



HAL
open science

Développement de méthodes numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques : application aux systèmes d'injection multi-points

Lola Guedot

► **To cite this version:**

Lola Guedot. Développement de méthodes numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques : application aux systèmes d'injection multi-points. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. INSA de Rouen, 2015. Français. NNT : 2015ISAM0017 . tel-01305555

HAL Id: tel-01305555

<https://theses.hal.science/tel-01305555v1>

Submitted on 21 Apr 2016

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

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

THÈSE

présentée par

Lola GUEDOT

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

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

Développement de méthodes numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques

Application aux systèmes d'injection multi-points

soutenue le 29 Septembre 2015

Membres du jury :

Rapporteurs :

Yves DUBIEF
Amsini SADIKI

Professeur, University of Vermont
Professeur, TU Darmstadt

Examineurs :

Bénédicte CUENOT
Sébastien DUCRUIX
Guillaume BALARAC
Sébastien BOURGOIS

Chercheur Senior, CERFACS
Directeur de Recherche CNRS, EM2C
Maître de Conférences INP Grenoble, LEGI
Ingénieur SNECMA

Directeurs de thèse :

Luc VERVISCH
Vincent MOUREAU

Professeur INSA de Rouen, CORIA
Chargé de Recherche CNRS, CORIA

Résumé : Développement d'outils numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques. Application aux systèmes d'injection multi-points.

La réduction des émissions polluantes des turboréacteurs nécessite une plus grande maîtrise du dimensionnement du système d'injection du mélange air-carburant au sein de la chambre de combustion. L'objectif de la thèse est d'améliorer la compréhension de la dynamique des écoulements swirlés, rencontrés dans les chambres aéronautiques. La simulation aux grandes échelles, qui exploite les supercalculateurs les plus puissants, est devenue un outil d'analyse incontournable. Cependant, la taille des simulations et le volume de données générées rendent difficile l'extraction des phénomènes à grande échelle. A cette fin, de nouvelles méthodes de post-traitement parallèles qui permettent d'accéder à l'évolution temporelle des structures tourbillonnaires dans des géométries complexes sont proposées. Ces méthodes sont appliquées à l'étude de la dynamique de flammes swirlées diphasiques dans lesquelles les structures cohérentes interagissent avec la zone réactive et le brouillard de gouttes.

Mots-clés : Simulation aux grandes échelles – Brûleurs swirlés – Filtres d'ordre élevé – Ecoulements diphasiques réactifs

Abstract : Development of numerical methods for the characterization of large scale structures in aeronautical swirl burners. Application to multi-points injectors.

The reduction of pollutant emissions of aeronautical devices requires to optimize the design of the injection systems in the combustion chamber. The objective of this work is to improve the understanding of the flow dynamics in swirl stabilized burners. Large Eddy Simulation has become a major tool for the analysis of such flows. The steady increase in computational power enables to perform high-fidelity simulations, that generates a large amount of data, making it difficult to extract relevant information regarding the large scale phenomena. To this aim, massively parallel post-processing methods, suited for complex geometries, were developed in order to extract large-scale structures in turbulent flows. These methods were applied to simulations of spray flames in swirl burners, to get a better insight of how the large scale structures interact with the flame topology and the spray dynamics.

Keywords : Large Eddy Simulation – Swirl burners – High-order filtering – Two-phase reacting flows

*Un jour j'irai vivre en théorie,
parce qu'en théorie tout se passe
bien.*

Remerciements

C'est au retour de la soutenance, alors que je quitte Rouen définitivement, que je m'attèle à mon tour à l'exercice à la fois difficile et libérateur de l'écriture de mes remerciements. L'occasion de remonter l'histoire et de faire le bilan de cette aventure, le temps d'un vol chargé en émotions et en turbulences...

Remontant quatre ans et demi en arrière, en Mars 2011, à Turbomeca, là où tout a commencé, je remercie Vincent Moureau et Luc Vervisch qui ont cru en mon potentiel pour faire une thèse, et ont bien voulu me proposer un sujet pour venir la faire parmi eux. Je remercie également Sandrine Geoffroy, Laurence Vial et Alain Daidié, qui ont joué un rôle déterminant dans le processus de choix de la thèse, et sans qui je n'aurais probablement jamais traversé la Garonne pour venir poursuivre mes études à Rouen.

Vient ensuite l'heure de faire mes valises pour aller les poser à Rouen, que j'étais alors bien incapable de situer sur une carte. Repensant à cette arrivée douloureuse, j'adresse un grand merci à Mourad Boukhalfa et l'ensemble du personnel administratif du CORIA pour leur accueil dans le laboratoire.

Je découvre alors que la Normandie n'a pas usurpé sa réputation, et nous gratifie d'une météo froide et humide 350 jours dans l'année. Mais la chaleur d'une région tient plus aux gens que l'on y rencontre qu'aux chiffres sur le thermomètre. J'adresse donc mes plus profonds remerciements à tous les collègues thésards et amis que l'aventure Rouennaise a mis sur ma route. Je pense d'abord aux anciens, dont certains sont partis depuis bien longtemps, mais qui ont participé chacun à leur manière à compléter ma formation doctorale : merci à Jon qui m'a appris à coder dans YALES2 (rien que ça...) et à caser les mots pangolin et turgescents dans ma thèse, à Nico qui m'a livré tous ses secrets sous Paraview, à Xavier, qui m'a appris à ne jamais manquer un pot de thèse ou une occasion de manger des petits fours, à Guimch et à ses cours de piano, mais aussi à Alex, Pecq, Mathias, Benjamin, Marianne, Chloé et les autres.

Merci également aux thésards de ma génération : ceux qui m'ont supportée pendant quatre ans, compagnons de galère et de rires depuis le premier jour. Ben, Pierre, Lisa, Hasnae (oui je te mets dans le même panier, yallah !), vous avez fait de ces quatre ans une expérience inoubliable. Merci à Lisa, mon adorable voisine de bureau, spécimen psychologique et capillaire unique en son genre, que j'ai pu étudier pendant 3 ans. Ta bonne humeur et ta douceur ont véritablement égayé mon quotidien. Pierre, je n'oublie pas tes multiples trahisons, mais merci malgré tout pour m'avoir supportée pendant la dernière ligne droite. Binôme de bureau, de voiture, de rédaction, de footing, et de potinage, tu as probablement laissé ta marque dans chaque page de ce manuscrit. Merci aussi à Ben, l'original de l'équipe, collectionneur de titres du Paris Normandie et de dessins WTF, qui a toujours trouvé les mots pour me redonner le sourire, me remonter le moral, me remotiver, me secouer ou me convaincre de faire un script. Enfin merci à Hasnae pour tout ce que nous avons partagé pendant ces quatre ans, voyages, zumba, mojitos, confidences, déguisements, et pour avoir mis une petite note orientale dans cette aventure. Je remercie

cette thèse de vous avoir mis tous les quatre sur mon chemin !

Merci aussi aux petits (certes, le mot est peut être mal choisi) jeunes qui sont arrivés ensuite : Dorian, Nico, Bastien, Eurielle, merci pour votre bonne humeur, les gâteaux aux pauses cafés, les soirées crêpes, les soirées pâtes, et les soirées tout court. Merci enfin et bonne chance à ceux avec qui j'ai partagé l'intimité des points hebdos du lundi matin : Thomas, Lancelot, Hakim, Adrien, Yann, Nico. Je vous souhaite bien du plaisir et du courage pour vos thèses !

L'aventure doctorale est tumultueuse et parsemée d'embuches. Le handball m'a permis de décompresser et d'encaisser les hauts et les bas. Pour ça je remercie toutes les jeunettes dont j'ai croisé la route dans l'équipe de l'INSA, et en particulier Caro, Popo, Sarah et Manon, qui ont amené un vent de folie et de fraîcheur dans cette thèse, et m'ont permis de rester à la page. #ancêtre #snapchat #CestQuoiUnHashtag

Le rythme s'intensifiant à l'approche de la fin, j'adresse mes profonds remerciements à celui sur qui j'ai pu toujours compter pour résoudre toutes sortes de problèmes d'ordre scientifique, informatique, psychologique, orthographique ou capillaire. Génie Logiciel, et véritable roc dans la tempête, merci Ghislain pour ta disponibilité et ta patience ! J'en profite également pour renouveler mes remerciements à Vincent dont le talent et la gentillesse n'ont d'égal que sa capacité à caser les mots *en fait* 12 fois dans la même phrase. Merci pour tous tes précieux conseils scientifiques et ton encadrement bienveillant. A vous deux, vous êtes les garants de l'atmosphère de travail exceptionnelle qui règne dans la team YALES2.

Vient enfin l'heure de la soutenance, dernière étape de la formation. Je remercie messieurs Yves Dubief et Amsini Sadiki d'avoir accepté d'être rapporteurs pour ma thèse, et d'avoir pris le temps de lire et de juger le manuscrit. Merci également à tous les membres du jury : Guillaume Balarac, Sébastien Ducruix, Bénédicte Cuenot et Sébastien Bourgeois d'avoir fait le déplacement jusqu'à Rouen pour juger mon travail.

Enfin pour l'ensemble de leur oeuvre, je remercie du fond du cœur ma famille et mon chéri qui m'ont entouré de la meilleure manière qui soit, veillant sur moi malgré la distance, et sans qui je ne serais probablement jamais arrivée au bout du périple. Merci pour votre soutien sans faille.

Nomenclature

Lettres romaines

Symbole	Signification	Unité
A	Surface	m^2
\mathbf{A}	Matrice du système linéaire pour les filtres d'ordre élevés	-
\mathcal{A}	Amplitude d'un signal dans l'espace de Fourier	selon variable
c	Avancement normalisé de la réaction	-
C_p	capacité calorifique à pression constante	$J.kg^{-1}$
C_s	Constante du modèle de Smagorinsky	-
C_w	Constante du modèle WALE	-
d_p	Diamètre d'une particule	m
D	Diamètre	m
\mathcal{D}_{th}	Coefficient de diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
\mathcal{D}	Coefficient de diffusion moléculaire	$m^2.s^{-1}$
\mathcal{D}_k	Coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce k dans le mélange	$m^2.s^{-1}$
$\mathcal{D}_{k,j}$	Coefficient de diffusion binaire de l'espèce k dans l'espèce j	$m^2.s^{-1}$
e_a	Energie acoustique	J
$E(\kappa)$	Spectre d'énergie cinétique turbulente	$m^3.s^{-2}$
\mathcal{E}	Fonction d'efficacité	-
f	Fréquence	s^{-1}
\mathcal{F}	Facteur d'épaississement	-
\mathbf{F}	Force ponctuelle s'appliquant sur une particule Lagrangienne	N
G	Noyau de convolution du filtre	-
\mathcal{G}	Flux axial de quantité de mouvement	
h	Echelle de longueur caractéristique	m
h_s	Enthalpie sensible massique	$J.kg^{-1}$
H_s	Enthalpie sensible	J
κ	Nombre d'onde	m^{-1}
\mathcal{K}	Conditionnement d'une matrice	-
k	Indice d'espèce	-
k_b	Constante de Boltzmann	$J.K^{-1}$
L	Echelle de longueur caractéristique	m

L_v	Chaleur latente de vaporisation	J.kg^{-1}
l_t	Echelle intégrale	m
m	Masse	kg
\dot{m}	Débit massique	kg.s^{-1}
\mathcal{M}_q	Moment statistique d'ordre q	-
N_r	Nombre de réactions	-
N_c	Nombre de cellules	-
N_p	Nombre de particules	-
N_{sp}	Nombre d'espèces	-
\mathcal{P}	PDF	-
P	Pression	Pa
q	Indice d'ordre	-
Q	Second invariant du tenseur de déformation	s^{-2}
Q_j	Taux d'avancement de la réaction	$\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
\dot{Q}	Débit volumique	$\text{m}^3.\text{s}^{-1}$
r	Coordonnée radiale	m
R	Distance radiale	m
\mathcal{R}	Constante des gaz parfaits	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
s	Coefficient stœchiométrique	-
\mathbf{S}	Tenseur des déformations	s^{-1}
S_{ij}	Composante du tenseur des déformations	s^{-1}
s	Entropie massique	$\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$
S	Entropie	J.K^{-1}
S	Capteur de flamme	-
s_L	Vitesse de flamme laminaire	m.s^{-1}
T	Température	K
t	Temps	s
t_{ij}	Tenseur des contraintes résiduelles	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-2}$
\mathcal{T}	Indice de Takeno	-
\mathbf{u}	Vecteur vitesse	m.s^{-1}
u	Composante de la vitesse	m.s^{-1}
V	Volume	m^3
V_k	Vitesse de diffusion de l'espèce k	m.s^{-1}
V^c	Vitesse de correction	m.s^{-1}
W	Masse molaire	kg.mol^{-1}
\mathbf{x}	Vecteur position	m
x	Composante du vecteur position	m
Y_k	Fraction molaire de l'espèce k	-
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	-
Y_c	Variable d'avancement de la réaction	-

Z	Fraction de mélange	-
z	Coordonnée axiale	m

Lettres grecques

Symbole	Signification	Unité
Γ	Circulation	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	-
δ_L	Epaisseur de flamme laminaire	m
Δ	Taille de filtre	m
Δ_x	Résolution spatiale du maillage	m
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$
η	Echelle de Kolmogorov	m
Θ	Terme source issu de la phase Lagrangienne	Selon variable
θ	Coordonnée tangentielle	-
λ_{th}	Coefficient de conductivité thermique	$\text{W.K}^{-1}.\text{m}^{-1}$
λ_T	Echelle de Taylor	m
λ	Longueur d'onde	m^{-1}
λ_j	j-ème valeur propre d'une matrice	Selon matrice
μ	Viscosité dynamique	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
ν	Viscosité cinématique	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
ρ	Masse volumique	$\text{kg}.\text{m}^{-3}$
σ_{ij}	Tenseur des contraintes	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-2}$
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-2}$
τ	Temps caractéristique	s
ϕ	Richesse	-
ϕ_v	Fraction volumique de liquide	-
φ	Scalaire générique	Selon variable
Φ	Fonction levelset	-
χ	Taux de dissipation scalaire	s^{-1}
Ω	Tenseur de vortacité : partie antisymétrique du gradient de vitesse	s^{-1}
Ω_{ij}	Composante de Ω	s^{-1}
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur	$\text{W}.\text{m}^{-3}$
$\dot{\omega}_k$	Terme source de l'espèce k	$\text{kg}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
ω	Vecteur vortacité	s^{-1}
ω	Fréquence angulaire	-1

Indices et exposants

Symbole	Signification
k	Relatif à l'espèce k
p	Relatif à la particule p
t	Turbulent
sgs	Sous maille

∞	Conditions à l'infini
<i>surf</i>	Conditions à la surface de la goutte
<i>u</i>	Dans les gaz frais
<i>b</i>	Dans les gaz brûlés
<i>th</i>	Thermique
<i>ref</i>	Relatif à l'état de référence
<i>eq</i>	A l'équilibre
0	A l'état initial
<i>D</i>	Partie déviatrice
<i>r</i>	Relatif à la direction radiale
θ	Relatif à la direction tangentielle
<i>z</i>	Relatif à la direction axiale
<i>O</i>	Relatif à l'oxydant
<i>F</i>	Relatif au carburant
<i>P</i>	Relatif aux produits de combustion
<i>l</i>	Relatif à la phase liquide
<i>g</i>	Relatif à la phase gazeuse
<i>q</i>	A l'ordre q

Nombres sans dimensions

Symbole	Signification
<i>Re</i>	Nombre de Reynolds
<i>Sw</i>	Nombre de Swirl
<i>Str</i>	Nombre de Strouhal
<i>St</i>	Nombre de Stokes
<i>Sc</i>	Nombre de Schmidt
<i>Pr</i>	Nombre de Prandtl
<i>Sc</i>	Nombre de Lewis
<i>Da</i>	Nombre de Damköhler
<i>Sh</i>	Nombre de Sherwood
<i>Nu</i>	Nombre de Nusselt
<i>B_M</i>	Nombre de Spalding massique
<i>B_T</i>	Nombre de Spalding thermique

Opérateurs mathématiques

Symbole	Signification
$\langle \varphi \rangle$	Moyenne statistique
$\bar{\varphi}$	Filtrage spatial
$\hat{\varphi}$	Transformée de Fourier
$\tilde{\varphi}$	Filtrage de Favre
φ'	Ecart à la moyenne : $\varphi' = \varphi - \langle \varphi \rangle$
φ''	Fluctuations : $\varphi'' = \varphi - \bar{\varphi}$

Acronymes

Symbole	Signification
AVBP	Solver LES développé au CERFACS
BFER	Schéma réduit à 2 étapes pour la combustion du kérosène
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrich-Lewy, condition de stabilité pour le pas de temps convectif
CPU	Central Processing Unit
CRZ	Central Recirculation Zone
DNS	Direct Numerical Simulation
DMD	Dynamic Modes Decomposition
DPCG	Deflated Preconditionned Conjugate Gradient
EOS	Equation of State
FPI	Flamelet Prolongation of ILDM
FRT	Facteur Radial de Temperature
HOF	High-Order Filter
ILDM	Intrinsic Low-Dimensional Manifold
ISL	Inner Shear Layer
LDA	Laser Doppler Anemometry
LEMCOTEC	Low Emission CORE-engine TEchnologies
LES	Large Eddy Simulation
MERCATO	Moyen Experimental de Recherche en Combustion Aerobie par Techniques Optiques
MPI	Message Passing Interface
MSFI	Multiple Stage Fuel Injection
ORZ	Outer Recirculation Zone
PCG	Preconditionned Conjugate Gradient
PCM	Presumed Conditional Moment
PDA	Phase Doppler Anemometry
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
POD	Proper Orthogonal Decomposition
PRECCINSTA	PREdiction and Control of Combustion INSTAbilities
PVC	Precessing Vortex Core
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RMS	Root Mean Square
TFLES	Thickened Flame approach for LES
TFV4A	4 th order scheme for explicit time integration of convective terms in YALES2
YALES2	LES solver developed at CORIA

Table des matières

1	Introduction	21
1.1	Contexte industriel	21
1.2	Contexte scientifique	22
1.3	Objectifs de la thèse	22
1.4	Organisation du manuscrit	23
2	Etude bibliographique des flammes swirlées dans les moteurs aéronautiques	26
2.1	Introduction au fonctionnement des turboréacteurs	26
2.1.1	Description générale	26
2.1.2	Chambre de combustion	28
2.1.3	Contraintes de conception et exigences environnementales	29
2.2	Evolutions technologiques : vers les systèmes d'injection multi-points	31
2.2.1	Mécanismes de formation des oxydes d'azotes et contraintes associées	31
2.2.2	Vers une combustion pauvre partiellement prémélangée	32
2.2.3	Les injecteurs multi-points	34
2.3	Etude bibliographique des écoulements swirlés dans les foyers aéro-nautiques	35
2.3.1	Mécanismes de stabilisation de la combustion	35
2.3.2	Généralités sur les écoulements swirlés et considérations théoriques	37
2.3.2.1	Définition du swirl	37
2.3.2.2	Equations de conservation pour les jets tournants	37
2.3.2.3	Classification des tourbillons	39
2.3.3	Dynamique des écoulements swirlés	43
2.3.3.1	Phénomène de Vortex Breakdown et topologie des écoulements swirlés	43
2.3.3.2	Le Precessing Vortex Core	44
2.3.3.3	Les flammes swirlées dans les chambres aéronautiques	49
3	Equations et modèles pour les écoulements diphasiques réactifs	53
3.1	Description et modèles numériques pour les écoulements turbulents réactifs	54
3.1.1	Equations de conservation et loi d'état	54
3.1.1.1	Propriétés thermodynamiques du mélange	54
3.1.1.2	Conservation de la masse	54
3.1.1.3	Conservation de la quantité de mouvement	54
3.1.1.4	Conservation des espèces chimiques	55
3.1.1.5	Conservation de l'énergie	56
3.1.1.6	Modélisation des phénomènes de transport	57

3.1.2	Introduction à la turbulence	58
3.1.2.1	Outils statistiques pour la description de la turbulence	59
3.1.2.2	Analyse du spectre de turbulence	61
3.1.2.3	Approches numériques pour les écoulements turbulents : RANS, LES, DNS	62
3.1.3	Etablissement des équations de conservation pour la LES	64
3.1.3.1	Equations de Navier-Stokes filtrées	64
3.1.3.2	Principaux modèles pour le transport de sous-maille	66
3.1.3.3	Fermeture du transport turbulent des espèces et de l'énergie	68
3.2	Modélisation de la combustion	69
3.2.1	Introduction à la modélisation des écoulements réactifs	69
3.2.1.1	Calcul des termes sources	69
3.2.1.2	Méthodes de réduction de la chimie	70
3.2.1.3	Généralités sur les régimes de combustion	71
3.2.1.4	Modélisation de l'interaction chimie - turbulence	73
3.2.2	Modélisation de la combustion du kérosène	74
3.2.2.1	Choix d'un surrogate pour le kérosène	74
3.2.2.2	Chimie réduite : le schéma BFER couplé à une approche TFLES	76
3.2.2.3	Chimie tabulée : modèle PCM-FPI	79
3.3	Approche numérique pour les écoulements diphasiques	83
3.3.1	Introduction à la modélisation des écoulements particuliers	83
3.3.1.1	Les écoulements particuliers	83
3.3.1.2	Approches pour la modélisation des écoulements diphasiques	84
3.3.2	Equations pour le formalisme Lagrangien	86
3.3.2.1	Cinématique de la goutte	86
3.3.2.2	Thermodynamique de la goutte	88
3.3.3	Couplage avec la phase gazeuse	91
3.3.3.1	Echange entre les particules et la phase gazeuse	91
3.3.3.2	Formalisme LES : interaction avec la turbulence	92
3.3.4	Méthodologie pour la collecte de statistiques sur la phase dispersée	93
3.4	Présentation du solveur LES YALES2	94
3.4.1	Solveur incompressible	94
3.4.1.1	Equations de Navier Stokes incompressibles	94
3.4.1.2	Méthode de résolution	95
3.4.2	Solveur à densité variable	96
3.4.2.1	Approximation à faible nombre de Mach	96
3.4.2.2	Méthode de résolution	97
3.4.3	Résolution de l'équation de Poisson	98
3.4.4	Parallélisme	99
4	Development of a methodology for the extraction of large-scale structures in swirling flows	101
4.1	Introduction to massively parallel simulations and post-processing of "Big Data"	102
4.2	Large-scale structures identification methods	103
4.2.1	Vortex identification in turbulent flows	103
4.2.2	Modal methods : POD, DMD	106

4.2.2.1	Proper Orthogonal Decomposition	106
4.2.2.2	Dynamic Modes Decomposition	109
4.2.3	Filtering	111
4.2.3.1	Spatial filtering process	112
4.2.3.2	Relation between selectivity and filter order	113
4.2.4	High-order implicit filters	114
4.3	Derivation and implementation of high-order filters on unstructured grids	116
4.3.1	Formulation of the high-order filters on 3D unstructured grids	116
4.3.2	Solving of the linear system	117
4.3.3	Factorization of the linear system	120
4.4	Application of the filters to canonical flows	120
4.4.1	1D test cases	120
4.4.1.1	Dirac function	120
4.4.1.2	Sine function	121
4.4.1.3	1D signal with turbulence-like energy spectrum	121
4.4.2	Two-dimensional Taylor vortices	122
4.4.3	Three-dimensional Homogeneous Isotropic Turbulence	125
4.4.4	Turbulent plane jet	127
4.4.4.1	Boundary conditions	128
4.4.4.2	Description of the flow	129
4.4.4.3	Numerical setup	129
4.4.4.4	Plane jet at $Re_h = 3\,000$	130
4.4.4.5	Plane jet at $Re_h = 60\,000$	130
4.5	Application of the filters to tubulent flows in a semi-industrial burner	131
4.5.1	Description of the burner	131
4.5.2	Extraction of the PVC on different meshes	132
4.6	Performances of the filtering process	135
4.6.1	Performances on a 3D HIT	135
4.6.2	Performances on the PRECCINSTA burner	135
4.6.3	Conclusions on the computational cost of high-order filters	136
4.7	Topology analysis of the Precessing Vortex Core	136
4.7.1	Isolation of the Precessing Vortex Core	136
4.7.2	PVC centerline reconstruction	138
4.7.2.1	Skeleton extraction	139
4.7.2.2	Interpolation of the skeleton on the grid	141
4.8	Conclusions on the filtering methodology and perspectives	144
5	Etude des interactions spray - flamme - PVC. Application à un brûleur swirlé diphasique : MERCATO	146
5.1	Présentation du banc MERCATO	147
5.2	Choix des points de fonctionnement	148
5.2.1	Point de fonctionnement non réactif	148
5.2.2	Point de fonctionnement réactif	150
5.3	Mise en œuvre du calcul	151
5.3.1	Paramètres numériques	151

5.3.2	Modélisation de l'injection de carburant	153
5.3.2.1	Description du modèle	153
5.3.2.2	Cas test de validation	158
5.3.3	Validation du modèle d'évaporation	161
5.4	Simulation du brûleur MERCATO à froid	165
5.4.1	Temps caractéristiques de l'écoulement	165
5.4.2	Topologie de l'écoulement gazeux	166
5.4.3	Topologie de l'écoulement diphasique	170
5.4.4	Extraction du PVC et analyse de l'interaction spray - PVC	172
5.4.4.1	Profil de vitesse dans le PVC	174
5.4.4.2	Distribution spatiale des particules et corrélation avec le PVC	176
5.5	Simulation du brûleur MERCATO à chaud	178
5.5.1	Temps caractéristiques de l'écoulement	178
5.5.2	Topologie de l'écoulement gazeux	178
5.5.3	Topologie de l'écoulement diphasique	182
5.5.4	Extraction du PVC	184
5.5.5	Description du mécanisme d'interaction spray - flamme - PVC	192
5.6	Performances	193
5.7	Conclusion	194
6	Modélisation et optimisation des systèmes d'injection multi-points LEMCOTEC	197
6.1	Objectifs du projet LEMCOTEC	197
6.2	Etude comparative des six systèmes d'injection LEMCOTEC	197
6.2.1	Description des six géométries	197
6.2.2	Paramètres numériques des simulations	198
6.2.2.1	Maillage et conditions opératoires	198
6.2.2.2	Modèles et paramètres numériques	198
6.2.3	Visualisation et comparaison des écoulements à froid	198
6.2.4	Influence du maillage et du modèle de sous-maille	198
6.3	Analyse en conditions réactives	198
6.3.1	Paramètres numériques de la simulation réactive	198
6.3.2	Influence de la combustion sur la dynamique de l'écoulement	198
6.4	Analyse des résultats et conclusions	198
7	Conclusion générale et perspectives	199
7.1	Conclusions	199
7.1.1	Méthode d'identification des grandes structures	199
7.1.2	Etude des interactions PVC - flamme diphasique	200
7.1.3	Etude des systèmes d'injection multi-points	200
7.2	Perspectives	201
7.2.1	Analyse des écoulements turbulents	201
7.2.2	Analyse de l'écoulement diphasique réactif dans le brûleur MERCATO	201
7.2.3	Développement d'outils pour le calcul exaflopie	202

A Publications et conférences	205
A.1 Publications	205
A.2 Conférences internationales	205
A.3 Communications orales	205
A.4 Article	205
A.5 Concours photo JDD CORIA	236
Table des figures	238
Liste des tableaux	245
Bibliographie	247

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Contexte industriel	21
1.2	Contexte scientifique	22
1.3	Objectifs de la thèse	22
1.4	Organisation du manuscrit	23

1.1 Contexte industriel

Depuis le premier décollage à bord d'un engin motorisé par Clément Ader en 1903, le transport aérien a connu un essor gigantesque. En effet, un peu plus d'un siècle plus tard, c'est plus de 5 milliards de passagers qui voyagent chaque année grâce à ce mode de transport, soit environ 30 millions de vols commerciaux par an d'après les chiffres de l'Airport Council International (ACI). La densité du trafic aérien mondial, représentée sur la Fig. 1.1, illustre l'ampleur du phénomène.

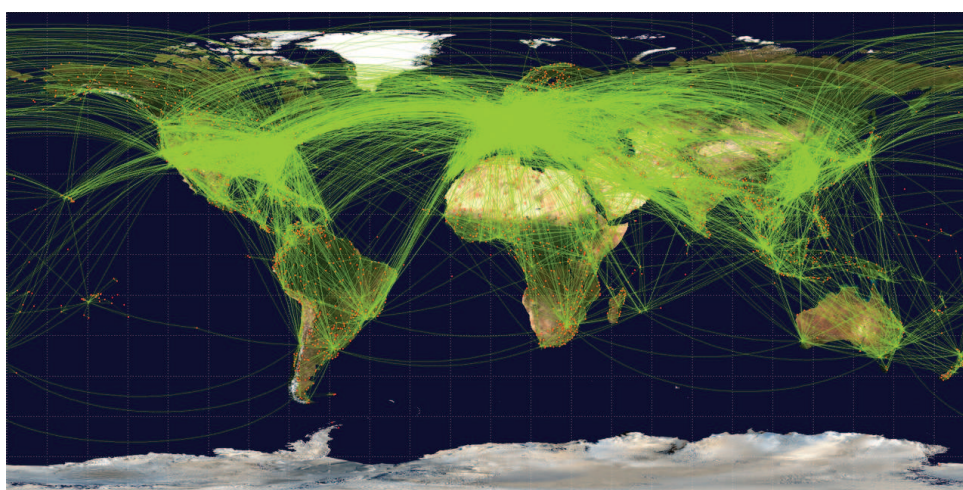


FIGURE 1.1 – Réseau mondial du transport aérien

L'expansion du trafic aérien est tel qu'il participe aujourd'hui de façon non négligeable à la production de gaz à effet de serre dans l'atmosphère, contribuant au réchauffement climatique et induisant des modifications majeures et complexes sur les milieux naturels et les niveaux marins à l'échelle mondiale.

Certains produits de combustion sont par ailleurs à l'origine de pathologies humaines inquiétantes. Long-temps négligé car il induisait un volume d'émission largement inférieur aux autres modes de transport, l'impact environnemental du trafic aérien fait maintenant l'objet d'une réglementation et d'un effort concerté à l'échelle internationale. Le récent rapport *Flighpath 2050* décrit la vision de l'Union Européenne pour le futur de l'aviation, et impose une réduction de 75% des émissions de CO₂ et de 90% des émissions de d'oxydes d'azote, ainsi qu'une diminution de 65% des émissions sonores pour 2050, par rapport aux chiffres de 2000.

Les industriels aéronautiques mettent en œuvre des programmes de recherche visant à développer de nouvelles technologies et à trouver des voies d'amélioration des technologies actuelles, afin de réduire la consommation de carburant et les émissions polluantes de leurs appareils. Ces améliorations concernent un grand nombre de domaines scientifiques : science des matériaux, contrôle des transferts thermiques, maîtrise des processus de combustion. Elles peuvent se traduire par l'optimisation des technologies existantes, ou le développement de technologies de rupture. Néanmoins, à l'heure actuelle, la combustion des produits issus du pétrole demeure le moyen le plus efficace pour produire de l'énergie. L'amélioration des processus de combustion des hydrocarbures est donc une priorité pour limiter l'impact environnemental du transport aérien.

1.2 Contexte scientifique

La mécanique des fluides numérique ou CFD (pour Computational Fluid Dynamics) est une branche de la mécanique des fluides qui utilise des méthodes numériques pour résoudre et étudier des problèmes qui font intervenir des écoulements fluides. C'est un outil d'aide au développement devenu essentiel dans tous les domaines industriels liés à la dynamique des fluides : aéronautique et spatial, automobile, transports ferroviaire et naval, énergies renouvelables, météorologie. En fonction des approximations choisies, qui sont issues d'un compromis entre les besoins en terme de précision de la représentation physique, et les ressources de calcul disponibles, la résolution numérique des équations permet l'accès à toutes les grandeurs instantanées en chaque point du domaine de calcul. La CFD a atteint un degré de maturité suffisant pour être intégrée aux processus industriels de conception, en complément des campagnes d'essais, puisqu'elle permet de limiter le nombre d'essais nécessaires au cours d'un cycle de développement, et donne accès à toutes les grandeurs physiques sur l'ensemble du domaine de calcul. Elle permet de pallier aux exigences de réduction des temps de conception et de recherche de solutions performantes dans un contexte où les objectifs sont multiples et souvent opposés. Grâce à l'augmentation incessante de la puissance des ressources de calcul, il est aujourd'hui possible d'atteindre des niveaux de résolution permettant une description détaillée des phénomènes physiques.

Ces outils numériques, associés à des études expérimentales, sont utilisés pour étudier en détail la phénoménologie des écoulements gazeux et diphasiques en présence dans les chambres de combustion, en vue de proposer des voies d'amélioration.

1.3 Objectifs de la thèse

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet européen LEMCOTEC (Low Emission Core-Engine Technologies), dont l'objectif est de réduire les émissions polluantes et sonores des turbomoteurs et turboréacteurs, en œuvrant sur toutes les parties du moteur, de l'admission des gaz frais à l'échappement des produits de combustion. Dans l'étude présentée ici, on s'intéresse plus particulièrement à la chambre

de combustion, et à l'optimisation des systèmes d'injection du prémélange air-carburant dans la chambre.

La dynamique de ces écoulements est complexe : l'écoulement gazeux est mis en rotation, ce qui génère une multitude de structures tourbillonnaires dont certaines sont très énergétiques, et qui interagissent avec la flamme et le spray de carburant. Dans ce contexte, la simulation numérique est un outil précieux qui donne accès à des informations instantanées ou statistiques partout dans la chambre, dans les limites de la discrétisation spatiale et temporelle.

Cependant, avec l'augmentation incessante de la puissance des calculateurs, la tendance actuelle est à l'augmentation de la résolution spatiale, permettant une description de la physique de plus en plus précise. Ces simulations, réalisées sur des maillages constitués de plusieurs millions, voire milliards de cellules nécessitent donc de manipuler des quantités colossales de données, dans lesquelles il devient difficile d'extraire des informations pertinentes et exploitables. Le développement d'outils permettant l'analyse des écoulements dans des simulations très haute fidélité, réalisées avec des codes de calcul massivement parallèles est donc un enjeu qu'il faut anticiper dès à présent.

L'objectif de la thèse est donc de contribuer à améliorer la compréhension de la dynamique des écoulements swirlés, couramment rencontrés dans les chambres aéronautiques. Pour cela, des méthodes de post-traitement adaptées au calcul haute performance doivent être développées. Le premier objectif de cette thèse est de proposer des outils permettant l'extraction des grandes structures cohérentes dans les écoulements turbulents, dans lesquels on rencontre une très large gamme d'échelles tourbillonnaires. Le deuxième objectif est d'utiliser ces outils pour comprendre comment les grandes structures de l'écoulement pilotent la dynamique des flammes swirlées, et interagissent avec la zone réactive et avec le brouillard de gouttes de carburant dans les chambres de combustion aéronautiques. Ces travaux nécessiteront par ailleurs de contribuer au développement et à la validation d'outils numériques pour la modélisation des flammes diphasiques.

1.4 Organisation du manuscrit

Ce manuscrit, qui s'attache à répondre aux deux problèmes présentés précédemment, s'organise de la manière suivante :

Le chapitre 2 décrit plus en détail le fonctionnement des turbines à gaz, avec une attention plus particulière sur la chambre de combustion et les mécanismes de formation des polluants. Les pistes investiguées actuellement pour réduire les émissions polluantes seront ensuite présentées, en s'attardant sur les évolutions technologiques concernant les systèmes d'injection. Enfin, afin d'aborder au mieux la problématique d'optimisation des écoulements swirlés en sortie d'injecteur, une étude bibliographique de la phénoménologie des écoulements swirlés sera présentée.

Le Chapitre 3 présente les équations de conservation qui régissent les écoulements réactifs, gazeux et diphasiques, ainsi que les méthodes numériques et les modèles utilisés pour résoudre ces équations dans le cadre de simulations réalisées avec un code CFD.

Le Chapitre 4 présente la méthode d'extraction des grandes structures tourbillonnaires développée durant la thèse, qui a fait l'objet d'un papier publié en Avril 2015 dans le journal international *Physics of Fluids*, disponible dans l'Annexe A. Une méthode de filtrage d'ordre élevé, permettant une séparation d'échelle nette, et étant applicable sur des maillages non-structurés a été implantée et parallélisée. Plusieurs tests de validation de ces filtres d'ordre élevé sont également présentés. Puis cette méthode a été appliquée au brûleur semi-industriel PRECCINSTA afin de démontrer son potentiel pour l'extraction des grandes structures et notamment d'une instabilité hydrodynamique caractéristique des écoulements

swirlés : le Precessing Vortex Core (PVC). Enfin, un algorithme permettant d'isoler le PVC et d'en extraire le squelette est présenté.

Le Chapitre 5 est dédié à l'analyse de l'interaction du PVC avec le spray de carburant et la flamme. Pour cela, le brûleur expérimental MERCATO a été modélisé en conditions non-réactives dans un premier temps, puis en conditions réactives. La mise en œuvre du calcul, ainsi que la confrontation des résultats obtenus à des données expérimentales et numériques sont d'abord présentées. Puis, les outils décrits dans le Chapitre 4 sont utilisés sur ces simulations pour analyser plus en détail le rôle du PVC.

Le Chapitre 6 est consacré à une étude menée sur six configurations d'injecteurs, dans le but de tester, par des simulations aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation en anglais), de nouvelles technologies de systèmes d'injection développées dans le cadre du projet LEMCOTEC. Une analyse comparative des topologies d'écoulement dans ces six géométries en conditions non réactives sera présentée. L'objectif de cette étude est de discriminer ces six systèmes d'injection et d'identifier les concepts les plus prometteurs.

Enfin, le Chapitre 7 apporte une conclusion générale de l'étude et propose des perspectives de recherche.

Chapitre 2

Etude bibliographique des flammes swirlées dans les moteurs aéronautiques

Une description du fonctionnement des turbines à gaz, avec une attention plus particulière sur la chambre de combustion et les mécanismes de formation des polluants est présentée dans ce chapitre. Les pistes investiguées actuellement pour réduire les émissions polluantes sont ensuite décrites, en s'attardant sur les systèmes d'injection. Afin d'aborder au mieux la problématique d'optimisation des écoulements swirlés en sortie d'injecteur, une étude bibliographique de la phénoménologie des jets tournants est également présentée.

Sommaire

2.1	Introduction au fonctionnement des turboréacteurs	26
2.1.1	Description générale	26
2.1.2	Chambre de combustion	28
2.1.3	Contraintes de conception et exigences environnementales	29
2.2	Evolutions technologiques : vers les systèmes d'injection multi-points	31
2.2.1	Mécanismes de formation des oxydes d'azotes et contraintes associées	31
2.2.2	Vers une combustion pauvre partiellement prémélangée	32
2.2.3	Les injecteurs multi-points	34
2.3	Etude bibliographique des écoulements swirlés dans les foyers aéro-nautiques	35
2.3.1	Mécanismes de stabilisation de la combustion	35
2.3.2	Généralités sur les écoulements swirlés et considérations théoriques	37
2.3.3	Dynamique des écoulements swirlés	43

2.1 Introduction au fonctionnement des turboréacteurs

2.1.1 Description générale

Un turboréacteur est une turbine à gaz qui produit l'énergie mécanique nécessaire à la poussée de l'avion, à partir de l'énergie contenue dans un hydrocarbure. L'air traversant le turboréacteur suit un cycle thermodynamique dont les étapes sont les suivantes [116] :

- **Admission**, à travers le fan, ou soufflante .
- **Compression**, via un ou plusieurs étages de compresseur.

- **Combustion**, dans une chambre dans laquelle les gaz frais comprimés sont mélangés au carburant pour que la combustion puisse avoir lieu, et dont le fonctionnement sera décrit plus en détail dans la section suivante.
- **Détente**, à travers une série de turbines, servant à redistribuer une partie de l'énergie issue de la combustion aux divers étages d'admission et de compression.
- **Echappement** des gaz chaud dont l'énergie résiduelle produit la poussée par détente dans la tuyère d'éjection.

Les différents éléments cités ici sont représentés sur la Fig. 2.1 .

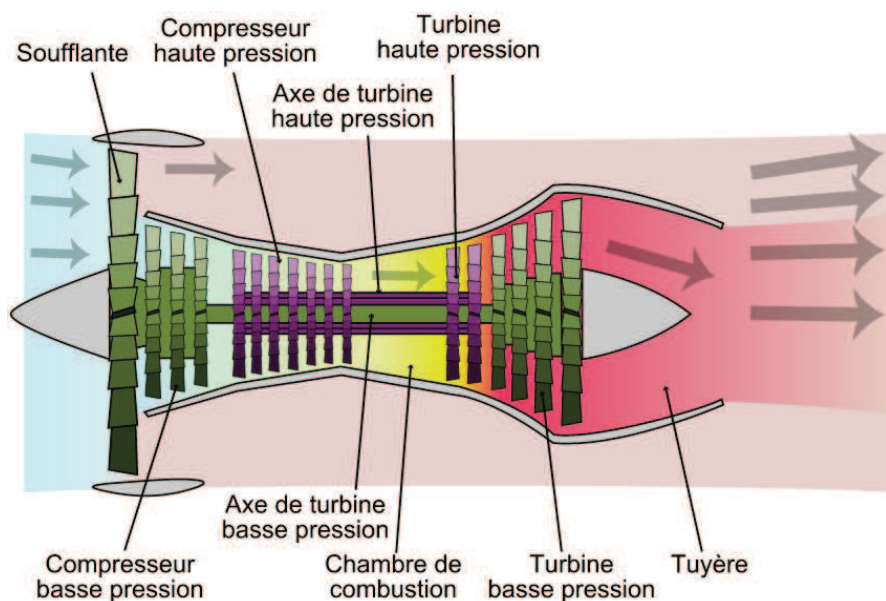


FIGURE 2.1 – Représentation schématique du fonctionnement et des éléments composant un turboréacteur

D'un point de vue thermodynamique, le fonctionnement des turbines à gaz est décrit par le cycle de Brayton, illustré sur la Fig. 2.2.

- *Etape 1-2* : L'air entrant dans le moteur subit une compression adiabatique réversible, donc isentropique.
- *Etape 2-3* : Le mélange air-carburant brûle à pression constante dans la chambre de combustion
- *Etape 3-4* : Les gaz brûlés sont ensuite détendus dans les différents étages de turbine. La transformation, adiabatique et réversible, se fait à entropie constante.
- *Etape 4-1* : Les gaz chaud éjectés dans l'atmosphère sont enfin refroidis à pression constante.

Le cycle décrit ci-dessus est idéal. En pratique, des phénomènes tels que les frottement, les pertes thermiques, la turbulence et les pertes de charge induisent une baisse du rendement, et impliquent la perte du caractère réversible des transformations.

Dans les turbomoteurs destinés à équiper les avions civils, le premier étage d'admission/compression (la soufflante) est de très grande dimension pour aspirer de grandes quantités d'air dont une partie seulement est envoyée au moteur (flux chaud), le reste (flux froid) étant dirigé pour contourner le moteur jusqu'à la tuyère où il est éjecté avec les gaz chauds. Le taux de dilution, défini comme le rapport de débit massique du flux froid (secondaire) et du flux chaud (primaire) est de l'ordre de 5 à 10 pour les avions de ligne, destinés à voler autour de Mach 0.8. Sur ce type d'avion, la poussée provient à 80%

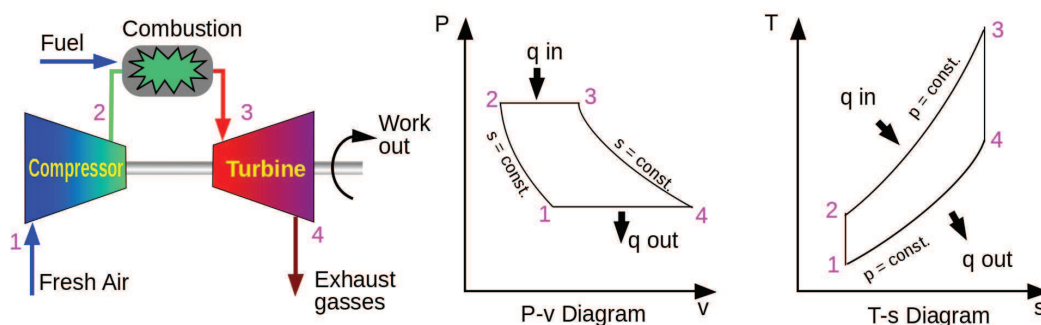


FIGURE 2.2 – Fonctionnement des turbines à gaz selon le cycle de Brayton idéal

du flux froid et à 20% du flux chaud. La tendance actuelle est à l'augmentation de ce taux de dilution, puisqu'elle permet un meilleur rendement et une diminution des émissions sonores de l'appareil [2].

2.1.2 Chambre de combustion

Les chambres de combustion aéronautiques sont généralement annulaires, et composées de plusieurs secteurs identiques, chacun des secteurs étant alimenté par son propre dispositif d'injection.

Une partie de l'air sortant du dernier étage de compression est redirigé vers le système d'injection de carburant, dans lequel il est mélangé avec le kérosène. La combustion de ce mélange air-fuel a lieu dans la zone primaire du foyer (voir Fig. 2.3). La plupart des technologies actuelles utilisent des systèmes d'injection de type tourbillonneurs, qui mettent l'écoulement en rotation, le carburant étant injecté au centre du tourbillonneur. Le phénomène de giration (ou swirl) induit par le dispositif d'injection favorise le mélange et génère une zone de recirculation au centre de l'écoulement qui participe à la stabilisation de la combustion. Une étude plus détaillée des écoulements swirlés sera présentée dans la section 2.3.

Les gaz issus de la combustion peuvent atteindre des niveaux de température de l'ordre de 2 200 K, qui vont donc bien au delà de la température de fusion des matériaux qui constituent la chambre. Il est donc impératif de diminuer la température des gaz brûlés et de protéger les parois pour assurer la tenue thermique du tube à flamme. Le reste de l'air issu du compresseur est donc injecté dans la chambre de combustion par les trous primaires et les trous de dilution dans la zone secondaire (voir Fig. 2.3), pour diminuer la température des gaz brûlés et assurer une température de sortie de chambre la plus homogène possible. Une partie de l'air de contournement est également utilisée dans divers dispositifs visant à diminuer la température des gaz brûlés près des parois (également représentés sur la Fig. 2.3) :

- **Les films**, composés d'une ou plusieurs rangées de trous tangentiels à la paroi qui servent à créer une couche d'air frais
- **Les multi-perforations**, qui consistent en une multitude de petits trous inclinés percés dans les parois de la chambre. Leur action est double : l'air frais qui est injecté par les trous participe à la protection par film de la paroi, et les trous contribuent au refroidissement de la chambre par un effet de pompage thermique au sein de la matière.

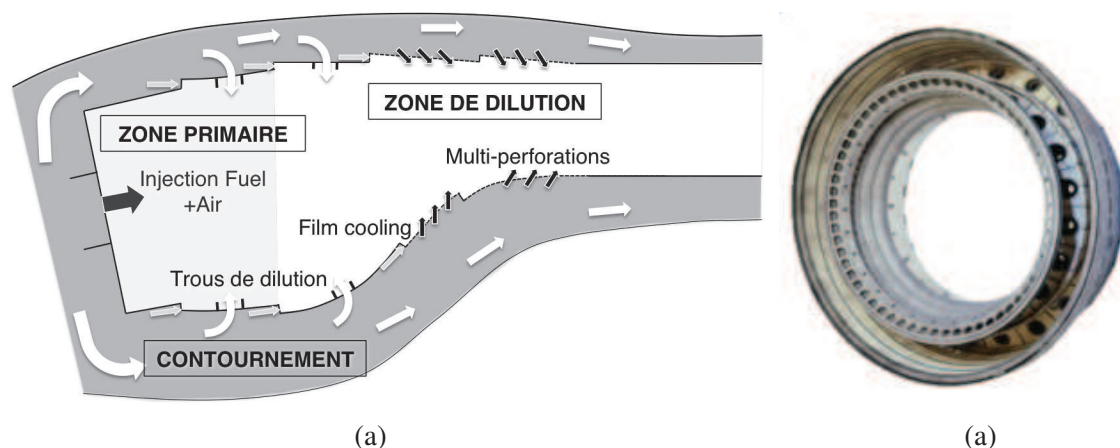


FIGURE 2.3 – Représentation schématique du fonctionnement d’une chambre de combustion (a), et photographie d’une chambre de combustion d’un moteur aéronautique (SNECMA) (b)

2.1.3 Contraintes de conception et exigences environnementales

Le rôle de la chambre est d’assurer la combustion du fuel dans les meilleures conditions possibles pour entrainer la turbine et fournir l’énergie nécessaire à la poussée. L’interaction de tous les phénomènes physiques ayant lieu dans la chambre doit donc être parfaitement maîtrisée pour garantir les performances du moteur. La conception de la chambre doit donc impérativement répondre à un certain nombre de critères, qui ne sont pas nécessairement compatibles les uns avec les autres et parmi lesquels on distingue :

- **Rendement de combustion élevé** : Le rendement de combustion, η_c est défini comme le ratio entre la quantité de chaleur issue de la combustion et la puissance chimique contenue dans le fuel injecté [116]. Il est maximal si tout le carburant est consommé. L’échappement d’imbrûlés et la sur-consommation de fuel sont alors évités.
- **Bonnes opérabilité de la chambre** : La plage d’allumage de la chambre doit être confortable pour assurer l’allumage même dans des conditions extrêmes de pression et de température (d’altitude). La stabilisation de la flamme doit pouvoir être assurée dans toute la plage de richesse imposée : la combustion doit pouvoir être maintenue dans une large gamme de richesse et de pression, et l’accrochage de la flamme dans la chambre doit être garanti pour éviter qu’elle ne remonte en amont de l’injection (phénomène de flashback)
- **Minimisation des pertes de charge** : pour maximiser les performances et donc la poussée, les pertes de charges induites notamment par le système d’injection et de refroidissement doivent être le plus faible possible.
- **Homogénéité de la température** en sortie de chambre : le profil de température en sortie de chambre impacte directement la durée de vie des composants qui lui succèdent (distributeur et turbine haute pression). La présence de points chauds dûs à une mauvaise homogénéité de la température peut être destructrice pour ces derniers. Le profil de température radial adimensionné en sortie de chambre (FRT pour Facteur Radial de Température) est par ailleurs un point crucial pour les constructeurs. La position du point le plus chaud, souvent situé dans la moitié supérieure de la hauteur de la veine d’air doit être parfaitement maîtrisée. L’objectif est d’assurer des températures suffisamment basses en pied de pale, où les contraintes mécaniques sont les plus importantes, et en tête de pale, partie la plus difficile à refroidir ; sans pour autant compromettre

la tenue en température de la pale au point le plus chaud.

- **Minimisation des émissions polluantes** : les fumées, les suies, les oxydes d'azote ou le monoxyde de carbone sont néfastes pour la santé et l'environnement, leur production doit donc être la plus faible possible.
- **Maîtrise des instabilités de combustion** : les instabilités thermo-acoustiques susceptibles de se développer dans la chambre de combustion peuvent provoquer des oscillations de pression capables de détériorer les composants de la chambre et du moteur et d'en compromettre le fonctionnement. Elles doivent donc également être évitées.
- **Tenue thermique des matériaux** : les températures gazeuses dans la zone où a lieu la combustion dépassent la température de fusion des matériaux constituant la chambre. Les parois doivent donc impérativement être protégées pour assurer une durée de vie acceptable. La conception doit garantir un intervalle maximal entre les immobilisations pour des opérations de maintenance.
- **Minimisation des coûts** : pour assurer une bonne compétitivité, les coûts de conception, de fabrication et de maintenance doivent être maîtrisés.
- **Réduction de la masse embarquée** : dans un contexte aéronautique, la question de la masse de l'appareil est toujours cruciale puisqu'elle impacte directement la consommation de carburant. Les composants et notamment la chambre de combustion doivent donc être conçus de manière à réduire leur masse au maximum.

Pour parvenir à satisfaire ces contraintes, des moyens techniques peuvent être identifiés. Parmi ces axes d'amélioration, on peut notamment citer :

- **L'augmentation de la pression dans la chambre**, qui favorise le rendement thermodynamique mais conduit à des températures plus élevées dans la chambre, compromettant la durée de vie thermique des composants et les émissions de polluants.
- **L'amélioration du mélange**, qui favorise l'efficacité de la combustion, l'allumage, l'homogénéité de la température dans la chambre, prévient l'apparition de points chauds, participant donc ainsi à minimiser la production de polluants
- **La modification de la répartition d'air** entre la zone primaire et le contournement. L'augmentation du pourcentage d'air envoyé dans la zone primaire peut favoriser le mélange dans la zone primaire, avec toutes les conséquences citées plus haut, mais le processus de dilution et donc le refroidissement sera moins performant.

Les contraintes de conception sont liées entre elles de manière complexe. Le processus de conception d'une chambre de combustion passe donc par un compromis entre tous ces objectifs.

Cependant, certains de ces critères font l'objet d'un effort particulier. Dans le contexte écologique actuel, la réduction des émissions de polluants dans l'atmosphère est un enjeu majeur, et la recherche de solutions technologiques visant à réduire la production d'espèces polluantes dans les chambres de combustion aéronautiques est au cœur de tous les programmes de recherche actuels. L'Union Européenne a fixé des objectifs de réduction des émissions polluantes pour l'horizon 2050, exposés dans le rapport Flightpath 2050. Ces objectifs consistent en une réduction de 75% des émissions de dioxyde de carbone (CO_2), une réduction de 90% des émissions d'oxydes d'azote (NO_x), et une réduction de 65% des émissions sonores par rapport à l'an 2000. Le projet LEMCOTEC (Low Emission COre engine TEChnology) qui a assuré le financement de cette thèse s'inscrit dans cette dynamique de réduction des émissions polluantes et a pour finalité de contribuer à répondre aux objectifs fixés par l'Union Européenne.

C'est pourquoi la tendance actuelle dans le domaine aéronautique est à la conception de nouvelles technologies de combustion visant à améliorer les performances écologiques du moteur. La section sui-

vante a pour but de décrire ces technologies. Les mécanismes de formation des polluants seront abordés dans la section 2.2.1, puis la stratégie actuelle et les nouvelles technologies associées, notamment en ce qui concerne les systèmes d'injection seront détaillés dans les sections 2.2.2 et 2.2.3 .

2.2 Evolutions technologiques : vers les systèmes d'injection multi-points

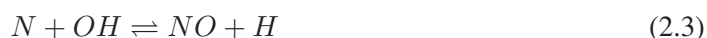
2.2.1 Mécanismes de formation des oxydes d'azotes et contraintes associées

Le diazote est le constituant principal de l'air atmosphérique, c'est pourquoi les machines thermiques à combustion interne sont responsables de la production d'une quantité importante d'oxydes d'azote, ou NO_x , composés dérivés du N_2 et formés à partir du dioxygène également présent dans l'air. Dans le contexte aéronautique de la combustion du kérosène, l'azote des NO_x provient exclusivement du diazote contenu dans l'air. En effet le kérosène est habituellement considéré comme un mélange ne contenant pas d'atomes d'azote. A titre d'exemple, la composition du kérosène définie par Dagaut [41] contient, en pourcentages volumiques, 74% de n-décane $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$, 15% de n-propylcyclohexane C_9H_{12} , et 11% de n-propylbenzène C_9H_{18} .

Dans ce cas, on distingue deux processus de formation du NO :

- Le NO thermique

Le mécanisme classique utilisé pour décrire la formation du NO dans la zone de post-flamme est celui de Zel'Dovich [229] :



La réaction 2.1 pilote l'ensemble du mécanisme. Elle présente une énergie d'activation très élevée (environ 320 KJ/mol [213]), qui se traduit par une forte dépendance à la température, ce qui explique l'appellation de NO thermique.

- Le NO précoce, formé dans le front de flamme.

Ce mécanisme de formation du NO aux temps caractéristiques très courts (de l'ordre de 10^{-4} s pour une combustion à 10 bar et 10^{-2} s pour une combustion à pression atmosphérique [147]) est décrit par le mécanisme de Fenimore [57] :



Ce mécanisme décrit un autre phénomène à l'origine de la rupture de la liaison triple du N_2 , initié par la réaction du diazote de l'air avec le radical hydrocarbonés CH pour former des radicaux HCN et NCN. Le radical CH est une espèce intermédiaire ayant une durée de vie très courte, qui existe uniquement lors de la décomposition du carburant.

La formation du NO_2 résulte ensuite de l'oxydation du monoxyde d'azote.

La formation des NO_x est donc favorisée par des hautes températures et des temps de résidence importants des gaz dans les zones à haute température. Les stratégies de réduction des émissions polluantes reposent donc sur une diminution de la température dans la chambre de combustion.

La Fig. 2.4 représente l'évolution des émissions de NO_x et de CO en fonction de la richesse. Le CO est produit au cours du mécanisme d'oxydation du fuel, puis plus ou moins complètement oxydé à son

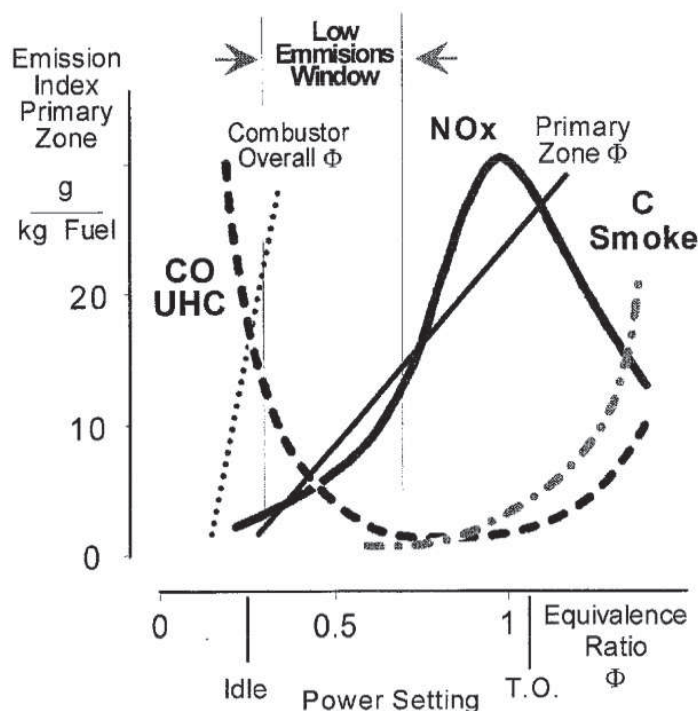


FIGURE 2.4 – Evolution des polluants (NO_x , CO, imbrûlés et fumées) en fonction de la richesse [224]

tour en CO_2 . [?] Dans le cas de la combustion d'un mélange pauvre, les faibles niveaux de température de flamme limitent la réaction d'oxydation du CO en CO_2 et sont responsables des hauts niveaux d'émission de CO à faible richesse. A richesse élevée, une quantité importante de CO est produite du fait de la raréfaction de l'oxygène, qui limite l'oxydation du CO en CO_2 . La fenêtre de faible émission de CO, centrée sur une richesse d'environ 0.8, est donc très étroite. La Fig. 2.4 appelle deux constats :

- Pour des richesses proches de la stœchiométrie, la production de NO_x est maximale.
- Il est difficile de diminuer les émissions de NO_x sans contribuer à l'augmentation des émissions de CO. Le niveau de production de CO est maximal pour des richesses faibles et élevées. Le graphique permet de mettre en évidence une zone de faibles émissions de NO_x et de CO, sur une plage de richesse correspondant à un régime pauvre.

Par ailleurs, les inhomogénéités dans le mélange génèrent, localement, des zones à richesse élevée qui brûlent à très haute température, responsables d'une importante production de NO_x locale. L'optimisation du mélange contribue donc à la réduction des espèces polluantes dans les gaz brûlés.

2.2.2 Vers une combustion pauvre partiellement prémélangée

L'analyse du mécanisme de production des NO_x , et des paramètres qui contribuent à augmenter les émissions polluantes permet d'identifier des axes d'amélioration. Différentes pistes d'évolutions technologiques peuvent alors être envisagées :

- L'utilisation de nouveaux carburants :

Le problème de ce type de stratégie réside dans la difficulté à trouver un carburant aussi performant que les hydrocarbures (l'éthanol par exemple possède un pouvoir calorifique 40% plus faible), qui a les mêmes propriétés que le kérosène et qui ne nécessite pas de repenser complètement

la structure de l'avion (exemple du stockage de l'hydrogène).

- **Le traitement des gaz brûlés visant à éliminer les NO_x par voie chimique :**

Les procédés de réduction des NO_x : la SCR (Selective Catalytic Reduction)[61] ou plus récemment la SNCR (Selective Non-Catalytic Reduction) [139] consistent à injecter dans les produits de combustion un gaz (ammoniac ou urée par exemple) pour réduire les oxydes d'azote en azote moléculaire. Ce type de procédé est plutôt utilisé pour diminuer les émissions dans les gros brûleurs industriels, et ne concerne pas vraiment le domaine aéronautique.

- **La modification de la géométrie de l'injecteur :**

L'évolution vers un mode de combustion prémélangé (ou partiellement prémélangé) pauvre assure des températures de flamme basses, ce qui limite la formation des NO_x thermiques. Pour assurer ce régime de fonctionnement, les injecteurs doivent donc être repensés afin de faire passer beaucoup d'air dans le système d'injection pour éviter l'apparition de zones riches et garantir de bonnes conditions de mélange. Ces nouvelles technologies d'injection sont regroupées sous l'appellation LP (Lean Premixed, pour des carburants gazeux) ou encore LPP (Lean Premixed Prevaporized, pour des carburants liquides). La géométrie de ce type d'injecteur est décrite sur la Fig. 2.5.

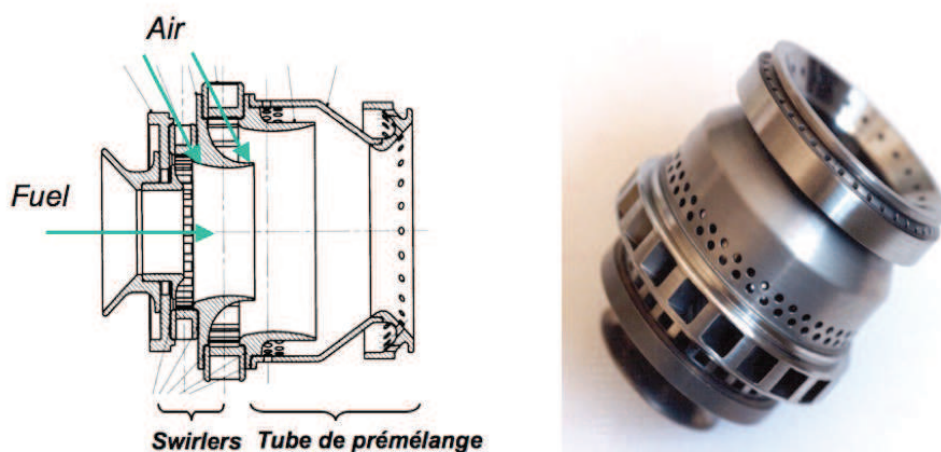


FIGURE 2.5 – Injecteur de type LPP (SNECMA). Description schématique (gauche), et photo d'un injecteur LPP (droite) [76]

Les risques inhérents au régime LPP comme le risque d'extinction au ralenti ou encore le risque de remontée de la flamme vers le système d'injection en régime prémélangé rendent indispensable la connaissance et la maîtrise de ces nouvelles technologies. L'inconvénient de ce type d'injecteur est que le régime de combustion prémélangé est très sensible aux perturbations aérodynamiques, ce qui induit des dynamiques de flammes très instationnaires. Ces conditions associées au confinement de la flamme favorisent l'excitation de modes acoustiques, provoquant l'apparition d'instabilités thermo-acoustiques [90]. Il en résulte des oscillations de pression et des fluctuations du taux de réaction de grande amplitude, susceptibles de provoquer des retours de flamme dans le système d'injection (flashback), et pouvant aller jusqu'à provoquer l'extinction. Les instabilités acoustiques peuvent, en outre, engendrer des vibrations capables d'endommager la structure de la chambre.

- La modification de la géométrie de la chambre :

De nouvelles technologies de chambre sont également en train de voir le jour, permettant une combustion en régime pauvre tout en évitant le problème d'instabilité mentionné ci-dessus. Le concept de Trapped Vortex Combustor (TVC) a notamment été largement étudié au cours des 20 dernières années. Le principe du TVC consiste à stabiliser la flamme au moyen de tourbillons bloqués dans une cavité, et est illustré sur la Fig. 2.6.

Les deux cavités, inférieures et supérieures sont le siège d'une zone de recirculation dans laquelle un mélange air–fuel est injecté. La flamme pilote obtenue dans la cavité est stable et n'est pas perturbée par l'écoulement principal. Les gaz chauds s'étendent ensuite vers l'écoulement principal où est injecté le reste de carburant. La combustion de l'ensemble du carburant sur deux étages en série, un premier étage pilote prémélangé riche, qui est ensuite mélangé à une grande quantité d'air issu de l'écoulement principal, et qui débouche sur un étage pauvre, fait de la chambre TVC un système du type RQL (Rich burn – Quick Quench – Lean burn), très efficace en terme de réduction d'émissions polluantes. Ce type de configuration présente par ailleurs des propriétés d'allumages intéressantes, fonctionne sur une large gamme de pression et de température. Le poids global du système, assez simple à mettre en oeuvre, est réduit, tout comme son coût de fabrication. Le TVC fait l'objet de nombreuses études récentes, notamment les travaux de thèse de Merlin [132] (étude numérique) et Burguburu [21] (étude expérimentale).

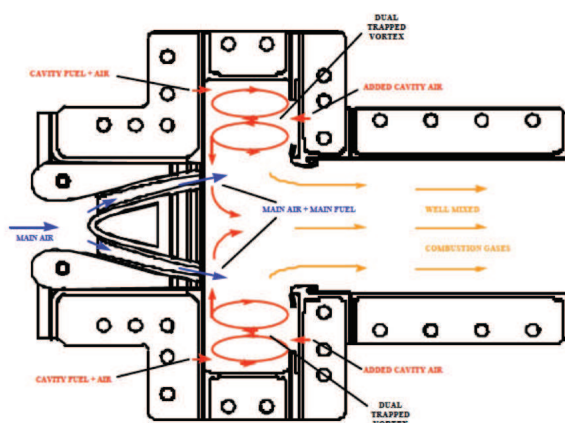


FIGURE 2.6 – Schéma de principe d'un Trapped Vortex Combustor [189]

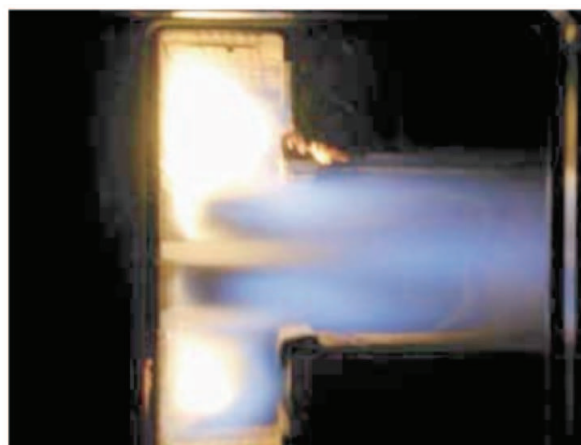


FIGURE 2.7 – Photo d'une chambre de type TVC en fonctionnement [84]

Les travaux présentés dans ce manuscrit concernent l'étude des technologies de type LPP, c'est à dire la voie du maintien de la géométrie de chambre swirlée, avec optimisation du système d'injection pour favoriser la combustion pauvre et le prémélange.

Dans la continuité des études déjà menées sur ce type de technologie, les derniers développements ont mené à de nouveaux dispositifs d'injection appelés injecteurs multi-points. La section qui suit est dédiée à la description de ce type d'injecteur.

2.2.3 Les injecteurs multi-points

Les systèmes d'injection de type LPP sont caractérisés par une fenêtre opératoire étroite, avec notamment un risque d'extinction pendant les phases de ralenti (régime très pauvre). Les injecteurs à étage sont

conçus pour pallier à ce type de problème. L'injection de carburant est répartie sur un étage dit pilote, fonctionnant seul pendant les phases de ralenti, et sur un étage secondaire, utilisé uniquement pendant les phases de pleine puissance (décollage par exemple). Ce deuxième étage est placé en aval du premier dans le sens de l'écoulement gazeux.

Les injecteurs multi-points, illustrés sur les Fig. 2.8 et 2.9, fonctionnent sur le principe des injecteurs à deux étages. Les zones pilote et plein gaz sont concentriques et disposées radialement sur l'axe du système d'injection. L'injection de l'étage plein gaz est réalisée au moyen d'une série d'orifices d'injection répartis en couronne. Ce circuit secondaire est utilisé lorsqu'une puissance supplémentaire est requise (accélération, décollage).

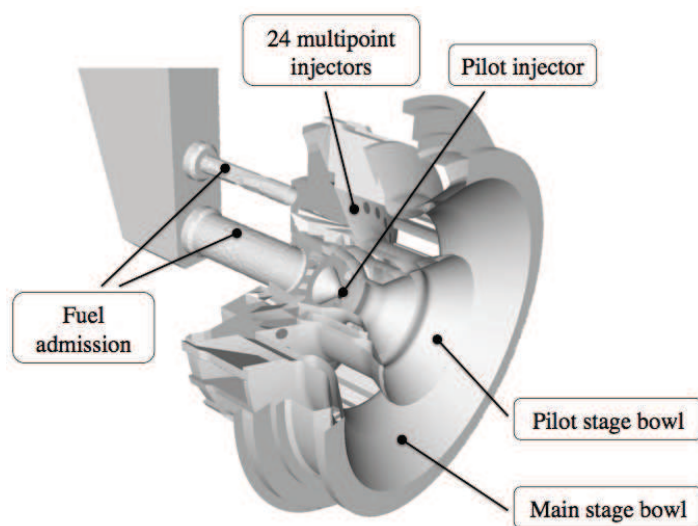


FIGURE 2.8 – Vue écorchée d'un système d'injection de type multi-points étudié dans le cadre du projet TLC [94]. Les deux étages, ainsi que leurs systèmes d'injection et d'admission de carburant sont représentés.



FIGURE 2.9 – Photographie d'un système d'injection multi-point (SNECMA) : vue globale et vue rapprochée [76]

Ce type d'injecteur, développé par SNECMA a fait l'objet de premières études numériques au CER-FACS [94] [81] et expérimentales à l'ONERA [144] [111] dans le cadre du projet TLC, qui ont permis de démontrer une bonne stabilité de la flamme dans le système malgré une richesse globale faible. Une configuration similaire développée par GE sous l'appellation TAPS (Twin Annular Premixing Swirler) est également en développement pour équiper les prochaines générations de moteurs. L'inconvénient majeur lié au fonctionnement par intermittence de l'étage multi-point est qu'il peut induire la cokéfaction du carburant stagnant dans le circuit d'alimentation des trous d'injection lorsque le circuit multi-points est coupé. [85].

2.3 Etude bibliographique des écoulements swirlés dans les foyers aéronautiques

2.3.1 Mécanismes de stabilisation de la combustion

Dans une chambre de combustion, l'allumage est réalisé à l'aide d'une étincelle. Une fois que la combustion est initiée, le fuel et l'air doivent en permanence être mélangés et chauffés pour alimenter

la flamme et éviter qu'elle ne s'éteigne. Ce problème de stabilisation de la flamme est un critère majeur dans la conception des chambres de combustion. Les applications mettant en oeuvre des vitesses d'écoulement très faibles, de l'ordre de la vitesse de flamme laminaire ou inférieures, présentent une stabilité naturelle. Pour les applications présentant des vitesses d'écoulement plus élevées (la plupart des applications industrielles, en particulier dans un contexte aéronautique), la stabilisation de la flamme n'est plus triviale, et différentes stratégies peuvent être envisagées pour assurer la stabilité :

- **L'auto-allumage :**

La stabilisation de la flamme peut être assurée par un processus d'auto-allumage lorsque l'un des réactifs est suffisamment chaud pour assurer l'initiation de la combustion malgré la vitesse d'entrée des réactifs. Ce mécanisme est surtout utilisé dans le cas de la combustion supersonique (scramjets), où le flux d'air est à très haute température du fait des hauts niveaux de compression, ou dans les moteurs Diesel où l'air est préchauffé par compression avant injection du carburant.

- **Le maintien en continu d'une source de chaleur :**

L'allumage continu peut être assuré par un écoulement secondaire de gaz chaud, une source de chaleur extérieure (électrique par exemple), ou encore une flamme pilote secondaire. La flamme de Sandia D [7], représentée sur la Fig. 2.10, est un exemple de flamme non-prémélangée stabilisée par une flamme pilote prémélangée.



FIGURE 2.10 – Photographie de la flamme dite de Sandia D. Le jet central (25% de méthane et 75% d'air en volume) est entouré de 72 flammes pilotes pauvres (mélange de C_2H_2 , H_2 , air, CO_2 et N_2). [1]

- **La création d'une zone de recirculation**

Le ralentissement de l'écoulement permet à la flamme de s'installer dans une zone où la vitesse de l'écoulement est du même ordre de grandeur que la vitesse de propagation de la flamme. Par ailleurs, le forçage d'une zone de recirculation permet de ramener des gaz brûlés issus de la combustion vers la flamme, et d'alimenter la combustion par un apport de gaz chauds. Plusieurs solutions sont envisageables pour forcer la recirculation :

- La première consiste à introduire un obstacle ("*bluff body*") ou un élargissement soudain de la section de passage pour favoriser la formation de zones de recirculation.
- Un autre possibilité consiste à mettre l'écoulement en rotation. La giration provoque une expansion du jet et la formation d'une zone de recirculation centrale favorable à la stabilisation

de flamme. Cette deuxième solution est souvent privilégiée dans le contexte aéronautique car elle induit des pertes de charge moins importantes, et la stabilisation a lieu plus loin des parois [155]. Elle permet par ailleurs d'améliorer le taux de mélange en augmentant l'activité turbulente dans le brûleur, de stabiliser la flamme et de concevoir des dispositifs plus compacts. Les flammes des brûleurs aéronautiques sont donc souvent stabilisées par un mouvement de rotation des réactifs entrant dans la chambre autour de l'axe du brûleur (swirl) imposé par la géométrie de l'injecteur. La section suivante s'attache à décrire la dynamique des écoulements swirlés, isothermes et réactifs, à travers un état de l'art des études expérimentales, théoriques et numériques de ce type d'écoulements.

2.3.2 Généralités sur les écoulements swirlés et considérations théoriques

2.3.2.1 Définition du swirl

Le terme swirl (*tourbillon* en anglais) est utilisé pour décrire les écoulements présentant à la fois une vitesse débitante (axiale), et une vitesse dans le plan transverse (azimutale). Les particules fluides possèdent donc une trajectoire hélicoïdale.

Le nombre de swirl compare les composantes axiales et tangentielles de l'écoulement [78] :

$$Sw = \frac{\mathcal{G}_\theta}{R\mathcal{G}_z} \quad (2.6)$$

R désigne une dimension radiale caractéristique de l'écoulement, \mathcal{G}_θ correspond au flux axial de quantité de mouvement azimutale, et \mathcal{G}_z est le flux axial de quantité de mouvement axiale. \mathcal{G}_θ et \mathcal{G}_z sont définis de la manière suivante :

$$\mathcal{G}_\theta = \int_0^R \rho u_\theta u_z 2\pi r^2 dr \quad (2.7)$$

$$\mathcal{G}_z = \int_0^R (\rho u_z^2 + P) 2\pi r dr \quad (2.8)$$

Les écoulements swirlés sont caractérisés par d'importantes vitesses tangentielles. L'accélération radiale induite par la vitesse tangentielle génère une chute de pression au niveau de l'axe de rotation, et une expansion radiale de l'écoulement, elle-même responsable d'une diminution de la vitesse tangentielle dans la direction axiale, ce qui génère un gradient de pression adverse dans la direction axiale. Quand ce gradient de pression devient trop important, l'énergie cinétique de l'écoulement dans la direction axiale n'est plus suffisante et des zones de recirculations apparaissent. Ce couplage entre les composantes axiale et radiale de la vitesse donne lieu à des écoulements complexes, qui ont fait l'objet de nombreuses études, expérimentales, théoriques et numériques.

2.3.2.2 Equations de conservation pour les jets tournants

On considère ici un écoulement décrit en coordonnées cylindriques. Le champ de vitesse est donc décomposé selon ses composantes axiale u_z , radiale, u_r et azimutale u_θ . Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement en coordonnées cylindriques sont présentées ici. La démonstration complète permettant de dériver ces équations est disponible dans la thèse de Galley [67], et repose sur les hypothèses suivantes :

- Ecoulement stationnaire

$$\frac{\partial}{\partial t} \simeq 0 \quad (2.9)$$

- Axisymétrie

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \simeq 0 \quad (2.10)$$

- Gradient axiaux négligeables devant les gradients radiaux :

$$\frac{\partial}{\partial r} \gg \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.11)$$

- Ecoulement suffisamment tournant, tel que :

$$u_r \ll u_\theta \quad (2.12)$$

Conservation de la masse

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z) = 0 \quad (2.13)$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$-\rho \frac{u_\theta^2}{r} = -\frac{\partial P}{\partial r} \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} (\rho u_r u_\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z u_\theta) + 2\rho \frac{u_r u_\theta}{r} = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} (\rho u_r u_z) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z^2) + \rho \frac{u_r u_z}{r} = -\frac{\partial P}{\partial z} \quad (2.16)$$

Intégration et interprétation

Les équations 2.13, 2.15 et 2.16 peuvent être interprétées en raisonnant en terme de grandeurs intégrées.

- Conservation de la quantité de mouvement azimutale

L'intégration de l'équation 2.15 sur une section transverse de l'écoulement donne, après multiplication de l'équation par r^2 :

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} (\rho u_r u_\theta) + r^2 \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z u_\theta) + 2r \rho u_r u_\theta \right] dr d\theta = 0 \quad (2.17)$$

En recombinaut le premier et le troisième terme du membre de gauche, on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_0^R (2\pi r^2 \rho u_z u_\theta) dr = - \int_0^R \left(\frac{\partial}{\partial r} 2\pi \rho r^2 u_r u_\theta \right) dr \quad (2.18)$$

ce qui donne, d'après Eq. 2.7 :

$$\frac{d}{dz} \mathcal{G}_\theta = - \left[2\pi \rho r^2 u_r u_\theta \right]_0^R = -(2\pi \rho r^2 u_r u_\theta)_{r=R} \quad (2.19)$$

Si l'écoulement est confiné, alors la vitesse radiale à la paroi est nulle, $u_r(R) = 0$. Si l'écoulement est libre, le fluide est au repos à l'infini, $u_r(R) = 0$. Ce qui donne pour \mathcal{G}_θ :

$$\frac{d}{dz} \mathcal{G}_\theta = 0 \quad (2.20)$$

Le flux axial de moment cinétique azimutal se conserve à travers l'écoulement.

- Conservation de la quantité de mouvement axiale

L'intégration de l'équation 2.16 sur une section transverse de l'écoulement donne :

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \left[r \frac{\partial}{\partial r} (\rho u_r u_z) + r \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z^2) + \rho u_r u_z \right] dr = - \int_0^R \int_0^{2\pi} r \frac{\partial P}{\partial z} dr \quad (2.21)$$

En recombinaut le premier et le troisième terme du membre de gauche, on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_0^R (2\pi r (\rho u_z^2 + P)) dr = - \int_0^R \left(\frac{\partial}{\partial r} (2\pi \rho r u_r u_z) \right) dr \quad (2.22)$$

ce qui donne, d'après Eq. 2.8 :

$$\frac{d}{dz} \mathcal{G}_z = - [2\pi \rho r u_r u_z]_0^R = -(2\pi \rho r u_r u_z)_{r=R} \quad (2.23)$$

De même que précédemment, étant donné que $u_z(R) = 0$, \mathcal{G}_z se conserve le long de l'axe z .

Dans le cadre des hypothèses d'écoulement stationnaire quasi-cylindrique, les quantités \mathcal{G}_z et \mathcal{G}_θ se conservent le long de l'écoulement. Le flux de quantité de mouvement axiale \mathcal{G}_z caractérise la composante axiale de l'écoulement, alors que le flux axial de quantité de mouvement azimutal \mathcal{G}_θ caractérise la composante tournante de l'écoulement. Le nombre de swirl, utilisé pour caractériser les écoulements tournants compare ces deux grandeurs, puisqu'il est défini comme :

$$Sw = \frac{\mathcal{G}_\theta}{R \mathcal{G}_z}. \quad (2.24)$$

C'est donc une constante de l'écoulement.

- Conservation de la quantité de mouvement radiale

L'équation 2.14 traduit le fait que dans un écoulement tournant, la force centrifuge générée par la vitesse azimutale est compensée par le gradient de pression radial. La région proche de l'axe de l'écoulement est donc caractérisée par une dépression. En dérivant l'équation 2.14 par rapport à z , on obtient alors une expression du gradient de pression axial, qui dépend de la distance à l'axe et du profil de vitesse tangentielle :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial z \partial r} = \frac{\rho}{r} \frac{\partial u_\theta^2}{\partial z} \quad (2.25)$$

Après intégration suivant r et simplification, cette équation s'écrit [122] :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{r=0} - \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{r=\infty} = -2\rho \int_0^\infty \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial z} dr \quad (2.26)$$

Si le gradient de pression axial au centre de l'écoulement (terme $\left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{r=0}$) devient positif, le gradient de pression adverse induit une diminution de la vitesse axiale pouvant mener à un point d'arrêt et à la formation d'une zone de recirculation. Le calcul du gradient axial de pression nécessite de connaître le profil de vitesse tangentielle. Pour étudier plus en détail ce mécanisme, la section suivante s'intéresse aux différents types de profils couramment utilisés dans la littérature pour modéliser le champ de vitesse dans un tourbillon sous l'hypothèse quasi-cylindrique.

2.3.2.3 Classification des tourbillons

Un tourbillon est défini comme une région fluide dans laquelle l'écoulement est principalement constitué d'un mouvement de rotation autour d'un axe. On considère un tourbillon d'axe z qui évolue dans le

plan (r, θ) . La vitesse est décomposée selon ses composantes axiale, tangentielle et azimutale. La plupart du temps, la composante radiale de la vitesse est négligée, soit $u_r = 0$. La description d'un tourbillon en terme de profil radial de vitesse tangentielle fait apparaître deux grands types de modèles canoniques pour les écoulements tourbillonnaires, qui sont décrits ci-dessous, juste après avoir précisé la notion de vorticité.

Vorticité

La vorticité est un concept clé dans la description de la dynamique des écoulements tourbillonnaires. D'un point de vue mathématique, elle est définie comme le rotationnel du champ de vitesse :

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.27)$$

Physiquement, c'est un vecteur qui décrit le mouvement rotatif local de l'écoulement. De manière plus intuitive, elle s'interprète comme la vitesse angulaire vue par une sphère solide qui serait placée dans l'écoulement.

Tourbillon rotationnel

Le terme tourbillon rotationnel est utilisé pour caractériser la rotation solide. Lorsque la vitesse angulaire $\dot{\theta}$ autour de l'axe z est constante dans le plan du tourbillon, alors la vitesse tangentielle croît linéairement avec la distance à l'axe :

$$u_\theta(r) = \dot{\theta}r. \quad (2.28)$$

Le champ de vecteur vitesse associé à la rotation solide s'annule au centre du tourbillon. Dans ce cas, la vorticité est constante. Elle est orientée suivant l'axe z et sa norme est égale à deux fois $\dot{\theta}$. La circulation sur un cercle de rayon r , grandeur désignant l'intégrale curviligne de la vitesse et notée Γ , est donc égale à :

$$\Gamma(r) = 2\pi\dot{\theta}r. \quad (2.29)$$

Tourbillon irrotationnel

Le terme de tourbillon potentiel, ou irrotationnel, désigne le cas où la vitesse tangentielle est inversement proportionnelle à la distance au centre du tourbillon. Dans ce cas, la vitesse angulaire est non nulle autour de l'axe du tourbillon, mais la vorticité est nulle en tout point, le champ de vitesse associé est donc dit irrotationnel. Pour ce type d'écoulement, la circulation sur un cercle de rayon r est constante et indépendante de r . La vitesse tangentielle s'écrit alors :

$$u_\theta(r) = \frac{\Gamma}{2\pi r}. \quad (2.30)$$

Les deux types de tourbillons décrits précédemment sont représentés sur la Fig. 2.11, où la vitesse adimensionnée u^* est tracée en fonction de la distance à l'axe du tourbillon :

$$u^*(r) = \frac{u_\theta(r)}{u_m} \quad \text{avec} \quad u_m = \frac{\Gamma}{2\pi R}, \quad (2.31)$$

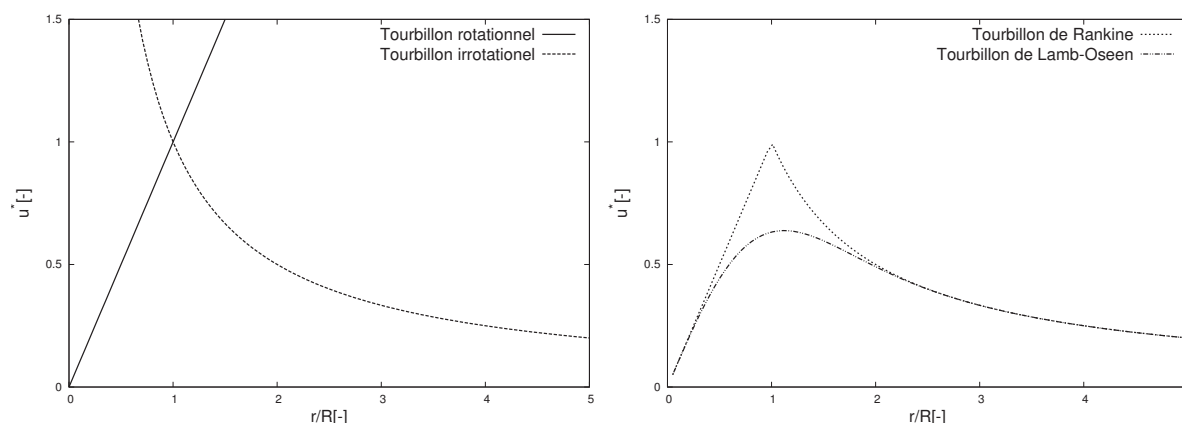


FIGURE 2.11 – Modèles de profils de vitesse tangentielle dans un tourbillon

Vers des modèles plus réalistes

Dans le cas d'un tourbillon irrotationnel, le profil de vitesse est tel que la vitesse tangentielle devient infiniment grande au centre du tourbillon. Ce modèle ne peut donc raisonnablement pas être utilisé pour décrire un tourbillon de manière réaliste. La plupart des tourbillons rencontrés dans la nature sont composés d'une région (coeur du tourbillon) où le vortex redevient rotationnel, avec un profil de vitesse qui décroît jusqu'à zéro sur l'axe.

- Tourbillon de Rankine Le tourbillon de Rankine, représenté sur la Fig. 2.11, est une combinaison des deux modèles présentés précédemment, le profil de vitesse est donc de la forme :

$$u_{\theta}(r) = u_m \frac{r}{R}, \quad \text{si } r \leq R \quad (2.32)$$

$$u_{\theta}(r) = u_m \frac{R}{r}, \quad \text{si } r > R \quad (2.33)$$

R désigne le rayon du coeur tourbillonnaire. L'écoulement est en rotation solide à l'intérieur du coeur ($r < R$), et irrotationnel à l'extérieur ($r > R$)

- Tourbillon de Lamb-Oseen Le tourbillon de Lamb-Oseen, également représenté sur la Fig. 2.11, est un tourbillon de type rotationnel qui décroît avec la viscosité :

$$u_{\theta}(r, t) = u_m \frac{R}{r} \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{4\nu t}\right) \right) \quad (2.34)$$

Ce modèle est une solution exacte des équations de Navier-Stokes. Il tend vers le tourbillon rotationnel pour de faibles rayons, et vers le tourbillon irrotationnel pour des rayons très importants.

Relation avec la pression

Comme expliqué dans la section précédente, dans un tourbillon, le champ de vitesse génère une variation de la pression dynamique. L'équation de conservation de la quantité de mouvement axiale (Eq. 2.14) décrit cette relation entre la vitesse tangentielle et la pression dans le tourbillon. Dans un plan (r, θ) , cette équation s'écrit

$$\rho \frac{u_{\theta}^2}{r} = \frac{dP}{dr} \quad (2.35)$$

Cette relation, associée au profil de vitesse présenté précédemment peut être utilisée pour étudier les variations de pression dans un tourbillon. Le profil radial de pression dans un tourbillon de Rankine s'écrit donc :

$$P(r) = P_\infty - \frac{\rho u_m^2}{2} \left(2 - \frac{r^2}{R^2} \right) \quad \text{pour } r \leq R \quad (2.36)$$

$$P(r) = P_\infty - \frac{\rho u_m^2 R^2}{2 r^2} \quad \text{pour } r > R \quad (2.37)$$

Dans le coeur du tourbillon, la pression évolue comme le carré de la distance à l'axe r , alors qu'à la périphérie, dans la zone où l'écoulement est irrotationnel, la pression est inversement proportionnelle au carré du rayon. Le profil de dépression dans le tourbillon ($\Delta P = P(r) - P_\infty$) est représenté sur la Fig. 2.12. La chute de pression au centre du tourbillon est le point de départ de nombreuses méthodes

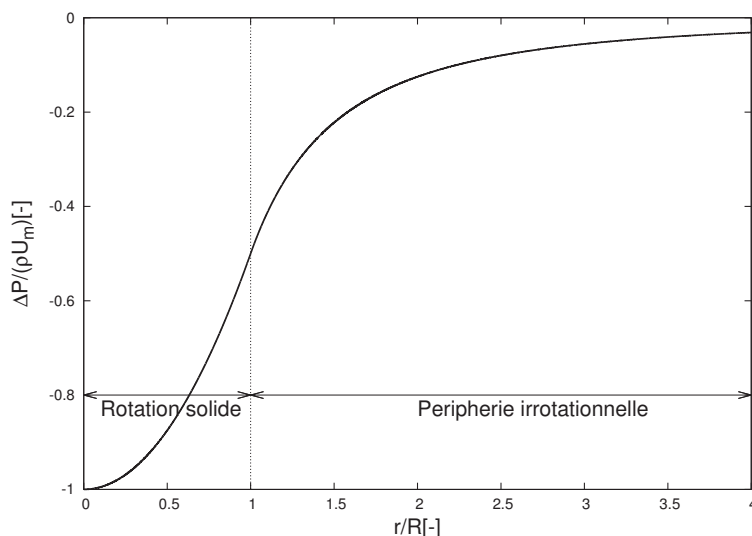


FIGURE 2.12 – Profil radial analytique de dépression dans un tourbillon de Rankine

d'identification des tourbillons dans les écoulements turbulents. Ces méthodes seront présentées plus en détail dans le Chapitre 4.

De la même manière, l'équation 2.26 permet d'étudier les variations axiales de pression, ce qui donne, toujours dans le cas d'un tourbillon de Rankine :

$$\frac{dP}{dz} \propto \frac{2\rho}{R^3} \frac{\Gamma^2}{(2\pi)^2} \frac{dR}{dz} = 2\rho u_m^2 \frac{1}{R} \frac{dR}{dz} \quad (2.38)$$

La contribution du tourbillon à la variation de pression est positive si le rayon du tourbillon augmente suivant z (expansion). Dans ce cas, la pression augmente le long de l'axe, et le gradient de pression peut conduire à l'apparition d'un point d'arrêt dans l'écoulement et générer une zone de recirculation au centre du tourbillon. Ce phénomène bien connu est appelé vortex breakdown (éclatement tourbillonnaire en français). Dans ce cas, les équations et les hypothèses présentées précédemment ne sont plus valables. La topologie et la stabilité de la zone de recirculation, et les conditions d'apparition du vortex breakdown dépendent des nombres de Reynolds et de swirl, et ont fait l'objet de nombreuses études expérimentales depuis le début des années 60. La section suivante s'attache à décrire la dynamique des écoulements swirlés dans lesquels le vortex breakdown intervient.

2.3.3 Dynamique des écoulements swirlés

2.3.3.1 Phénomène de Vortex Breakdown et topologie des écoulements swirlés

Dans les écoulements faiblement swirlés, un gradient de pression axial est généré par l'écoulement tourbillonnaire, mais il n'est pas assez important pour parvenir à arrêter l'écoulement et donner lieu à une zone de recirculation. Lorsque le swirl augmente, le gradient de pression adverse devient tel que l'énergie cinétique de l'écoulement n'est pas suffisante pour le compenser, provoquant l'apparition d'un point d'arrêt qui joue le rôle d'obstacle aérodynamique. Ce mécanisme est couramment utilisé pour stabiliser les écoulements réactifs. Une zone de recirculation centrale se forme, permettant d'alimenter la flamme en gaz chauds. Ce phénomène, appelé vortex-breakdown, a d'abord été observé dans les écoulements autour d'ailes delta et largement étudié pour son importance potentielle sur l'aérodynamique, mais concerne aussi les écoulements swirlés, ou jets tournants, qui combinent une composante de vitesse axiale et azimutale. Il est étudié en détail dans la revue de Lucca-Negro et O'Doherty [122].

Ce changement brutal de topologie de l'écoulement a été étudié par de nombreux auteurs. Harvey [83] fût un des premiers à étudier les écoulements swirlés, et observer différents comportements en fonction de l'intensité du swirl. Il décrit le vortex breakdown comme la transition entre les écoulements faiblement swirlés et les écoulements fortement swirlés, caractérisée par une recirculation du fluide. Il montre également que la zone de très faible vitesse due à la recirculation crée un point d'arrêt et agit comme un objet solide obligeant le fluide à le contourner.

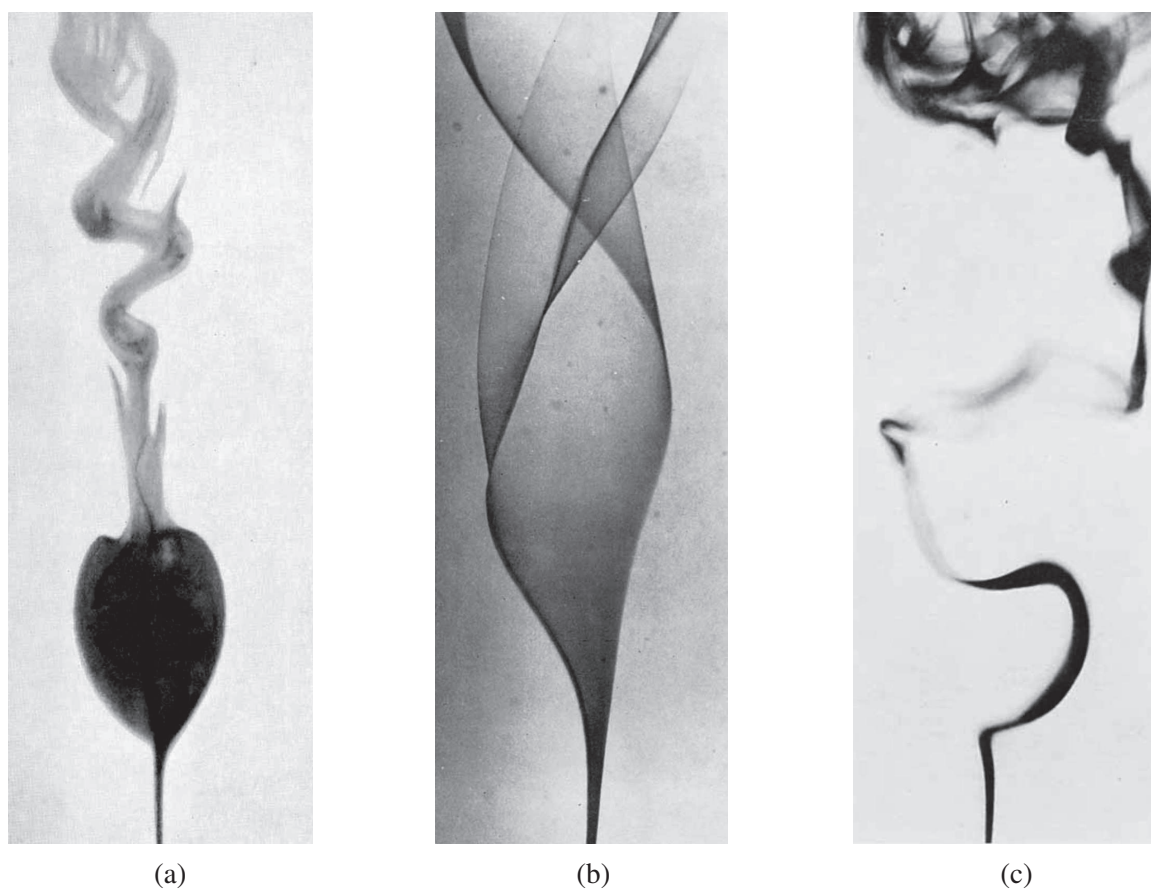


FIGURE 2.13 – Visualisation des 3 modes de vortex breakdown observés par Sarpkaya [175] : mode axisymétrique (a), en double hélice (b), et hélicoïdal (c)

Sarpkaya [175] recense trois grands types de vortex breakdown : axisymétrique ("bubble"), en spirale, ou en double hélice, en observant un filament de colorant au sein d'un écoulement swirlé. Ces trois modes font également partie de la classification proposée par Faler et Leibovich [53], qui identifient sept modes parmi lesquels on retrouve les trois structures proposées par Sarpkaya, les quatre autres étant des combinaisons des trois premiers qui n'interviennent qu'à faible nombre de Reynolds. Ces trois topologies d'écoulements, présentées Fig. 2.13 sont détaillées ci dessous :

- **Mode axisymétrique** (Fig. 2.13 (a))

Le premier mode de vortex breakdown est caractérisé par un point d'arrêt sur l'axe de l'écoulement, suivi d'une zone de recirculation axisymétrique ("bulle") et quasi-stationnaire pour un débit donné. La zone de recirculation se déplace vers l'amont de l'écoulement lorsque le débit augmente. La formation de cette structure est observée par Escudier [50], et illustrée sur la Fig. 2.14. L'injection d'un colorant au centre d'un écoulement swirlé et l'augmentation progressive du débit permet de distinguer la formation d'un point d'arrêt, en aval duquel s'installe une zone axisymétrique dans laquelle le fluide circule en sens inverse. Lorsque le débit continue d'augmenter, la "bulle" ainsi formée remonte l'écoulement.

- **Mode double-hélice** (Fig. 2.13 (b))

Le colorant injecté au niveau de l'axe est étiré sous la forme d'une nappe triangulaire dont les extrémités s'enroulent l'une autour de l'autre, formant une sorte de double hélice. Ce mode, moins courant que les deux autres est considéré comme marginal.

- **Mode hélicoïdal** (Fig. 2.13 (c))

Le colorant injecté au niveau de l'axe ralentit jusqu'au point d'arrêt, où il prend une trajectoire hélicoïdale conique et s'enroule autour de la zone de recirculation. Cette hélice persiste un ou deux tours avant de se désintégrer en turbulence à grande échelle. Contrairement au mode axisymétrique, la zone de recirculation n'est pas alimentée par le coeur du tourbillon, mais par le fluide environnant. Ce mode est caractérisé par une forte périodicité de l'écoulement, dont la fréquence est reliée au nombre de swirl.

Sarpkaya [175] a également étudié les conditions de transition d'un type d'éclatement tourbillonnaire à l'autre, en fonction des conditions de débit, caractérisées par le Reynolds, et de l'intensité du swirl, caractérisée dans son cas par le nombre dans dimension $\Gamma/u_0 D_0$. Le diagramme de la Fig. 2.15 représente la position axiale du vortex breakdown, symbolisé par des triangles dans le cas d'un éclatement hélicoïdal et par des cercles dans le cas d'un éclatement axisymétrique. Les lignes continues représentent les iso-niveaux de $\dot{\theta}$. A niveau de swirl constant, et à faible nombre Reynolds, le mode axisymétrique est observé. Lorsque le débit est augmenté, le point de stagnation remonte vers l'amont de l'écoulement, jusqu'à atteindre une zone de transition (matérialisée par les lignes pointillées), au delà de laquelle le vortex breakdown est de type hélicoïdal. La position de la zone de transition dépend du swirl et du nombre de Reynolds.

2.3.3.2 Le Precessing Vortex Core

Le mode instationnaire hélicoïdal a été étudié plus en détail par plusieurs auteurs. Vonnegut [218] fut l'un des premiers à identifier expérimentalement un phénomène périodique, dont la fréquence était directement liée au débit. Lambourne et Bryer [108] font la même observation sur un écoulement autour d'une aile delta. Chanaud [29] a étudié comment la fréquence des oscillations est liée au nombre de Reynolds et constate lui aussi l'apparition d'une structure périodique au delà d'un nombre de Reynolds critique. A partir de $Re = 300$, une zone de recirculation s'installe dans l'écoulement. Au delà de

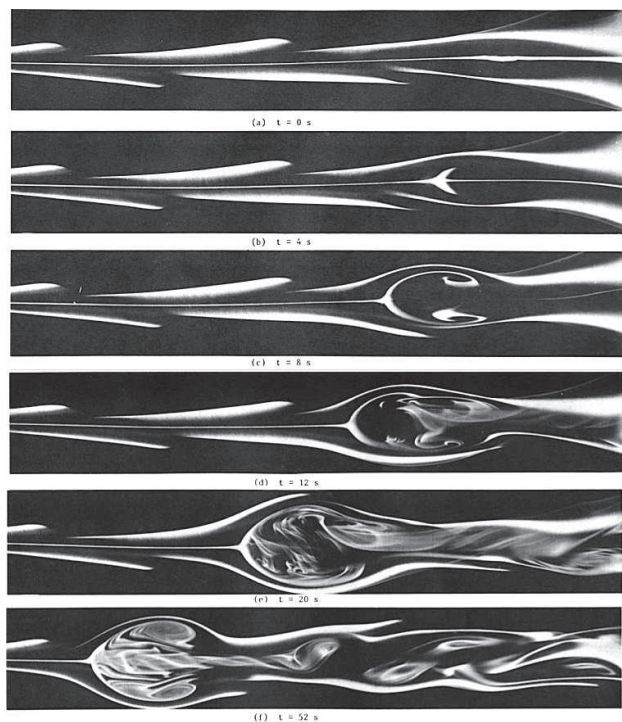


FIGURE 2.14 – Visualisation de l’apparition d’une zone de recirculation axisymétrique due au vortex breakdown par augmentation progressive du débit (le colorant est injecté sur l’axe et en un point décentré) [50]

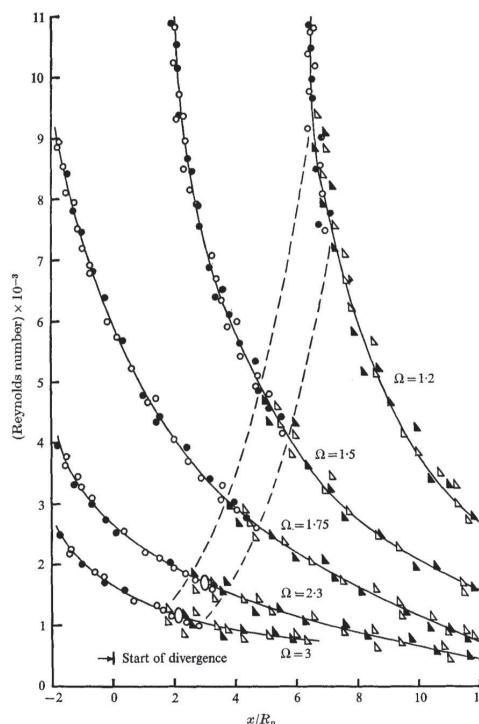


FIGURE 2.15 – Cartographie du mode et de la position du vortex breakdown, obtenue par Sarpkaya [175] en fonction du nombre de swirl et du nombre de Reynolds

300, il constate qu’une perturbation forcée de l’écoulement au niveau des entrées tangentielles génère une oscillation périodique en aval qui disparaît au bout de quelques cycles. En augmentant légèrement le nombre de Reynolds, ces oscillations persistent, et pour des Reynolds encore plus élevés elles apparaissent spontanément. Les Fig. 2.16 et 2.17 illustrent la topologie du PVC décrite par Chanaud [29] ou encore Poinsot [155].

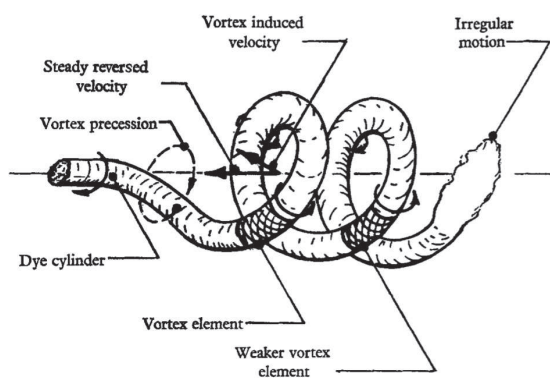


FIGURE 2.16 – Schéma de la structure périodique observée par Chanaud, décrite comme un tourbillon hélicoïdal rotatif [29]

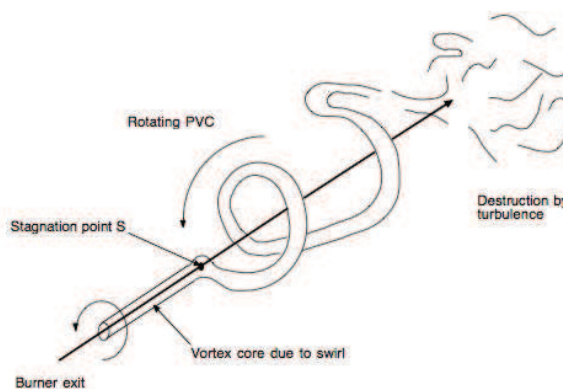


FIGURE 2.17 – Topologie du PVC du point de stagnation à sa désintégration en turbulence à grande échelle [155]

Cassidy et Falvey [25] observent également un écoulement stationnaire en aval du breakdown pour

de faibles nombres de Reynolds, et un vortex hélicoïdal qui précède autour de l'axe de rotation pour des nombres de Reynolds plus élevés. Par ailleurs l'injection axiale de carburant au niveau de l'axe de rotation a tendance à affaiblir le PVC. La fréquence du PVC est caractérisée en terme de nombre de Strouhal : $Str = fD^3/\dot{Q}$, f étant la fréquence caractéristique de l'instabilité. Le graphique représenté sur la Fig. 2.18 montre clairement que le nombre de Strouhal est dépendant du débit.

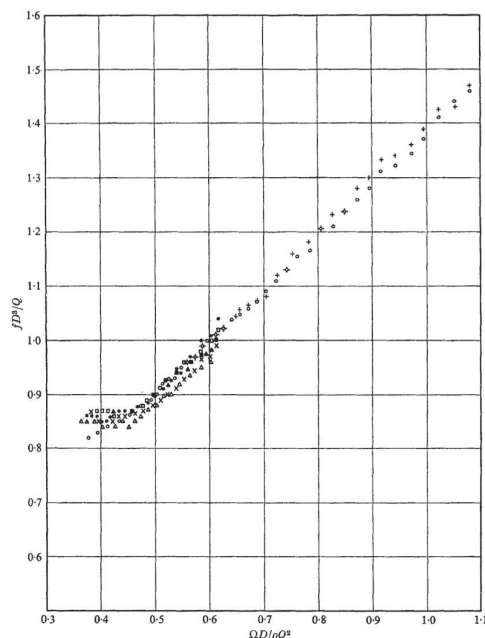


FIGURE 2.18 – Relation entre la fréquence et le débit dans un écoulement swirlé confiné [25]

Les auteurs ayant étudié le sens de rotation du mouvement de précession du tourbillon arrivent à des conclusions différentes : Sarpkaya [175], tout comme Faler et Leibovich [53] observent que le sens d'enroulement de l'hélice et le sens de précession de la structure sont identiques au sens de rotation de l'écoulement. Au contraire, Escudier et Zehnder [51] obtiennent un sens d'enroulement opposé au sens de rotation de l'écoulement, mais une précession de l'hélice en adéquation avec l'écoulement. L'expérience menée par Brucker [19] conduit à un enroulement de la spirale dans le sens de l'écoulement et une précession de la spirale contra-rotative.

Toutes ces études ont été réalisées avec un fluide incompressible et pour des nombres de Reynolds modérés. Dans les chambres de combustion swirlées, les nombres de Reynolds sont bien plus élevés et des effets de compressibilité peuvent modifier la dynamique de l'écoulement. Syred et Beer [203] ont étudié ce phénomène dans des flammes à swirl et ont constaté le même genre de mécanisme et l'apparition d'une structure tourbillonnaire en spirale. Ils sont les premiers à nommer cette structure PVC pour Precessing Vortex Core (coeur tourbillonnaire en precession). Syred *et al.* [204] considèrent que cette structure est due à une forme de vortex breakdown à très haut nombre de Reynolds dans les écoulements à densité variable. Les auteurs montrent que le PVC est moins énergétique en conditions réactives qu'en conditions isothermes, lorsque la combustion se fait en régime de diffusion. Au contraire, en régime de prémélange, en l'absence de processus intrinsèque d'amortissement de l'écoulement, le terrain est plus propice au développement d'instabilités telles que le PVC [202]. Le mode d'injection de carburant joue également un rôle significatif, et en particulier l'injection axiale contribue à diminuer l'amplitude du PVC. Une étude plus quantitative du PVC basée sur des mesures PIV phasées à partir

d'un signal de pression dans une chambre de combustion industrielle montre alors que le PVC modifie la forme de la zone de recirculation. Les moyennes de phases ainsi obtenues sont présentées sur la Fig. 2.19. La position du PVC est identifiée grâce à l'asymétrie du profil de vitesse tangentielle. La vitesse azimuthale du PVC génère une zone de haute vitesse tangentielle (représentée en orange) là où elle est dans le même sens que l'écoulement global, et une zone de vitesse tangentielle négative (matérialisée en bleu) là où elle est opposée au sens de l'écoulement. Le PVC induit également une asymétrie et une excentration de la zone de recirculation centrale (matérialisée en bleu sur la deuxième colonne), il impacte donc directement le processus de stabilisation de la flamme qui repose sur la stabilité de cette zone de recirculation. Peu après, Galley [68] a montré avec des mesures PLIF que le point de stabilisation de la flamme n'est pas stationnaire, mais qu'il tourne légèrement autour de l'axe du brûleur, à la même fréquence que le PVC.

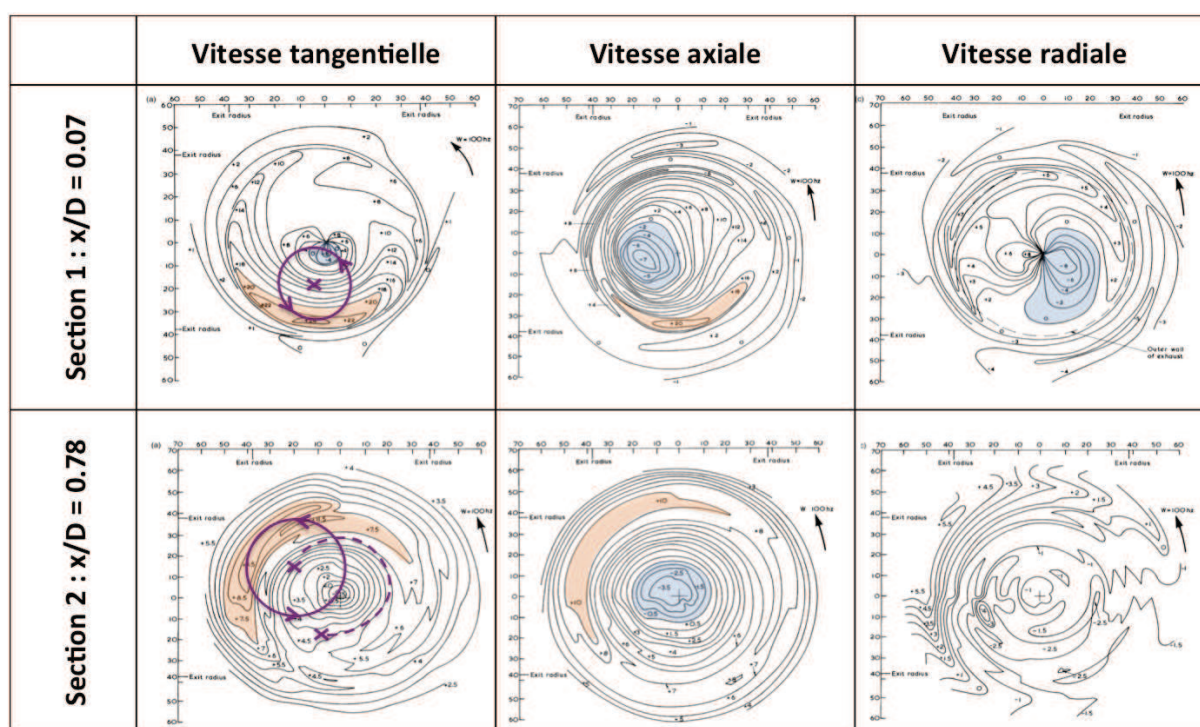


FIGURE 2.19 – Moyennes de phase des trois composantes de vitesses dans deux plans transverse de l'écoulement [204]. Les aires en bleu correspondent à des zones de vitesse négatives, les aires en orange correspondent aux zones où la vitesse est la plus élevée. Les cercles violets représentent la position supposée du PVC dans le plan, et la courbe en pointillé matérialise l'enroulement du PVC entre la section 1 et la section 2.

Boxx *et al.* [16] et Stohr *et al.* [199] ont étudié l'influence du PVC sur un écoulement réactif en analysant des champs expérimentaux à l'aide de méthodes modales qui ont permis de mettre en évidence de manière qualitative d'importantes interactions entre l'écoulement et la combustion, mais aussi des phénomènes d'extinction locale ou d'auto-allumage dus au PVC.

Par ailleurs, le PVC interagit périodiquement avec le front de flamme [202]. Le mécanisme expliquant comment un vortex peut plisser le front de flamme et générer de l'étirement est détaillé sur la Fig. 2.20.

L'augmentation de la surface de flamme du fait du plissement et de l'étirement conduit à des fluc-

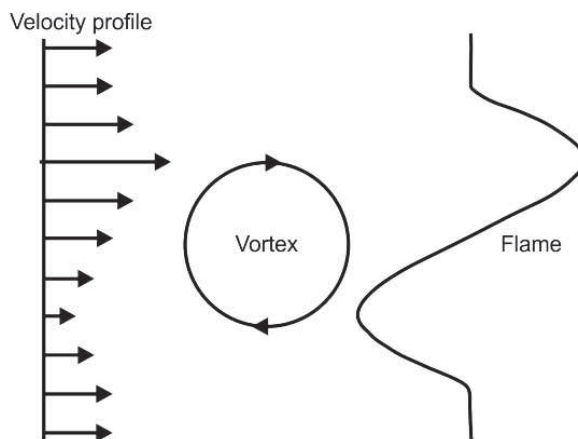


FIGURE 2.20 – Interaction flamme-vortex : la modification locale du profil de vitesse par le tourbillon plisse le front flamme, provoquant une augmentation de la surface de flamme, responsable d’une augmentation locale du dégagement de chaleur.

tuations périodiques du dégagement de chaleur, qui peuvent alors se coupler avec des phénomènes acoustiques et déclencher un mécanisme d’amplification des perturbations acoustiques qui peut avoir des conséquences dramatiques sur le fonctionnement du brûleur.

L’équation de transport pour l’énergie acoustique s’écrit [155] :

$$\frac{\partial e_{a,1}}{\partial t} + \nabla \cdot (P_1 u_1) = r_1 \text{ avec } r_1 = \frac{(\gamma - 1)}{\gamma P_0} P_1 \dot{\omega}_T^1 \quad (2.39)$$

Le terme de droite, r_1 , est un terme issu du couplage entre l’acoustique et le dégagement de chaleur dû à la combustion. Ce couplage thermo-acoustique peut donner lieu à des états stables ou instables, selon la valeur de r_1 , qui peut jouer le rôle soit de terme source si les oscillations de pression sont en phase avec les fluctuations du dégagement de chaleur, soit de terme puit si le dégagement de chaleur est maximum quand la pression est à son minimum. Ce critère de stabilité, proposé par Rayleigh [159], et longtemps adopté par la communauté, conduit à de meilleures prédictions de la stabilité du brûleur si l’on raisonne de manière intégrale, en réalisant une intégration spatiale (sur tout le domaine), et temporelle (sur une période) de l’Eq. 2.39 [155]. Le système est alors instable si l’énergie acoustique croît, c’est à dire si le transfert d’énergie thermique en énergie acoustique est supérieur à l’énergie dissipée dans le domaine et/ou perdue aux parois. Très récemment, Steinberg *et al.* [198] ont montré que l’interaction entre l’acoustique et la dynamique du PVC est un phénomène complexe, le PVC pouvant aussi bien amplifier ou amortir les instabilités acoustiques selon la position relative du PVC et de la flamme. Caux-Brisebois *et al.* [26] proposent une méthode de post-traitement avancée de données expérimentales pour étudier plus en détail le déphasage entre les phénomènes acoustiques et la combustion et prédire la stabilité du brûleur.

Le PVC interagit également avec le spray de carburant dans le cas de flammes diphasiques. Cet aspect a notamment été abordé dans de nombreuses études expérimentales et numériques du brûleur diphasique semi-industriel MERCATO, développé à l’ONERA [70]. Dans ses travaux de thèse dédiés à l’étude numérique du brûleur MERCATO [173], Sanjose montre, en effectuant une analyse POD (Proper Orthogonal Decomposition) sur la fraction volumique de liquide, que la répartition de carburant dans la chambre est corrélée au PVC. Cela conduit à des amas de concentration préférentielle de gouttes

entraînant des fluctuations de richesse [174]. De même, Providakis *et al.* [157] ont observé grâce à une reconstruction du PVC par des moyennes de phase, que les fluctuations de vitesse sont corrélées aux fluctuations du spray. En calculant un nombre de Stokes (Eq. 3.111) des particules basé sur le temps caractéristiques du PVC, il apparaît que l'essentiel des particules a un Stokes inférieur ou de l'ordre de 1, ce qui explique que le spray soit fortement perturbé par la dynamique du PVC. Cependant, plus récemment, Jones *et al.* [97], ont étudié l'influence du PVC sur l'atomisation primaire en s'appuyant aussi sur des simulations LES de MERCATO. Ils ont montré que les hauts niveaux de turbulence générés par le PVC en sortie d'injecteur contribuent à accélérer la désintégration du spray de carburant, favorisant l'apparition de petites gouttes et améliorant ainsi l'évaporation et l'efficacité du système.

Schneider *et al.* [182] montrent que dans le cas de simulations URANS, certains modèles de turbulence ne permettent pas de détecter la présence du PVC observé expérimentalement, ce qui contribue à montrer qu'une approche LES est plus adaptée pour l'étude des brûleurs swirlés [155].

2.3.3.3 Les flammes swirlées dans les chambres aéronautiques

Les flammes swirlées confinées dans les brûleurs aéronautiques possèdent donc une structure caractéristique, qui varie selon l'intensité du swirl [155]

- Dans les brûleurs peu swirlés, une zone de recirculation externe (ORZ pour Outer Recirculation Zone) se forme autour du jet principal. Elle améliore la stabilité et l'accrochage de la flamme.
- Quand le nombre de swirl augmente, la vitesse axiale a tendance à diminuer au niveau de l'axe de symétrie. Pour un nombre de swirl supérieur à 0.6 [202], cette zone de faible vitesse axiale se transforme en une zone de recirculation centrale (CZR pour Central Recirculation Zone), dans laquelle les gaz brûlés viennent alimenter et rechauffer les gaz frais.
- Pour des nombres de swirl plus élevés, la taille de la zone de recirculation centrale a tendance à augmenter. Des nombres de swirl élevés peuvent générer des instabilités, et augmentent le risque de flashback [155].

La topologie de l'écoulement à la sortie du swirler pour ces différents niveaux de swirl est représentée sur la Fig. 2.21.

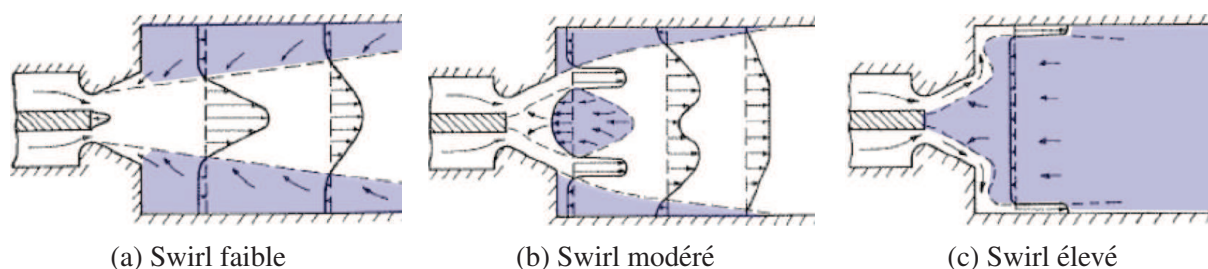


FIGURE 2.21 – Topologie de l'écoulement pour différents niveaux de swirl. Les aires en bleu matérialisent les zones de recirculation induites par le swirl. (Image issue de la thèse de Palies [146])

Entre l'écoulement principal et les zones de recirculation, le fluide est cisailé. On distingue donc également des zones de cisaillement : l'ISL (Inner Shear Layer) désigne la zone de cisaillement entre l'ORZ et l'écoulement principal. Ces zones de cisaillement sont caractérisées par d'importants niveaux de vitesse RMS [201].

Il existe divers types d'injecteurs permettant d'imposer à l'écoulement ce mouvement de rotation : des tourbillonneurs à vrilles axiales, ou radiales, et des injecteurs à plusieurs tourbillonneurs, co- ou

contrarotatifs. Un exemple de système d'injection multi-étages composé d'un tourbillonneur axial et d'une entrée radiale est présenté Fig. 2.22, ainsi qu'une synthèse de la topologie de l'écoulement à la sortie de ce type d'injecteur.

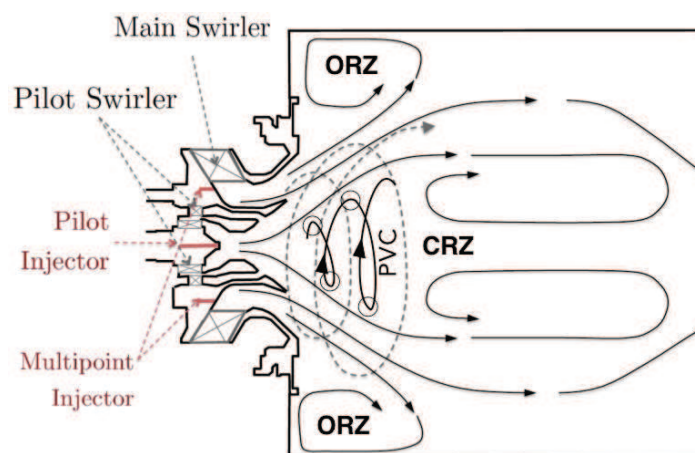


FIGURE 2.22 – Schéma des principales structures tourbillonnaires identifiées à la sortie du système d'injection TLC (schéma issu de la thèse de Barré [8])

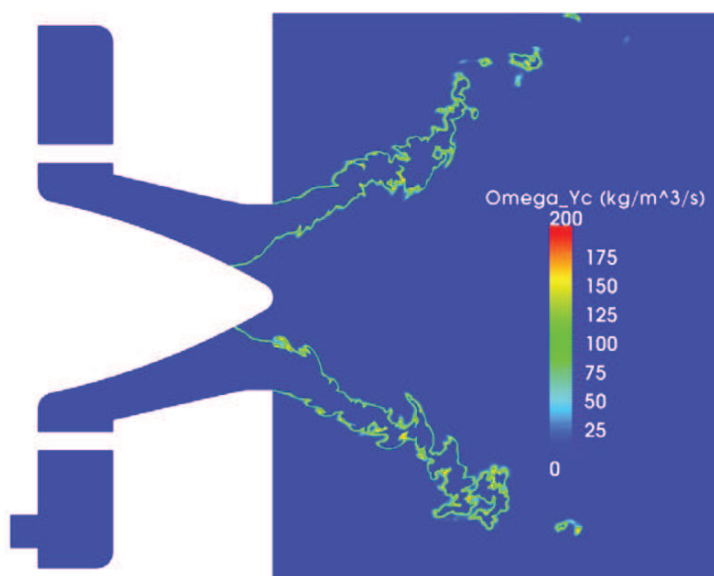


FIGURE 2.23 – Flamme en V dans le brûleur PRECCINSTA, matérialisée par la variable d'avancement dans le plan médian (Moureau *et al.* [138])



FIGURE 2.24 – Visualisation de la flamme de laboratoire étudiée dans la thèse de Palies [146]

Les avantages technologiques de la stabilisation par le swirl sont multiples :

- Contrairement à une stabilisation par accroche flamme, la stabilisation par swirl est faite grâce à un point d'arrêt aérodynamique. Elle permet donc de s'affranchir des contraintes thermo-mécaniques liées à la présence de pièces mécaniques dans la zone de réaction où les gaz sont les plus chauds.
- Un autre avantage du swirl est la compacité de flamme, le rapport de longueur par rapport à une flamme de type jet étant d'environ 1:3. La combustion ayant lieu dans un volume plus petit,

cela permet donc de réduire la taille du brûleur. Cet aspect est particulièrement important dans le contexte aéronautique, où la masse embarquée en vol est un paramètre critique. La flamme, stabilisée sur l'avant de la zone de recirculation centrale est dite "en V" lorsqu'elle est accrochée au centre du brûleur, et "en M" lorsqu'elle est également accrochée sur la paroi externe du swirler [46]. Cette structure de flamme en M, visible sur les Fig. 2.23 et 2.24, a un ratio surface-volume important, assurant l'efficacité du système avec un encombrement réduit.

- La zone de recirculation joue le rôle de réservoir énergétique. L'importante quantité de gaz contenue dans la zone de recirculation permet donc de stabiliser la flamme sur une large plage de fonctionnement. Par ailleurs, dans la zone de cisaillement entre le jet principal et les zones de recirculation, les gradients de vitesse sont très importants, donnant lieu à des niveaux de turbulence élevés qui améliorent le mélange des réactifs, et contribuent au bon fonctionnement du brûleur sur une large gamme de débits.

Sous certaines conditions détaillées précédemment (la condition simplifiée $Sw > 0.7$ est communément adoptée), le cœur tourbillonnaire issu du swirler se déstabilise et s'enroule autour de la zone de recirculation centrale, donnant lieu à une instabilité caractéristique des flammes swirlées : le PVC. De nombreuses études ont montré son importance sur la dynamique de l'écoulement, la répartition des gouttes de carburant, le mélange, la stabilité de la flamme ou encore les fluctuations de dégagement de chaleur. Son rôle dans l'écoulement est encore trop peu connu, et son apparition mal maîtrisée. Il est donc nécessaire de développer des outils permettant d'étudier plus en détail le PVC dans les écoulements swirlés pour améliorer la conception des chambres de combustion. Cette problématique fait l'objet de l'étude décrite dans les Chapitres 4 et 5 .

Chapitre 3

Equations et modèles pour les écoulements diphasiques réactifs

Ce chapitre rappelle les équations de conservation qui régissent les écoulements réactifs, gazeux et diphasiques, ainsi que les méthodes numériques et les modèles utilisés pour résoudre ces équations dans le cadre de simulations réalisées avec un code CFD. Le code YALES2, développé au CORIA et utilisé durant la thèse est également présenté.

Sommaire

3.1	Description et modèles numériques pour les écoulements turbulents réactifs	54
3.1.1	Equations de conservation et loi d'état	54
3.1.2	Introduction à la turbulence	58
3.1.3	Etablissement des équations de conservation pour la LES	64
3.2	Modélisation de la combustion	69
3.2.1	Introduction à la modélisation des écoulements réactifs	69
3.2.2	Modélisation de la combustion du kérosène	74
3.3	Approche numérique pour les écoulements diphasiques	83
3.3.1	Introduction à la modélisation des écoulements particuliers	83
3.3.2	Equations pour le formalisme Lagrangien	86
3.3.3	Couplage avec la phase gazeuse	91
3.3.4	Méthodologie pour la collecte de statistiques sur la phase dispersée	93
3.4	Présentation du solveur LES YALES2	94
3.4.1	Solveur incompressible	94
3.4.2	Solveur à densité variable	96
3.4.3	Résolution de l'équation de Poisson	98
3.4.4	Parallélisme	99

3.1 Description et modèles numériques pour les écoulements turbulents réactifs

3.1.1 Equations de conservation et loi d'état

3.1.1.1 Propriétés thermodynamiques du mélange

L'objectif de la simulation numérique est de prédire l'évolution thermodynamique du système étudié. Pour cela, une équation d'état doit être utilisée pour établir une relation entre les différentes variables d'état. Il existe différents types d'équation d'état suivant les phénomènes physiques étudiés. Dans le cadre de cette étude, le mélange étudié sera considéré comme un gaz parfait, et l'équation d'état suivante sera utilisée :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} T, \quad (3.1)$$

où \mathcal{R} (J/mol/K) désigne la constante des gaz parfaits et \bar{W} la masse molaire moyenne du mélange. Elle s'exprime en fonction des fractions massiques et des masses molaires des composants du mélange :

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k}, \quad (3.2)$$

où N_{sp} désigne le nombre d'espèces.

3.1.1.2 Conservation de la masse

L'équation de continuité, qui traduit la conservation de la masse s'écrit de la manière suivante

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.3)$$

3.1.1.3 Conservation de la quantité de mouvement

Si les forces de volume qui s'appliquent sur le fluide sont négligées, l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}, \quad (3.4)$$

où τ_{ij} désigne le tenseur des contraintes visqueuses et s'écrit pour un fluide Newtonien :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (3.5)$$

La somme du tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et du terme de pression est appelé tenseur des contraintes et noté σ_{ij} :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P \delta_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - P \delta_{ij}, \quad (3.6)$$

Le tenseur des déformation S_{ij} et sa partie déviatrice (*i.e.* à trace nulle) étant définis comme :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{et} \quad S_{ij}^D = S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij}, \quad (3.7)$$

l'équation 3.4 s'écrit aussi :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} 2\mu S_{ij}^D. \quad (3.8)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit de la même manière pour un écoulement non réactif et un écoulement réactif. Cependant la combustion modifie la dynamique puisqu'elle entraîne de fortes variations de la viscosité dynamique μ et de la densité.

3.1.1.4 Conservation des espèces chimiques

Dans le cas d'un mélange de N_{sp} espèces, la composition du gaz est caractérisée par la fraction massique Y_k de l'espèce k , définie comme :

$$Y_k = \frac{m_k}{m}, \quad (3.9)$$

et doit vérifier :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1. \quad (3.10)$$

La fraction massique Y_k est gouvernée par l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k, \quad (3.11)$$

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

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0. \quad (3.12)$$

Le terme $V_{k,i}$ désigne la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i . D'après la théorie cinétique des gaz, les expressions des vitesses de diffusion V_k peuvent être déterminées en inversant un système de N_{sp} équations [223] faisant intervenir les coefficients binaires de diffusion de l'espèce j dans l'espèce k , $\mathcal{D}_{j,k}$, et les fractions molaires X_k :

$$X_k = Y_k \frac{\bar{W}}{W_k}. \quad (3.13)$$

La résolution exacte de ce système, qui nécessite l'inversion d'une matrice $N_{sp} \times N_{sp}$, est trop coûteuse et complexe d'un point de vue mathématique [49]. La vitesse de diffusion est alors souvent approximée avec une approche simplifiée proposée par Hirschfelder et Curtiss [86] :

$$V_{k,i}^{HC} X_k = -\mathcal{D}_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (3.14)$$

où \mathcal{D}_k désigne le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange.

L'équation de conservation, pour l'espèce k , devient alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (3.15)$$

Cependant, cette équation ne vérifie pas l'équation de continuité 3.3. En effet, les équations de transport des N_{sp} espèces du mélange doivent également vérifier l'équation 3.10. Il en résulte donc un système de $N_{sp} + 1$ équations pour N_{sp} inconnues. La somme des N_{sp} équations de transport des espèces (3.15)

combinée avec les identités 3.10, et 3.12 doit redonner l'équation de continuité. Or, en utilisant la simplification de Hirschfelder et Curtiss, et en écrivant la somme des N_{sp} équations d'espèce, l'équation de conservation de la masse n'est plus vérifiée :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) \neq 0 \quad (3.16)$$

Deux méthodes peuvent être envisagées pour assurer la conservation de la masse :

- La première consiste à ne résoudre que $N_{sp} - 1$ équations d'espèces, la dernière étant obtenue en utilisant la relation $Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N_{sp}-1} Y_k$. Cette méthode peut donc entraîner d'importantes erreurs sur la fraction massique de cette dernière espèce.
- La seconde méthode consiste à introduire une vitesse de correction V_i^c dans l'équation (3.15) :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho (u_i + V_i^c) Y_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k, \quad (3.17)$$

calculée de manière à assurer la conservation de la masse.

La somme des N_{sp} équations d'espèce donne alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - \rho V_i^c \right) = 0, \quad (3.18)$$

ce qui permet d'écrire :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}. \quad (3.19)$$

3.1.1.5 Conservation de l'énergie

La conservation de l'énergie peut être présentée sous différentes formes selon la grandeur qui est considérée. La variable choisie ici pour écrire l'équation bilan est l'enthalpie sensible h_s , définie comme :

$$h_s = \int_{T_0}^T C_p dT. \quad (3.20)$$

L'équation bilan pour l'enthalpie sensible s'écrit [155] :

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{th} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_{s,k} V_{k,i} \right) + \dot{\omega}_T. \quad (3.21)$$

Comme pour l'équation de conservation des espèces chimiques, la vitesse de diffusion, $V_{k,i}$ est exprimée comme :

$$V_{k,i} = V_{k,i}^{HC} + V_i^c. \quad (3.22)$$

Le terme source $\dot{\omega}_T$ correspond à l'énergie produite lors de la combustion, et dépend des enthalpies de formation des espèces $\Delta h_{f,k}^0$ et du terme source des espèces $\dot{\omega}_k$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k. \quad (3.23)$$

3.1.1.6 Modélisation des phénomènes de transport

La diffusion, la conduction et la viscosité sont des phénomènes liés au transport moléculaire. La diffusion est un transport de masse dû aux gradients de concentration, la conduction thermique relève de processus de transfert de chaleur dus aux gradients de température, et enfin la viscosité est liée à des transferts de quantité de mouvement dus aux gradients de vitesse. Le paragraphe qui suit s'attache à présenter brièvement deux types d'approches pour caractériser ces phénomènes de transport : un modèle de transport complexe issu de la théorie cinétique des gaz et un modèle simplifié.

- Modèle de transport complexe

Le modèle de transport complexe utilisé couramment dans les solveurs de chimie complexe est basé sur la théorie cinétique des gaz, et permet d'exprimer les coefficients de transport de chaque espèce en présence en fonction de la composition du mélange et de grandeurs moléculaires supposées connues. Le calcul de $\lambda_{th,k}$, $\mathcal{D}_{k,j}$, et μ_k est détaillé dans les travaux de Giovangigli [75], et résumé dans la thèse de Gruselle [77].

La viscosité dynamique du mélange est ensuite calculée à partir des viscosités dynamiques de chaque espèce par l'intermédiaire d'une loi de mélange donnée par la formule de Wilke [221]

$$\mu = \sum_k \frac{\mu_k X_k}{\sum_j \Phi_{k,j} X_j} \quad \text{avec} \quad \Phi_{k,j} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_k}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_k}\right)^{1/4}\right]^2}{\sqrt{8} \sqrt{1 + \frac{W_k}{W_j}}}. \quad (3.24)$$

De même, la conductivité thermique du mélange est calculée selon la loi de mélange donnée par Brocaw [18] :

$$\lambda_{th} = \frac{1}{2} \left[\sum_k X_k \lambda_{th,k} + \left(\sum_k \frac{X_k}{\lambda_{th,k}} \right)^{-1} \right]. \quad (3.25)$$

Les coefficients de diffusion binaires $\mathcal{D}_{k,j}$ de l'espèce k vis-à-vis de l'espèce j sont réutilisés pour calculer pour chaque espèce un coefficient de diffusion moyen dans le mélange [49] :

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} \frac{X_j}{\mathcal{D}_{k,j}}}. \quad (3.26)$$

Ce coefficient de diffusion équivalent de l'espèce k dans le mélange est réintroduit dans l'équation de conservation des espèces chimiques dans le cadre de l'approximation de Hirschfelder-Curtiss présentée précédemment (Eq. 3.15).

- Modèle de transport simplifié

Dans certains cas où la modélisation des phénomènes de transport ne nécessite pas une telle précision, et pour des raisons de coût CPU, un modèle de transport très simplifié, basé sur des approximations largement utilisées peut être privilégié.

La viscosité dynamique peut être calculée par l'intermédiaire d'une loi dépendant de la température. La plus courante est la loi de Sutherland qui s'écrit de la manière suivante :

$$\mu = \mu_{ref} \frac{T_{ref} + C}{T + C} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2}, \quad (3.27)$$

La diffusivité thermique λ_{th} est calculée à partir du nombre de Prandtl, Pr , qui compare la viscosité cinématique et la diffusion thermique :

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda_{th}}. \quad (3.28)$$

Pour la diffusion moléculaire, tous les coefficients de diffusion \mathcal{D}_k sont supposés égaux, $\mathcal{D}_k = \mathcal{D}$. Le nombre de Schmidt compare la viscosité cinématique ν et la diffusion moléculaire :

$$Sc = \frac{\nu}{\mathcal{D}}. \quad (3.29)$$

Le rapport de ces deux nombres sans dimension est appelé nombre de Lewis :

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\lambda_{th}}{\rho C_p \mathcal{D}}. \quad (3.30)$$

Le coefficient de diffusion s'écrit donc :

$$\mathcal{D} = \frac{\lambda_{th}}{\rho C_p Le}. \quad (3.31)$$

le modèle le plus simple consiste à supposer le nombre de Lewis constant et unitaire. Cette hypothèse forte, qui revient à négliger les effets de diffusion différentielle se justifie par le fait que le Lewis ne subit que de faibles variations, même à travers un front de flamme [155].

3.1.2 Introduction à la turbulence

Afin d'expliquer plus en détails les enjeux et les difficultés liés à la simulation numérique des écoulements turbulents, il convient de rappeler quelques généralités sur la turbulence.

Reynolds [163] fût le premier à identifier deux états possibles pour un écoulement fluide : laminaire ou turbulent. Dans les écoulements caractérisés par de faibles vitesses, les petites perturbations sont immédiatement amorties par la viscosité moléculaire qui préserve le caractère ordonné du fluide. L'écoulement est dit laminaire. Lorsque la vitesse augmente, la viscosité n'est plus suffisante pour dissiper ces perturbations qui vont être amplifiées par divers mécanismes d'instabilités. L'écoulement passe alors d'un état laminaire à un état turbulent. Parmi ces mécanismes d'instabilités, on distingue par exemple les instabilités de Kelvin-Helmholtz (Fig. 3.1), caractéristiques de l'enroulement en structures tourbillonnaires à l'interface de deux fluides se déplaçant à des vitesses différentes et les instabilités de Rayleigh-Taylor (Fig. 3.2), apparaissant à l'interface séparant deux fluides de densités différentes soumis à la pesanteur. Ces deux états très différents correspondent toutefois aux mêmes équations, introduites dans la section 3.1.1. La transition de l'état laminaire à l'état turbulent s'explique par la caractère non linéaire de ces équations.

La turbulence fait intervenir une large gamme d'échelles spatiales et temporelles, de nature instationnaire et au comportement aléatoire, et est par définition un phénomène tridimensionnel (perte des symétries existantes), instable (instationnaire, avec d'importantes fluctuations dans le temps et dans l'espace) et chaotique.

En pratique, la plupart des applications industrielles mettent en œuvre des écoulements en régime turbulents, dont les propriétés présentent de nombreux intérêts. Parmi les conséquences pratiques de la turbulence exploitées dans les systèmes industriels, on peut par exemple citer la réduction de la traînée due à la turbulence dans les zones de décollement (balles de golf), l'activation du mélange dans le cas

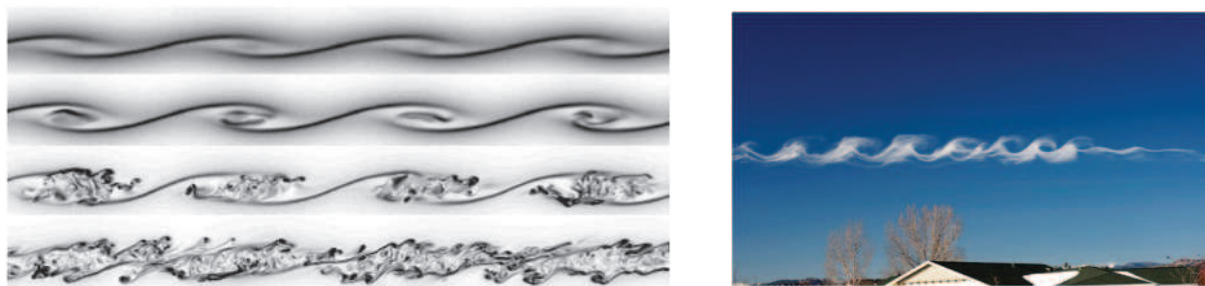


FIGURE 3.1 – Instabilités de Kelvin-Helmoltz qui se développent à l’interface de fluides se déplaçant à des vitesses différentes.

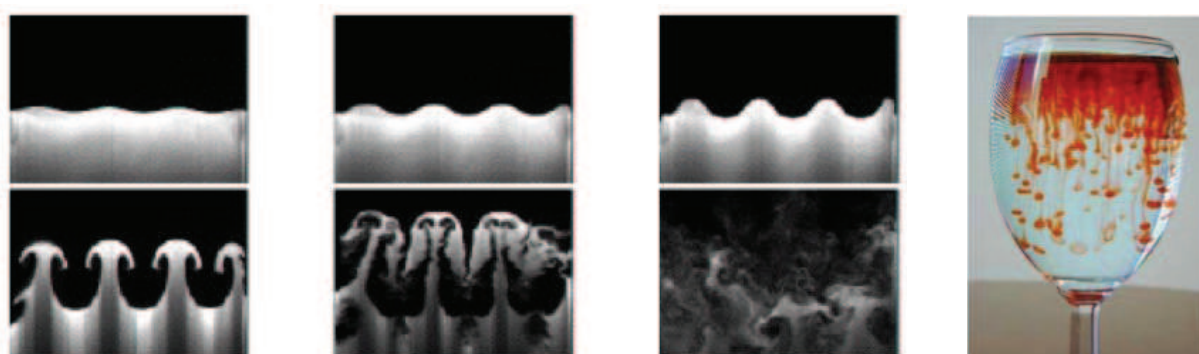


FIGURE 3.2 – Instabilités de Rayleigh-Taylor qui se développent à l’interface de fluides de densité différente.

d’un fluide à plusieurs constituants (moteurs à piston et turbines à gaz), ou encore l’augmentation des transferts pariétaux.

Le caractère turbulent d’un écoulement peut être quantifié en comparant les forces visqueuses du fluide qui s’opposent au mouvement, et les forces d’inertie. Le nombre sans dimension qui compare ces deux forces est le nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{uL}{\nu}. \quad (3.32)$$

3.1.2.1 Outils statistiques pour la description de la turbulence

La turbulence est par essence un phénomène instationnaire, chaotique et aléatoire. La nature aléatoire de la turbulence peut sembler incompatible avec le caractère déterministe des équations qui la caractérisent. Cela s’explique par le fait que les écoulements turbulents comportent inévitablement des perturbations dans les conditions aux limites (rugosité de la paroi, présence d’impureté dans le fluide, inhomogénéité de la température, etc...), et que par ailleurs les équations de Navier-Stokes présentent une grande sensibilité à ces petites perturbations. La non-linéarité des équations de Navier-Stokes peut conduire, pour deux états initiaux très proches, à deux états très différents. De petits effets peuvent avoir de grandes conséquences, et le phénomène s’aggrave quand le nombre de Reynolds devient très élevé. En d’autres termes, les équations de Navier-Stokes conduisent à une solution stable (laminaire) pour un nombre de Reynolds faible, et à une solution instable et chaotique (turbulente) à des nombre de Reynolds plus élevés.

Compte tenu du caractère aléatoire de la variable φ que l'on cherche à résoudre, il est impossible de construire un modèle mathématique capable de prédire φ . Le modèle numérique doit donc s'attacher à décrire φ de manière statistique, c'est-à-dire à prédire sa PDF (Probability Density Function) [156, 31]. La PDF \mathcal{P} de la variable aléatoire φ est la fonction telle que :

$$\mathbb{P}(\varphi \leq \varphi_1) = \int_{-\infty}^{\varphi_1} \mathcal{P}(x) dx \quad (3.33)$$

La PDF $\mathcal{P}(\varphi)$ d'une variable est parfaitement déterminée si tous ses moments statistiques sont connus. Le moment statistique d'ordre q est défini comme :

$$\mathcal{M}_q(\varphi) = \langle \varphi^q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^q \mathcal{P}(x) dx \quad (3.34)$$

Le moment d'ordre 1 correspond à la moyenne de la variable aléatoire :

$$\langle \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \mathcal{P}(x) dx \quad (3.35)$$

On définit φ' , la fluctuation de φ , comme l'écart à la valeur moyenne :

$$\varphi' = \varphi - \langle \varphi \rangle \quad (3.36)$$

Il peut également être intéressant de connaître les moments de φ' aussi appelés moments centrés :

$$\mu_q(\varphi) = \langle \varphi'^q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \langle \varphi \rangle)^q \mathcal{P}(x) dx \quad (3.37)$$

Le moment centré d'ordre zero μ_0 vaut 1, le moment centré d'ordre 1, μ_1 vaut 0. Le moment centré d'ordre 2, μ_2 , aussi appelé variance, est défini comme :

$$\text{var}(\varphi) = \mu_2(\varphi) = \langle \varphi'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \langle \varphi \rangle)^2 \mathcal{P}(x) dx \quad (3.38)$$

On utilise plus couramment la racine carrée de μ_2 , plus connue sous le nom d'écart-type ou bien souvent désigné dans le contexte de la LES comme RMS (Root Mean Square) de φ .

L'étude des écoulements turbulents nécessite également un outil mathématique capable de quantifier la répartition spectrale de l'énergie cinétique turbulente. Pour quantifier l'énergie cinétique turbulente contenue dans les échelles de taille caractéristique r , on introduit le tenseur des corrélations doubles de vitesse, qui indique comment les fluctuations de vitesses à des points distants de r sont corrélées :

$$R_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) = \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \rangle. \quad (3.39)$$

Sa transformée de Fourier, définie comme :

$$\Phi_{ij}(\boldsymbol{\kappa}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} R_{ij}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (3.40)$$

correspond à la contribution du nombre d'onde $\boldsymbol{\kappa}$ à l'énergie cinétique turbulente.

Pour s'affranchir des considérations directionnelles et raisonner uniquement en nombre d'onde scalaire κ , on définit le spectre d'énergie cinétique turbulente en intégrant la trace de $\Phi_{ij}(\boldsymbol{\kappa})$ sur la sphère de rayon κ notée $\mathbb{S}(\kappa)$ dans l'espace des nombres d'onde :

$$E(\kappa) = \oint_{\mathbb{S}} \frac{1}{2} \Phi_{ii}(\boldsymbol{\kappa}) dS. \quad (3.41)$$

Le terme $E(\kappa) \Delta\kappa$ correspond à la contribution énergétique des échelles dont le module du nombre d'onde est compris dans la plage $\kappa \leq |\boldsymbol{\kappa}| \leq \kappa + \Delta\kappa$.

3.1.2.2 Analyse du spectre de turbulence

Le spectre d'énergie cinétique turbulente $E(\kappa)$, décrit d'après l'Eq. 3.41, caractérise, pour chaque échelle κ l'état turbulent des structures tourbillonnaires de taille correspondante. Il est représenté sur la Fig. 3.3.

C'est à Lewis F. Richardson [164] que l'on doit la notion de cascade énergétique, résumée en quelques vers inspirés d'un poème de Jonathan Swift :

*Big whorls have little whorls,
Which feed on their velocity ;
And little whorls have lesser whorls,
And so on to viscosity .*

Cette notion qui fut ensuite formalisée par la théorie de Kolmogorov[105]. Le concept de cascade énergétique, décrit le transfert de l'énergie produite par les grandes structures du fait des gradients de vitesse importants vers les plus petites structures par des mécanismes de compression/étirement.

Les échelles du spectre de turbulence sont hiérarchisées de la manière suivante [156]

- **L'échelle intégrale**, associée aux plus grandes structures tourbillonnaires de l'écoulement, qui suivent des directions privilégiées qui dépendent de la géométrie. Les grandes échelles sont celles qui contiennent les tourbillons les plus énergétiques. Le nombre de Reynolds basé sur l'échelle intégrale l_t est défini comme :

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{\nu}, \quad (3.42)$$

où u'_t désigne la vitesse caractéristiques des fluctuations liées à l'échelle intégrale l_t .

item[-] **Les échelles intermédiaires** qui contiennent les tourbillons les plus dissipatifs de l'écoulement, responsables du transfert de l'énergie cinétique des plus grandes échelles vers les plus petites par un phénomène de cascade énergétique décrit dans la théorie de Kolmogorov. **L'échelle de Taylor** λ_T désigne l'échelle la plus dissipative.

- **L'échelle de Kolmogorov**, qui désigne la taille des plus petits tourbillons, limitée par l'agitation moléculaire. A cette échelle, toute l'énergie cinétique turbulente est dissipée sous forme de chaleur. Le nombre de Reynolds associé à l'échelle de Kolmogorov est noté Re_η :

$$Re_\eta = \frac{u'_\eta \eta}{\nu} \approx 1. \quad (3.43)$$

Les plus petites échelles de l'écoulement jouent un rôle purement dissipatif et présentent un caractère isotrope et universel, la cascade énergétique ayant détruit l'anisotropie initiale des grandes échelles.

Le phénomène de cascade énergétique est illustré par le spectre d'énergie cinétique turbulente représenté sur la Fig. 3.3. La production d'énergie turbulente est assurée par les plus grandes échelles, elle est donc maximale en $\kappa = 2\pi/l_t$. Elle est ensuite transférée aux nombres d'ondes plus importants, en suivant une pente en $\kappa^{-5/3}$. Enfin au sein des plus petites échelles, l'énergie résiduelle est dissipée sous forme d'énergie thermique. La définition du spectre d'énergie, décrite dans l'équation 3.41, associée à l'équation de conservation de la quantité de mouvement 3.4, permet d'établir une équation d'évolution pour l'énergie cinétique turbulente [156] :

$$\frac{\partial E}{\partial t}(\kappa, t) = P(\kappa, t) - \frac{\partial}{\partial \kappa} T(\kappa, t) - 2\nu\kappa^2 E(\kappa, t) \quad (3.44)$$

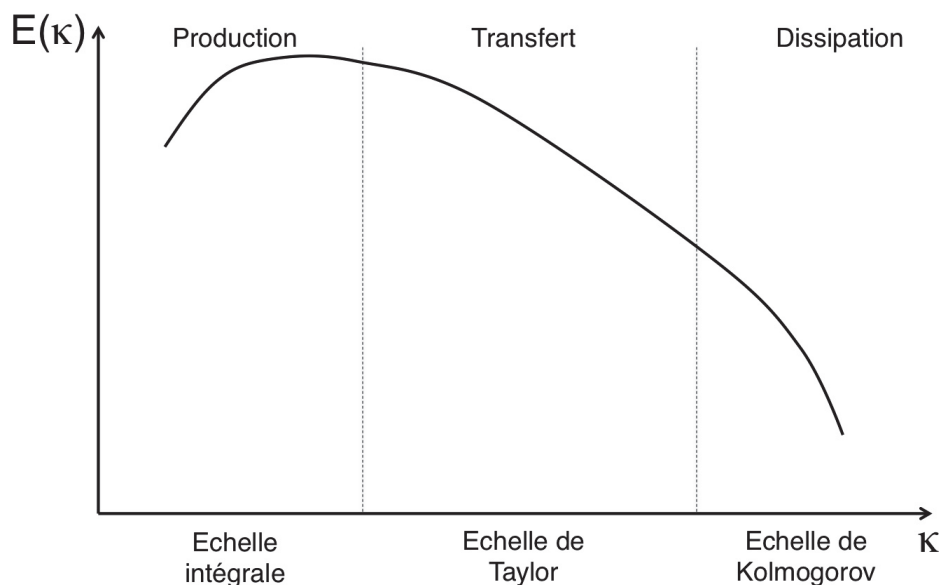


FIGURE 3.3 – Spectre d'énergie cinétique turbulente

Les trois termes du membre de droite dans l'équation 3.44 représentent respectivement la production d'énergie aux grandes échelles, le taux de transfert d'énergie des grandes échelles vers les plus petites, et la dissipation visqueuse.

Les équations 3.42 et 3.43 permettent d'établir une relation entre l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov :

$$\frac{l_t}{\eta} \approx (Re_t)^{3/4} \quad (3.45)$$

L'équation 3.45 montre bien que la disparité des échelles caractéristiques de l'écoulement croît avec le nombre de Reynolds. Autrement dit, pour un domaine de calcul donné, plus le nombre de Reynolds est grand, plus il faudra diminuer la taille des cellules fluides pour résoudre l'intégralité du spectre. Si l'on considère un domaine cubique de côté L , discrétisé avec N points dans chaque direction de l'espace, la taille des cellules est alors égale à L/N dans chaque direction. Pour espérer raisonnablement résoudre toutes les échelles de la turbulence sur ce maillage, dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, le domaine doit être plus grand que l'échelle intégrale l_t , et la taille de la plus petite cellule Δx doit être de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov, ce qui impose la relation :

$$N \approx \frac{l_t}{\eta}. \quad (3.46)$$

Le nombre de cellules dans le domaine cubique doit donc satisfaire :

$$N^3 \approx Re_t^{9/4}. \quad (3.47)$$

Dans la plupart des applications aéronautiques, Re_t est de l'ordre de quelques milliers à quelques dizaines de milliers. Il en résulte donc un maillage de l'ordre de 10^9 éléments.

3.1.2.3 Approches numériques pour les écoulements turbulents : RANS, LES, DNS

Les équations de Navier-Stokes constituent un modèle de la mécanique des fluides, qui s'applique aussi bien aux écoulements laminaires qu'aux écoulements turbulents, et dont la validité a été largement démontrée.

Le principe de la Simulation Numérique Directe (ou DNS pour Direct Numerical Simulation en anglais), consiste à résoudre directement la forme discrétisée des équations de Navier-Stokes. Cela suppose, pour que les termes discrétisés soient le plus proche possible des termes continus, que toutes les échelles de la turbulence soient résolues. Or, la section précédente a permis de mettre en évidence, pour des écoulements fortement turbulents, le coût de calcul prohibitif d'une simulation basée sur la résolution directe des équations de Navier-Stokes, et ce même si on ne considère qu'une turbulence non-réactive. La prise en compte des phénomènes de combustion ou d'atomisation par exemple augmentent dramatiquement le coût du calcul. Malgré la progression des performances des supercalculateurs, l'approche DNS reste donc consacrée essentiellement à des calculs académiques, sur des domaines de petite taille. Dans le cas où l'approche DNS n'est pas envisageable, un autre formalisme doit être utilisé pour prendre en compte le fait que la simulation numérique ne peut pas capturer toutes les échelles de l'écoulement.

L'approche RANS (pour Reynolds Averaged Navier-Stokes) consiste à résoudre les équations obtenues en appliquant un opérateur de moyenne statistique aux équations de Navier-Stokes. Ainsi, seul l'écoulement moyen est calculé, et aucune des échelles du spectre de turbulence n'est résolue. Du fait de la non-linéarité des équations de Navier-Stokes, des termes non-résolus apparaissent dans les équations moyennées et leur fermeture nécessite l'utilisation de modèles de turbulence. L'avantage de l'approche RANS est qu'elle permet de travailler avec des maillages très grossiers, et des temps de restitutions courts ce qui la rend attractive auprès des industriels. Elle permet également d'exploiter les symétries de la géométrie et de réaliser des simulations en 2D, puisque contrairement aux grandeurs instantanées, les champs moyens présentent des symétries spatiales.

La méthode intermédiaire en terme de quantité d'information résolue est la Simulation aux Grandes Echelles (ou LES pour Large Eddy Simulation en anglais). Elle consiste à appliquer un opérateur de filtrage spatial aux équations de Navier-Stokes pour ne résoudre que les grandes échelles de l'écoulement. Cette méthode permet de résoudre non pas un champ moyen comme l'approche RANS, mais un champ instantané dont une partie du contenu fréquentiel a été filtré. Les termes non-fermés des équations de Navier-Stokes filtrées doivent également être modélisés, et représentent l'effet des plus petites structures sur les plus grandes. Or les plus petites structures du spectre sont isotropes, universelles et principalement dissipatives. Elles se prêtent donc bien à la modélisation. Le coût de calcul, bien moins important que celui d'une DNS, rend la LES accessible pour de nombreuses configurations industrielles et complexes.

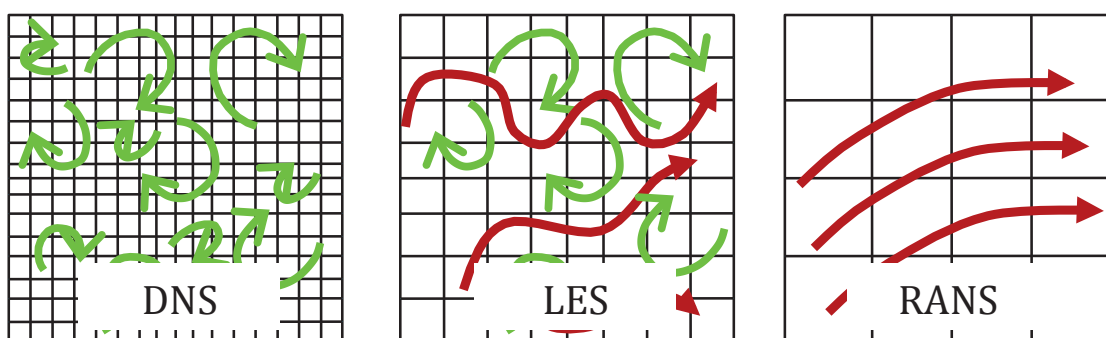


FIGURE 3.4 – Illustration des approches RANS, LES et DNS

Les trois méthodes précédemment présentées sont décrites sur les Fig. 3.4 et 3.5. La Fig. 3.4 illustre pour chaque méthode ce qui est résolu (en vert) et ce qui est modélisé (en rouge), et sur quel genre de maillage. Sur la Fig. 3.5, le spectre moyen, au sens statistique, de la turbulence est représenté. L'intégralité du spectre est résolu en DNS. En LES, le spectre est résolu jusqu'à une échelle de coupure,

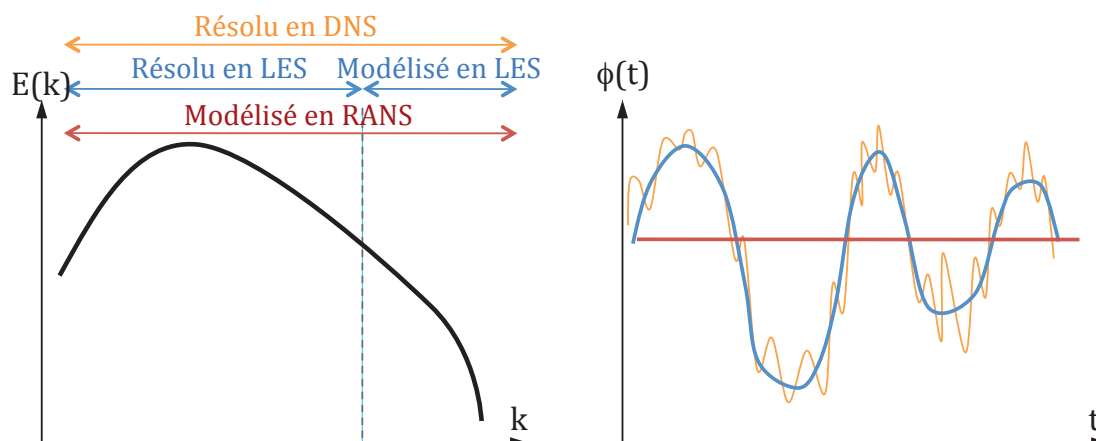


FIGURE 3.5 – Fonctionnement des approches RANS, LES et DNS, illustré dans l'espace spectral (gauche), et dans l'espace physique (droite)

ce qui se traduit sur la solution par une grandeur physique au contenu fréquentiel tronqué. En RANS, l'intégralité du spectre est modélisé, la solution obtenue est une grandeur moyenne, sans fluctuations, qui n'évolue pas dans le temps.

3.1.3 Etablissement des équations de conservation pour la LES

3.1.3.1 Equations de Navier-Stokes filtrées

L'approche LES nécessite un jeu d'équations décrivant l'évolution des grandeurs filtrées. Elles sont obtenues en appliquant un opérateur de filtrage spatial – noté $\overline{(\cdot)}$ – aux équations de Navier-Stokes présentées plus haut.

L'opération de filtrage, qui assure la séparation d'échelle entre la partie non résolue et la partie résolue du spectre est définie mathématiquement comme la convolution de la variable à filtrer $\varphi(\mathbf{x}, t)$ par un opérateur de filtrage $G_{\Delta}(\mathbf{x})$ de largeur Δ [171] :

$$\overline{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\mathbf{y}) G_{\Delta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (3.48)$$

$\overline{\varphi}$ est la variable filtrée. La différence entre φ et $\overline{\varphi}$ constitue les fluctuations de sous-maillages et sera notée φ'' :

$$\varphi = \overline{\varphi} + \varphi'' \quad (3.49)$$

L'opérateur de filtrage doit remplir les conditions suivantes :

- La normalisation :

$$\int_{\mathbb{R}^3} G_{\Delta}(\mathbf{x}) = 1 \quad (3.50)$$

- La commutativité avec les opérateurs de dérivation temporelle et spatiale

$$\overline{\frac{\partial \varphi}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \overline{\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial x_i}. \quad (3.51)$$

La commutativité avec la dérivée spatiale est assurée si le filtre G_{Δ} est isotrope, et que la taille de filtre Δ est homogène. En pratique dans la plupart des applications LES, le filtrage spatial est assuré

de manière implicite par l'intermédiaire du maillage, les échelles inférieures à l'échelle de coupure ne pouvant être capturées. La taille de filtre est donc étroitement liée à la résolution du maillage. L'erreur de commutation étant proportionnelle à $d\Delta(x)/dx$, elle peut devenir importante dans le cas de simulations mettant en œuvre des géométries complexes et faisant intervenir des maillages non structurés et à la résolution non homogène en espace. Cependant, l'hypothèse selon laquelle la commutativité spatiale est respectée est largement utilisée en LES. En ce qui concerne la commutativité avec la dérivée temporelle, elle est assurée si le maillage n'évolue pas avec le temps. Les erreurs de commutation avec la dérivée temporelle dans le cadre d'applications avec des maillages mobiles (moteurs à pistons par exemple) ont été étudiées dans le cadre de la thèse de Moureau [135], mais sortent du contexte de cette thèse.

L'opération de filtrage n'est en général pas distribuable ni idempotente :

$$\overline{\varphi_1 \varphi_2} \neq \overline{\varphi_1} \overline{\varphi_2} \quad \text{et} \quad \overline{\overline{\varphi}} \neq \overline{\varphi} \quad (3.52)$$

Dans le cadre des écoulements à densité variable, pour retomber sur un jeu d'équations filtrées le plus semblable possible aux équations de départ, le filtrage au sens de Favre est introduit. Il repose sur une pondération de la variable à filtrer par la masse volumique :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho \varphi}}{\bar{\rho}}. \quad (3.53)$$

Les équations de Navier-Stokes filtrées sont obtenues en appliquant l'opérateur de filtrage (en supposant qu'il commute avec les dérivées spatiales et temporelles) au jeu d'équations initial :

- **Conservation de la masse :**

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.54)$$

ce qui donne en appliquant le filtrage de Favre :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.55)$$

De manière générale, tous les termes du type $\partial \rho \varphi / \partial x_i$ seront traités de la manière suivante :

$$\overline{\frac{\partial \rho \varphi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{\rho \varphi}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varphi}}{\partial x_i} \quad (3.56)$$

- **Conservation de la quantité de mouvement :**

L'équation de quantité de mouvement filtrée s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} \quad (3.57)$$

Le terme $\overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j}$ nécessite un traitement spécial car le produit filtré n'est pas égal au produit des vitesses filtrées $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$. Le tenseur des contraintes résiduelles, noté t_{ij} , est introduit pour faire apparaître $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$. Ce terme, issu du filtrage du terme non-linéaire de l'équation de quantité de mouvement est défini comme :

$$t_{ij} = -\bar{\rho}(\overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (3.58)$$

L'équation de quantité de mouvement devient donc :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\tau}_{ij} + \underbrace{t_{ij}}_{(1)}). \quad (3.59)$$

- **Conservation de l'enthalpie sensible :**

La même opération fait apparaître des termes non résolus (notés (2), (3) et (4)) dans l'équation de conservation de l'enthalpie sensible

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s) = \frac{D\bar{P}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\underbrace{\lambda_{th} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}}_{(2)} - \bar{\rho} \underbrace{(u_i \tilde{h}_s - \tilde{u}_i \tilde{h}_s)}_{(3)} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\underbrace{\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}}_{(4)} \right) + \underbrace{\bar{\omega}_T}_{(5)} \end{aligned} \quad (3.60)$$

- **Conservation des espèces chimiques :**

Le filtrage de l'équation de conservation des espèces chimiques donne :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\underbrace{-\bar{V}_{k,i} \tilde{Y}_k}_{(6)} - \bar{\rho} \underbrace{(u_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}_{(7)} \right) + \underbrace{\bar{\omega}_k}_{(8)}. \quad (3.61)$$

Dans ces équations, les termes (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7) et (8) ne peuvent pas être calculés explicitement. Il est donc nécessaire d'introduire des fermetures afin d'exprimer ces termes en fonction des variables résolues par le solveur.

- L'utilisation d'un modèle de LES capable de reproduire au mieux le rôle des échelles de sous-maille est nécessaire pour la modélisation du tenseur des contraintes résiduelles (terme (1)). Plusieurs modèles de sous-maille pour la turbulence seront présentés dans la section 3.1.3.2.
- Les flux de diffusion (termes (2), (4) et (6)) sont exprimés par des lois de transport basées sur un gradient :

$$\bar{V}_{k,i} \tilde{Y}_k = -\mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad \rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} = -\bar{\rho} \sum_{k=1}^N \mathcal{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \tilde{h}_{s,k} \quad (3.62)$$

$$\text{et} \quad \lambda_{th} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} = \lambda_{th} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}. \quad (3.63)$$

Dans le cas d'un modèle de transport complexe, les coefficients de diffusion λ_{th} et \mathcal{D}_k sont alors calculés en fonction des grandeurs filtrées \tilde{T} et \tilde{Y}_k .

- La modélisation des flux non résolus d'enthalpie et d'espèces (termes (3) et (7)) sera détaillée dans la section 3.1.3.3.
- En ce qui concerne les termes sources filtrés des équations d'espèces et d'enthalpie, $\bar{\omega}_T$ et $\bar{\omega}_k$, il est très difficile de définir un modèle universel, qui convient aussi bien pour les flammes prémélangées que pour les flammes de diffusion. Il est donc nécessaire pour chaque type de combustion de définir un modèle spécifique, basé sur la compréhension des phénomènes mis en jeu. La modélisation des termes (5) et (8) sera étudiée plus en détail dans la section 3.2.1.4.

3.1.3.2 Principaux modèles pour le transport de sous-maille

Il existe une grande variété de modèles de sous-maille, qui peuvent être classés en trois catégories.

- Modèles fonctionnels : La grande majorité des modèles reposent sur l'introduction d'une viscosité turbulente ν_t . Ces modèles sont dits fonctionnels puisqu'ils s'attachent uniquement à modéliser la fonction dissipative des échelles non résolues. Les modèles basés sur une viscosité turbulente présentent l'avantage d'apporter de la stabilité numérique au calcul.
- Modèles structurels : Il existe également des modèles de type structurel, qui se concentrent sur la structure des échelles à modéliser et non pas leur fonction, et suppose que leur structure est similaire à celle des plus petites échelles résolues [6]. L'inconvénient de ces modèles à similarité d'échelles est qu'ils prédisent moins bien les transferts d'énergie cinétique turbulente vers les petites échelles.
- Modèles mathématiques : On distingue enfin des modèles purement mathématiques qui reposent par exemple sur des méthodes de déconvolution. Le problème de ce type d'approche est qu'elle repose sur la connaissance de l'opérateur de filtrage, or dans la majorité des cas en LES le filtrage est implicite, il dépend du maillage, et le noyau de convolution n'est pas connu explicitement.

Les modèles les plus couramment utilisés sont ceux basés sur une viscosité turbulente. Deux de ces modèles, qui ont été utilisés dans le cadre de cette thèse, sont présentés dans les sections qui suivent.

Hypothèse de Boussinesq Tous les modèles de viscosité turbulente reposent sur l'hypothèse de Boussinesq [15]. De la même manière que dans l'équation de quantité de mouvement (Eq. 3.4), le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} s'écrit :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\mu\tilde{S}_{ij}^D, \quad (3.64)$$

le terme t_{ij} est modélisé en introduisant une viscosité turbulente μ_t et en utilisant une expression similaire :

$$t_{ij} = 2\mu_t\tilde{S}_{ij}^D. \quad (3.65)$$

L'équation de quantité de mouvement devient donc :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} 2(\mu + \mu_t)\tilde{S}_{ij}^D \quad (3.66)$$

Le rôle du modèle de sous-maille est donc de fournir une expression pour la viscosité turbulente μ_t .

Modèle de Smagorinsky Le modèle de Smagorinsky [194] est basé sur l'hypothèse selon laquelle, globalement dans le domaine de calcul, le taux de dissipation d'énergie cinétique correspond au taux de production au niveau de l'échelle de filtrage :

$$\mu_t = \bar{\rho}(C_s\Delta)^2|\tilde{\mathbf{S}}| \quad \text{avec} \quad |\tilde{\mathbf{S}}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad (3.67)$$

où Δ est la taille de filtre (*i.e.* taille du maillage), et C_s est la constante de Smagorinsky. Sa valeur dépend de la configuration, elle vaut $C_s \approx 0.2$ dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, et en pratique, sa valeur est fixée entre 0.1 et 0.2. La manière dont ce modèle est défini assure que la dissipation introduite, globalement, sur tout le domaine de calcul est correcte. Très populaire pour sa simplicité de mise en œuvre, il présente toutefois l'inconvénient d'être très dissipatif près des parois ou dans les zones de cisaillement.

Germano [71] est à l'origine d'un modèle de sous-maille issu du modèle de Smagorinsky, avec un calcul local et dynamique de la constante de Smagorinsky à partir de la connaissance des données résolues.

Un second filtre de largeur Δ' supérieure à Δ est utilisé, noté $\widetilde{(\cdot)}^{\Delta'}$.

Le tenseur de sous-maille $t_{ij} = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j})$ et le tenseur de sous-maille basé sur la vitesse filtrée deux fois $t'_{ij} = -\bar{\rho} \left(\widetilde{\widetilde{u_i u_j}^{\Delta'}} - \widetilde{\widetilde{u_i}^{\Delta'}} \widetilde{\widetilde{u_j}^{\Delta'}} \right)$ peuvent également s'écrire à partir du modèle de Smagorinsky de la manière suivante :

$$t_{ij} = 2\bar{\rho}(C_s \Delta)^2 |\widetilde{\mathbf{S}}| \widetilde{S}_{ij}^D \quad (3.68)$$

$$t'_{ij} = 2\bar{\rho}(C_s \Delta')^2 |\widetilde{\mathbf{S}}| \widetilde{S}_{ij}^{D'} \quad (3.69)$$

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

$$L_{ij} = t_{ij} - t'_{ij} = \bar{\rho} \left(\widetilde{\widetilde{u_i}^{\Delta'} \widetilde{u_j}^{\Delta'}} - \widetilde{\widetilde{u_i u_j}^{\Delta'}} \right). \quad (3.70)$$

En combinant les équations 3.68, 3.69 et 3.70, la constante de Smagorinsky peut donc être calculée à partir des champs de vitesses filtrés à deux échelles. Le modèle de Smagorinsky dynamique convient pour une large gamme d'applications, mais il est plus coûteux et complexe à mettre en œuvre, puisqu'il requiert notamment l'utilisation d'un opérateur de filtrage explicite.

Modèle de WALE L'autre modèle utilisé dans le cadre de cette thèse est le modèle de WALE (Wall-Adaptating Local Eddy-viscosity), développé par Nicoud et Ducros [142]. Il repose sur une autre formulation de la viscosité turbulente, plus adaptée pour décrire le comportement aux parois et la transition vers la turbulence :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}. \quad (3.71)$$

où C_w est une constante fixée à $C_w = 0.5$ et

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}(\widetilde{h}_{ij} + \widetilde{h}_{ji}) - \frac{1}{3}\widetilde{h}_{kk}\delta_{ij}, \quad \text{où} \quad \widetilde{h}_{ij} = \widetilde{g}_{ik}\widetilde{g}_{kj} \quad \text{et} \quad \widetilde{g}_{ij} = \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.72)$$

3.1.3.3 Fermeture du transport turbulent des espèces et de l'énergie

Les flux non résolus d'enthalpie et d'espèce sont modélisés à l'aide d'un terme de diffusion, et en fonction de propriétés de transport turbulent : viscosité turbulente, ν_t , nombre de Prandtl turbulent, Pr_t et nombre de Schmidt turbulent, Sc_t . L'hypothèse sous-jacente consiste à dire que, par analogie à l'approximation de Boussinesq pour l'énergie cinétique, les flux de chaleur et d'espèce entre les échelles résolues et les échelles non résolues sont alignés avec les gradients d'enthalpie et d'espèces.

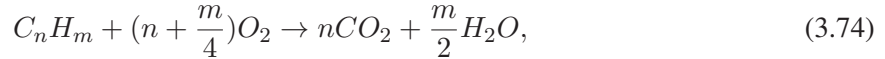
$$\widetilde{u_i h_s} - \widetilde{u_i} \widetilde{h_s} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{h_s}}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad \widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k} = \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} \quad (3.73)$$

3.2 Modélisation de la combustion

3.2.1 Introduction à la modélisation des écoulements réactifs

3.2.1.1 Calcul des termes sources

Dans le cas d'écoulements réactifs, les termes sources $\dot{\omega}_k$ dans l'équation 3.15 de conservation des espèces chimiques et $\dot{\omega}_T$ dans l'équation 3.21 de conservation de l'enthalpie sensible sont non-nuls et doivent être modélisés. Si l'on considère l'équation de bilan globale pour la combustion d'un hydrocarbure :



en réalité le processus est bien plus complexe, et fait intervenir des centaines de réactions et d'espèces intermédiaires. Plus le nombre d'éléments carbone du combustible est important, plus les combinaisons moléculaires possibles augmentent, et plus le mécanisme est complexe. L'étude de la cinétique chimique de ces réactions et le développement de schémas détaillés pour les décrire constitue un domaine de recherche vaste et complexe. Le mécanisme de la réaction se décompose en N_r réactions réversibles, faisant intervenir N_{sp} espèces :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{kj} \mathbb{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{kj} \mathbb{M}_k, \quad \text{avec } j = 1, N_r \quad (3.75)$$

où ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stœchiométriques de l'espèce k dans la réaction j et \mathbb{M}_k le symbole chimique de l'espèce k .

On appelle $\dot{\omega}_{kj}$ le taux de réaction de l'espèce k dans la réaction j . Le terme source de l'espèce k , $\dot{\omega}_k$ est la somme des taux de réaction de l'espèce k produits par les N_r réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{N_r} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{kj} Q_j. \quad (3.76)$$

Q_j est le taux d'avancement de la réaction j , et s'écrit

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}}. \quad (3.77)$$

K_{fj} et K_{rj} sont respectivement les constantes de réaction directe ("forward") et indirecte ("reverse") de la réaction j . La détermination de ces constantes constitue le cœur du problème pour modéliser la cinétique d'une réaction de combustion.

Les constantes K_{fj} sont souvent modélisées d'après la loi empirique d'Arrhenius :

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{T_{aj}}{T}\right), \quad (3.78)$$

où A_{ij} est la constante préexponentielle, β_j l'exposant de température et T_{aj} la température d'activation. Les constantes indirectes K_{rj} sont alors évaluées à partir d'une hypothèse d'équilibre :

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{K_{eq}} \quad \text{avec} \quad K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right), \quad (3.79)$$

où P_0 est la pression de référence, ΔH_j^0 et ΔS_j^0 correspondent respectivement aux variations d'enthalpie et d'entropie au cours de la réaction j . Le taux de dégagement de chaleur (terme source d'enthalpie) est ensuite déduit des taux de réactions des N_{sp} espèces et de l'enthalpie de formation de l'espèce k , $\Delta h_{f,k}^0$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (3.80)$$

3.2.1.2 Méthodes de réduction de la chimie

Un schéma cinétique se présente donc sous la forme d'une liste de réactions chimiques associées à leurs paramètres d'Arrhénius. L'implantation de tels schémas dans un code CFD suppose donc de transporter toutes les espèces, et de calculer leurs termes sources à partir de toutes les réactions intervenant dans le schéma, ce qui représente un coût CPU important. Par ailleurs, la combustion peut être associée à des temps caractéristiques très courts, ce qui limite le pas de temps et augmente encore le coût du calcul. Il existe plusieurs approches visant à diminuer le coût associé au calcul des termes sources chimiques dans les calculs réactifs.

Réduction de type chimique

La première approche consiste à réduire la complexité du mécanisme chimique en construisant un schéma cinétique ne tenant compte que des réactions et des espèces de plus grande importance. Toute la difficulté de l'exercice consiste à choisir les réactions et les espèces à prendre en compte dans le schéma réduit.

Parmi ces mécanismes de réduction de la chimie, se distinguent notamment l'Approximation des Etats Quasi-Stationnaires (AEQS) ou encore l'Approximation des Equilibres Partiels (AEP) [150], consistant à négliger les phénomènes rapides, ayant une durée de vie très courte à l'échelle de la réaction globale, ce qui permet de diminuer la raideur du système en diminuant la disparité des échelles de temps caractéristiques propre au schéma cinétique détaillé.

On peut également citer les méthodes de type Directed Relation Graph (DRG) introduites par Lu *et al.* [121], qui consistent, à partir d'un schéma cinétique détaillé, à cartographier les relations et les dépendances entre les espèces, et à ne garder dans le mécanisme squelettique que celles qui sont dépendantes d'un ensemble réduit d'espèces "importantes", identifiées par l'utilisateur. Pepiot *et al.* [148] proposent une amélioration de cette méthode : Directed Relation Graph with Error Propagation, qui porte une attention particulière à l'erreur introduite en enlevant un groupe d'espèces du mécanisme.

Réduction par paramétrisation

La deuxième approche consiste à calculer la chimie avec un schéma détaillé et à la stocker dans une bibliothèque en fonction d'un nombre réduit de paramètres. Seuls ces paramètres sont transportés dans le code, la composition, la température et les termes sources sont lus dans la table. Le principe de tabulation de la chimie repose sur la méthode ILDM, proposée par Maas et Pope [126] et basée sur l'analyse des différents temps caractéristiques de la chimie. Cette analyse a permis de mettre en évidence une variété attractive de faible dimension (ou ILDM pour Intrinsic Low-Dimensional Manifold) vers laquelle convergent toutes les solutions possibles du système. Seule la connaissance de cet attracteur est nécessaire pour connaître l'évolution du système.

Deux modèles de chimie tabulée reposant sur la méthode ILDM et l'hypothèse de flamelette ont été développés simultanément par Giquel *et al.* [74] (modèle FPI pour Flamelet Prolongation of ILDM),

et Van Oijen *et al.* [209] (modèle FGM pour Flamelet Generated Manifold). Ces deux modèles très similaires font l'hypothèse d'une analogie entre le front de flamme local et une flamme laminaire. Les réponses de flamme sont projetées dans un espace réduit : elles sont par exemple tabulées en fonction d'une variable de progrès et d'une fraction de mélange, qui seront définies dans la section 3.2.1.3.

Dans le cas d'une approche de type chimie tabulée, la construction de la table chimique doit être réalisée de manière cohérente avec le régime de combustion du problème étudié. C'est pourquoi les archétypes de la combustion sont présentés dans la section qui suit.

3.2.1.3 Généralités sur les régimes de combustion

Il existe deux régimes canoniques de combustion, qui sont indépendants de la nature turbulente ou non de l'écoulement. Il s'agit de la flamme de prémélange et de la flamme de diffusion (non prémélangée), qui diffèrent par le mélange (ou non) du combustible et du comburant avant la combustion. Entre ces deux configurations de flamme, on distingue également des régimes intermédiaires tels que les flammes partiellement prémélangées, ou encore la combustion stratifiée.

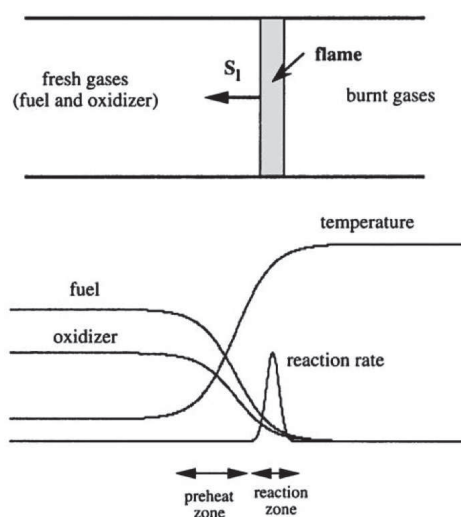


FIGURE 3.6 – Représentation schématique de la structure d'une flamme de prémélange monodimensionnelle [215]

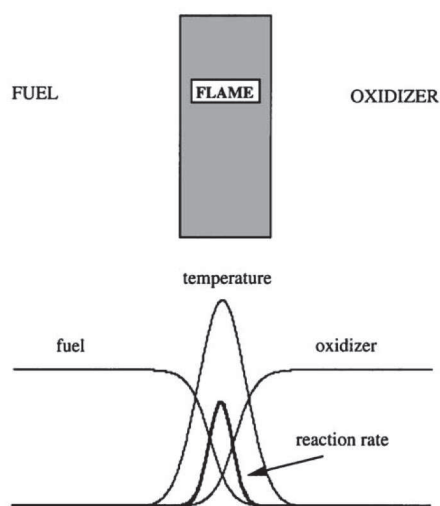


FIGURE 3.7 – Représentation schématique de la structure d'une flamme de diffusion monodimensionnelle [215]

Les flammes de prémélange

La flamme de prémélange mono-dimensionnelle, représentée Fig.3.6, est caractérisée par un mélange frais de réactifs, séparés des gaz brûlés par un front de flamme se propageant librement en direction des gaz frais à vitesse s_L . Le front de flamme, d'épaisseur δ_L se décompose en deux zones distinctes : la zone de préchauffage, dominée par les phénomènes de diffusion de chaleur et d'espèce, et la zone de réaction, caractérisée par un taux de dégagement de chaleur très important.

L'évolution des processus réactionnels à travers la flamme prémélangée est décrite par la variable d'avancement (ou de progrès), c . Cette grandeur normalisée, valant 0 dans les gaz frais et 1 dans les gaz brûlés peut être définie à partir de la température comme :

$$c = \frac{T - T^0}{T_{eq} - T^0}, \quad (3.81)$$

ou à partir d'une combinaison linéaire des fractions massiques des produits de combustion Y_c :

$$c = \frac{Y_c - Y_c^0}{Y_c^{eq} - Y_c^0}. \quad (3.82)$$

Y_c doit être monotone des gaz frais aux gaz brûlés. (Y_c^0, T^0) et (Y_c^{eq}, T^{eq}) désignent les valeurs de (Y_c, T) à l'état non-brûlé et à l'état d'équilibre.

Le mélange du carburant et de l'oxydant dans les gaz frais étant en théorie parfaitement homogène dans le cas prémélangé, la richesse s'écrit :

$$\phi = s \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (3.83)$$

où $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont respectivement les fractions massiques de carburant et d'oxydant initiales et s le rapport stœchiométrique défini comme :

$$s = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F}, \quad (3.84)$$

avec ν_O et ν_F , coefficients stœchiométriques de la réaction globale $\nu_F F + \nu_O O \rightarrow \nu_P P$. Cette richesse est égale à 1 dans le cas d'un mélange à la stœchiométrie. Le mélange est qualifié de pauvre pour $\phi < 1$ et de riche pour $\phi > 1$. Du fait de l'existence de gradients de température entre les gaz frais et les gaz brûlés, la flamme se propage par diffusion de proche en proche en direction des gaz frais. La vitesse de propagation du front de flamme laminaire, ainsi que son épaisseur sont des grandeurs fondamentales de la combustion prémélangée :

$$s_L(\phi) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_c dx}{\rho_u} \quad \text{et} \quad \delta_{L,th}(\phi) = \frac{T_b - T_u}{|\nabla T|_{max}} \quad \text{ou} \quad \delta_{L,c}(\phi) = \frac{1}{|\nabla c|_{max}} \quad (3.85)$$

Les flammes de diffusion

La flamme de diffusion, représentée Fig.3.7, est caractérisée par une injection séparée du fuel et de l'oxydant. La flamme se développe autour de la zone de diffusion et se stabilise au niveau de la ligne stœchiométrique. A l'inverse de la flamme de prémélangé, la flamme de diffusion ne bénéficie d'aucun mécanisme d'auto-propagation et est pilotée par le mélange. La grandeur qui permet de caractériser la flamme de diffusion est donc la fraction de mélange, définie comme :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \quad (3.86)$$

Il s'agit d'un scalaire passif qui rend compte du niveau de mélange du carburant et de l'oxydant. La fraction de mélange vaut 1 dans le carburant pur, et 0 coté oxydant. Un autre paramètre fondamental dans les flammes de diffusion est le taux de dissipation scalaire, qui rend compte du temps caractéristique de la diffusion dans le mélange :

$$\chi_Z = 2D |\nabla Z|^2, \quad (3.87)$$

un taux de dissipation scalaire important indiquant une diffusion rapide des espèces.

Vers la description d'un système de combustion réaliste, la flamme partiellement pré-mélangée

La caractérisation des régimes de combustion basée sur les deux régimes canoniques qui viennent d'être présentés est largement pratiquée dans la littérature, mais il paraît évident que les caractéristiques

propres à ces deux régimes sont trop restrictives pour s'appliquer à la majorité des flammes rencontrées dans les configurations académiques et industrielles. Le mélange des réactifs ne pouvant être que partiel, le concept de flamme partiellement prémélangée a donc été introduit par Peters [149], et s'impose pour certains auteurs comme un troisième régime de combustion canonique [10].

Indice de Takeno

Dans les configurations industrielles, le régime de combustion n'est jamais complètement apparenté à l'un des deux régimes de flamme canonique, et le mode de combustion peut varier en espace selon la zone du brûleur qui est considérée. L'indice de Takeno, proposé par Yamashita *et al.* [226] est couramment utilisé pour déterminer la nature du régime de combustion. Il est défini comme le produit scalaire des gradients des fractions massiques de fuel Y_F et d'oxydant Y_O :

$$\mathcal{T} = \frac{\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O}{|\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O|}. \quad (3.88)$$

La normalisation permet d'obtenir un indicateur qui vaut 1 dans les zones où la combustion se fait en régime de prémélange, et -1 en régime de diffusion.

3.2.1.4 Modélisation de l'interaction chimie - turbulence

L'autre problème majeur associé à la combustion turbulente réside dans la fermeture des termes non résolus dans les équations de conservation (détaillés dans la section 3.1.3.1). Physiquement, l'apparition de termes non résolus traduit le fait que l'épaisseur du front de flamme est dans la majorité des cas plus faible que la taille des cellules du maillage, la combustion a donc lieu en sous-maille. L'utilisation d'un modèle de combustion turbulente est donc nécessaire pour prendre en compte les effets de sous-maille. Quelques approches pour la modélisation de sous-maille seront brièvement présentées ici, sans objectif d'exhaustivité ni volonté de les décrire en détail. Pour plus de précisions sur le sujet, un état de l'art complet des modèles pour la combustion turbulente a été établi par Veynante et Vervisch [215] ou encore par Pitsch [154].

Les modèles géométriques

L'approche géométrique consiste à considérer le front de flamme comme une surface géométrique fine et mobile. Plusieurs modèles découlent de cette approche et sont essentiellement destinés à la modélisation des flammes de prémélange du fait de l'hypothèse de l'existence d'une interface clairement définie entre gaz frais et gaz brûlés. On distingue notamment des modèles qui supposent que le front de flamme s'apparente à un niveau de potentiel (approche Levelset ou G-Equation) et que la distance à celle-ci permet de reconstruire les propriétés locales du fluide [223, 153]. Il existe également des modèles à densité de surface de flamme [12] qui consistent à écrire le taux de réaction comme le produit du taux de réaction par unité de surface de flamme et d'une densité de surface de flamme, qui peut être transportée ou calculée de manière algébrique. Un autre exemple de modèle géométrique est l'approche de flamme épaissie, qui sera décrite plus en détail dans la Section 3.2.2.2.

Les modèles statistiques

Les modèles basés sur l'approche statistique s'appuient sur une description statistique du mélange à l'aide d'une fonction de densité de probabilité (PDF). Initialement, cette approche fut développée pour

des flammes non prémélangées puis étendue à la combustion prémélangée. Le taux de réaction filtré s'écrit :

$$\bar{\omega}_k(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \omega_k(Z) \mathcal{P}(Z : \mathbf{x}, t) dZ. \quad (3.89)$$

Toute la difficulté de cette approche réside dans la détermination de la PDF $\mathcal{P}(Z : \mathbf{x}, t)$, qui peut être transportée [206, 225] (résolue en chaque point de l'espace et du temps) ou bien présumée [152, 212].

Les modèles algébriques basés sur le mélange turbulent

L'approche algébrique, particulièrement adaptée aux flammes de diffusion, est basée sur l'hypothèse de nombre de Damköhler Da très élevé, le taux de réaction étant alors piloté par le mélange turbulent. Dans les modèles basés sur cette approche, le taux de réaction est donc exprimé en fonction du taux de dissipation scalaire χ_Z [149].

3.2.2 Modélisation de la combustion du kérosène

Dans le cadre de cette thèse, le problème de la modélisation de la chimie est uniquement appliqué à la combustion du kérosène dans les brûleurs aéronautiques. Cette section s'attache donc à décrire plus en détail les différentes approches utilisées ici pour la réduction de la chimie du kérosène et le couplage avec la turbulence.

3.2.2.1 Choix d'un surrogate pour le kérosène

La construction d'un mécanisme détaillé a pour but de rendre compte de tous les phénomènes physico-chimiques survenant au cours de la réaction. La complexité de ces mécanismes, qui font intervenir des centaines d'espèces et des milliers de réactions, est d'autant plus importante que l'hydrocarbure considéré est lourd.

Les moteurs aéronautiques utilisent du kérosène, carburant issu du raffinage du pétrole et constitué d'un mélange d'hydrocarbures. La composition de ce mélange peut varier en fonction de l'origine du pétrole brut ou du processus de raffinement. Les carburants doivent remplir un certain nombre de spécifications internationales, et il existe une grande variété de mélanges susceptibles de remplir ces conditions.

La composition du kérosène étant mal définie, il doit donc être modélisé par une ou plusieurs espèces de substitution, ou surrogate, dont la composition, la masse molaire et les propriétés sont similaires aux propriétés globales du kérosène. La recherche des espèces de substitution les plus appropriées a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche [37],[88]. Le surrogate le plus simple pour le kérosène est le n-décane, qui rentre dans les spécifications du Jet A1. Le surrogate choisi ici correspond au mélange utilisé par Luche dans sa thèse [123], issu des travaux de Dagaut [41]. Il s'agit d'un mélange composé, en pourcentages volumiques, de 74% de n-décane $C_{10}H_{22}$, 15% de n-propylcyclohexane C_9H_{12} , et 11% de n-propylbenzène C_9H_{18} , détaillé dans la Table 3.1.

Les propriétés thermodynamiques du kérosène peuvent être calculées à partir des propriétés des trois corps purs donnés dans la Table 3.1. Les propriétés à l'état de référence (C_p , h^0 , s^0) sont notamment décrits par la paramétrisation NASA :

$$\frac{C_p^0}{\mathcal{R}}(T) = \alpha_0 + \alpha_1 T + \alpha_2 T^2 + \alpha_3 T^3 + \alpha_4 T^4 \quad (3.90)$$

$$\frac{h^0}{\mathcal{R}T}(T) = \alpha_0 + \frac{\alpha_1}{2} T + \frac{\alpha_2}{3} T^2 + \frac{\alpha_3}{4} T^3 + \frac{\alpha_4}{5} T^4 + \frac{\alpha_5}{T} \quad (3.91)$$

Composé	Fraction massique [-]	Masse molaire [g/mol]	Fraction molaire [-]
C ₁₀ H ₂₂	0.767	142.284	0.7396
C ₉ H ₁₂	0.132	120.194	0.1507
C ₉ H ₁₈	0.101	126.241	0.1097
C _{9.73957} H _{20.0542}	1.0	137.195	1.0

TABLE 3.1 – Composition du surrogate du kérosène proposé par Luche [123].

$$\frac{s^0}{\mathcal{R}}(T) = \alpha_0 \ln(T) + \alpha_1 T + \frac{\alpha_2}{2} T^2 + \frac{\alpha_3}{3} T^3 + \frac{\alpha_4}{4} T^4 + \alpha_6 \quad (3.92)$$

Les coefficients sont calculés comme une moyenne pondérée par les fractions massiques des trois constituants, et sont détaillés dans la Table 3.3. Les propriétés du kérosène sous forme liquide sont évaluées à partir des corrélations établies par Harstad et Bellan [82], et les propriétés de transport sont approchées par celles du n-décane dans l'air [173] (voir Table 3.2).

Masse molaire	<i>W</i>			
	[g/mol]			
	137.195			
Propriétés du liquide	<i>T_{boil}</i>	<i>C_p</i>	ρ_l	<i>L_v</i>
	[K]	[J/K/kg]	[kg/m ³]	[J/kg]
	445.1	2003	781	2.89×10^5
Propriétés de transport	<i>Pr</i>	<i>Sc</i>	μ	
	[-]	[-]	[kg/m/s]	
	0.70995	2.2763	$\mu = \mu_0 (T/T_0)^\beta$, avec $\mu_0 = 2.554 \times 10^{-5}$ kg/m/s, $T_0 = 463\text{K}$ et $\beta = 0.71016$	

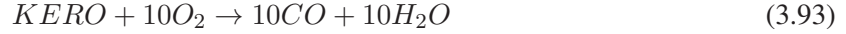
TABLE 3.2 – Propriétés liquides et gazeuses de l'espèce kérosène.

Coefficients	$T \in [300; 1000]\text{K}$	$T \in [1000; 5000]\text{K}$
α_0	-4.15×10^0	2.20×10^1
α_1	1.28×10^{-1}	5.61×10^{-2}
α_2	-1.08×10^{-4}	-2.09×10^{-5}
α_3	6.53×10^{-8}	3.57×10^{-9}
α_4	2.08×10^{-11}	-2.3×10^{-13}
α_5	-2.83×10^4	-3.61×10^4
α_6	5.09×10^1	-8.60×10^1

TABLE 3.3 – Propriétés thermodynamiques du surrogate du kérosène.

3.2.2.2 Chimie réduite : le schéma BFER couplé à une approche TFLES

La première approche pour la modélisation de la combustion du kérosène, utilisée dans le cadre des simulations diphasiques avec évaporation du brûleur MERCATO qui seront présentées dans le Chapitre 5, repose sur le schéma cinétique réduit 2S_KERO_BFER, développé par Franzelli *et al.* [63]. Il s'agit d'un schéma à 6 espèces et à 2 étapes : oxydation du kérosène, et équilibre $CO - CO_2$. Il est donc basé sur les deux réactions suivantes :



Afin de prédire correctement la vitesse de flamme dans les zones riches, une correction est utilisée pour corriger les constantes pré-exponentielles en fonction de la richesse. La Fig. 3.8 compare les vitesses de flamme obtenues sur des flammes laminaires 1D avec le schéma réduit 2S_KERO_BFER et les mécanismes détaillés de Luche [123] (91 espèces, 991 réactions), et de Dagaut [40] (209 espèces, 1673 réactions), en fonction de la richesse, pour différentes températures de gaz frais.

Ce schéma réduit prédit de manière satisfaisante la vitesse de flamme sur une large gamme de température de gaz frais. En ce qui concerne la température des gaz brûlés, le schéma est prédictif pour des richesses faibles, mais montre quelques écarts avec les schémas détaillés pour des richesses $\phi > 1.4$, du fait, entre autres, de la non-prise en compte de espèces H_2 et H .

Dans les cas où une approche de type chimie réduite est retenue, les calculs ont été réalisés avec un modèle de combustion turbulente de type flamme épaissie. En effet, les travaux de thèse de Franzelli [65] ont montré de bons résultats avec ces deux modèles dans des simulations turbulentes complexes et notamment sur le brûleur PRECCINSTA.

Butler et O'Rourke [22] ont proposé un modèle permettant de résoudre le front de flamme sur un maillage dont la taille caractéristique est supérieure à l'épaisseur de flamme. On rappelle que dans une flamme laminaire, l'épaisseur et la vitesse s'expriment de la manière suivante [223] :

$$s_L = \sqrt{\dot{\omega}_T \mathcal{D}_{th}} \quad \text{et} \quad \delta_L = \frac{\mathcal{D}_{th}}{s_L} = \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{th}}{\dot{\omega}_T}}, \quad (3.95)$$

où $\mathcal{D}_{th} = \lambda_{th}/\rho C_p$ est la diffusivité thermique et $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur.

Ce modèle, dit de flamme épaissie ou TFLES pour Thickened Flame approach for LES, consiste à diviser les taux de réaction et multiplier la diffusion thermique et des espèces par un facteur \mathcal{F} :

$$\bar{\omega}_k = \frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}} \quad \text{et} \quad \bar{\omega}_T = \frac{\dot{\omega}_T}{\mathcal{F}}, \quad (3.96)$$

$$\mathcal{D}_k \rightarrow \mathcal{F}\mathcal{D}_k \quad \text{et} \quad \mathcal{D}_{th} \rightarrow \mathcal{F}\mathcal{D}_{th}. \quad (3.97)$$

De cette manière, la vitesse de flamme n'est pas affectée par le changement de variable et l'épaisseur de flamme laminaire est multipliée par \mathcal{F} , ce qui permet de résoudre le front de flamme sur le maillage.

Cependant, l'opération d'épaississement artificiel de la flamme modifie l'interaction flamme - turbulence. En effet, le nombre de Damköhler, qui compare le temps caractéristique de la turbulence τ_t au temps chimique τ_c , et s'écrit :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t s_L}{u' \delta_L}, \quad (3.98)$$

est diminué d'un facteur \mathcal{F} . La flamme épaissie est moins sensible à l'activité turbulente, et le plissement du front de flamme dû à la turbulence est sous-estimé. L'effet de la turbulence sur le plissement a été

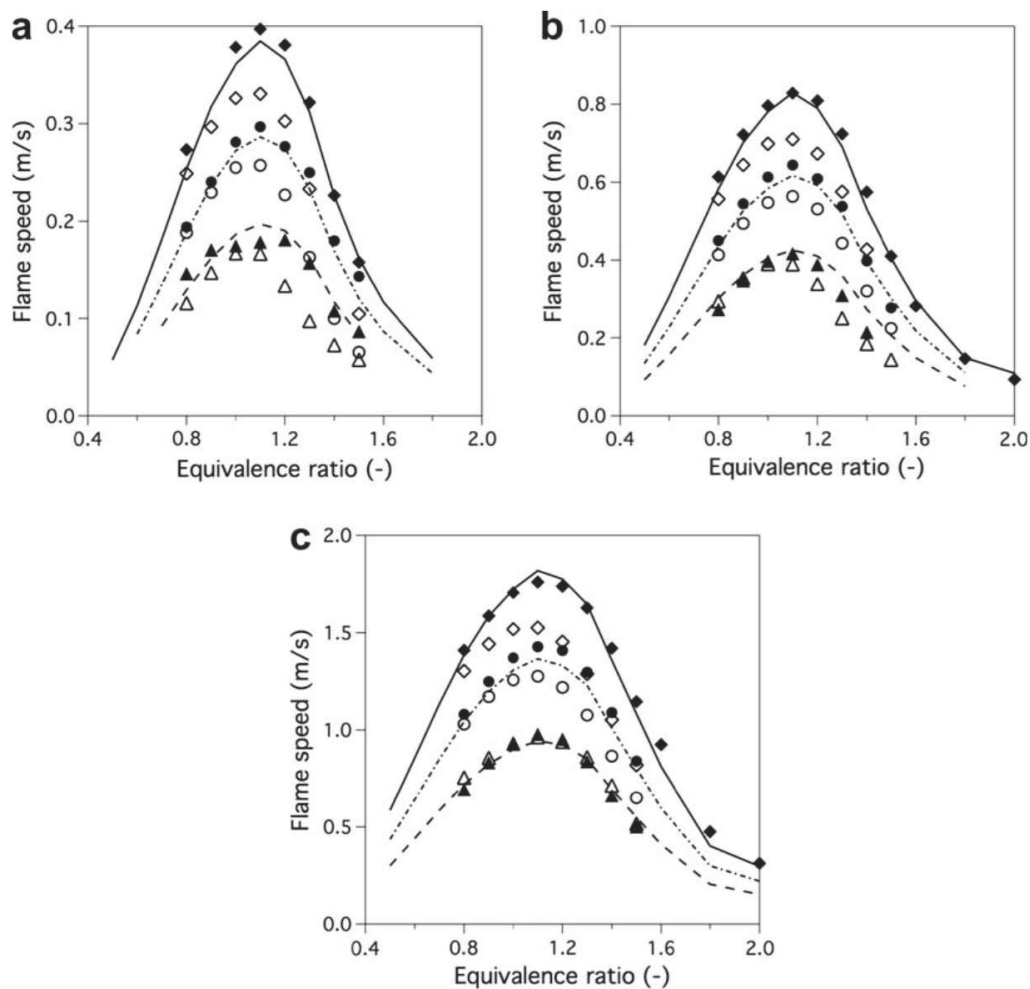


FIGURE 3.8 – Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse, pour des températures de gaz frais $T_f = 300K$ (a), $T_f = 473K$ (b) et $T_f = 700K$ (c). Le schéma BFER (lignes) est comparé aux mécanismes détaillés de Luche (symboles noir), et de Dagaut (symboles blanc) [63].

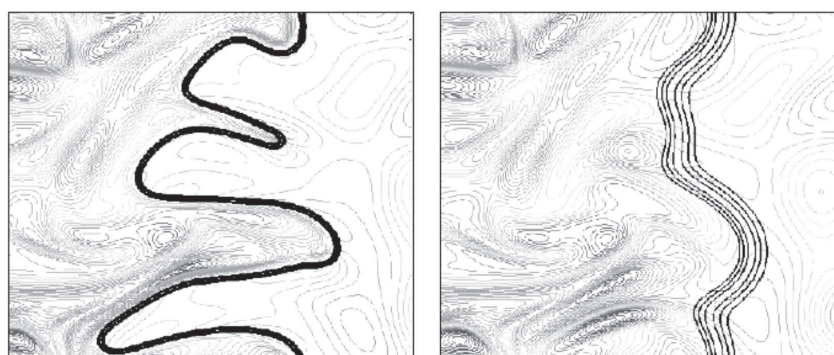


FIGURE 3.9 – DNS de l'interaction flamme turbulence : flamme non épaissie (gauche) et flamme épaissie d'un facteur $\mathcal{F} = 5$; La flamme artificiellement épaissie est clairement moins plissée par la turbulence du fait de la modification de l'interaction flamme-turbulence dûe au facteur d'épaississement [155].

étudié en détail à partir de calculs DNS, par Angelberger *et al.* [5] et Colin *et al.* [36], et est illustré sur la Fig. 3.9. Une fonction d'efficacité \mathcal{E} , correspondant à un plissement de sous-maille est donc introduite pour modéliser l'interaction de la turbulence sur le front de flamme [36, 30] :

$$\bar{\dot{\omega}}_k = \frac{\mathcal{E}\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}} \quad \text{et} \quad \bar{\dot{\omega}}_T = \frac{\mathcal{E}\dot{\omega}_T}{\mathcal{F}}. \quad (3.99)$$

$$\mathcal{D}_k \rightarrow \mathcal{E}\mathcal{F}\mathcal{D}_k \quad \text{et} \quad \mathcal{D}_{th} \rightarrow \mathcal{E}\mathcal{F}\mathcal{D}_{th}. \quad (3.100)$$

La mise en œuvre du modèle TFLES peut donc être résumée de la manière suivante :

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

L'épaississement étant appliqué de manière uniforme sur tout le domaine, la diffusion est accélérée partout, même dans les zones non réactives où l'épaississement n'est pas nécessaire. Ce modèle a initialement été développé pour des flammes prémélangées, et doit être modifié pour pouvoir être utilisé dans des cas partiellement prémélangés pour ne pas affecter la diffusion dans les zones non réactives où a lieu le mélange. C'est dans ce but que Légier *et al.* [117] proposent une version dynamique du modèle, qui consiste à n'appliquer le facteur d'épaississement que dans les zones réactives. Le facteur \mathcal{F} n'est donc plus constant en espace, mais varie en temps et en espace de 1 (pas d'épaississement) à \mathcal{F}_{max} :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{max} - 1)\mathcal{S}, \quad (3.101)$$

où \mathcal{S} est un capteur de flamme dont la valeur vaut 0 dans les zones non réactives et 1 dans la flamme.

On peut trouver différentes formulations du capteur de flamme dans la littérature, notamment en fonction de l'approche de chimie utilisée. Une description plus détaillée des capteurs de flamme proposés dans la littérature est disponible dans la thèse de Bénard [24].

Le capteur utilisé dans les calculs présentés ici est basé sur les termes sources de CO_2 , CO et H_2O :

$$\begin{cases} \mathcal{S} = 1 & \text{si } \dot{\omega} > \dot{\omega}_s \\ \mathcal{S} = 0 & \text{si } \dot{\omega} < \dot{\omega}_s \end{cases} \quad \text{avec } \dot{\omega} = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO} + \dot{\omega}_{H_2O}, \quad (3.102)$$

où $\dot{\omega}_s$ est une valeur seuil définie en pratique comme un pourcentage de la valeur maximale de $\dot{\omega}$ rencontrée dans une flamme 1D. Ce capteur convient bien pour la chimie multi-espèces, et est très similaire à celui proposé dans les travaux de thèse de Franzelli [65].

Différentes fonctions d'efficacité peuvent être trouvées dans la littérature. Colin [36] propose une fonction basée sur le rapport entre le facteur de plissement Ξ (i.e. surface de flamme divisée par sa projection dans la direction de propagation) de la flamme originelle d'épaisseur δ_0^L sur l'épaisseur de flamme épaissie $\delta_0^{\mathcal{F}}$:

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi(\delta_0^L)}{\Xi(\delta_0^{\mathcal{F}})} = \frac{1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta}{\delta_0^L}, \frac{u'}{s_0^L}\right) \frac{u'}{s_0^L}}{1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta}{\delta_0^{\mathcal{F}}}, \frac{u'}{s_0^L}\right) \frac{u'}{s_0^L}}, \quad (3.103)$$

où α est un paramètre, Γ une fonction du modèle, et Δ la taille de filtre LES.

Le modèle en loi de puissance proposé par Charlette [30] décrit la surface de flamme non-résolue en fonction d'échelles de coupure interne et externe représentant l'étendue d'échelles de longueurs nécessitant une résolution de sous-maille. Ce modèle sera utilisé ici, en prenant en compte la correction proposée par Wang et al [220] :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E} \left(\frac{\Delta}{\delta_0^L}, \frac{u'}{s_0^L} \right) = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_0^L} - 1, \Gamma \frac{u'}{s_0^L} \right] \right)^\gamma, \quad (3.104)$$

où γ est une constante du modèle. Une estimation dynamique de l'exposant γ peut permettre d'améliorer la précision du modèle [181].

3.2.2.3 Chimie tabulée : modèle PCM-FPI

La deuxième approche utilisée dans le cadre des calculs présentés dans cette thèse repose sur la tabulation de la chimie, brièvement introduite précédemment. Cette section s'attache à décrire plus en détail le modèle FPI, et son extension vers la combustion turbulente.

Maas et Pope [126] proposent une analyse dynamique des équations chimiques afin de rechercher l'existence d'un sous-espace attracteur, (ILDM pour Intrinsic Low Dimensional Manifold), vers lequel les fractions massiques $Y_k(t)$ vont converger, comme illustré sur la Fig. 3.10.

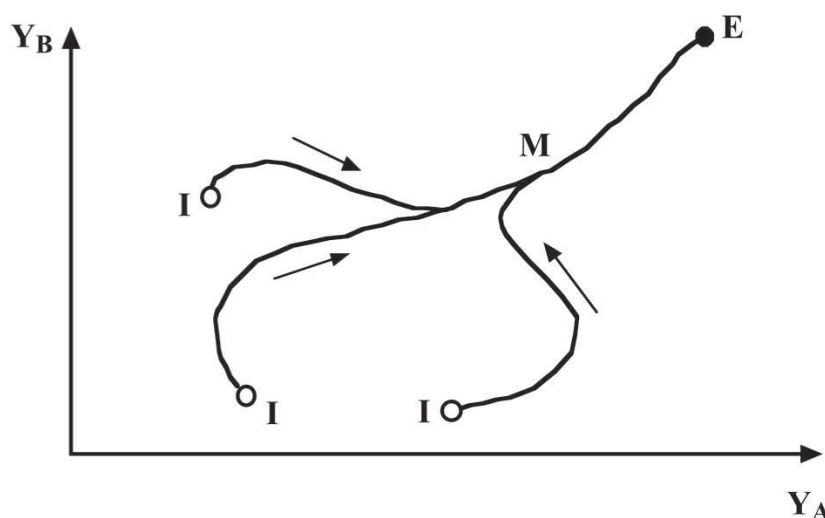


FIGURE 3.10 – Convergence des trajectoires dans l'espace des fractions massique $\{Y_A, Y_B\}$ vers l'attracteur de faible dimension (courbe ME), puis vers l'équilibre E [155].

Les fractions massiques faisant partie de ce sous-espace attracteur évoluent selon des trajectoires qui convergent plus ou moins vite. La vitesse de convergence est liée au temps caractéristique du mode associé à chaque trajectoire, qui est en fait l'inverse des valeurs propres de la matrice jacobienne du système réactionnel. Il s'agit alors de décrire l'ILDM dans l'espace des compositions (richesse, température). Une fois ce sous-espace déterminé, les fractions massiques $Y_k(t)$ peuvent être connues en fonction des paramètres qui décrivent la variété, et qui peuvent servir d'entrée pour la tabulation. Une base de données contenant toute l'information chimique du schéma cinétique est construite en fonction de quelques variables nécessaires à la description du sous-espace attracteur. Celui-ci ne couvrant pas tout l'espace des phases, une prolongation linéaire est effectuée, ce qui constitue une source d'erreur et une limitation du modèle.

Le formalisme mathématique de la méthode ILDM fournit une résolution précise de la cinétique chimique. Cependant, la méthode s'appuie sur une hypothèse de relaxation faible des temps chimiques situés hors de l'ILDM. Ce manque d'information conduit à une mauvaise description des zones de basses température, zone de la prolongation linéaire. Les phénomènes d'auto-inflammation ou de propagation de flamme (dans le cas des flammes de prémélange) ne peuvent donc pas être prédits par la méthode ILDM.

Gicquel [73] propose donc de prolonger la méthode ILDM avec des calculs de flammes laminaires 1D prémélangées qui utilisent des cinétiques détaillées, c'est la méthode FPI (Flamelet Prolongation of ILDM). La méthode FGM (Flamelet Generated Manifold) développée par Oijien *et al.* [209] repose également sur ce concept. Gicquel *et al.* [74] ont montré que ces méthodes fournissent de meilleurs résultats aux basses températures tout en conservant la précision de la méthode ILDM pour les hautes températures. Au-delà de la comparaison avec l'ILDM, les méthodes FPI et FGM constituent un exemple de méthode de tabulation de la chimie. Elles s'appuient en effet sur l'approche des flammelettes, concept introduit par Bradley *et al.* en 1988 [17], pour lequel une projection des variables thermo-chimiques de la flamme est réalisée sur un espace réduit, ce dernier étant constitué, par exemple, d'une variable d'avancement basée sur une combinaison de fractions massiques d'espèces chimiques. En d'autres termes, la structure détaillée d'une flamme de prémélange 1D, résolue dans l'espace physique au moyen de codes de calcul de type CHEMKIN, est stockée dans une table dont les paramètres d'entrée, Ψ_l , permettent une description de la flamme tabulée. Dans le cas où une seule flamme de prémélange est stockée, l'avancement réactionnel est suffisant pour décrire l'évolution de la composition depuis les gaz frais jusqu'aux gaz brûlés. Par exemple, on pourra prendre $\Psi_l = \{Y_c\} = \{Y_{CO} + Y_{CO_2}\}$ dans le cas d'une combustion méthane-air. Si plusieurs flammelettes sont stockées à différentes richesses, une dimension est ajoutée à la table pour tenir compte du mélange air-combustible, i.e. $\Psi_l = \{Y_c, Z\}$.

ILDM est une méthode qui dérive d'une étude mathématique des valeurs propres du système chimique, FPI adopte une approche plus pragmatique et assimile le front de flamme à une flamme laminaire 1D. Sa structure ne dépend donc plus des conditions locales, elle peut être calculée *a priori* et correspond à une réponse de flamme d'un problème canonique (flamme de prémélange ou flamme de diffusion). Plusieurs variables "physiques" (Ψ_l) définissent donc la bibliothèque de flammelettes et servent de coordonnées à celle-ci. Il est possible de considérer d'autres phénomènes, comme la dépendance en pression ou les pertes thermiques, et d'ajouter autant de coordonnées que nécessaires à table. La tabulation ne se limite pas à l'étude des flammes de prémélange et peut être appliquée à un large éventail de configurations :

- Les flammes de diffusion, dans ce cas les réponses de flamme sont tabulées en fonction de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire.
- La combustion partiellement prémélangée, tabulée en fonction d'une variable d'avancement et d'une fraction de mélange.

Dans le formalisme FPI, les informations thermo-chimiques sont stockées selon les valeurs de la fraction de mélange, Z , et de la variable d'avancement, c . L'extension de FPI au formalisme LES est faite ici avec la méthode PCM, qui permet de prendre en compte les effets de sous-maille caractérisant les interactions chimie-turbulence, via les ségrégations (moments d'ordre deux) des grandeurs de contrôle Z et c , respectivement S_Z et S_c . Le principe de la tabulation de la chimie est récapitulé sur la Fig. 3.11

Cette méthode appartient à l'approche statistique, les termes sources sont modélisés à l'aide de fonction densité de probabilité (PDF) :

$$\bar{\omega}_k = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_k \mathcal{P}(Z, c) dZ dc. \quad (3.105)$$

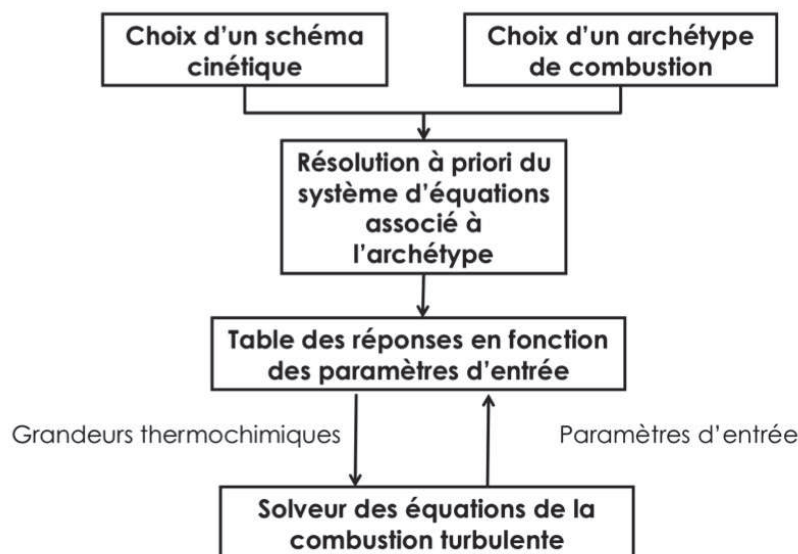


FIGURE 3.11 – Principe de la résolution de la chimie par la méthode de la tabulation, schéma issu de la thèse de Lodier [120]

où $\mathcal{P}(Z, c)$ est la densité de probabilité jointe de Z et c . Les travaux de Vervisch [212], basés sur l'analyse de données DNS montrent que la PDF jointe peut être décomposée en faisant l'hypothèse de décorrélation des distributions de Z et c :

$$\mathcal{P}(Z, c) = \mathcal{P}(c|Z)\mathcal{P}(Z) \approx \mathcal{P}(c)\mathcal{P}(Z). \quad (3.106)$$

Le terme source s'écrit donc en fonction de deux PDF indépendantes dont la forme doit être présumée.

Parmi les nombreux exemples de PDF présumées dans la littérature, la plus connue est la β -PDF, qui s'applique sur des variables φ normalisées :

$$\mathcal{P}(\varphi) = \beta_{\varphi, \varphi'^2} = \frac{\varphi^{a-1}(1-\varphi)^{b-1}}{\int_0^1 ((\varphi^* - 1)^{a-1}(1-\varphi^*)^{b-1} d\varphi^*)}, \quad (3.107)$$

où a et b sont deux coefficients déterminés d'après les deux premiers moments :

$$a = \tilde{\varphi} \left(\frac{1}{S_\varphi} - 1 \right) \quad \text{et} \quad b = a \left(\frac{1}{\tilde{\varphi}} - 1 \right). \quad (3.108)$$

Le terme S_φ désigne la ségrégation de φ , et correspond à la variance normalisée :

$$S_\varphi = \frac{\widetilde{\varphi'^2}}{\tilde{\varphi}(1-\tilde{\varphi})}. \quad (3.109)$$

L'avantage des β -PDF est que suivant les valeurs de la ségrégation, elles prennent des formes différentes, illustrées sur la Fig. 3.12.

L'estimation de la PDF et donc du terme source filtré nécessite de connaître la variance de Z et c . Plusieurs modèles sont proposés dans la littérature : elle peut être modélisée par une dépendance linéaire [211] ou quadratique [214] au gradient résolu $\partial\varphi/\partial x_j$, ou bien transportée.

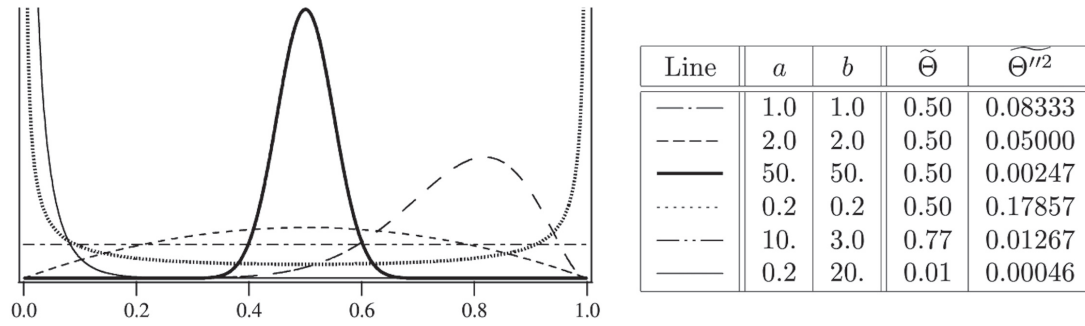


FIGURE 3.12 – Formes de la β -PDF appliquée à la température normalisée Θ , pour plusieurs valeurs de a et b [155].

Le terme source filtré est donc une fonction de quatre paramètres :

$$\bar{\omega}_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \tilde{Z}''^2, \tilde{c}''^2) = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_k(Z, c) \beta_{\tilde{Z}, S_Z}(Z) \beta_{\tilde{c}, S_c}(c) dZ dc, \quad (3.110)$$

et est stocké dans une table non plus à deux mais à quatre entrées \tilde{Z} , \tilde{c} , \tilde{Z}''^2 et \tilde{c}''^2 .

3.3 Approche numérique pour les écoulements diphasiques

3.3.1 Introduction à la modélisation des écoulements particuliers

3.3.1.1 Les écoulements particuliers

Les écoulements particuliers sont constitués d'une phase porteuse (qui peut être gazeuse ou liquide), et d'une phase dispersée (particules liquides ou solides, ou bien bulles de gaz). Ces écoulements, utilisés dans de nombreuses applications industrielles, peuvent être classifiés en fonction de la fraction volumique de particules dans le domaine fluide et du nombre de Stokes des particules, défini comme :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_g}, \quad (3.111)$$

où τ_p est le temps de relaxation des particules, et τ_g le temps caractéristique de l'écoulement gazeux. Cette classification, proposée par Elghobashi [47], est résumée Fig. 3.13.

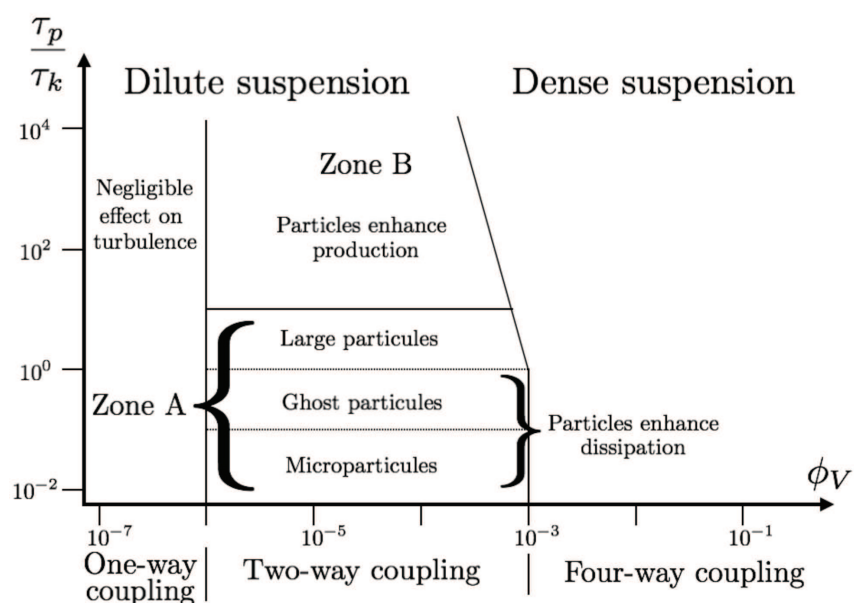


FIGURE 3.13 – Classification des écoulements particuliers selon Elghobashi [47], image tirée de la thèse de Farcy [54]

Trois types d'écoulements, décrits ci-dessous, peuvent être distingués dans cette classification, selon la fraction volumique de particules.

Écoulements peu chargés

Dans le cas des écoulements peu chargés en particules ($\phi_v < 10^{-6}$), l'impact de l'écoulement sur les particules est important, mais l'influence des particules sur le gaz est négligeable. Seules les forces gazeuses sur les particules sont modélisées, d'où la dénomination de one-way coupling.

Suspensions diluées

Lorsque la fraction volumique de particules augmente, l'influence des particules sur le fluide ne peut plus être négligée, la rétroaction des particules sur la quantité de mouvement doit être prise en compte (two-way coupling). Ce régime est divisé en deux zones :

- Pour des nombre de Stokes élevés, les particules génèrent de la turbulence
- Pour des nombre de Stokes inférieurs à 1, les particules favorisent la dissipation de la turbulence

Écoulements denses

Pour $\phi_v > 10^{-3}$, l'écoulement est très chargé, les particules vont donc avoir tendance à se rencontrer fréquemment, et à échanger de la quantité de mouvement. Les interactions particules-particules doivent donc être prises en compte, c'est le four-way coupling

Dans le cas des chambres de combustion aéronautiques, l'écoulement particulaire considéré est le spray liquide généré par l'atomisation du jet de carburant à la sortie de l'injecteur. Le carburant est injecté sous forme liquide à haute pression. La nappe liquide est déstabilisée et se désintègre en filaments et en amas, jusqu'à former un brouillard de gouttes de l'ordre de 1 à 100 microns, qui s'évaporent ensuite pour alimenter la flamme en carburant gazeux (Fig. 3.14). Hormis la zone proche de l'injection liquide, où a lieu l'atomisation, et dans laquelle on retrouve également des phénomènes de coalescence et d'atomisation secondaire, ce type d'écoulement se situe majoritairement dans la domaine du two-way coupling.

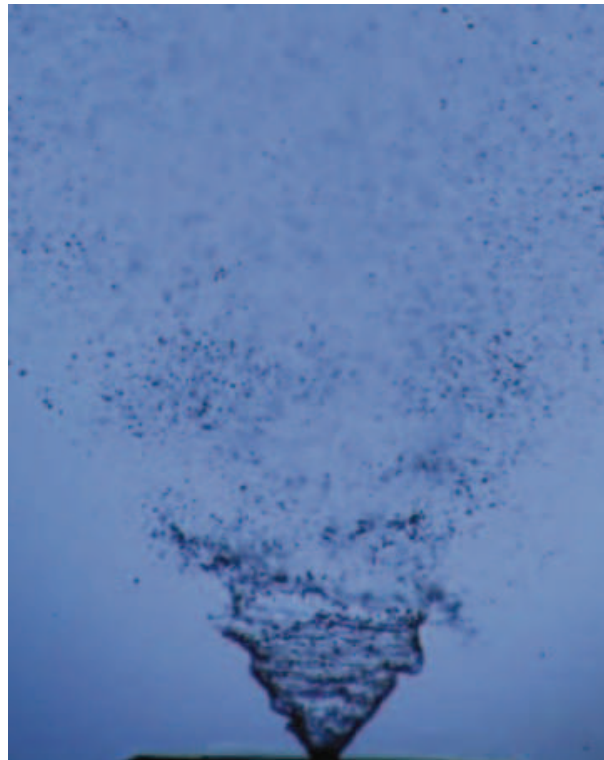


FIGURE 3.14 – Photographie du spray de carburant SAFIR, issue des travaux de Cessou [27]

3.3.1.2 Approches pour la modélisation des écoulements diphasiques

La résolution exacte de l'écoulement diphasique consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes et/ou des milieux continus pour chacune des deux phases, et coupler les deux à l'aide de relations de saut à l'interface. Des méthodes numériques existent pour gérer le suivi d'interface et les échanges de masse, énergie et quantité de mouvement dans ce type d'approche : méthode VOF (pour Volume of

Fluid) ou Levelset [176, 186, 131, 43], mais nécessitent une résolution spatiale suffisante pour capturer la position de l'interface. Cette méthode peut donc être envisagée pour des applications spécifiques, dans lesquelles les interfaces ont un intérêt particulier ou dans des configurations académiques ne comportant que quelques gouttes. Cependant, la résolution de l'ensemble de l'écoulement dans le cas d'un brouillard de gouttes dans une configuration de type chambre de combustion aéronautique engendrerait un coût de calcul prohibitif.

Des méthodes adaptées aux écoulements dispersés ont donc été développées. Etant admis que la phase porteuse est résolue avec un solveur Eulerien, suivant les méthodes présentées dans la Section 3.1, il existe deux grands type d'approches pour traiter la phase dispersée et la coupler à la phase porteuse : les méthodes Lagrangiennes, et les méthodes Eulériennes.

Description Eulerienne

L'approche Euler-Euler consiste à considérer la phase dispersée comme un milieu continu semblable à un fluide, dont les propriétés correspondent aux propriétés moyennes du brouillard de gouttes. Les caractéristiques de la phase dispersée sont donc transportées sur le maillage eulérien, à l'aide d'un jeu d'équations très similaires à celles utilisées pour la phase porteuse. On distingue deux formalismes, détaillés dans la thèse de Kaufmann [101], selon le type de moyenne utilisé : volumique ou statistique. Le filtrage volumique [93] conduit à un jeu d'équations de transport très similaires aux équations de Navier-Stokes, et faisant intervenir une grandeur ϕ_v , qui correspond à la fraction volumique de la phase liquide. Les modèles Eulériens statistiques sont dérivés à partir de l'équation de Boltzmann soumis à certaines hypothèses, et à diverses méthodes d'intégration. L'approche la plus simple est de type bi-fluide : la phase liquide est définie par la densité en nombre de gouttes, sa masse et sa vitesse. Elle est donc monodisperse en vitesse et en taille. L'extension de ce type d'approche à des écoulements turbulents a été proposée par Simonin [191], et Février *et al.* [59]. Elle repose sur une décomposition statistique de la vitesse des particules en une vitesse d'ensemble, appelée vitesse corrélée ou mésoscopique, et une vitesse propre à chaque particule, appelée vitesse décorrélée.

Le gros avantage de l'approche eulérienne, en résolvant les deux phases avec les mêmes algorithmes et le même maillage, est qu'elle permet de profiter des capacités de parallélisme du solveur, et de s'affranchir des erreurs d'interpolation liées au couplage.

Le principal inconvénient de l'approche Eulérienne est sa difficulté à modéliser les cas de figure où les grandeurs moyennes ne permettent pas de représenter le spray de façon réaliste, en particulier lorsque le spray présente des caractéristiques polydisperses avec une importante dispersion de diamètres de gouttes pour une même position. La polydispersion en taille peut être prise en compte en transformant l'approche bi-fluide en une approche multi-fluide. L'espace des tailles de gouttes est alors discrétisé en intervalles appelés sections [110], et chaque classe est transportée indépendamment des autres. Son principal défaut est la multiplication du système d'équations par autant de classes qui sont nécessaires pour représenter l'écoulement, ce qui augmente considérablement le coût de calcul. Un couplage entre l'approche multi-fluide et le formalisme Eulérien Mésoscopique a fait l'objet des travaux de Vié *et al.* [217]. Les méthodes à PDF présumée consistent à présumer les distributions en taille, en température et en vitesse de la phase gazeuse. Mossa [134] propose de présumer leur forme en prenant par exemple une distribution log normale pour la distribution en taille, une distribution gaussienne pour la température et la vitesse, ce qui permet d'obtenir un spray polydispense en taille et en vitesse. Des méthodes de quadrature de moments (approche QMOM) ont également été proposées pour prendre en comptes la polydispersion [129]. Une quadrature de Gauss de la PDF (représentation en plusieurs Dirac) permet de bien reproduire

les phénomènes d'évolution de la taille des gouttes (évaporation, fragmentation, coalescence). Ce passage par la quadrature étant coûteux, une autre approche consiste à transporter les poids calculés par quadrature au lieu des moments (approche DQMOM) [62]. L'autre inconvénient du formalisme eulérien est son incapacité à traiter les cas où les particules ont des trajectoires complexes et très différentes au sein d'un même volume de contrôle. Desjardin *et al.* [42] ont proposé une méthode pour améliorer la prédiction du croisement de trajectoire. Enfin, le spray possède des propriétés similaires à celles d'un fluide fortement compressible : l'approche Eulérienne nécessite donc des méthodes numériques capable de prendre en compte des fronts très raides, ce qui implique souvent des schémas peu dispersifs et le recours à un opérateur de viscosité artificielle.

Description Lagrangienne

L'approche Lagrangienne, plus intuitive, consiste à suivre de manière individuelle et ponctuelle chaque particule dans le domaine de calcul, en lui appliquant des transferts de masse, quantité de mouvement et énergie avec la phase porteuse. Chaque particule possède donc des propriétés (température, diamètre, vitesse) qui lui sont propres. La position des particules n'étant pas coïncidente avec les nœuds du maillage, cette approche nécessite des méthodes d'interpolation performantes afin de limiter les erreurs numériques liées au couplage.

L'avantage de cette méthode et qu'elle ne nécessite pas de recourir à un modèle pour traiter les effets tels que le croisement de trajectoires ou la polydispersion. Pour réduire le coût de calcul, plusieurs particules peuvent être regroupées au sein d'une particule stochastique, dont le poids numérique w_p correspond au nombre de particules physiques décrites par ce groupe. Cependant l'augmentation du poids numérique des particules se fait au détriment de la précision du calcul [48].

La méthode Lagrangienne peut présenter des difficultés sur des calculs parallèles, puisque la distribution des particules dans le domaine peut être très différente de la distribution des cellules du maillage eulérien, et peut varier au cours du temps. Un faible nombre de processeurs a alors une grande quantité de particules à traiter, alors que d'autres ne voient aucune particule. Ces disparités de charge de calculs entre les processeurs porte préjudice à l'efficacité du parallélisme. Pour limiter ce problème, il est alors possible de partitionner le domaine de manière adaptée en fonction de la densité en particules afin d'équilibrer la charge de travail de tous les processeurs. Cet équilibrage de charge peut également être réalisé de manière dynamique, en repartitionnant le domaine au cours du calcul.

Les approches Eulerienne et Lagrangienne ont été comparées dans diverses études (Fig. 3.15), et ont toutes les deux démontré leur potentiel dans un contexte LES. La méthode retenue ici est la description lagrangienne de la phase dispersée, implantée dans le solveur YALES2 dans le cadre de la thèse d'Enjalbert [48].

3.3.2 Equations pour le formalisme Lagrangien

3.3.2.1 Cinématique de la goutte

Dans le formalisme Lagrangien, les gouttes sont assimilées à des particules sphériques, la masse de la particule, m_p , s'écrit donc :

$$m_p = \rho_p \frac{\pi}{6} d_p^3 \quad (3.112)$$

où d_p est le diamètre de la particule et ρ_p sa masse volumique.

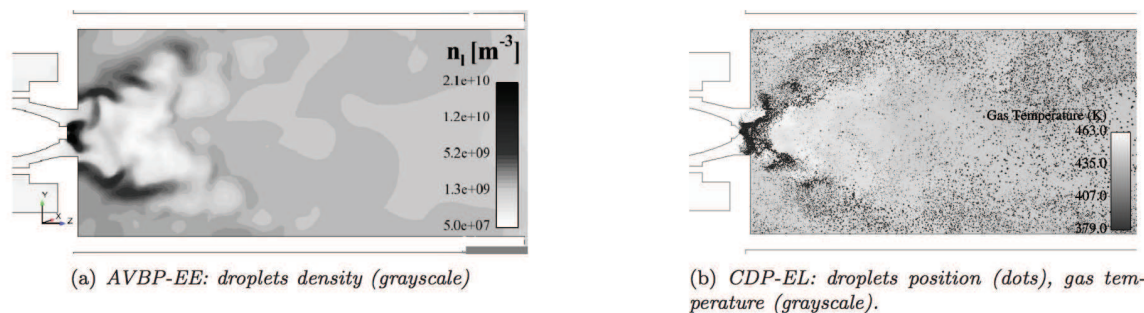


FIGURE 3.15 – Comparaison de la distribution de gouttes dans le brûleur MERCATO, simulation Euler-Euler (gauche), et Euler-Lagrange (droite) [174]

Position

La position de la particule, \mathbf{x}_p , est reliée à sa vitesse \mathbf{u}_p d'après la relation de mécanique du point :

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p. \quad (3.113)$$

Quantité de mouvement

Le principe fondamental de la dynamique permet d'écrire la relation suivante pour décrire la vitesse de la particule :

$$\frac{d}{dt}(m_p \mathbf{u}_p) = \mathbf{F}_p. \quad (3.114)$$

Le terme \mathbf{F}_p est la résultante des forces extérieures s'exerçant sur la particule et se décompose en deux contributions :

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_p^G + \mathbf{F}_p^A \quad (3.115)$$

où \mathbf{F}_p^G désigne l'ensemble des forces de gravité et de flottabilité, et \mathbf{F}_p^A les forces aérodynamiques de trainée.

Gravité

Les forces de gravité agissant sur la particule peuvent être synthétisées de la manière suivante :

$$\mathbf{F}_p^G = (\rho_p - \rho) \frac{\pi}{6} d_p^3 \mathbf{g}, \quad (3.116)$$

où ρ désigne la masse volume de la phase porteuse et \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur. Dans le cas de particules liquides dans un écoulement gazeux, $\rho_p \gg \rho$, la poussée d'Archimède peut donc être négligée devant les effets de gravité. De plus, dans les écoulement fortement turbulent, la force de gravité peut être négligée devant les forces aérodynamiques.

Aérodynamique

La force de trainée exercée par le gaz sur la particule s'écrit :

$$\mathbf{F}_p^A = m_p \frac{1}{\tau_p} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}). \quad (3.117)$$

τ_p désigne le temps de réponse de la particule aux fluctuations de vitesse et dépend du régime d'écoulement, caractérisé par le nombre de Reynolds particulaire :

$$Re_p = \frac{d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}|}{\nu} \quad (3.118)$$

- Pour un nombre de Reynolds de particule modéré, $Re_p < 1000$, de nombreuses corrélations existent pour τ_p , en fonction de Re_p et d'un coefficient de traînée C_D [60]. Les corrélations empiriques de Schiller et Naumann [177] donnent :

$$\tau_p = \frac{4}{3C_D Re_p} \frac{\rho_p}{\rho} \frac{d_p^2}{\nu} \quad \text{et} \quad Re_p C_D = 24(1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad (3.119)$$

Lorsque $Re_p < 1$, l'équation ci-dessus donne $Re_p C_D \approx 24$: la loi de Stokes est retrouvée. Dans ce cas :

$$\tau_p = \frac{1}{18} \frac{\rho_p}{\rho} \frac{d_p^2}{\nu}. \quad (3.120)$$

La corrélation proposée par Schiller et Naumann est en réalité une extension de la loi de Stokes à des Reynolds particulières plus élevés.

- Lorsque Re_p est plus élevé ($Re_p > 1000$), la turbulence derrière la particule est pleinement développée et le coefficient de traînée devient constant et égal 0.44 :

$$\tau_p = \frac{4}{3C_D Re_p} \frac{\rho_p}{\rho} \frac{d_p^2}{\nu} \quad \text{et} \quad C_D = 0.44 \quad (3.121)$$

3.3.2.2 Thermodynamique de la goutte

Hypothèses du modèle

Les caractéristiques thermodynamiques de la goutte (température, composition) sont déterminées en appliquant les équations de conservation de la masse et de l'énergie à la particule. Les propriétés du gaz dans le milieu ambiant sont désignées à l'aide de l'indice ∞ , les propriétés thermodynamiques à la surface de la goutte sont notées $_{surf}$. Les particules considérées sont des gouttes mono-composant. La notation i sera utilisée pour désigner l'espèce, gazeuse ou liquide, dont est constituée la goutte. L'évaporation de goutte multi-composants a également été implémentée dans le code dans le cadre de la thèse de Farcy [54], mais n'est pas traitée ici.

Le modèle de transfert de masse proposé par Spalding [197] est utilisé. Il repose sur les hypothèses suivantes :

- *Hypothèse 1* : La goutte est supposée parfaitement sphérique, et isolée : les interactions avec les autres particules ne sont pas prises en compte.
- *Hypothèse 2* : La conductivité thermique du liquide est supposée infinie, la température dans la goutte est uniforme.
- *Hypothèse 3* : La diffusivité thermique $\mathcal{D} = \lambda_{th}/\rho C_p$ du liquide étant très inférieure à celle du gaz, le temps caractéristique thermique de la phase porteuse est très court devant celui de la goutte. La réponse thermique est donc supposée quasi-stationnaire dans le gaz, les dérivées temporelles seront négligées.
- *Hypothèse 4* : La surface de la goutte est supposée à l'équilibre thermodynamique avec le gaz environnant. La loi de Clausius-Clapeyron peut donc être utilisée pour calculer la pression de vapeur saturante de l'espèce k à la surface de la goutte :

$$P_{k,surf} = P_{ref} \exp \left(\frac{W_k L_{v,k}}{R} \left(\frac{1}{T_{boil}} - \frac{1}{T_p} \right) \right), \quad (3.122)$$

où $L_{v,k}$ est la chaleur latente de vaporisation de l'espèce k sous forme liquide, W_k sa masse molaire, et T_{boil} est la température d'ébullition de la goutte à la pression de référence $P_{ref} = 1$ atm.

- *Hypothèse 5* : Les propriétés du milieu ambiant (mélange gazeux hors espèce évaporée) sont supposées constantes, de la surface de la goutte à l'infini
- *Hypothèse 6* : Loi $2/3 - 1/3$

Le schéma représenté Fig. 3.16 rappelle les notations utilisées ici. Les propriétés du gaz qui entoure la surface de la goutte ne correspondent ni à celles du milieu ambiant, ni à celles à la surface de la goutte. Pour caractériser cet état intermédiaire (noté par la suite avec l'indice $1/3$) Hubbard *et al.* [91] proposent une moyenne pondérée à $2/3 - 1/3$ des valeurs à la surface et à l'infini :

$$T_{1/3} = \frac{2}{3}T_{surf} + \frac{1}{3}T_{\infty} \quad (3.123)$$

$$Y_{1/3,k} = \frac{2}{3}Y_{surf,k} + \frac{1}{3}Y_{\infty,k} \quad (3.124)$$

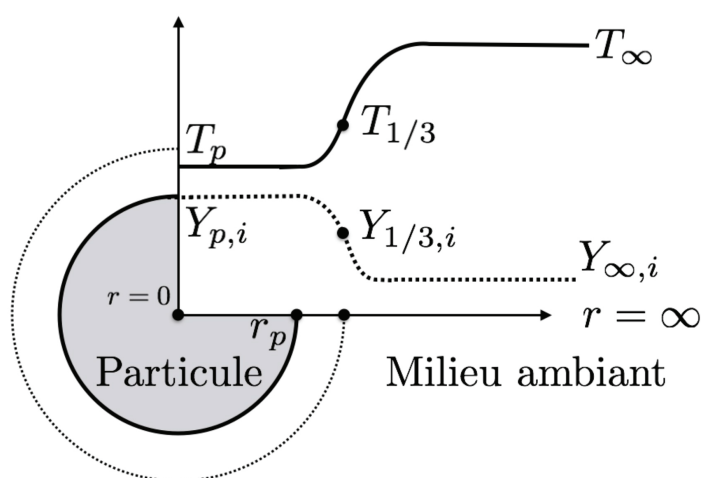


FIGURE 3.16 – Schéma d'une goutte qui s'évapore dans un milieu ambiant gazeux [54]

Evolution de la masse

La variation de masse de la goutte est obtenue en intégrant l'équation de conservation de l'espèce évaporée entre le rayon de la goutte et le milieu ambiant. Les détails de la démonstration sont disponibles dans les travaux de Sirignano [192] ou dans la thèse de Jeagle [94] :

$$\dot{m}_p = -\pi d_p \rho D Sh \log(1 + B_M) \quad \text{avec} \quad B_M = \frac{Y_{k,surf} - Y_{k,\infty}}{1 - Y_{k,surf}} \quad (3.125)$$

Dans cette équation, les termes suivants doivent être identifiés :

- Le nombre de Spalding massique, B_M , caractérise les effets de transfert de masse en fonction des fractions massique de l'espèce évaporée, à la surface de la goutte et à l'infini. La fraction massique dans le milieu ambiant est interpolée depuis les nœuds du maillage eulérien. La fraction massique à la surface est peut être exprimée en fonction de la fraction molaire et des masses molaires :

$$Y_{k,surf} = \frac{X_{k,surf} W_k}{W_{surf}} \quad \text{avec} \quad W_{surf} = X_{k,surf} W_k + (1 - X_{k,surf}) \bar{W}_{j \neq k, surf} \quad (3.126)$$

La masse molaire à la surface W_{surf} est calculée comme une moyenne pondérée par les fractions molaires de la masse molaire de l'espèce évaporée et de toutes les autres espèces. La masse molaire du mélange hors espèce évaporée, $\bar{W}_{j \neq k, surf}$ est uniforme de la surface à l'infini, d'après l'*Hypothèse 4*, et peut donc être calculée de la manière suivante :

$$\bar{W}_{j \neq k, surf} = \bar{W}_{j \neq k, \infty} = \frac{1 - Y_{k, \infty}}{1 - Y_{k, \infty} \frac{W_{\infty}}{W_k}} W_{\infty} \quad (3.127)$$

La fraction molaire d'espèce évaporée à la surface, $X_{i, surf}$ est déduite de la pression partielle calculée d'après la formule de Clausius-Clapeyron (Eq. 3.122) :

$$X_{k, surf} = \frac{P_{k, surf}}{P} . \quad (3.128)$$

- Le nombre de Sherwood, ratio entre le flux de masse et le flux de masse dû à la diffusion, dépend des effets convectifs. Dans un environnement au repos ($u_{\infty} = 0$), $Sh = 2$. Cependant, de manière générale, la vitesse relative vue par les gouttes n'est pas nulle, $u_{\infty} \neq 0$. Dans ce cas, les corrélations proposées par Ranz et Marshall [158] peuvent être utilisées pour corriger le nombre de Sherwood en prenant en compte les effets de convection forcée :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad (3.129)$$

- Le terme diffusif (ρD) de l'équation 3.125, est généralement approximé par :

$$\rho D = \frac{\mu}{Sc} \quad (3.130)$$

où Sc correspond au nombre de Schmidt de l'espèce évaporée, et μ est la viscosité dynamique du mélange gazeux.

Evolution de la température

De la même manière que pour la masse, l'évolution de la température de la goutte est obtenue en intégrant l'équation de conservation de l'énergie de la surface de la goutte à l'infini. La démonstration détaillée est disponible dans l'ouvrage de Sirignano [192], ou dans la thèse d'Enjalbert [48]. L'expression finale suivante est alors obtenue :

$$\frac{dT_p}{dt} = -\frac{1}{\tau_h} \left(T_p - \left(T_{\infty} - \frac{L_v B_T}{C_{p, 1/3}} \right) \right), \quad (3.131)$$

où τ_h est un temps caractéristique de chauffage, défini comme :

$$\tau_h = \frac{\rho_p d_p^2}{6} \frac{Sc}{Sh \cdot \mu^{1/3}} \frac{C_{p, k}}{C_{p, 1/3}} \frac{B_T}{\log(1 + B_M)} \quad (3.132)$$

- Le nombre de Spalding thermique B_T , qui caractérise le transfert de chaleur, peut être exprimé en fonction du nombre de Spalding massique, défini dans l'Eq. 3.125 :

$$B_T = (1 + B_M) \frac{Sh \cdot Pr}{Nu \cdot Sc} - 1 \quad (3.133)$$

- Le nombre de Nusselt décrit le rapport entre les transferts thermiques convectifs et diffusifs. A l'instar du nombre de Sherwood pour les transferts de masse, il peut être exprimé à l'aide des corrélations établies par Ranz et Marshall pour une surface sphérique [158] :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.134)$$

Cas particulier de l'ébullition

Dans le cas particulier où la température de la goutte T_p tend vers la température d'ébullition, T_{boil} , la couche gazeuse qui entoure la goutte atteint la saturation, $Y_{k,surf}$ tend vers 1 et le nombre de Spalding massique B_M diverge vers l'infini.

Dans ce cas on écrit plutôt, $T_p = T_{boil}$, et $dT/dt = 0$. L'équation 3.131 devient donc :

$$B_T^{sat} = \frac{C_{p,ref}(T_\infty - T_{boil})}{L_v} \quad (3.135)$$

Le nombre de Spalding massique à l'ébullition est alors obtenu en utilisant la relation 3.133 :

$$B_M^{sat} = (1 + B_T^{sat})^{\frac{Nu.Sc}{Sh.Pr}} - 1, \quad (3.136)$$

et l'équation décrivant la variation de masse dans la goutte (Eq. 3.125) fait intervenir B_M^{sat} :

$$\dot{m}_p = -\pi d_p Sh(\rho D) \log(1 + B_M^{sat}) \quad (3.137)$$

Evolution du diamètre

L'évolution du diamètre de la particule est obtenue à partir de l'équation d'évolution de la masse (Eq. 3.125) :

$$dm_p = \left(\frac{\pi \rho_p d_p^2}{2} \right) dd_p. \quad (3.138)$$

L'évolution temporelle du diamètre s'exprime donc en fonction du temps caractéristique d'évaporation τ_m et du diamètre initial de la particule $d_{p,0}$:

$$\frac{dd_p^2}{dt} = -\frac{d_{p,0}^2}{2d_p \tau_m} \quad \text{avec} \quad \tau_m = \frac{\rho_p d_{p,0}^2 Sc}{4Sh\mu_{1/3} \log(1 + B_M)}. \quad (3.139)$$

3.3.3 Couplage avec la phase gazeuse

3.3.3.1 Echange entre les particules et la phase gazeuse

La rétroaction des particules sur la phase porteuse se fait par l'intermédiaire de trois termes sources sur la conservation de la masse Θ_M , de la quantité de mouvement Θ_D et de l'enthalpie Θ_H , qui sont ajoutés aux équations de conservation du solveur Eulérien (Equations 3.3, 3.4, 3.21 et 3.15).

Ces termes sources sont ponctuels et localisés à la position des particules, et calculés en fonction des variations des propriétés de chaque particule. Le terme source massique, redistribué sur le maillage Eulérien s'écrit :

$$\Theta_M(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} -\dot{m}_p^{(i)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)), \quad (3.140)$$

où δ est la distribution de Dirac, et ΔV un volume de contrôle, théoriquement de l'ordre de grandeur du volume de la particule, mais en pratique choisi comme étant égal au volume de contrôle relatif à la cellule du maillage eulérien contenant la particule.

De même, le terme source intervenant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, issu de la résultante des forces aérodynamiques exercées sur la particule par la phase continue s'écrit :

$$\Theta_D(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} -\mathbf{F}_p^{(i)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)). \quad (3.141)$$

Le terme source d'énergie résulte à la fois de l'énergie prélevée par le chauffage de la particule et par le changement d'état des espèces évaporées :

$$\Theta_H(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} \left(-m_p^{(i)} C_{p,l} \frac{dT_p^{(i)}}{dt} + \dot{m}_p^{(i)} L_v \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)). \quad (3.142)$$

3.3.3.2 Formalisme LES : interaction avec la turbulence

Dans un contexte LES, seules les grandeurs correspondant aux échelles résolues sont disponibles. Les fluctuations de sous mailles doivent faire l'objet d'une modélisation.

Impact de la phase dispersée sur la turbulence de sous-maille

La première question qui se pose est de savoir si les modèles de turbulence classiques sont toujours valides dans le cas d'écoulements chargés en particules. En effet, la présence de particules peut avoir deux impacts sur le spectre de turbulence : les plus petites particules sont susceptibles de dissiper l'énergie cinétique turbulente, alors que les plus grosses peuvent augmenter la turbulence. [13, 169]. Par ailleurs, la ségrégation des particules par les tourbillons de sous-maille n'étant pas prise en compte, les effets du two-way coupling peuvent être localement mal estimés [58, 162]. Les modèles de sous-mailles conçus pour les écoulements monophasiques ne sont à priori pas prévus pour prendre en compte ces effets. Cependant, hormis une étude de Yuu *et al.* [228] qui proposent un modèle de turbulence dépendant du nombre de Reynolds des particules, la plupart des études récentes [219, 96, 174] utilisent les modèles de turbulence classiques (Smagorinsky notamment), sans y apporter de modification particulière. La même approche sera utilisée ici.

Impact des fluctuations de sous maille de la phase porteuse sur les particules

Le solveur Lagrangien utilise les grandeurs eulériennes pour calculer l'avancement des particules. Or en LES, les échelles de sous-mailles ne sont pas résolues. Les particules n'ont accès qu'à $\tilde{\varphi}$ au lieu de φ , et ne voient pas les fluctuations de sous-maille. Une modélisation supplémentaire doit donc être introduite pour exprimer φ en fonction de $\tilde{\varphi}$. Les travaux d'Okong'o et Bellan [143] comparent plusieurs approches :

- La première consiste à négliger les effets de sous-maille : $\varphi = \tilde{\varphi}$
- Un autre approche consiste à modéliser φ comme une variable aléatoire suivant une loi Gaussienne de moyenne $\tilde{\varphi}$ et de variance σ_{φ}^{sgs} qui doit également être estimée.
- Un modèle analytique de la forme $\varphi = \tilde{\varphi} + \bar{\sigma} \text{sign}(\nabla^2 \tilde{\varphi})$ est également proposé.

Ils en concluent que la première approche donne de meilleurs résultats que la deuxième mais moins bons que la troisième. Bini et Jones [11] proposent un autre modèle basé sur le Reynolds particulaire Re_p pour modéliser les fluctuations de vitesse. Le même genre de modèle est développé pour les fluctuations de température [11]. Utilisé dans plusieurs études, ce modèle montre de très bons résultats. Cependant, ces modèles sont utiles pour le calcul du terme de trainée lorsque les fluctuations non résolues de vitesse sont de l'ordre de la vitesse de la particule ou plus importantes. C'est à dire, selon la classification d'Elgobashi [47], pour les très petites particules ($\tau_p/\tau_k < 1$). Dans le cas d'un spray évaporant, ce cas de figure n'est rencontré qu'en fin de vie des gouttes, et l'essentiel du spray peut être considéré comme étant insensible aux fluctuations de sous maille. Ces dernières sont donc négligées dans les travaux présentés ici, et l'hypothèse $\tilde{\varphi} = \varphi$ est utilisée.

3.3.4 Méthodologie pour la collecte de statistiques sur la phase dispersée

Les statistiques pour la phase liquide sont calculées sur le maillage Eulérien, d'après la méthodologie décrite dans la thèse d'Enjalbert [48], et rappelée ci-dessous. Pour cela, on introduit un opérateur d'interpolation des particules vers la grille Eulérienne. Les notations suivantes seront utilisées :

\mathbf{x}_i/φ_i	Position et propriété physique au nœud i du maillage
\mathbf{x}_p/φ_p	Position et propriété physique de la particule p
\mathcal{E}	Cellule du maillage eulérien
$\mathcal{N}(\mathcal{E})$	Ensemble des noeuds de l'élément \mathcal{E}
$\mathcal{E}_{\mathbf{x}_i}$	Cellule du maillage ayant le un nœud i pour sommet)
\mathcal{E}_p	Cellule du maillage contenant la particule p
$\langle \cdot \rangle$	Opérateur de moyenne temporelle
$\{ \cdot \}$	Opérateur d'interpolation des particules vers le maillage

Etant donnée une grandeur physique φ définie sur un ensemble de particules, la valeur interpolée de φ au noeud i du maillage Eulérien est définie de la manière suivante :

$$\{\varphi\}_i = \sum_{p|\mathbf{x}_p \in \mathcal{E}_{\mathbf{x}_i}} g_{i,p} \varphi_p, \quad (3.143)$$

où $g_{i,p}$ est le poids d'interpolation, basé sur l'inverse de la distance :

$$g_{i,p} = \frac{1/|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_i|}{\sum_{i' \in \mathcal{N}(\mathcal{E}_p)} 1/|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{i'}|} \quad (3.144)$$

Le calcul de la moyenne temporelle tient compte du poids numérique des particules, w , ce qui donne :

$$\langle \varphi(\mathbf{x}_i) \rangle = \frac{\langle \{w\varphi\}_i \rangle}{\langle \{w\}_i \rangle}. \quad (3.145)$$

Les fluctuations sont définies de la manière suivante :

$$\varphi_{rms}(\mathbf{x}_i) = \langle \varphi^2(\mathbf{x}_i) \rangle - \langle \varphi(\mathbf{x}_i) \rangle^2, \quad (3.146)$$

et s'expriment donc :

$$\varphi_{rms}(\mathbf{x}_i) = \frac{\langle \{w\varphi^2\}_i \rangle}{\langle \{w\}_i \rangle} - \left(\frac{\langle \{w\varphi\}_i \rangle}{\langle \{w\}_i \rangle} \right)^2. \quad (3.147)$$

3.4 Présentation du solveur LES YALES2

Les simulations présentées dans ces travaux ont été réalisées à l'aide du solveur LES YALES2, basé sur la méthode des volumes finis. Il permet de traiter des maillages non-structurés composés de différents types d'éléments : triangles et quadrilatères en 2D ; tétraèdres, prismes, pyramides et hexahèdres en 3D. Les volumes de contrôle, sur lesquels les équations de transport seront intégrées, sont construits autour de chaque nœud composant le maillage. Un exemple de volume de contrôle est représenté sur la figure 3.17.

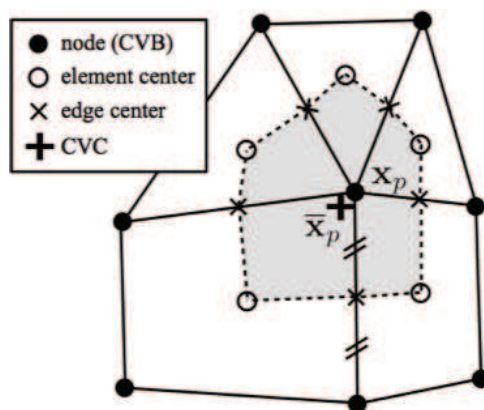


FIGURE 3.17 – Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2 : x_p représente le nœud du maillage, \bar{x}_p représente le barycentre du volume de contrôle.

Les grandeurs physiques, pression, scalaires, vitesse, sont stockées aux nœud. Plusieurs schémas sont disponibles pour l'avancement en temps explicite : Runge-Kutta du second, troisième et quatrième ordre. Un schéma plus récent proposé par Kraushaar [106] appelé TFV4A, qui combine les méthodes Runge-Kutta et Lax-Wendroff, est également disponible. L'intégration spatiale est effectuée avec un schéma d'ordre 4. Plus de détails sur la discrétisation spatiale dans le code sont disponibles dans la thèse de Vantieghem [210]. Il est possible d'introduire de la viscosité artificielle avec la formulation de Cook & Cabot [38].

YALES2 propose deux solveurs pour la résolution des équations de Navier-Stokes pour les écoulements à faible nombre de Mach :

- **Le solveur incompressible à densité variable (VDS)**, qui suppose que les variations de pression, densité et température dues aux ondes acoustiques sont négligées. Les variations de température modifient la densité par l'intermédiaire d'une loi d'état.
- **Le solveur incompressible (ICS)**, dont le formalisme suppose que la densité n'est pas impactée par les variations de températures, ce qui limite l'utilisation de ce solveur à des simulations isothermes.

3.4.1 Solveur incompressible

3.4.1.1 Equations de Navier Stokes incompressibles

Les équations de Navier-Stokes, présentées dans la section 3.1.1 peuvent être formulées dans le cadre des écoulements incompressibles, qui suppose que la densité est constante en temps et en espace. Ces équations, résolues par le solveur incompressible de YALES2, s'écrivent alors :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.148)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (3.149)$$

3.4.1.2 Méthode de résolution

L'avancement en temps est basé sur la méthode de pas fractionné proposée par Chorin [34] puis modifié par Kim et Moin [102]. La vitesse est résolue à chaque pas de temps soit n , $n + 1$, etc alors que les scalaires, la densité et la pression sont résolus sur des pas de temps décalés $n + 1/2$, $n + 3/2$, etc. Cette méthode de projection, souvent utilisée pour la simulation d'écoulements incompressibles repose sur la décomposition d'Helmholtz, qui énonce qu'un champ vectoriel peut se décomposer en une partie irrotationnelle ($\nabla \times = 0$) et une partie solénoïdale ($\nabla \cdot = 0$). Cette décomposition, appliquée au champ de vitesse, s'écrit :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_s, \quad (3.150)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla^2 \varphi. \quad (3.151)$$

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

1. Etape de prédiction

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

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \mathbf{u}^n) + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n \quad (3.152)$$

2. Etape de correction

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

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2} \quad (3.153)$$

Le calcul de \mathbf{u}^{n+1} nécessite de connaître $P^{n+1/2}$, qui est déterminé en résolvant l'équation de Poisson pour la pression obtenue en appliquant l'opérateur divergence à l'équation 3.153, et en réintégrant la contrainte de divergence nulle pour \mathbf{u}^{n+1} :

$$\nabla^2 P^{n+1/2} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.154)$$

Une fois $P^{n+1/2}$ connu, \mathbf{u}^{n+1} est donné par l'équation 3.153 :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla P^{n+1/2} \quad (3.155)$$

En d'autres termes, cette deuxième étape consiste à calculer la partie irrotationnelle de \mathbf{u}^* :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = \nabla \cdot \mathbf{u}_i^* = \frac{\Delta t}{\rho} \nabla^2 P^{n+1/2}, \quad (3.156)$$

et construire \mathbf{u}^{n+1} en retranchant à \mathbf{u}^* sa composante irrotationnelle pour obtenir un champ à divergence nulle.

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

1. Etape de prédiction

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

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

2. Etape de correction

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

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2} + \frac{1}{\rho} \nabla P^{n-1/2} \quad (3.158)$$

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

$$\nabla^2 (P^{n+1/2} - P^{n-1/2}) = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (3.159)$$

3.4.2 Solveur à densité variable

3.4.2.1 Approximation à faible nombre de Mach

Dans de nombreuses applications industrielles, la vitesse caractéristique de l'écoulement est très faible devant la vitesse du son (i.e. devant la vitesse de propagation des ondes acoustiques). Le nombre de Mach étant le nombre sans dimension qui compare la vitesse du fluide à la vitesse du son, on parle alors d'écoulement à faible nombre de Mach. Trois effets sont responsables des variations de masse volumique dans l'écoulement : les variations de pression (effet de compressibilité), les variations de température (effet de dilatation), et les variations de la composition (mélange d'espèces de masse volumique différentes). Dans le cadre d'un écoulement à faible nombre de Mach, les ondes acoustiques se propagent beaucoup plus vite que les ondes entropiques à travers le domaine, et la pression s'homogénéise très rapidement dans le domaine. La pression thermodynamique est variable temporellement, sous l'effet de la variation de T ou Y_k ; mais elle est constante en espace, sous l'effet de la propagation à une vitesse presque "infinie" des ondes acoustiques.

La formulation incompressible à densité constante des équations de Navier-Stokes (Eqs. 3.148 et 3.149) n'est pas adaptée pour traiter ce cas de figure. Cependant, l'approche compressible n'est donc pas non plus adaptée puisque le pas de temps imposé par les conditions de stabilité de type CFL est contraint par la vitesse des ondes acoustiques, conduisant à des temps de calculs prohibitifs.

Au début des années 80, Klainerman et Majda [103] ont montré que l'écoulement compressible converge vers un écoulement incompressible quand le nombre de Mach tend vers zéro, et Majda et Sethian [127] ont proposé une approche intermédiaire entre les formulations compressible et incompressible des équations de Navier-Stokes. A partir de développements asymptotiques (qui ne seront pas détaillés ici) des variables primitives, ils dérivent un jeu d'équation pour décrire les écoulements sous l'hypothèse Low-Mach. La pression est décomposée en deux termes : la pression thermodynamique, supposée constante en espace, et la pression dynamique, variable en espace et en temps.

En remplaçant les variables primitives par leurs développements à l'ordre zéro, les équations de Navier-Stokes deviennent :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.160)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial P_2}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}. \quad (3.161)$$

- Conservation de l'enthalpie sensible

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \frac{DP_0}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{th} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} V_{k,i} \right) + \dot{\omega}_T. \quad (3.162)$$

- Conservation des espèces

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho (u_i + V_i^c) Y_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k, \quad (3.163)$$

Le terme de pression P_0 qui apparait dans l'équation d'enthalpie correspond à la pression thermodynamique. Elle est constante en espace, et dans le cadre de cette thèse également constante en temps. Le terme de pression P_2 dans l'équation de quantité de mouvement correspond à la pression dynamique. Ses variations sont couplées aux variations de vitesse, et c'est ce terme qui intervient dans l'équation de Poisson et l'étape de correction. La masse volumique est variable en espace et en temps, elle dépend de la température et de la composition locale, et est calculée par l'intermédiaire de l'équation d'état.

3.4.2.2 Méthode de résolution

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

1. Prédiction de la densité

Dans un premier temps, un prédicteur sur la densité ρ^* est calculé d'après la conservation de la masse :

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

2. Prédiction des scalaires

L'avancement des scalaires, et notamment de la température T^* , et des espèces Y_k^* est réalisé à partir du prédicteur de densité. Pour un scalaire φ quelconque, on a :

$$\frac{\rho^* \varphi^* - \rho^{n+1/2} \varphi^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^n \varphi^{n+1/2}) + \mathbb{D}(\varphi^{n+1/2}) + \mathbb{R}(\varphi^{n+1/2}), \quad (3.165)$$

où \mathbb{D} et \mathbb{R} désignent respectivement les termes de diffusion et de réaction. La température est déduite des scalaires prédits :

$$T^* = f(Y_k^*, h_s^*). \quad (3.166)$$

3. Correction de la densité

La densité au temps $n + 3/2$ est ensuite calculée comme une relaxation entre la valeur prédite ρ^* et une valeur issue de l'équation d'état basée sur la valeur prédite des scalaires, ρ^{EOS} . Par exemple, dans le cas de l'équation d'état des gaz parfaits :

$$\rho^{EOS} = \frac{P_0}{\mathcal{R}T^*} \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k^*}{W_k} \right)^{-1}. \quad (3.167)$$

Ce qui donne pour la densité :

$$\rho^{n+3/2} = \alpha \rho^{EOS} + (1 - \alpha) \rho^*. \quad (3.168)$$

Si $\alpha = 0$, la densité ne prend pas en compte la loi d'état. Inversement, si $\alpha = 1$, la densité prédite n'est pas prise en compte. En pratique, le coefficient de relaxation α est fixé par défaut à 0.7, afin de prendre en compte les deux effets.

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

$$\rho^{n+1} = \frac{1}{2}(\rho^{n+1/2} + \rho^{n+3/2}). \quad (3.169)$$

4. Prédiction de la vitesse

Une fois la densité ρ^{n+1} connue, la même démarche que pour le formalisme incompressible peut être mise en œuvre. La vitesse est avancée sans tenir compte de l'évolution de la pression :

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^* - (\rho \mathbf{u})^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^* \mathbf{u}^n) - \nabla P_2^{n-1/2}. \quad (3.170)$$

5. Correction de la vitesse

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

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^{n+1} - (\rho \mathbf{u})^*}{\Delta t} = -\nabla P_2^{n+1/2} + \nabla P_2^{n-1/2}. \quad (3.171)$$

L'équation de Poisson permettant de calculer $P_2^{n+1/2}$ est obtenue en prenant la divergence de l'Eq. 3.171, et en intégrant la condition imposée par l'équation de continuité pour \mathbf{u}^{n+1} :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^{n+1} = -\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)^{n+1} \approx -\frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t}. \quad (3.172)$$

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

$$\nabla \cdot (\nabla P_2^{n+1/2} - \nabla P_2^{n-1/2}) = \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t^2} + \frac{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^*}{\Delta t}. \quad (3.173)$$

6. Correction des scalaires

Enfin, l'avancement des scalaires est corrigé pour tenir compte de la correction sur la vitesse. Pour le scalaire φ , on a :

$$\frac{(\rho \varphi)^{n+3/2} - (\rho \varphi)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^{n+1} \varphi^{n+1/2} + \mathbb{D}(\varphi^{n+1/2}) + \mathbb{R}(\varphi^{n+1/2}). \quad (3.174)$$

3.4.3 Résolution de l'équation de Poisson

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

$$\nabla \cdot (\alpha \nabla \varphi) = RHS. \quad (3.175)$$

Il s'agit d'un système d'équations linéaires dont l'inconnue est le vecteur des valeurs de la pression sur les nœuds du domaine discrétisé. Sa résolution requiert de faire appel à un solveur linéaire. La résolution de cette équation peut représenter une part très importante du temps de calcul nécessaire à la simulation de chaque pas de temps. En effet, les solveurs utilisés pour cette résolution sont obligatoirement

des solveurs itératifs, et le nombre d'itérations nécessaire à l'obtention d'une estimation suffisamment précise de la solution exacte peut être élevé selon l'algorithme utilisé et des caractéristiques de la matrice de l'opérateur laplacien. De plus, des communications inter-processeurs sont nécessaires à chaque itération du solveur linéaire, et ces communications peuvent représenter une proportion très importante du temps total de la simulation, pouvant aller jusqu'à 80% si aucune attention particulière n'est apportée à l'implémentation de la méthode [128]. L'optimisation de la méthode de résolution l'équation de Poisson est donc un point-clé pour la simulation des écoulements incompressibles. Cette problématique a fait l'objet de la thèse de Malandain [128]. Plusieurs algorithmes sont disponibles dans YALES2 pour inverser le système linéaire : PCG (Preconditionned Conjugate Gradient)[208] et Deflated PCG [141], mais également le schéma BIGSTAB [208].

3.4.4 Parallélisme

YALES2 a été développé pour le calcul massivement parallèle, pour répondre au besoin croissant d'augmenter la taille du domaine et la résolution spatiale dans les simulations récentes. La méthode la plus courante en CFD est la décomposition de domaine, chaque processeur étant assigné à une partie différente du domaine de calcul. L'interdépendance de ces sous-domaines est prise en compte à l'aide de communications entre les processeurs qui échangent des informations à l'interface de chaque groupe de cellules grâce à des instructions MPI (Message Passing Interface). La décomposition du maillage en sous-domaine doit assurer une répartition de la charge de travail sur les processeurs la plus optimale possible. Dans un contexte purement eulérien, la manière la plus évidente d'y arriver consiste à découper le maillage en sous-domaines contenant le même nombre de volumes de contrôle. Si cette décomposition est triviale pour un maillage structuré, elle l'est beaucoup moins pour un maillage non structuré. Dans YALES2, cette opération est faite à l'aide d'une librairie externe : METIS [99] ou SCOTCH [32].

Une particularité du code YALES2, développé pour optimiser les performances sur des calculs impliquant un grand nombre de processeur est la double décomposition de domaine. En effet, chaque sous-domaine obtenu à l'issue du premier niveau de découpage du maillage est lui-même décomposé en plusieurs groupes de cellules. La taille de ces groupes de cellules est telle que les données qu'ils contiennent est adaptée à la capacité de la mémoire cache des processeurs. Cette double décomposition de domaine est par ailleurs mise à profit pour optimiser les performances du solveur de Poisson. En effet ces groupes de cellules fournissent un maillage grossier, utilisé par les solveurs linéaires bi-niveaux tels que le PCG avec déflation. Le solveur fait donc intervenir deux types de communications, des communications externes correspondant au premier niveau de décomposition et gérés par des communications MPI ; et des communications internes, permettant les échanges entre les groupes de cellules au sein d'un processeur, qui ne sont pas concernées par les instructions MPI.

Dans le cas d'une simulation diphasique lagrangienne, la stratégie de découpage du maillage doit être adaptée. En effet, les particules n'étant pas nécessairement réparties de manière homogène dans le domaine, la répartition proposée précédemment conduit à un déséquilibre de charge entre les processeurs. Une solution consiste à rendre l'algorithme de décomposition sensible à la répartition des particules dans le domaine, et pas seulement au nombre de cellules fluides pour optimiser la décomposition. La librairie qui prend en charge la décomposition du maillage réalise donc un partitionnement de graphe à double contrainte.

Chapitre 4

Development of a methodology for the extraction of large-scale structures in swirling flows

*Contrairement au reste du manuscrit, ce chapitre est rédigé en anglais car il est en grande partie issu d'un article récemment accepté pour publication dans le journal international *Physics of Fluids*. Cet article est disponible en Annexe A.*

Ce chapitre présente la méthode d'extraction des grandes structures tourbillonnaires développée durant la thèse. Une méthode de filtrage d'ordre élevé, permettant une séparation d'échelle nette, et étant applicable sur des maillages non-structurés a été implémentée et parallélisée. Plusieurs tests de validation de ces filtres d'ordre élevé sont également présentés. Puis cette méthode a été appliquée au brûleur semi-industriel PRECCINSTA afin de démontrer son potentiel pour l'extraction des grandes structures dans ce type d'écoulement et notamment d'une instabilité hydrodynamique caractéristique des écoulements swirlés : le Precessing Vortex Core. Enfin, un outil permettant d'isoler le PVC et d'en extraire le squelette est présenté.

Sommaire

4.1	Introduction to massively parallel simulations and post-processing of "Big Data"	102
4.2	Large-scale structures identification methods	103
4.2.1	Vortex identification in turbulent flows	103
4.2.2	Modal methods : POD, DMD	106
4.2.3	Filtering	111
4.2.4	High-order implicit filters	114
4.3	Derivation and implementation of high-order filters on unstructured grids	116
4.3.1	Formulation of the high-order filters on 3D unstructured grids	116
4.3.2	Solving of the linear system	117
4.3.3	Factorization of the linear system	120
4.4	Application of the filters to canonical flows	120
4.4.1	1D test cases	120
4.4.2	Two-dimensional Taylor vortices	122
4.4.3	Three-dimensional Homogeneous Isotropic Turbulence	125
4.4.4	Turbulent plane jet	127

4.5	Application of the filters to tubulent flows in a semi-industrial burner	131
4.5.1	Description of the burner	131
4.5.2	Extraction of the PVC on different meshes	132
4.6	Performances of the filtering process	135
4.6.1	Performances on a 3D HIT	135
4.6.2	Performances on the PRECCINSTA burner	135
4.6.3	Conclusions on the computational cost of high-order filters	136
4.7	Topology analysis of the Precessing Vortex Core	136
4.7.1	Isolation of the Precessing Vortex Core	136
4.7.2	PVC centerline reconstruction	138
4.8	Conclusions on the filtering methodology and perspectives	144

4.1 Introduction to massively parallel simulations and post-processing of "Big Data"

Large-Eddy Simulation and Direct Numerical Simulation are increasingly attractive approaches for the modeling of turbulent flows due to the steady development of massively parallel super-computers. The exponential improvement of computer performances was studied in 1965 by Gordon E. Moore, co-founder of the Intel Corporation, whose observations are summarized by the so-called "Moore's law". It states that the number of transistors in a dense integrated circuit doubles approximately every two years, which means that processor speed, or overall processing power for computers doubles every two years. This law is illustrated in Fig. 4.1. So far, his prediction has proven to be accurate over the history of computing hardware, partly because it is used in the semiconductor industry to guide long-term planning and to set targets for research and development.

The increase in CPU power is a strong driving mechanism for CFD because it enables to improve the fidelity of the simulations by increasing the mesh resolution or the simulation physical time, or by adding more physics. As a result, large scale simulations with meshes up to several billion cells are currently performed on massively parallel machines using thousands of processors. The analysis of these billion-cell simulations is very challenging because it requires to handle a large amount of data, and traditional data processing tools have to be redesigned in order to cope with this amount of data. This issue, which is shared with many other scientific domains, is often referred to as the "big data" challenge. The challenges associated with the big data include analysis, sharing, storage, transfer, and visualization. Data partitioning, data ordering, parallel processing are some examples of technical solutions generally used to overcome these problems. There is therefore a strong convergence of the techniques implemented in parallel Navier-Stokes solvers and the "big data" post-processing tools, and some effort must be made to develop new tools to post-process and analyze large scales simulation.

This chapter is dedicated to the development of a method for large scale structures extraction, that becomes very challenging when dealing with highly refined meshes. These high-fidelity simulations provide solutions that contain a wide range of length-scales, ensuring a good description of the physics, but making it difficult to extract relevant information among the large amount of data it generates. First, the common tools for coherent structures identification are presented and compared. Then, high-order filtering is introduced as a well-suited tool to perform scale separation. The implementation of these high-order filters in the 3D unstructured LES solver YALES2 is detailed and several test cases for the evaluation of these filters are presented. The last section of the chapter is devoted to the results obtained

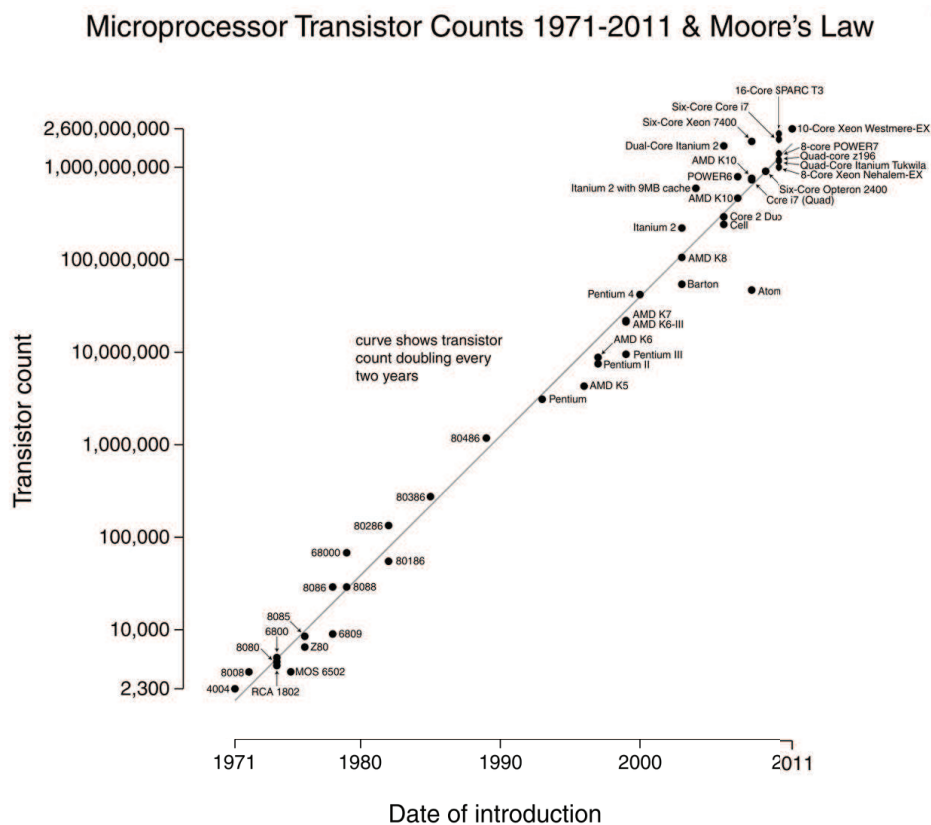


FIGURE 4.1 – Illustration of the Moore's law (solid line), and CPU transistors counts plotted against their year of introduction

when applying high-order filters combined with level set techniques to a complex turbulent swirling jet flow.

4.2 Large-scale structures identification methods

4.2.1 Vortex identification in turbulent flows

Beside the difficulties related to highly resolved meshes, the definition of a criterion for vortex identification in turbulent flows is not trivial, and requires to define precisely the concept of vortex as reveals the extensive literature from the last decades addressing this issue.

A first intuitive definition of a vortex core is based on the fact that in a vortex, the pressure tends to decrease on the axis, because of the centrifugal force [104]. However, it was demonstrated that a low-pressure iso-surface is not a suitable tool for vortex identification since the presence of a local pressure minimum is neither a necessary condition for the existence of a vortex core (the swirl can be balanced by viscous forces rather than pressure forces for example), nor a sufficient condition (pressure minimum can be found in flows that does not involve swirl) [95].

Another intuitive definition of a vortex is a tube delimited by circular closed streamlines [124], but this representation is limited since the streamlines are highly deformed when the vortex is convected or in the case of vortices interaction [79].

Iso-surfaces of high vorticity are another immediate candidate for vortex core identification [196],

but this criterion does not distinguish if the vorticity is caused by the background shear or by actual swirl motion. This can be a problem especially close to the walls, where the flow is highly sheared [95].

Later, Chong *et al.* [33] proposed another criterion based on the velocity gradient tensor $\nabla \mathbf{u}$. They state that the local streamline pattern around a point, in a reference frame moving with the point, is related to the eigenvalues of the velocity gradient tensor at this point. They define a vortex as a region where two eigenvalues of the velocity gradient tensor are complex. This condition is satisfied when the discriminant of the characteristic cubic polynomial of the tensor, or Δ -criterion is positive. Zhou *et al.* [230] extended this criterion by showing that the swirl intensity is related to the imaginary part of the complex eigenvalues of $\nabla \mathbf{u}$. Under this condition, $\nabla \mathbf{u}$ has one real eigenvalue λ_r and two conjugate complex eigenvalues $\lambda_{cr} \pm i\lambda_{ci}$. The swirling strength is defined as λ_{ci} and is identified as a measure of the rotation rate. Chakraborty *et al.* [28] proposed an enhancement of the swirling strength criterion by using the ratio $\lambda_{cr}/\lambda_{ci}$ to quantify the degree to which the fluid is locally spiraling. This ratio, referred to as the inverse spiraling compactness, takes positive values when the fluid particles are spiraling away from the center, and negative values in the case of inward spiraling.

Another criterion based on the velocity gradient tensor proposed by Hunt *et al.* [92] is the Q-criterion, named after the second invariant of this tensor :

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) , \quad (4.1)$$

where Ω_{ij} and S_{ij} are respectively the antisymmetric part and symmetric part of *boldsymbol* $\nabla \mathbf{u}$:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ and } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) . \quad (4.2)$$

This criterion compares locally the rotation rate to the shear rate. The presence of a vortex implies large positive values of the Q-criterion. Vortices are therefore defined as regions of positive Q-criterion, i.e where the vorticity magnitude is higher than the strain rate, with the additional condition of low pressure. Most of the time, this second condition is assumed satisfied if $Q > 0$ [95, 45].

Jeong and Hussain [95] proposed another criterion starting from the idea that the presence of a vortex core is correlated to a pressure minimum. They form the equation for the Hessian of pressure by taking the gradient of the Navier-Stokes equation, and discard the terms due to vorticity transport, irrotational straining, and viscous effects and they are left with :

$$-\frac{1}{\rho} (\nabla^2 P) = \Omega^2 + \mathbf{S}^2 \quad (4.3)$$

From the equation above, they show that a pressure minimum occurs when two of the eigenvalues of the $\Omega^2 + \mathbf{S}^2$ tensor are negative. This criterion is summarized as $\lambda_2 < 0$, where λ_2 is the intermediate eigenvalue of this tensor. By taking the trace of Eq. 4.3, the classical relation $\Delta P = 2\rho Q$, where ρ is the fluid density, can be recovered. Whereas the Q-criterion looks for the excess of rotation over the strain rate in all spatial directions, the λ_2 criterion measures it only in a specific plane [28].

Several studies [151, 45] have shown that iso-surfaces of Q-criterion and λ_2 -criterion give very similar results, provided that equivalent thresholds are used (see Fig. 4.2). Furthermore, relations between the different criteria were demonstrated by Chakraborty *et al.* [28].

The criterion preferentially used in the present study is the Q-criterion, which is related to the Laplacian of the pressure field in incompressible flows. For homogeneous isotropic turbulence, the scaling power of the Q-criterion with the wave-number κ is larger than unity [140]. As a result, the Q-criterion exhibits larger values for small vortices than for big vortices. This issue is particularly annoying in well

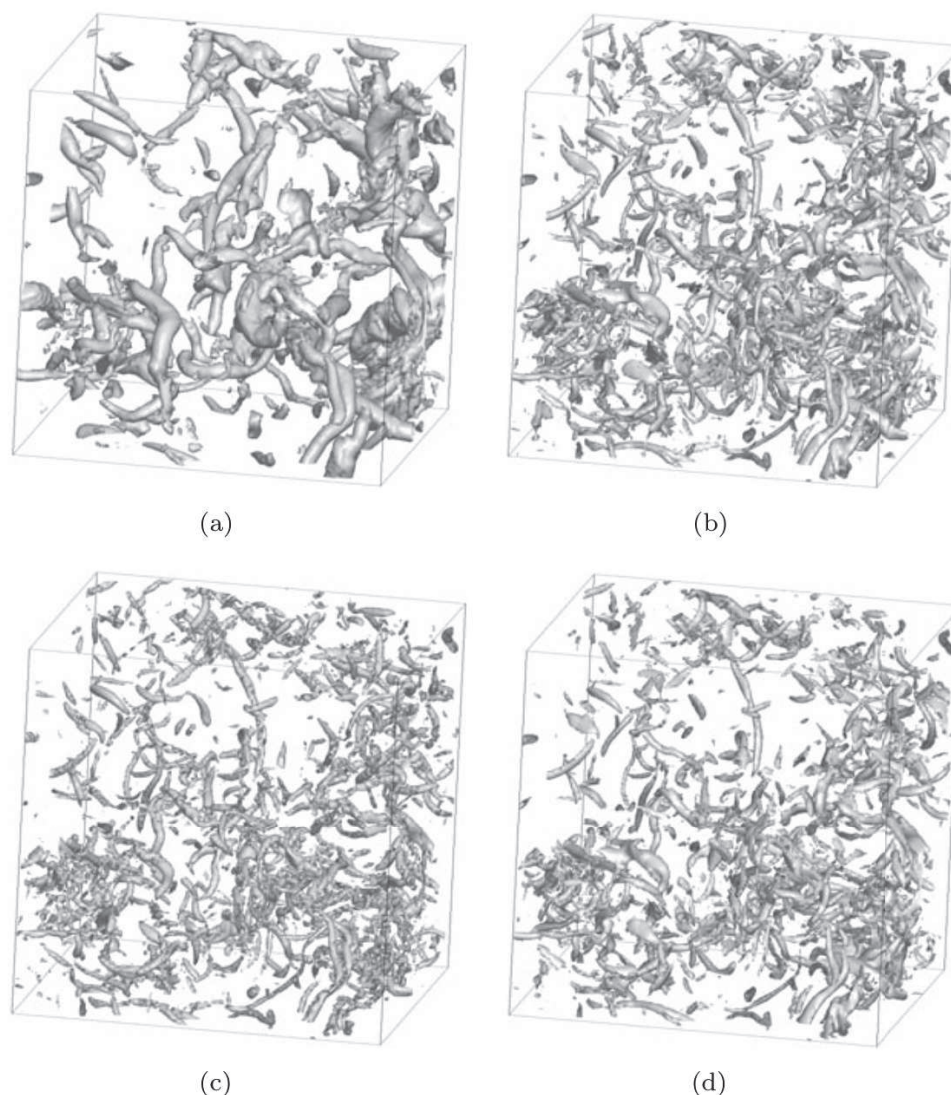


FIGURE 4.2 – Comparison of vortex identification methods in homogeneous isotropic turbulence : Pressure iso-surface (a), Vorticity iso-surface (b) , λ_2 isosurface (c), Q-criterion isosurface (d) [45]

refined simulations that feature a large range of turbulent scales. In these simulations, the small vortices completely mask the large vortices when looking at surfaces of Q-criterion iso-values.

This problem is illustrated here in the simulation of a semi-industrial swirl burner operated in the PRECCINSTA European project. As introduced in Chapter 2, in this swirl burner, large recirculation zones are formed in order to stabilize a lean premixed air/methane flame, and the swirl motion generates a large coherent vortex called the Precessing Vortex Core (PVC).

Q-criterion has already been used to visualize the PVC on coarse grids [136] but an issue appears for highly refined simulations. This issue is illustrated in Fig. 4.3. A Q-criterion iso-surface is used to visualise the PVC. The method performs well on the coarse grid but appears to be inefficient on refined grids. A low Q-criterion threshold must be chosen to capture the PVC since it is a large scale vortex compared to the smaller resolved scales. But the Q-criterion of the smallest vortices is larger than the one of the large coherent structures because the smallest vortices have a greater velocity gradient. As a result, the Q-criterion of the smallest vortices completely masks the one of the large scales. When choosing

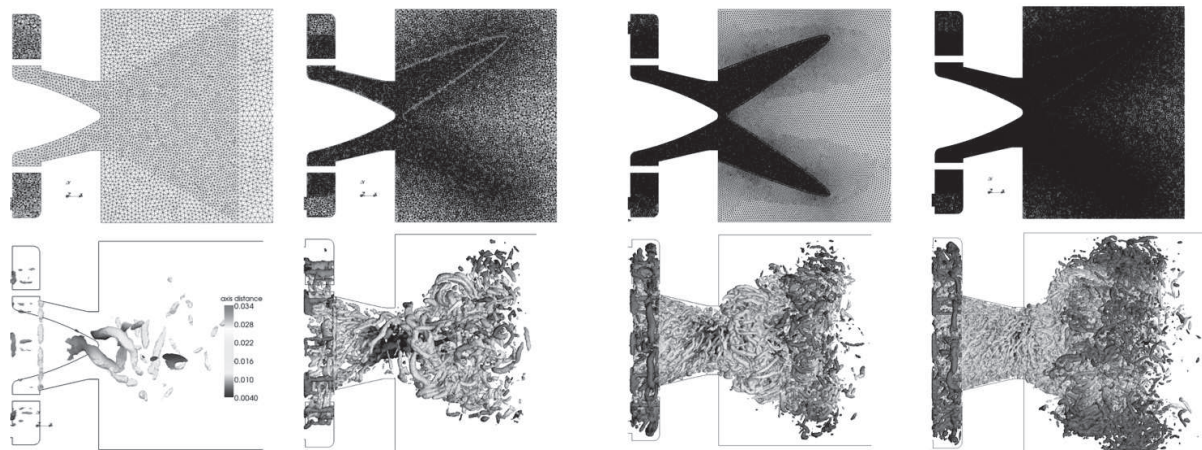


FIGURE 4.3 – Q-criterion isocontour $Q = 0.32 \times 10^8 s^{-2}$ on 4 meshes 1.7 million cells (first column), 14 million cells (second column), 41 million cells (third column) and 110 million cells (fourth column)

a higher threshold, only the smaller vortices can be revealed. The Q-criterion is a good candidate for vortices extraction but it is limited to the visualization of vortices of characteristic length-scale close the smallest scales resolved on the mesh. To circumvent the Q-criterion scaling issue, it is mandatory to develop numerical techniques able to perform scale separation of the different coherent structures.

4.2.2 Modal methods : POD, DMD

The visualization of large turbulent eddies may be achieved using Proper Orthogonal Decomposition (POD) [9] or Dynamic Mode Decomposition (DMD) [168]. The main goal in this type of methods is the extraction of large-scale coherent motion from a given data set. The starting point is a series of N velocity vector fields $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_N\}$, measured at M spatial positions. The N snapshots are assembled columnwise in a $M \times N$ matrix :

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_N] \quad (4.4)$$

The objective is to decompose this matrix as illustrated in Fig. 4.4. The decomposition is generally not unique, but imposing some constraints on the modes will lead to a final decomposition with specific properties.

4.2.2.1 Proper Orthogonal Decomposition

Proper Orthogonal Decomposition is a method based on the statistical treatment of data, aiming at characterizing the flow dynamics and at identifying dominant modes in the flows by a modal analysis. This method, introduced in 1970 by Lumley [125], was initially intended for the analysis of experimental data, but has been demonstrated as a powerful tool to study turbulent flows. The basic principles of this method are presented here, a more detailed description is available in the review of Berkooz [9]. Given a data set of N snapshot, measured at M spatial positions, the objective of POD is to represent the variables (pressure, velocity) as a series of modes built to be orthogonal functions obtained by minimizing the error associated to a projection operator. This is a particular case of the general decomposition introduced in Fig. 4.4, the orthogonality constraint ensures to obtain uncorrelated modes.

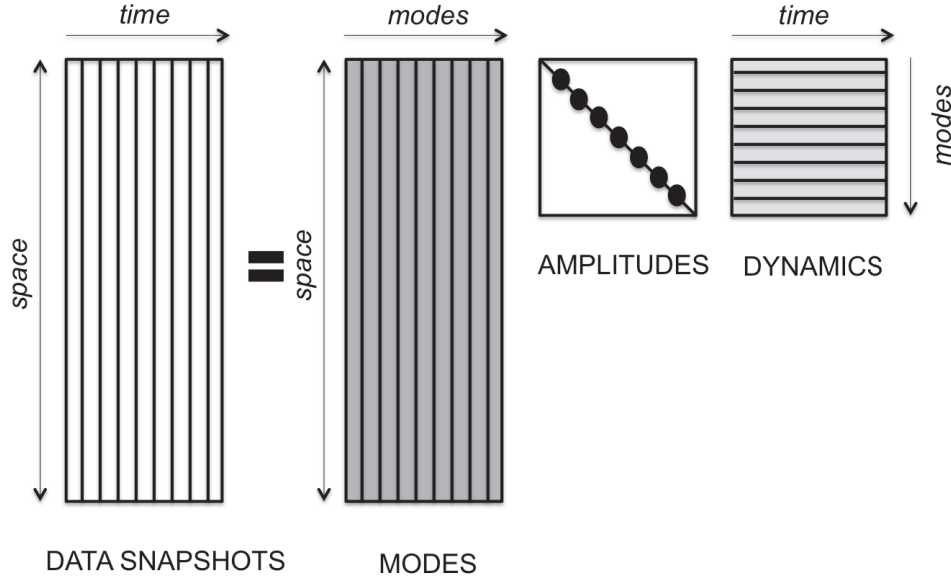


FIGURE 4.4 – Principle of modal decomposition, from [178]

The velocity is decomposed into a mean and a fluctuating part :

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}_l) = \bar{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}_l) + \mathbf{u}'_i(\mathbf{x}_l), \quad l \in [1; M] \text{ and } i \in [1; N]. \quad (4.5)$$

The objective of POD analysis is to determine the set of functions ψ_j ($j \in [1; N]$), called POD modes, which best represent the fluctuating part of the velocity fluctuations \mathbf{u}'_i . The decomposition of \mathbf{u}'_i reads :

$$\mathbf{u}'_i(\mathbf{x}_l) = \sum_{j=1}^N a_{ij} \Psi_j(\mathbf{x}_l), \quad i \in [1; N], j \in [1; N] \text{ and } l \in [1; M]. \quad (4.6)$$

The mode coefficients, or amplitude, a_{ij} , is the projection of the velocity field \mathbf{u}'_i on mode Ψ_j :

$$a_{ij} = \langle \mathbf{u}'_i, \Psi_j \rangle, \quad i \in [1; N] \text{ and } j \in [1; N], \quad (4.7)$$

where the angled brackets denote spatial integration :

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (4.8)$$

By construction, the POD modes form an orthonormal basis :

$$\langle \Psi_i \cdot \Psi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i \in [1; N] \text{ and } j \in [1; N]. \quad (4.9)$$

The determination of POD modes leads to an eigenvalue problem for a matrix of size $M \times M$ which is directly solved in the original work of Lumley [125]. However, numerical simulation typically provide data fields with several millions of spatial points, and the direct solution is computationally extremely expensive. On the other hand, the number of temporal snapshots is often significantly lower : $N \ll M$. In that case, the POD modes can be determined more efficiently and generally in good approximation by the method of snapshots introduced by Sirovich [193]. The POD modes are determined from the eigenvalues λ_j and eigenvectors \mathbf{v}_j of the $N \times N$ correlation matrix K_{ij} :

$$K_{ij} = \frac{1}{N} \langle \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}'_j \rangle \quad i \in [1; N] \text{ and } j \in [1; N]. \quad (4.10)$$

The POD modes and their coefficients are then given by :

$$\Psi_j(\mathbf{x}_l) = \frac{1}{\lambda_j N} \sum_{i=1}^N a_{ij} \mathbf{u}'_i(\mathbf{x}_l) \text{ with } a_{ij} = v_{ij} \sqrt{\lambda_j N}, \quad i \in [1; N], j \in [1; N] \text{ and } l \in [1; M]. \quad (4.11)$$

Physically, the eigenvalues λ_j can be interpreted as the contribution of mode j to the total fluctuating kinetic energy :

$$E \propto \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}'_i \rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i. \quad (4.12)$$

The POD extracts an orthogonal basis which is sorted with respect to the energy contained in each mode, the method is optimal with respect to kinetic energy for low-order representation of the field. The expansion of the velocity fluctuation at order R is defined as :

$$\mathbf{u}'_i^{(R)}(\mathbf{x}_l) = \sum_{j=1}^R a_{ij} \Psi_j(\mathbf{x}_l) \quad i \in [1; N], j \in [1; N] \text{ and } l \in [1; M]. \quad (4.13)$$

The first modes represent the most dominant unsteady flow structures.

This method was applied to an experimental swirled burner. Thanks to the analysis of the first modes coefficients, the authors were able to extract the phase angle of the periodic vortex motion, and to perform phase-averaging of the flow in a streamwise plane. As illustrated in Fig. 4.5, they used the phase angle as an azimuthal coordinate to reconstruct the 3D structure of the PVC for the 2D data [200].

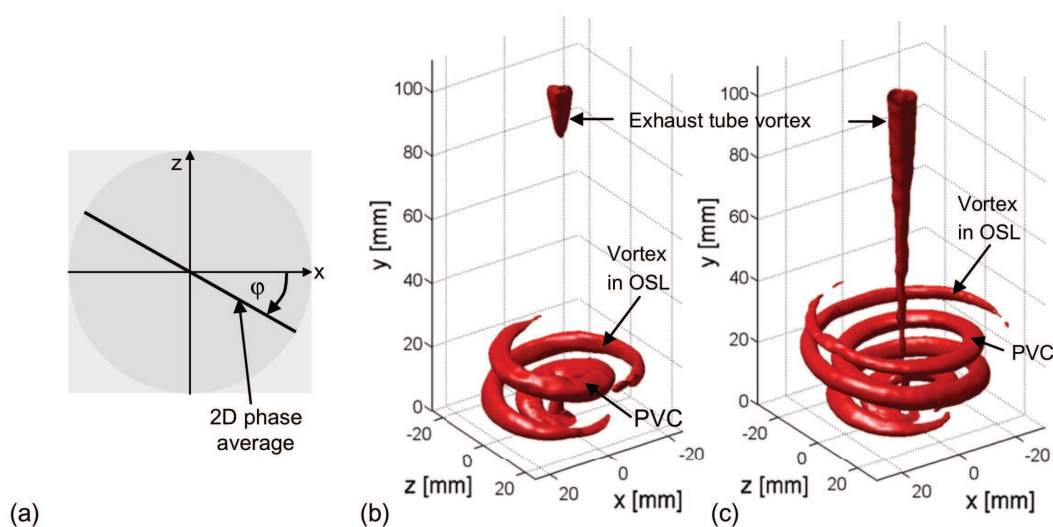


FIGURE 4.5 – 3D reconstruction of the PVC in an experimental swirled burner [200]

Another application of POD for the analysis of swirled flows is presented in the work of Sanjose [173]. As illustrated in Fig. 4.6, POD analysis of the pressure fluctuations enables to identify the PVC as the second mode. POD on the liquid volume fraction reveals that the characteristic frequency of the first mode matches the PVC frequency, and the visualization of these modes shows that the spray is correlated to the PVC and follows its precessing movement

The objective of this method is to determine the most energetic structures by diagonalizing the spatial correlation matrix computed from the snapshots. Two major drawbacks are commonly acknowledged : energy considerations may not be the best way to rank the flow structures, and due to the use of second-order statistics as a basis for the decomposition, valuable information is lost.

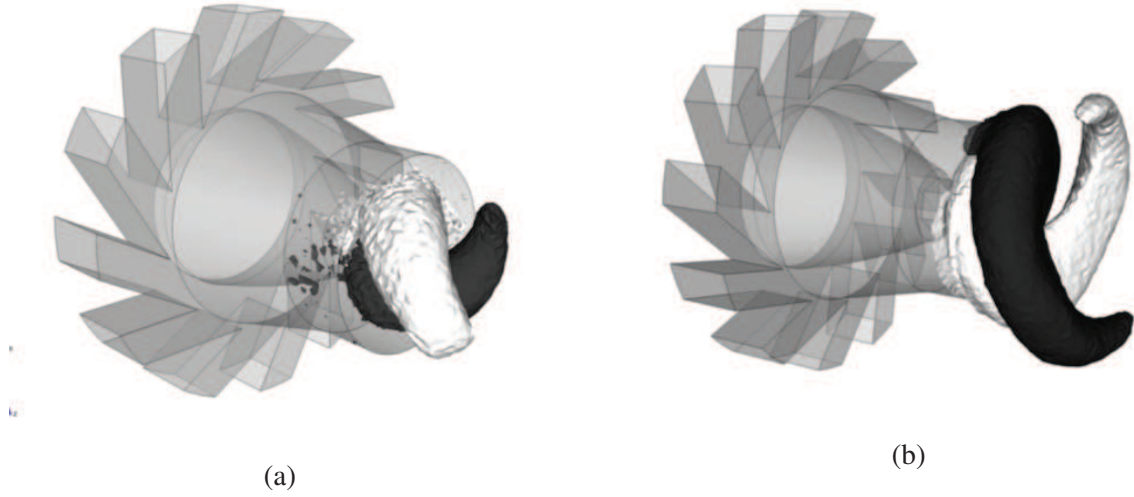


FIGURE 4.6 – Proper Orthogonal Decomposition of the fluctuations of pressure (a) and of liquid volume fraction (b). The structure is displayed with isosurfaces of maximal (black) and minimal (white) mode amplitude [173]

4.2.2.2 Dynamic Modes Decomposition

The objective of the DMD method, introduced by Rowley *et al.* [168], is to extract the temporal evolution of spatial structures, from the given snapshot sequence. A temporal dynamics consisting of single frequencies is assumed. The description of the full algorithm is detailed in the work of Schmidt [179].

The method assumes the existence of a linear operator \mathbf{B} that connects the flow field \mathbf{u}_i to the subsequent flow field \mathbf{u}_{i+1} :

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{u}_i . \quad (4.14)$$

where \mathbf{B} is approximately the same over the full sampling interval $[1, N]$. From this expression, the objective is the extraction of the dynamic characteristics (eigenvalues, eigenvectors, energy amplification) of the dynamical process described by \mathbf{B} based on the sequence \mathbf{U} .

The series of flow fields can be written as the following sequence :

$$\mathbf{U}_1^N = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_N\} = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{B}\mathbf{u}_1, \mathbf{B}^2\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{B}^{N-1}\mathbf{u}_1\} . \quad (4.15)$$

The resulting vectors are a basis of the Krylov subspace. From Eq. 4.14, it follows :

$$\mathbf{B}\mathbf{U}_1^{N-1} = \mathbf{U}_2^N , \quad (4.16)$$

which can be expressed, using the properties of Krylov spaces [179] :

$$\mathbf{B}\mathbf{U}_1^{N-1} = \mathbf{U}_2^N \approx \mathbf{U}_1^{N-1}\mathbf{M} . \quad (4.17)$$

The matrix \mathbf{M} is a companion matrix that contains the dynamic information represented in the data sequence :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & & & a_1 \\ 1 & 0 & & a_2 \\ & \ddots & \ddots & \dots \\ & & 1 & 0 & a_{N-2} \\ & & & 1 & a_{N-1} \end{pmatrix} . \quad (4.18)$$

The subdiagonal entries reflect the fact that, by design, the vector in the i -th column of \mathbf{U}_1^{N-1} is identical to the vector in the $(i+1)$ -th column of \mathbf{U}_2^N for $i = 1, \dots, N-1$. The only unknowns in \mathbf{M} are the coefficients a_1, a_2, \dots, a_{N-1} which constitute the $(N-1)$ components of the linear representation of the last snapshot \mathbf{u}_N in terms of the previous samples $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_{N-1}\}$, and are computed by solving a least-square problem. The eigenvalues of \mathbf{M} approximate a subset of the eigenvalues of \mathbf{B} and contain the dynamics information represented in the data sequence.

The next step consists in solving the eigenvalue problem :

$$\mathbf{M}\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i \quad \text{with} \quad i = 1 \dots N-1. \quad (4.19)$$

The eigenvectors of \mathbf{S} represent the corresponding spatial structure of the modes, expressed in the snapshot basis. The DMD modes, Ψ_i , are obtained using the following expression :

$$\Psi_i = \mathbf{U}_1^{N-1}\mathbf{v}_i. \quad (4.20)$$

The matrix \mathbf{M} being a companion matrix, it can be diagonalized with a Vandermonde matrix \mathbf{C} [168] :

$$\mathbf{M} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{C}, \quad (4.21)$$

where \mathbf{C} is the matrix obtained by assembling columnwise the eigenvectors of \mathbf{M} . A Vandermonde matrix has the following form :

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 & \cdots \\ 1 & z_2 & z_2^2 & \cdots \\ 1 & z_3 & z_3^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & z_{N-1} & z_{N-1}^2 & \cdots \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad z_l = \exp^{i\omega_l\Delta t} \quad (4.22)$$

where each line describes a harmonic motion. From this decomposition, Eq. 4.17 can be written :

$$\mathbf{U}_2^N = \mathbf{U}_1^{N-1}\mathbf{M} = \mathbf{U}_1^{N-1}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{C} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Lambda}\mathbf{C}, \quad (4.23)$$

where $\mathbf{\Phi}$ is the matrix obtained by assembling the DMD modes defined in Eq. 4.20. In terms of the decomposition described in Fig. 4.4, the constraint imposed here is that the temporal evolution of each DMD mode consists of single frequencies. In contrast to the Proper Orthogonal Decomposition where a spatial orthogonality of the modes is enforced, the dynamic mode decomposition aims at an orthogonality in time (by identifying pure frequencies). The resulting DMD modes are in general non-orthogonal [180].

Both POD and DMD were applied on PIV data obtained on an experimental strongly swirling non-reactive jet [3]. Figure 4.7 compares the first two POD modes with the DMD modes of highest amplitude. Both methods successfully detects the presence of the PVC.

The major advantage of DMD, which is also shared by the POD method, relies on its ability to process subdomains : it enables to analyze data from a smaller part of the full domain, and to focus on smaller regions where dynamically interesting phenomena are expected. The downsampling also allows to treat only $2D$ slices for example, to reduce the amount of data to be stored.

Particular attention has to be paid on the temporal separation of the snapshots in the input data sequence. In order for the DMD to extract pertinent flow processes, these processes must be sampled at a sufficiently high frequency to ensure that the Nyquist-Shannon criterion is fulfilled [179].

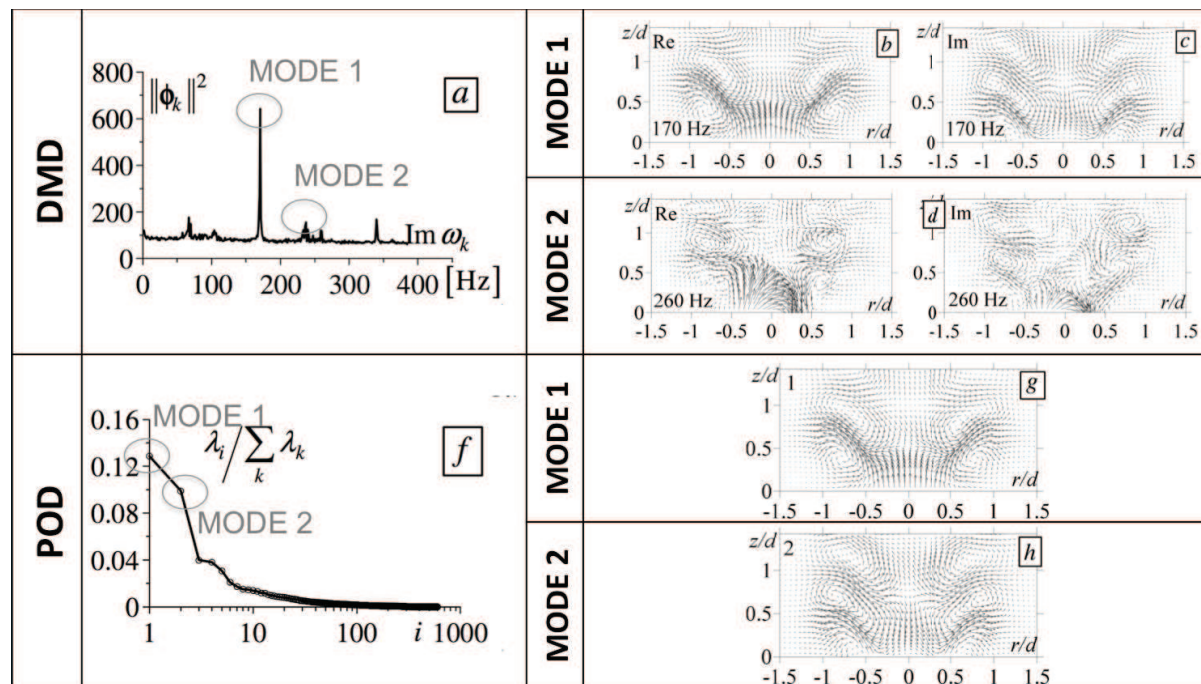


FIGURE 4.7 – Spectra of modes and spatial distributions of the most energetic ones for a non-reacting jet under strong forcing[3]

4.2.3 Filtering

These two modal methods are particularly interesting for the analysis of the dynamics of these large structures but both methods require the storage of a large amount of snapshots, which is presently intractable for billion-cell simulations without sub-sampling. Moreover, those methods usually require to perform some temporal or spatial filtering, to remove high-frequency motions and avoid aliasing issues.

Wavelet transform is another type of time-frequency analysis technique. The reviews of Farge [55] or Schneider and Vasilyev [184] describe in detail this method, and explain how it can be applied to fluid mechanics. Wavelet decomposition aims at finding, in a signal, structures that look like a reference function (mother wavelet), and a set of functions (child wavelets) obtained by shifting and scaling this mother wavelet. The data resulting of the correlation of these functions with the signal (wavelet coefficients) provides spatial and temporal information. The advantage of wavelet transform over classical Fourier transform is its ability to represent functions that have discontinuities and sharp peaks, and to accurately reconstruct non-periodic signals. Orthogonal wavelet decomposition was used to process turbulent flows and only keep the Gaussian part of the turbulent flow field [183, 56].

Another possible solution, developed during this thesis is to use low-pass filters able to extract turbulent scales of a given size [118, 140]. Performing this scale separation is quite challenging as it requires to extract features from a large amount of data distributed across a large number of processors. This operation also necessitates a good selectivity in order to leave the large-scales unaffected while damping all the smallest scales. High-order filters, which have better selectivity than low-order filters, are therefore good candidates for large-scale features extraction.

Various high-order filters have been derived in the past : in the 70s, Shapiro proposed explicit filters up to order 16 [187, 188]. Recursive filters with high selectivity were also widely studied [145, 87, 23].

Raymond *et al.* in the 90s [160, 161] designed implicit high-order filters for the analysis of wea-

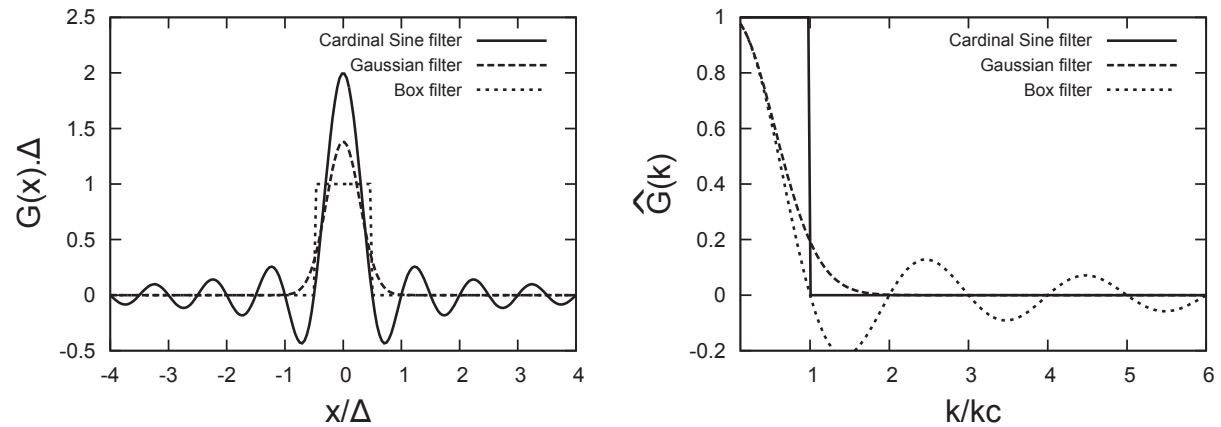


FIGURE 4.8 – Representation of the common filters in the physical space (left) and spectral space (right). The scales are normalized by the filter width where appropriate.

ther data. Their implicit formulation is particularly interesting as it enables to obtain high-order filters from low-order finite-difference schemes on compact stencils. This formulation also makes the boundary conditions issues easier to deal with.

4.2.3.1 Spatial filtering process

For a one-dimensional infinite domain, the filtering of a scalar $\varphi(x)$ reads [156, 171] :

$$\bar{\varphi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(y) G_{\Delta}(y-x) dy. \quad (4.24)$$

$\bar{\varphi}$ is the filtered variable and G_{Δ} is the convolution kernel with a filter size equal to Δ . Usual filters used in the derivation of Large-Eddy Simulation models [156] are summarized in Table 4.1 as well as their Fourier transform. In this table, κ is the wave-number and κ_c is the cut-off wave-number defined as $\kappa_c = 2\pi/\Delta$. The expression of the Gaussian filter is chosen to ensure it has the same second-order moment than the Box filter.

Name	Physical space G_{Δ}	Wavenumber space \hat{G}_{Δ}
Box	$\frac{1}{\Delta} H\left(\left \frac{1}{2} - \frac{x}{\Delta}\right \right)$	$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\kappa\Delta\right)}{\frac{1}{2}\kappa\Delta}$
Gaussian	$\left(\frac{6}{\pi\Delta^2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{6x^2}{\Delta^2}\right)$	$\exp\left(-\frac{\kappa^2\Delta^2}{24}\right)$
Cardinal Sine	$\frac{\sin(2\pi x/\Delta)}{\pi x}$	$H\left(1 - \frac{\kappa}{\kappa_c}\right)$

TABLE 4.1 – Common filters and associated Fourier transform

The filtering operation described in Eq. 4.24 is a convolution product, and can be written in the spectral space as

$$\hat{\bar{\varphi}}(\kappa) = \hat{G}_{\Delta}(\kappa) \hat{\varphi}(\kappa), \quad (4.25)$$

where $\widehat{\varphi}$ is the Fourier transform of φ and $\widehat{\overline{\varphi}}$ is the Fourier transform of $\overline{\varphi}$. The convolution kernel $\widehat{G}_\Delta(\kappa)$ in the spectral space represents the damping of each monochromatic wave of the signal as a function of the wave-number. The convolution kernel of the Gaussian filter, Box filter and Cardinal Sine filter are plotted in the physical and spectral domains in Fig. 4.8.

Convolution can be achieved in the physical space by discretizing the kernel over the mesh and integrating with usual methods. Alternatively, this convolution may be performed based on the expansion in Taylor series of φ , in order to write $\overline{\varphi}$ as a sum of moments [138, 100, 172]

$$\varphi(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \frac{d^j \varphi}{dx^j} (y-x)^j. \quad (4.26)$$

The filtered scalar $\overline{\varphi}$ can then be written as follows :

$$\overline{\varphi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \frac{d^j \varphi}{dx^j} (y-x)^j G_\Delta(y-x) dy. \quad (4.27)$$

After the variable change $z = y - x$, the filtering operation becomes

$$\overline{\varphi}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{d^j \varphi}{dx^j} \mathcal{M}_j \quad \text{with} \quad \mathcal{M}_j = \frac{1}{j!} \int_{-\infty}^{+\infty} z^j G_\Delta(z) dz. \quad (4.28)$$

Equation 4.28 suggests that this Taylor expansion exists only if G_Δ decreases towards infinity faster than any inverse power of z . As a result, only filters that are sufficiently rapidly decreasing can be defined through their moments and the Taylor series expansion cannot be performed for the cardinal sine filter for example.

For a Gaussian filter, all moments \mathcal{M}_j can be calculated analytically. Since the filter is symmetric, all the odd moments are equal to zero and the even moments are equal to :

$$\mathcal{M}_{2n} = \left(\frac{\Delta^2}{24} \right)^n \frac{1}{n!}. \quad (4.29)$$

The first non-zero moment of Gaussian and Box filters is the second-order moment, indicating that they are second-order filters.

As already mentioned, the Cardinal Sine is not decreasing sufficiently fast toward zero at infinity and its moments can not be defined in the usual sense. On the other hand, the Cardinal Sine filter is the limit, for $n \rightarrow \infty$, of filters having their first n moments equal to zero. This indicates that this filter can be thought of as an infinite order filter.

4.2.3.2 Relation between selectivity and filter order

The selectivity of a filter can be defined as its ability to damp the smallest scales while not affecting the largest ones. The cardinal sine filter, which has a sharp transition at the cut-off wavenumber in the spectral space, has the best selectivity. On the other hand, the Gaussian filter removes part of the information before the cut-off – which should be avoided – and does not remove completely the sub-filter scale information, which is not good neither for large-scale structure extraction.

Designing selective low-pass filters requires a unity damping function at the neighborhood of zero wave-number, to ensure that the large structures associated with the smallest wave-numbers are not

affected by the filtering operation. Mathematically, this condition is satisfied if the successive derivatives of the damping function are equal to zero at zero wave-number [216],

$$\left. \frac{d^{2j}G(\kappa)}{d\kappa^{2j}} \right|_{\kappa=0} = 0, \text{ with } j = 1, 2, \dots \quad (4.30)$$

These successive derivatives for $k = 0$ may be related to the moments of the filter as shown hereafter. Applying a Fourier transform to Eq. 4.28 leads to

$$\widehat{\varphi}(\kappa) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \kappa^{2j} \widehat{\varphi}(\kappa) \mathcal{M}_{2j}. \quad (4.31)$$

Forming the ratio of the filtered to unfiltered variable enables to express $\widehat{G}(\kappa)$ as a function of the moments of $G(x)$

$$\widehat{G}(\kappa) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \kappa^{2j} \mathcal{M}_{2j}. \quad (4.32)$$

The derivative $d^{2n}\widehat{G}(\kappa)/d\kappa^{2n}$ is thus :

$$\frac{d^{2n}\widehat{G}(\kappa)}{d\kappa^{2n}} = (-1)^n (2n)! \mathcal{M}_{2n} + \sum_{j=n+1}^{\infty} \frac{(2j)!}{(2j-2n)!} (-1)^j \kappa^{2j-2n} \mathcal{M}_{2j}. \quad (4.33)$$

For $\kappa = 0$, the derivative of order $2n$ depends only on the moment of order $2n$:

$$\left. \frac{d^{2n}\widehat{G}(\kappa)}{d\kappa^{2n}} \right|_{\kappa=0} = (-1)^n (2n)! \mathcal{M}_{2n}. \quad (4.34)$$

This final expression shows that if the $2n$ -th moment of the filtering kernel is equal to zero, the $2n$ -th derivative of the Fourier transform of the filtering kernel is equal to zero at the neighborhood of $\kappa = 0$. A good selectivity requires a sharp slope near the cut-off wave-number to provide efficient scale separation, and a flat slope at the origin to leave the large-scale unaffected by the filtering. This flatness at the origin is directly linked to the order of the filter, as raised by Eq. 4.34.

The Gaussian filter is a second-order filter (the first non-zero moment of the Taylor series is the second-order moment), and is poorly suited to perform scale separation. The Cardinal Sine filter has an infinite order, meaning that all the derivatives are equal to zero at $\kappa = 0$, and has an excellent selectivity since it is discontinuous at the cut-off. High-order filters have a high number of zero derivatives at $\kappa = 0$, ensuring that the slope remains flat close to the origin, and the low wave-numbers are not affected much by the filtering.

4.2.4 High-order implicit filters

To remove small-scale structures of the flow without interfering with the largest ones, the filter has to be selective. As discussed in section 4.2.3.2, high-order filters provide better selective properties. The principle of the filters designed by Raymond *et al.* [160, 161] is to achieve high-order from compact finite-difference operators. In the present paper, the sine filter of arbitrary order is studied. The high-order implicit filter (HOF) of order $2q$ on a one-dimensional domain reads :

$$\varphi_i + \Delta x^{2q} \epsilon (-1)^q \mathbf{D}^q \overline{\varphi}_i = \varphi_i. \quad (4.35)$$

In this case, φ and $\bar{\varphi}$ are vectors representing the unfiltered and filtered variable discretized on the one-dimensional mesh, Δx the homogeneous grid spacing, ϵ a variable linked to the cut-off wave-number, and \mathbf{D} the second derivative operator defined as :

$$\mathbf{D} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

These filters may be analyzed in the complex Fourier space assuming a monochromatic signal $\varphi_i = \mathcal{A} \exp(i\kappa x_i)$, where \mathcal{A} is the amplitude, κ is the wave-number and x_j the position of the j -th mesh point. The filter response defined as the ratio of the filtered and unfiltered amplitudes \bar{A}/A is

$$\frac{\bar{A}}{\mathcal{A}}(\kappa) = \frac{1}{1 + 4^q \epsilon \sin^{2q}(\kappa \Delta x / 2)}. \quad (4.37)$$

The ϵ parameter enables to control the filter size. In order to write this parameter as a function of the filter width Δ , the cut-off wave-number $\kappa_c = 2\pi/\Delta$ is defined as the wave-number where the amplitude is damped of 50% by the filter, i.e. $\bar{A}/\mathcal{A}(\kappa_c) = 0.5$. This leads to the following value of the ϵ parameter

$$\epsilon = \frac{1}{4^q \sin^{2q}\left(\frac{\kappa_c \Delta x}{2}\right)}. \quad (4.38)$$

The high-order filter of order $2q$ with a cut-off wave-number $\kappa_c = 2\pi/\Delta$ is finally obtained from Eq. 4.35 and the ϵ parameter found above

$$\bar{\varphi}_i + (\beta \mathbf{D})^q \bar{\varphi}_i = \varphi_i \quad \text{with} \quad \beta = -\frac{\Delta x^2}{4 \sin^2(\kappa_c \Delta x / 2)}. \quad (4.39)$$

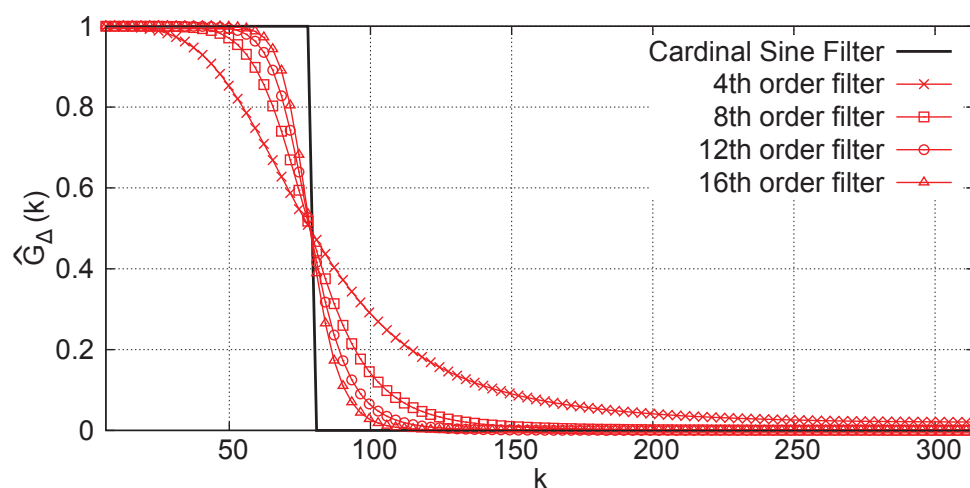


FIGURE 4.9 – Damping functions of high-order filters, for order 4, 8, 12 and 16, compared to Cardinal Sine filter

The damping function \bar{A}/A in the spectral space becomes

$$\frac{\bar{A}}{A} = \left(1 + \frac{\sin^{2q}(\kappa\Delta x/2)}{\sin^{2q}(\kappa_c\Delta x/2)} \right)^{-1}. \quad (4.40)$$

This damping function is plotted in Fig. 4.9 for various orders. Since the definition of this filter family ensures that the amplitude damping is 50% at the cut-off wave-number, all the curves intersect each other at the cut-off. The higher is the order, the sharper is the filter response. These filters show a good selectivity which is an essential property to extract structures of a given size from the flow.

The filter kernel $\widehat{G}(\kappa)$ can be approximated using the first terms of its Taylor series, at $k = 0$:

$$\widehat{G}(\kappa) = \left(1 + \frac{\sin^{2q}(\kappa\Delta x/2)}{\sin^{2q}(\kappa_c\Delta x/2)} \right)^{-1} = 1 - \kappa^{2q} \frac{(\Delta x/2)^{2q}}{\sin^{2q}(\kappa_c\Delta x/2)} + o(\kappa^{2q}) \quad (4.41)$$

By doing a term by term identification with Eq. 4.32, one finds that :

$$\widehat{G}(\kappa) = \mathcal{M}_0 + (-1)^q \kappa^{2q} \mathcal{M}_{2q} + o(\kappa^{2q}) \quad (4.42)$$

which gives

$$\mathcal{M}_0 = 1 \quad \text{and} \quad \mathcal{M}_{2q} = (-1)^{q+1} \frac{(\Delta x/2)^{2q}}{\sin^{2q}(\kappa_c\Delta x/2)} \quad (4.43)$$

The first moment is equal to one, ensuring that the normalization property of the filter is satisfied :

$$\int_{-\infty}^{\infty} G_{\Delta}(z) dz = 1. \quad (4.44)$$

As expected, the first non-zero moment of the filter of order $2q$ is \mathcal{M}_{2q} . According to Section 4.2.3.2, the selectivity of the filter increases with q .

4.3 Derivation and implementation of high-order filters on unstructured grids

The aim of the present work is to extract large-scale features in realistic geometries. The proposed methodology has to be as versatile as possible in terms of domain discretization and element type. In this section, high-order filters are derived for a finite-volume solver using unstructured grids.

4.3.1 Formulation of the high-order filters on 3D unstructured grids

A first part of the work consisted in the generalization of the high-order Raymond filters to 3D unstructured grids with non-uniform grid spacing, in order to implement them in the LES solver YALES2 [137]. In this case, the second-order derivative operator \mathbf{D} is defined as a node-centered Laplacian operator. In the finite-volume context, the Laplacian of the variable φ at node i is defined as the divergence of the gradient, applied to the nodal volume of node i , and can be expressed as the sum over the faces of the control volume \mathcal{V}_i , of the fluxes equal to $\nabla\varphi$:

$$(\mathbf{D}\varphi)_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \mathcal{P}_i} \frac{(\varphi_j - \varphi_i)}{\Delta_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot d\mathbf{A}_{ij}, \quad (4.45)$$

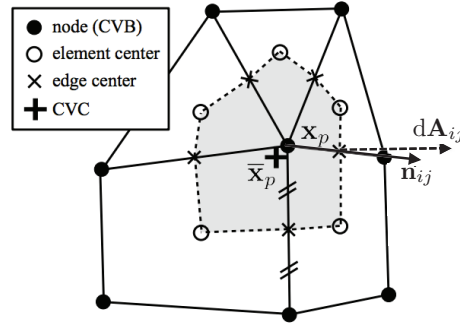


FIGURE 4.10 – Details on the node-centered Laplacian computation in YALES2

where \mathcal{N}_i is the set of nodes adjacent to i , V_i is the volume of the dual mesh element \mathcal{V}_i , dA_{ij} is the normal vector of the face of \mathcal{V}_i attributed to the pair (i, j) , \mathbf{n}_{ij} is a vector parallel to the direction between the two nodes of the pair (i, j) , and Δ_{ij} is the distance between i and j (see Fig. 4.10).

To ensure discrete conservative properties of the filter, the coefficient β is also written in a node centered form and is included in the Laplacian operator itself leading to a modified operator \mathbf{D}' defined as :

$$(\mathbf{D}'\varphi)_i = (\nabla \cdot \beta \nabla)\varphi_i \simeq \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} (\varphi_j - \varphi_i) \frac{\Delta_{ij}}{(-4) \sin^2(\kappa_c \Delta_{ij}/2)} \mathbf{n}_{ij} \cdot d\mathbf{A}_{ij}. \quad (4.46)$$

The high-order filtering operation can be written :

$$(\mathbf{I} + \mathbf{D}'^q)\bar{\varphi} = \varphi \quad (4.47)$$

where \mathbf{D}' is the modified symmetric Laplacian operator.

The computation of the filtered variable requires the inversion of a linear system written as follows :

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b} \quad \text{with} \quad \begin{cases} \mathbf{A} = (\mathbf{I} + \mathbf{D}'^q) \\ \mathbf{X} = \bar{\varphi} \\ \mathbf{b} = \varphi \end{cases} \quad (4.48)$$

The size of the matrix \mathbf{A} is $N_n \times N_n$, N_n being the number of grid points.

4.3.2 Solving of the linear system

The algorithm used to invert the linear system and to compute $\bar{\varphi}$ is a conjugate gradient, preconditioned by the inverse of the diagonal. An indicator of the speed of convergence of the algorithm is the condition number of the matrix \mathbf{A} [141], related to the eigenvalues of \mathbf{A} , λ_j :

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}) = \frac{\max|\lambda_j|}{\min|\lambda_j|}, \quad j = 1, \dots, N_n. \quad (4.49)$$

The estimation of the condition number requires the computation of the eigenvalues of \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} + \beta^q \mathbf{D}^q \quad \text{with} \quad \beta = \frac{\Delta x^2}{(-4) \sin^2(k_c \Delta x/2)}. \quad (4.50)$$

They can be computed from the eigenvalues of \mathbf{D} , which is the second-order derivative discrete operator. On a one-dimensional periodic homogeneous grid composed of N_n points, \mathbf{D} is a tridiagonal

$N_n \times N_n$ matrix :

$$\mathbf{D} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

Eigenvalues of \mathbf{D} can be expressed as follows [98] :

$$\lambda_{0,j} = \frac{-4}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{j\pi}{N_n} \right), \quad (4.52)$$

and the eigenvalues can be deduced from Eq. 4.52 and Eq. 4.50 :

$$\lambda_j = 1 + (\beta \lambda_{0,j})^q. \quad (4.53)$$

After recombining with the expressions of λ_0 and β , the j -th eigenvalue of \mathbf{A} can be written :

$$\lambda_j = 1 + \frac{\sin^{2q} \left(\frac{j\pi}{N} \right)}{\sin^{2q} \left(\frac{\kappa_c \Delta x}{2} \right)}. \quad (4.54)$$

The smallest eigenvalue is found for $j = N_n$:

$$\min |\lambda_j| = |\lambda_{N_n}| = 1. \quad (4.55)$$

If N_n is even, the largest eigenvalue is found for $j = N_n/2$:

$$\max |\lambda_j| = |\lambda_{N/2}| = 1 + \frac{1}{\sin^{2q} \left(\frac{\kappa_c \Delta x}{2} \right)}. \quad (4.56)$$

If N_n is odd, the largest eigenvalue is found for $j = (N_n + 1)/2$ and since :

$$\sin^{2q} \left(\frac{(N_n + 1)\pi}{2N_n} \right) < \sin^{2q} \left(\frac{\pi}{2} \right), \quad (4.57)$$

the expression in Eq. 4.56 is an upper limit for $\max |\lambda_k|$.

The final expression for $\kappa(A)$ is :

$$\mathcal{K}(A) = \frac{\max |\lambda_j|}{\min |\lambda_j|} = \frac{|\lambda_{N/2}|}{|\lambda_N|} = 1 + \frac{1}{\sin^{2q} \left(\frac{\kappa_c \Delta x}{2} \right)}. \quad (4.58)$$

The condition number $\mathcal{K}(A)$ is plotted as a function of the filter order and the filter width in Fig. 4.11. Condition number shows a high sensitivity to both parameters, and especially to the filter order.

In order to improve the convergence of the Preconditioned Conjugate Gradient (PCG), the quantity computed by the solver is not the filtered variable $\bar{\varphi}$ itself, but the difference between the filtered and unfiltered fields [160] :

$$(\mathbf{I} + \mathbf{D}^q)(\bar{\varphi} - \varphi) = -\mathbf{D}^q \varphi. \quad (4.59)$$

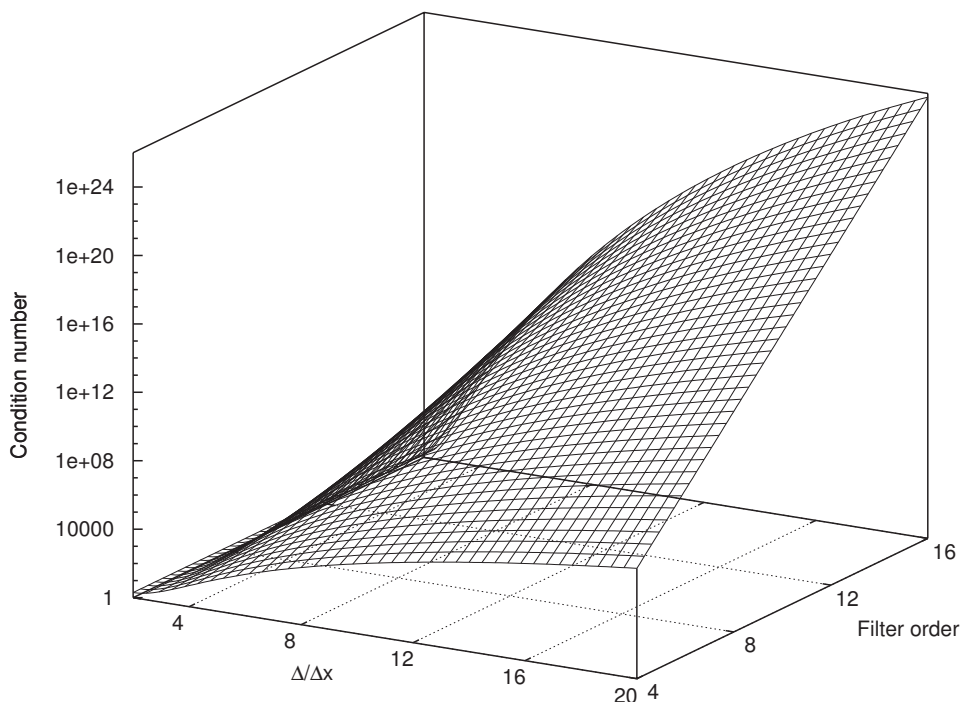


FIGURE 4.11 – Condition number of matrix \mathbf{A} , versus filter order and filter size.

Since the filtering operation does not affect the largest features of the flow, this difference doesn't contain any low wave-number components, which are the most costly to converge with a PCG. The system to be solved by the PCG becomes :

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b} \quad \text{with} \quad \begin{cases} \mathbf{A} = (\mathbf{I} + \mathbf{D}'^q) \\ \mathbf{X} = \bar{\varphi} - \varphi \\ \mathbf{b} = -\mathbf{D}'^q \varphi \end{cases} \quad (4.60)$$

The input parameters are the order of the filter and the filter size. On non-homogeneous grids, the ratio $\Delta/\Delta x$ is not homogeneous in space, leading to a non-homogeneous filter size. For this reason, the extraction of structures of a given length scale, requires that the filtering size is expressed as the actual physical size of the filter, not as the ratio $\Delta/\Delta x$. The disadvantage of this parameter is that on meshes with highly variable mesh size, the filtering size can become smaller than the largest cells, causing some problems in the convergence of the linear solver. In practice, since it would not make sense to filter with a size lower than the mesh resolution, the filter size is limited to prevent it from being lower than twice the local grid spacing.

4.3.3 Factorization of the linear system

To make this filter suitable for meshes of several billion cells, some work has been done to accelerate the convergence and improve the robustness of the solving. The matrix A can be written as the product of q complex matrices (polynomial factorization of the system, where α_j are the complex roots of the polynomial $1 + x^q$):

$$\mathbf{I} + \mathbf{D}'^q = \prod_{j=1}^q (\mathbf{I} + \alpha_j \mathbf{D}'). \quad (4.61)$$

This operation reduces the system to q systems with sparse matrices easier to invert. Each $N_n \times N_n$ complex symmetric matrix is then transformed into a $2N_n \times 2N_n$ real symmetric matrix that can be inverted with the PCG algorithm [66]. With this factorization, q linear system are inverted instead of one, but for each system the stencil of the operators is reduced, making the convergence easier. But on the other hand, the matrices to be inverted are twice larger in both directions. The resolution based on this factorization will be referred to as "first order polynomial" throughout this paper.

Another possible factorization, in the case where the order $2q$ is a multiple of 4, is obtained by gathering the conjugate complex roots to remain in the real space, leading to a factorization with second-order polynomials :

$$\prod_{j=1}^{q/2} (\mathbf{I} + 2\Re(\alpha_j) \mathbf{D}' + \mathbf{D}'^2) \bar{\varphi} = \varphi. \quad (4.62)$$

In that case, there are $q/2$ successive linear systems to invert.

The second-order polynomial factorization showed better convergence properties and was used in the applications presented in the following sections. The performances of the three approaches will be examined in detail later in the paper.

4.4 Application of the filters to canonical flows

To assess the proper behavior of the filter, some 1D test cases were performed, and compared to their analytical solution. Then the ability of the filter to isolate coherent structures of a given length has been tested on 2D and 3D canonical cases.

4.4.1 1D test cases

4.4.1.1 Dirac function

The convolution kernel in the physical space of this filter cannot be easily expressed analytically. A solution to approximate it is to filter a one-dimensional numerical signal which approximates a Dirac delta function.

The Dirac function was set to zero everywhere except in zero, where it takes the value $1/\Delta x$:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1/\Delta x, & |x| < \Delta x/2 \\ 0, & |x| > \Delta x/2 \end{cases} \quad (4.63)$$

Figure 4.12 shows the signal obtained after filtering the Dirac function with the HOF, compared to the analytical convolution kernel of the Gaussian filter and the Cardinal sine filter. High-order filters feature a behavior similar to the cardinal sine filter. As the filter order increases, the convolution kernel of the HOF gets closer and closer to the Cardinal Sine kernel.

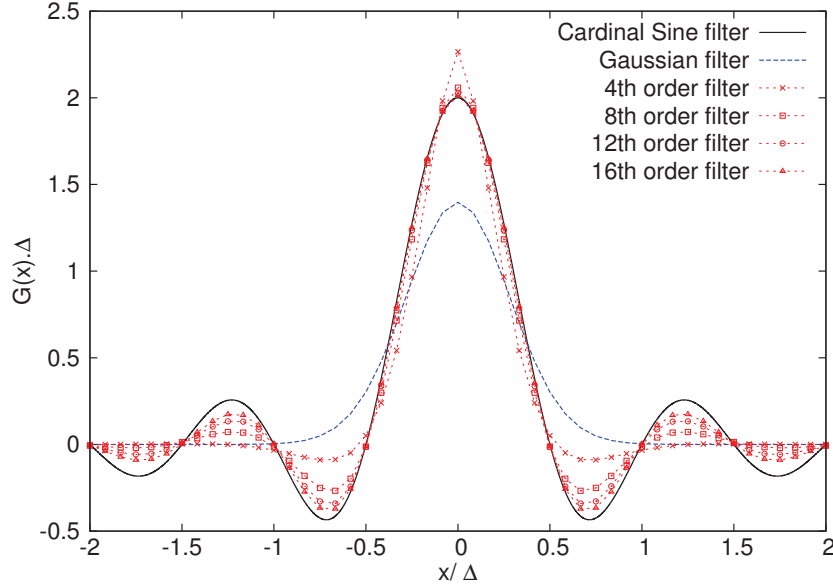


FIGURE 4.12 – Filtering of a Dirac function with high-order filters of various orders.

4.4.1.2 Sine function

Sine function of various wave length λ , defined as

$$\varphi(x) = \sin(2\pi\lambda x), \quad (4.64)$$

were filtered with a 12th order filter, with a size Δ . As the sine function is a monochromatic signal, the damping of the amplitude can be obtained directly from the damping function of the filter.

As plotted in Fig. 4.13, for a sine function of wave length $\lambda_1 = 5\Delta/6$, the amplitude of the filtered variable must be 0.9 times the amplitude of the original signal. If the wave length of the sine function is equal to the filter size, $\lambda_2 = \Delta$ the amplitude is reduced by half. And for a wave length $\lambda_3 = 5\Delta/4$, the amplitude is divided by 10.

The amplitude of the filtered waves (Fig. 4.14) are in perfect agreement with the damping function of the filter (Fig. 4.13).

4.4.1.3 1D signal with turbulence-like energy spectrum

In this test case, a scalar φ was defined on a one-dimensional grid. The energy density of the scalar in the Fourier space was modeled with a synthetic spectrum, and φ was built from this spectrum, as for a 3D Homogeneous Isotropic Turbulence [14]. The resulting one-dimensional scalar field is plotted in Fig. 4.15.

The energy spectrum of the filtered scalar $\bar{\varphi}$ is defined as follows :

$$\widehat{E}(\kappa) = \widehat{\bar{\varphi}}^*(\kappa) \cdot \widehat{\bar{\varphi}}(\kappa). \quad (4.65)$$

On the other hand, a theoretical energy spectrum can be obtained by multiplying the energy spectrum based on the unfiltered scalar field by the square of the convolution kernel of the filter in the spectral space :

$$\widehat{E}(\kappa)^{th} = (\widehat{G}(\kappa)\widehat{\varphi}(\kappa))^* (\widehat{G}(\kappa)\widehat{\varphi}(\kappa)) \quad (4.66)$$

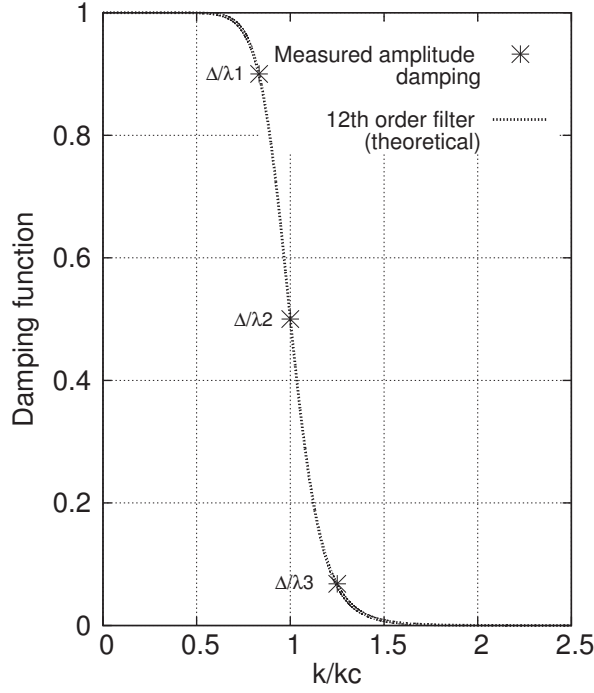


FIGURE 4.13 – Damping function of the filter, and expected damping of the amplitude for 3 sine functions of respective wave length $\lambda_1 = 5\Delta/6$, $\lambda_2 = \Delta$ and $\lambda_3 = 5\Delta/4$.

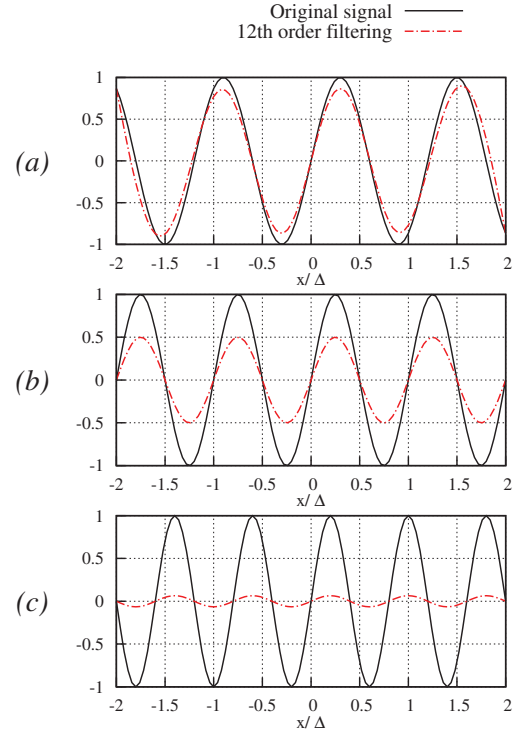


FIGURE 4.14 – Filtering of sine functions of wave length $\lambda_1 = 5\Delta/6$ (a), $\lambda_2 = \Delta$ (b), and $\lambda_3 = 5\Delta/4$ (c).

$$\widehat{E}(\kappa)^{th} = \widehat{\varphi}^*(\kappa)\widehat{G}(\kappa)^2\widehat{\varphi}(\kappa) \quad (4.67)$$

$$\widehat{E}(\kappa)^{th} = \widehat{\varphi}^*(\kappa)\widehat{\varphi}(\kappa)\widehat{G}(\kappa)^2 \quad (4.68)$$

$$\widehat{E}(\kappa)^{th} = \widehat{E}(\kappa).\widehat{G}(\kappa)^2 \quad (4.69)$$

The energy spectrum of the scalar $\widehat{\varphi}$ obtained after the filtering operation (Eq. 4.65) was compared to this theoretical solution (Eq. 4.69) and the result is plotted in Fig. 4.16. The spectrum matches the analytical solution, ensuring the proper behavior of the implemented filter.

4.4.2 Two-dimensional Taylor vortices

In this section, a linear combination of 2D Taylor vortices with three different sizes ($L/2$, $L/4$ and $L/8$, where L is the size of the computational domain) is considered. The meshes used in this case are 2D grids with triangular or rectangular elements, but the filtering is performed with an unstructured formulation in all cases.

Taylor vortices of characteristic size λ are obtained by imposing the following velocity field :

$$\begin{cases} u_x = \cos\left(x\frac{2\pi}{2\lambda}\right)\sin\left(y\frac{2\pi}{2\lambda}\right) \\ u_y = -\sin\left(x\frac{2\pi}{2\lambda}\right)\cos\left(y\frac{2\pi}{2\lambda}\right) \end{cases} \quad (4.70)$$

The test case consists of a linear combination of vortices of respective size $\lambda_1 = L/2$, $\lambda_2 = L/4$ and $\lambda_3 = L/8$, as described in Figure 4.17.

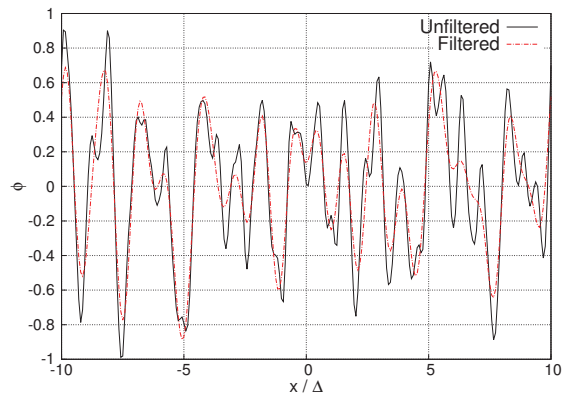


FIGURE 4.15 – 1D scalar field resulting from the energy spectrum defined in Eq. 4.71 (solid line), and scalar filtered with 12^{th} order implicit filter (dash line)

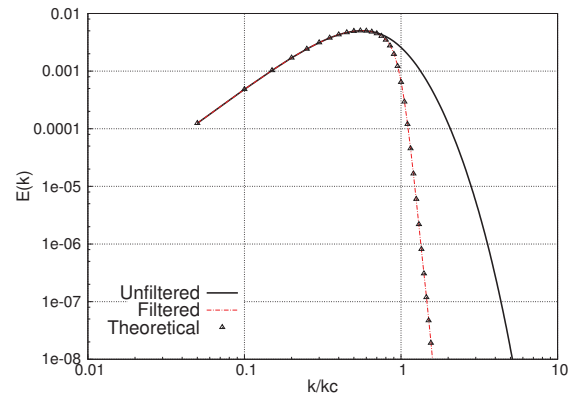


FIGURE 4.16 – Energy spectrum of the unfiltered (solid line) and filtered (dash line) 1D HIT and comparison with analytical solution from Eq. 4.69 (symbols)

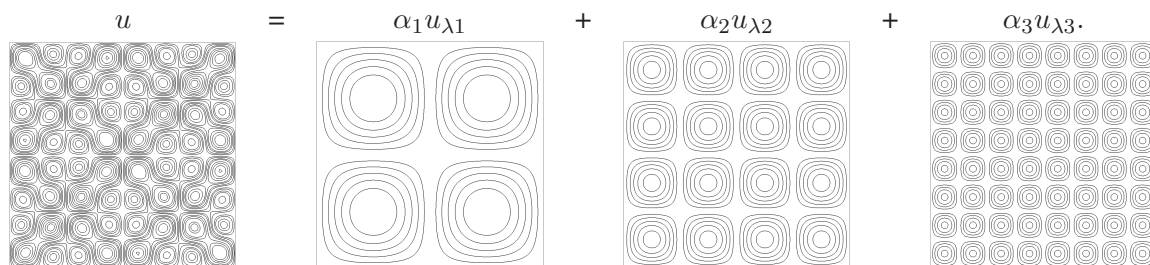


FIGURE 4.17 – Description of the velocity field defined as a combination of Taylor vortices of 3 sizes. Coefficients α_1 , α_2 , α_3 were respectively set to 1, 0.9 and 0.7

The velocity field has been filtered with filter widths of $L/2$ and $L/4$. The $L/4$ filtering removes the structure of smallest size $L/8$. The $L/2$ filtering removes both $L/8$ and $L/4$ vortices, leaving only the biggest vortices. The $L/2$ -filtered field can be compared to the analytical solution of Taylor Green vortices of size $L/2$ (Fig. 4.18, first column). Plotting the difference between the unfiltered field and the $L/4$ -filtered field enables to extract the $L/4$ vortices, which can also be compared to the exact solution (Fig. 4.18, second column). The same can be done for the smallest vortices (Fig. 4.18, third column). The same procedure was applied to a Gaussian filter (Fig. 4.18 (c)), and the difference between the two types of filter is clearly visible.

The three sizes of vortices are well recovered with the HOF, while the Gaussian filter hardly captures the biggest vortices, and they come out stretched and damped. For the smaller vortices, traces of the other frequencies are still visible and some energy remains in the wave-numbers that were not supposed to be affected by the filter, since the Gaussian band-pass filter is not selective enough. As the filter order increases, the medium-size vortices extracted with the band-pass filter gets closer to the analytical solution, as can be seen on Fig. 4.19.

Table 4.2 shows the L_2 norm of the difference between the analytical $L/8$ Taylor vortices and the filtered field on the whole domain.

This test case was also used to test the performances of the filter on a non-homogeneous grid, with

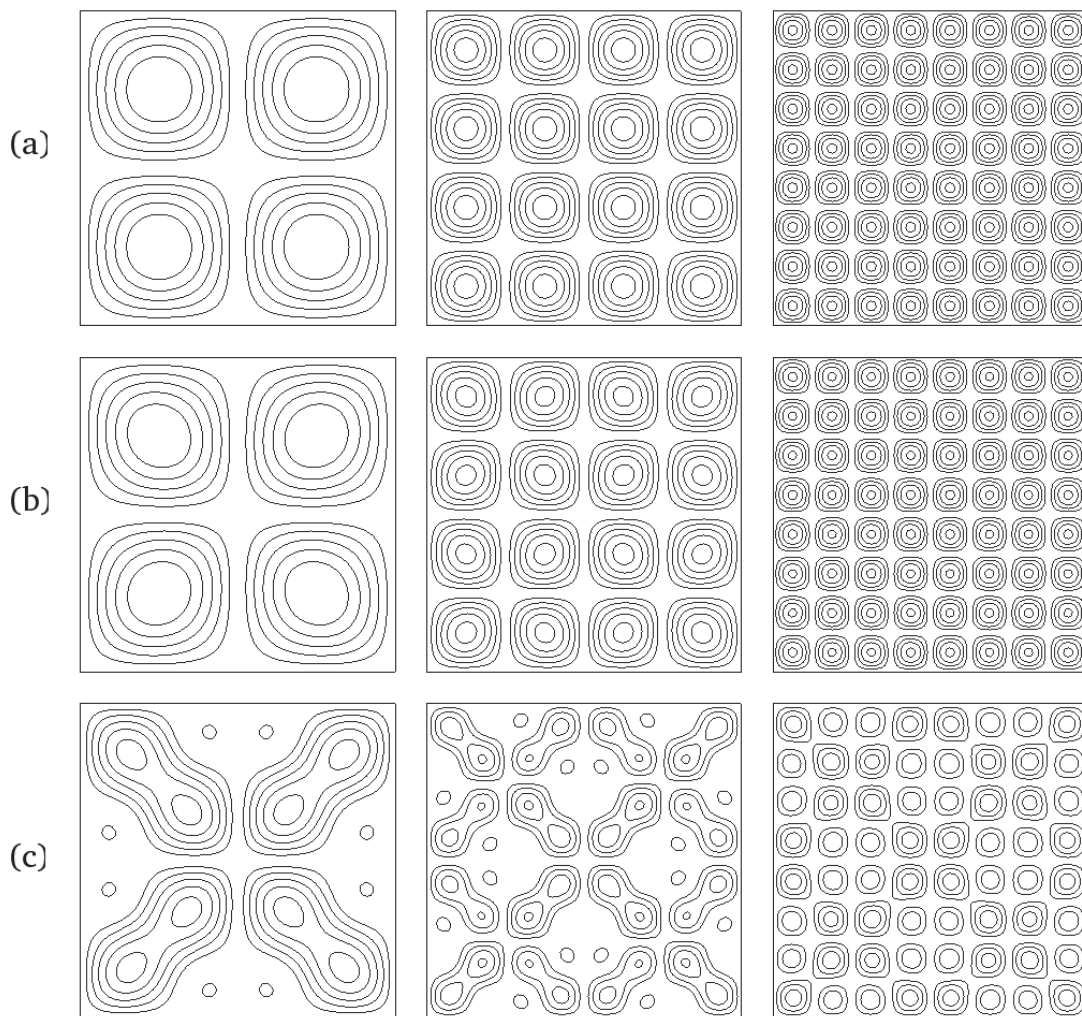


FIGURE 4.18 – Extraction of Taylor vortices with 12th order band pass filter (b), Gaussian filter (c) and comparison with exact solutions (a)

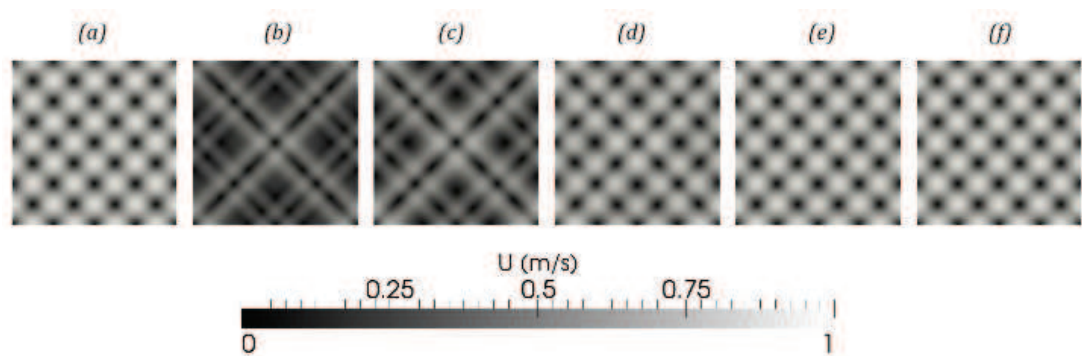


FIGURE 4.19 – Extraction of intermediate Taylor vortices with Gaussian filter (b), and implicit filter at order 4 (c), 8 (d), 12 (e) and 16 (f). Comparison to the analytical solution (a)

an imposed homogeneous filter size. Fig. 4.20 shows the extraction of the intermediate size vortex on a cartesian grid and a triangle cells mesh with highly non-homogeneous grid spacing. Results show that HOF are able to handle both type of elements, and that the grid distortion has a moderate influence on

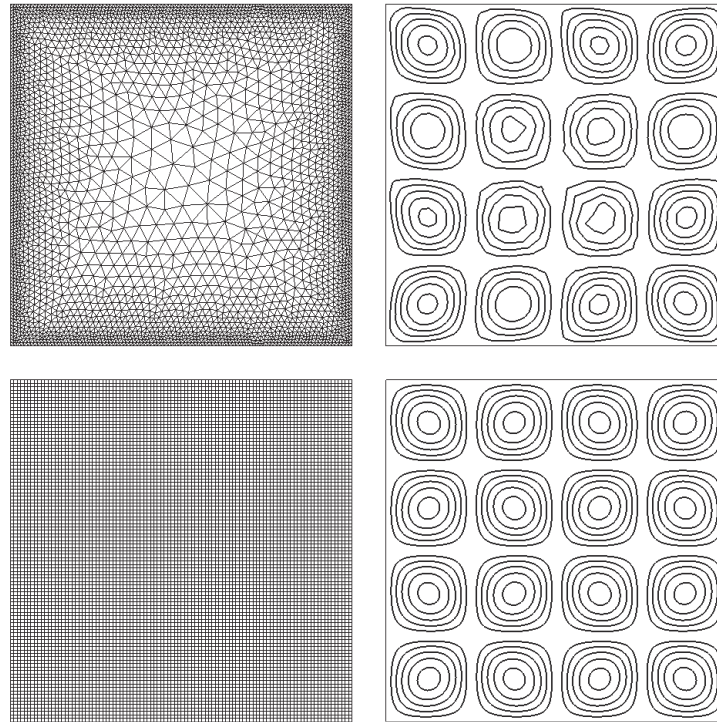


FIGURE 4.20 – Extraction of $L/4$ Taylor vortices with the 12^{th} order filter on a cartesian grid (left) and an unstructured grid (right).

	Gaussian	4th order	8th order	12th order
Quad	0.22	0.17	0.051	0.013
Tri	0.26	0.17	0.058	0.028

TABLE 4.2 – L_2 norm of the difference between filtered solution and analytical solution for various filters

the quality of the filtering, ensuring small contribution of truncation errors and demonstrating the ability of the HOF to maintain a homogeneous filter size on the whole domain.

4.4.3 Three-dimensional Homogeneous Isotropic Turbulence

The HOF are then applied to a 128^3 Homogeneous Isotropic Turbulence on a cartesian grid and compared to a Gaussian filter. A synthetic energy spectrum, proposed by Pope [156] :

$$E(\kappa) = \frac{3}{2} \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3} \left(\frac{\kappa L_e}{\sqrt{(\kappa L_e)^2 + C_e^2}} \right)^{11/3} \exp \left(-\beta \left(((\kappa \eta)^4 + C_\eta^4)^{1/4} - C_\eta \right) \right) \quad (4.71)$$

is used to generate the 3D velocity field for the initialization of the homogeneous isotropic turbulence. In this expression, η refers to the Kolmogorov length scale, L_e is the energetic length scale defined as $L_e = K^{3/2}/\varepsilon$, where K is the turbulent kinetic energy and ε is the turbulent kinetic energy dissipation rate $\varepsilon = \nu^3/\eta^4$. The value of the model constants β , C_e and C_η and the input parameters of this model are summarized in Table 4.3.

The characteristics of the resulting turbulent flow are summarized in Fig. 4.4. The energy spectrum of

Energetic length [m]	L_e	1.5×10^{-3}
Dissipation length [m]	η	8×10^{-6}
Kinematic viscosity [m ² /s]	ν	1.517×10^{-5}
	β	5.2
Model constants	C_e	$\sqrt{6.78}$
	C_η	0.4

TABLE 4.3 – Parameters for the initialization of the homogeneous isotropic turbulent field.

Number of grid points	N	128^3
Computational domain size [m]	L	1×10^{-2}
Grid resolution L/N [m]	Δx	7.8×10^{-5}
Integral length [m]	l_t	8.16×10^{-4}
Taylor scale [m]	λ	1.4×10^{-4}
Kolmogorov scale [m]	η	8×10^{-6}
Number of integral scales	L/l_t	12
Turbulent Reynolds number	Re_t	477
Taylor Reynolds number	Re_λ	84
Kinematic viscosity [m ² /s]	ν	1.517×10^{-5}
Turbulent kinetic energy [m ² /s ²]	K	117.8
Turbulent dissipation rate [m ² /s ³]	ε	8.52^5

TABLE 4.4 – Characteristics of the turbulent field

the turbulent field used to test the HOF, plotted in Fig. 4.21, suggests that the $\kappa^{-5/3}$ Kolmogorov scaling law is recovered in the inertial sub-range.

The performances of the filter in this case are discussed from the analysis of the Q-criterion spectrum, defined in Section 4.2.1. The Q-criterion was filtered with HOF from order 4 to 16 and the Gaussian filter, with a filter size equal to 12 times the mesh resolution. The choice was made to filter the Q-criterion rather than filtering the velocity and compute the Q-criterion based on the filtered velocity. The computation of the Q-criterion involves multiplying velocity derivatives which may generate scales of frequency twice higher than the original signal, and the computation of the derivatives with discrete operators introduces truncation errors which may lead to undesirable noise in the result. Filtering of the Q-criterion efficiently prevents these issues, as shown in Fig. 4.22.

Figure 4.23 shows the influence of the filtering on a Q-criterion iso-surface, by comparing an iso-surface of unfiltered Q-criterion (a), an iso-surface of filtered Q-criterion, with HOF (b) and Gaussian filter (c). The difference between the two filters is clearly visible, as many small structures damped by the HOF persist with the Gaussian filter. The ability of the implicit filter to efficiently dissipate the smaller structures is again illustrated here. Both filters remove part of the information, allowing to plot a low value of Q-criterion, but the high-order filter provides a better dissipation of the smaller scales.

Another illustration of this result is given in Fig. 4.24. The higher selectivity of the HOF over the Gaussian filter is clearly visible. The spectrum fits better the unfiltered spectrum for the low wave-numbers, and decreases faster after the cut-off. Figure 4.24 also compares the spectra of filtered Q-criterion with order from 4 to 16. As the order increases, the selectivity of the filter is improved. The

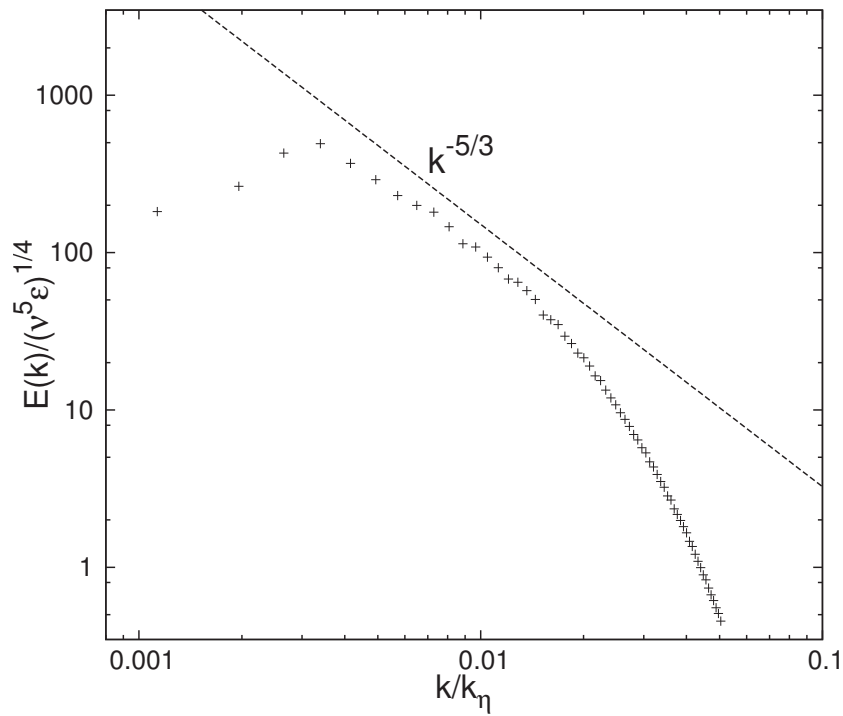


FIGURE 4.21 – Turbulent kinetic energy spectrum of the HIT $E(\kappa)$, initialized with a Pope spectrum. $k\kappa_\eta$ is the wave-number associated with the Kolmogorov scale $\kappa_\eta = 2\pi/\eta$

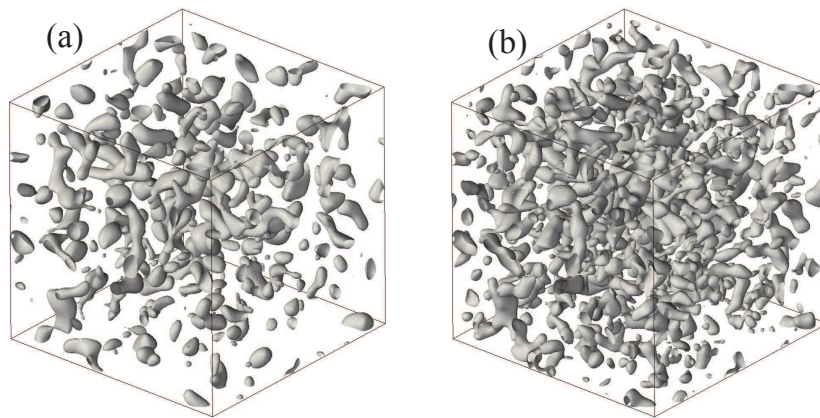


FIGURE 4.22 – Iso-surface of filtered Q-criterion (a), and Q-criterion based on filtered velocity (b) - $Q = 6 \times 10^7 s^{-2}$

higher is the order, the sharper is the spectrum for high wave-numbers.

4.4.4 Turbulent plane jet

Plane jets exhibit typical and well documented coherent structures, such as Kelvin-Helmoltz vortices. Simulations of a turbulent plane jet were carried out to assess the ability of the filter to extract energy containing structures from such flow.

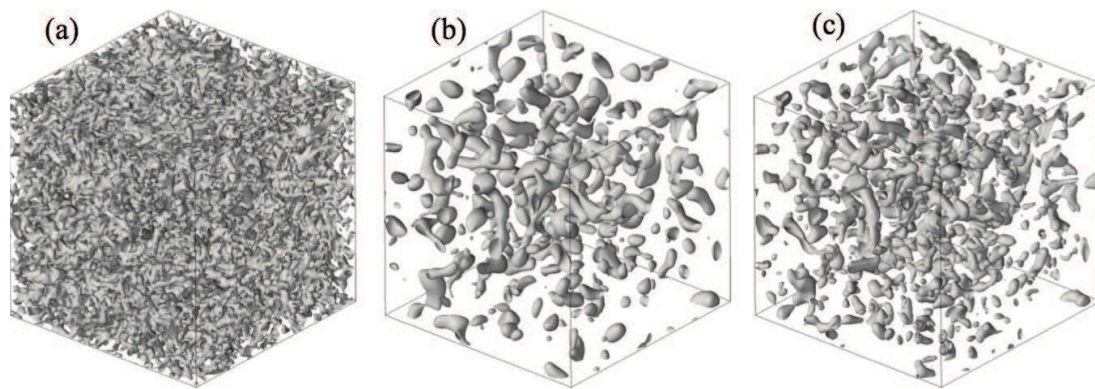


FIGURE 4.23 – Iso-surface of unfiltered Q-criterion (a), Q-criterion filtered with the 12th order filter (b), and the Gaussian filter (c) - $Q = 6 \times 10^7 s^{-2}$

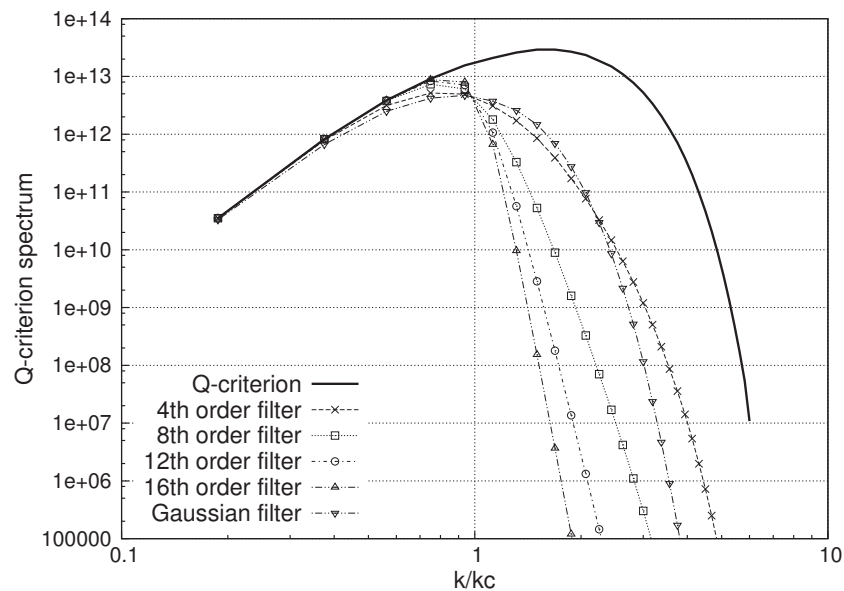


FIGURE 4.24 – Unfiltered (solid line) and filtered Q-criterion spectrum, with implicit filters from order 4 to 16 and Gaussian filter.

4.4.4.1 Boundary conditions

Thomas and Goldschmidt [207] report that the velocity in the near nozzle region can be approximated by a hyperbolic-tangent profile. The following mean velocity profile was imposed at the inlet, with a small co-flow away from the jet centerline :

$$u_x(x = 0, y, z) = \frac{u_j + u_c}{2} + \frac{u_j - u_c}{2} \tanh \left(\frac{h}{4\theta_0} \left(1 - \frac{2|y|}{h} \right) \right), \quad (4.72)$$

where h is the jet's inlet slot width, $u_j = 1.091$ is the velocity at the jet centerline, $u_c = 0.091$ is the co-flow velocity, and θ_0 is the momentum thickness and was set to $h/30$. The mean velocities in the y and z -directions are set to zero. A sketch of the flow is displayed in Fig 4.25.

Boundary conditions were treated as slip-walls in the y direction and periodic in the z direction. This type of jet generally features an initial region where Kelvin-Helmoltz vortices are formed. Then,

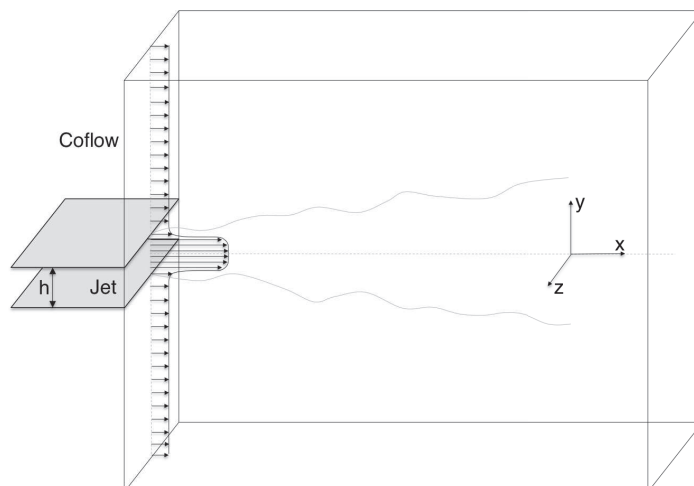


FIGURE 4.25 – Sketch of the flow. The computational domain size is $12.4h \times 12h \times 2.9h$

depending on the Reynolds number of the flow, these coherent structures give birth to a fully developed turbulence downstream.

4.4.4.2 Description of the flow

Shear layer instabilities were studied by Monkewitz and Huerre [133], who proposed a relation between the velocity ratio :

$$r = \frac{u_j - u_c}{u_j + u_c}, \quad (4.73)$$

and the frequency of the instability, ω^* , from which the separation length between consecutive Kelvin-Helmholtz billows can be deduced. For the velocity ratio considered in this study, and a hyperbolic tangent velocity profile, the expected non-dimensional angular frequency is $\omega^* = 0.2128$. In their work, the spatial coordinates, the velocity and the time are non-dimensionalized with the length scale θ_0 , the characteristic velocity $\bar{u} = (u_j + u_c)/2$ and the time scale θ_0/\bar{u} . This value of ω^* corresponds to a Strouhal number equal to :

$$Str = \frac{\omega^*}{2\pi} = \frac{f\theta_0}{\bar{u}} = 0.033. \quad (4.74)$$

This leads to the following instability length scale λ :

$$\lambda = \frac{\bar{u}}{f} = \frac{\theta_0}{Str} = 1.01h. \quad (4.75)$$

4.4.4.3 Numerical setup

Two simulations were carried out : a first one with a Reynolds number based on the jet width h , $Re_h = 3000$, as in the simulation performed by Da Silva and Metais [39]. A second simulation was performed at $Re_h = 60000$, to assess the ability of the method to extract large-scale structures even in highly turbulent flows. The same mesh was used for both simulations. The mesh consists of 300 million tetrahedra, and the spatial resolution is homogeneous with a cell size $\Delta_m \approx 0.02h$. In the $Re_h = 3000$ case, Da Silva and Metais compared their mesh resolution to the Kolmogorov and Taylor micro-scales, and showed that it was within the accepted range for an accurate DNS. The mesh resolution used in this

study is twice higher, so no subgrid-scale turbulence model was introduced. In the $Re_h = 60\,000$ case, the localized dynamic Smagorinsky model was used [71].

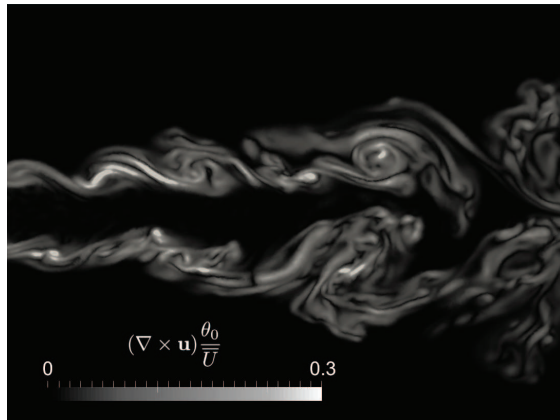


FIGURE 4.26 – Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 3\,000$,

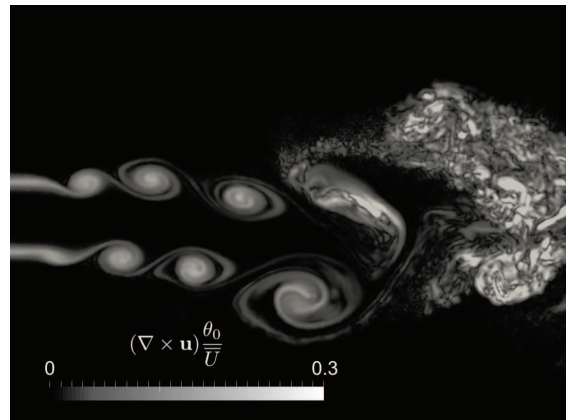


FIGURE 4.27 – Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 60\,000$

4.4.4.4 Plane jet at $Re_h = 3\,000$

Figure 4.26 shows the jet dynamics for the $Re_h = 3\,000$ case, after a physical time corresponding to approximately ten flow-through times. To accelerate the transition to the fully developed regime, turbulence was injected at the inlet in the shear layer regions. The amplitude of the fluctuations corresponds to 10% of the mean velocity $\bar{u} = (u_j + u_c)/2$. The injection of turbulence generates small-scale vortices that mask the Kelvin-Helmoltz structures, as visible on the Q-criterion iso-surface displayed in Fig. 4.28. The Q-criterion was then filtered, at order 12, with a filter size $\Delta = 20\Delta_m$ and the large-scale structures present in the flow become clearly identifiable with a filtered Q-criterion iso-surface. The separation length between two consecutive vortices in both upper and lower shear layers is approximately $\lambda = h$, which is in good agreement with the theoretical value of Monkewitz and Huerre [133], ensuring a good description of the structures extracted with the filtering method.

4.4.4.5 Plane jet at $Re_h = 60\,000$

In the second simulation, at $Re_h = 60\,000$, the natural transition to the fully turbulent state occurs more rapidly and thus the turbulence injection was removed. The vorticity magnitude field in the mid-plane after ten flow-through times is presented in Fig. 4.27.

A Q-criterion iso-surface is displayed in Fig. 4.29. In the first part of the flow, only large-scale Kelvin-Helmoltz vortices are present. As for the first simulation, the separation length between two consecutive vortices in both upper and lower shear layer is approximately $\lambda = h$. Downstream, the flow becomes fully turbulent, and exhibits a wide range of length scales. However, the Q-criterion iso-surface only shows the smallest scales of the flow and is unable to extract the largest structures in high Reynolds simulations. On the other hand, the filtered Q-criterion iso-surface shows that filtering does not affect the Kelvin-Helmoltz billows visible in the first part of the flow, while revealing the large-scale structures which are still present in the second part of the flow.

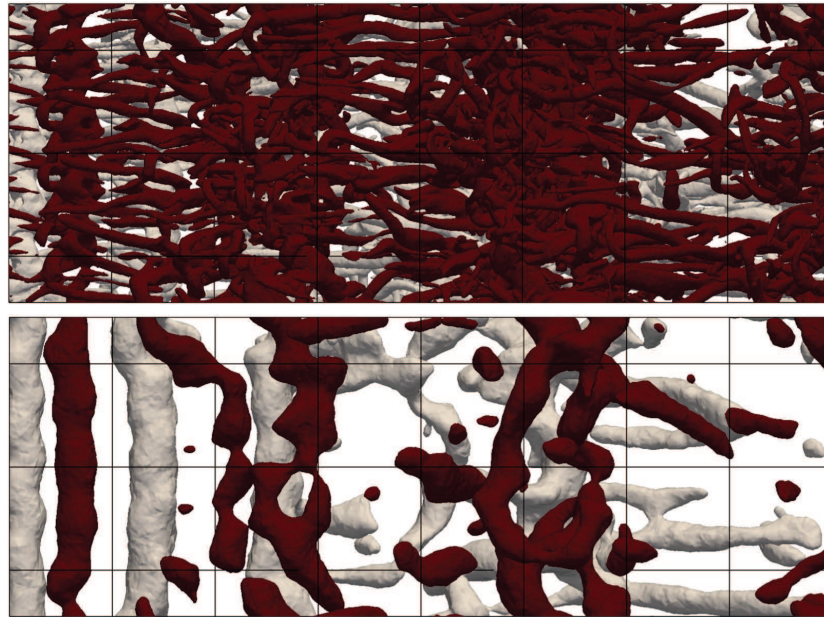


FIGURE 4.28 – Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re_h = 3\,000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark respectively.

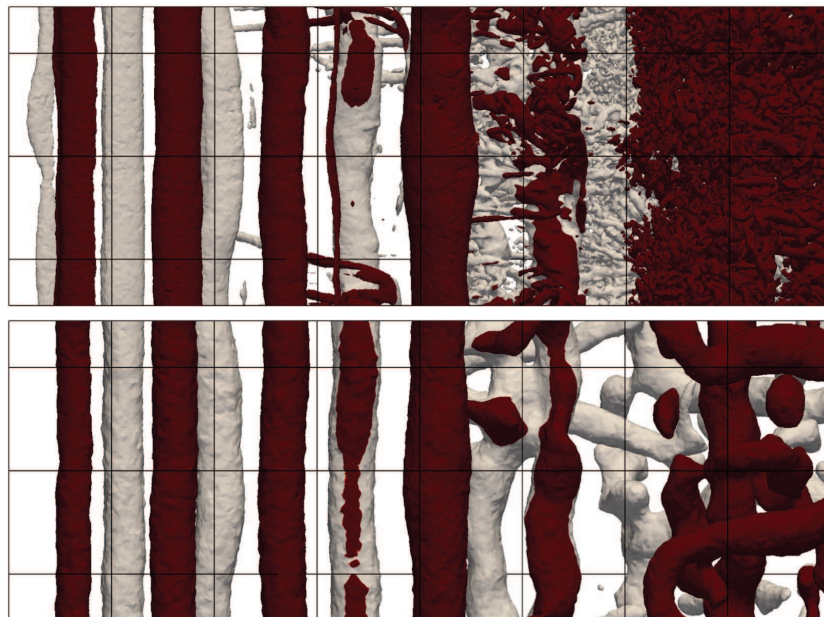


FIGURE 4.29 – Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re = 60\,000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark respectively.

4.5 Application of the filters to turbulent flows in a semi-industrial burner

4.5.1 Description of the burner

Finally, the HOF are applied in a complex semi-industrial swirl burner in order to assess their behavior on massive unstructured grids and evaluate their ability to extract large-scale features from a complex

turbulent flow. The PRECCINSTA swirl burner has been widely studied both experimentally [109, 130] and numerically [167, 69] and is a challenging test for the HOF since it has been computed with several mesh resolutions from 1.7 million to 2.6 billion tetrahedra (the numerical database used to test the HOF comes from simulations detailed in the work of Moureau *et al.* [138]). The wall conditions of the burner introduce a difficulty since they do not allow to perform a convolution operation close to the boundaries, highlighting another advantage of the present method when dealing with complex geometries.

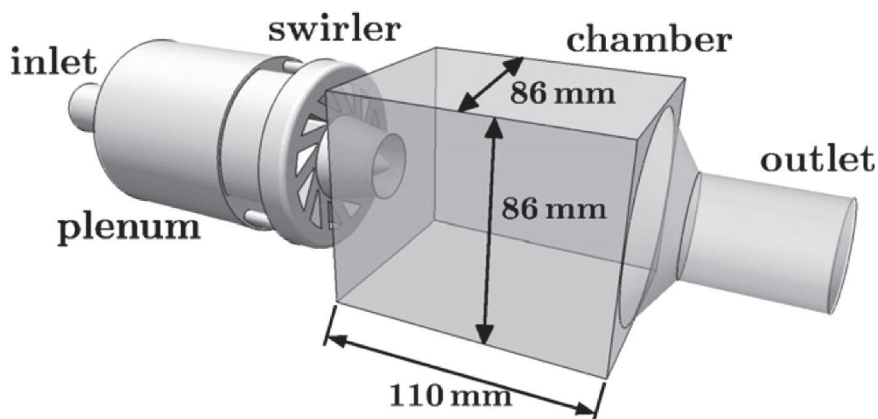


FIGURE 4.30 – Geometry of the PRECCINSTA swirled burner

The experimental burner, presented in Fig. 4.30, features a plenum, a swirler, a square combustion chamber, and a cylindrical exhaust. With a total mass flow rate of 12.9 g/s, the Reynolds number based on the mean velocity and the inlet diameter is approximately equal to $Re = 40\,000$.

4.5.2 Extraction of the PVC on different meshes

In the refined simulations (14, 41 and 110 millions), the Q-criterion was filtered with a 12th order filter at the approximate diameter of the PVC observed on the coarse mesh, $\Delta = 6\text{ mm}$, in order to remove the turbulent scales smaller than this coherent structure. A filtered Q-criterion iso-surface is plotted, using the Q-criterion value that reveals the PVC on the coarse mesh. The results, presented in Fig. 4.31 show that all the small-scale structures were removed by the filtering, leaving a big 3D helical vortex similar to the PVC observed on the 1.7 million. However, some differences can be noted between the PVC observed on the 1.7 million cells mesh and the refined meshes. For example, on the coarse mesh, the PVC features 2 fingers, while only one finger is visible on all the other meshes. This tends to demonstrate that the 1.7 million mesh does not allow to capture precisely the dynamics of the PVC. The four cases presented on Fig. 4.31 are instantaneous solutions of simulation performed with the four meshes, taken at a random physical time which is different for each mesh. This explains the differences observed on the PVC, which is not visualized at the same physical time. However, the structure is visible on the four instantaneous solutions, attesting the strength and the coherence of the PVC. As explained in Section 4.2.1, the extraction of the PVC is not trivial on highly refined meshes, and to author's knowledge, this is the first time it is performed on such massive grids.

This complex geometry was also filtered with a Gaussian filter to compare the ability of the two filters to extract the PVC. Figs. 4.32 and 4.33 compare the performances of the two filters on this complex geometry, for the 110 million and 878 million meshes. Both figures show that the Gaussian filter leaves an important number of small scales vortices around the PVC. This demonstrates the importance of having

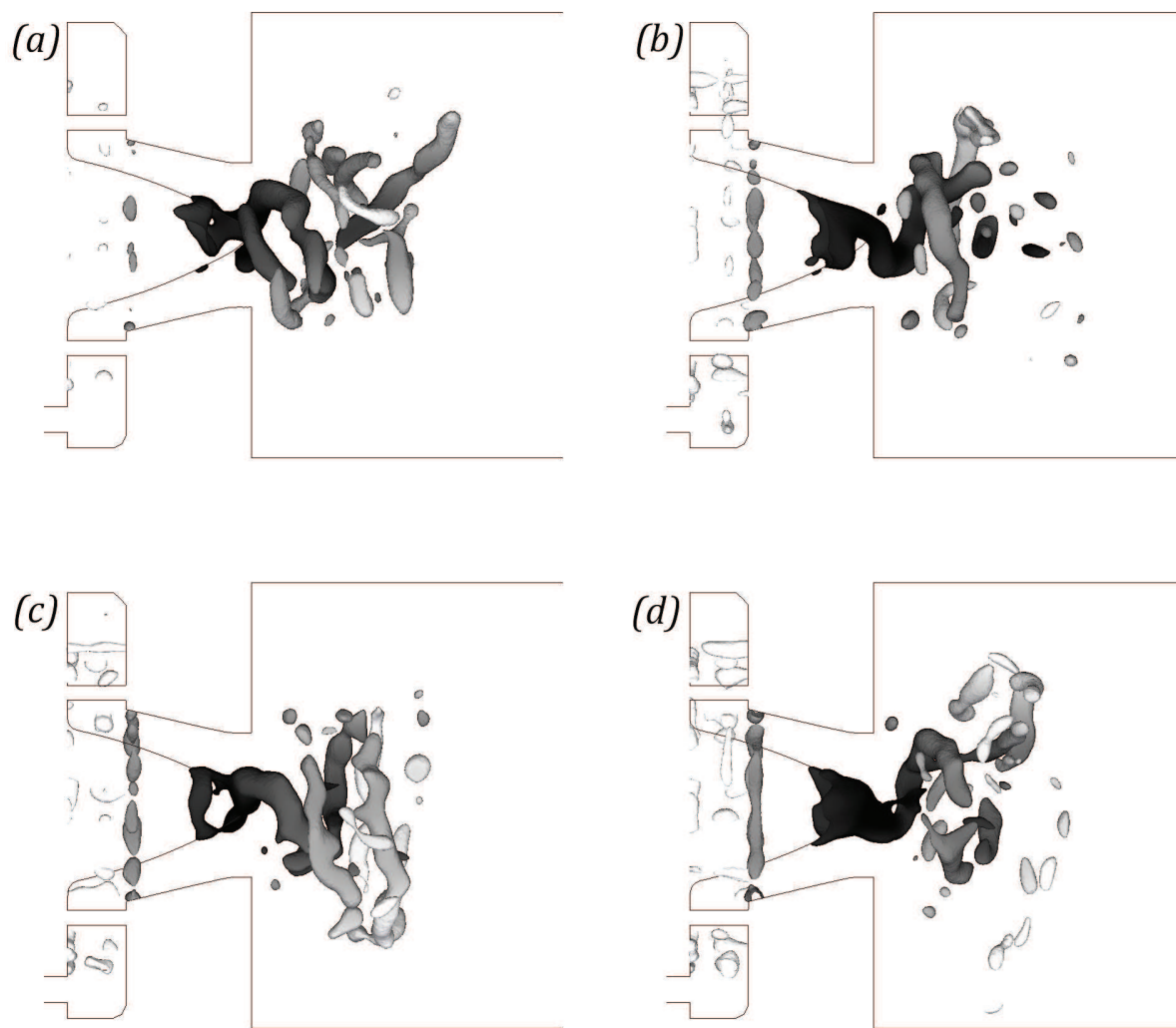


FIGURE 4.31 – Iso-surface of filtered Q-criterion on the 14M mesh with a 12th order filter (a), on the 41M mesh with a 12th order filter (b), on the 110M mesh with a 12th order filter (c) and in the 878M mesh with a 8th order filter(d). Filtering size = 6mm. $\overline{Q} = 0.32 \times 10^8 s^{-2}$

high-order filters to separate scales efficiently. The Gaussian filter is less selective, and its filtering size is not homogeneous in space on a non-homogeneous grid.



FIGURE 4.32 – Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 12th order filter (right), on the 110M mesh

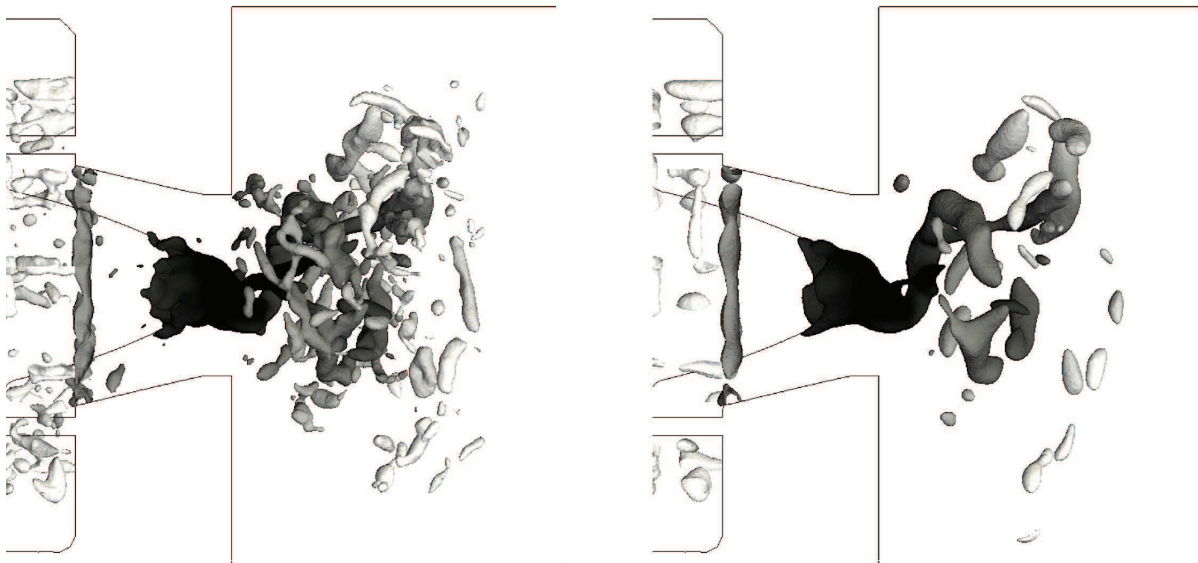


FIGURE 4.33 – Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 8th order filter (right), on the 878M mesh

4.6 Performances of the filtering process

4.6.1 Performances on a 3D HIT

The performances of the filter with the three methods were compared on the three-dimensional HIT of 128^3 test case presented in Section 4.4.3, filtered at a size $\Delta = 12\Delta x$, with a 8^{th} order filter. Performances of the filter with the 3 algorithms are summarized in Table 4.5. The factorization decreases significantly the computational cost of the filter. The time is divided by 23, and the number of PCG iterations is divided by 10 for the 2^{nd} order polynomial factorization.

The performances are very similar for the two types of factorization, and are approximately one order of magnitude faster than the PCG without any factorization. Another advantage of reducing the number of PGC iterations is that it decreases the accumulation of numerical errors. The two types of factorization give similar results, but the robustness of the 2^{nd} order factorization, that needs less iterations to reach convergence, enables to perform filtering at order 16 even on meshes of several million of elements.

	Without factorization	1st order polynomial	2nd order polynomial
Computational time (s)	460	80	20
Number of PCG iterations	5 000	800	500

TABLE 4.5 – Comparison of the performances of linear solvers

4.6.2 Performances on the PRECCINSTA burner

The performances of the filter were also analyzed in the aeronautical burner presented in Section 4.5. To estimate the computational cost of the filter, it is compared for two meshes to the CPU cost of one time step iteration for the same mesh (see Table 4.6). For the 110M mesh, the filtering cost is 200 times higher than the computational cost of a time step.

TABLE 4.6 – CPU cost of the 12^{th} order filter

Cells	14 M	110 M
Filtering cost / Time step cost	10	200

This industrial burner was used to compare the performances of the 3 algorithms on a complex geometry : the 14M cells mesh was filtered at orders 4, 8, 12 and 16. The computational cost of the filtering is plotted in Fig. 4.34. The factorization - complex or real - tremendously reduces the filtering cost and the number of PCG iterations. On this type of mesh, the convergence was impossible with the first algorithm for orders above 8. By reducing the accumulation of numerical errors, the factorization allows to filter at the 12^{th} order, but the system does not converge at order 16. The second order factorization enables to increase the order up to 16.

To assess the performances of the filter, a 20 hours computation was performed on the IDRIS supercomputer Turing, on 1024 processors, with a filtering of the Q-criterion every 0.05 ms. With a PVC frequency of 540 Hz, this filtering time step ensures almost 40 solutions in one PVC characteristic time-scale. This simulation shows that HOF are suitable to do on-the-fly post-processing.

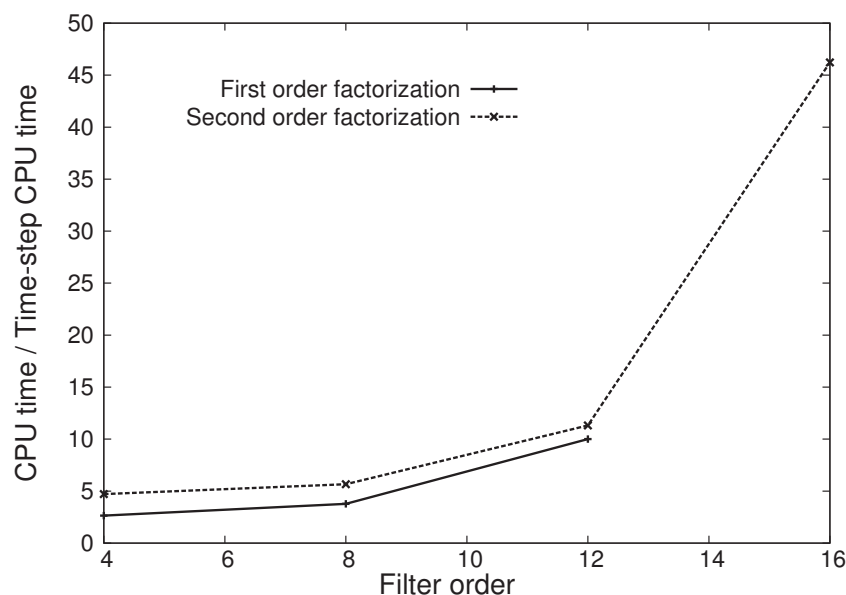


FIGURE 4.34 – Computational cost of the 2 algorithm (complex factorization and real factorization) on an industrial swirl burner (14M cells mesh). Real factorization allows to increase the order up to 16.

4.6.3 Conclusions on the computational cost of high-order filters

The previous sections showed that the cost of the filtering operation can be high compared to the cost of one time-step. However, the objective of the filtering is to extract large-scales structures compared to the mesh resolution. The characteristic time-scale of these structures is related to their size, and is orders of magnitude higher than the computational time-step, especially in the case of reactive compressible simulations. The frequency of the filtering operation should be coherent with the characteristic time scale of the large-scale structures, and in that case, the ratio between the cost of the filtering and the simulation becomes a lot more reasonable.

Even if the filtering cost might seem high, it remains low compared to the total cost of the computation that usually requires thousands of time-steps to achieve statistical convergence, and filtering provides complementary information for the analysis of the flow behavior.

4.7 Topology analysis of the Precessing Vortex Core

4.7.1 Isolation of the Precessing Vortex Core

The filtering operation removes efficiently all the small-scale structures, leaving only the vortices of the same length scale as the PVC. An additional step is required to isolate the PVC. A conservative levelset [43] method was used to identify and isolate the PVC among all the remaining large-scale vortices, in order to perform some advanced analysis of the influence of the PVC on the flame position or on the droplets spatial distribution in the case of two-phase combustion. Having access to data such as the normal or the distance to the PVC enables to perform statistical analysis of the droplet distribution according to the distance of the PVC or to compute mean tangential velocity profiles in the vortex, and will bring more insight in the topology of swirled two-phase reactive flows.

First a level set function is defined to identify the iso-surface corresponding to the PVC. The level

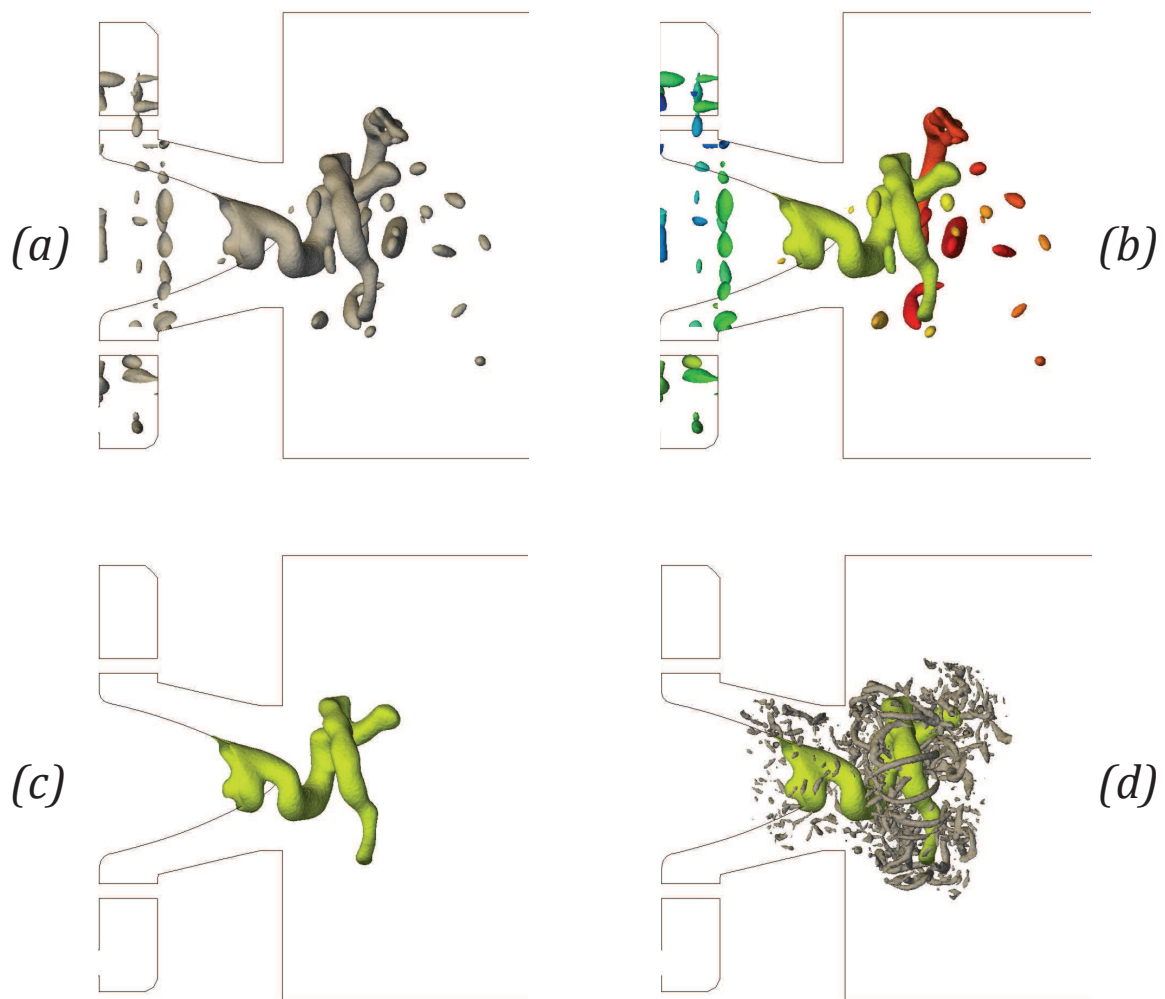


FIGURE 4.35 – Iso-surface of the level set function based on the filtered Q-criterion iso-surface (a) - Iso-surface of the level set function, colored by the color of each closed volume (b) - Iso-surface of the redefined level set function to extract the PVC (c) Iso-surface of the level set function surrounded by smaller vortices (d)

set function Φ computation is based on the filtered Q-criterion, and on its value at the interface ($Q_0 = 0.32 \times 10^8 s^{-2}$), and must ensure $\Phi = 0.5$ at the interface. The difference between the local value of the filtered Q-criterion and the value at the iso-surface is converted into a pseudo-distance ψ that is then used to calibrate the level set function :

$$\Phi = \frac{1}{2} \left(\tanh \left(\frac{\psi}{2\epsilon} \right) + 1 \right) \text{ with } \psi = \frac{Q - Q_0}{Q_0} \times 10^{-3}, \quad (4.76)$$

where ϵ is a parameter that sets the thickness of the profile. In this case, $\epsilon = 0.5$.

All vortices are now associated with a $\Phi = 0.5$ iso-surface (Fig.4.35 (a)). The next step is to identify which one is the Precessing Vortex Core and to isolate it. This can be done thanks to a topology analysis tool implemented in YALES2. This tool identifies closed volumes within the level set function iso-surface, and attach a color to each closed region (Fig. 4.35 (b)). Once the color of the PVC is identified, the level set function is set to zero everywhere the color is different from the PVC color, so that

only the PVC remains in the level set iso-surface (Fig. 4.35 (c)).

The level set comes with numerical tools such as computation of the normals and the distance to the surface. It is now possible to plot at the same time the large-scale structure of interest (the PVC) and the smaller vortices resolved on the refined mesh (with an iso-surface of unfiltered Q-criterion) at a close distance from the PVC, to study the interaction between the large-scale structures and the small scale structures (Fig. 4.35 (d)).

This methodology was also applied to a highly refined case, with a mesh of 878 million tetrahedra (see Fig. 4.36).

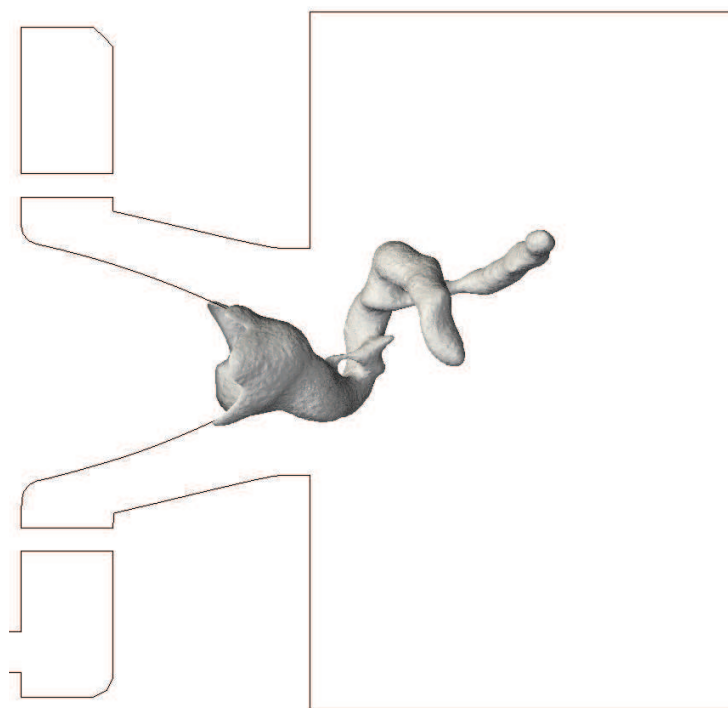


FIGURE 4.36 – Iso-surface of the level set based on the filtered Q-criterion, with filtering size $\Delta = 6mm$. The mesh consists of 878 million tetrahedra.

4.7.2 PVC centerline reconstruction

In order to make some conditional statistics, the next step consists in extracting the center-line, or skeleton, of the PVC to reconstruct a local coordinate system related to the PVC. This center-line is a 1D manifold, from which a curvilinear abscissa can be defined, the origin being set at the swirler exit.

The definition of the PVC coordinate system is explained in Fig. 4.37. The first coordinate of the local PVC axis system is defined as the axial direction, aligned with curvilinear abscissa, The second coordinate is defined as the normal (radial) direction and the third is the tangential direction.

The details of this process are provided in the next sections : the PVC skeleton extraction is presented in Section 4.7.2.1, and its application to the projection of the PVC axis on the grid is described in Section 4.7.2.2.

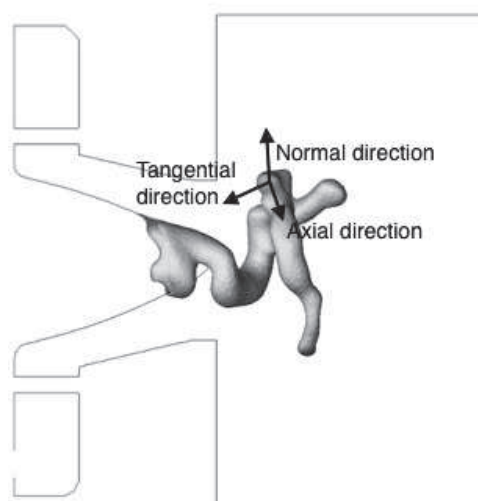


FIGURE 4.37 – Definition of the PVC coordinate system

4.7.2.1 Skeleton extraction

The development of algorithms able to extract a 1D representation of a 3D set of points is a well documented research field which is useful in many application from computer graphics sciences to image processing for medical purpose. Some notable work of skeletonization of 2D or 3D surfaces can be found in the literature, such as the work of Tagliasacchi *et al.* [205] that assumes the input shape to be predominantly cylindrical and relies on the search of local circular cross sections. In the present case, the extraction of the PVC center-line was performed using an open-source dedicated software developed by Huang *et al.* [89].

Given an unorganized and unoriented set of J points $\{q_j\}$, $j \in [1, J]$, the objective is to find an optimal set of I projected points $\{x_i\}$, $i \in [1, I]$ that represents a localized center of the shape.

The location x of a point which has the minimum total distance to a set of points, also called spatial median, or L1-median, is the solution of the well-known following optimization problem :

$$x = \operatorname{argmin}_X \sum_{j \in J} \|x - q_j\|. \quad (4.77)$$

This L1-median is unique for a given set of points.

The definition used by Huang *et al.* [89] in their algorithm is a spatially localized version of the spatial median, *i.e.* :

$$\operatorname{argmin}_X \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \|x_i - q_j\| \theta(\|x_i - q_j\|) \quad \text{with} \quad \theta(r) = e^{\frac{-r^2}{(h/2)^2}}. \quad (4.78)$$

The localization is performed with the weight function θ , which is a fast decaying smooth function with support radius h defining the size of the local neighborhood for L1-medial skeleton construction.

The optimization algorithm aims at computing a skeleton curve composed of one or several branches that best represents the original shape. The branch identification starts from an initial set of sample points, which are initially all considered as non-branch points. The sample points are contracted following Eq. 4.78 based on an initial neighborhood size h_0 . To determine whether a point is part of a branch after this contraction step, a directionality degree measure is used, and x_i is considered as a candidate for

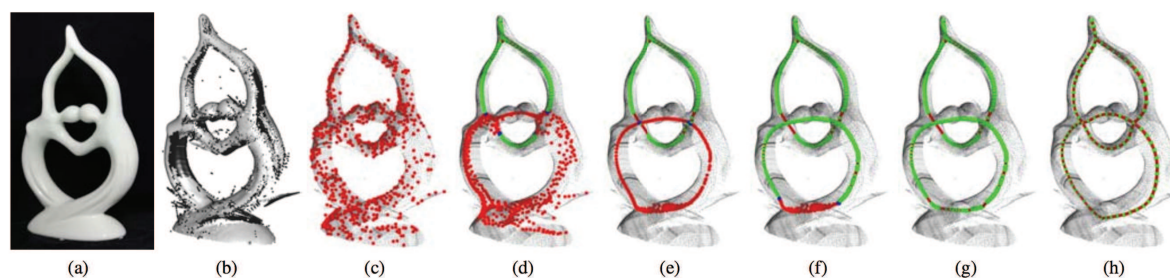


FIGURE 4.38 – Example of application of the Pointcloud processing software : given an incomplete and noisy raw scan (b) of the object in (a), a subset of samples shown in red in (c) is randomly selected. These points are iteratively projected onto a skeletal point cloud with a gradually increasing neighborhood size (d-g). After down-sampling, smoothing, and re-centering, the final curve skeleton is obtained (h).[89]

branch point if points in x'_i 's neighborhood are well-aligned skeleton-wise. To identify branch points, an extremity point is found, and the branch is built incrementally from this point to nearby candidates. Tracing stops when there is no candidate in the local neighborhood satisfying the directional criterion.

The procedure may leave some sample points labeled as non-branch points : they require further contraction under a larger neighborhood size h to form new branches. However, relying on a fixed h , large or small, that remains unchanged throughout the contraction process, does not perform well for complex shapes. To cope with this issue, the algorithm gradually increases h while excluding already identified branch points from further contraction until all points become branch points.

Applying the L1-median without any further optimization tends to lead to a sparse distribution, where local centers are likely accumulated into a set of point clusters. To avoid such clustering, particular attention was paid to prevent accumulation once points are already contracted onto their local center positions. This is achieved using a repulsion force whenever a skeleton branch is formed locally. Moreover, if the input point cloud is highly non-uniform, the local center tends to be biased towards regions with higher point density. To alleviate this, an additional constraint based on locally adaptive density weights was added to the iterative scheme.

The main advantages of this method, that were prerequisites for the application to PVC extraction in massively parallel simulations are summarized below :

- The formulation is simple, leading to a fast and robust algorithm.
- Curve skeleton extraction can be performed from general 3D shapes represented by point sets without prior assumptions on the shape geometry (e.g., cylindrical) or topology.
- There is no quality requirement on the set of points representing the input shape, meaning that preprocessing which may include for example denoising, normal estimation, spatial discretization, or data completion is not necessary. This is in contrast to the majority of existing methods for curve skeleton computation, which require the input shape to be complete, or represented by fine tessellations [44, 35, 222].

The Pointcloud processing library was linked to the CFD solver. The solver selects a set of grids points located in the level-set function iso-surface, as displayed in Fig. 4.39 (a,b). Then the external library performs the skeletonization and returns to the solver a list of coordinates that defines the center-line of the PVC (Fig. 4.39 (c)). The only input parameter of the skeleton extraction algorithm is the initial neighborhood size h_0 , which is directly related to the characteristic length scale of the structure, and is

defined from the filter width used for the structure identification, Δ with the empirical relation :

$$h_0 = 0.7\Delta. \quad (4.79)$$

The Pointcloud library is sequential and no particular effort was made to enable the parallelization of the process, since the computational cost of the skeletonization is small compared to the cost of one time step. The initial set of points is gathered on the master process that executes the skeletonization algorithm sequentially. Once the skeleton is obtained on this processor, it is broadcasted back to all the other processors and interpolated on their local grid. Any further processing can now be done in parallel.

4.7.2.2 Interpolation of the skeleton on the grid

The skeleton consists of a list of coordinates that does not necessarily match the grid points, and are not ordered skeleton-wise. The skeleton points need to be sorted, starting from the node closest to the center of the injector. The second point is defined as its first neighbor in the streamwise direction. The next point is chosen within the two neighbors of the second node, from directional considerations. This operation is repeated until a branch extremity is reached. The result is a list of $N + 1$ sorted points, numbered from P_1 to P_{N+1} . The CFD code reads this list and stores, for each edge $P_n P_{n+1}$, the middle point S_n and \mathbf{n}_n , which is a normalized vector oriented from P_n to P_{n+1} that materializes the axial direction of the PVC :

$$S_n = \text{midpoint}[P_n P_{n+1}] \quad \text{i.e.} \quad \mathbf{x}_{S_n} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{P_n} + \mathbf{x}_{P_{n+1}}), \quad (4.80)$$

where \mathbf{x}_{S_n} and \mathbf{x}_{P_n} are the spatial coordinates of S_n and P_n respectively, and :

$$\mathbf{n}_n = \frac{(\mathbf{x}_{P_n} - \mathbf{x}_{P_{n+1}})}{\|\mathbf{x}_{P_n} - \mathbf{x}_{P_{n+1}}\|}. \quad (4.81)$$

All notations are illustrated in Fig. 4.40.

Once the N skeleton points are ordered and renumbered from S_1 to S_N , the curvilinear abscissa s is reconstructed on the 1D mesh formed by the skeleton points :

$$s_n = \sum_{k=1}^{n-1} l_k \quad \text{with} \quad l_n = \|\mathbf{x}_{S_n} - \mathbf{x}_{S_{n+1}}\| \quad (4.82)$$

where s_n is the curvilinear abscissa at node n , and l_n is the length of the segment $[S_n, S_{n+1}]$.

Then, this information is propagated throughout the whole grid from the PVC centerline, following the process described below and illustrated in Fig. 4.41. For each grid point X_i , the closest skeleton point S_n is determined. From this skeleton point, the first component of the local PVC coordinate system, or axial coordinate \mathbf{e}_z , oriented skeleton-wise is deduced immediately from \mathbf{n}_n :

$$\mathbf{e}_z = \mathbf{n} \quad (4.83)$$

Then, \mathbf{v}_i is constructed as the vector going from S_n to X_i :

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{S_n} \quad (4.84)$$

The projection on the axial component, δ_s :

$$\delta_{s,i} = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}, \quad (4.85)$$

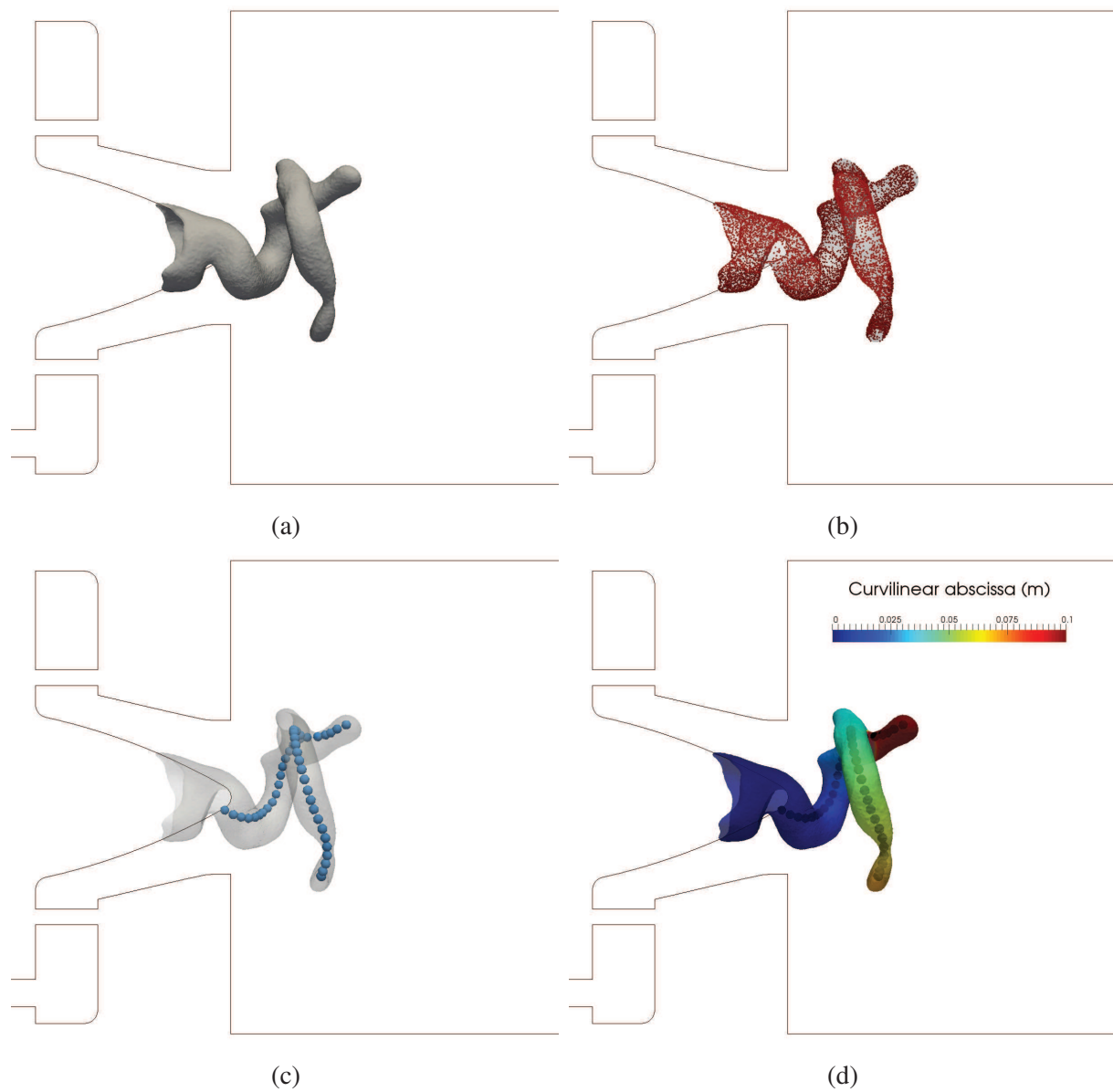


FIGURE 4.39 – Description of the skeleton extraction process on the PRECCINSTA - 41M case : From a level-set function iso-surface (a), a random down-sampling is performed to select an input data set for the pointcloud library (b), the library computes the skeleton and returns it to the solver (c), the skeleton is interpolated on the 3D grid in order to compute a local curvilinear abscissa (d)

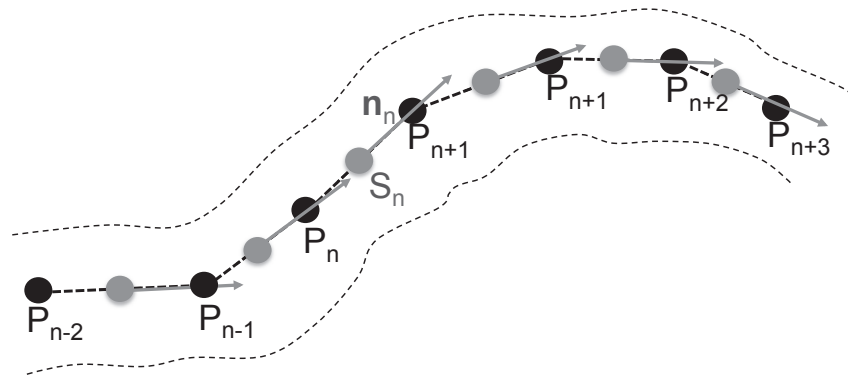
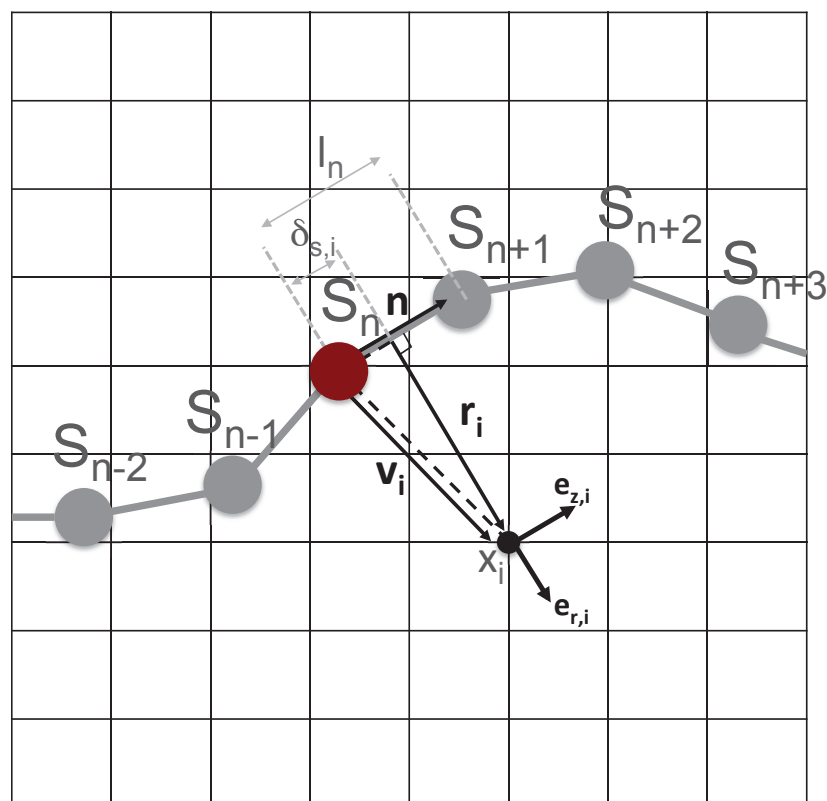


FIGURE 4.40 – Notations for skeleton points


 FIGURE 4.41 – Propagation of skeleton on grid points. The mesh node X_i (black point), and its closest skeleton node S_n (red point) are considered.

represents the curvilinear distance from skeleton point S_n to the orthogonal projection of X_i on the skeleton. The orthogonal component of \mathbf{v}_i (see vector \mathbf{r}_i on Fig. 4.41) is obtained by removing $\delta_{s,i}\mathbf{n}$:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{v}_i - \delta_{s,i}\mathbf{n} . \quad (4.86)$$

The norm of \mathbf{r}_i is the distance of X_i to the PVC. Normalizing \mathbf{r}_i leads to the second axis of the local PVC coordinate system :

$$\mathbf{e}_{r,i} = \frac{\mathbf{r}_i}{\|\mathbf{r}_i\|} \quad (4.87)$$

The construction of the last vector of the orthonormal basis is straightforward :

$$\mathbf{e}_{t,i} = \mathbf{e}_{z,i} \wedge \mathbf{e}_{r,i} \quad (4.88)$$

Finally, the local projection of the curvilinear abscissa is defined as follows :

$$s_i = s_n + \max \left(\min \left(\delta_{s,i}, \frac{l_n}{2} \right), -\frac{l_n}{2} \right). \quad (4.89)$$

The quantities $r_i = \|\mathbf{r}_i\|$, s_i , and $(\mathbf{e}_{z,i}, \mathbf{e}_{r,i}, \mathbf{e}_{t,i})$ can be calculated throughout the whole computational domain, allowing correlation between local physical variables and the PVC. Figure 4.39 (d) shows the PVC iso-surface colored by curvilinear abscissa, computed from Eq. 4.89.

4.8 Conclusions on the filtering methodology and perspectives

In this chapter, high-order implicit filters for the identification of large-scale structures in turbulent flows were presented. These filters showed good results on canonical test cases, and were successfully applied in the PRECCINSTA semi-industrial swirl burner. The computational cost of such filters is much higher than classical second order filters, but the optimization of the algorithm allowed to filter highly refined grids, at high-order, with non-prohibitive restitution time. Associated with sub-domain identification methods, HOF are an efficient tool to extract large-scale structures even on refined meshes. This methodology can also be applied to smaller vortices to analyze the relationship between the preferential directions of small and large vortices. The combination of all these results should bring more insight into the correlations between the different turbulent scales. Those filters can also be a valuable tool to interpolate data on a coarse grid and perform modal analysis (POD, DMD) with reduced computational costs, since filtering allows to interpolate data on a coarse grid while fulfilling the Nyquist-Shannon sampling theorem.

As explained in Chapter 2, the PVC is a well-known 3D coherent structure in swirl flows, but the role it plays in the flow dynamics needs to be investigated in more details. The extraction of large-scale features with HOF in this type of burner in a particule-laden flow will enable to understand and analyze the interaction between the liquid fuel spray and the large-scale vortices. The HOF can be a useful tool towards a better understanding of the fuel mixing process in aeronautical swirl burners, when applied in industrial combustors with liquid injection. Moreover, these advanced post-processing tools can be used to compute the average velocity profile of the PVC from the local tangential vector.

This will be further investigated in Chapter 5, where the HOF will be applied on the two-phase LES of the MERCATO burner, in non-reactive and reactive cases, to gain more insight into the coupling mechanisms between the spray dynamics, the evaporation process, and the combustion.

Chapitre 5

Etude des interactions spray - flamme - PVC. Application à un brûleur swirlé diphasique : MERCATO

Ce chapitre est dédié à l'étude du rôle du PVC dans les flammes swirlées diphasiques, et notamment à l'interaction entre le PVC et le brouillard de goutte ou la structure de flamme. Pour cela, le brûleur expérimental MERCATO a été modélisé en conditions non-réactives dans un premier temps, puis en conditions réactives. La mise en œuvre du calcul, ainsi que la confrontation des résultats obtenus à des données expérimentales et numériques sont d'abord présentés. Puis, les outils décrits dans le Chapitre 4 sont utilisés sur ces simulations pour analyser le rôle du PVC dans la dynamique de l'écoulement.

Sommaire

5.1	Présentation du banc MERCATO	147
5.2	Choix des points de fonctionnement	148
5.2.1	Point de fonctionnement non réactif	148
5.2.2	Point de fonctionnement réactif	150
5.3	Mise en œuvre du calcul	151
5.3.1	Paramètres numériques	151
5.3.2	Modélisation de l'injection de carburant	153
5.3.3	Validation du modèle d'évaporation	161
5.4	Simulation du brûleur MERCATO à froid	165
5.4.1	Temps caractéristiques de l'écoulement	165
5.4.2	Topologie de l'écoulement gazeux	166
5.4.3	Topologie de l'écoulement diphasique	170
5.4.4	Extraction du PVC et analyse de l'interaction spray - PVC	172
5.5	Simulation du brûleur MERCATO à chaud	178
5.5.1	Temps caractéristiques de l'écoulement	178
5.5.2	Topologie de l'écoulement gazeux	178
5.5.3	Topologie de l'écoulement diphasique	182
5.5.4	Extraction du PVC	184
5.5.5	Description du mécanisme d'interaction spray - flamme - PVC	192
5.6	Performances	193

5.1 Présentation du banc MERCATO

Le banc MERCATO (Moyen Expérimental de Recherche en Combustion Aérobique) a été mis en place dans le cadre de la thèse de Garcia-Rosa [70] pour étudier les phénomènes physiques mis en jeu dans la combustion diphasique, dans des conditions de pression et de température normales (pression atmosphérique), ou plus critiques, visant à reproduire les conditions de hautes altitudes auxquelles peuvent être confrontés les moteurs aéronautiques. Ces travaux font suite aux études menées dans le cadre du programme PRECCINSTA (PREdiction and Control of Combustion INSTAbilities for industrial gaz turbines), dédié à l'étude des instabilités thermoacoustiques dans les brûleurs aéronautiques en écoulement gazeux.

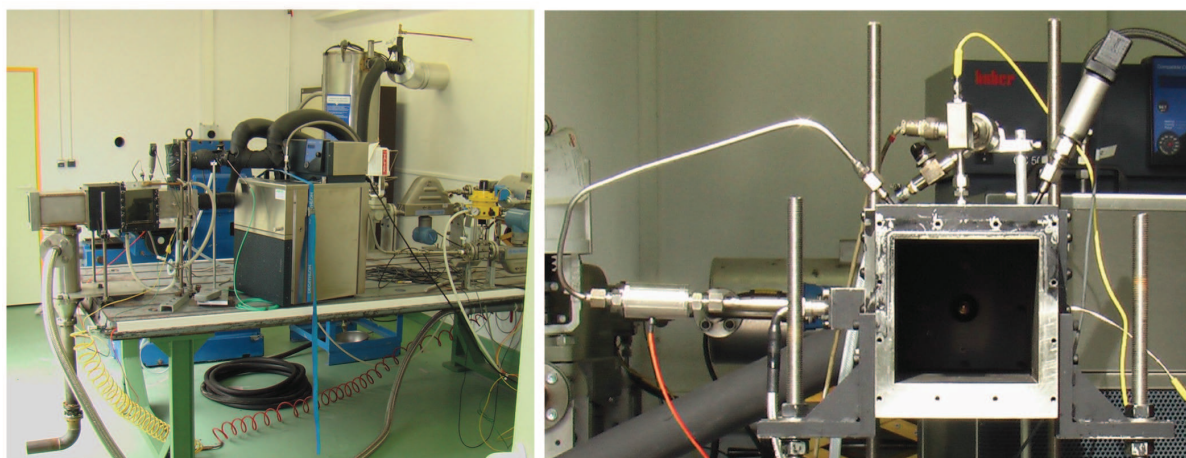


FIGURE 5.1 – Photographie du banc expérimental MERCATO à l'ONERA.

Il est composé d'un plenum dans lequel l'air est injecté, et à la suite duquel sont placés l'ensemble des éléments que l'on retrouve dans une chambre de combustion : le swirler, l'injecteur de carburant liquide et la chambre de combustion. Le système d'injection, incluant le gicleur et l'entrée d'air tourbillonnaire, a été conçu par TURBOMECA. La chambre de combustion est alimentée en air par un swirler radial composé de 12 veines qui mettent l'écoulement en rotation. L'atomiseur, placé au centre de ce swirler est une tête d'injection mécanique fabriquée par Delavan. L'écoulement diphasique débouche dans une chambre de combustion de forme rectangulaire. Cette chambre est munie d'un hublot transparent permettant la visualisation de la flamme.

Afin de simuler la montée en température induite par la traversée du compresseur en amont de la chambre, un dispositif de préchauffage permet d'élever la température de l'air à plus de 200°. A l'inverse, les conditions de basses températures caractéristiques d'un fonctionnement en haute altitude peuvent être générées à l'aide d'un échangeur à azote liquide pouvant refroidir l'air jusqu'à -40°. Les basses pressions rencontrées en conditions de haute altitude sont reproduites grâce à un raccord d'aspiration installé en sortie de chambre. Ce dispositif permet de diminuer la pression de la chambre jusqu'à 0.4 bar. Les conditions de pression et température obtenues sont représentatives de celles rencontrées à des altitudes allant jusqu'à 6000 m.

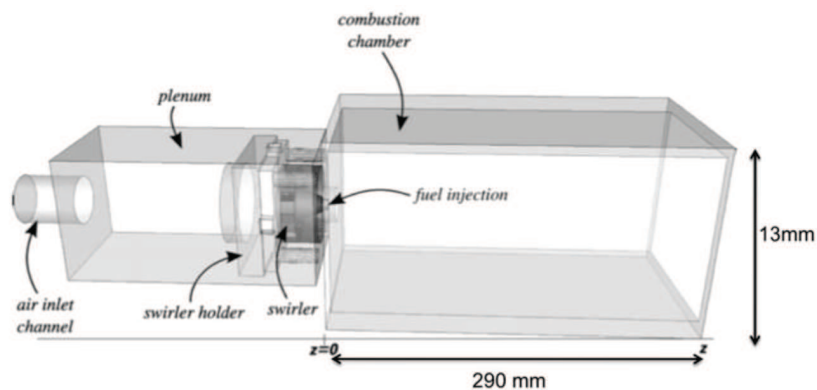


FIGURE 5.2 – Description de la géométrie du brûleur MERCATO.

5.2 Choix des points de fonctionnement

La configuration MERCATO a fait l'objet de plusieurs campagnes d'essais. Les nombreuses études numériques et expérimentales menées sur ce banc sont synthétisées dans le Tableau 5.1. Cette configuration a notamment été modélisée pour étudier la combustion diphasique [64], l'allumage [52, 20], l'effet de la prise en compte de la polydispersion du spray [80], mais également pour valider des modèles numériques pour les écoulements diphasiques [173, 217], l'atomisation secondaire [185] et l'évaporation [190].

Deux points de fonctionnement, détaillés ci-après, ont été retenus pour être simulés dans le cadre de cette thèse.

5.2.1 Point de fonctionnement non réactif

Le premier point choisi est le point de fonctionnement non réactif dit "de mise en place". En effet, de nombreuses données expérimentales sont disponibles pour ce point de fonctionnement qui n'était pas prévu au départ dans la thèse de Garcia-Rosa [70]. Deux techniques expérimentales sont mises en œuvre sur le banc MERCATO : la technique LDA (Laser Doppler Anemometry) qui permet de mesurer des profils de vitesse gazeuse, et la méthode PDA (Phase Doppler Anemometry) qui donne accès aux vitesses de la phase liquide. Le préchauffage de l'air limite l'accumulation de gouttes sur les hublots de visualisation, permettant ainsi de mesurer des profils de vitesse par LDA/PDA sur une large plage de sections. Le dispositif de mesure mis en place permet une acquisition des profils de vitesse liquide et gazeuse par LDA/PDA sur cinq sections placées à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre (voir Fig. 5.3). Pour ce point de fonctionnement, on distingue trois cas :

- Un cas monophasique, sans injection de carburant. Pour ce cas, les mesures LDA ont été effectuées sur des gouttes d'huile d'olive servant de traceurs, pulvérisées dans l'écoulement en amont du système d'injection.
- Un cas diphasique avec un débit de carburant de 1 g/s. Dans ce cas, une fine pellicule de kérosène formée sur les hublots de visualisation limite le nombre de plans de mesures. Les mesures ont été réalisées dans les sections à 6 et 26 mm. Afin de limiter l'influence du film liquide sur les fenêtres, une mesure supplémentaire a été faite sur les traversées à 56 mm en forçant le débit d'air à 18 g/s au lieu de 15 g/s. Les profils de vitesse dans le plan à 56 mm devront donc être traités avec prudence.

Référence	Description du point de fonctionnement	Etudes numériques associées
Garcia-Rosa [70]	Point de mise en place : monophasique et diphasique non réactif, avec préchauffage ¹	Garcia-Rosa [70] Etude de la combustion diphasique
	T_g (K) 463	Lamarque [107] Etude de la combustion diphasique
	T_l (K) 285	Roux [166] Validation du schéma PSI pour la phase dispersée
	\dot{m}_l (g/s) 0, 1, 2	Sanjose [173] Validation de la méthode Euler/Euler mésoscopique et du modèle d'injection FIMUR
Rosa [70]	Diagnostics : LDA/PDA	Vié [217] Validation de la méthode Euler/Euler multiclasse
	- 6, 26, 56, 86 et 116 mm de l'injection pour le cas monophasique	Senoner [185] Etude de l'impact du modèle d'injection
	- 6, 26, 56 mm de l'injection pour le cas à 1 g/s	Sierra-Sanchez [190] Etude et comparaison de modèles d'évaporation
	- 6 mm de l'injection pour le cas à 2 g/s	Lerderlin [114] Confronter les modèles (Lagrangien, chimie tabulée) à une configuration diphasique semi-industrielle.
	Point validation sol : diphasique réactif	Lamarque [107] Etude de la combustion diphasique
	T_g (K) 285	
	T_l (K) 285	
	\dot{m}_g (g/s) 3 26	
	Point Dépression TA : cas diphasique réactif déprimé	
	T_g (K) 285	
	T_l (K) 285	
	\dot{m}_g (g/s) 3 15	
	Point haute altitude : cas visant à reproduire les conditions de fonctionnement en haute altitude	
	T_g (K) 233	
	T_l (K) 233	
	\dot{m}_g (g/s) - 15	
Lecourt [112]	TIMECOP : cas réactif	Linassier [119] Etude de l'allumage diphasique
	T_g (K) 293	
	T_l (K) 293	
	\dot{m}_g (g/s) 1-3.5 11.5-35	
Linassier [119]	TIMECOP : cas non réactif	
	T_g (K) 463	
	T_l (K) 285-293	
	\dot{m}_l (g/s) 0.45-2 6.6-19.8	
	Point de référence : cas diphasique réactif	Linassier [119] Cartographie d'allumage
	T_g (K) 293	Eyssartier [52] Etude de l'allumage
	T_l (K) 293	Bruyat [20] Impact de l'évaporation multicomposant sur l'allumage
	\dot{m}_g (g/s) 2.25 35	Hannebique [80] Analyse de l'effet de la polydispersion

TABLE 5.1 – Points de fonctionnement expérimentaux du brûleur MERCATO et études numériques associées.

- Un cas diphasique avec un débit de carburant de 2 g/s. L'augmentation du débit de carburant limite encore les mesures de vitesse, qui sont dans ce cas disponibles uniquement dans la section à 6 mm.

Etant données le peu de données expérimentales pour le cas à 2 g/s, seuls les cas monophasique et diphasique à 1 g/s seront modélisés.

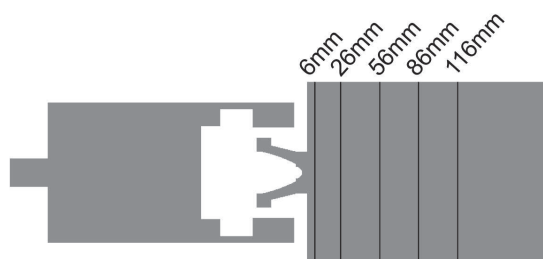


FIGURE 5.3 – Position axiale des plans de mesures dans la chambre MERCATO - Cas non réactif.

5.2.2 Point de fonctionnement réactif

L'importante diversité des diagnostics expérimentaux menés sur le banc MERCATO, due aux difficultés inhérentes aux techniques employées qui ont obligé à des changements de conditions opératoires, parfois en cours de campagnes d'essais, ont conduit à une multiplication des points de fonctionnement étudiés. Afin de recentrer les efforts, la thèse de Linassier [119] et les travaux qui ont suivi, se sont concentrés sur l'étude du point de fonctionnement mis en place par Linassier, et qualifié de "point de référence". Les conditions opératoires ont été judicieusement choisies au vu des point de fonctionnement étudiés jusque là, pour assurer l'allumage de la chambre et faciliter la mise en place de diagnostics optiques. C'est donc ce point de fonctionnement qui a été modélisé dans les travaux présentés ici. Les conditions opératoires sont résumées dans le Tableau 5.1.

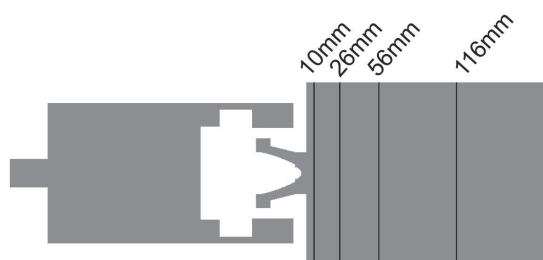


FIGURE 5.4 – Position axiale des plans de mesures dans la chambre MERCATO - Cas réactif.

Les diagnostics LDA ont permis de mesurer des profils de vitesse axiale moyenne et fluctuante gazeuses à différentes positions en aval de l'injecteur : 10, 26, 56 et 116 mm. Des mesures PDA ont permis de capturer les profils de vitesse axiale moyenne et fluctuante liquide dans les quatre mêmes sections. Ces plans de mesure sont rappelés sur la Fig. 5.4.

5.3 Mise en œuvre du calcul

5.3.1 Paramètres numériques

Les deux calculs sont effectués à l'aide du solveur à densité variable introduit dans la Section 3.4. La phase gazeuse est modélisée par un spray de particules Lagrangiennes. La stratégie de couplage des particules avec la phase gazeuse est de type two-way coupling sur la masse, la quantité de mouvement et l'énergie (Section 3.3). L'approche Lagrangienne permet de gérer facilement la polydispersion du spray. La distribution de diamètre des particules est donc modélisée à l'injection par une PDF discrète de 50 classes de gouttes visant à reproduire une distribution de Rosin-Rammler, représentée sur la Fig. 5.5.

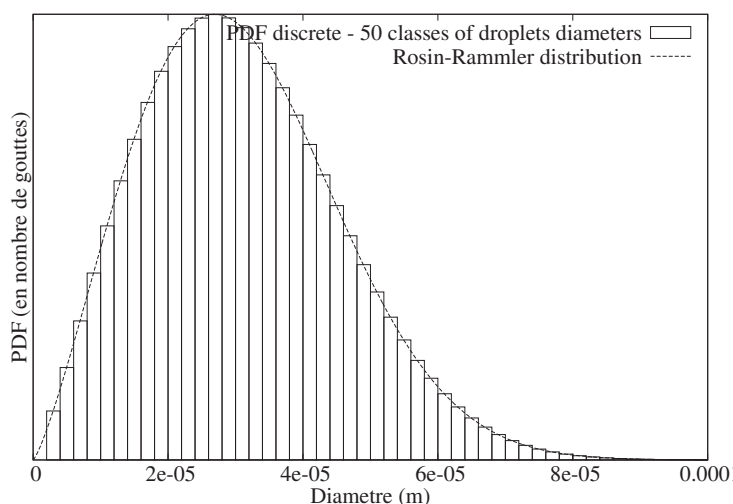


FIGURE 5.5 – Distribution de Rosin-Rammler (ligne pointillée), et distribution discrète utilisée dans la simulation (histogramme).

	Maillage 1	Maillage 2
Nombre de cellules	40 M	326 M
Nombre de noeuds	7.6 M	59.7 M
Taille de maille à l'injection	0.15 mm	0.07 mm
Taille de maille dans la flamme	0.6 mm	0.3 mm

TABLE 5.2 – Caractéristiques du maillage du brûleur MERCATO.

Le domaine de calcul est représenté sur la Fig. 5.6. Il inclut le raccord d'aspiration vertical, qui permet la mise en dépression de la chambre. La campagne d'essai correspondant aux conditions opératoires non réactives a été réalisée sans ce raccord. Cependant, le même maillage, comprenant la chambre et la trompe d'aspiration sera utilisé pour les deux simulations. Le maillage est composé de 40 millions de tétraèdres. La résolution dans les zones les plus raffinées, situées dans les vrilles et à la sortie du système d'injection, est de l'ordre de 150 microns. Le ratio entre la taille des plus petites cellules et le diamètre des plus grosses particules, allant jusqu'à 100 microns, est donc d'environ 1.5, on atteint donc les limites de validité des hypothèses de l'approche de point force. Cependant, ce ratio concerne le cas extrême et localisé des plus grosses particules situées dans la zone du domaine la plus résolue. Vu la distribution de taille de gouttes utilisée pour ces simulations, les particules ayant un diamètre



FIGURE 5.6 – Domaine de calcul modélisé dans les simulations du banc MERCATO (gauche), et coupe médiane du maillage grossier (droite).

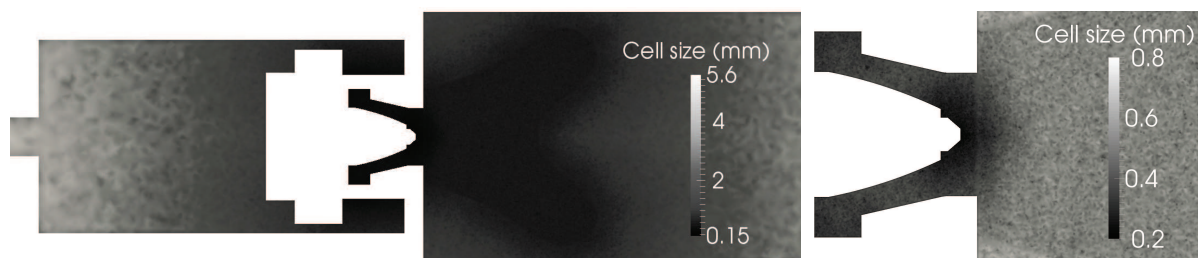


FIGURE 5.7 – Résolution du maillage à 40M de cellules (gauche), et zoom sur la zone d’injection (droite). Les plus petites cellules ont une taille d’environ $150 \mu\text{m}$ à la sortie du swirler.)

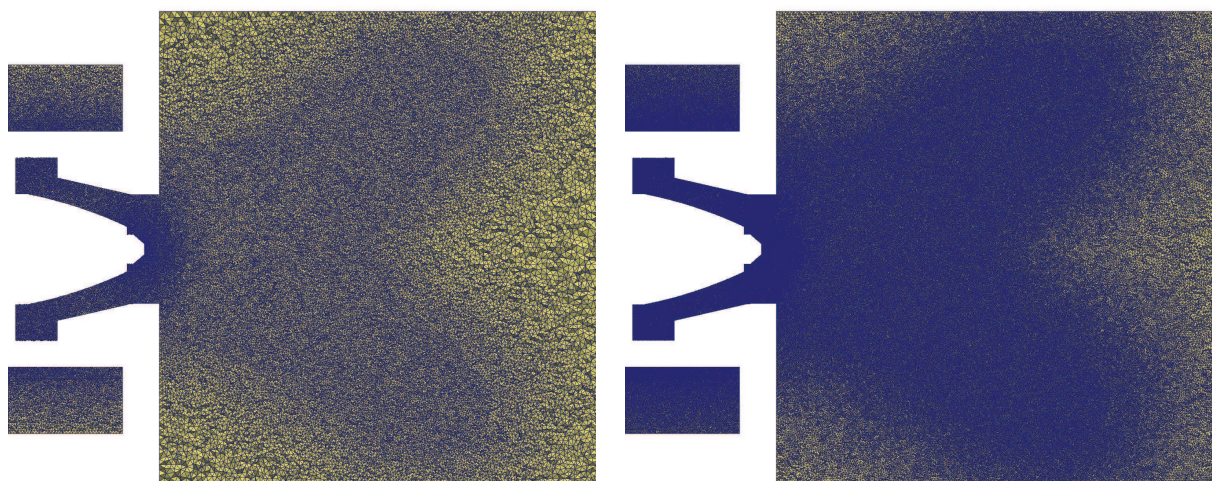


FIGURE 5.8 – Maillage grossier : 40M de cellules, (gauche), et maillage après un niveau de raffinement homogène : 326M de cellules (droite).

supérieur à 80 microns sont très peu nombreuses. Par ailleurs, l'évaporation contribue à réduire la taille des particules. Si l'on considère le diamètre moyen D_{32} se situant autour de 35 microns, l'approche de point force est donc largement justifiée. Pour les deux points de fonctionnement, le calcul sera également réalisé sur un maillage plus résolu, obtenu en appliquant un raffinement homogène au maillage initial. Chaque tétraèdre étant découpé en huit, le maillage résultant comporte donc 326 millions de cellules. Les caractéristiques de ces deux maillages sont résumées dans la Table 5.2.

Le modèle d'évaporation présenté dans la Section 3.3.2.2 est utilisé pour prendre en compte la production de kérosène gazeux, sous la forme du surrogate à une seule espèce introduit dans la Section 3.2.2.1. Un cas test de validation de l'évaporation du kérosène sera présenté dans la Section 5.3.3. En ce qui concerne la turbulence, le modèle de sous-maille Smagorinsky dynamique (Section 3.1.3.2) est utilisé. Dans le cas réactif, la combustion est modélisée à l'aide du schéma à deux étapes BFER (Section 3.2.2.2), et les interactions chimie-turbulence sont prises en compte par le modèle TFLES dynamique (Section 3.2.2.2).

Les conditions aux limites sont résumées dans la Table 5.3. Toutes les parois, supposées adiabatiques, sont modélisées par des conditions d'adhérence pour le gaz, et de rebond pour les particules. L'entrée est modélisée par une condition de débit, sans injection de turbulence, l'essentiel de la turbulence dans la chambre étant générée par le passage de l'air dans le swirler. Le traitement de la condition d'entrée liquide et la signification des paramètres de l'injecteur seront détaillés dans la Section 5.3.2.

Nom	Type	Paramètres physiques			
		Cas non-réactif		Cas réactif	
Inlet	Débit imposé	Temperature	$T = 463 \text{ K}$	Temperature	$T = 293 \text{ K}$
		Fractions massiques	$Y_{N_2} = 0.76$ $Y_{O_2} = 0.24$	Fractions massiques	$Y_{N_2} = 0.76$ $Y_{O_2} = 0.24$
		Débit massique	$\dot{m} = 15 \text{ g/s}$	Débit massique	$\dot{m} = 35 \text{ g/s}$
Injection	LISA	Temperature	$T = 300\text{K}$	Temperature	$T = 293\text{K}$
		Fractions massiques	$Y_{KERO} = 1$	Fractions massiques	$Y_{KERO} = 1$
		Débit massique	$\dot{m} = 1 \text{ g/s}$	Débit massique	$\dot{m} = 2.25 \text{ g/s}$
		Rayon	$R_0 = 0.25\text{mm}$	Rayon	$R_0 = 0.25\text{mm}$
		Angle	$\gamma_s = 30^\circ$	Angle	$\gamma_s = 30^\circ$
Parois		Gaz : parois adhérentes, adiabatiques - Particules : rebond élastique			

TABLE 5.3 – Conditions aux limites.

5.3.2 Modélisation de l'injection de carburant

5.3.2.1 Description du modèle

Dans le cadre de la simulation du brûleur diphasique MERCATO, une attention particulière doit être apportée pour la modélisation de l'injection de carburant. En effet, les brûleurs aéronautiques sont équipés d'injecteurs swirlés mécaniques. Ces injecteurs sont constitués d'une chambre de swirl dans laquelle le fluide sous pression est injecté tangentiellement et mis en rotation. Le carburant est ensuite expulsé à travers un orifice de sortie. Le mouvement de giration induit une remontée d'air à l'intérieur de la sortie de l'atomiseur, le fluide est donc éjecté sous la forme d'une nappe liquide conique. La nappe liquide sortant de l'injecteur à des vitesses importantes est ensuite déstabilisée et désintégrée sous forme

d'un brouillard de gouttes. La Fig. 5.9, tirée des travaux de Cessou est une photographie du spray formé à la sortie d'un injecteur. On observe très distinctement les deux régimes de désintégration : la nappe liquide en sortie d'injecteur (zone A), et le brouillard de gouttes qui résulte de l'atomisation primaire et secondaire de cette nappe liquide (zone B). La vue en coupe d'un injecteur swirlé est présentée Fig. 5.10.

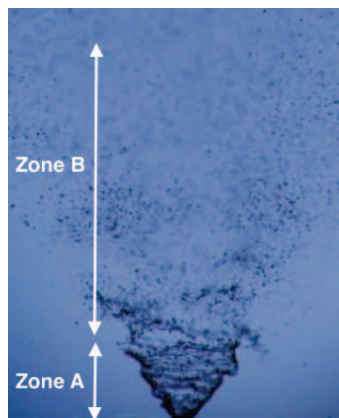


FIGURE 5.9 – Photographie du spray de carburant SAFIR, issue des travaux de Cessou [27].

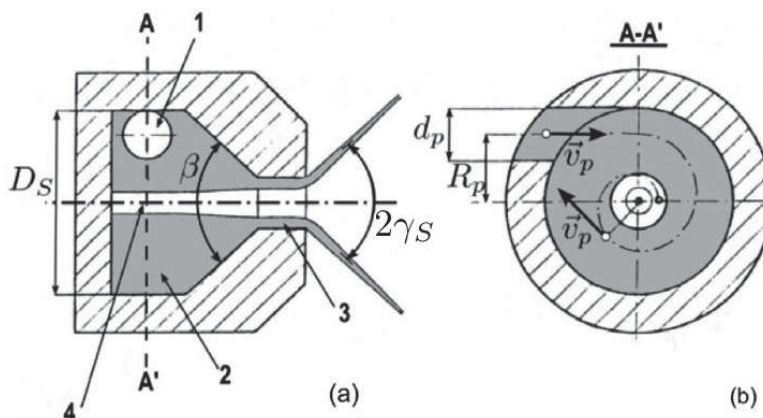


FIGURE 5.10 – Vue en coupe d'un atomiseur pressurisé swirlé et détail des paramètres géométriques. La surface grisée matérialise la nappe liquide, les surfaces hachurées représentent le solide [115].

La simulation numérique du phénomène d'atomisation est un sujet complexe qui fait l'objet d'études spécifiques, et fait appel à des méthodes numériques avancées de suivi d'interface et dont le coût de calcul serait prohibitif dans le cadre de la modélisation d'une chambre de combustion complète.

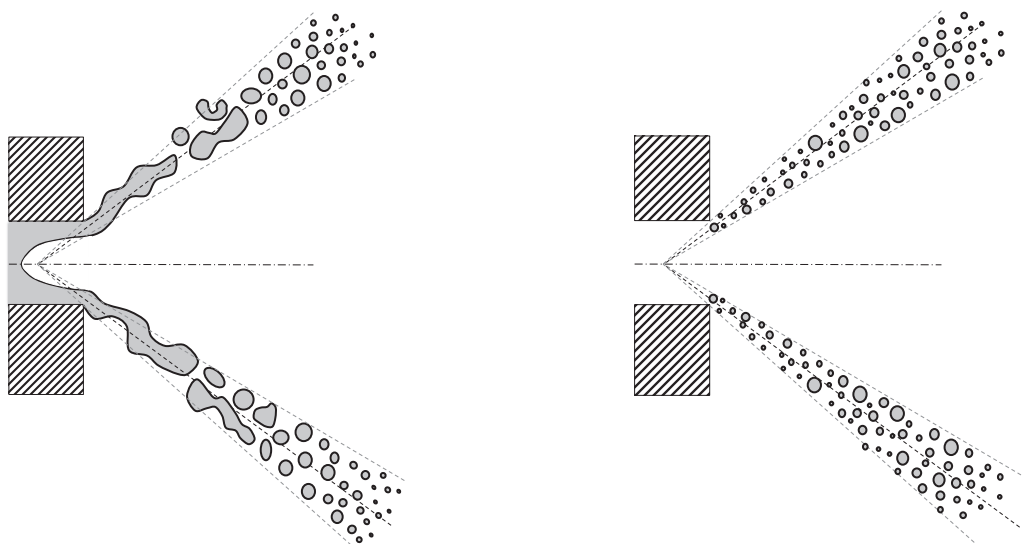


FIGURE 5.11 – Topologie réaliste du spray en sortie d'injecteur (gauche), et approximation pour l'injection de particules Lagrangiennes (droite)

L'approche choisie pour modéliser le spray dans ce genre de contexte consiste à négliger l'effet de la phase d'atomisation et à injecter directement un brouillard de gouttes à la sortie de l'injecteur, comme illustré sur la Fig. 5.11. Cette solution a déjà été envisagée sur cette même configuration dans le cadre des travaux de Sanjose [173] qui a développé un modèle pour l'injection liquide dans les atomiseurs

swirlés, dans le cadre de simulations Euler-Euler. Senoner a lui aussi abordé cette problématique en injectant un spray Lagrangien établi à la sortie de l'injecteur, couplé à un modèle d'atomisation secondaire qui génère des petites gouttes à partir des plus grosses jusqu'à obtenir la distribution de diamètre souhaitée. La thèse d'Enjalbert [48] fait également état de la difficulté de modéliser le spray en sortie d'injecteur dans le cadre d'une simulation Lagrangienne. Il explique qu'en l'absence de la nappe liquide en sortie d'injecteur, l'aérodynamique de l'écoulement est modifiée puisque l'écoulement co-courant peut alors traverser le spray. Cette différence dans la topologie de l'écoulement est illustrée dans la thèse de Hannebique [80], qui a utilisé le modèle d'injection de Sanjose dans des simulations Lagrangiennes polydisperse. Les lignes de courant qui pénètrent au centre du cône creux en l'absence de nappe liquide cohérente entraînent les plus petites gouttes au centre de l'injecteur. Ce phénomène a pour effet d'accroître la ségrégation des particules et l'accumulation de petites particules près de l'axe de l'injecteur.

La modélisation précise du spray n'étant pas l'objectif principal de cette étude, et le brouillard de gouttes étant par ailleurs fortement perturbé par l'écoulement d'air co-courant qui sort du tourbillonneur, un modèle simple a été développé pour reproduire l'injection, à partir du modèle FIMUR (Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction) issu des travaux de Sanjose et Senoner. Le modèle FIMUR pour les simulations Lagrangiennes suppose que le spray est établi à la sortie de l'injecteur, et s'attache à décrire le profil de vitesse à imposer aux particules injectées. Il repose sur la description de l'écoulement dans l'atomiseur établie par Lefebvre [115].

En sortie d'injecteur, le swirl génère une recirculation d'air au centre de l'atomiseur, responsable de l'éclatement du spray en forme de cône creux. Le cône d'air remonte jusqu'en amont du plan d'injection, la surface de sortie du liquide est donc modélisée comme une couronne, dont le rayon extérieur correspond au rayon de sortie de l'atomiseur, R_0 , et le rayon intérieur au rayon du cône d'air R_a . Le rayon R_a étant dépendant du swirl, il est calculé à partir des formules de Risk et Lefebvre [165], qui corrélient l'angle d'ouverture moyen γ_s au ratio des surfaces du cœur gazeux A_a et de l'orifice de sortie de l'injecteur A_0 :

$$X = \frac{A_a}{A_0} = \left(\frac{R_a}{R_0} \right)^2 = \frac{\sin^2 \gamma_s}{1 + \cos^2 \gamma_s}. \quad (5.1)$$

Dans le modèle FIMUR, développé dans les thèses de Sanjose [173] et Senoner [185], la vitesse radiale liquide est supposée constante :

$$u_r = 0. \quad (5.2)$$

La vitesse axiale des particules est supposée égale à la vitesse axiale de la nappe liquide, elle même déduite de la conservation de la masse dans l'injecteur :

$$u_z = \frac{\dot{m}}{\rho\pi(R_0^2 - R_a^2)}. \quad (5.3)$$

La vitesse tangentielle, responsable de l'expansion radiale du jet est donnée par la conservation de la quantité de mouvement angulaire :

$$u_\theta = \frac{\dot{m}R_s}{r\rho A_p}. \quad (5.4)$$

Cependant, cette formulation n'assure pas strictement l'angle de spray prescrit, qui est pourtant un paramètre d'entrée du modèle. Par ailleurs, le paramètre A_p est une donnée géométrique de l'injecteur et n'est pas forcément connu.

Un nouveau modèle, reposant sur les mêmes hypothèses de départ, et basé sur des considérations géométriques a donc été proposé et implanté dans YALES2, sous l'appellation LISA (Liquid Injection for Swirled Atomizers). Les paramètres d'entrée sont le débit massique de liquide \dot{m} , l'angle moyen

d'ouverture du spray γ_s , et le rayon de sortie de l'atomiseur R_0 . La vitesse radiale des gouttes sur les points d'injection est supposée nulle et la vitesse axiale est déduite du débit carburant, elles sont donc décrites par les équations 5.2 et 5.3. La vitesse axiale est calculée de façon géométrique pour assurer le bon angle à la sortie, les particules étant supposées parfaitement inertielles.

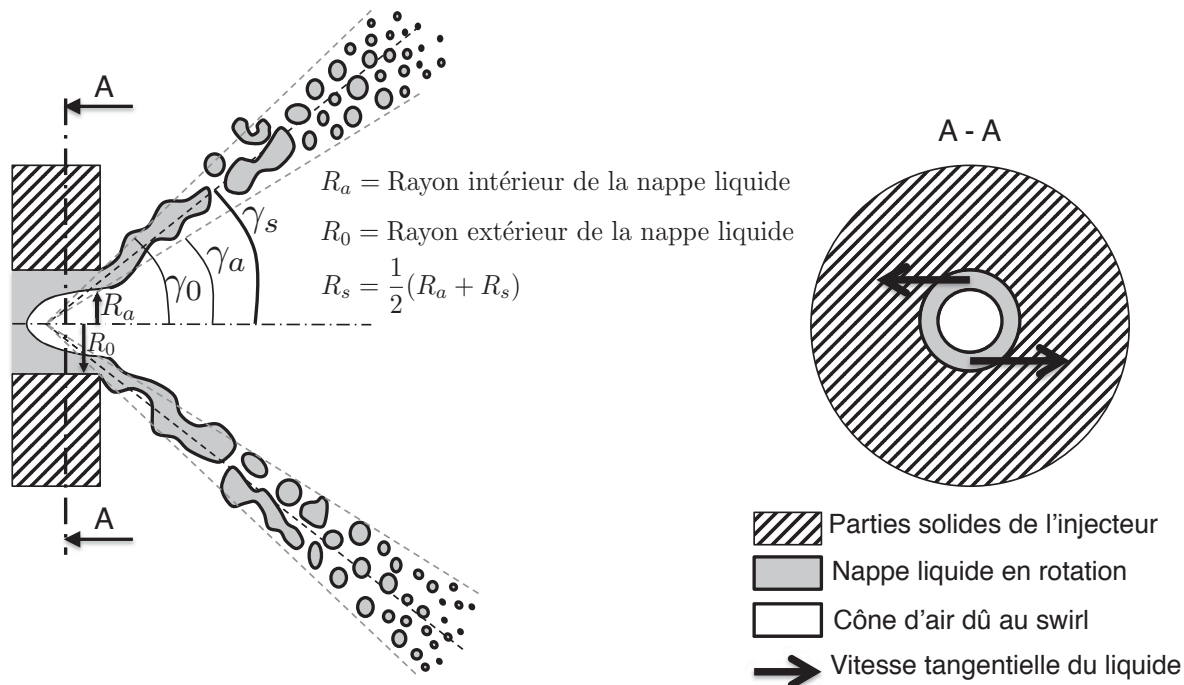


FIGURE 5.12 – Paramètres géométriques du spray en sortie d'injecteur.

Les particules sont injectées sur une couronne de rayon extérieur R_0 et de rayon intérieur R_a , calculé d'après l'Eq. 5.1. Le rayon R_s correspond au centre du film liquide, et γ_s à l'angle moyen d'ouverture du spray. Les particules, sont confinées entre les angles extrêmes γ_a et γ_0 correspondant respectivement à R_a et R_0 . Toutes ces notations sont illustrées sur la Fig. 5.12. Pour chaque particule, le point d'injection est choisi de manière aléatoire sur la couronne de sortie, suivant une loi uniforme. La vitesse d'injection de cette particule est ensuite déterminée à partir de sa position radiale sur la couronne, d'après la démarche décrite ci-dessous.

L'ouverture du spray est limitée à l'intervalle $[\gamma_a, \gamma_0]$, et l'angle auquel doit être injecté chaque particule dépend uniquement de sa position radiale. Comme illustré sur la Fig. 5.13, une particule injectée à un rayon R_i compris entre R_a et R_0 doit avoir une trajectoire qui donne un angle γ tel que :

$$\tan \gamma = \frac{R_i}{\delta z} = \frac{R_i}{R_s} \tan \gamma_s. \quad (5.5)$$

Observons maintenant la trajectoire d'une particule, injectée à un rayon R_i , compris entre R_a et R_0 , illustrée sur la Fig. 5.13. Au bout d'un temps t quelconque, la particule qui se déplace à vitesse constante (on rappelle que les particules sont considérées comme parfaitement inertielles), se trouve alors à une distance à l'axe :

$$R(t) = \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}, \quad (5.6)$$

où $x(t)$ et $y(t)$ sont les coordonnées de la particule à l'instant t dans le plan (x, y) , et dépendent de la

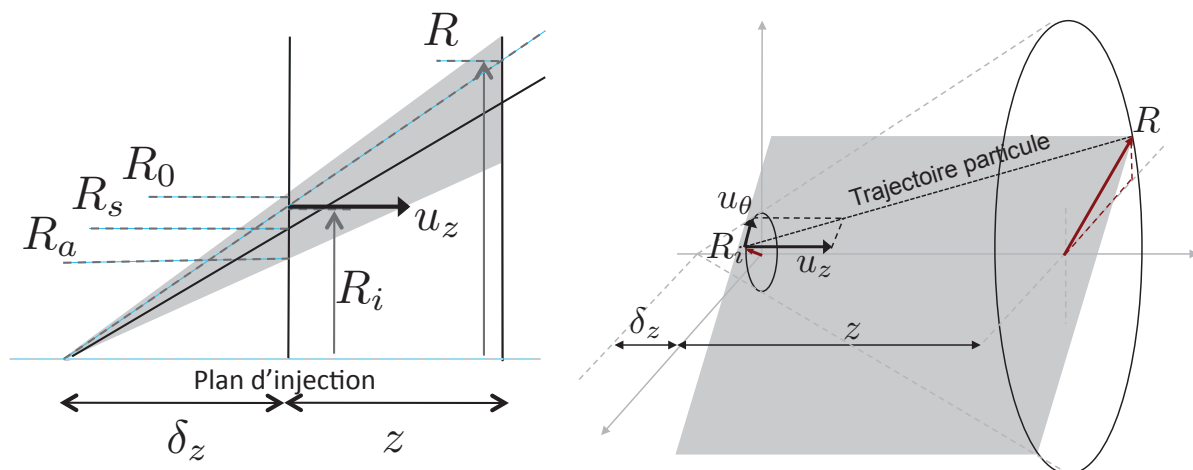


FIGURE 5.13 – Paramètres géométriques de l'injecteur LISA.

position initiale de la particule, et de sa vitesse dans le plan (x, y) :

$$x(t) = x_i + u_{\theta,x}t \quad \text{et} \quad y(t) = y_i + u_{\theta,y}t. \quad (5.7)$$

On obtient donc pour $R(t)$:

$$R(t)^2 = (x_i + u_{\theta,x}t)^2 + (y_i + u_{\theta,y}t)^2 \quad (5.8)$$

$$= (x_i^2 + y_i^2) + 2t(xu_{\theta,x} + yu_{\theta,y}) + t^2(u_{\theta,x}^2 + u_{\theta,y}^2) \quad (5.9)$$

$$= R_0^2 + t^2u_{\theta}^2 \quad (5.10)$$

Sur la coordonnée axiale, la particule s'est déplacée d'une distance $z = u_z t$, ce qui permet d'obtenir une relation décrivant le rayon du spray en fonction de la position axiale, des vitesses d'injection, et du rayon auquel la particule a été injectée :

$$R(z) = \sqrt{\left(\frac{u_{\theta}z}{u_z}\right)^2 + R_i^2}. \quad (5.11)$$

Cette fonction est tracée sur la Fig. 5.14, et tend rapidement vers l'asymptote oblique $u_{\theta}z/u_z$ quand $z \gg R_i$. Cette approximation peut être faite ici dans la mesure où le rayon de sortie de l'injecteur est très faible devant les dimensions du domaine de calcul, ce qui donne :

$$R(z) = \frac{u_{\theta}z}{u_z}. \quad (5.12)$$

L'angle d'ouverture est relié à $R(z)$ par la relation :

$$\tan \gamma = \frac{R(z)}{z + \delta z} \quad \text{avec} \quad \frac{\delta z}{z} = \frac{R_i}{R(z)}, \quad (5.13)$$

ce qui donne en faisant l'hypothèse que $R_i \ll R(z)$:

$$\tan \gamma = \frac{R(z)}{z + \frac{zR_i}{R(z)}} = \frac{R(z)^2}{z(R(z) + R_i)} \simeq \frac{R(z)}{z}. \quad (5.14)$$

L'angle d'ouverture du spray s'écrit donc :

$$\tan \gamma = \frac{R(z)}{z} = \frac{u_{\theta}}{u_z}, \quad (5.15)$$

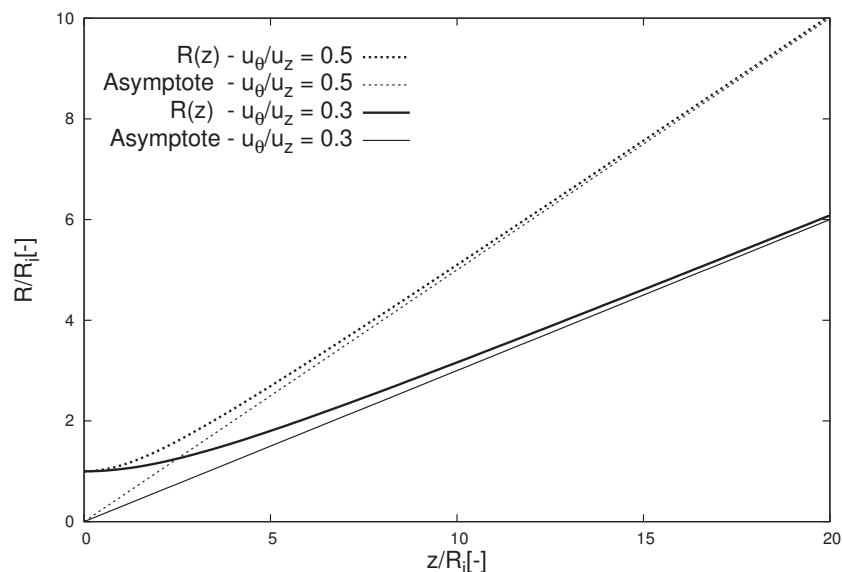


FIGURE 5.14 – Distance à l’axe en fonction du rayon d’injection, du ratio de vitesse axiale et tangentielle, et de la position axiale - Formule analytique de l’Eq. 5.11 (traits épais), et relation approchée de l’Eq. 5.12 (traits fins).

ce qui donne la relation suivant pour la vitesse tangentielle :

$$u_{\theta} = u_z \tan \gamma. \quad (5.16)$$

Cette relation permet de calibrer la vitesse tangentielle en fonction de la vitesse axiale pour imposer aux particules la giration nécessaire pour obtenir l’angle d’ouverture requis.

Les paramètres du modèle d’injection LISA sont synthétisés dans la Table 5.4.

5.3.2.2 Cas test de validation

Le modèle d’injection LISA est validé sur un cas test consistant en un spray de particules, généré par un atomiseur swirlé, placé dans une chambre cylindrique. Les particules sont injectées dans une atmosphère au repos. Cette configuration, qui a également servi à la validation du modèle d’injection FI-MUR dans le code AVBP dans la thèse de Hannebique [80], correspond à celle de l’expérience menée par Yang *et al.* [227]. Les profils de vitesse axiale moyenne pour la phase liquide sont donc confrontés à des valeurs expérimentales disponibles dans six plans de mesure en aval de l’injecteur. Ces mesures ont été réalisées à partir de diagnostics PDA. La chambre est également équipée d’un système de visualisation directe à l’aide d’une caméra haute fréquence permettant d’obtenir des photographies du spray.

Le gaz dans la chambre est à pression et température ambiante. Les parois de la chambre sont modélisés par des murs avec condition de glissement. Un faible écoulement co-courant à 6 m/s est imposé en entrée, comme dans la simulation présentée par Hannebique [80]. En ce qui concerne le spray, une distribution de type Rosin-Rammler, centrée autour du diamètre moyen $d_p = 60 \mu\text{m}$ est imposée pour le diamètre des particules. Les paramètres d’entrée pour le modèle LISA sont donnés par les caractéristiques de l’injecteur, et sont résumés dans la Table 5.5.

Un maillage composé de 3.3 millions de tétraèdres est utilisé. Une vue 3D du domaine de calcul, une coupe du maillage utilisé, ainsi qu’un schéma rappelant les conditions aux limites utilisées sont

Paramètres généraux de l'injecteur				
Paramètres d'entrée	γ_s	°	Angle moyen	
	\dot{m}	g/s	Débit massique	
	R_0	m	Rayon de sortie	
Paramètres de l'injecteur	X	-	Ratio surfacique	$f(\gamma_s)$
	R_a	m	Rayon du cône d'air	$f(X)$
	R_s	m	Rayon médian	$f(R_0, R_a)$
	γ_0	°	Angle d'ouverture maximal	$f(\gamma_s, R_a, R_s)$
	γ_a	°	Angle d'ouverture minimal	$f(\gamma_s, R_0, R_s)$
	u_z	m/s	Vitesse axiale	$f(\dot{m}, R_0, R_a)$
Paramètres spécifiques à chaque particule				
Paramètres aléatoires	R_i	m	Position radiale de la particule sur la couronne d'injection	Tirage aléatoire
	α	°	Position azimutale de la particule sur la couronne d'injection	Tirage aléatoire
Paramètres de la particule	γ	m	Angle d'ouverture	$f(\gamma_s, R_i, R_s)$
	u_θ	m/s	Vitesse tangentielle	$f(\gamma, u_z)$

TABLE 5.4 – Synthèse des paramètres de l'injecteur et du spray.

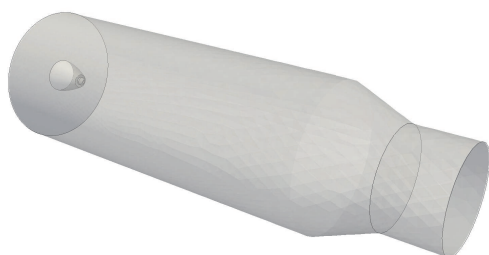


FIGURE 5.15 – Géométrie 3D du domaine de calcul.

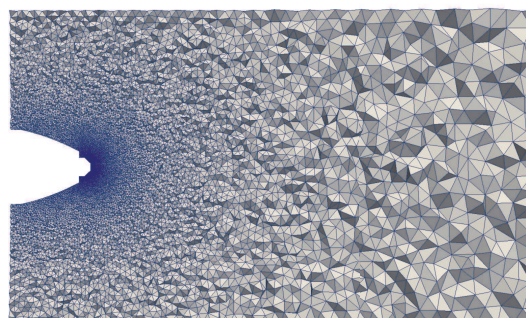


FIGURE 5.16 – Coupe du maillage dans le plan médian.

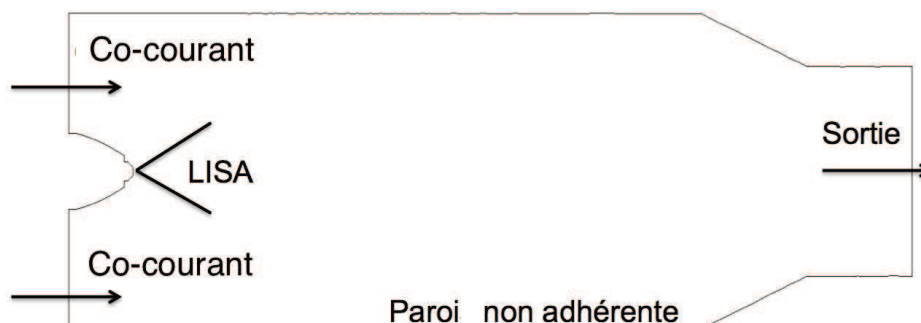


FIGURE 5.17 – Schéma des conditions aux limites utilisées.

\dot{m} (g/s)	R_0 (mm)	γ_s (°)
3	0.25	30

TABLE 5.5 – Paramètres du modèle d'injection.

représentés sur les Fig. 5.15, 5.16 et 5.17.

Une photographie du spray est comparée à une vue de côté du champ de particules sur la Fig. 5.18. Cette première visualisation permet de constater que l'angle de spray est correctement reproduit.



FIGURE 5.18 – Photographie du spray (gauche), et ensemble des particules dans la simulation Lagrangienne (droite).

Les particules, injectées à une vitesse plus importante que le gaz, mettent la phase gazeuse en mouvement dans la zone d'injection, sous l'effet du two-way coupling. Les plus petites particules sont immédiatement entraînées par ces vitesses importantes et ont tendance à s'accumuler près de l'axe de l'injecteur. Les plus grosses particules sont peu influencées par la phase gazeuse et conservent l'angle imposé par le modèle d'injection. On assiste donc à une ségrégation des particules suivant leur taille, et rapidement la topologie du spray en cône creux disparaît, la zone centrale étant remplie de petites particules. Ce phénomène est illustré sur la Fig. 5.19, qui montre le spray, décomposé en trois classes de particules correspondant respectivement aux diamètres les plus faibles, intermédiaires et les plus importants.

La comparaison avec les profils expérimentaux, tracés sur la Fig. 5.20 permet de constater une sous-estimation de la vitesse au centre de l'écoulement dans le plan le plus proche de l'injection, correspondant aux plus petites particules. Comme expliqué précédemment, ce problème est lié à la non prise en compte de la phase d'atomisation primaire. L'absence de film liquide permet aux lignes de courant de traverser le spray et d'entraîner des particules au centre de l'écoulement. Pour obtenir une meilleure prédiction de la dynamique en proche injecteur, il faudrait alors introduire un modèle visant à reproduire les effets de l'atomisation, ou bien injecter les particules plus en aval, un fois le spray établi. On observe également une légère sur-estimation de la vitesse à la périphérie du spray, dans laquelle on retrouve essentiellement les grosses particules. Cependant, les profils de vitesse sont globalement en bon accord avec les mesures.

Ce modèle est donc jugé suffisamment prédictif pour être utilisé dans les simulations du brûleur MERCATO, d'autant plus que dans ce type de configuration plus réaliste, les particules ne sont pas injectées dans une atmosphère au repos, mais dans un écoulement fortement turbulent dans lequel les

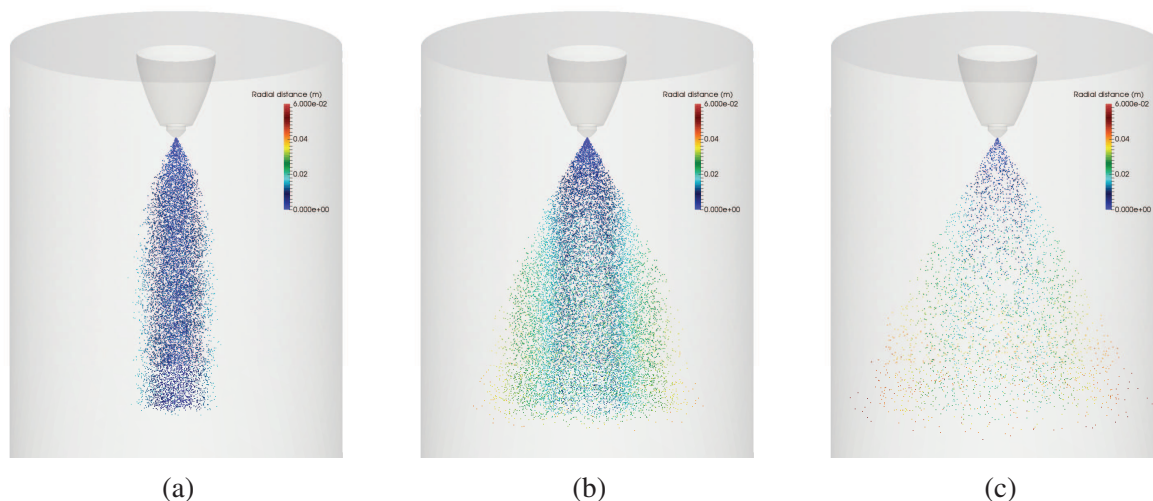


FIGURE 5.19 – Particules ayant un diamètre inférieur à $30 \mu\text{m}$ (a) - Particules ayant un diamètre compris entre $30 \mu\text{m}$ et $60 \mu\text{m}$ (b) - Particules ayant un diamètre supérieur à $60 \mu\text{m}$ (c).

vitesse sont plus importantes que la vitesse d'injection des particules. L'impact du modèle d'injection est donc considérablement réduit par rapport à la configuration présentée ici, et la distribution spatiale des particules est très rapidement contrôlée par la phase gazeuse plutôt que par l'injection elle-même.

5.3.3 Validation du modèle d'évaporation

Afin de valider le choix du modèle d'évaporation utilisé et son implantation dans le solveur YALES2, un cas test d'évaporation d'une goutte isolée dans une atmosphère au repos a été simulé et confronté à des résultats expérimentaux. Les hypothèses du modèle, détaillées dans la Section 3.3.2.2, sont rappelées ci-dessous :

- *Hypothèse 1* : La goutte est supposée parfaitement sphérique, et isolée : les interactions avec les autres particules ne sont pas prises en compte.
- *Hypothèse 2* : La conductivité thermique du liquide est supposée infinie, la température dans la goutte est uniforme.
- *Hypothèse 3* : La diffusivité thermique $\mathcal{D}_{th} = \lambda/\rho C_p$ du liquide étant très inférieure à celle du gaz, le temps caractéristique thermique de la phase porteuse est très court devant celui de la goutte. La réponse thermique est donc supposée quasi-stationnaire dans le gaz.
- *Hypothèse 4* : La surface de la goutte est supposée à l'équilibre thermodynamique avec le gaz.

La validation de ce modèle d'évaporation par un cas test de goutte isolée a quelques limites. En effet, dans un gaz au repos, on observe des gradients de température et de concentration dans la goutte, ce cas sort donc légèrement du cadre de l'hypothèse de conductivité infinie dans la goutte. En pratique, dans le cas d'un spray dans un écoulement turbulent, cette hypothèse est plus réaliste puisque le gradient de vitesse entre la goutte et la phase gazeuse favorise l'uniformisation de la température dans le liquide, mais les gradients de vitesse ont tendance à déformer la goutte qui n'est alors plus parfaitement sphérique, ce qui remet en cause les hypothèses du modèle. La configuration de goutte isolée dans un environnement au repos, pour laquelle de nombreuses études expérimentales sont disponibles dans la littérature, est malgré tout un cas communément adopté pour la validation des modèles d'évaporation.

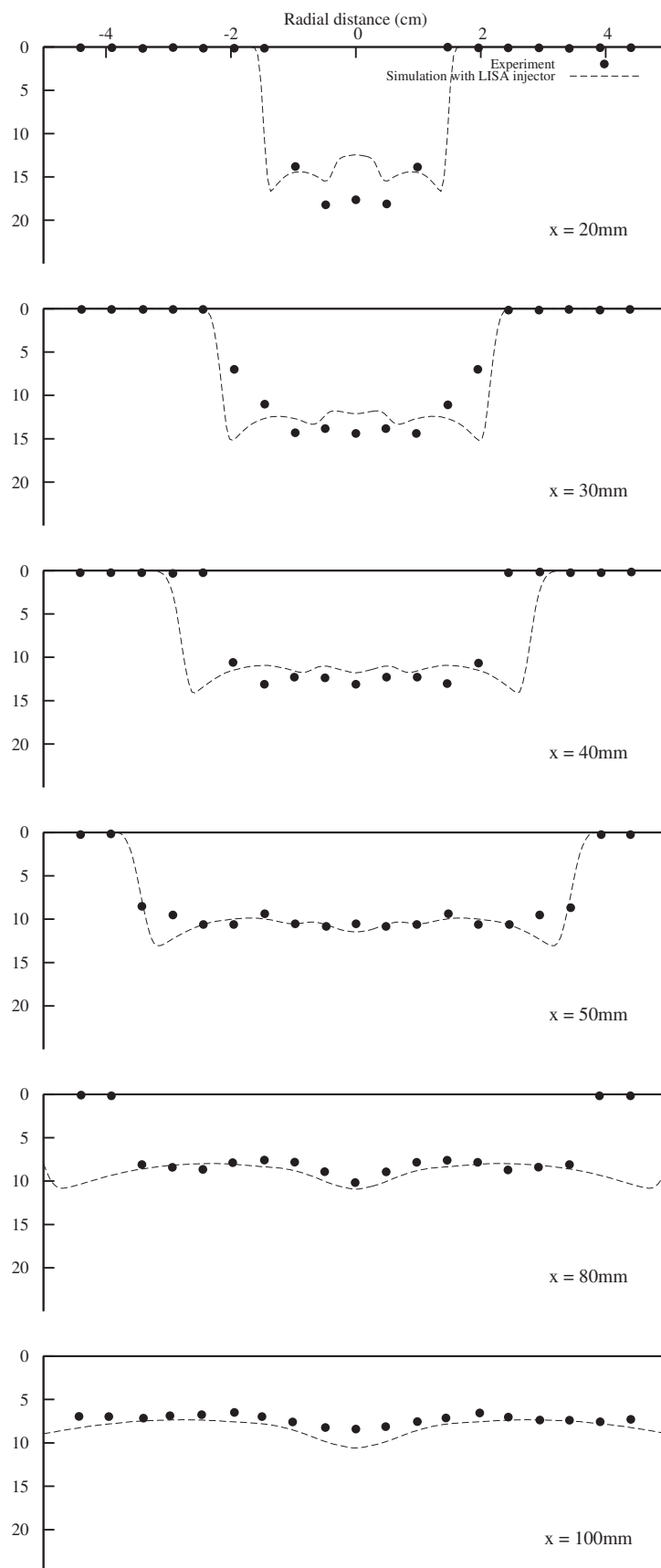


FIGURE 5.20 – Profils de vitesse axiale de la phase liquide (Symbole : Exp - Ligne continue : Simulation).

Les résultats sont confrontés aux mesures expérimentales de Ghassemi *et al.* [72]. Une goutte isolée de kérosène de diamètre initial $d_p = 1.52$ mm est placée dans une atmosphère au repos constituée de N_2 à 973K et 0.1 MPa. Ces paramètres correspondent à ceux de l'expérience menée par Ghassemi *et al.* [72]. Ce cas test a également servi de référence pour la validation du modèle d'évaporation d'AVBP, dans le cadre de la thèse de Sierra-Sanchez [190].

Le domaine de calcul est un cube de 10 cm de coté, fermé par des murs adiabatiques. Une particule est injectée au centre du domaine à une température initiale de 300 K, elle est réchauffée par le gaz environnant et s'évapore. On s'intéresse alors à l'évolution temporelle des grandeurs physiques de la goutte : diamètre, température, mais aussi à l'effet de l'évaporation sur la phase gazeuse.

Les évolutions du diamètre au carré, de la température de la goutte, du terme source d'enthalpie et de masse sont représentés sur les Fig. 5.21 et 5.22.

La goutte se réchauffe jusqu'à sa température d'ébullition, puis la loi en d^2 , introduite dans la Section 5.3.3 est retrouvée. Au fur et à mesure que la goutte se réchauffe, le taux d'évaporation augmente, jusqu'à atteindre un maximum lorsque la température de la goutte se stabilise à l'ébullition. Puis, lorsque la goutte commence à s'évaporer, son diamètre et donc la surface d'échange avec la phase gazeuse diminue, donc le terme source massique diminue.

Les résultats expérimentaux montrent une augmentation notable du diamètre de la goutte au cours de la phase de chauffage due à la dilatation thermique. Dans la simulation, la densité du liquide est supposée constante. L'évolution du diamètre de la goutte, et notamment la pente de la droite, correspondant au taux d'évaporation, est correctement prédite par le modèle d'évaporation, et en accord avec les résultats expérimentaux de Ghassemi. Les écarts constatés sur le temps total d'évaporation s'expliquent en partie par les différences observées pendant la phase transitoire de chauffage de la goutte.

Le temps d'évaporation est relativement bien reproduit. Sanjose [173] et Sierra-Sanchez [190] ont montré une importante dépendance du temps d'évaporation aux paramètres thermodynamiques, et notamment aux nombres de Schmidt et de Prandtl du liquide. Un calcul dynamique de ces grandeurs supposées constantes ici permettrait certainement d'améliorer la prédictivité du modèle. Par ailleurs, la goutte modélisée ici a un diamètre initial de 1.52 mm. Les particules modélisée dans le cadre de la simulation de MERCATO auront un diamètre compris entre $2 \mu\text{m}$ et $100 \mu\text{m}$, soit 15 à 750 fois inférieur. On peut donc raisonnablement supposer que l'impact du modèle sur la prédiction du temps d'évaporation sera moins important dans ce cas plus réaliste.

Enfin, la Fig. 5.23 montre l'effet de l'évaporation sur le milieu ambiant. La variation de masse dans le gaz correspond bien à la masse initiale de la goutte.

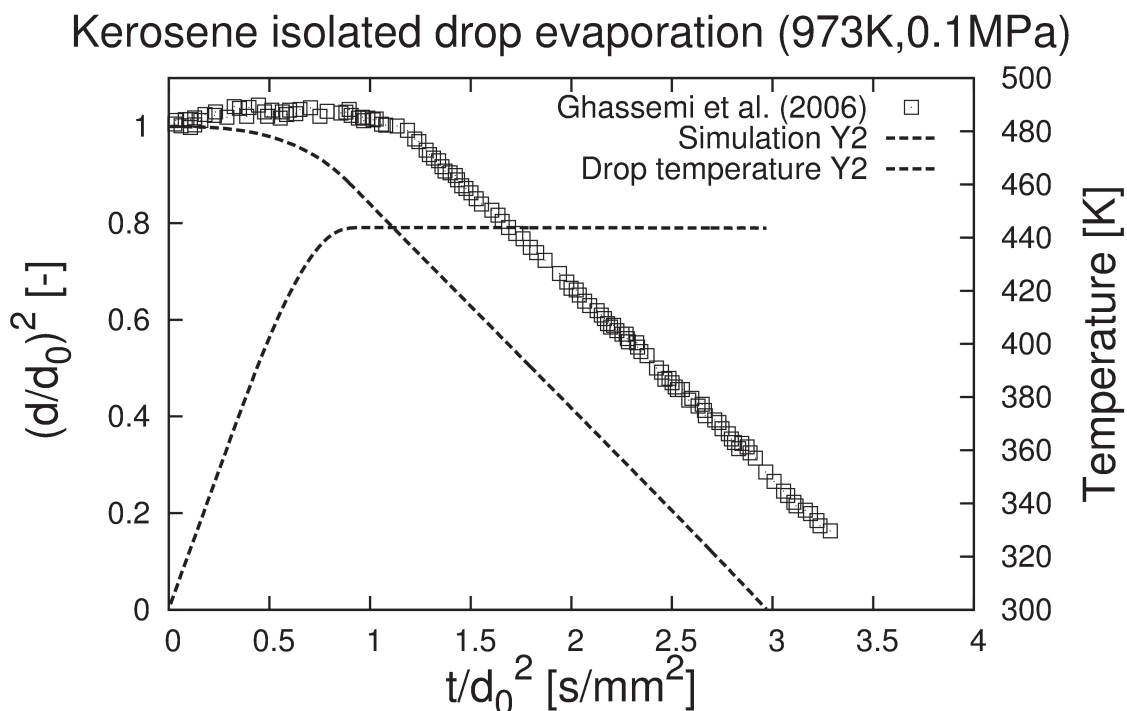


FIGURE 5.21 – Evaporation d’une goutte de kérosène : évolution du diamètre et de la température.

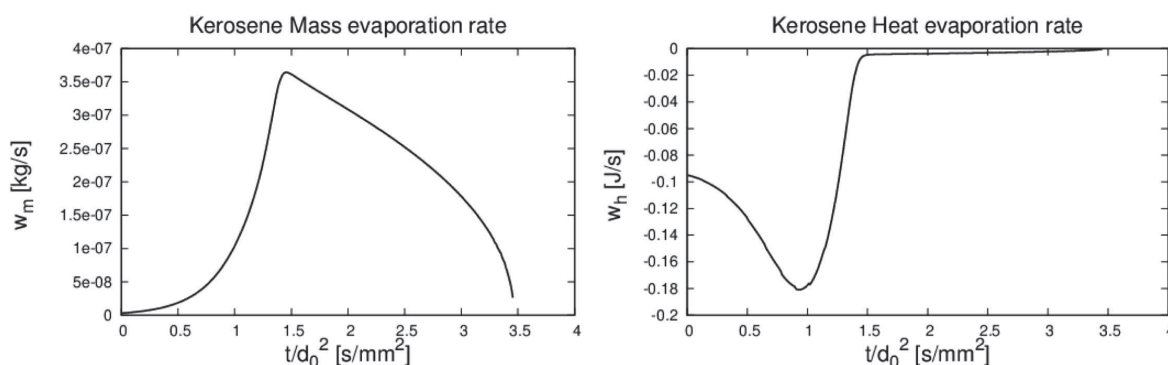


FIGURE 5.22 – Evaporation d’une goutte de kérosène : évolution du terme source de masse (gauche) et d’enthalpie (droite).

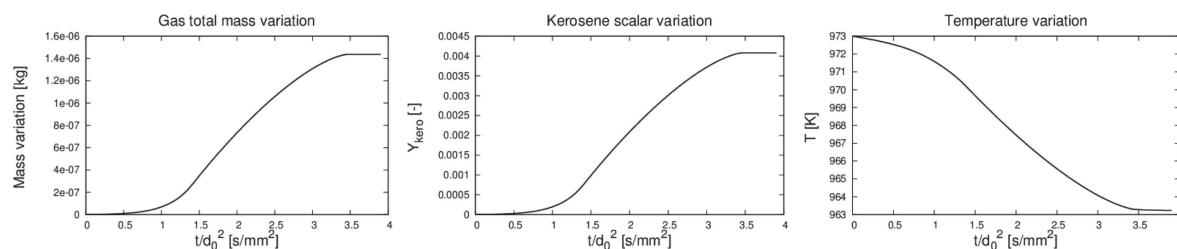


FIGURE 5.23 – Evaporation d’une goutte de kérosène : effet sur le milieu ambiant.

5.4 Simulation du brûleur MERCATO à froid

Cette section s'attache à décrire la simulation et l'analyse du point de fonctionnement non réactif, préchauffé, dit "point de mise en place". Un écoulement isotherme sans évaporation est d'abord modélisé à l'aide du solveur incompressible afin d'installer le champ de vitesse, et notamment les zones de recirculation de coin où les très faibles vitesses axiales conduisent à des temps caractéristiques très longs. Le temps total de cette simulation isotherme est d'environ 400 ms. Une fois le champ de vitesse convergé, la température est initialisée de manière uniforme en imposant la température d'entrée de 463 K dans tout le domaine, et l'évaporation des particules est activée. Les statistiques sont alors obtenues en moyennant les champs instantanés sur un temps de 140 ms, ce qui correspond à environ 14 temps convectifs, τ_{conv} .

Les résultats des simulations monophasique et diphasique sont d'abord présentés et comparés aux données expérimentales dans les Sections 5.4.2 et 5.4.3. Puis dans un second temps, une étude des interactions entre le PVC et le spray de carburant réalisée à l'aide des outils décrits dans le Chapitre 4 est présentée.

5.4.1 Temps caractéristiques de l'écoulement

Le nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux est calculé à la sortie du système d'injection. Il est basé sur le diamètre de sortie D_s , la vitesse débitante dans la section de calcul $\bar{u}_s = 28$ m/s, et la viscosité cinématique de la phase gazeuse ce qui donne :

$$Re = \frac{\bar{u}_s D_s}{\nu} \approx 24\,000. \quad (5.17)$$

Cet ordre de grandeur pour le nombre de Reynolds garantit l'existence d'une zone inertielle dans le spectre d'énergie cinétique turbulente [156], ce qui justifie l'utilisation d'une approche LES pour ce type d'écoulement.

Le nombre de Swirl, défini dans la Section 2.3.2.1, est également calculé dans la section de sortie de l'injecteur : $Sw = 0.73$. Le nombre de Swirl étant supérieur à 0.6, on s'attend donc à retrouver une topologie d'écoulement telle que décrite dans la Section 2.3.3.3, avec une zone de recirculation centrale, des zones de recirculation de coin, et un PVC.

Le temps convectif est défini comme le temps nécessaire au fluide pour traverser la chambre, de la sortie du système d'injection à l'entrée du raccord d'aspiration, compte tenu de la vitesse débitante relevée dans le plan de sortie de l'injecteur :

$$\tau_{conv} = \frac{L_c}{\bar{u}_s} = 10 \text{ ms}, \quad (5.18)$$

où L_c est la longueur de la chambre. En calculant ce temps caractéristique en se basant uniquement sur la longueur de la portion de chambre dans laquelle sont relevées les mesures expérimentales, on obtient :

$$\tau_{conv} = 4 \text{ ms}. \quad (5.19)$$

Le temps caractéristique du swirl τ_{swirl} peut être défini comme le temps nécessaire pour que le fluide injecté dans la chambre réalise un tour complet autour de l'axe de rotation, en négligeant l'expansion radiale :

$$\tau_{swirl} = \frac{2\pi R_s}{u_\theta} = 2.3 \text{ ms}, \quad (5.20)$$

où u_θ est la vitesse tangentielle relevée dans le plan de sortie d'injecteur, au rayon R_s .

Un autre temps caractéristique de l'écoulement, également lié au swirl est obtenu à partir de la fréquence du PVC, mesurée expérimentalement à $f_{PVC} \approx 800\text{Hz}$, ce qui donne :

$$\tau_{PVC} = \frac{1}{f_{PVC}} = 1.25 \text{ ms} . \quad (5.21)$$

Les particules ont également des temps caractéristiques qui varient selon les phénomènes considérés. Le temps caractéristique de trainée, défini dans la Section 3.3.2.1, est très variable selon le diamètre des particules :

$$0.03 \text{ ms} < \tau_p < 11 \text{ ms} . \quad (5.22)$$

Le temps d'évaporation des gouttes est mesuré *a posteriori* en relevant le temps de vie des particules dans la simulation et varie essentiellement selon le diamètre à l'injection :

$$0.2 \text{ ms} < \tau_{evap} < 70 \text{ ms} . \quad (5.23)$$

Le temps d'évaporation des particules, pour les plus grosses gouttes ayant les temps de vie les plus longs, est bien supérieur aux temps convectifs de l'écoulement. On s'attend donc à ce que les particules occupent une grande partie du domaine et des zones de recirculation.

5.4.2 Topologie de l'écoulement gazeux

Le nombre de swirl étant relativement élevé dans la chambre MERCATO, l'écoulement est caractérisé par une longue zone de recirculation centrale, qui se forme à quelques centimètres du plan d'injection, et s'étend pratiquement jusqu'à l'entrée du raccord d'aspiration. Cette longue zone de recirculation avait également été observée expérimentalement. Ce point de fonctionnement ayant été mis en œuvre sans le raccord d'aspiration, la chambre expérimentale était alors beaucoup plus courte, et la zone de recirculation sortait du domaine, comme en témoigne l'effet d'aspiration ressenti en sortie de chambre [107]. La plupart des études numériques réalisées sur ce point de fonctionnement avaient choisi d'éloigner la sortie en modélisant l'atmosphère autour de la chambre. Afin de pouvoir utiliser le même maillage pour les deux simulations, le choix a été fait ici d'utiliser la configuration avec le raccord d'aspiration même si celui-ci était absent lors des mesures. La Fig. 5.24 montre que la forme et l'étendue de la zone de recirculation centrale ne sont pas affectées par la présence de ce raccord, par rapport à un domaine de calcul avec une chambre raccourcie et l'atmosphère en sortie.

La simulation permet également de mettre en évidence les quatre zones de recirculation de coin, observées dans toutes les études numériques et expérimentales menées sur cette configuration. Durant la campagne de mesures, les gouttes de carburant piégées dans ces zones de recirculation et impactant le fond de chambre ont dilué le revêtement de la paroi, rendant la délimitation des zones de recirculation clairement visible sur le fond de chambre, par une zone foncée en croix, et quatre zones rectangulaires plus claires dans les coins. Ces zones de recirculation, matérialisées par des iso-lignes de vitesse axiale nulle, $u_z = 0 \text{ m/s}$ pour la simulation, et par des zones plus claires sur la photo du dispositif expérimental, sont visibles sur la Fig. 5.25.

La Fig. 5.26 montre le champ de vitesse instantanée dans le plan médian, pour les deux maillages sur lequel sont superposées les zones de recirculations moyennes, ainsi que la ratio μ_t/μ , critère permettant de quantifier l'importance du modèle de sous-maille et la qualité de la LES. Dans la chambre de combustion, le maximum du ratio de viscosité turbulente sur la viscosité laminaire est de l'ordre de 16 pour le maillage 1, et de 8 pour le maillage raffiné, qui permet de capturer des échelles turbulentes de plus petite

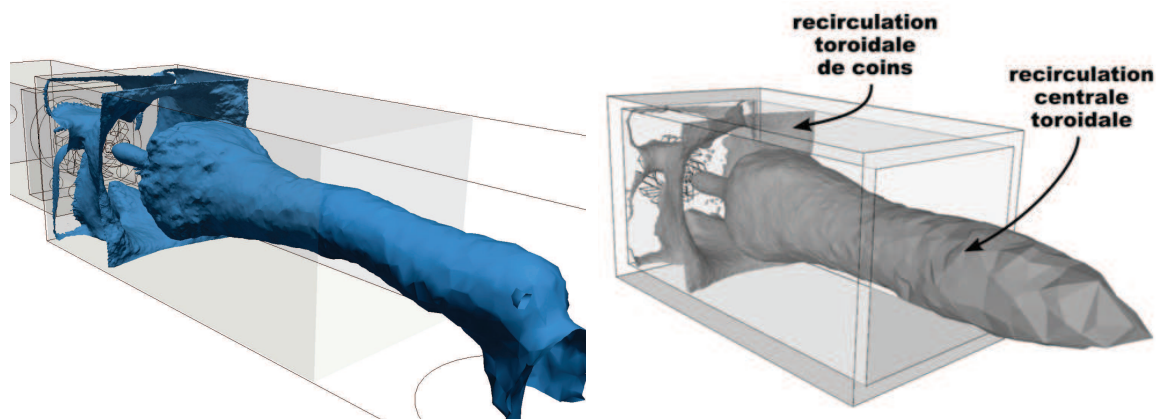


FIGURE 5.24 – Visualisation des zones de recirculation par une isosurface de vitesse axiale nulle : calcul YALES2 avec raccord d'aspiration (gauche), et calcul AVBP sans raccord d'aspiration [173] (droite).

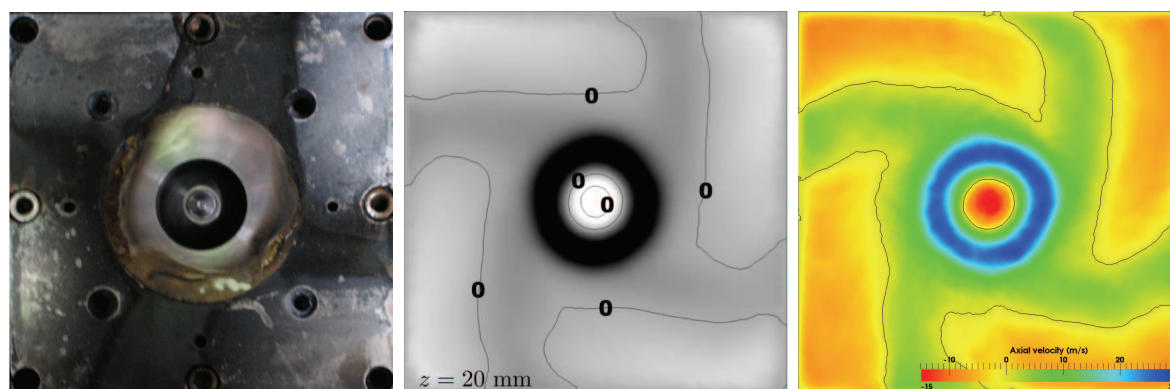


FIGURE 5.25 – Représentation des zones de recirculation expérimentales [113] (gauche), dans la simulation AVBP de Sanjose [173] et dans la simulation YALES2 (droite).

taille et de limiter l'impact du modèle de turbulence de sous-maille. Ces ratios sont plus élevés dans le raccord de sortie où le maillage est beaucoup plus grossier.

Les profils de vitesse gazeuse sont représentés sur la Fig. 5.27. Les profils de vitesse axiale moyenne témoignent de la présence de la zone de recirculation centrale, avec des vitesses très faibles à négatives au centre de l'axe, et deux pics de part et d'autre, qui décroissent et s'écartent lorsque l'écoulement progresse vers la sortie. L'élargissement soudain de la zone de recirculation centrale est nettement visible sur le profil à 86 mm. La vitesse moyenne orthoradiale suit le même schéma d'évolution, l'élargissement brusque de la section de passage conduisant rapidement la vitesse tangentielle à diminuer. Autour de la zone de recirculation, le fluide subit un très fort cisaillement. C'est dans cette zone que vient osciller le PVC, d'où les importants niveaux de RMS relevés dans les zones de cisaillement. Les fluctuations atteignent environ 60 à 70 % de la valeur moyenne, ce qui atteste du caractère fortement instationnaire de l'écoulement.

Ces profils de vitesse sont comparés aux données expérimentales issues des travaux de Garcia-Rosa [70], mais aussi à la simulation LES réalisée dans la thèse de Senoner [185], avec le code AVBP. De manière générale, les profils des trois composantes de vitesse moyenne et RMS sont en très bon accord avec les mesures expérimentales et la simulation AVBP, pour le maillage 1 (40M de cellules), et pour le maillage 2 (326M de cellules). Il existe néanmoins quelques différences notables, principalement sur

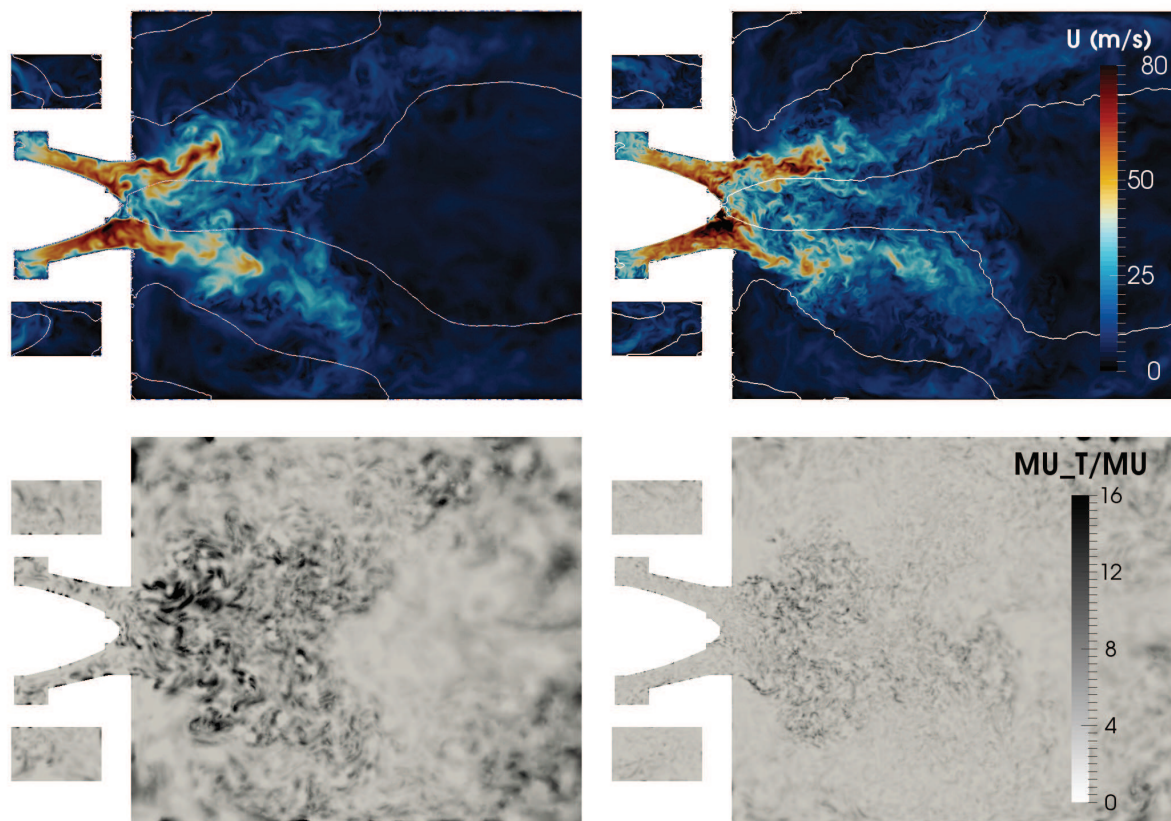


FIGURE 5.26 – Champ instantanés dans le plan médian : vitesse et zones de recirculation matérialisées par des iso-lignes de vitesse axiale moyenne nulle (haut), et ratio de viscosité turbulente sur la viscosité laminaire (bas). Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).

les profils les plus en aval du fond de chambre. Le profil de vitesse axiale à 56 mm montre quelques différences, qui s'expliquent par le fait que le profil expérimental n'est pas parfaitement axisymétrique : les deux pics de vitesse sont décentrés par rapport à l'axe. Le profil issu de la simulation est symétrique. Cependant, le maximum de vitesse axiale est correctement reproduit dans cette section. Les différences avec le profil expérimental de vitesse axiale à 86 mm traduisent une mauvaise prédiction de l'ouverture du jet. En effet, ce plan de mesure est situé juste en aval de l'ouverture soudaine du jet, mise en évidence sur la Fig. 5.24, sur laquelle on constate une expansion soudaine de la zone de recirculation. En aval de cette ouverture, l'écoulement est beaucoup plus proche des parois, et perçoit l'effet du confinement des parois de la chambre de combustion. Le mécanisme physique de recollement du jet d'air à la paroi est un mécanisme complexe d'interaction de la turbulence du jet avec la turbulence proche paroi. Ce phénomène est difficile à prédire avec précision et fait intervenir la discrétisation locale, le modèle de turbulence de sous-maille, et la résolution de l'écoulement pariétal. Des différences avec l'expérience ont été observées dans ces sections dans de nombreuses études numériques, comme en atteste par exemple la comparaison avec le calcul de Senoner [185] également représenté sur la Fig. 5.27. Les différences évoquées précédemment sont moins prononcées avec un niveau de raffinement de maillage, attestant une meilleure prédiction de la dynamique de l'écoulement et de l'énergie cinétique turbulente avec le maillage raffiné.

Les profils de vitesse RMS sont également en très bon accord avec l'expérience, en particulier dans

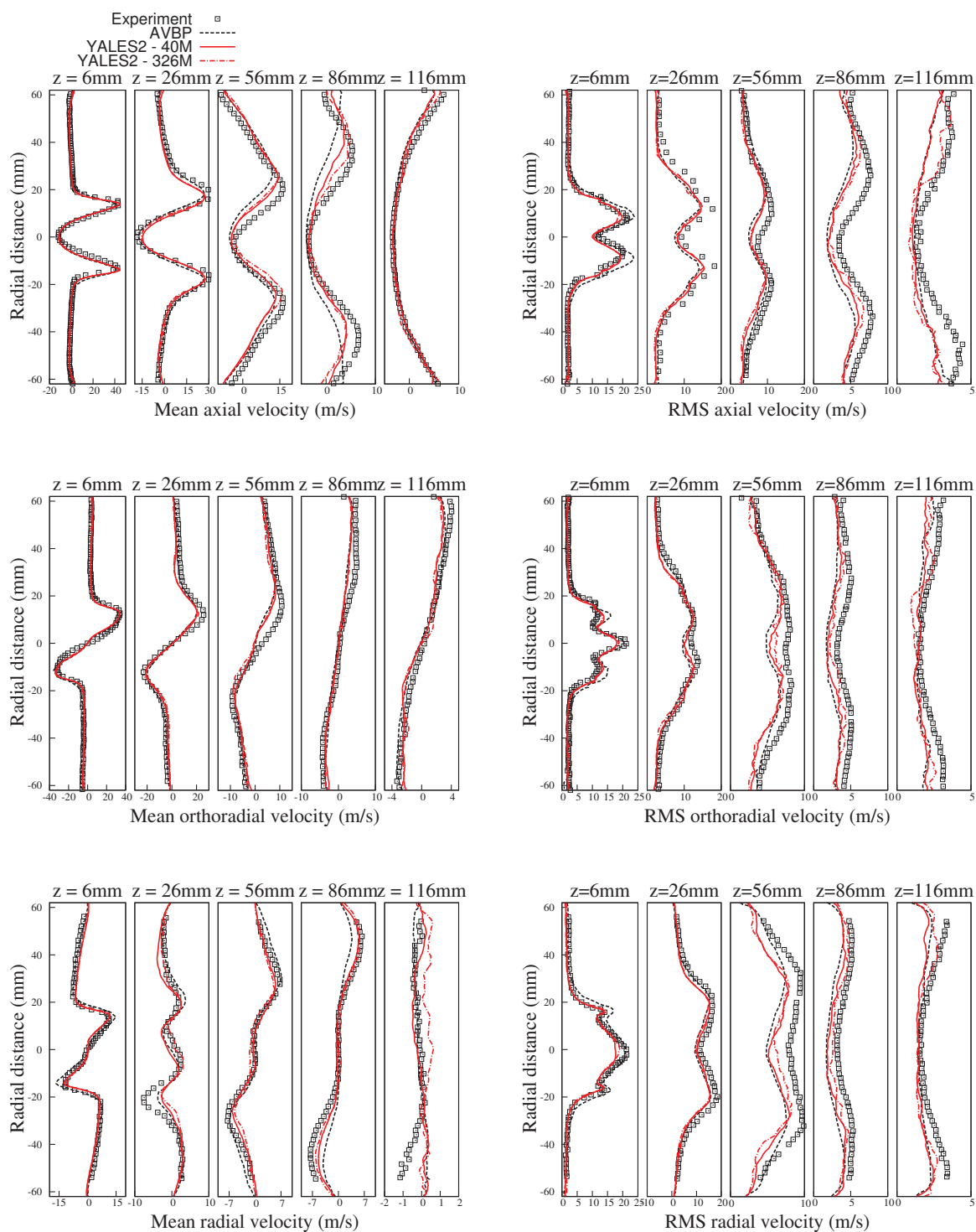


FIGURE 5.27 – Profils de vitesse gazeuse dans les cinq plans expérimentaux (Symboles : Exp [70] - Ligne traitillée : AVBP [185] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M - Ligne traitillée-pointillée : YALES2 maillage 326M).

les deux premiers plans de mesure, dans lesquels les pics de fluctuation sur l'axe ou dans le jet sont très bien capturés. Dans les plans les plus éloignés, les différences avec les profils expérimentaux sont plus marquées. Le maillage étant plus raffiné dans cette partie de l'écoulement, cela s'explique par une moins bonne résolution des structures tourbillonnaires qui se traduit par une sous-estimation de l'énergie cinétique turbulente.

5.4.3 Topologie de l'écoulement diphasique

Cette section a pour but de décrire la dynamique de l'écoulement diphasique. La Fig. 5.28 présente les statistiques pour les trois composantes de vitesse de la phase liquide. Le procédé d'interpolation sur le maillage Eulérien et d'accumulation des statistiques pour les particules, permettant d'évaluer, pour la phase liquide, des moyennes et RMS comparables à des données expérimentales est décrite dans la Section 3.3.4.

Les profils de vitesse axiale, tangentielle et radiale sont comparés avec les données expérimentales de Garcia-Rosa [70], et avec la simulation polydisperse mise en œuvre dans la thèse de Senoner [185], qui est celle dont les paramètres numériques s'approchent le plus de la simulation présentée ici. De même que pour la phase porteuse, les statistiques sont en bon accord avec les données expérimentales et numériques. Cependant, quelques différences notables peuvent être observées. Sur les profils de vitesse axiale moyenne, on constate notamment une sur-estimation de la vitesse négative proche de l'axe, induite par la zone de recirculation centrale. Pour les trois composantes de vitesse moyenne, des écarts notables peuvent être observés dans le troisième plan de mesure. Cependant, on rappelle que les comparaisons dans ce plan sont délicates étant donné que les mesures ont été réalisées à un débit massique d'air différent.

Un champ instantané de fraction massique de kérosène et de température dans le plan médian, ainsi que le spray de particules, visualisées par des sphères colorées par leur diamètre sont présentés sur la Fig. 5.29.

Les particules sont essentiellement concentrées dans les zones où les vitesses gazeuses sont les plus élevées (dans le jet principal), mais également près des parois et dans les zones de recirculation de coin. La zone de recirculation centrale au contraire compte très peu de particules, et essentiellement des particules de très faible diamètre. Il s'agit de gouttes en fin de vie ramenées de l'écoulement aval par la recirculation. Les particules sont injectées à une température de 300 K dans un écoulement gazeux à 463 K. Le pompage d'énergie nécessaire au réchauffement des particules et à leur évaporation conduit à diminuer la température du gaz dans la chambre, qui s'homogénéise en sortie de chambre et dans les zones de recirculation de coin aux alentours de 420 K. La fraction massique de fuel est très importante dans les zones de recirculation de coin, alors qu'elle est plus faible dans la zone de recirculation centrale, qui est peu alimentée en particules.

Le caractère très instationnaire de l'écoulement est clairement visible, même sur des champs instantanés. La dissymétrie du spray, comportant des zones à forte concentration en particules alternées avec des zones dépeuplées atteste du caractère très turbulent de l'écoulement. L'observation de champs instantanés pris à des temps successifs très proches (Fig. 5.30) montre que l'interaction du spray avec le PVC semble évidente, en particulier près de l'injecteur où le spray oscille de bas en haut dans le plan médian, en phase avec des oscillations également observées sur le champ de fraction massique de kérosène. La période de ce battement, observé visuellement, est d'environ 1.2 ms, ce qui correspond à une fréquence d'environ 830 Hz. On rappelle que le nombre de swirl dans cette configuration est de 0.73. Les études expérimentales et numériques déjà menées pour ces conditions opératoires ont révélé la présence d'un

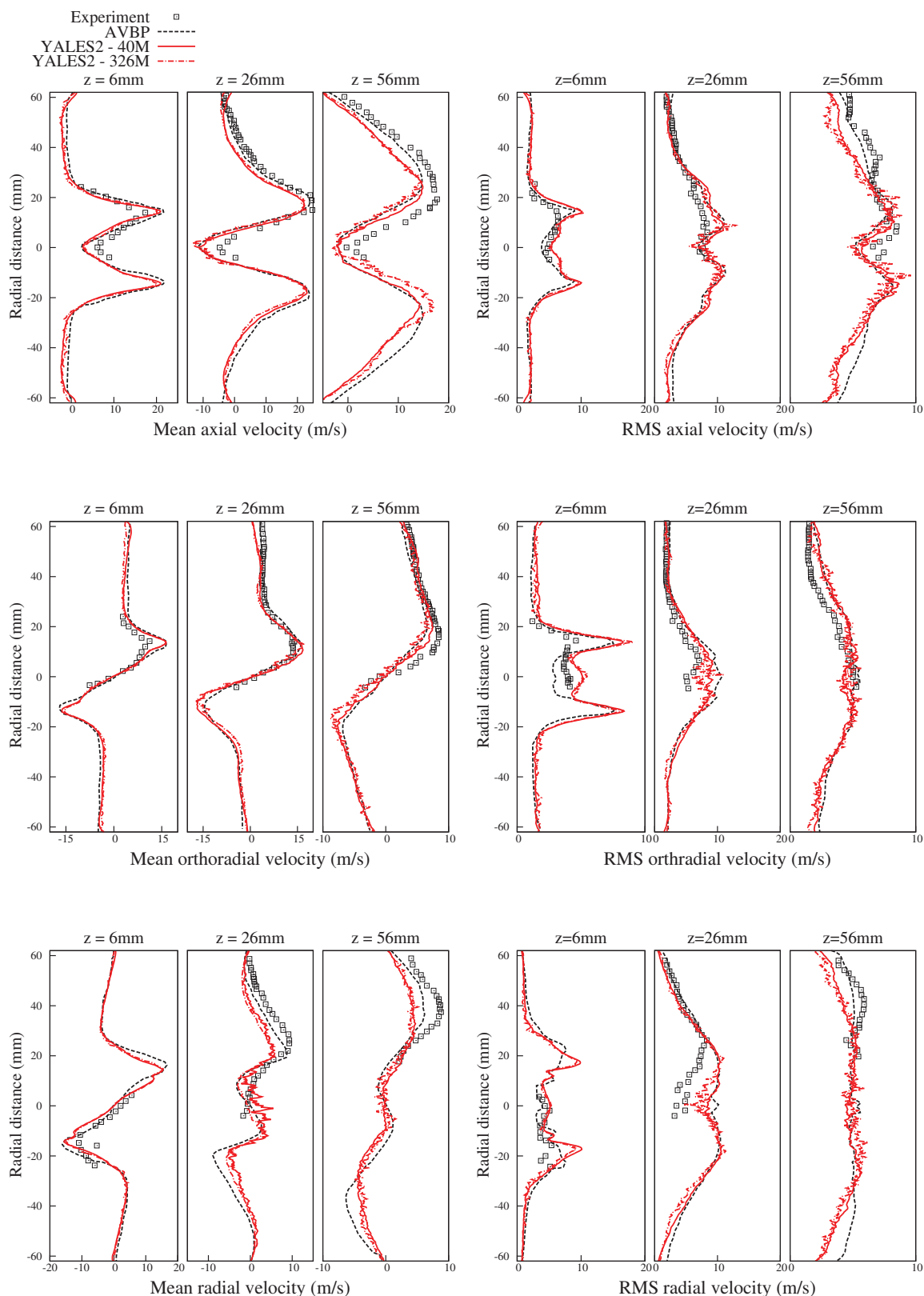


FIGURE 5.28 – Profils de vitesse liquide dans les trois plans expérimentaux (Symboles : Exp [70] - Ligne traitillée : AVBP [185] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M - Ligne traitillée-pointillée : YALES2 maillage 326M).

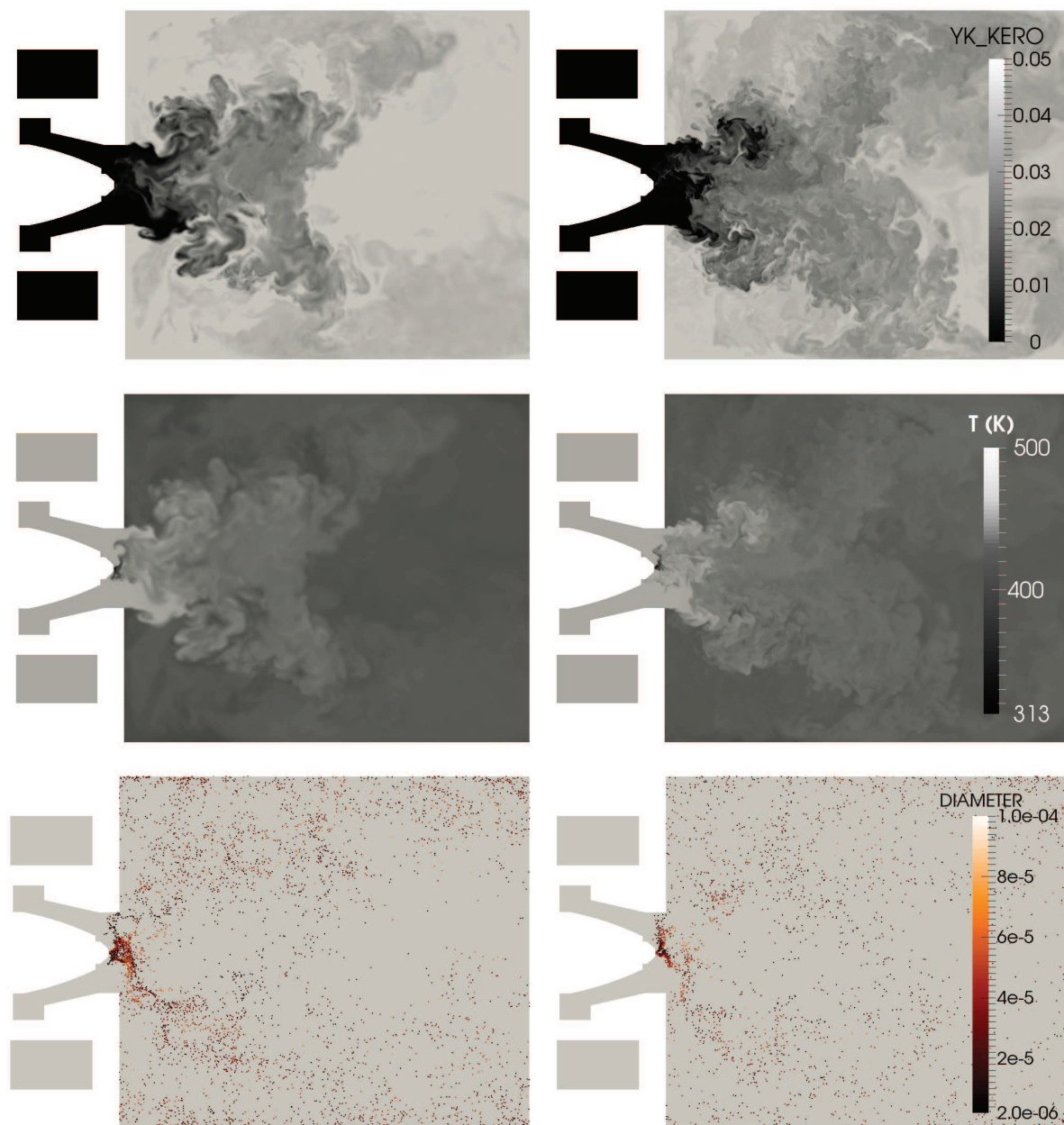


FIGURE 5.29 – Champ instantanés dans le plan médian : fraction massique de fuel gazeux (haut), température (milieu) et particules dans les cellules passant par le plan médian, colorée par leur diamètre. Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).

PVC dont la fréquence est de 800 Hz. Il paraît donc très probable que la dynamique du spray et de l'évaporation est fortement influencée par le PVC.

5.4.4 Extraction du PVC et analyse de l'interaction spray - PVC

Les outils présentés dans le Chapitre 4 sont appliqués à cette simulation pour isoler le PVC en filtrant le critère Q , avec une taille de filtre de 8 mm et à l'ordre 12.

La Fig. 5.31 compare une iso-surface de critère Q et de critère Q filtré. La méthode d'extraction

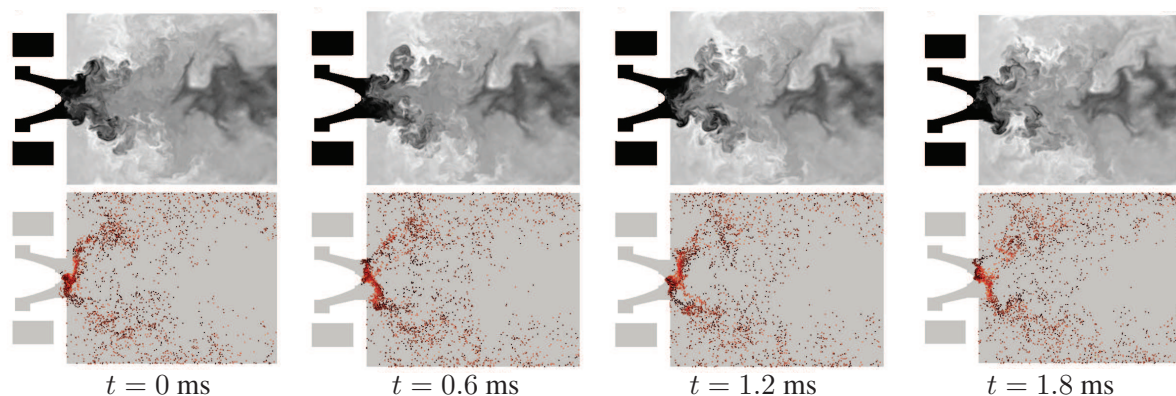


FIGURE 5.30 – Fraction massique de kérosène et spray coloré par le diamètre des particules dans le plan médian, à 4 instants successifs - Mise en évidence du caractère très instationnaire et périodique de la dynamique du spray.

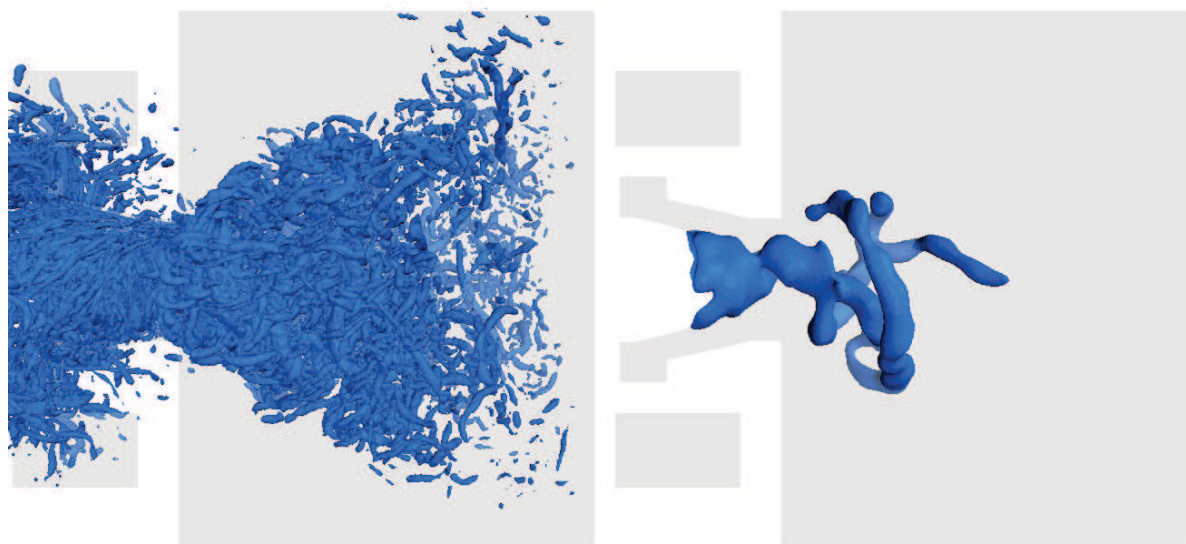


FIGURE 5.31 – Iso-surface de critère $Q = 3 \times 10^7 s^{-2}$ (gauche) et de fonction levelset basée sur le critère Q filtré $\bar{Q} = 3 \times 10^7 s^{-2}$ (droite).

du PVC permettant de visualiser de manière instantanée cette structure cohérente, il est alors possible d'étudier comment elle interagit avec le spray de carburant liquide. La Fig. 5.32 montre le spray vu du fond de chambre. La distance au PVC, obtenue à partir de la fonction levelset définie dans la section 4.7.1, est interpolée sur les particules. La superposition du PVC et du spray coloré par la distance permet d'observer une corrélation entre le PVC et la distribution spatiale des particules. On distingue une zone au centre du PVC où la concentration est importante, et une zone à la périphérie de l'iso-surface, beaucoup moins peuplée en particules. L'objectif des sections qui suivent est de caractériser cette corrélation et d'apporter des éléments quantitatifs pour améliorer la compréhension de la dynamique des écoulements swirlés diphasiques.

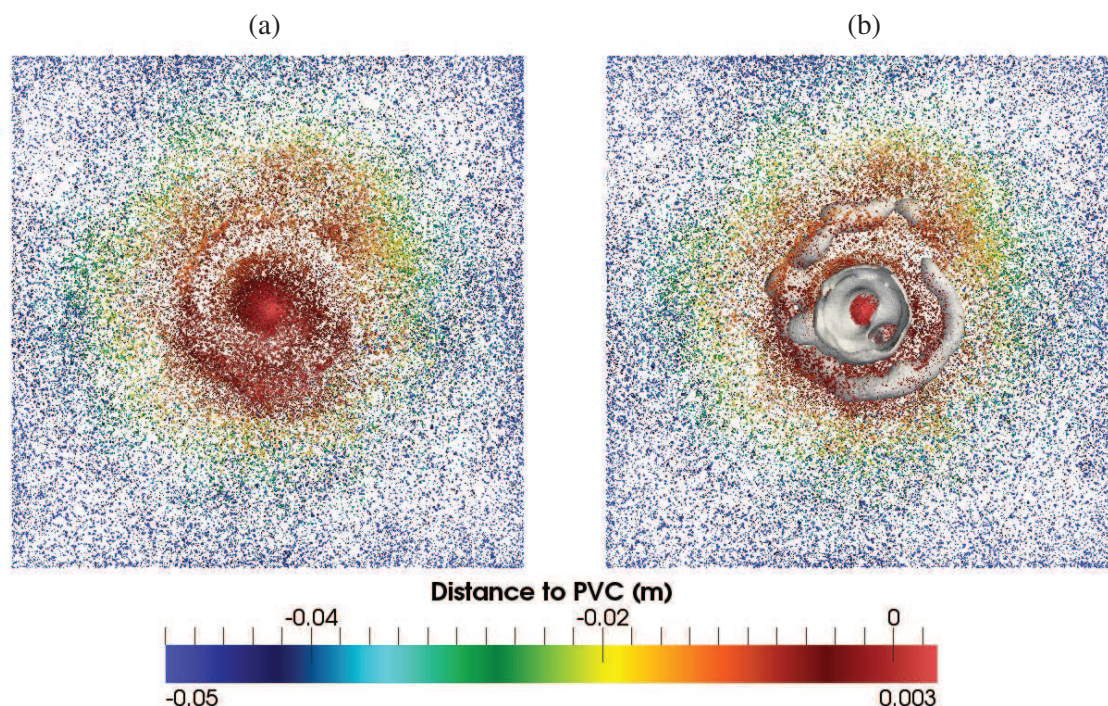


FIGURE 5.32 – Particules Lagrangiennes colorées par la distance au PVC, vues depuis le fond de chambre (a). Le PVC est superposé aux particules pour mettre en évidence la corrélation avec la distribution spatiale des gouttes (b).

5.4.4.1 Profil de vitesse dans le PVC

Les méthodes présentées dans la Section 4.7.2 ont permis de reconstruire le squelette et le repère local du PVC. Les différentes étapes, du filtrage du critère Q à la reconstruction du squelette sont illustrées sur la Fig. 5.33.

Les informations fournies par le squelette permettent de projeter la vitesse de l'écoulement dans le repère spatial lié au PVC, calculé d'après la procédure décrite dans la Section 4.7.2.2. Cette vitesse est ensuite moyennée le long de l'abscisse curviligne, afin de reconstruire des profils radiaux de vitesse radiale, u_r , tangentielle, u_θ , et axiale, u_z , dans le tourbillon. Ces profils sont tracés sur la Fig. 5.34, et comparés aux profils théoriques présentés dans la Section 2.3.2.3.

Conformément à l'hypothèse décrite par l'Eq. 2.12, la vitesse radiale est très négligeable devant la composante tangentielle. Le profil de vitesse tangentielle possède les caractéristiques typiques d'un tourbillon : un cœur rotationnel de type rotation solide dans lequel la vitesse croît linéairement avec le rayon, et une partie externe dans laquelle la vitesse décroît. La position radiale du maximum de vitesse, qui est également la frontière entre ces deux types de rotation définit le rayon du tourbillon. Ce profil est comparé aux profils canoniques de Rankine [4] et Lamb-Oseen [170], où les paramètres : maximum de vitesse, U_m , et coordonnée radiale correspondante, R , sont ajustés pour minimiser l'écart entre le profil théorique de Lamb-Oseen et le PVC.

A partir de ces paramètres, un temps caractéristique du cœur tourbillonnaire peut être calculé :

$$\tau_{PVC} = \frac{2\pi R}{u_m}. \quad (5.24)$$

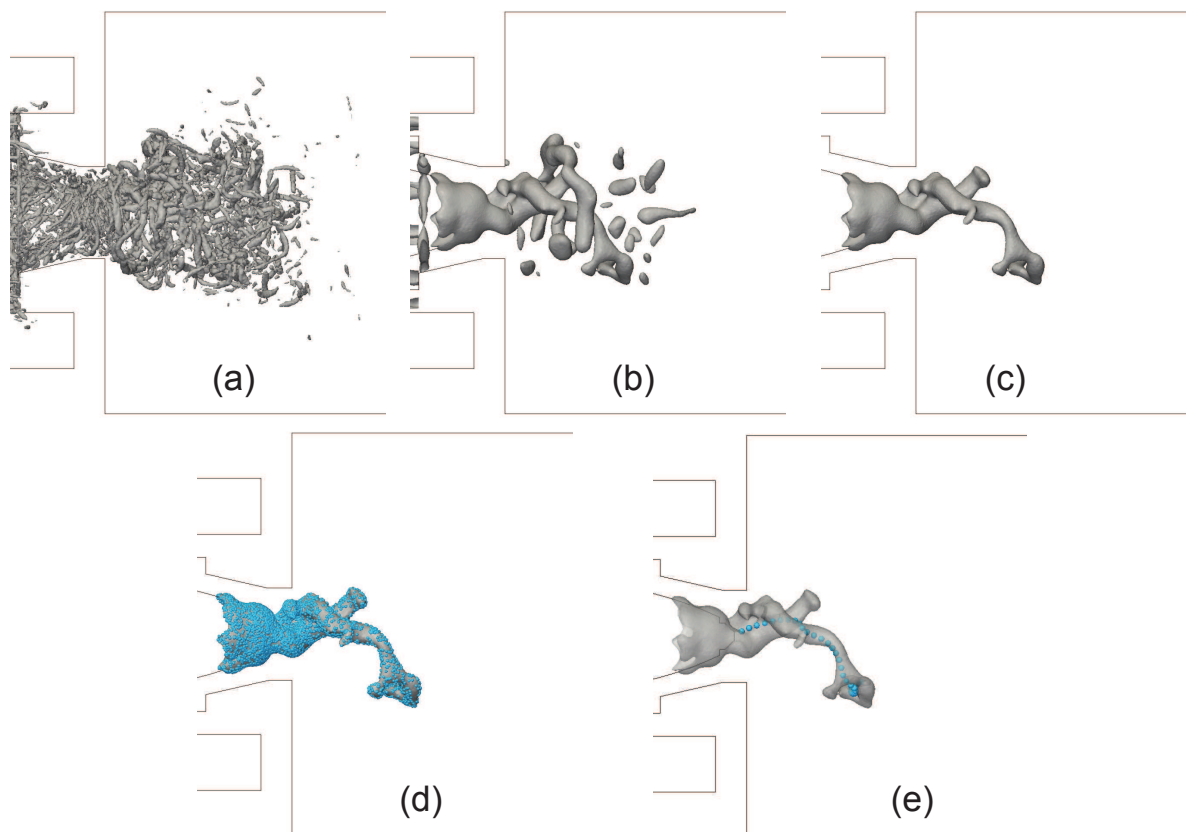


FIGURE 5.33 – Extraction et isolation du PVC : iso-surface de critère Q (a), iso-surface de critère Q filtré (b), iso-surface de fonction levelset (c), downsampling de l’iso-surface (d), reconstruction squelettique (e).

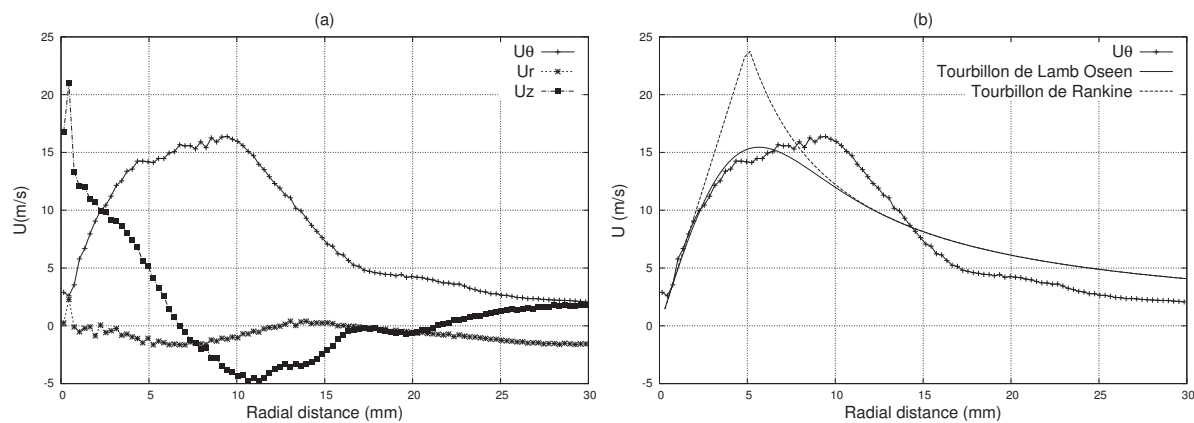


FIGURE 5.34 – Profil de vitesse axiale tangentielle et radiale dans le PVC (gauche) - Comparaison à des profils analytiques canoniques (droite).

Dans le cas présent, les grandeurs caractéristiques ainsi obtenues sont les suivantes :

$$u_m = 15 \text{ m/s} \quad , \quad R = 5.04 \text{ mm} \quad \text{et} \quad \tau_{PVC} = 2.07 \text{ m/s} . \quad (5.25)$$

Cette échelle de temps est utilisée pour calculer un nombre de Stokes des particules basé sur le temps

caractéristique du PVC, et le temps de relaxation des particules introduit dans la Section 3.3.2.1, calculé d'après l'Eq. 3.119 :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_{PVC}} \quad (5.26)$$

5.4.4.2 Distribution spatiale des particules et corrélation avec le PVC

Pour analyser plus en détail le rôle du PVC dans la ségrégation spatiale des particules, la distribution spatiale dans la direction radiale est calculée pour diverses classes de tailles de particules. Ces statistiques conditionnées par la taille des particules sont présentées sur la Fig. 5.35.

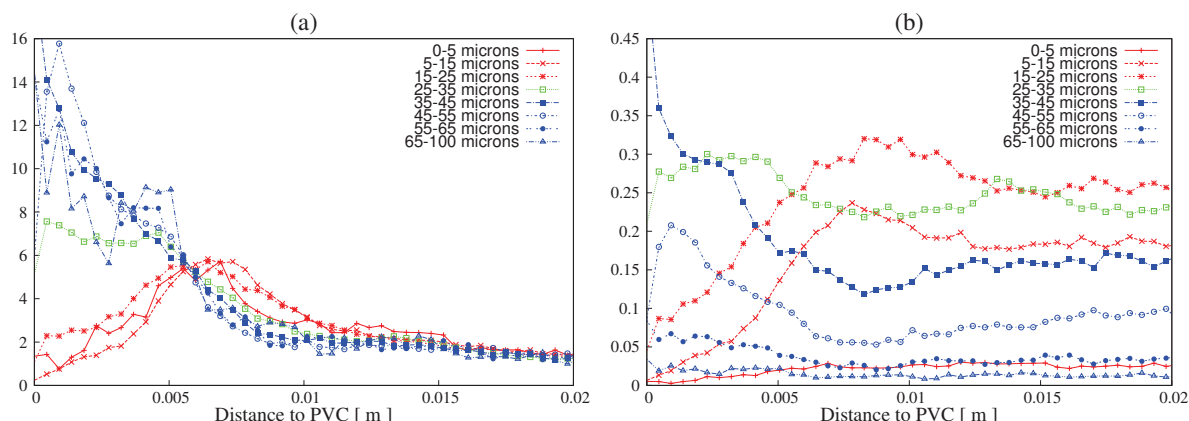


FIGURE 5.35 – Influence du PVC sur la distribution spatiale des particules : PDF de distance au PVC, r , conditionnée par le diamètre des gouttes, d_p : PDF($r, d_p = d_p^*$) (gauche), et PDF de diamètre conditionnée par la distance au PVC : PDF($d_p, r = r^*$) (droite).

La Fig. 5.35 (a) représente la PDF de la distance au PVC pour différentes tailles de gouttes d_p^* , PDF($r, d_p = d_p^*$). La distribution des plus petites particules, représentées en rouge, diffère de manière significative de la distribution des plus grosses particules, représentées en bleu, au voisinage du PVC. Plus loin du PVC, cette différenciation disparaît.

La Fig. 5.35 (b) illustre, si l'on se place à une position donnée r^* sur l'axe des abscisses, la PDF du nombre de particules, conditionnée par la distance au PVC : PDF($d_p, r = r^*$). Par exemple, une valeur de 0.3 pour la classe 15 – 20 microns indique que 30 % des particules présentes à cette distance du PVC appartiennent à cette classe.

Ces deux graphiques montrent que le centre du PVC ($r < R$) est essentiellement peuplé de grosses particules. En effet, seules les particules les plus inertielles sont capables de traverser le PVC, ou de rester au dans le cœur du PVC où elles sont injectées. Il n'y a donc que très peu de petites particules à l'intérieur du cœur tourbillonnaire. Ces dernières ont plutôt tendance à s'accumuler à la périphérie du PVC, dans la zone correspondant à $r \approx R$. Plus loin du PVC ($r > R$), la PDF correspond approximativement à la distribution de Rosin Rammler imposée à l'injection.

Le nombre de Stokes, calculé d'après l'Eq. 5.26, est tracé en fonction du diamètre, sur la Fig. 5.36. Les trois classes de gouttes : $d_p \in [0 - 25\mu\text{m}]$, $d_p \in [25 - 35\mu\text{m}]$ et $d_p \in [35 - 100\mu\text{m}]$, au comportement distinct, identifiées en analysant la Fig. 5.35, sont identifiées en rouge, vert et bleu respectivement. Le nombre de Stokes correspondant à la transition entre les particules centrifugées par le PVC, et celle qui sont moins sensibles à son influence se situe autour de 1.

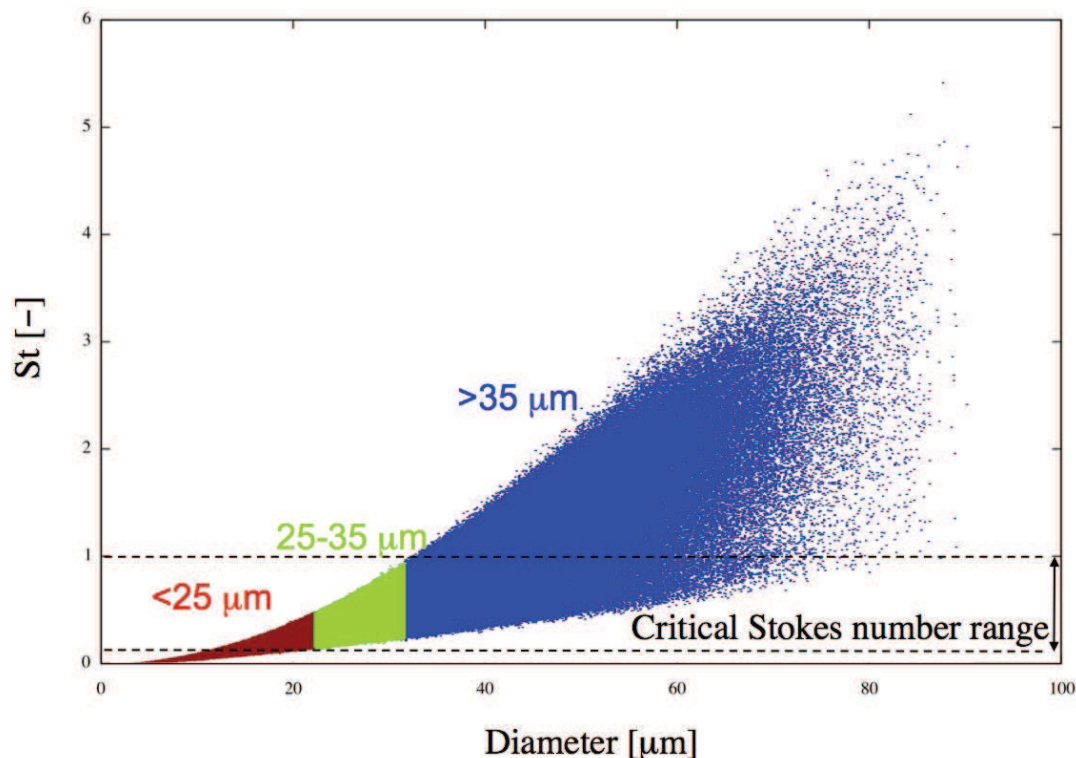


FIGURE 5.36 – Nombre de Stokes des particules.

Ces résultats montrent que le PVC a une influence très marquée sur la dynamique du spray, particulièrement près de l'injection, où le PVC est le plus intense. L'impact du PVC sur le spray est particulièrement marqué pour des particules de diamètre supérieur à $35 \mu\text{m}$, et est variable selon la taille des particules. Ces conclusions montrent l'importance d'utiliser une approche numérique permettant de modéliser au mieux la polydispersion pour ce type de configuration. A ce titre, le choix d'une approche Lagrangienne semble particulièrement approprié.

Le PVC génère une disparition de la symétrie axiale du spray, perturbé de façon périodique par le mouvement de précession. Il influence également la distribution spatiale des particules, et notamment des plus petites.

Dans la section suivante, le banc MERCATO est simulé dans des conditions opératoires réactives, afin d'étudier l'impact de ces interactions spray-PVC sur la stabilité de la combustion diphasique. L'objectif est d'apporter des éléments de réponse aux questions suivantes :

- Quelle est l'influence de la ségrégation spatiale des particules sur l'homogénéité du mélange air-carburant ?
- Ces observations sont-elles toujours valables en conditions réactives ?
- Les oscillations observées sur le spray en sortie d'injecteur affectent-elle la stabilité de l'accrochage de la flamme ?

5.5 Simulation du brûleur MERCATO à chaud

Dans cette Section, la simulation du point réactif, dit "point de référence" est présentée. Dans un premier temps, l'écoulement est installé avec un calcul purement gazeux, non réactif. Puis les gouttes sont injectées, et une partie du volume de la chambre est remplacé par de l'air préchauffé pour accélérer l'évaporation et favoriser l'allumage. Puis la combustion est initiée en introduisant un noyau d'allumage dans lequel on impose un terme source d'enthalpie qui augmente progressivement jusqu'à une valeur de consigne. Une fois l'état stationnaire atteint, les moyennes sont accumulées pendant environ 150 ms.

Les résultats seront comparés à des données expérimentales. Les vitesses axiales gazeuses ont été obtenues par mesures LDA appliquées à de fines particules de zirconium servant de traceurs. Des mesures PDA sont utilisées pour caractériser les vitesses de l'écoulement gazeux.

5.5.1 Temps caractéristiques de l'écoulement

Comme pour le point de fonctionnement non réactif, les temps caractéristiques de l'écoulement et les principaux nombres sans dimensions qui le caractérisent sont résumés ici.

Les nombres de Reynolds et de swirl, calculés dans le plan de sortie du système d'injection, et basés sur le diamètre de sortie, D_s donnent :

$$Re = \frac{\bar{u}_s D_s}{\nu} \approx 54\,000 \quad \text{et} \quad Sw = 0.7. \quad (5.27)$$

Comme précédemment, ces nombres de Reynolds et de swirl élevés témoignent d'un écoulement turbulent et fortement tourbillonnaire.

Le temps convectif est basé sur la vitesse débitante $\bar{u}_s = 42$ m/s et la longueur de la chambre :

$$\tau_{conv} = \frac{L_c}{\bar{u}_s} = 7 \text{ ms}. \quad (5.28)$$

Le temps caractéristique du swirl τ_{swirl} , lié à la vitesse tangentielle, ainsi que le temps lié à la fréquence expérimentale du PVC $f_{PVC} = 1050$ Hz sont également évalués :

$$\tau_{swirl} = \frac{2\pi R_s}{u_\theta} = 1.5 \text{ ms}, \quad \text{et} \quad \tau_{PVC} = \frac{1}{f_{PVC}} = 0.9 \text{ ms}. \quad (5.29)$$

Les temps caractéristiques du spray sont donnés ci-dessous, pour la traînée :

$$0.01 \text{ ms} < \tau_p < 7 \text{ ms}, \quad (5.30)$$

et pour l'évaporation, estimé en relevant le temps de vie des particules dans la chambre :

$$0.2 \text{ ms} < \tau_{evap} < 8 \text{ ms}. \quad (5.31)$$

5.5.2 Topologie de l'écoulement gazeux

Comme pour le point de fonctionnement non réactif, l'écoulement présente une large zone de recirculation centrale constituée d'une première partie étroite qui démarre quelques millimètres en aval de l'injection, et suivie d'une expansion en aval des zones de recirculation de coin. Cette expansion est moins marquée à chaud. De la même manière, du fait de la section carrée de l'enceinte de confinement, la zone de recirculation n'est pas axisymétrique : la forme caractéristique de la zone de recirculation de

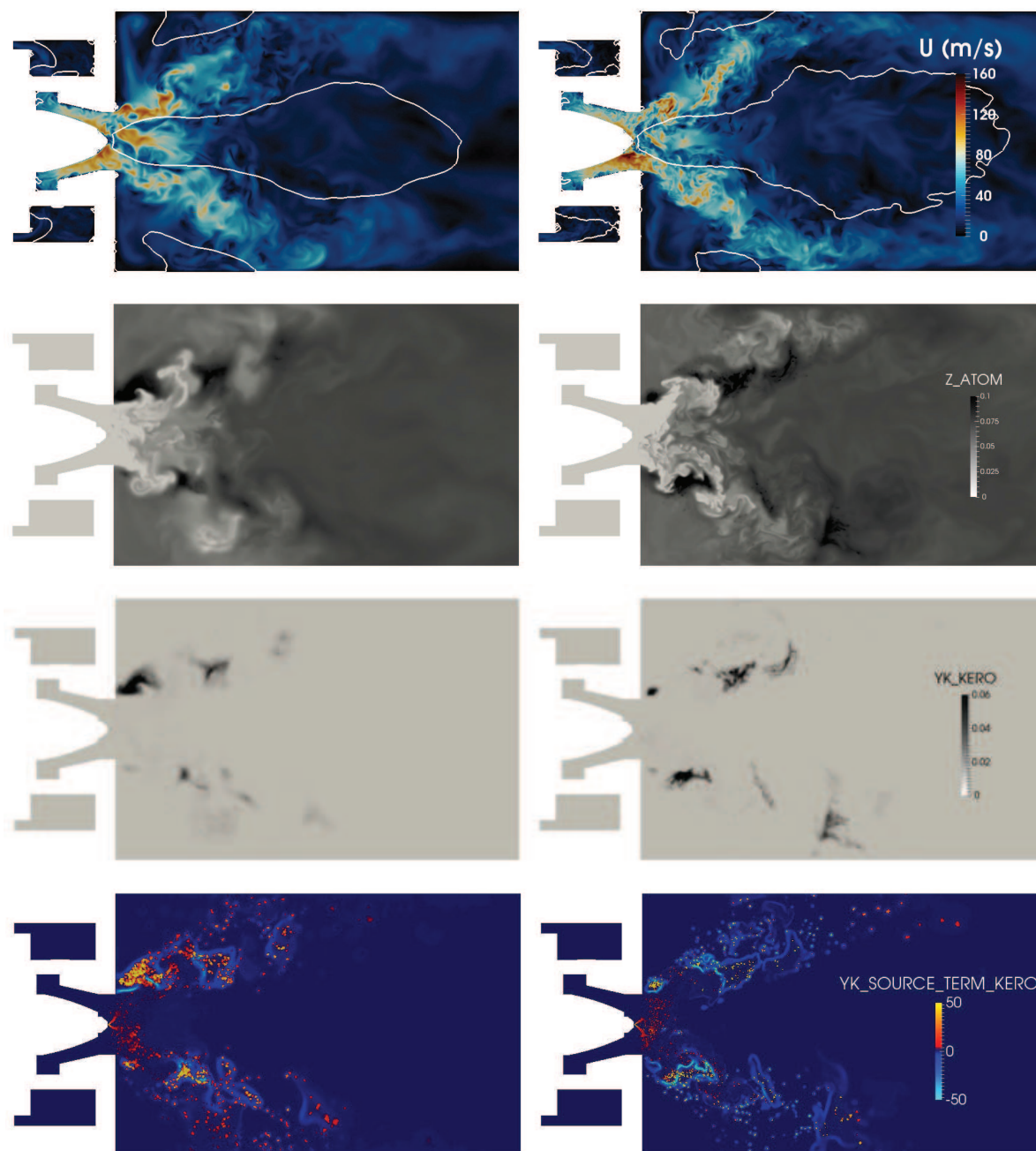


FIGURE 5.37 – Champs instantanés dans le plan médian : vitesse et zones de recirculation matérialisées par des iso-lignes de vitesse axiale moyenne nulle (1ère ligne), fraction de mélange (2ème ligne), fraction massique de kérosène (3ème ligne), terme source de fraction massique de kérosène (4ème ligne) - Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).

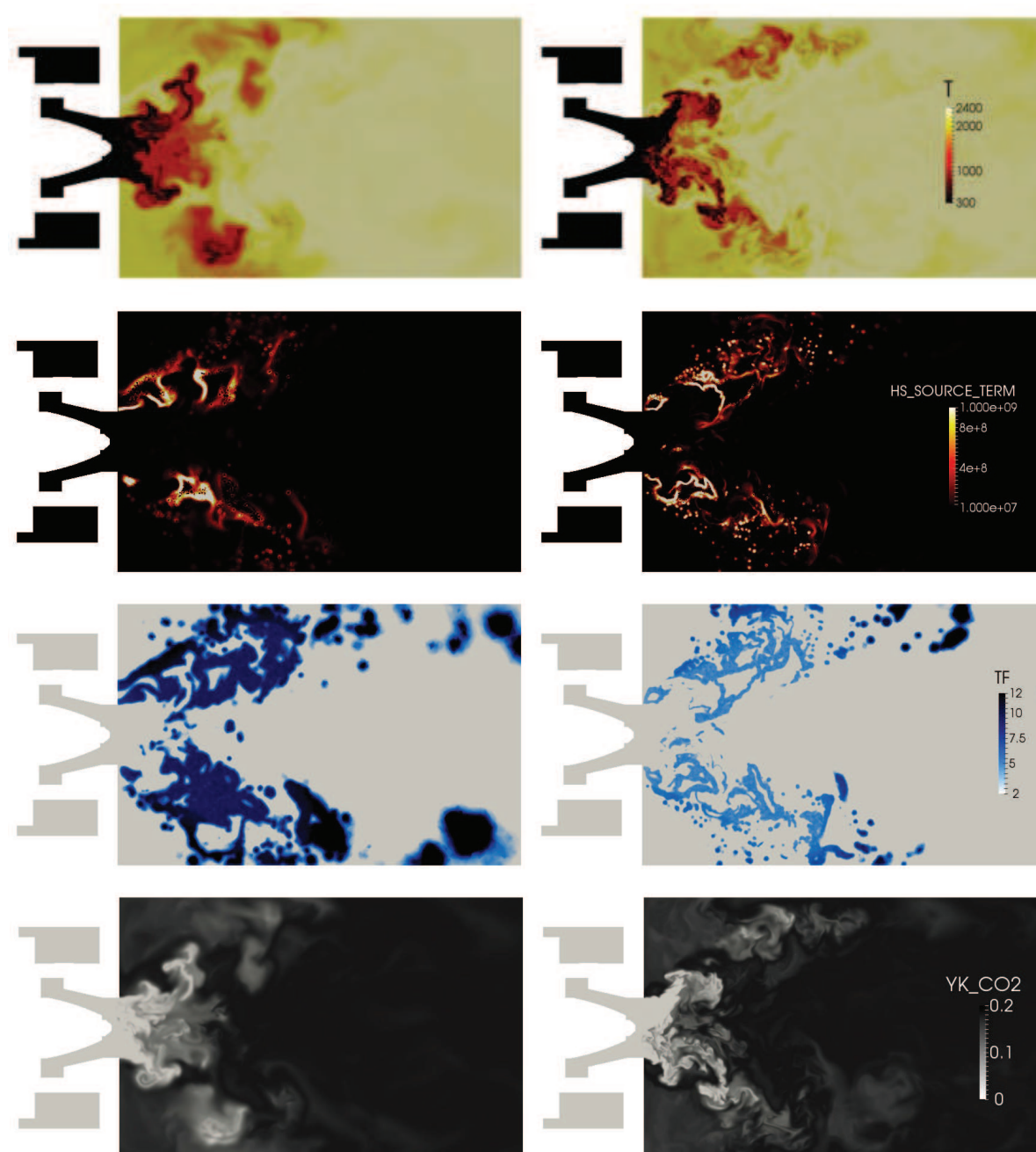


FIGURE 5.38 – Champs instantanés dans le plan médian : température (1ère ligne), terme source d'enthalpie (2ème ligne), facteur d'épaissement (3ème ligne), fraction massique de CO_2 (4ème ligne) - Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).

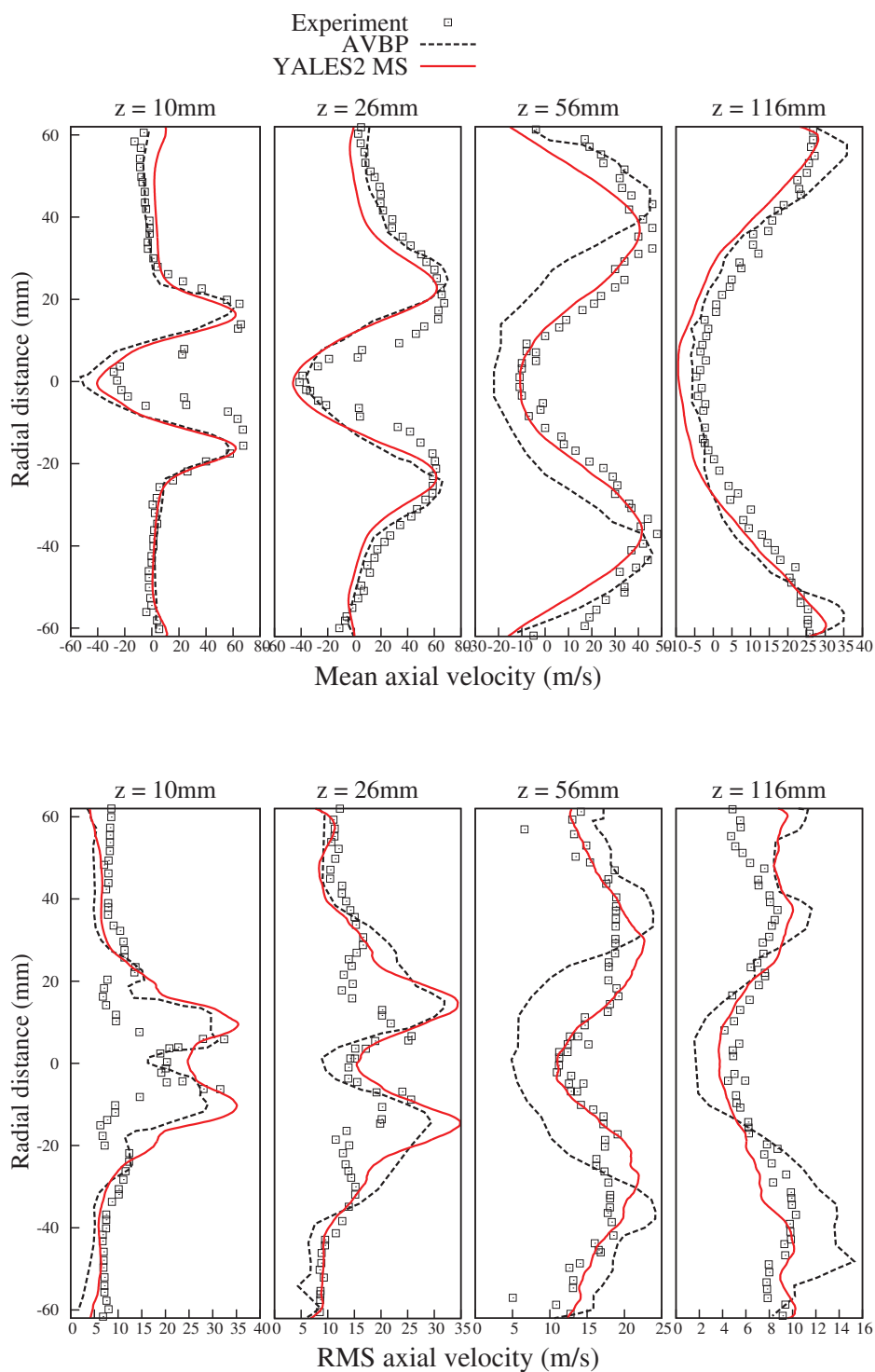


FIGURE 5.39 – Profils de vitesse gazeuse dans les quatre plans expérimentaux (Symboles : Exp [113] - Ligne traitillée : AVBP [80] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M).

coin, composée de quatre régions disposées en forme de croix est également retrouvée. Les Fig. 5.37 et 5.38 montrent des champs instantanés des variables Eulériennes, dans le plan médian, pour les deux maillages.

Les champs de température et de terme source d'enthalpie montrent que la flamme est fortement plissée par l'écoulement issu du swirler. Elle est accrochée sur la paroi externe du diffuseur et forme deux branches, qui se rejoignent au niveau du point d'accrochage de la flamme situé dans la zone de recirculation centrale. Le terme source de fraction massique de kérosène est représenté sur la Fig. 5.37. Les zones positives, représentées par l'échelle rouge à jaune délimitent les zones de production de kérosène, et donc d'évaporation. Les zones en bleu montrent les zones où le kérosène est consommé par combustion. La majorité des gouttes ne s'évapore pas immédiatement après leur injection : elle s'évaporent dans le front de flamme et dans les gaz brûlés. On observe ainsi des zones à richesse élevée dans les gaz brûlés, juste en amont du front de flamme. Ce carburant est ensuite consommé, soit immédiatement en régime de diffusion, soit après avoir été mélangé à l'air par l'activité turbulente, pour brûler en régime partiellement prémélangé. Le facteur d'épaississement est également représenté sur la Fig. 5.38. Comme expliqué dans la Section 3.2.2.2, il conditionné par un capteur de flamme basé sur la variable d'avancement, et dépend de la taille locale du maillage. Dans l'essentiel de la zone réactive, l'épaississement est de l'ordre de 12 pour le maillage grossier, et de 6 pour le maillage raffiné. La comparaison avec le calcul raffiné, dans lequel le modèle de combustion de sous maille a une influence réduite permet donc de s'assurer que l'utilisation du modèle TFLES, plutôt adapté aux flammes prémélangées, reproduit correctement la structure de flamme diphasique partiellement prémélangée que l'on retrouve dans le brûleur MERCATO.

Les vitesses axiales, moyennes et RMS pour la phase liquide sont représentées sur la Fig. 5.41, dans les sections à 10, 26, 56 et 116 mm du fond de chambre. A l'issue de la première campagne d'essais, menée pendant la thèse de Linassier [119], il n'existait pas de mesures LDA pour la phase gazeuse pour les conditions opératoires correspondant au "point de référence". Lecourt a montré que les profils de vitesse étaient auto-similaires, et que moyennant une renormalisation appropriée, les profils issus d'un autre point de fonctionnement pouvaient être utilisés pour réaliser des comparaisons. Cette démarche a été utilisée notamment dans les thèses de Linassier [119], de Bruyat [20] ou encore d'Eyssartier [52]. Cependant, des travaux plus récents [113] ont permis l'accès aux vitesses axiales gazeuses et liquides dans les quatre sections. C'est donc à ces données expérimentales, moins complètes mais mesurées au bon point de fonctionnement, ainsi qu'à la simulation Euler - Lagrange réalisée par Hannebique [80] que les profils de vitesse seront confrontées. Un bon accord tant sur la structure globale du jet que sur l'amplitude des vitesses moyennes et fluctuantes est obtenu, et l'évolution axiale du profil de vitesse moyenne montre que l'expansion du jet est bien prédite. On distingue malgré tout quelques écarts par rapport aux mesures dans les deux premières sections, notamment sur la position radiale des pics de vitesse, également observés dans le calcul AVBP. La taille de la zone de recirculation centrale est légèrement surestimée dans les deux simulations. Dans les plans à 56 et 116 mm, la simulation est en excellent accord avec les données expérimentales. Les statistiques pour le calcul réalisé avec le maillage raffiné ne sont pas présentées ici par manque de temps d'accumulation.

5.5.3 Topologie de l'écoulement diphasique

Cette section s'attache à décrire la dynamique du brouillard de gouttes. La Fig. 5.41 illustre le spray de carburant dans la chambre, et dans une épaisseur de 2 cm centrée sur le plan médian. Les particules sont colorées par leur diamètre et leur température. Les particules sont injectées à une température de 300

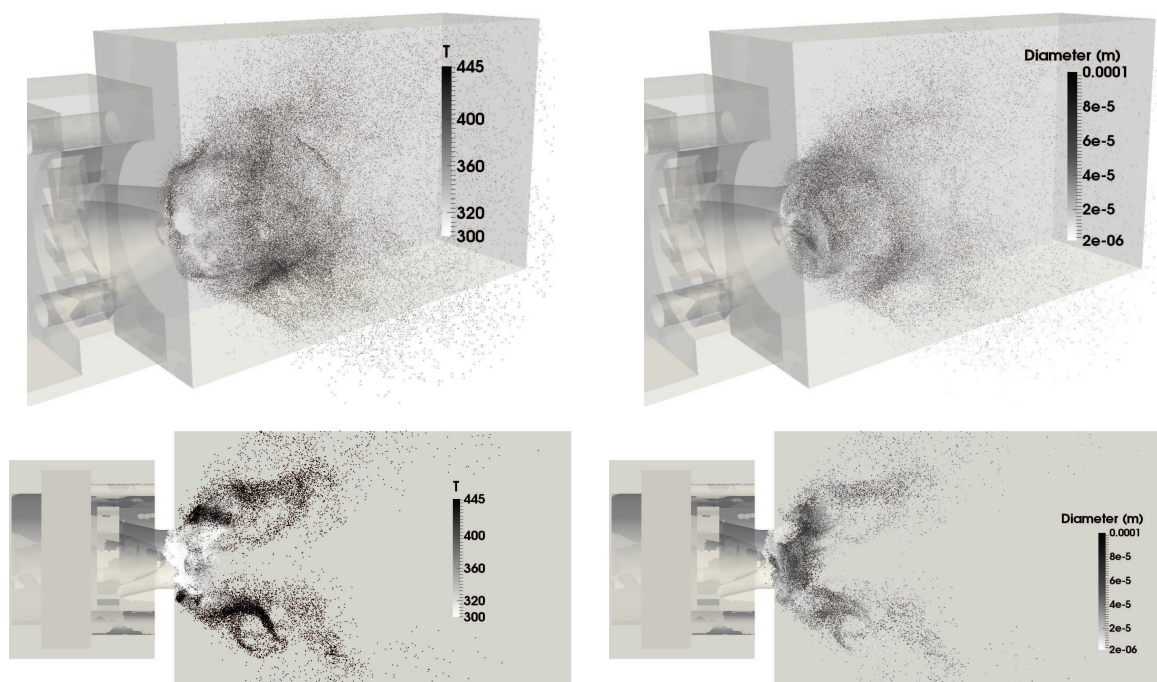


FIGURE 5.40 – Spray de carburant dans la chambre MERCATO (haut), et dans une épaisseur de 2 cm autour du plan médian (bas). Les particules sont colorées par leur température (gauche) et par leur diamètre (droite).

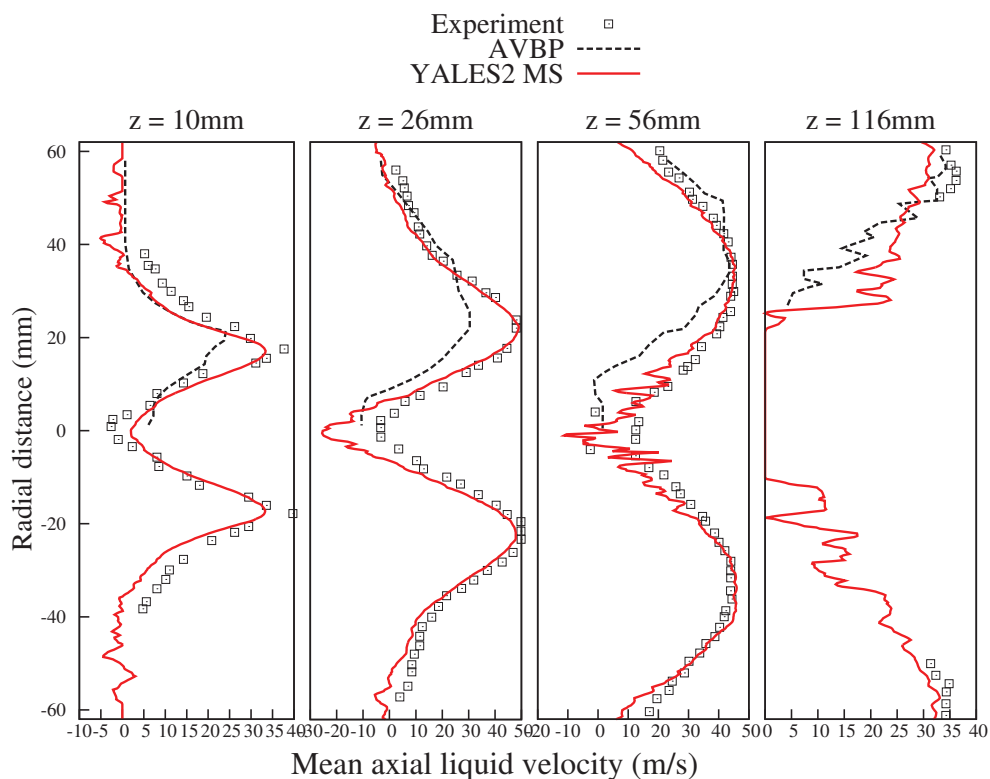


FIGURE 5.41 – Profils de vitesse liquide dans les quatre plans expérimentaux (Symboles : Exp [113] - Ligne traitillée : AVBP [80] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M).

K. Elles se réchauffent rapidement jusqu'à atteindre leur température d'ébullition $T_{boil} = 445$ K, dans des gaz chauds à environ 2400 K, résultat de la combustion d'un mélange kérosène-air à une richesse $\phi = 0.95$. Leur temps de vie dans la chambre dépend ensuite de leur diamètre d'injection. En sortie de chambre, et dans les zones de recirculation, sont présentes uniquement de petites particules dont l'évaporation est presque terminée.

Une comparaison des profils de vitesses axiales pour la phase liquide est donnée en Fig.5.40. Les résultats sont en très bon accord avec les mesures, même dans la dernière section où la rareté des particules rend l'accumulation de statistiques plus difficile. La localisation et l'amplitude des maximums sont bien reproduites dans les quatre sections.

5.5.4 Extraction du PVC

Comme pour le cas monophasique, la dynamique de l'écoulement réactif est ici aussi caractérisée par un mécanisme périodique qui démarre au niveau du plan d'injection. La Fig. 5.42 montre des champs instantanés de fraction de mélange et de température qui mettent en évidence ce phénomène instationnaire : de manière périodique, le point d'accrochage de la flamme (position extrême de remontée des gaz brûlés dans la direction axiale dans la zone de recirculation) semble osciller de bas en haut dans le plan médian, à une période d'environ 0.9 ms qui correspond approximativement à la période de rotation du PVC.

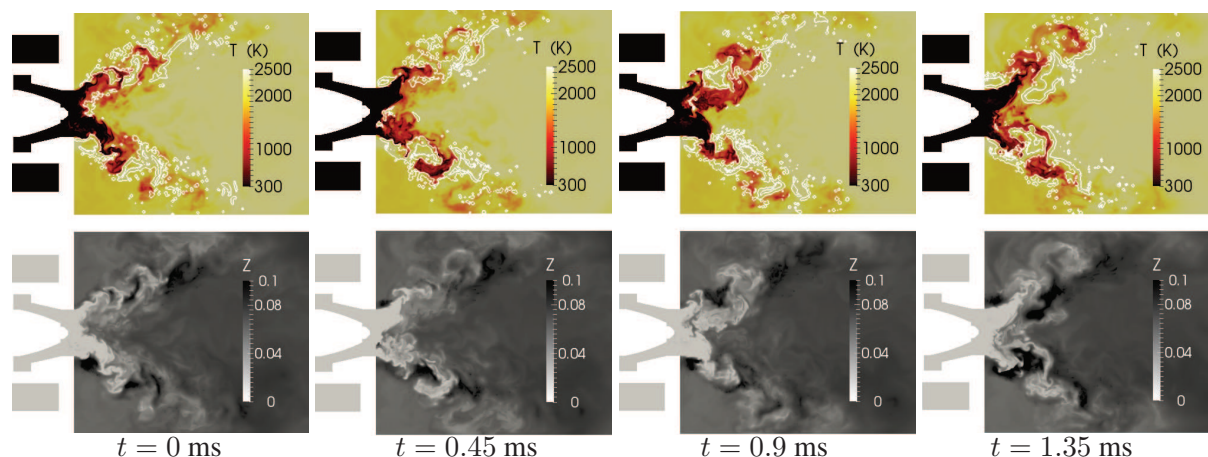


FIGURE 5.42 – Fraction de mélange et température, à quatre instants successifs - Mise en évidence du caractère périodique de la dynamique du spray.

La Fig. 5.43 fait également état d'une probable corrélation entre le PVC et les mécanismes d'évaporation-combustion. On distingue en effet des poches de carburant disposées en quinconce selon un motif qui rappelle la forme du PVC. Le taux de réaction, impacté par la distribution spatiale du carburant gazeux suit également cette disposition en spirale, avec une alternance de zones réactives et non réactives.

Pour caractériser ce phénomène périodique et le corréler au PVC, le critère Q et la température ont été filtrés à l'ordre 8 avec une taille de filtre de 12 mm, et le PVC et la surface de flamme ont été isolés à l'aide d'une fonction levelset d'après les méthodes décrites dans le Chapitre 4. Les fonctions levelset utilisées sont basées sur les iso-surfaces de température filtrée $\bar{T} = 1100$ K et de critère Q filtré $\bar{Q} = 2 \times 10^8$ s⁻² et de température non filtrée $T = 1100$ K. Dans la suite de la section, ces fonctions levelset seront désignées par $\Phi_{\bar{T}}$, $\Phi_{\bar{Q}}$ et Φ_T respectivement. La Fig.5.44 montre les iso-surfaces $\Phi_T = 0.5$, $\Phi_{\bar{T}} = 0.5$ et $\Phi_{\bar{Q}} = 0.5$, à plusieurs instants répartis sur l'équivalent d'une période de précession du PVC, et appelle plusieurs

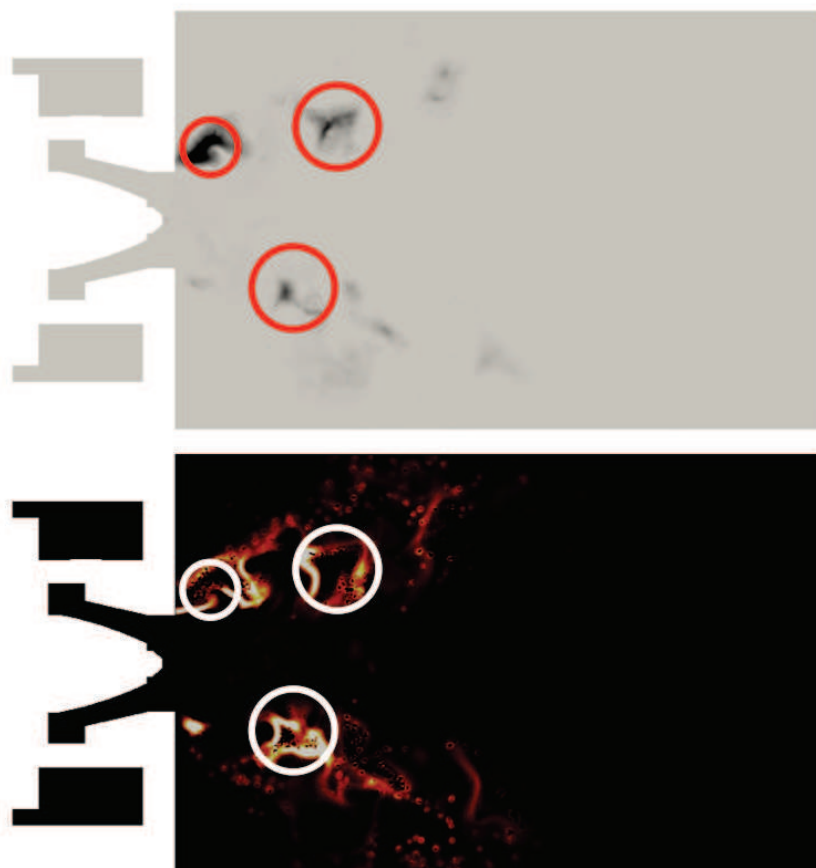


FIGURE 5.43 – Fraction massique de kérosène (haut) et de terme source d’enthalpie (bas). Mise en évidence de l’influence du PVC.

remarques. Premièrement, l’iso-surface $\Phi_T = 0.5$, qui sera par la suite désignée de manière abusive par l’appellation ”surface de flamme”, suit globalement la spirale décrite par le PVC. Cela génère donc des poches de gaz chauds périodiques qui sont convectées vers la sortie. La deuxième remarque importante concerne l’iso-surface de Φ_T , sur laquelle on distingue très clairement le point d’accrochage de la flamme dans la zone de recirculation centrale. Ce point, essentiel pour la stabilité de la combustion, tourne autour de l’axe de rotation, dans le sens opposé au sens d’enroulement du PVC autour de la CRZ, mais dans le même sens que le mouvement de précession du PVC. Le sens de précession du PVC et de rotation du point d’accrochage de la flamme correspond au sens de rotation de l’écoulement, imposé par le swirler.

La Fig. 5.45 montre des iso-surfaces matérialisant le PVC, la flamme et le spray. Les Fig. 5.45 (a) et (c) mettent en évidence un dysymétrie du spray au voisinage de l’injection. Sur la Fig. 5.45 (c), le spray est concentré dans la partie du plan opposée au PVC, et la Fig. 5.45 (a) montre que le déplacement du spray, combiné à la rotation du PVC provoque un enroulement du spray autour de l’axe. Le spray suit donc le même mouvement de précession que le PVC, avec un déphasage.

Afin de mettre en évidence de manière plus quantitative la corrélation spatiale entre la surface de flamme, le spray et le PVC, la PDF de distance au PVC calculée sur l’ensemble de la surface de flamme, et sur l’iso-surface matérialisant le spray liquide est représentée sur la Fig. 5.46. On distingue sur les deux courbes un pic situé autour de 1 cm du centre du PVC. Cette courbe est obtenue à partir des iso-surfaces représentées sur la Fig.5.45. La première remarque que l’on peut faire est que les faibles valeurs de PDF



FIGURE 5.44 – Iso-surfaces de levelset $\Phi_T = 0.5$ et $\Phi_Q = 0.5$ (gauche), iso-surface de levelset $\Phi_T = 0.5$ vue du fond de chambre, coloriée par les RMS de vitesse (milieu), et représentation schématique de l'enroulement du PVC et de la position du point d'accrochage de la flamme (droite). Les images sont prises à des temps successifs répartis sur un tour de précession du PVC.

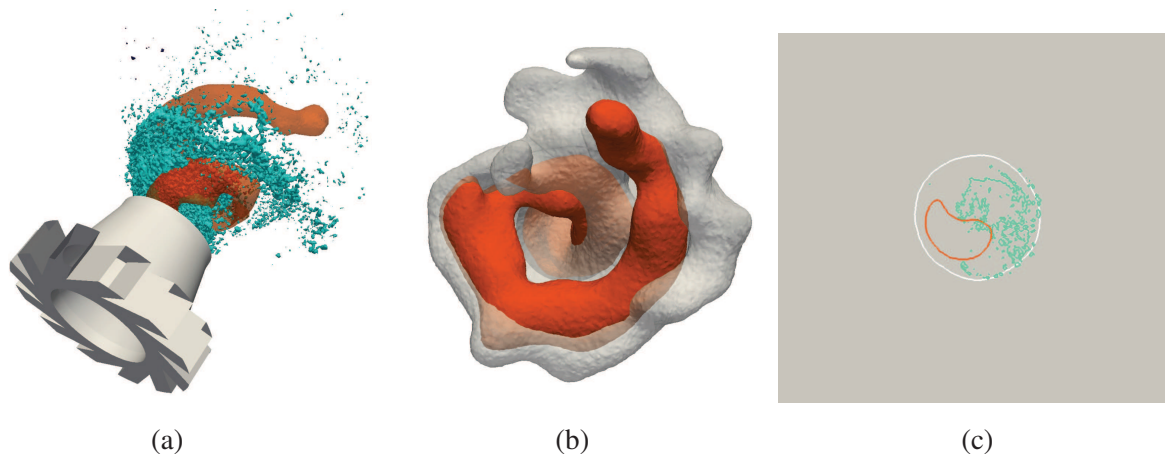


FIGURE 5.45 – Iso-surfaces représentant la flamme (blanc, $\Phi_T = 0.5$), le PVC (orange, $\Phi_Q = 0.5$), et le spray (bleu turquoise), en vue 3D (a), (b), et dans une coupe transverse à 6mm du plan d’injection (c)

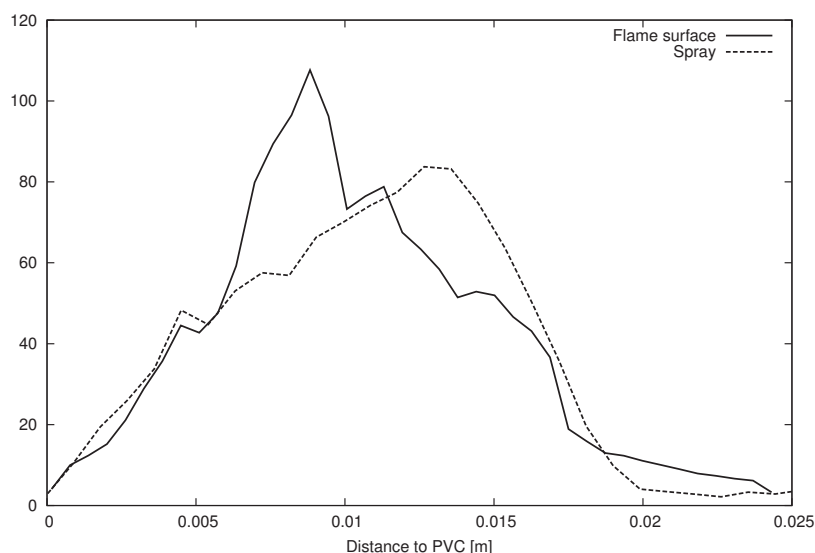


FIGURE 5.46 – PDF de distance au PVC, conditionnée par la surface de flamme (ligne continue), et le spray (ligne discontinue)

pour une distance au PVC inférieure à 0.5 mm, correspondant au cœur interne du PVC, montrent que le spray et la flamme sont concentrés à l’extérieur du PVC. L’écoulement tourbillonnaire au centre du PVC chasse les gouttes, la flamme et le spray se déplacent donc de manière périodique autour de l’axe de précession, à la même fréquence que le PVC. Il existe donc une corrélation spatiale entre le PVC et le spray, qui se reporte sur la structure de flamme, par l’intermédiaire d’un mécanisme d’interaction qui sera décrit dans la Section 5.5.5.

Le bon accrochage de la flamme est un point essentiel pour assurer la stabilité de la combustion. L’iso-surface $\Phi_T = 0.5$ a donc été utilisée pour mesurer la position du point d’accrochage de la flamme au cours de la simulation, afin d’étudier le mécanisme de rotation de ce point observé précédemment. L’algorithme d’extraction de ce point, décrit sur la Fig. 5.48, comprend le filtrage de la température, la définition d’une fonction levelset basée sur la température filtrée, et enfin la recherche du point dans les gaz brûlés ($\Phi_T > 0.5$) dont la coordonnée axiale est la plus faible. La zone de recherche est limitée à un cylindre dont le rayon est égal au diamètre de sortie, et allant du plan d’injection à deux diamètres en

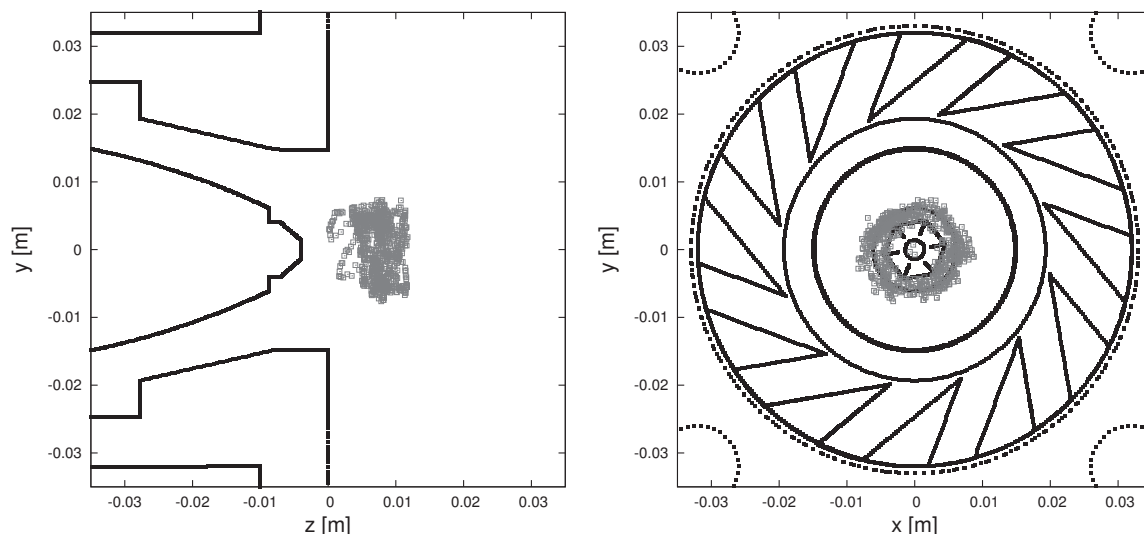


FIGURE 5.47 – Relevé des point d'accrochage de la flamme, et localisation dans la géométrie du brûleur.

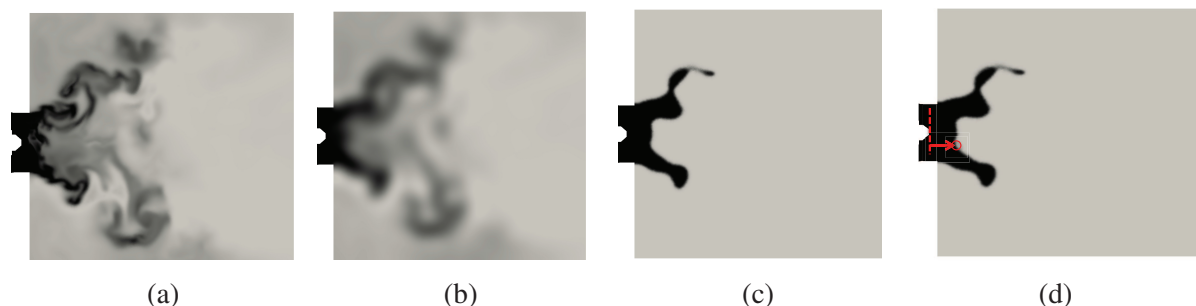


FIGURE 5.48 – Champ instantané de température (a), température filtrée (b), levelset basée sur l'iso-surface de température filtrée $\bar{T} = 1100$ K, et méthode d'identification du point d'accrochage de la flamme.

aval. L'ensemble des points relevés, représenté sur la Fig. 5.47, est majoritairement confiné autour d'un disque de rayon 6 mm dans le plan (x, y) , positionné à environ 1 mm du fond de chambre.

Les points sont collectés sur une durée correspondant approximativement à dix périodes de précession du PVC. Les coordonnées dans le plan (x, y) sont tracées en fonction du temps sur la Fig. 5.49. La position suivant l'axe x et y sont approximées respectivement par les fonctions suivantes :

$$x(t) = R \cos(\omega t + \varpi) \quad \text{et} \quad y(t) = R \sin(\omega t + \varpi) \quad (5.32)$$

où les paramètres ϖ , R et ω sont calculés pour approximer au mieux les deux profils au sens des moindres carrés. La valeur ω issue de l'optimisation correspond à une fréquence de 1220 Hz, ce qui correspond à 16% près à la fréquence du PVC.

L'angle fait par le point avec l'axe x dans le plan (x, y) :

$$\alpha = \arg(xi + y) \quad (5.33)$$

est également tracé sur la Fig. 5.49. La fréquence $\omega/2\pi$ est utilisée pour recentrer les données temporelles sur une période, par le changement de variable sur l'axe des abscisses :

$$t' = t \quad \text{mod} \quad t_{PVC}. \quad (5.34)$$

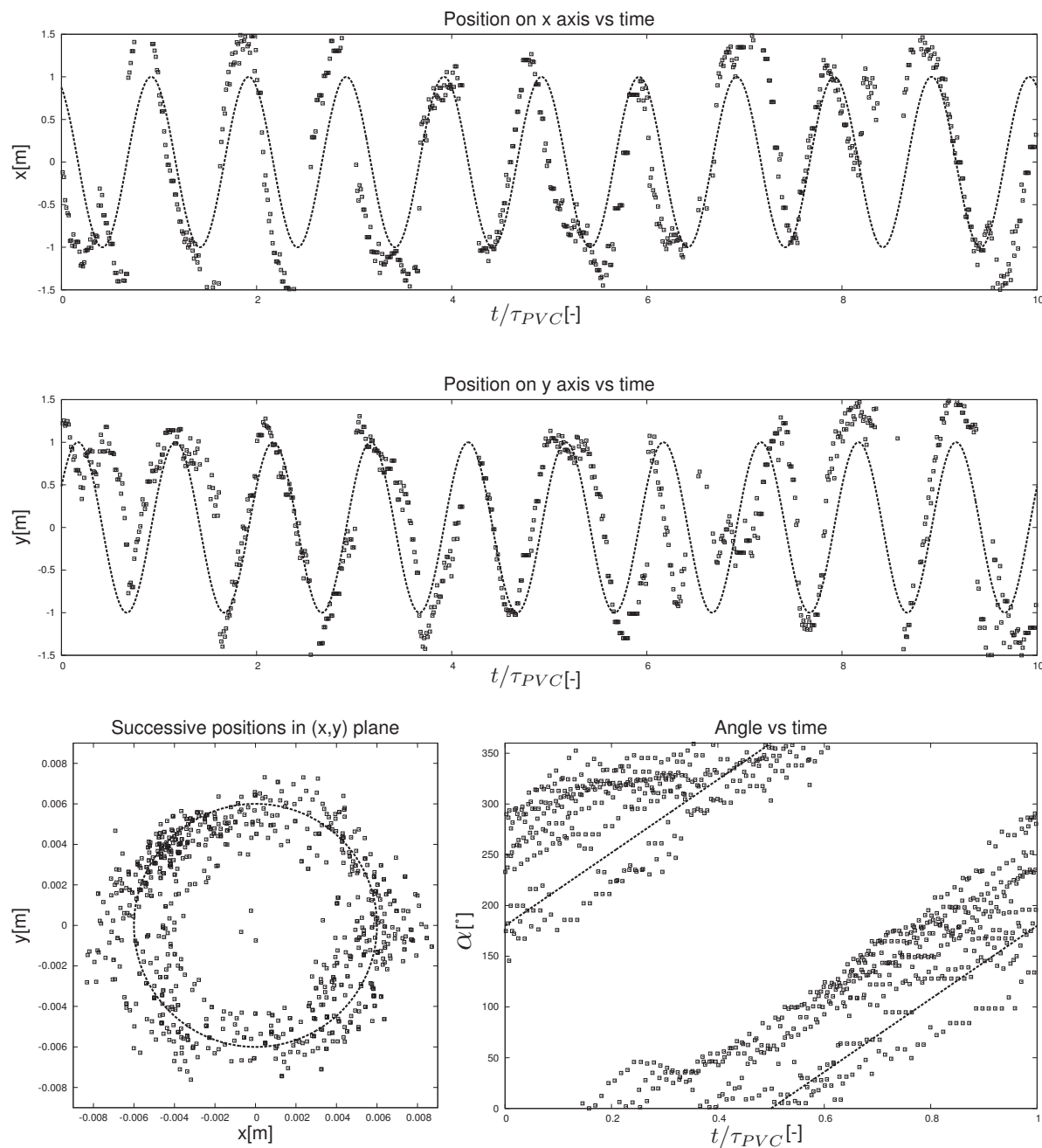


FIGURE 5.49 – Localisation et évolution du point d'accrochage de la flamme.

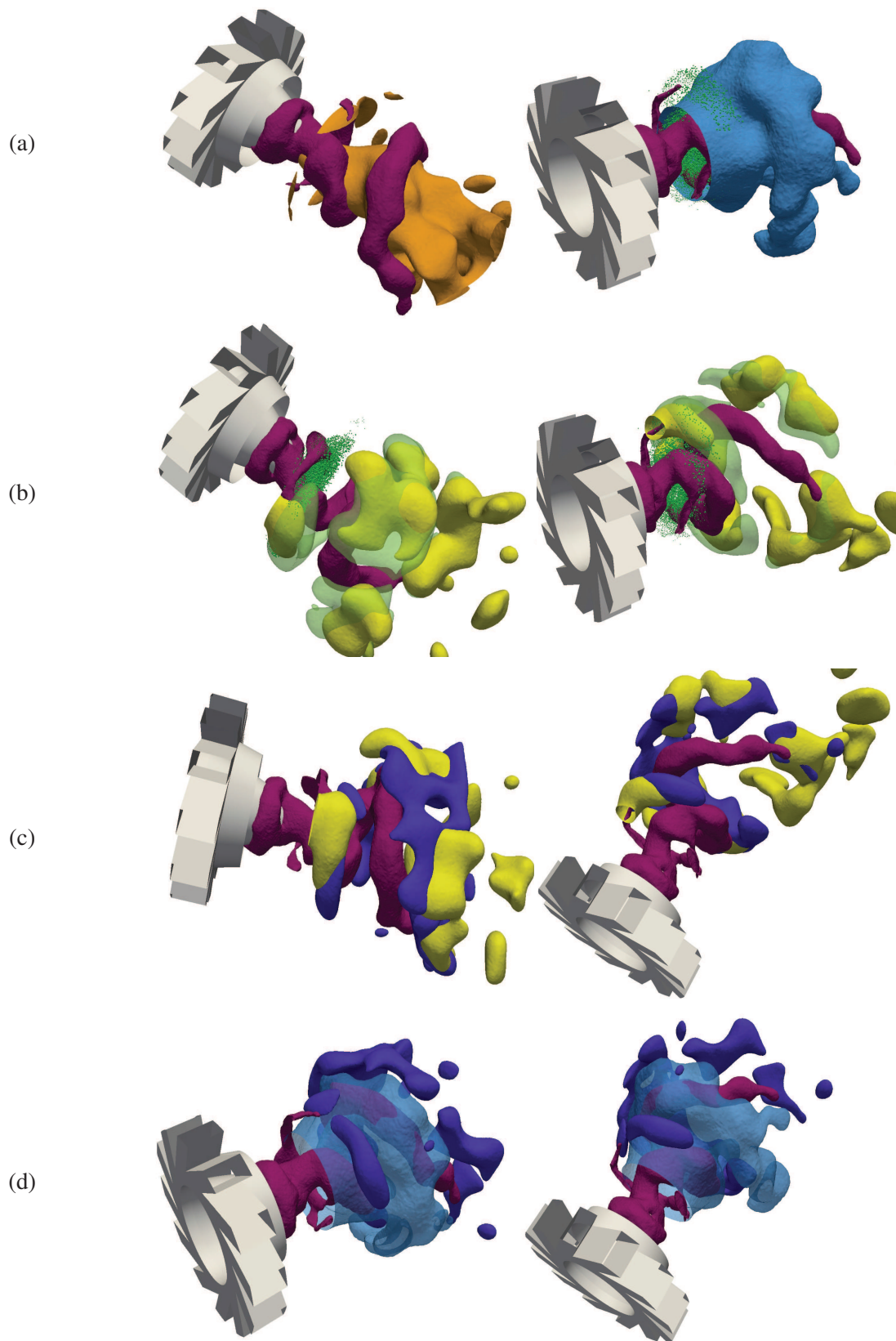
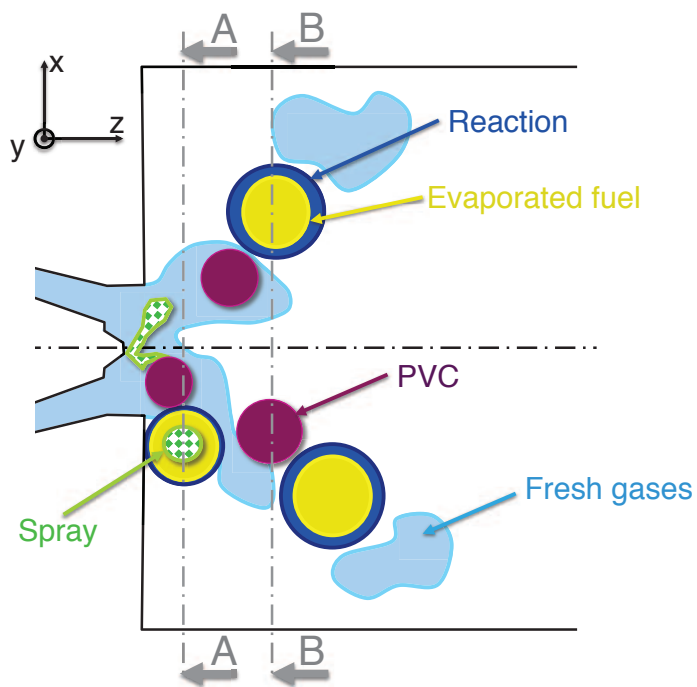
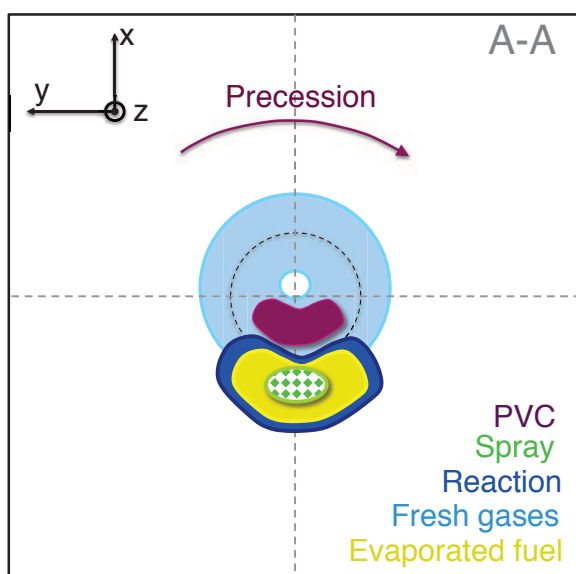


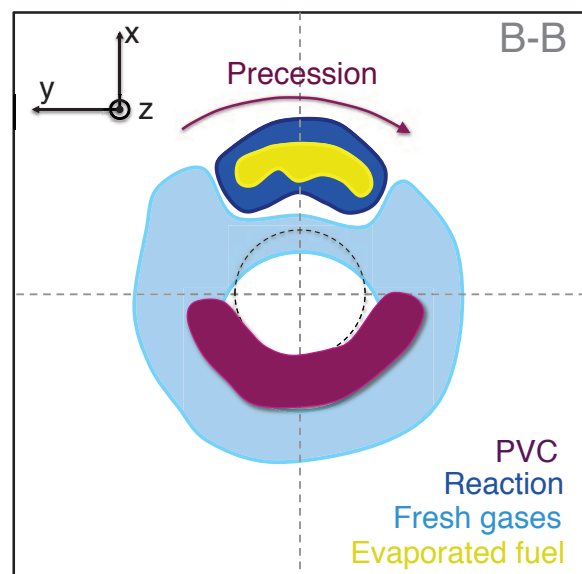
FIGURE 5.50 – Iso-contours de $\Phi_{\bar{Q}} = 0.5$ (rose), de vitesse axiale filtrée $\bar{u}_z = 0$ (orange), $\Phi_{\bar{T}} = 0.5$ (bleu clair), fraction massique de kérosène filtrée $\bar{Y}_{kero} = 0.01$ (jaune), terme source d'évaporation filtré $\bar{\omega}_{kero,evap}$ (vert transparent), terme source d'enthalpie filtré $\bar{\omega}_T$ (bleu foncé) et spray dans la zone proche injecteur (vert).



(a)



(b)



(c)

FIGURE 5.51 – Schéma du mécanisme d'interaction du spray et de la flamme avec le PVC. Vue de côté (a), et coupes transverses (b) et (c).

L'angle α évolue globalement de manière linéaire.

Ces observations permettent de conclure que l'accrochage de la flamme tourne autour de l'axe de rotation à une fréquence proche de celle du PVC, et fluctue légèrement dans la direction axiale. Cette instabilité se limite à une zone spatiale assez réduite. La Section 5.4 a montré que dans cette région, le spray est également fortement perturbé par l'écoulement dans la région proche injecteur.

5.5.5 Description du mécanisme d'interaction spray - flamme - PVC

Afin d'identifier le mécanisme à grande échelle mis en place par le PVC, plusieurs grandeurs physiques ont été filtrées avec un filtre d'ordre 8 et une taille de 12 mm : la température, mais aussi la fraction massique de kérosène, le terme source d'évaporation, le taux de réaction et la vitesse. La Fig. 5.50 montre des iso-surfaces de toutes ces grandeurs. Le PVC commence à s'enrouler autour de la CRZ en perturbant, ce qui conduit notamment à décaler le point de stagnation de l'axe de rotation. Le spray, injecté dans ce champ de vitesse complexe se concentre préférentiellement dans la zone du plan de sortie opposée au PVC. Cette dissymétrie du spray est illustré sur la Fig.5.51, qui schématise le mécanisme d'interaction du PVC avec l'écoulement. L'expansion radiale convecte les particules vers les gaz brûlés, où elles se réchauffent et commencent à s'évaporer. La rotation du PVC déplace peu à peu ce phénomène dans la direction azimutale autour de l'axe, créant un dégagement de kérosène gazeux qui tourne de manière périodique sur la périphérie externe de la sortie du diffuseur, et qui est ensuite convecté par la composante axiale de la vitesse. Cela conduit à une distribution du kérosène, qui, si l'on regarde uniquement les phénomènes à grande échelle, suit une forme de spirale entrelacée et déphasée avec le PVC.

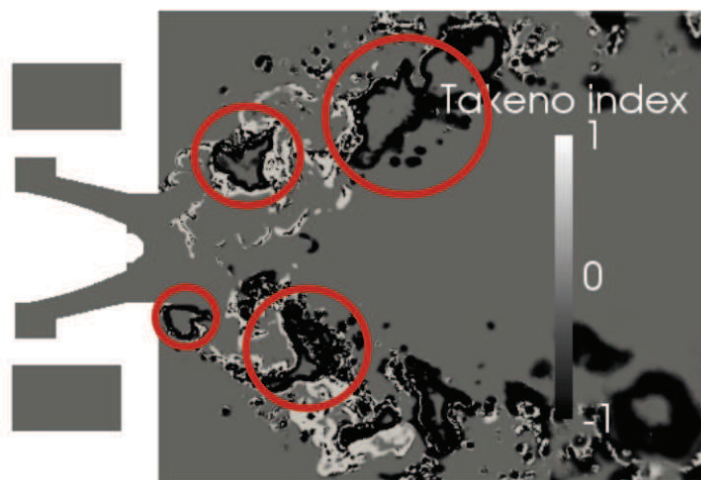


FIGURE 5.52 – Indice de Takeno dans le plan médian : les zones en noir indiquent une flamme de diffusion, les zones blanches indiquent une flamme de prémélange.

La réaction, initiée par la production locale de carburant gazeux, suit alors le même schéma. Le carburant évaporé massivement dans ces zones préférentielles brûle en diffusion, d'où la surface de flamme en spirale visible sur la Fig. 5.50. Le kérosène restant est mélangé par l'activité turbulente et brûle en régime prémélangé dans le reste de la flamme. Les plus grosses gouttes finissent de s'évaporer plus en aval, générant de petites zones de réaction isolées. Cette structure de flamme est clairement visible sur la Fig. 5.52, sur laquelle on retrouve des zones de flamme de diffusion, disposées en spirale autour de la CRZ, et correspondant aux poches de kérosène évoquées plus haut. Ces zones, identifiées par

les cercles rouges, sont alternées avec des flammes prémélangées, issues de la combustion du kérosène résiduel.

5.6 Performances

Les performances du code sur ces deux calculs, et avec les deux maillages sont résumées dans la Table. 5.6. Sur le calcul non réactif, le coût des particules représente environ 40 à 50% du temps de calcul total, pour 1.3 millions de particules. Cette proportion diminue avec le raffinement de maillage, le coût des particules étant masqué par l'augmentation du temps passé dans les communications entre processeurs et l'inversion du système linéaire pendant l'étape de correction de la pression (voir Section 3.4). Le coût de l'avancement des particules pourrait être largement limité en augmentant le poids numérique des particules, fixé à 1 dans l'ensemble des simulations présentées ici, pour diminuer le nombre total de particules. Pour le maillage à 326 millions de cellules, le nombre de processeurs a été multiplié par 8, afin de conserver la charge par processeurs au moins pour la partie gazeuse. La comparaison des performances sur ces deux calculs permet donc de tracer la courbe de scaling présentée sur la Figure 5.53. Cette courbe permet de constater une diminution des performances sur 8092 processeurs, qui ne représente pas un effondrement notable.

En ce qui concerne la simulation en conditions réactives, la combustion favorise l'évaporation, le nombre de particules est donc bien inférieur au cas non réactif, le coût de calcul dû à l'avancement des particules est donc nettement inférieur. L'avancement des scalaires se fait à un coût beaucoup élevé dans le cas réactif. Pour limiter l'impact des scalaires, le calcul des termes sources est réparti sur l'ensemble des processeurs, afin de répartir la charge entre ceux qui contiennent des zones réactives et ceux qui sont loin de la flamme. La stratégie d'équilibrage de charge, basée sur des communications MPI et du vol de tâche [195], est décrite plus en détail dans la thèse de Gruselle [77].

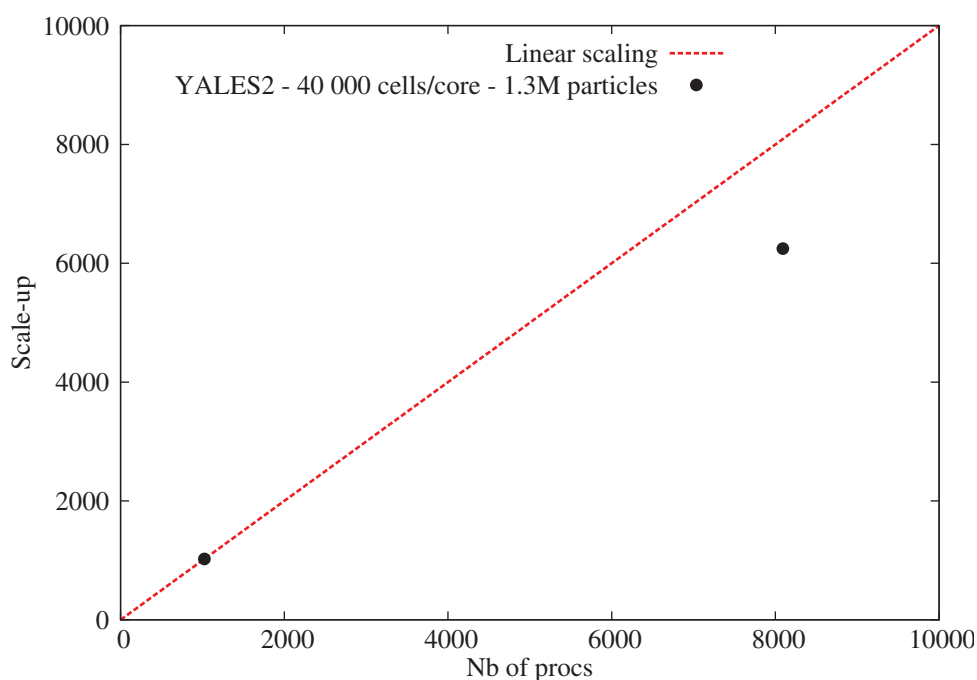


FIGURE 5.53 – Scaling sur le calcul non réactif

Cas non réactif					
40M			320M		
Nombre de processeurs		1024	Nombre de processeurs		8092
Nombre de particules		1.3 M	Nombre de particules		1.3 M
Pas de temps		2.1×10^{-6}	Pas de temps		0.9×10^{-6}
Coût de calcul réduit		325	Coût de calcul réduit		421
Répartition	Particules	45%	Répartition	Particules	38%
	Scalaires	25%		Scalaires	13%
	Communications	10%		Communications	15%
	Equation de Poisson	22%		Equation de Poisson	41%
Cas réactif					
40M			320M		
Nombre de processeurs		1024	Nombre de processeurs		4096
Nombre de particules		200 000	Nombre de particules		200 000
Pas de temps		1.4×10^{-6}	Pas de temps		0.6×10^{-6}
Coût de calcul réduit		431	Coût de calcul réduit		507
Répartition	Particules	26%	Répartition	Particules	20%
	Scalaires	42%		Scalaires	51%
	Communications	12%		Communications	12%
	Equation de Poisson	23%		Equation de Poisson	21%

TABLE 5.6 – Synthèse des performances du code pour les deux points de fonctionnement, sur le maillage grossier et le maillage raffiné.

5.7 Conclusion

Des simulations du brûleur MERCATO, en conditions non réactives préchauffées et réactives, ont été mises en œuvre, démontrant la capacité du code à prédire des écoulements diphasiques, turbulents, réactifs dans des configurations industrielles à géométrie complexe. Ces simulations ont été confrontées avec succès à des résultats expérimentaux, à des calculs réalisés avec un code différent, mais également à des simulations sur des maillages deux fois plus résolus dans chaque direction de l'espace.

Ces simulation ont dans un second temps permis de mettre en évidence la présence d'une structure cohérente de type Precessing Vortex Core, à l'aide des outils de filtrage et d'extraction des grandes structures décrits dans le Chapitre 4, conformément aux attentes théoriques dans ce type d'écoulement fortement swirlé. Cette structure, largement documentée dans l'ensemble de la littérature relative aux écoulements swirlée reste un enjeu majeur dans la conception de systèmes industriels faisant intervenir des écoulements tournants. Les outils développés dans le cadre de cette thèse permettent, par une approche originale, d'étudier les effets du PVC sur la dynamique de l'écoulement, en se concentrant sur une approche instantanée, quand la plupart des méthodes proposées reposent sur des analyses modales ou des moyennes de phases. L'étude menée sur une configuration diphasique non réactive, puis diphasique réactive a permis de mettre en évidence comment le PVC génère des structures cohérentes et pilote la structure de flamme.

Il est à l'origine d'un mécanisme sur les grandes échelles du taux d'évaporation et de réaction, initié au niveau de la zone d'injection, où il impacte la dynamique du spray d'une manière qui s'avère ensuite

cruciale sur les phénomènes ayant lieu plus en aval. Le PVC génère des fluctuations sur des grandeurs telles que la température, la fraction massique de kérosène, le taux d'évaporation et le taux de réaction, qui conduisent à de nombreux phénomènes périodiques dont la fréquence correspond à celle du PVC. Il est donc essentiel de bien reproduire la dynamique du spray près de l'injection. Le nombre de Stokes des particules impacte la manière dont ses dernières interagissent avec le PVC. Il paraît donc important d'utiliser une approche permettant de prendre en compte la polydispersion du spray, avec une bonne description de la distribution en diamètre. La modélisation de la phase d'atomisation peut également jouer un rôle important, puisque le mécanisme d'interaction entre le PVC et la flamme diphasique s'initie très près de l'injection, où le brouillard de gouttes n'est pas nécessairement complètement établi.

Le PVC affecte également la stabilité du point d'accrochage de la flamme, qui suit un mouvement de précession autour de l'axe de rotation, sans pour autant porter préjudice à la stabilité de la combustion. En effet, la flamme est par ailleurs bien accrochée sur la partie extérieure du diffuseur où l'évaporation s'initie, et constamment alimentée au centre du spray par des gaz chauds recirculants et du carburant pouvant brûler en régime prémélangé.

Chapitre 6

Modélisation et optimisation des systèmes d'injection multi-points LEMCOTEC

Ce chapitre est consacré à une étude menée sur six configurations d'injecteurs, dans le but de tester, par des calculs LES, de nouvelles technologies de systèmes d'injection développées dans le cadre du projet LEMCOTEC. Des simulations non réactives des six géométries sont réalisées. L'objectif de ces simulations est d'analyser les topologies d'écoulement de ces systèmes d'injection pour les comparer et identifier les concepts les plus prometteurs.

Pour des raisons de confidentialité, le contenu de ce chapitre a été retiré de la version publique du manuscrit.

Sommaire

6.1	Objectifs du projet LEMCOTEC	197
6.2	Etude comparative des six systèmes d'injection LEMCOTEC	197
6.2.1	Description des six géométries	197
6.2.2	Paramètres numériques des simulations	198
6.2.3	Visualisation et comparaison des écoulements à froid	198
6.2.4	Influence du maillage et du modèle de sous-maille	198
6.3	Analyse en conditions réactives	198
6.3.1	Paramètres numériques de la simulation réactive	198
6.3.2	Influence de la combustion sur la dynamique de l'écoulement	198
6.4	Analyse des résultats et conclusions	198

Chapitre 7

Conclusion générale et perspectives

Sommaire

7.1 Conclusions	199
7.1.1 Méthode d'identification des grandes structures	199
7.1.2 Etude des interactions PVC - flamme diphasique	200
7.1.3 Etude des systèmes d'injection multi-points	200
7.2 Perspectives	201
7.2.1 Analyse des écoulements turbulents	201
7.2.2 Analyse de l'écoulement diphasique réactif dans le brûleur MERCATO	201
7.2.3 Développement d'outils pour le calcul exaflopique	202

7.1 Conclusions

L'étude menée durant cette thèse s'inscrit dans un objectif à long terme d'optimisation des systèmes de combustion pour l'industrie aéronautique. Le travail exposé dans ce manuscrit participe à cet objectif en proposant des méthodes d'analyse des écoulement swirlés dans les simulations haute fidélité, et s'est déroulé en deux temps.

7.1.1 Méthode d'identification des grandes structures

La première partie du travail, présentée dans le Chapitre 4, a consisté à développer une méthode d'identification des grandes structures tourbillonnaires. Ce travail est nécessaire dans un contexte où la résolution spatiale des simulations augmente de manière spectaculaire avec le développement de super-calculateurs et de codes de calcul massivement parallèle. Une méthode de filtrage d'ordre élevé, permettant une séparation d'échelle nette grâce à leur bonne sélectivité, et compatibles avec des maillages non-structurés a été implantée dans le code de calcul YALES2. De nombreux cas tests ont permis d'attester de l'aptitude de ces filtres à extraire des structures de taille donnée dans des écoulements canoniques. Leur utilisation sur le brûleur semi-industriel PRECCINSTA a prouvé la capacité des filtres d'ordre élevé à extraire les grandes structures de l'écoulement sur des maillages avoisinant le milliard de cellules. Le coût de calcul de ces filtres d'ordre élevé est lié à l'inversion du système linéaire, et augmente avec l'ordre du filtre. Il est plus élevé que pour la plupart des filtres classiques d'ordre deux, mais les efforts

d'optimisation de l'algorithme d'inversion ont rendu possible l'utilisation de filtres d'ordre 8 et 12, sur des maillages très raffinés, avec des temps de restitution non prohibitifs.

En combinant ces filtres à des méthodes d'extraction de sous-domaines, cet outil permet d'isoler les grandes structures des écoulements turbulents, dans des configurations à haut nombre de Reynolds.

7.1.2 Etude des interactions PVC - flamme diphasique

Dans un second temps, ces outils ont été appliqués à l'étude des interactions spray-flamme-PVC dans un brûleur aéronautique. Le PVC est une instabilité caractéristique des écoulements swirlés, décrite en détail dans le Chapitre 2. La compréhension des phénomènes physiques liés au PVC reste un enjeu majeur dans la conception de systèmes industriels faisant intervenir des écoulements tournants.

Des simulations LES du brûleur MERCATO ont été mises en œuvre, en conditions réactives et non réactives. La méthode de filtrage a été appliquée à ces calculs, dans le but d'étudier le mécanisme d'interaction du PVC avec le spray dans le cas non réactif, puis avec la flamme diphasique dans le cas réactif. Cette étude a permis d'améliorer la compréhension des phénomènes de couplage entre le PVC, la dynamique du spray, le processus d'évaporation et la structure de l'écoulement réactif. Ces travaux, basés sur une approche instantanée, alors que la plupart des méthodes proposées dans la littérature reposent sur des analyses modales ou des moyennes de phase, ont permis d'expliquer comment le PVC génère des structures cohérentes dans la distribution spatiale du carburant et pilote la structure de flamme.

Le PVC est à l'origine d'un mécanisme à grande échelle, qui pilote les taux d'évaporation et de réaction. Ce mécanisme démarre au niveau de la zone d'injection, où le PVC perturbe la dynamique du spray d'une manière qui s'avère ensuite cruciale sur les phénomènes ayant lieu plus en aval, et générant une zone de réaction disposée en spirale dans le sillage du PVC. Une étude menée sur le spray a montré que les particules à très faible nombre de Stokes, très sensibles au PVC, ont une dynamique très différentes des grosses particules, plus inertielles. Cette observation confirme l'importance d'utiliser une approche polydisperse et de prédire correctement la distribution de diamètre. L'absence de modélisation de la phase d'atomisation peut également jouer un rôle important. En effet, le mécanisme d'interaction entre le PVC et la flamme diphasique s'initie très près de l'injection, où le brouillard de gouttes n'est pas nécessairement complètement établi. Le PVC affecte également la stabilité du point d'accrochage de la flamme, qui tourne autour de l'axe de rotation, à une fréquence proche du mouvement de précession du PVC.

7.1.3 Etude des systèmes d'injection multi-points

En parallèle de ces travaux, une étude comparative de plusieurs systèmes d'injection multi-points a été menée. L'analyse des écoulements dans ces systèmes d'injection s'appuie entre autres sur les outils d'identification des grandes structures développés dans la première partie de la thèse. Ces simulations ont permis d'identifier plusieurs configurations prometteuses, qui ont ensuite fait l'objet d'optimisations géométriques avant d'être utilisées dans les études expérimentales prévues dans la suite du projet LEMCOTEC. Les systèmes d'injection multi-points sont encore en étude, mais les résultats issus des différentes campagnes d'essais ont montré leur efficacité dans la réduction des NO_x et ils semblent également très prometteurs pour la réduction d'émissions de particules.

7.2 Perspectives

Les différents points développés dans cette thèse peuvent conduire à plusieurs axes de recherche, décrits dans les sections suivantes.

7.2.1 Analyse des écoulements turbulents

Les filtres d'ordre élevé ouvrent la perspective à de nombreuses applications pour l'analyse des écoulements turbulents, allant au delà du contexte des écoulements swirlés, comme en atteste par exemple le cas test du jet plan présenté dans la Section 4.4.4. Combiné aux méthodes d'extraction basées sur une fonction levelset et à l'algorithme de reconstruction squelettique, cet outil peut permettre par exemple d'étudier la relation entre la direction privilégiée des plus petits et des plus grands tourbillons, et d'établir des corrélations entre la turbulence à petite et à grande échelle. La Fig. 7.1 montre le PVC, ainsi que les plus petits tourbillons résolus sur le maillage. La distance signée au PVC permet de limiter la visualisation aux tourbillons présents au voisinage du PVC. On distingue très clairement une direction préférentielle pour la turbulence à petite échelle, qui semble se développer de manière orthogonale au PVC. L'approfondissement de ces travaux pourrait donc apporter un éclairage nouveau sur les corrélations entre les différentes échelles de la turbulence.

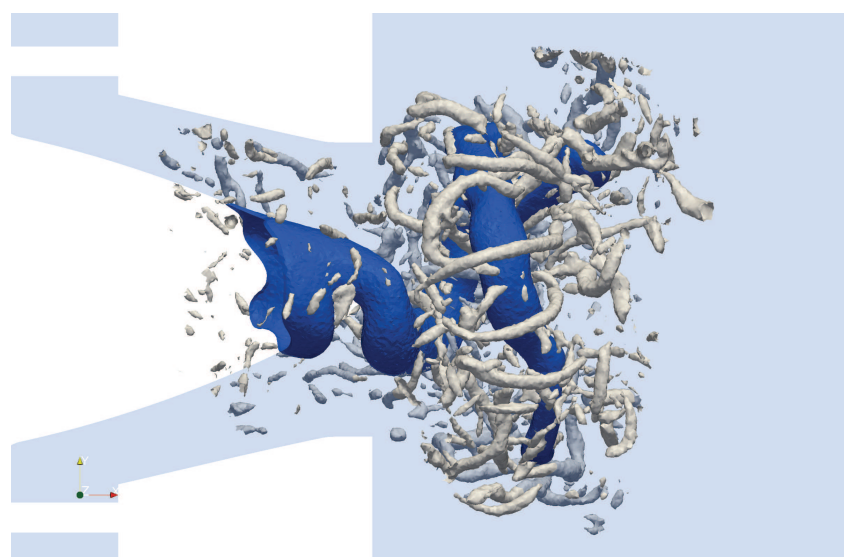


FIGURE 7.1 – Mise en évidence de la corrélation entre le PVC et les petits tourbillons environnants

7.2.2 Analyse de l'écoulement diphasique réactif dans le brûleur MERCATO

L'utilisation des filtres d'ordre élevé sur la simulation du brûleur MERCATO a permis de mettre en évidence un mécanisme d'interaction entre le PVC et la structure de flamme. Cette étude a été réalisée sur le maillage le plus grossier, constitué de 40 millions de cellules, et il serait intéressant de réaliser la même analyse sur un maillage plus raffiné. En effet, la comparaison du PVC obtenu à différentes résolutions de maillage sur PRECCINSTA a montré quelques légères différences dans la structure des grandes échelles de l'écoulement, ces dernières étant mieux prédites sur les simulations les plus raffinées. Dans cette optique, un calcul issu d'un deuxième niveau de raffinement de maillage sera bientôt mis en œuvre, portant le maillage à 2.6 milliards de cellules.

Le calcul du brûleur MERCATO fera aussi l'objet d'une étude comparative entre l'approche chimie réduite utilisée ici, et un calcul en chimie tabulée avec le modèle PCM-FPI. Ce calcul permettra de comparer la structure de flamme, mais aussi les performances du code avec ces deux approches. La Fig. 7.2 montre les premiers résultats comparatifs entre chimie tabulée et chimie réduite.

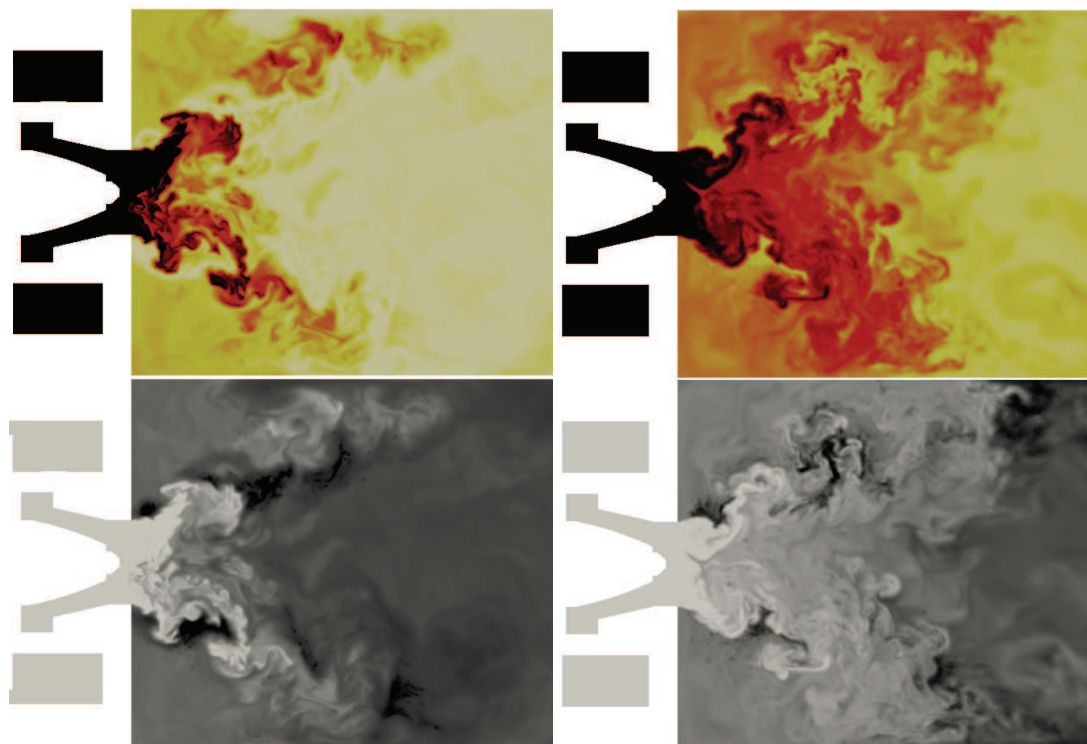


FIGURE 7.2 – Champs de température (haut), et de fraction de mélange (bas) dans le plan médian, en chimie réduite (gauche), et en chimie tabulée (droite).

7.2.3 Développement d'outils pour le calcul exaflopique

Les travaux initiés ici sont un premier pas vers le développement d'outils de post-traitement des simulations très haute fidélité sur la prochaine génération de super-calculateurs. La transition vers ce type de calculateurs nécessite de repenser notamment les méthodes de maillage et de post-traitement tels qu'on les connaît aujourd'hui. La thèse de N. Legrand, qui vient de démarrer au CORIA, s'inscrit dans la même démarche et vise à préparer les outils de simulation de demain, et à anticiper les problèmes liés au Big-data dans le contexte du calcul haute-performance. Les filtres d'ordre élevé développés ici serviront de point de départ pour proposer et tester des méthodes de post-traitement basées sur le filtrage et l'interpolation des solutions sur une grille grossière, permettant d'alléger les opérations de transfert des données et de visualisation des résultats. L'étape préliminaire de filtrage est indispensable pour pouvoir interpoler une solution sur une grille grossière sans générer des erreurs dues au repliement de spectre. Elle permet de supprimer les fréquences qui ne peuvent pas être représentées sur la grille grossière, et donc de respecter le critère d'échantillonnage de Nyquist-Shannon. Les travaux à venir porteront donc entre autres sur la mise au point de méthodes de filtrage plus performantes. Les pistes d'améliorations reposent par exemple sur l'optimisation des solveurs linéaires existants, ou le développement de nouveaux filtres

d'ordre élevés basés sur une intégration temporelle de problèmes de diffusion.

La génération de maillages constitués de plusieurs milliards de points pour des simulations LES et DNS est également un défi. Des méthodes d'adaptation de maillage en parallèle, basées sur la librairie MMG3D développée à l'INRIA, sont en cours de développement dans YALES2 dans le cadre de la thèse de P. Bénard. Ces méthodes d'adaptation dynamique permettent de générer des maillages de très grande taille, avec une résolution spatiale adaptée à l'aide de contraintes reposant sur des considérations physiques, et mise à jour au cours du calcul. Dans ce contexte, l'interpolation sur plusieurs grilles à des niveaux de raffinement différents est également une piste pour développer des critères de raffinement et d'adaptation de maillage, basés sur la divergence entre deux réalisations d'un même calcul LES. Ce type de méthode, qui nécessite également de disposer d'outils de filtrage et d'interpolation performants, sera également abordée dans la thèse de N. Legrand.

Annexe A

Publications et conférences

A.1 Publications

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in large-eddy simulation and application to a swirl burner. *Physics of Fluids (1994-present)*, 27, 045107 (2015).

A.2 Conférences internationales

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Modeling and analysis of the interactions of coherent structures with a spray flame. *ERCOFTAC DLES 10*. Limassol, Cyprus. 2015

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Numerical study of spray/precessing vortex core interaction in realistic swirling flows. *ERCOFTAC ETMM 10*. Marbella, Spain. 2014

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Design of high-order implicit filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in LES. *ERCOFTAC DLES 9*. Dresden, Germany. 2013

A.3 Communications orales

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Filtrés implicites pour l'identification des grandes structures. *Journée des doctorants en combustion TURBOMECA*, Bordes, France. 2012

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Identification des structures cohérentes dans les écoulements swirlés. *Journée des doctorants en combustion TURBOMECA*, Bordes, France. 2012

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Modélisation et optimisation de systèmes d'injection multi-points. *Seminaire GDTECH*, Bordes, France. 2013

L. Guedot, G. Lartigue, V. Moureau. Two phase flow simulation of the MERCATO burner : 1er prix du concours photo. *Journée des doctorants CORIA*, Rouen, France. 2014

A.4 Article

Ci-après, une reproduction de l'article *Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in large-eddy simulation and application to a swirl burner*.

Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in large-eddy simulation and application to a swirl burner

L. Guedot,^{a)} G. Lartigue,^{b)} and V. Moureau^{c)}

*CORIA-UMR6614, Normandie Université, CNRS, INSA et Université de Rouen,
Avenue de l'Université, 76800 Saint-Etienne-du-Rouvray, France*

(Received 24 October 2014; accepted 30 March 2015; published online 15 April 2015)

The analysis of large-scale structures from highly refined unsteady simulations becomes challenging as the mesh resolution increases, and some new tools must be developed in order to perform their identification and extraction. A solution is to use filters to remove the smallest flow motions. High-order filters, characterized by their good selectivity properties, were implemented in an unstructured finite-volume solver for large-eddy simulation, and their ability to extract structures of a given scale was tested on canonical flows. Then, these filters were applied on an aeronautical swirl burner with a complex geometry. The results show that novel high-order filters are able to extract the precessing vortex core from this realistic turbulent flow. High-order filtering enables to study in detail this large-scale structure and to gain insight into the dynamic of swirl flows. © 2015 AIP Publishing LLC. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4917280>]

I. INTRODUCTION

Large-Eddy Simulation (LES) and Direct Numerical Simulation (DNS) are increasingly popular modeling tools for the understanding and the prediction of turbulent flows. The mesh resolution in these 3D unsteady simulations has been in a constant increase over the last decades, driven by the development of massively parallel super-computers. The post-processing of the large amount of data generated by these simulations is however very challenging. The analysis of large-scale features in turbulent flows is particularly difficult as it requires to process either wide regions of the computational domain or a large number of instantaneous solutions of the flow.

Beside these difficulties, the definition of a criterion for vortex identification in turbulent flows is not trivial and requires to define precisely the concept of vortex as reveals the extensive literature from the last decades addressing this issue. A first intuitive definition of a vortex core is based on the fact that in a vortex, the pressure tends to decrease on the axis, because of the centrifugal force.¹ However, it was demonstrated that a low-pressure iso-surface is not a suitable tool for vortex identification since the presence of a local pressure minimum is neither a necessary condition for the existence of a vortex core (the swirl can be balanced by viscous forces rather than pressure forces, for example) nor a sufficient condition (pressure minimum can be found in flows that do not involve swirl).² Another intuitive definition of a vortex is a tube delimited by circular closed streamlines,³ but this representation is limited since the streamlines are highly deformed when the vortex is convected or in the case of vortices interaction.⁴ Iso-surfaces of high vorticity are another immediate candidate for vortex core identification,⁵ but this criterion does not distinguish if the vorticity is caused by the background shear or by actual swirl motion. This can be a problem especially close to the walls, where the flow is highly sheared.² Later, Chong *et al.*⁶ proposed another criterion based on the velocity gradient tensor $\nabla \mathbf{u}$. They state that the local streamline pattern around a point, in a

^{a)} lola.guedot@coria.fr. <http://www.coria-cfd.fr/index.php/User:Guedot>

^{b)} <http://www.coria-cfd.fr/index.php/User:Lartigue>

^{c)} <http://www.coria-cfd.fr/index.php/User:Moureauv>

reference frame moving with the point, is related to the eigenvalues of the velocity gradient tensor at this point. They define a vortex as a region where two eigenvalues of the velocity gradient tensor are complex. This condition is satisfied when the discriminant of the characteristic cubic polynomial of the tensor, or Δ -criterion, is positive. Zhou *et al.*⁷ extended this criterion by showing that the swirl intensity is related to the imaginary part of the complex eigenvalues of $\nabla\mathbf{u}$. Under this condition, $\nabla\mathbf{u}$ has one real eigenvalue λ_r and two conjugate complex eigenvalues $\lambda_{cr} \pm i\lambda_{ci}$. The swirling strength is defined as λ_{ci} and is identified as a measure of the rotation rate. Chakraborty *et al.*⁸ proposed an enhancement of the swirling strength criterion by using the ratio $\lambda_{cr}/\lambda_{ci}$ to quantify the degree to which the fluid is locally spiraling. This ratio, referred to as the inverse spiraling compactness, takes positive values when the fluid particles are spiraling away from the center and negative values in the case of inward spiraling. Another criterion based on the velocity gradient tensor proposed by Hunt *et al.*⁹ is the Q-criterion, named after the second invariant of this tensor,

$$Q = \frac{1}{2} (\|\boldsymbol{\Omega}\|^2 - \|\mathbf{S}\|^2),$$

where

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

and

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1)$$

Vortices are defined as regions of positive Q-criterion, i.e., where the vorticity magnitude is higher than the strain rate, with the additional condition of low pressure. Most of the time, this second condition is assumed satisfied if Q is positive.^{2,10} Jeong and Hussain² proposed another criterion starting from the idea that the presence of a vortex core is correlated to a pressure minimum. They form the equation for the Hessian of pressure by taking the gradient of the Navier-Stokes equation and discard the terms due to vorticity transport, irrotational straining, and viscous effects, and they are left with

$$-\frac{1}{\rho} (\nabla^2 P) = \boldsymbol{\Omega}^2 + \mathbf{S}^2. \quad (2)$$

From the equation above, they show that a pressure minimum occurs when two of the eigenvalues of the $\boldsymbol{\Omega}^2 + \mathbf{S}^2$ tensor are negative. This criterion is summarized as $\lambda_2 < 0$, where λ_2 is the intermediate eigenvalue of this tensor. Whereas the Q-criterion looks for the excess of rotation over the strain rate in all spatial directions, the λ_2 criterion measures it only in a specific plane.⁸ Several studies^{10,11} have shown that iso-surfaces of Q-criterion and λ_2 -criterion give very similar results, providing that equivalent thresholds are used. Furthermore, relations between the different criteria were demonstrated by Chakraborty *et al.*⁸ By taking the trace of Eq. (2), the classical relation $\Delta P = 2\rho Q$, where ρ is the fluid density, can be recovered.

The criterion preferentially used in the present study is the Q-criterion, which is related to the Laplacian of the pressure field in inviscid incompressible flows. For homogeneous isotropic turbulence, the scaling power of the Q-criterion with the wave-number k is larger than unity.¹² As a result, the Q-criterion exhibits larger values for small vortices than for big vortices. This issue is particularly annoying in well refined simulations that feature a large range of turbulent scales. In these simulations, the small vortices completely mask the large vortices when looking at surfaces of Q-criterion iso-values. To circumvent the Q-criterion scaling issue, it is mandatory to develop numerical techniques able to separate the different coherent structures.

The visualization of large turbulent eddies may be achieved using proper orthogonal decomposition (POD)^{13,14} or dynamic mode decomposition (DMD).¹⁵ These two modal methods are particularly interesting for the analysis of the dynamics of these large structures but both methods require the storage of a large amount of snapshots, which is presently intractable for billion-cell simulations without sub-sampling. Moreover, those methods usually require to perform some temporal or spatial filtering, to remove high-frequency motions, and to avoid aliasing issues.

A possible solution, developed in this paper, is to use low-pass filters able to extract turbulent scales of a given size.^{12,16} Performing this scale separation is quite challenging as it requires to extract features from a large amount of data distributed across a large number of processors. This operation also necessitates a good selectivity in order to leave the large-scales unaffected while damping all the smallest scales. High-order filters, which have better selectivity than low-order filters, are therefore good candidates for large-scale features extraction.

Various high-order filters have been derived in the past: in the 1970s, Shapiro proposed explicit filters up to order 16.^{17,18} Recursive filters with high selectivity were also widely studied.^{19–21} Another possible approach is to use an orthogonal wavelet decomposition and to only keep the Gaussian part of the turbulent flow field.^{22,23} Raymond and Garder in the 1990s^{24,25} designed implicit high-order filters for the analysis of weather data. Their implicit formulation is particularly interesting as it enables to obtain high-order filters from low-order finite-difference schemes on compact stencils. This formulation also makes the boundary condition issues easier to deal with.

The objective of the paper is to design and evaluate high-order filters for the extraction of large-scale features in massively parallel simulations of turbulent flows in complex geometries. To this aim, high-order implicit filters (HOFs) based on the work of Raymond and Garder^{24,25} are derived and applied to various problems including a semi-industrial swirl burner for the extraction of the Precessing Vortex Core (PVC). The paper is organized as follows. Section II introduces the high-order filtering technique as a well-suited tool to perform scale separation. The implementation of these high-order filters in the 3D unstructured LES solver YALES2 is detailed in Sec. III. Several test cases for the evaluation of these filters are presented in Sec. IV. Section V is devoted to the results obtained when applying high-order filters combined with level set techniques to a complex turbulent swirling jet flow. Section VI summarizes the conclusions.

II. HIGH-ORDER FILTERS

In this section, the link between selectivity and order of the filter is recalled. Then, the high-order implicit filters for Cartesian grids of Raymond and Garder^{24,25} are presented.

A. Spatial filtering process

For a one-dimensional infinite domain, the filtering of a scalar $\phi(x)$ reads^{26,27}

$$\bar{\phi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) G_{\Delta}(y-x) dy, \quad (3)$$

$\bar{\phi}$ is the filtered variable and G_{Δ} is the convolution kernel with a filter size equal to Δ . Usual filters used in the derivation of large-eddy simulation models²⁶ are summarized in Table I as well as their Fourier transform. In this table, k is the wave-number and k_c is the cutoff wave-number defined as $k_c = 2\pi/\Delta$. The expression of the Gaussian filter is chosen to ensure it has the same second-order moment than the box filter.

The filtering operation described in Eq. (3) is a convolution product and can be written in the spectral space as

TABLE I. Common filters and associated Fourier transform.

Name	Physical space G_{Δ}	Wavenumber space \hat{G}_{Δ}
Box	$\frac{1}{\Delta} H\left(\left \frac{1}{2} - \frac{x}{\Delta}\right \right)$	$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}k\Delta\right)}{\frac{1}{2}k\Delta}$
Gaussian	$\left(\frac{6}{\pi\Delta^2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{6x^2}{\Delta^2}\right)$	$\exp\left(-\frac{k^2\Delta^2}{24}\right)$
Cardinal sine	$\frac{\sin(2\pi x/\Delta)}{\pi x}$	$H\left(1 - \frac{k}{k_c}\right)$

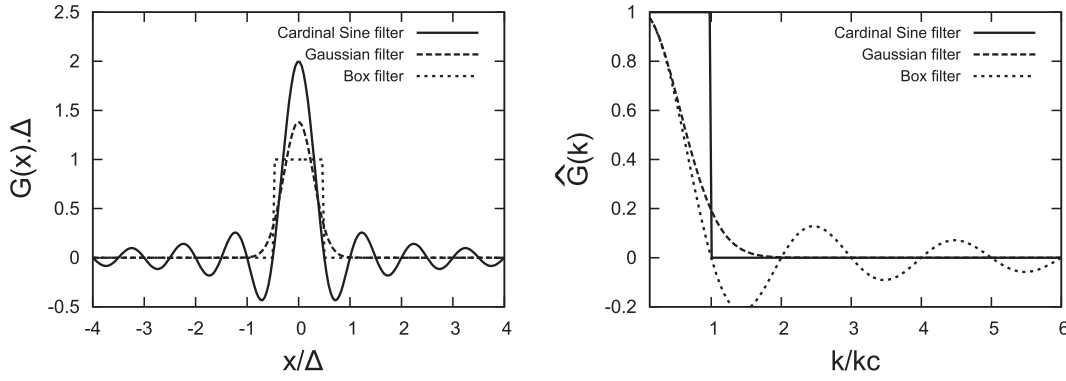


FIG. 1. Representation of the common filters in the physical space (left) and spectral space (right). The scales are normalized by the filter width where appropriate.

$$\widehat{\bar{\phi}}(k) = \widehat{G}_\Delta(k) \widehat{\phi}(k), \quad (4)$$

where $\widehat{\phi}$ is the Fourier transform of ϕ and $\widehat{\bar{\phi}}$ is the Fourier transform of $\bar{\phi}$. The convolution kernel $\widehat{G}_\Delta(k)$ in the spectral space represents the damping of each monochromatic wave of the signal as a function of the wave-number. The convolution kernel of the Gaussian filter, box filter, and cardinal sine filter is plotted in the physical and spectral domains in Fig. 1.

Convolution can be achieved in the physical space by discretizing the kernel over the mesh and integrating with usual methods. Alternatively, this convolution may be performed based on the expansion in Taylor series of ϕ , in order to write $\bar{\phi}$ as a sum of moments^{28,29}

$$\phi(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \frac{d^j \phi}{dx^j}(y-x)^j. \quad (5)$$

The filtered scalar $\bar{\phi}$ can then be written as follows:

$$\bar{\phi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \frac{d^j \phi}{dx^j}(y-x)^j G_\Delta(y-x) dy. \quad (6)$$

After the variable change $z = y - x$, the filtering operation becomes

$$\bar{\phi}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{d^j \phi}{dx^j} M_j,$$

with

$$M_j = \frac{1}{j!} \int_{-\infty}^{+\infty} z^j G_\Delta(z) dz. \quad (7)$$

Equation (7) suggests that this Taylor expansion exists only if G_Δ decreases towards infinity faster than any inverse power of z . As a result, only filters that are sufficiently rapidly decreasing can be defined through their moments and the Taylor series expansion cannot be performed for the cardinal sine filter, for example.

For a Gaussian filter, all moments M_j can be calculated analytically. Since the filter is symmetric, all the odd moments are equal to zero and the even moments are equal to

$$M_{2n} = \left(\frac{\Delta^2}{24}\right)^n \frac{1}{n!}. \quad (8)$$

The first non-zero moment of Gaussian and box filters is the second-order moment, indicating that they are second-order filters.

As already mentioned, the cardinal sine is not decreasing sufficiently fast toward zero at infinity and its moments cannot be defined in the usual sense. On the other hand, the cardinal sine filter is

the limit, for $n \rightarrow \infty$, of filters having their first n moments equal to zero. This indicates that this filter can be thought of as an infinite order filter.

B. Relation between selectivity and order of the filter

The selectivity of a filter can be defined as its ability to damp the smallest scales while not affecting the largest ones. The cardinal sine filter, which has a sharp transition at the cutoff wave-number in the spectral space, has the best selectivity. On the other hand, the Gaussian filter removes part of the information before the cutoff—which should be avoided—and does not remove completely the sub-filter scale information, which is not good neither for large-scale structure extraction.

Designing selective low-pass filters requires a unity damping function at the neighborhood of zero wave-number, to ensure that the large structures associated with the smallest wave-numbers are not affected by the filtering operation. Mathematically, this condition is satisfied if the successive derivatives of the damping function are equal to zero at zero wave-number,³⁰

$$\left. \frac{d^{2j}G(k)}{dk^{2j}} \right|_{k=0} = 0,$$

with

$$j = 1, 2, \dots \quad (9)$$

These successive derivatives for $k = 0$ may be related to the moments of the filter as shown hereafter. Applying a Fourier transform to Eq. (7) leads to

$$\widehat{\phi}(k) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j k^{2j} \widehat{\phi}(k) M_{2j}. \quad (10)$$

Forming the ratio of the filtered to unfiltered variable enables to express $\widehat{G}(k)$ as a function of the moments of $G(x)$,

$$\widehat{G}(k) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j k^{2j} M_{2j}. \quad (11)$$

The derivative $d^{2n}\widehat{G}(k)/dk^{2n}$ is thus

$$\frac{d^{2n}\widehat{G}(k)}{dk^{2n}} = (-1)^n (2n)! M_{2n} + \sum_{j=n+1}^{\infty} \frac{(2j)!}{(2j-2n)!} (-1)^j k^{2j-2n} M_{2j}. \quad (12)$$

For $k = 0$, the derivative of order $2n$ depends only on the moment of order $2n$,

$$\left. \frac{d^{2n}\widehat{G}(k)}{dk^{2n}} \right|_{k=0} = (-1)^n (2n)! M_{2n}. \quad (13)$$

This final expression shows that if the $2n$ th moment of the filtering kernel is equal to zero, the $2n$ th derivative of the Fourier transform of the filtering kernel is equal to zero at the neighborhood of $k = 0$. A good selectivity requires a sharp slope near the cutoff wave-number to provide efficient scale separation and a flat slope at the origin to leave the large-scale unaffected by the filtering. This flatness at the origin is directly linked to the order of the filter, as raised by Eq. (13).

The Gaussian filter is a second-order filter (the first non-zero moment of the Taylor series is the second-order moment) and is poorly suited to perform scale separation. The cardinal sine filter has an infinite order, meaning that all the derivatives are equal to zero at $k = 0$, and has an excellent selectivity since it is discontinuous at the cutoff. High-order filters have a high number of zero derivatives at $k = 0$, ensuring that the slope remains flat close to the origin, and the low wave-numbers are not affected much by the filtering.

C. High-order implicit filters

To remove small-scale structures of the flow without interfering with the largest ones, the filter has to be selective. As discussed in Sec. II B, high-order filters provide better selective properties. The principle of the filters designed by Raymond and Garder^{24,25} is to achieve high-order from compact finite-difference operators. In the present paper, the sine filter of arbitrary order is studied. The HOF of order $2p$ on a one-dimensional domain reads

$$(I + \Delta x^{2p} \epsilon (-1)^p D^{2p}) \bar{\phi} = \phi. \quad (14)$$

In this case, ϕ and $\bar{\phi}$ are vectors representing the unfiltered and filtered variables discretized on the one-dimensional mesh, Δx the homogeneous grid spacing, ϵ a variable linked to the cutoff wave-number, and D the second derivative operator defined as

$$D = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (15)$$

These filters may be analyzed in the complex Fourier space assuming a monochromatic signal $\phi_j = A \exp(ikx_j)$, where A is the amplitude, k is the wave-number, and x_j the position of the j th mesh point. The filter response defined as the ratio of the filtered and unfiltered amplitudes \bar{A}/A is

$$\frac{\bar{A}}{A} = \frac{1}{1 + 4^p \epsilon \sin^{2p}(k\Delta x/2)}. \quad (16)$$

The ϵ parameter enables to control the filter size. In order to write this parameter as a function of the filter width Δ , the cutoff wave-number $k_c = 2\pi/\Delta$ is defined as the wave-number where the amplitude is damped of 50% by the filter, i.e., $\bar{A}/A(k_c) = 0.5$. This leads to the following value of the ϵ parameter:

$$\epsilon = \frac{1}{4^p \sin^{2p}\left(\frac{k_c \Delta x}{2}\right)}. \quad (17)$$

The high-order filter of order $2p$ with a cutoff wave-number $k_c = 2\pi/\Delta$ is finally obtained from Eq. (14) and the ϵ parameter found above,

$$\bar{\phi} + (\beta D)^p \bar{\phi} = \phi,$$

with

$$\beta = -\frac{\Delta x^2}{4 \sin^2(k_c \Delta x/2)}. \quad (18)$$

The damping function \bar{A}/A in the spectral space becomes

$$\frac{\bar{A}}{A} = \left(1 + \frac{\sin^{2p}(k\Delta x/2)}{\sin^{2p}(k_c \Delta x/2)}\right)^{-1}. \quad (19)$$

This damping function is plotted in Fig. 2 for various orders. Since the definition of this filter family ensures that the amplitude damping is 50% at the cutoff wave-number, all the curves intersect each other at the cutoff. The higher is the order, the sharper is the filter response. These filters show a good selectivity which is an essential property to extract structures of a given size from the flow.

The filter kernel $\hat{G}(k)$ can be approximated using the first terms of its Taylor series, close to $k = 0$,

$$\hat{G}(k) = \left(1 + \frac{\sin^{2p}(k\Delta x/2)}{\sin^{2p}(k_c \Delta x/2)}\right)^{-1} = 1 - k^{2p} \frac{(\Delta x/2)^{2p}}{\sin^{2p}(k_c \Delta x/2)} + o(k^{2p}). \quad (20)$$

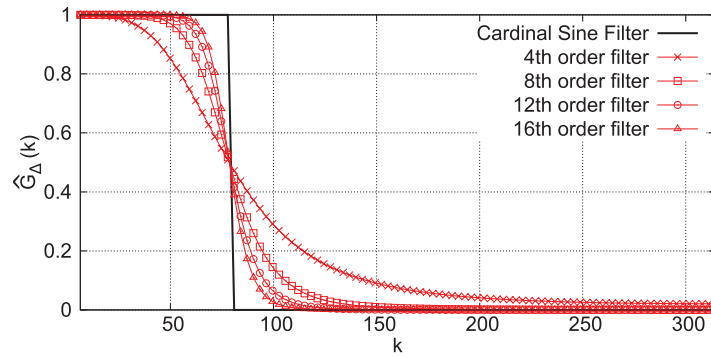


FIG. 2. Damping functions of high-order filters, for order 4, 8, 12, and 16, compared to cardinal sine filter.

By doing a term by term identification with Eq. (11), one finds that

$$\widehat{G}(k) = M_0 + (-1)^p k^{2p} M_{2p} + o(k^{2p}), \quad (21)$$

which gives

$$M_0 = 1$$

and

$$M_{2p} = (-1)^{p+1} \frac{(\Delta x/2)^{2p}}{\sin^{2p}(k_c \Delta x/2)}. \quad (22)$$

The first moment is equal to one, ensuring that the normalization property of the filter is satisfied,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G_{\Delta}(z) dz = 1. \quad (23)$$

As expected, the first non-zero moment of the filter of order $2p$ is M_{2p} : this means that for high values of $2p$, these implicit filters have a good selectivity.

III. DERIVATION AND IMPLEMENTATION OF HIGH-ORDER FILTERS ON UNSTRUCTURED GRIDS

The aim of the present work is to extract large-scale features in realistic geometries. The proposed methodology has to be as versatile as possible. In this section, high-order filters are derived for a finite-volume solver using unstructured grids.

A. Formulation of the high-order filters on 3D unstructured grids

A first part of the work consisted in the generalization of the high-order Raymond filters to 3D unstructured grids with non-uniform grid spacing, in order to implement them in the LES solver YALES2.³¹ In this case, the second-order derivative operator D is defined as a node-centered Laplacian operator. In the finite-volume context, the Laplacian of the variable ϕ at node i is defined as the divergence of the gradient, applied to the nodal volume Ω_i of node i , and can be expressed as the sum over the faces of the control volume Ω_i , of the fluxes of $\nabla\phi$,

$$(D\phi)_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \mathcal{P}_i} \frac{(\phi_j - \phi_i)}{\Delta_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot d\mathbf{A}_{ij}, \quad (24)$$

where \mathcal{P}_i is the set of nodes adjacent to i , V_i is the volume of the dual mesh element Ω_i , $d\mathbf{A}_{ij}$ is the normal vector of the face of Ω_i , attributed to the pair (i, j) , \mathbf{n}_{ij} is a vector parallel to the direction between the two nodes of the pair (i, j) , and Δ_{ij} is the distance between i and j (see Fig. 3).

To ensure discrete conservative properties of the filter, the coefficient β is also written in a node centered form and is included in the Laplacian operator itself leading to a modified operator D'

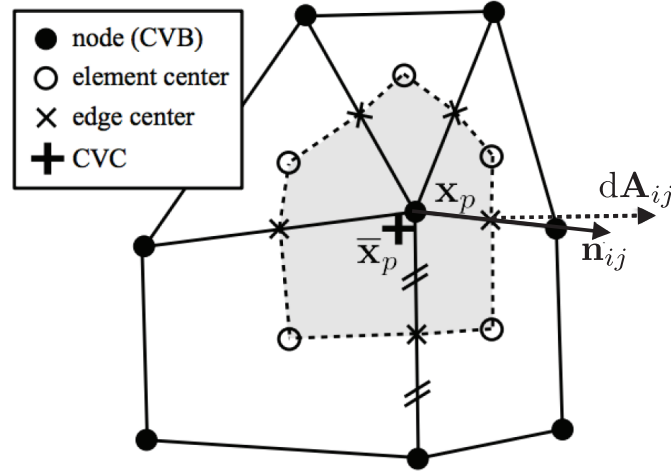


FIG. 3. Details on the node-centered Laplacian computation on unstructured mesh in YALES2.

defined as

$$(D'\phi)_i = (\nabla \cdot \beta \nabla)\phi_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \mathcal{P}_i} (\phi_j - \phi_i) \frac{\Delta_{ij}}{(-4) \sin^2(k_c \Delta_{ij}/2)} \mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{dA}_{ij}. \quad (25)$$

The high-order filtering operation can be written as

$$(I + D'^p)\bar{\phi} = \phi, \quad (26)$$

where D' is the modified symmetric Laplacian operator.

The computation of the filtered variable requires the inversion of a linear system written as follows:

$$Ax = b,$$

with

$$\begin{cases} A = (I + D'^p) \\ x = \bar{\phi} \\ b = \phi \end{cases}. \quad (27)$$

B. Solving of the system

The algorithm used to invert the linear system and to compute $\bar{\phi}$ is a conjugate gradient, preconditioned by the inverse of the diagonal. An indicator of the speed of convergence of the algorithm is the condition number of the matrix A ,³² related to the eigenvalues of A , λ_k

$$\kappa(A) = \frac{\max|\lambda_k|}{\min|\lambda_k|}. \quad (28)$$

Details on the computation of κ in one dimension are available in the Appendix. The condition number $\kappa(A)$ is plotted as a function of the filter order and the filter width in Fig. 4. Condition number shows a high sensitivity to both parameters, and especially to the filter order.

In order to improve the convergence of the Preconditioned Conjugate Gradient (PCG), the quantity computed by the solver is not the filtered variable $\bar{\phi}$ itself, but the difference between the filtered and unfiltered fields,²⁴

$$(I + D'^p)(\bar{\phi} - \phi) = -D'^p \phi. \quad (29)$$

Since the filtering operation does not affect the largest features of the flow, this difference does not contain any low wave-number components, which are the most costly to converge with a PCG. The

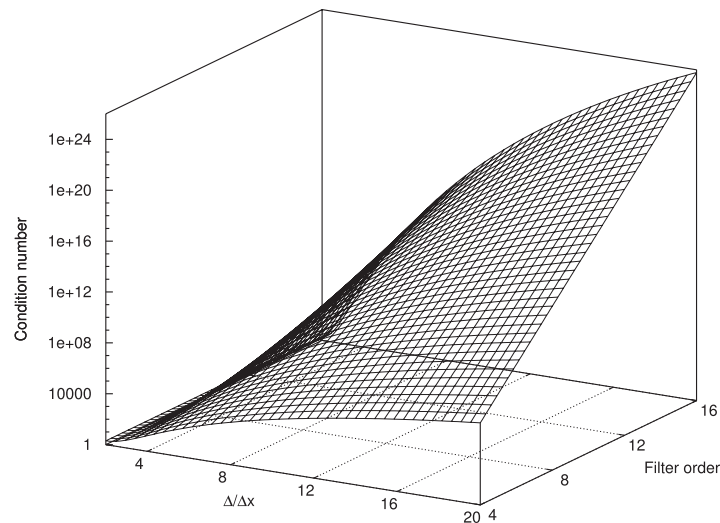


FIG. 4. Condition number of matrix A vs filter order and filter size.

system to be solved by the PCG becomes

$$Ax = b,$$

with

$$\begin{cases} A = (I + D'^p) \\ x = \bar{\phi} - \phi \\ b = -D'^p \phi \end{cases} \quad (30)$$

The input parameters are the order of the filter and the filter size. On non-homogeneous grids, the ratio $\Delta/\Delta x$ is not homogeneous in space, leading to a non-homogeneous filter size. For this reason, the extraction of structures of a given length scale requires that the filtering size is expressed as the actual physical size of the filter, not as the ratio $\Delta/\Delta x$. The disadvantage of this parameter is that on meshes with highly variable mesh size, the filtering size can become smaller than the largest cells, causing some problems in the convergence of the linear solver. In practice, the filter size is limited to prevent it from being lower than twice the local grid spacing.

C. Factorization of the linear system

To make this filter suitable for meshes of several billion cells, some work has been done to accelerate the convergence and to improve the robustness of the solving. The matrix A can be written as the product of p complex matrices (polynomial factorization of the system, where α_i are the complex roots of the polynomial $1 + x^p$),

$$I + D'^p = \prod_{j=1}^p (I + \alpha_j D'). \quad (31)$$

This operation reduces the system to p systems with sparse matrices easier to invert. Each $N \times N$ complex symmetric matrix is then transformed into a $2N \times 2N$ real symmetric matrix that can be inverted with the PCG algorithm.³³ With this factorization, p linear system is inverted instead of one, but for each system, the stencil of the operators is reduced, making the convergence easier. But on the other hand, the matrices to be inverted are twice larger in both directions. The resolution based on this factorization will be referred to as “first order polynomial” throughout this paper.

Another possible factorization, in the case where the order $2p$ is a multiple of 4, is obtained by gathering the conjugate complex roots to remain in the real space, leading to a factorization with

second-order polynomials,

$$\prod_{j=1}^{p/2} (I + 2 \operatorname{Re}(\alpha_j) D' + D'^2) \bar{\phi} = \phi. \quad (32)$$

In that case, there are $p/2$ successive linear systems to invert.

The second-order polynomial factorization showed better convergence properties and was used in the applications presented in Secs. IV and V. The performances of the three approaches will be examined in detail later in the paper.

IV. APPLICATION OF THE FILTERS TO CANONICAL FLOWS

To assess the proper behavior of the filter, some 1D test cases were performed and compared to the analytical solution. Then the ability of the filter to isolate coherent structures of a given length scale has been tested on 2D and 3D canonical cases.

A. 1D test cases

1. Dirac function

The convolution kernel in the physical space of this filter cannot be easily expressed analytically. A solution to approximate it is to filter a one dimensional numerical signal which approximates a Dirac delta function.

The Dirac function was set to zero everywhere except in zero, where it takes the value $1/\Delta x$,

$$\phi(x) = \begin{cases} 1/\Delta x, & |x| < \Delta x/2 \\ 0, & |x| > \Delta x/2 \end{cases}. \quad (33)$$

Figure 5 shows the signal obtained after filtering the Dirac function with the HOF, compared to the analytical convolution kernel of the Gaussian filter and the cardinal sine filter. High-order filters feature a behavior similar to the cardinal sine filter. As the filter order increases, the convolution kernel of the HOF gets closer and closer to the cardinal sine kernel.

2. Sine function

Sine function of various wavelengths λ , defined as

$$\phi(x) = \sin(2\pi\lambda x), \quad (34)$$

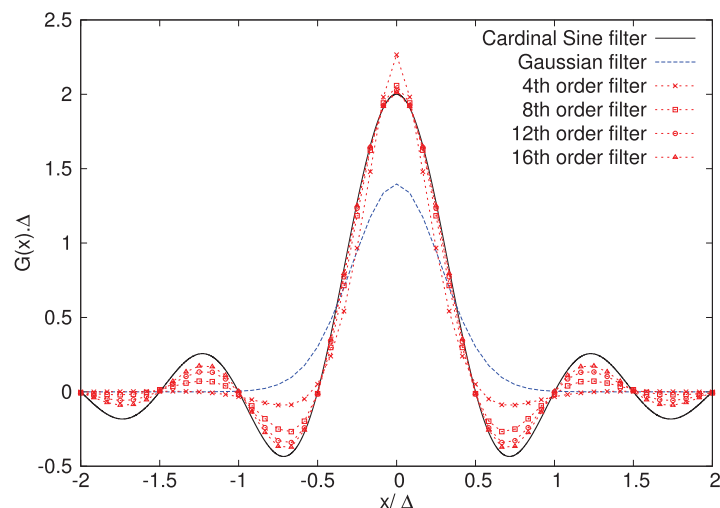


FIG. 5. Filtering of a Dirac function with high-order filters of various orders.

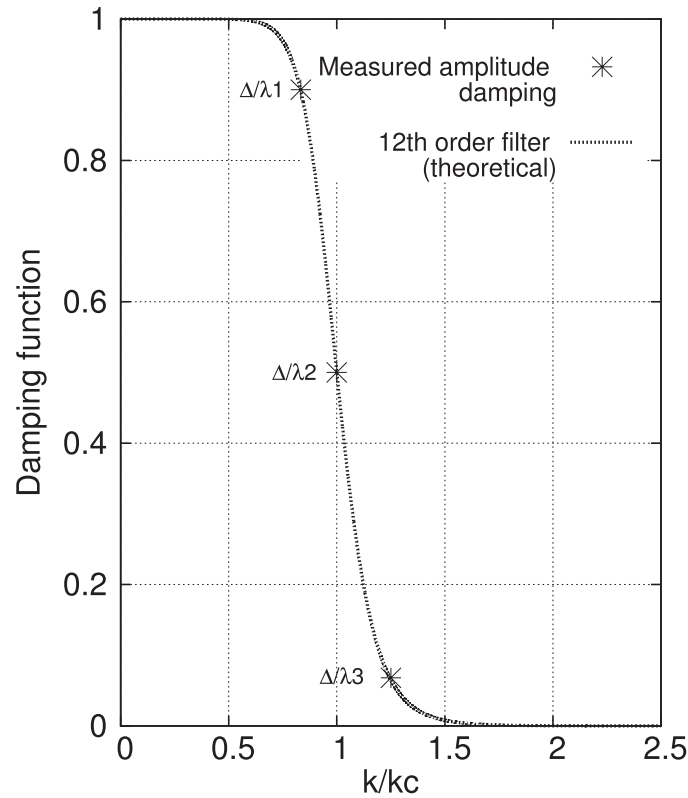


FIG. 6. Damping function of the filter and expected damping of the amplitude for 3 sine functions of respective wavelength $\lambda_1 = 5\Delta/6$, $\lambda_2 = \Delta$, and $\lambda_3 = 5\Delta/4$.

was filtered with a 12th order filter, with a size Δ . As the sine function is a monochromatic signal, the damping of the amplitude can be read directly from the damping function of the filter.

As plotted in Fig. 6, for a sine function of wavelength $\lambda_1 = 5\Delta/6$, the amplitude of the filtered variable must be 0.9 times the amplitude of the original signal. If the wavelength of the sine function is equal to the filter size, $\lambda_2 = \Delta$, the amplitude is reduced by half. And for a wavelength $\lambda_3 = 5\Delta/4$, the amplitude is divided by 10.

The amplitude of the filtered waves (Fig. 7) is in perfect agreement with the damping function of the filter (Fig. 6).

3. 1D signal with turbulence-like energy spectrum

In this test case, a scalar ϕ was defined on a one dimensional grid. The energy density of the scalar in the Fourier space was modeled with a synthetic spectrum, and ϕ was built from this spectrum, as for a 3D homogeneous isotropic turbulence (HIT).³⁴ The resulting one-dimensional scalar field is plotted in Fig. 8.

The energy spectrum of the filtered scalar $\bar{\phi}$ is defined as follows:

$$\widehat{\bar{E}}(k) = \widehat{\bar{\phi}}^*(k) \cdot \widehat{\bar{\phi}}(k). \quad (35)$$

On the other hand, a theoretical energy spectrum can be obtained by multiplying the energy spectrum based on the unfiltered scalar field by the square of the convolution kernel of the filter in the spectral space,

$$\widehat{\bar{E}}(k)^{th} = \widehat{E}(k) \cdot \widehat{G}(k)^2. \quad (36)$$

The energy spectrum of the scalar $\bar{\phi}$ obtained after the filtering operation (Eq. (35)) was compared to this theoretical solution (Eq. (36)) and the result is plotted in Fig. 9. The spectrum matches the analytical solution, ensuring the proper behaviour of the implemented filter.

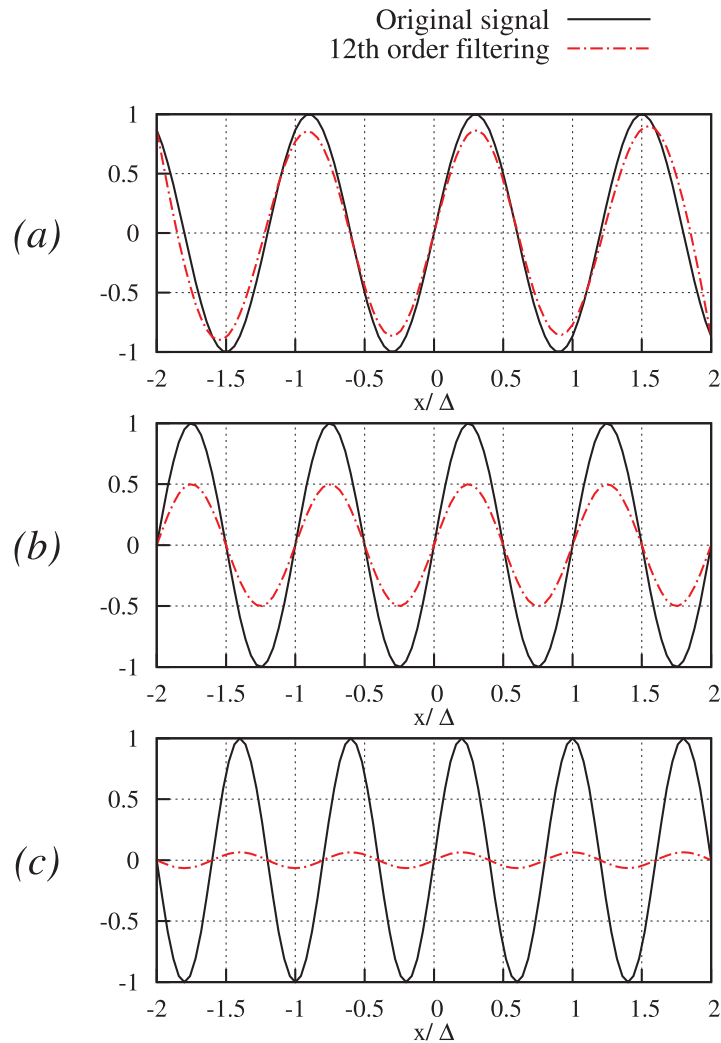


FIG. 7. Filtering of sine functions of wavelengths $\lambda_1 = 5\Delta/6$ (a), $\lambda_2 = \Delta$ (b), and $\lambda_3 = 5\Delta/4$ (c).

B. Two-dimensional Taylor vortices

In this section, a linear combination of 2D Taylor vortices with 3 different sizes ($L/2$, $L/4$, and $L/8$, where L is the size of the computational domain) is considered. The meshes used in this case are 2D grids with triangles or rectangular elements, but the filtering is performed with an unstructured formulation in all cases.

Taylor vortices of characteristic size λ are obtained by imposing the following velocity field:

$$\begin{cases} u_x = \cos\left(x \frac{2\pi}{2\lambda}\right) \sin\left(y \frac{2\pi}{2\lambda}\right) \\ u_y = -\sin\left(x \frac{2\pi}{2\lambda}\right) \cos\left(y \frac{2\pi}{2\lambda}\right) \end{cases}. \quad (37)$$

The test case consists in a linear combination of vortices of respective size $\lambda_1 = L/2$, $\lambda_2 = L/4$, and $\lambda_3 = L/8$, as described in Figure 10.

The velocity field has been filtered with filter widths of $L/2$ and $L/4$. The $L/4$ filtering removes the structure of smallest size $L/8$. The $L/2$ filtering removes both $L/8$ and $L/4$ vortices, leaving only the biggest vortices. The $L/2$ -filtered field can be compared to the analytical solution of Taylor Green vortices of size $L/2$ (Fig. 11, first column). Plotting the difference between the unfiltered field and the $L/4$ -filtered field enables to extract the $L/4$ vortices, which can also be compared to the exact solution (Fig. 11, second column). The same can be done for the smallest vortices (Fig. 11,

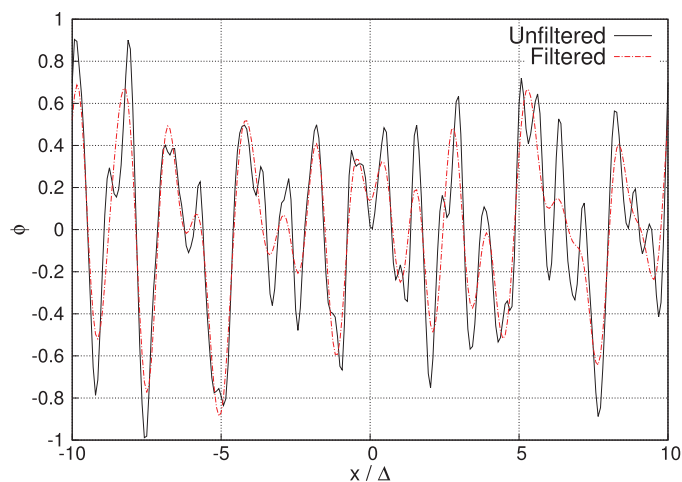


FIG. 8. 1D scalar field resulting from the energy spectrum defined in Eq. (38) (solid line) and scalar filtered with 12th order implicit filter (dashed line).

third column). The same procedure was applied to a Gaussian filter (Fig. 11(c)), and the difference between the two types of filter is clearly visible.

The three sizes of vortices are well recovered with the HOF, while the Gaussian filter hardly captures the biggest vortices, and they come out stretched and damped. For the smaller vortices, traces of the other frequencies are still visible and some energy remains in the wave-numbers that were not supposed to be affected by the filter, since the Gaussian band-pass filter is not selective enough. As the filter order increases, the medium-size vortices extracted with the band-pass filter get closer to the analytical solution, as can be seen on Fig. 12.

Table II shows the L_2 norm of the difference between the analytical $L/8$ Taylor vortices and the filtered field on the whole domain.

This test case was also used to test the performances of the filter on a non-homogeneous grid, with an imposed homogeneous filter size. Fig. 13 shows the extraction of the intermediate size vortex on a Cartesian grid and a triangle cell mesh with highly non-homogeneous grid spacing. Results show that HOFs are able to handle both types of elements, and that the grid distortion has a moderate influence on the quality of the filtering, ensuring small contribution of truncation errors, and demonstrating the ability of the HOF to maintain a homogeneous filter size on the whole domain.

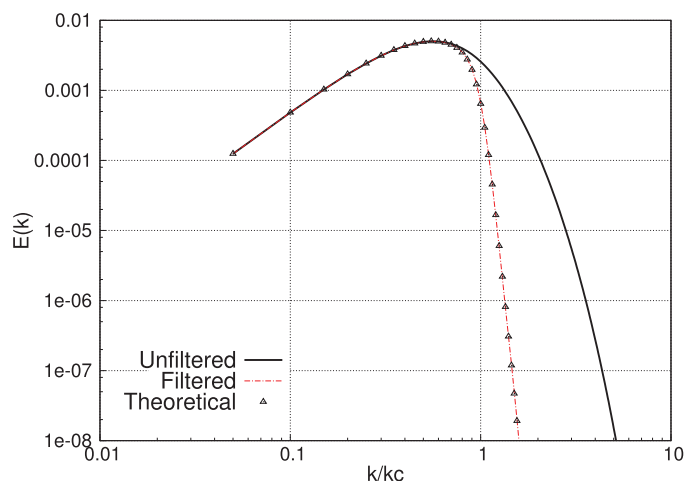


FIG. 9. Energy spectrum of the unfiltered (solid line) and filtered (dashed line) 1D HIT and comparison with analytical solution from Eq. (36) (symbols).

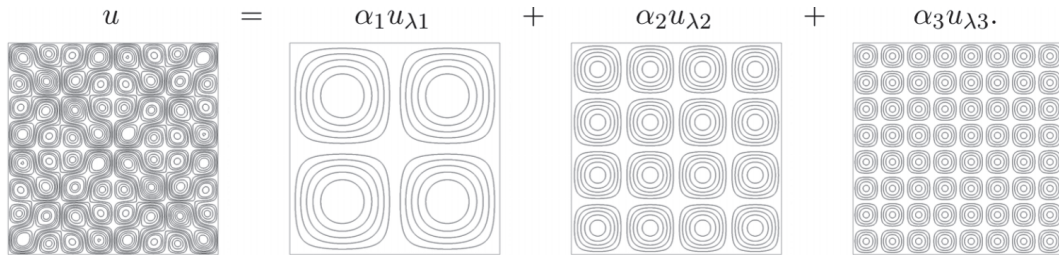


FIG. 10. Description of the velocity field defined as a combination of Taylor vortices of 3 sizes. Coefficients α_1 , α_2 , and α_3 were, respectively, set to 1, 0.9, and 0.7.

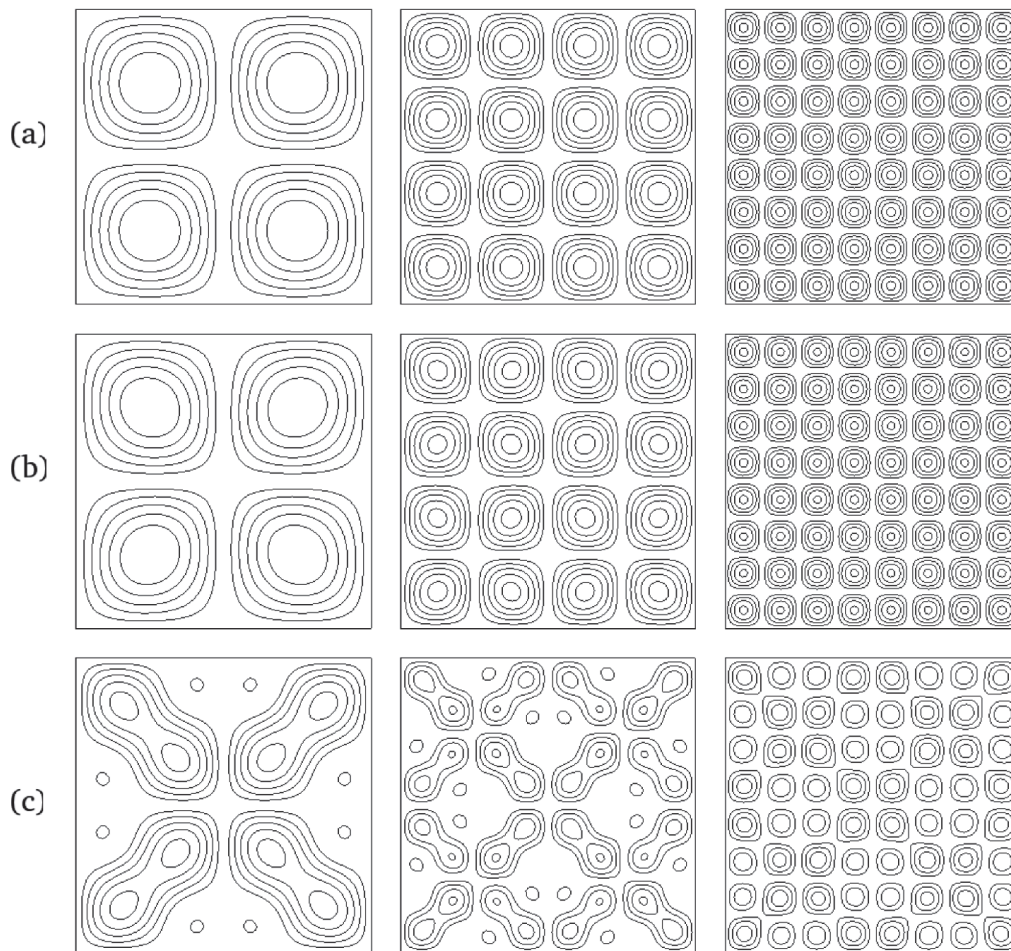


FIG. 11. Extraction of Taylor vortices with 12th order band pass filter (b), Gaussian filter (c), and comparison with exact solutions (a).

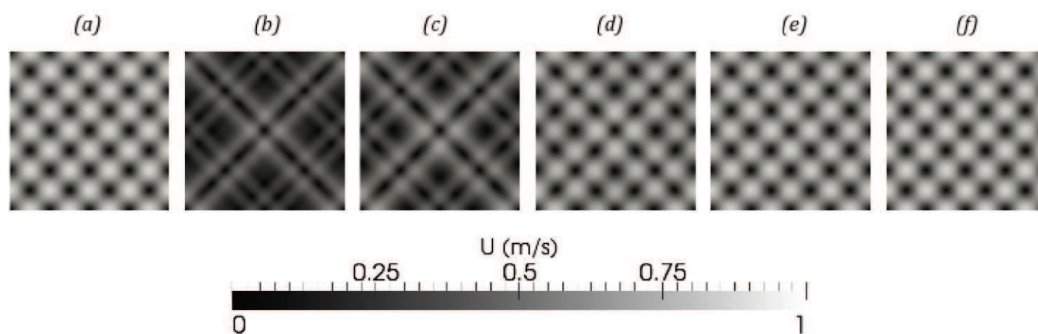


FIG. 12. Extraction of intermediate Taylor vortices with Gaussian filter (b), and implicit filter at order 4 (c), 8 (d), 12 (e), and 16 (f). Comparison to the analytical solution (a).

TABLE II. L_2 norm of the difference between filtered solution and analytical solution for various filters.

	Gaussian	4th order	8th order	12th order
Quad	0.22	0.17	0.051	0.013
Tri	0.26	0.17	0.058	0.028

C. Three-dimensional homogeneous isotropic turbulence

The HOFs are then applied to a 128^3 homogeneous isotropic turbulence on a Cartesian grid and compared to a Gaussian filter. A synthetic energy spectrum, proposed by Pope,²⁶

$$E(k) = \frac{3}{2} \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} \left(\frac{k \cdot L_e}{\sqrt{(k \cdot L_e)^2 + C_e^2}} \right)^{11/3} \exp \left(-\beta \left((k \cdot \eta)^4 + C_\eta^4 \right)^{1/4} - C_\eta \right) \quad (38)$$

is used to generate the 3D velocity field for the initialisation of the homogeneous isotropic turbulence. In this expression, η refers to the Kolmogorov length scale, L_e is the energetic length scale defined as $L_e = K^{3/2}/\varepsilon$, where K is the turbulent kinetic energy and ε is the turbulent kinetic energy dissipation rate $\varepsilon = v^3/\eta^4$. The value of the model constants β , C_e , and C_η and the input parameters of this model are summarized in Table III.

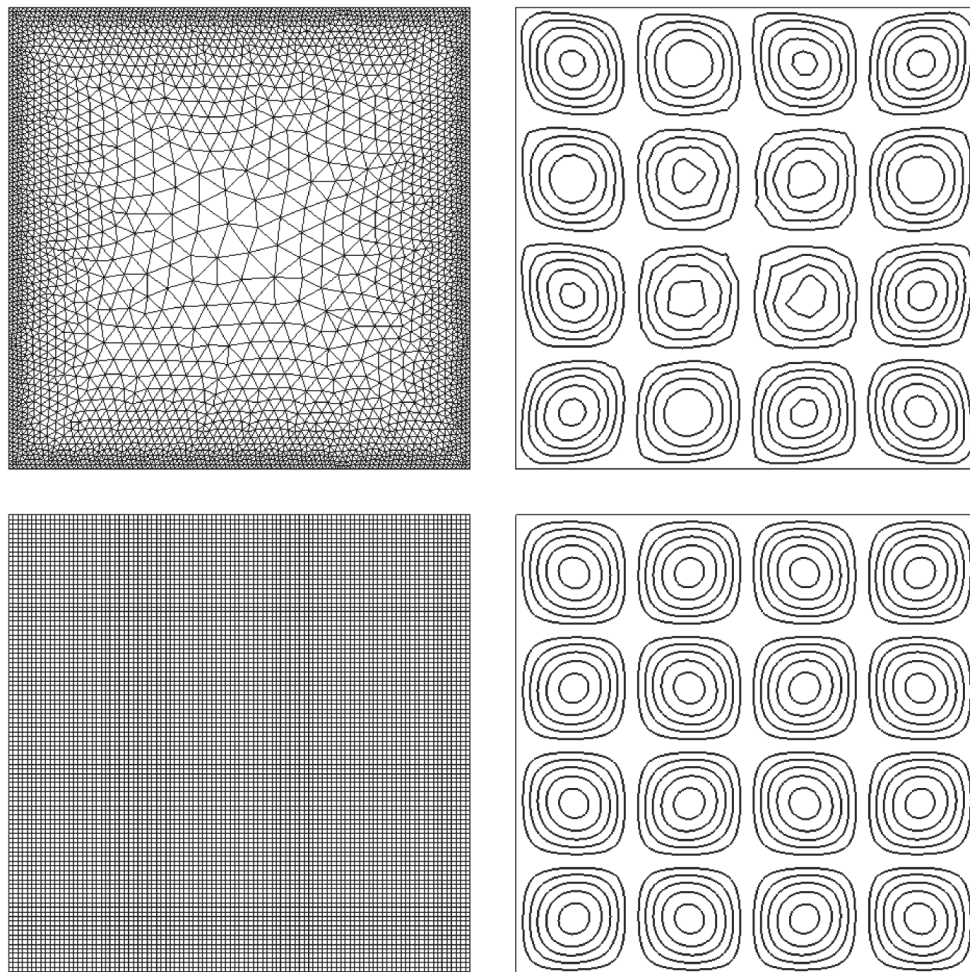


FIG. 13. Extraction of $L/4$ Taylor vortices with the 12th order filter on a Cartesian grid (left) and an unstructured grid (right).

TABLE III. Parameters for the initialization of the homogeneous isotropic turbulent field.

Energetic length (m)	L_e	1.5×10^{-3}
Dissipation length (m)	η	8×10^{-6}
Kinematic viscosity (m^2/s)	ν	1.517×10^{-5}
Model constants	β	5.2
	C_e	$\sqrt{6.78}$
	C_η	0.4

The characteristics of the resulting turbulent flow are summarized in Table IV. The energy spectrum of the turbulent field used to test the HOF, plotted in Fig. 14, suggests that the $k^{-5/3}$ Kolmogorov scaling law is recovered in the inertial sub-range.

The performances of the filter in this case are discussed from the analysis of the Q-criterion spectrum, defined in Sec. I. Q-criterion was filtered with HOF from order 4 to 16 and the Gaussian filter, with a filter size equal to 12 times the mesh resolution. The choice was made to filter the Q-criterion rather than filtering the velocity and compute the Q-criterion based on the filtered velocity. The computation of the Q-criterion involves multiplying velocity derivatives which may generate scales of frequency twice higher than the original signal, and the computation of the derivatives with discrete operators introduces truncation errors which may lead to undesirable noise in the result. Filtering of the Q-criterion efficiently prevents these issues, as shown in Fig. 15.

Figure 16 shows the influence of the filtering on a Q-criterion iso-surface, by comparing an iso-surface of unfiltered Q-criterion (a), an iso-surface of filtered Q-criterion, with HOF (b), and Gaussian filter (c). The difference between the two filters is clearly visible, as many small structures damped by the HOF remain with the Gaussian filter. The ability of the implicit filter to efficiently dissipate the smaller structures is again illustrated here. Both filters remove part of the information, allowing to plot a low value of Q-criterion, but the high-order filter provides a better dissipation of the smaller scales.

Another illustration of this result is given in Fig. 17. The higher selectivity of the HOF over the Gaussian filter is clearly visible. The spectrum fits better the unfiltered spectrum for the low wave-numbers and decreases faster after the cutoff. Figure 17 also compares the spectra of filtered Q-criterion with order from 4 to 16. As the order increases, the selectivity of the filter is improved. The higher is the order, the sharper is the spectrum for high wave-numbers.

TABLE IV. Characteristics of the turbulent field.

Number of grid points	N	128^3
Computational domain size (m)	L	1×10^{-2}
Grid resolution L/N (m)	Δx	7.8×10^{-5}
Integral length (m)	l_t	8.16×10^{-4}
Taylor scale (m)	λ	1.4×10^{-4}
Kolmogorov scale (m)	η	8×10^{-6}
Number of integral scales	L/l_t	12
Turbulent Reynolds number	Re_t	477
Taylor Reynolds number	Re_λ	84
Kinematic viscosity (m^2/s)	ν	1.517×10^{-5}
Turbulent kinetic energy (m^2/s^2)	K	117.8
Turbulent dissipation rate (m^2/s^3)	ε	8.52^5

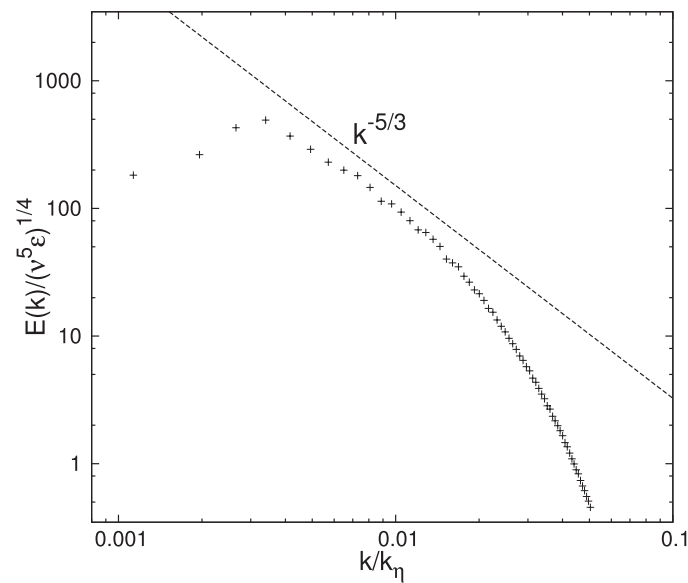


FIG. 14. Turbulent kinetic energy spectrum of the HIT $E(k)$, initialized with a Pope spectrum. k_η is the wave-number associated with the Kolmogorov scale $k_\eta = 2\pi/\eta$.

D. Turbulent plane jet

Plane jets exhibit typical and well documented coherent structures, such as Kelvin-Helmoltz vortices. Simulations of a turbulent plane jet were carried out to assess the ability of the filter to extract energy containing structures from such flow.

Thomas and Goldschmidt³⁵ report that the velocity in the near nozzle region can be approximated by a hyperbolic-tangent profile. The following mean velocity profile was imposed at the inlet, with a small co-flow away from the jet centerline:

$$U_x(x=0, y, z) = \frac{U_j + U_c}{2} + \frac{U_j - U_c}{2} \tanh\left(\frac{h}{4\theta} \left(1 - \frac{2|y|}{h}\right)\right), \quad (39)$$

where h is the jet's inlet slot width, $U_j = 1.091$ is the velocity at the jet centerline, $U_c = 0.091$ is the co-flow velocity, and θ is the momentum thickness and was set to $h/30$. The mean velocities in the y and z -directions are set to zero. A sketch of the flow is displayed in Fig. 18.

Boundary conditions were treated as slip-walls in the y direction and periodic in the z direction. This type of jet generally features an initial region where Kelvin-Helmoltz vortices are formed.

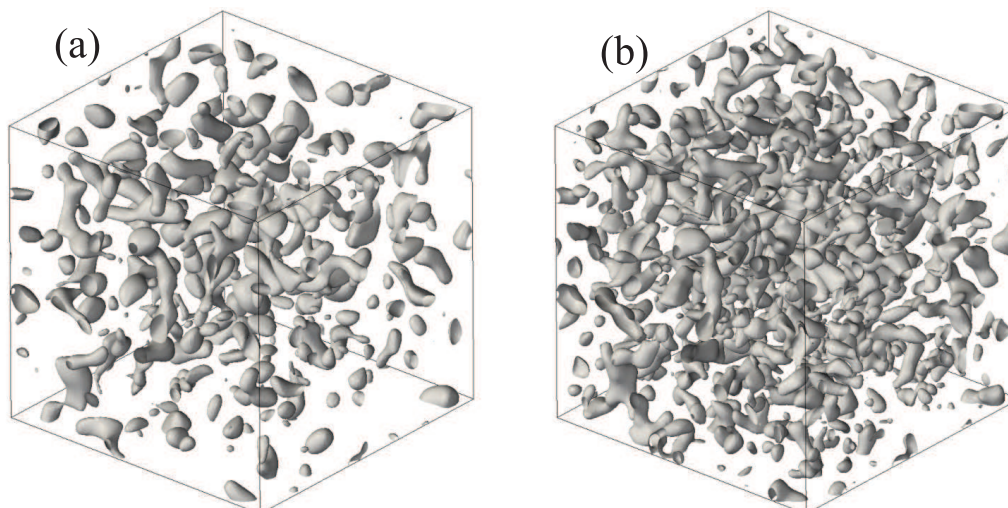


FIG. 15. Iso-surface of filtered Q-criterion (a) and Q-criterion based on filtered velocity (b)— $Q = 6 \times 10^7 \text{ s}^{-2}$.

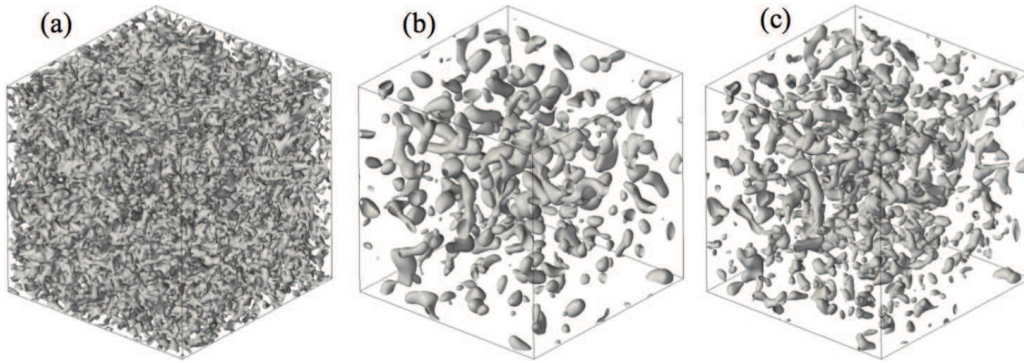


FIG. 16. Iso-surface of unfiltered Q-criterion (a), Q-criterion filtered with the 12th order filter (b), and the Gaussian filter (c)— $Q=6 \times 10^7 \text{ s}^{-2}$.

Then, depending on the Reynolds number of the flow, these coherent structures give birth to a fully developed turbulence downstream.

Shear layer instabilities were studied by Monkewitz and Huerre,³⁶ who proposed a relation between the velocity ratio,

$$r = \frac{U_j - U_c}{U_j + U_c}, \quad (40)$$

and the frequency of the instability, from which the separation length between consecutive Kelvin-Helmholtz billows can be deduced. For the velocity ratio considered in this study and a hyperbolic tangent velocity profile, the expected non-dimensional angular frequency is $\omega^* = 0.2128$. In their work, the spatial coordinates, the velocity, and the time are non-dimensionalized with the length scale θ , the characteristic velocity $\bar{U} = (U_j + U_c)/2$, and the time scale θ/\bar{U} . This value of ω^* corresponds to a Strouhal number equal to

$$St = \frac{\omega^*}{2\pi} = \frac{f\theta}{\bar{U}} = 0.033. \quad (41)$$

This leads to the following instability length scale λ :

$$\lambda = \frac{\bar{U}}{f} = \frac{\theta}{St} = 1.01h. \quad (42)$$

Two simulations were carried out: a first one with a Reynolds number based on the jet width h , $Re_h = 3000$, as in the simulation performed by Da Silva and Métais.³⁷ A second simulation was performed at $Re_h = 60\,000$, to assess the ability of the method to extract large-scale structures

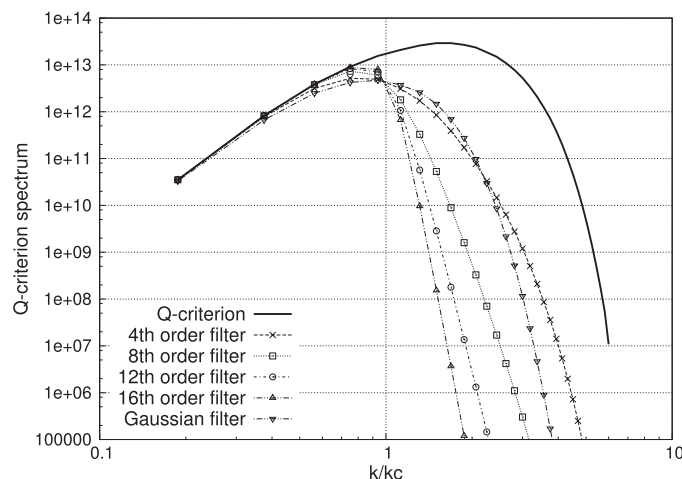


FIG. 17. Unfiltered (solid line) and filtered Q-criterion spectrum, with implicit filters from order 4 to 16 and Gaussian filter.

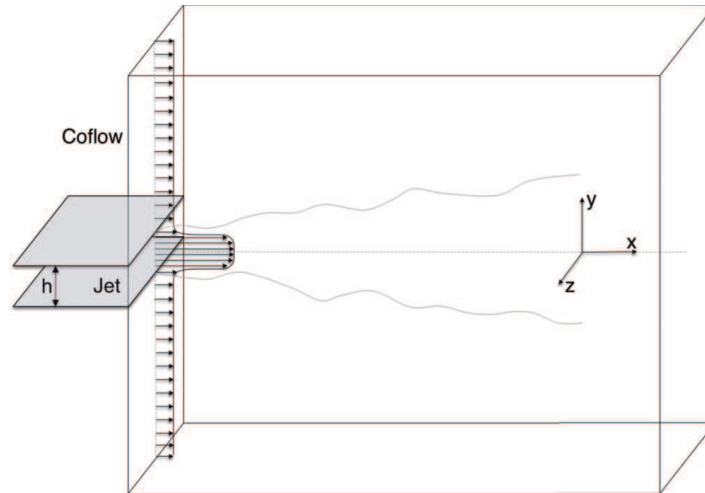


FIG. 18. Sketch of the flow. The computational domain size is $12.4h \times 12h \times 2.9h$.

even in highly turbulent flows. The same mesh was used for both simulations. The mesh consists of 300×10^6 tetrahedra, and the spatial resolution is homogeneous with a cell size $\Delta_m \approx 0.02h$. In the $Re_h = 3000$ case, Da Silva and Métais compared their mesh resolution to the Kolmogorov and Taylor micro-scales and showed that it was within the accepted range for an accurate DNS. The mesh resolution used in this study is twice higher, so no subgrid-scale turbulence model was introduced. In the $Re_h = 60\,000$ case, the localized dynamic Smagorinsky model was used.³⁸

1. Plane jet at $Re_h = 3000$

Figure 19 shows the jet dynamics for the $Re_h = 3000$ case, after a physical time corresponding to approximately ten flow-through times. To accelerate the transition to the fully developed regime, turbulence was injected at the inlet in the shear layer regions. The amplitude of the fluctuations corresponds to 10% of the mean velocity $\bar{U} = (U_j + U_c)/2$. The injection of turbulence generates small-scale vortices that mask the Kelvin-Helmoltz structures, as visible on the Q-criterion iso-surface displayed in Fig. 20. The Q-criterion was then filtered, at order 12, with a filter size $\Delta = 20\Delta_m$ and the large-scale structures present in the flow become clearly identifiable with a filtered Q-criterion iso-surface. The separation length between two consecutive vortices in both upper and lower shear layers is approximately $\lambda = h$, which is in good agreement with the theoretical

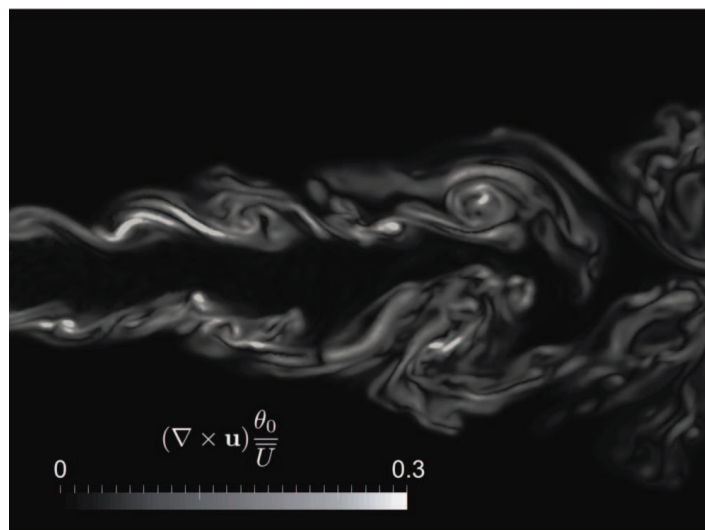


FIG. 19. Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 3000$.

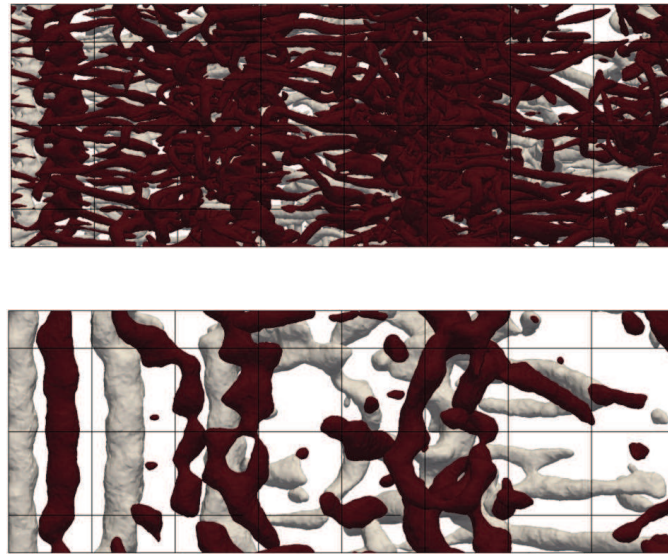


FIG. 20. Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re_h = 3000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark, respectively.

value of Monkewitz and Huerre,³⁶ ensuring a good description of the structures extracted with the filtering method.

2. Plane jet at $Re_h = 60\,000$

In the second simulation, at $Re_h = 60\,000$, the natural transition to the fully turbulent state occurs more rapidly and thus the turbulence injection was removed. The vorticity magnitude field in the mid-plane after ten flow-through times is presented in Fig. 21.

A Q-criterion iso-surface is displayed in Fig. 22. In the first part of the flow, only large-scale Kelvin-Helmholtz vortices are present. As for the first simulation, the separation length between two consecutive vortices in both upper and lower shear layers is approximately $\lambda = h$. Downstream, the flow becomes fully turbulent and exhibits a wide range of length scales. However, the Q-criterion iso-surface only shows the smallest scales of the flow and is unable to extract the largest structures in high Reynolds simulations. On the other hand, the filtered Q-criterion iso-surface shows that filtering does not affect the Kelvin-Helmholtz billows visible in the first part of the flow, while revealing the large-scale structures which are still present in the second part of the flow.

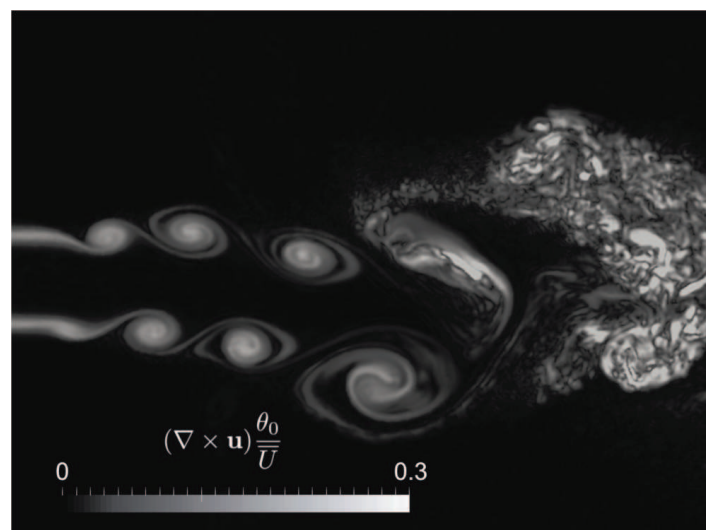


FIG. 21. Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 60\,000$.

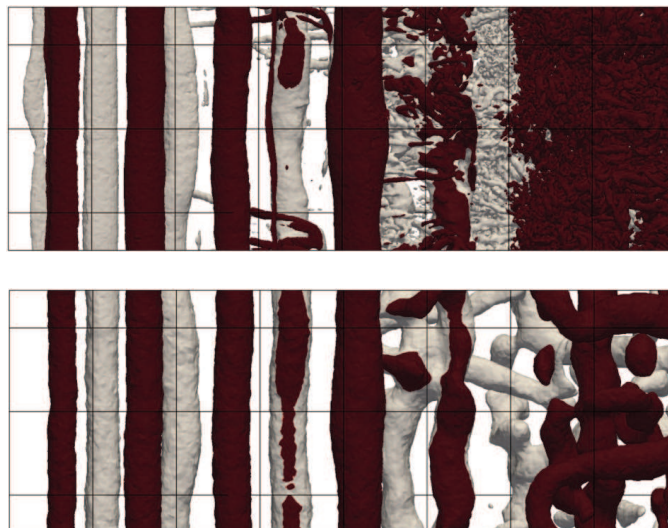


FIG. 22. Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re = 60\,000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark, respectively.

V. APPLICATION OF THE FILTERS TO TURBULENT FLOWS IN A SEMI-INDUSTRIAL BURNER

A. Description of the burner

Finally, the HOFs are applied in a complex semi-industrial swirl burner in order to assess the behavior of the filters on massive unstructured grids and evaluate their ability to extract large-scale features from a complex turbulent flow. The PRECCINSTA swirl burner has been widely studied both experimentally^{39,40} and numerically^{41,42} and is a challenging test for the HOF since it has been computed with several mesh resolutions from 1.7×10^6 to 2.6×10^9 tetrahedra (the numerical database used to test the HOF comes from simulations detailed in the work of Moureau *et al.*²⁸).

The experimental burner, presented in Fig. 23, features a plenum, a swirler, a square combustion chamber, and a cylindrical exhaust. With a total mass flow rate of 12.9 g/s, the Reynolds number based on the mean velocity and the inlet diameter is approximately equal to $Re = 40\,000$.

B. Large-scale structures in aeronautical burners

In aeronautical burners, swirling flows are commonly used for the flame stabilization. The swirl number is defined as the ratio of tangential over axial momentum flux⁴³

$$S = \frac{\int_0^R u_\theta u_z r^2 dr}{R \int_0^R u_z^2 r dr}. \quad (43)$$

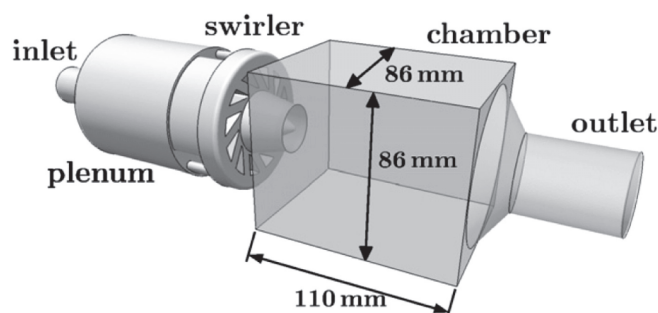


FIG. 23. Geometry of the PRECCINSTA swirled burner.

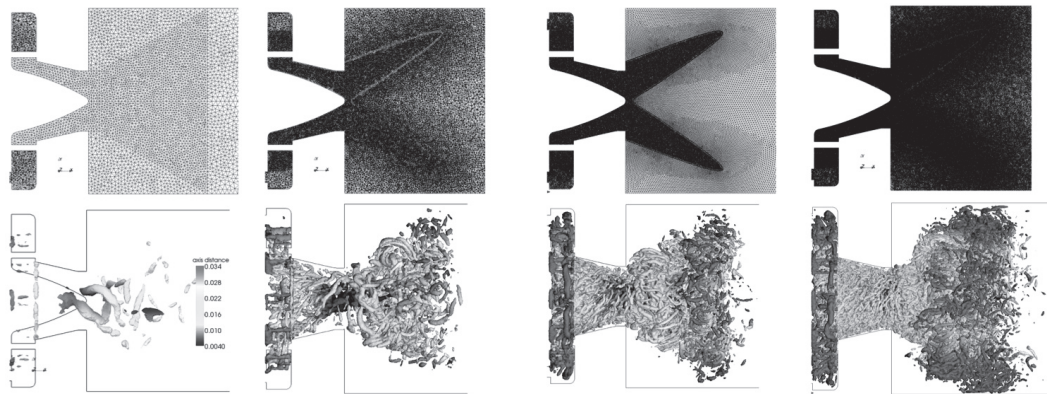


FIG. 24. Q-criterion isocontour $Q = 0.32 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$ on the 4 meshes: 1.7×10^6 cells (first column), 14×10^6 cells (second column), 41×10^6 cells (third column), and 110×10^6 cells (fourth column).

When the swirl number is higher than 0.6, vortex breakdown occurs and leads to the formation of a well known 3D structure: the PVC.⁴⁴ This helical vortex precesses around the central recirculation zone (CRZ) and dominates the flow dynamics and part of the mixing process. The PVC can be responsible of fluctuations of the heat release rate⁴⁵ or preferential segregation of fuel droplets in the case of spray flames.⁴⁶ In the PRECCINSTA burner, experimental and numerical studies have shown the existence of a PVC, oscillating at a frequency of 540 Hz,⁴¹ corresponding to a characteristic time scale of 1.9 ms.

Q-criterion maximum values can be found in the center of the smallest vortices. In the center of the large-scale vortices, the Q-criterion is lower. Large-scale structures can be visualized with iso-surfaces of low Q-criterion, but this method reveals both large and small structures regardless of their size. The bigger is the structure compared to the mesh resolution, the harder it is to extract.

In the simulation performed with the 1.7×10^6 cells mesh, the Q-criterion iso-surface ($Q = 0.32 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$) colored by the axis distance exhibits the presence of the precessing vortex core (helical vortex visible in Fig. 24). This Q-criterion iso-surface is also plotted on the refined meshes (14×10^6 , 41×10^6 , and 110×10^6) in Fig. 24. It is clearly visible that on bigger meshes, this large structure becomes impossible to post-process without any filtering.

C. Results

In the refined simulations (14×10^6 , 41×10^6 , and 110×10^6), the Q-criterion was filtered with a 12th order filter at the approximate diameter of the PVC observed on the coarse mesh, $\Delta = 6 \text{ mm}$, in order to remove the turbulent scales smaller than this coherent structure. A filtered Q-criterion iso-surface is plotted, using the Q-criterion value that reveals the PVC on the coarse mesh. The results, presented in Fig. 25, show that all the small-scale structures were removed by the filtering, leaving a big 3D helical vortex similar to the PVC observed on the 1.7×10^6 . The four cases presented in Fig. 25 are instantaneous solutions of simulation performed with the four meshes, taken at a random physical time which is different for each mesh. This explains the differences observed on the PVC, which is not visualized at the same physical time. However, the structure is visible on the four instantaneous solutions, attesting the strength and the coherence of the PVC. As explained in Sec. I, the extraction of the PVC is not trivial on highly refined meshes, and to the author's knowledge, this is the first time it is performed on such massive grids.

This complex geometry was also filtered with a Gaussian filter to compare the ability of the two filters to extract the PVC. Figures 26 and 27 compare the performances of the two filters on this complex geometry, for the 110×10^6 and 878×10^6 meshes. Both figures show that the Gaussian filter leaves an important number of small scales vortices around the PVC. This demonstrates the importance of having high-order filters to separate scales efficiently. The Gaussian filter is less selective, and its filter size is mesh dependent so it is not homogeneous in space.

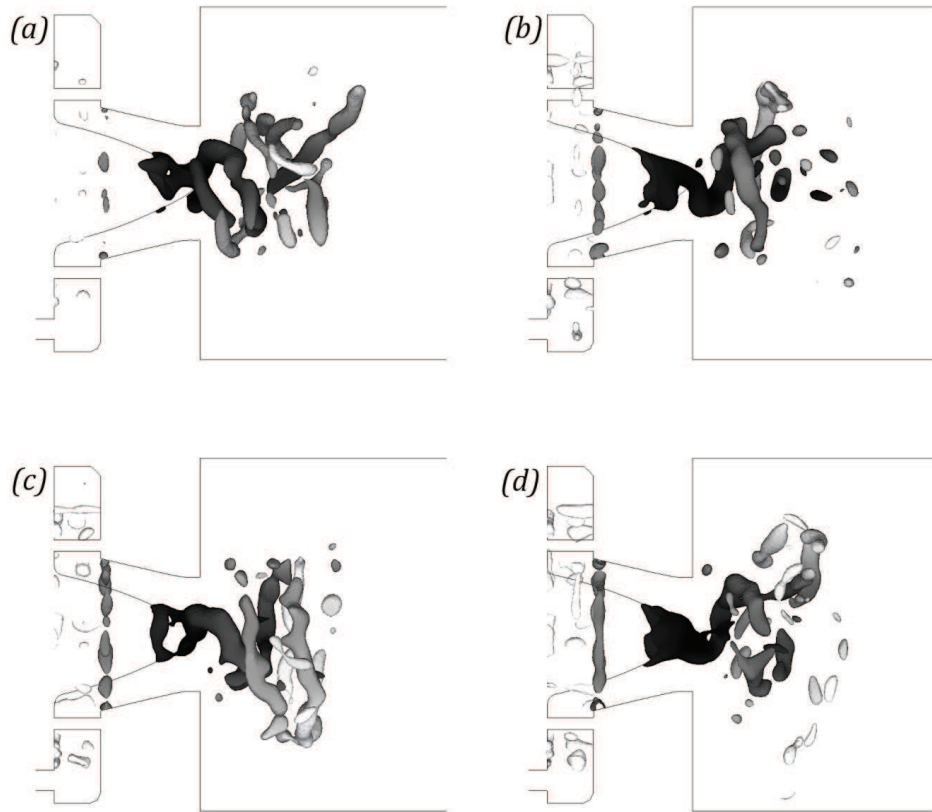


FIG. 25. Iso-surface of filtered Q -criterion on the 14M mesh with a 12th order filter (a), on the 41M mesh with a 12th order filter (b), on the 110M mesh with a 12th order filter (c), and in the 878M mesh with a 8th order filter (d). Filtering size = 6 mm. $\overline{Q} = 0.32 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$.

D. Extraction of the precessing vortex core

The filtering operation removes efficiently all the small-scale structures, leaving only the vortices of the same length scale as the PVC. An additional step is required to isolate the PVC. A conservative level set⁴⁷ method was used to identify and isolate the PVC among all the remaining large-scale vortices, in order to perform some advanced analysis of the influence of the PVC on the flame position or on the droplets spatial distribution in the case of two-phase combustion. Having access to data such as the normal or the distance to the PVC enables to perform statistical analysis

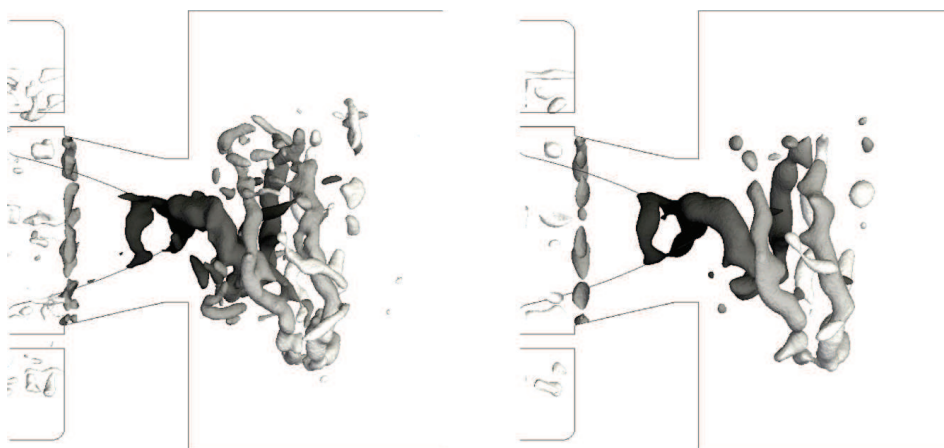


FIG. 26. Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 12th order filter (right), on the 110M mesh.



FIG. 27. Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 8th order filter (right), on the 878M mesh.

of the droplet distribution according to the distance of the PVC or to compute mean tangential velocity profiles in the vortex, and will bring more insight into the topology of swirled two-phase reactive flows.

First, a level set function is defined to identify the iso-surface corresponding to the PVC. The level set function ϕ computation is based on the filtered Q -criterion, and on its value at the interface ($Q_0 = 0.32 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$), and must ensure $\phi = 0.5$ at the interface. The difference between the local value of the filtered Q -criterion and the value at the iso-surface is converted into a pseudo-distance ψ that is then used to calibrate the level set function

$$\phi = \frac{1}{2} \left(\tanh \left(\frac{\psi}{2\epsilon} \right) + 1 \right)$$

with

$$\psi = \frac{Q - Q_0}{Q_0} \times 10^{-3}, \quad (44)$$

where ϵ is a parameter that sets the thickness of the profile. In this case, $\epsilon = 0.5$.

All vortices are now associated with a $\phi = 0.5$ iso-surface (Fig. 28(a)). The next step is to identify which one is the precessing vortex core and to isolate it. This can be done, thanks to a topology analysis tool implemented in YALES2. This tool identifies closed volumes within the level set function iso-surface and attaches a color to each closed region (Fig. 28(b)). Once the color of the PVC is identified, the level set function is set to zero everywhere the color is different from the PVC color, so that only the PVC remains in the level set iso-surface (Fig. 28(c)).

The level set comes with handful numerical tools such as computation of the normals and the distance to the surface. It is now possible to plot at the same time the large-scale structure of interest (the PVC) and the smaller vortices resolved on the refined mesh (with an iso-surface of unfiltered Q -criterion) at a close distance from the PVC, to study the interaction between the large-scale structures and the small scale structures (Fig. 28(d)).

This methodology was also applied to a highly refined case, with a mesh of 878×10^6 tetrahedra (see Fig. 29).

VI. PERFORMANCES OF THE FILTERING PROCESS

A. Performances on a 3D HIT

The performances of the filter with the three methods were compared on the three-dimensional HIT of 128^3 test case presented in Sec. IV C, filtered at a size $\Delta = 12\Delta x$, with a 8th order filter. Performances of the filter with the three algorithms are summarized in Table V. The factorization

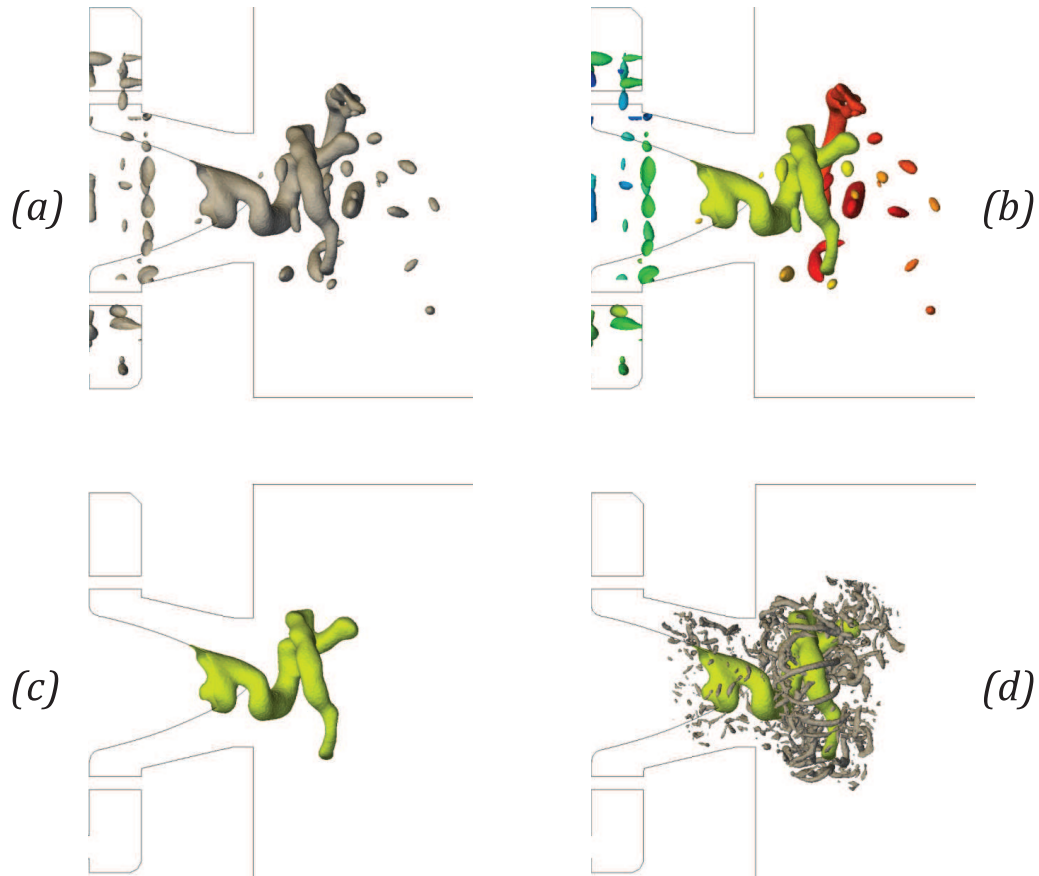


FIG. 28. Iso-surface of the level set function based on the filtered Q-criterion iso-surface (a). Iso-surface of the level set function, colored by the color of each closed volume (b). Iso-surface of the redefined level set function to extract the PVC (c). Iso-surface of the level set function surrounded by smaller vortices (d).

decreases significantly the computational cost of the filter. The time is divided by 23, and the number of PCG iterations is divided by 10 for the 2nd order polynomial factorization.

The performances are very similar for the two types of factorization and are approximately one order of magnitude faster than the PCG without any factorization. Another advantage of reducing

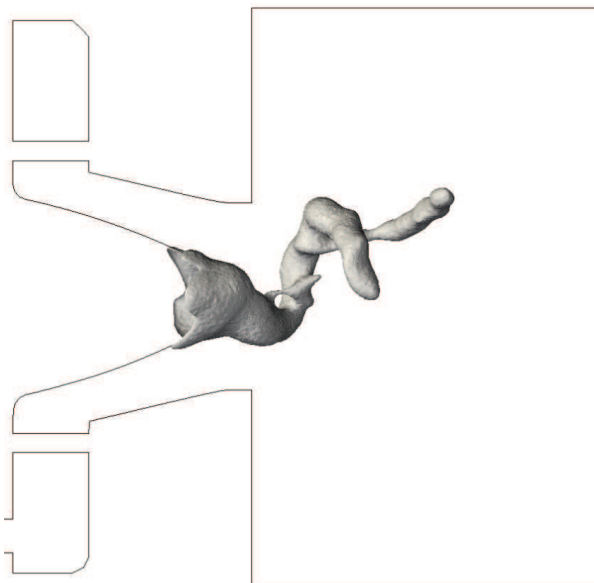


FIG. 29. Iso-surface of the level set based on the filtered Q-criterion, with filtering size $\Delta = 6$ mm. The mesh consists of 878×10^6 tetrahedra.

TABLE V. Comparison of the performances of linear solvers.

	Without factorization	1st order polynomial	2nd order polynomial
Computational time (s)	460	80	20
Number of PCG iterations	5000	800	500

the number of PGC iterations is that it decreases the accumulation of numerical errors. The two types of factorization give similar results, but the robustness of the 2nd order factorization, which needs less iterations to reach convergence, enables to perform filtering at order 16 even on meshes of several million of elements.

B. Performances on the PRECCINSTA burner

The performances of the filter were also analyzed in the aeronautical burner presented in Sec. V. To estimate the computational cost of the filter, it is compared for two meshes to the computational cost of one time step iteration for the same mesh (see Table VI). For the 110M mesh, the filtering cost is 200 times higher than the computational cost of a time step.

This industrial burner was used to compare the performances of the 3 algorithms on a complex geometry: the 14M cells mesh was filtered at orders 4, 8, 12, and 16. The computational cost of the filtering is plotted in Fig. 30. The factorisation—complex or real—tremendously reduces the filtering cost and the number of PCG iterations. On this type of mesh, the convergence was impossible with the first algorithm for orders above 8. By reducing the accumulation of numerical errors, the factorization allows to filter at the 12th order, but the system does not converge at order 16. The real factorization enables to increase the order up to 16.

To assess the performances of the filter, a 20 h computation was performed on the IDRIS super-computer Turing, on 1024 processors, with a filtering of the Q-criterion every 0.05 ms. With a PVC frequency of 540 Hz, this filtering time step ensures almost 40 solutions in one PVC characteristic time-scale. This simulation shows that HOFs are suitable to do on-the-fly post-processing.

C. Conclusions on the computational cost of high-order filters

Sections VI A and VI B showed that the cost of the filtering operation can be high compared to the cost of one time-step. However, the objective of the filtering is to extract large-scales structures compared to the mesh resolution. The characteristic time-scale of these structures is related to their size and is orders of magnitude higher than the computational time-step, especially in the case of reactive compressible simulations. The frequency of the filtering operation should be coherent with the characteristic time scale of the large-scale structures, and in that case, the ratio between the cost of the filtering and the simulation becomes a lot more reasonable.

Even if the filtering cost might seem high, it remains low compared to the total cost of the computation that usually requires thousands of time-steps to achieve statistical convergence, and filtering provides complementary information for the analysis of the flow behaviour.

TABLE VI. Computational cost of the 12th order filter.

	14M	110M
Cells		
Filtering cost/time step cost	10	200

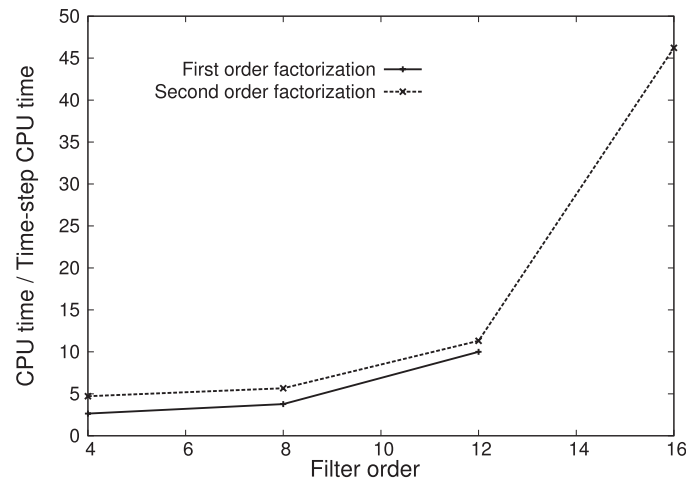


FIG. 30. Computational cost of the 2 algorithms (complex factorization and real factorization) on an industrial swirl burner (14M cells mesh). Real factorization allows to increase the order up to 16.

VII. CONCLUSIONS AND PERSPECTIVES

In this paper, high-order implicit filters for the identification of large-scale structures in turbulent flows are presented. These filters showed good results on canonical test cases and were successfully applied in the PRECCINSTA semi-industrial swirl burner. The computational cost of such filters is much higher than classical second order filters, but the optimization of the algorithm allowed to filter highly refined grids, at high-order, with non-prohibitive restitution time.

Associated with sub-domain identification methods, HOFs are an efficient tool to extract large-scale structures even on refined meshes. These advanced post-processing tools will be improved in order to extract from the PVC the local tangential vector, allowing to compute the average velocity profile of this structure. This methodology will also be applied to smaller vortices to analyze the relationship between the preferential directions of small and large vortices. The combination of all these results should bring more insight into the correlations between the different turbulent scales.

The PVC is a well-known 3D coherent structures in swirl flows, but the role it plays in the flow dynamics needs to be investigated in more details. The extraction of large-scale features with HOF in this type of burner, associated with two-phase flow simulations, will enable to understand and analyse the interaction between the liquid fuel spray and the large-scale vortices. The HOFs are a useful tool towards a better understanding of the fuel mixing process in aeronautical swirl burners and will soon be applied in industrial combustors with liquid injection. Those filters can also be a valuable tool to interpolate data on a coarse grid and perform modal analysis (POD, DMD) with reduced computational costs, since filtering allows to interpolate data on a coarse grid while fulfilling the Nyquist-Shannon sampling theorem.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was granted access to the HPC resources from IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique), under the allocation x2014-2b6880 made by GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif) and from CRIHAN (Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie), under the allocation 2012-006. The authors also thank G. Balarac from LEGI for kindly sharing his numerical setup for the plane jet simulation.

APPENDIX: COMPUTATION OF THE CONDITION NUMBER OF THE MATRIX A

This section provides details on the computation of the condition number of the matrix A of the $N \times N$ linear system, introduced in Sec. III. This criterion is an indicator of the speed of

convergence of the solving of the linear system $Ax = b$ and is defined as

$$\kappa(A) = \frac{\max|\lambda_k|}{\min|\lambda_k|}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (\text{A1})$$

The estimation of the condition number requires the computation of the eigenvalues of A,

$$A = I + \beta^p D^p \text{ with } \beta = \frac{\Delta x^2}{(-4)\sin^2(k_c \Delta x/2)}. \quad (\text{A2})$$

They can be computed from the eigenvalues of D, which is the second order derivative discrete operator. On a one-dimensional periodic homogeneous grid composed of N points, D is a tridiagonal $N \times N$ matrix,

$$D = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A3})$$

Eigenvalues of D can be expressed as⁴⁸

$$\lambda_{0,j} = \frac{-4}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad (\text{A4})$$

and the eigenvalues can be deduced from Eqs. (A4) and (A2),

$$\lambda_j = 1 + (\beta\lambda_{0,j})^p. \quad (\text{A5})$$

After recombining with the expressions of λ_0 and β , the j th eigenvalue of A can be written as

$$\lambda_j = 1 + \frac{\sin^{2p}\left(\frac{j\pi}{N}\right)}{\sin^{2p}\left(\frac{k_c \Delta x}{2}\right)}. \quad (\text{A6})$$

The smallest eigenvalue is found for $j = N$,

$$\min|\lambda_k| = |\lambda_N| = 1. \quad (\text{A7})$$

If N is even, the largest eigenvalue is found for $j = N/2$,

$$\max|\lambda_k| = |\lambda_{N/2}| = 1 + \frac{1}{\sin^{2p}\left(\frac{k_c \Delta x}{2}\right)}. \quad (\text{A8})$$

If N is odd, the largest eigenvalue is found for $j = (N + 1)/2$ and since

$$\sin^{2p}\left(\frac{(N + 1)\pi}{2N}\right) < \sin^{2p}\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad (\text{A9})$$

the expression in Eq. (A8) is an upper limit for $\max|\lambda_k|$.

The final expression for $\kappa(A)$ is

$$\kappa(A) = \frac{\max|\lambda_k|}{\min|\lambda_k|} = \frac{|\lambda_{N/2}|}{|\lambda_N|} = 1 + \frac{1}{\sin^{2p}\left(\frac{k_c \Delta x}{2}\right)}. \quad (\text{A10})$$

¹ S. J. Kline and S. K. Robinson, "Turbulent boundary layer structure: Progress, status, and challenges," in *Structure of Turbulence and Drag Reduction* (Springer, 1990), pp. 3–22.

² J. Jeong and F. Hussain, "On the identification of a vortex," *J. Fluid Mech.* **285**, 69–94 (1995).

³ H. J. Lugt, "The dilemma of defining a vortex," in *Recent Developments in Theoretical and Experimental Fluid Mechanics* (Springer, 1979), pp. 309–321.

⁴ G. Haller, "An objective definition of a vortex," *J. Fluid Mech.* **525**, 1–26 (2005).

⁵ P. R. Spalart, "Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $R_\theta = 1410$," *J. Fluid Mech.* **187**, 61–98 (1988).

⁶ M. S. Chong, A. E. Perry, and B. J. Cantwell, "A general classification of three-dimensional flow fields," *Phys. Fluids A* **2**(5), 765–777 (1990).

- ⁷ J. Zhou, R. J. Adrian, S. Balachandar, and T. M. Kendall, "Mechanisms for generating coherent packets of hairpin vortices in channel flow," *J. Fluid Mech.* **387**, 353–396 (1999).
- ⁸ P. Chakraborty, S. Balachandar, and R. J. Adrian, "On the relationships between local vortex identification schemes," *J. Fluid Mech.* **535**, 189–214 (2005).
- ⁹ J. Hunt, A. Wray, and P. Moin, "Eddies, stream, and convergence zones in turbulent flows," in *Proceedings of Summer Program 1988* (Center for Turbulence Research, Stanford University, 1988), pp. 193–208.
- ¹⁰ Y. Dubief and F. Delcayre, "On coherent-vortex identification in turbulence," *J. Turbul.* **1**, 1–22 (2000).
- ¹¹ B. Pierce, P. Moin, and T. Sayadi, "Application of vortex identification schemes to direct numerical simulation data of a transitional boundary layer," *Phys. Fluids* **25**(1), 015102 (2013).
- ¹² T. Nabil, W. A. Kareem, S. Izawa, and Y. Fukunishi, "Extraction of coherent vortices from homogeneous turbulence using curvelets and total variation filtering methods," *Comput. Fluids* **57**, 76–86 (2012).
- ¹³ M. Stöhr, I. Boxx, C. D. Carter, and W. Meier, "Experimental study of vortex-flame interaction in a gas turbine model combustor," *Combust. Flame* **159**(8), 2636–2649 (2012).
- ¹⁴ M. Stöhr, R. Sadanandan, and W. Meier, "Phase-resolved characterization of vortex-flame interaction in a turbulent swirl flame," *Exp. Fluids* **51**(4), 1153–1167 (2011).
- ¹⁵ P. J. Schmid, "Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data," *J. Fluid Mech.* **656**, 5–28 (2010).
- ¹⁶ T. Leung, N. Swaminathan, and P. A. Davidson, "Geometry and interaction of structures in homogeneous isotropic turbulence," *J. Fluid Mech.* **710**, 453–481 (2012).
- ¹⁷ R. Shapiro, "Smoothing, filtering, and boundary effects," *Rev. Geophys.* **8**(2), 359–387, doi:10.1029/RG008i002p00359 (1970).
- ¹⁸ R. Shapiro, "Linear filtering," *Math. comp.* **29**(132), 1094–1097 (1975).
- ¹⁹ R. K. Otnes and L. Enochson, *Applied Time Series Analysis* (Wiley, New York, 1978), Vol. 1.
- ²⁰ H. Holtz and C. T. Leondes, "The synthesis of recursive digital filters," *J. Assoc. Comput. Mach.* **13**(2), 262–280 (1966).
- ²¹ S. Butterworth, "On the theory of filter amplifiers," *Wireless Eng.* **7**, 536–541 (1930).
- ²² K. Schneider, M. Farge, G. Pellegrino, and M. M. Rogers, "Coherent vortex simulation of three-dimensional turbulent mixing layers using orthogonal wavelets," *J. Fluid Mech.* **534**, 39–66 (2005).
- ²³ M. Farge, K. Schneider, and N. Kevlahan, "Non-gaussianity and coherent vortex simulation for two-dimensional turbulence using an adaptive orthogonal wavelet basis," *Phys. Fluids* **11**(8), 2187–2201 (1999).
- ²⁴ W. H. Raymond, "High-order low-pass implicit tangent filters for use in finite area calculations," *Mon. Weather Rev.* **116**(11), 2132–2141 (1988).
- ²⁵ W. H. Raymond and A. Garder, "A review of recursive and implicit filters," *Mon. Weather Rev.* **119**(2), 477–495 (1991).
- ²⁶ S. B. Pope, *Turbulent Flows* (Cambridge University Press, 2000).
- ²⁷ P. Sagaut, *Introduction à la Simulation des Grandes Échelles pour les Écoulements de Fluide Incompressible* (Springer, 1998), Vol. 30.
- ²⁸ 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**(7), 1340–1357 (2011).
- ²⁹ P. Sagaut and R. Grohens, "Discrete filters for large eddy simulation," *Int. J. Numer. Methods Fluids* **31**(8), 1195–1220 (1999).
- ³⁰ R. Vichnevetsky and J. B. Bowles, *Fourier Analysis of Numerical Approximations of Hyperbolic Equations* (SIAM, 1982), Vol. 5.
- ³¹ V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch, "Design of a massively parallel CFD code for complex geometries," *C. R. Mec.* **339**(2–3), 141–148 (2011).
- ³² Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (SIAM, 2003).
- ³³ R. W. Freund, "Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **13**(1), 425–448 (1992).
- ³⁴ H. Boughanem, "Evaluation des termes de transport et de dissipation de surface de flamme par simulation numérique directe de la combustion turbulente," Ph.D. thesis (INSA de Rouen, 1998).
- ³⁵ F. O. Thomas and V. W. Goldschmidt, "Structural characteristics of a developing turbulent planar jet," *J. Fluid Mech.* **163**, 227–256 (1986).
- ³⁶ P. A. Monkewitz and P. Huerre, "Influence of the velocity ratio on the spatial instability of mixing layers," *Phys. Fluids* **25**(7), 1137–1143 (1982).
- ³⁷ C. B. Da Silva and O. Métais, "On the influence of coherent structures upon interscale interactions in turbulent plane jets," *J. Fluid Mech.* **473**, 103–145 (2002).
- ³⁸ M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot, "A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model," *Phys. Fluids A* **3**(7), 1760–1765 (1991).
- ³⁹ G. Lartigue, U. Meier, and C. Bérat, "Experimental and numerical investigation of self-excited combustion oscillations in a scaled gas turbine combustor," *Appl. Therm. Eng.* **24**(11–12), 1583–1592 (2004).
- ⁴⁰ W. Meier, P. Weigand, X. Duan, and R. Geisendannerthoben, "Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame," *Combust. Flame* **150**(1–2), 2–26 (2007).
- ⁴¹ S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, and C. Bérat, "Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations," *Combust. Flame* **141**(1–2), 40–54 (2005).
- ⁴² J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo, "Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner," *Combust. Flame* **155**(1–2), 247–266 (2008).
- ⁴³ A. K. Gupta, D. G. Lilley, and N. Syred, *Swirl flows* (Abacus Press, Tunbridge Wells, Kent, England, 1984), p. 488.
- ⁴⁴ N. Syred, "A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems," *Prog. Energy Combust. Sci.* **32**(2), 93–161 (2006).
- ⁴⁵ V. Moureau, P. Minot, H. Pitsch, and C. Bérat, "A ghost-fluid method for large-eddy simulations of premixed combustion in complex geometries," *J. Comput. Phys.* **221**(2), 600–614 (2007).

- ⁴⁶ M. Sanjose, "Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide," Ph.D. thesis (Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2009).
- ⁴⁷ O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch, "An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization," *J. Comput. Phys.* **227**(18), 8395–8416 (2008).
- ⁴⁸ H. Kalis, S. Rogovs, and A. Gedroics, "On the mathematical modelling of the diffusion equation with piecewise constant coefficients in a multi-layered domain," *Int. J. Pure Appl. Math.* **81**(4), 555–575 (2012); available at <http://www.ijpam.eu/contents/2012-81-4/2>.

A.5 Concours photo JDD CORIA

Dans le cadre de la Journée des doctorants 2014 du CORIA, un concours d'images scientifiques sur le thème *Andy Warhol* a été organisé. La Fig. A.1 représentée ci dessous a remporté le premier prix.

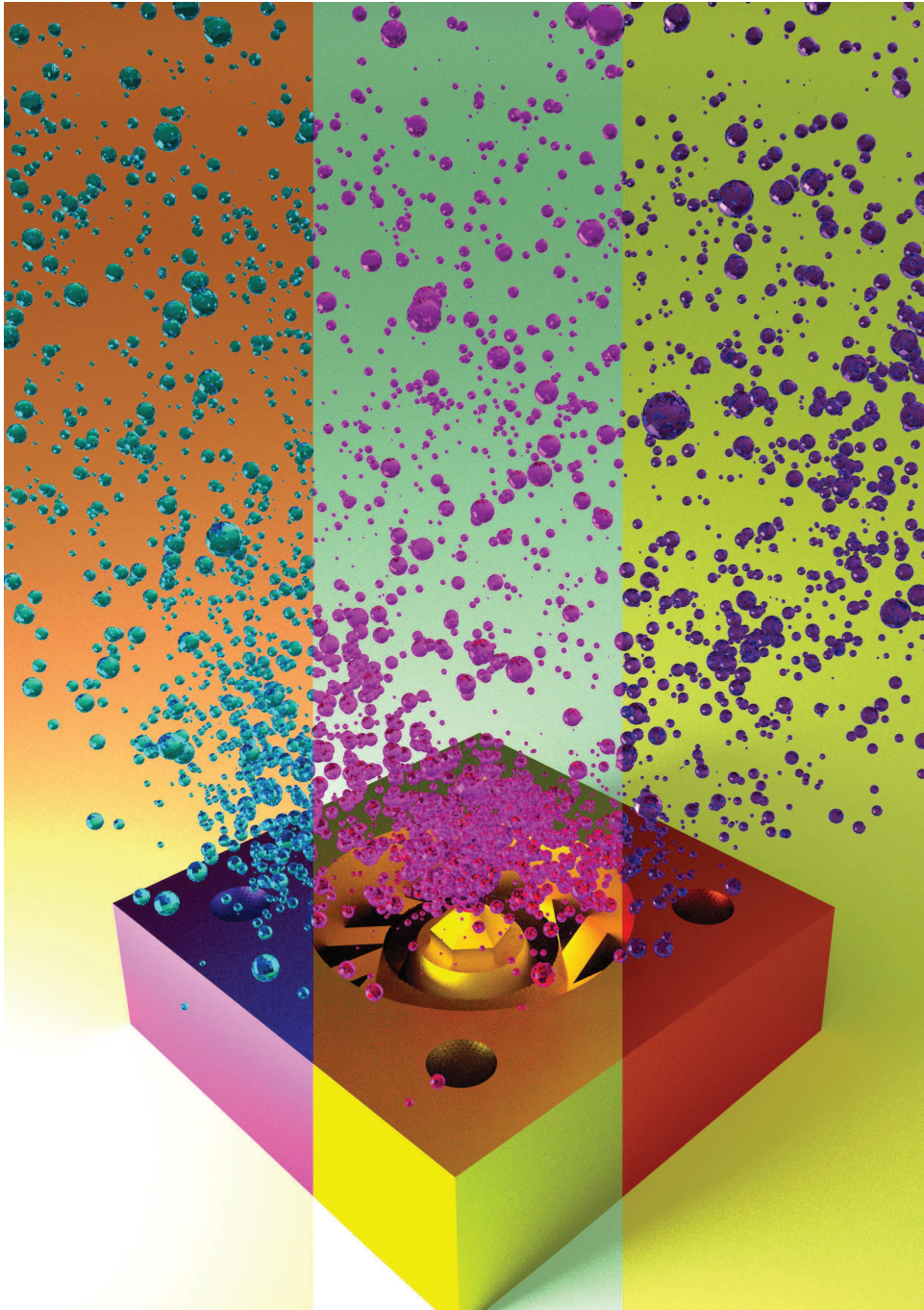


FIGURE A.1 – Two phase flow simulation of the MERCATO burner : Lagrangian particles representing kerosene droplets are injected at the exit of the swirler in the MERCATO test-cell, to model the fuel spray evaporating in a preheated atmosphere. Droplets diameters are Rosin-Rammler distributed, and particles are displayed as spheres scaled according to the droplet sizes.

Table des figures

1.1	Réseau mondial du transport aérien	21
2.1	Représentation schématique du fonctionnement et des éléments composant un turboréacteur	27
2.2	Fonctionnement des turbines à gaz selon le cycle de Brayton idéal	28
2.3	Représentation schématique du fonctionnement d'une chambre de combustion (a), et photographie d'une chambre de combustion d'un moteur aéronautique (SNECMA) (b) .	29
2.4	Evolution des polluants (NO_x , CO, imbrûlés et fummées) en fonction de la richesse [224]	32
2.5	Injecteur de type LPP (SNECMA). Description schématique (gauche), et photo d'un injecteur LPP (droite) [76]	33
2.6	Schéma de principe d'un Trapped Vortex Combustor [189]	34
2.7	Photo d'une chambre de type TVC en fonctionnement [84]	34
2.8	Vue écorchée d'un système d'injection de type multi-points étudié dans le cadre du pro- jet TLC [94]. Les deux étages, ainsi que leurs systèmes d'injection et d'admission de carburant sont représentés.	35
2.9	Photographie d'un système d'injection multi-point (SNECMA) : vue globale et vue rap- prochée [76]	35
2.10	Photographie de la flamme dite de Sandia D. Le jet central (25% de méthane et 75% d'air en volume) est entouré de 72 flammes pilotes pauvres (mélange de C_2H_2 , H_2 , air, CO_2 et N_2). [1]	36
2.11	Modèles de profils de vitesse tangentielle dans un tourbillon	41
2.12	Profil radial analytique de dépression dans un tourbillon de Rankine	42
2.13	Visualisation des 3 modes de vortex breakdown observés par Sarpkaya [175] : mode axisymétrique (a), en double hélice (b), et hélicoïdal (c)	43
2.14	Visualisation de l'apparition d'une zone de recirculation axisymétrique due au vortex breakdown par augmentation progressive du débit (le colorant est injecté sur l'axe et en un point décentré) [50]	45
2.15	Cartographie du mode et de la position du vortex breakdown, obtenue par Sarpkaya [175] en fonction du nombre de swirl et du nombre de Reynolds	45
2.16	Schéma de la structure périodique observée par Chanaud, décrite comme un tourbillon hélicoïdal rotatif [29]	45
2.17	Topologie du PVC du point de stagnation à sa désintégration en turbulence à grande échelle [155]	45
2.18	Relation entre la fréquence et le débit dans un écoulement swirlé confiné [25]	46

2.19	Moyennes de phase des trois composantes de vitesses dans deux plans transverses de l'écoulement [204]. Les aires en bleu correspondent à des zones de vitesse négatives, les aires en orange correspondent aux zones où la vitesse est la plus élevée. Les cercles violets représentent la position supposée du PVC dans le plan, et la courbe en pointillé matérialise l'enroulement du PVC entre la section 1 et la section 2.	47
2.20	Interaction flamme-vortex : la modification locale du profil de vitesse par le tourbillon plisse le front flamme, provoquant une augmentation de la surface de flamme, responsable d'une augmentation locale du dégagement de chaleur.	48
2.21	Topologie de l'écoulement pour différents niveaux de swirl. Les aires en bleu matérialisent les zones de recirculation induites par le swirl. (Image issue de la thèse de Palies [146])	49
2.22	Schéma des principales structures tourbillonnaires identifiées à la sortie du système d'injection TLC (schéma issu de la thèse de Barré [8])	50
2.23	Flamme en V dans le brûleur PRECCINSTA, matérialisée par la variable d'avancement dans le plan médian (Moureau <i>et al.</i> [138])	50
2.24	Visualisation de la flamme de laboratoire étudiée dans la thèse de Palies [146]	50
3.1	Instabilités de Kelvin-Helmholtz qui se développent à l'interface de fluides se déplaçant à des vitesses différentes.	59
3.2	Instabilités de Rayleigh-Taylor qui se développent à l'interface de fluides de densité différente.	59
3.3	Spectre d'énergie cinétique turbulente	62
3.4	Illustration des approches RANS, LES et DNS	63
3.5	Fonctionnement des approches RANS, LES et DNS, illustré dans l'espace spectral (gauche), et dans l'espace physique (droite)	64
3.6	Représentation schématique de la structure d'une flamme de prémélange monodimensionnelle [215]	71
3.7	Représentation schématique de la structure d'une flamme de diffusion monodimensionnelle [215]	71
3.8	Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse, pour des températures de gaz frais $T_f = 300K$ (a), $T_f = 473K$ (b) et $T_f = 700K$ (c). Le schéma BFER (lignes) est comparé aux mécanismes détaillés de Luche (symboles noir), et de Dagaut (symboles blanc) [63].	77
3.9	DNS de l'interaction flamme turbulence : flamme non épaissie (gauche) et flamme épaissie d'un facteur $\mathcal{F} = 5$; La flamme artificiellement épaissie est clairement moins plissée par la turbulence du fait de la modification de l'interaction flamme-turbulence due au facteur d'épaississement [155].	77
3.10	Convergence des trajectoires dans l'espace des fractions massique $\{Y_A, Y_B\}$ vers l'attracteur de faible dimension (courbe ME), puis vers l'équilibre E [155].	79
3.11	Principe de la résolution de la chimie par la méthode de la tabulation, schéma issu de la thèse de Lodier [120]	81
3.12	Formes de la β -PDF appliquée à la température normalisée Θ , pour plusieurs valeurs de a et b [155].	82
3.13	Classification des écoulements particuliers selon Elghobashi [47], image tirée de la thèse de Farcy [54]	83
3.14	Photographie du spray de carburant SAFIR, issue des travaux de Cessou [27]	84

3.15	Comparaison de la distribution de gouttes dans le brûleur MERCATO, simulation Euler-Euler (gauche), et Euler-Lagrange (droite) [174]	87
3.16	Schéma d'une goutte qui s'évapore dans un milieu ambiant gazeux [54]	89
3.17	Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2 : x_p représente le nœud du maillage, \bar{x}_p représente le barycentre du volume de contrôle.	94
4.1	Illustration of the Moore's law (solid line), and CPU transistors counts plotted against their year of introduction	103
4.2	Comparison of vortex identification methods in homogeneous isotropic turbulence : Pressure iso-surface (a), Vorticity iso-surface (b), λ_2 isosurface (c), Q-criterion isosurface (d) [45]	105
4.3	Q-criterion isocontour $Q = 0.32 \times 10^8 s^{-2}$ on 4 meshes 1.7 million cells (first column), 14 million cells (second column), 41 million cells (third column) and 110 million cells (fourth column)	106
4.4	Principle of modal decomposition, from [178]	107
4.5	3D reconstruction of the PVC in an experimental swirled burner [200]	108
4.6	Proper Orthogonal Decomposition of the fluctuations of pressure (a) and of liquid volume fraction (b). The structure is displayed with isosurfaces of maximal (black) and minimal (white) mode amplitude [173]	109
4.7	Spectra of modes and spatial distributions of the most energetic ones for a non-reacting jet under strong forcing[3]	111
4.8	Representation of the common filters in the physical space (left) and spectral space (right). The scales are normalized by the filter width where appropriate.	112
4.9	Damping functions of high-order filters, for order 4, 8, 12 and 16, compared to Cardinal Sine filter	115
4.10	Details on the node-centered Laplacian computation in YALES2	117
4.11	Condition number of matrix A, versus filter order and filter size.	119
4.12	Filtering of a Dirac function with high-order filters of various orders.	121
4.13	Damping function of the filter, and expected damping of the amplitude for 3 sine functions of respective wave length $\lambda_1 = 5\Delta/6$, $\lambda_2 = \Delta$ and $\lambda_3 = 5\Delta/4$	122
4.14	Filtering of sine functions of wave length $\lambda_1 = 5\Delta/6$ (a), $\lambda_2 = \Delta$ (b), and $\lambda_3 = 5\Delta/4$ (c).	122
4.15	1D scalar field resulting from the energy spectrum defined in Eq. 4.71 (solid line), and scalar filtered with 12 th order implicit filter (dash line)	123
4.16	Energy spectrum of the unfiltered (solid line) and filtered (dash line) 1D HIT and comparison with analytical solution from Eq. 4.69 (symbols)	123
4.17	Description of the velocity field defined as a combination of Taylor vortices of 3 sizes. Coefficients α_1 , α_2 , α_3 were respectively set to 1, 0.9 and 0.7	123
4.18	Extraction of Taylor vortices with 12th order band pass filter (b), Gaussian filter (c) and comparison with exact solutions (a)	124
4.19	Extraction of intermediate Taylor vortices with Gaussian filter (b), and implicit filter at order 4 (c), 8 (d), 12 (e) and 16 (f). Comparison to the analytical solution (a)	124
4.20	Extraction of $L/4$ Taylor vortices with the 12 th order filter on a cartesian grid (left) and an unstructured grid (right).	125
4.21	Turbulent kinetic energy spectrum of the HIT $E(\kappa)$, initialized with a Pope spectrum. $k\kappa_\eta$ is the wave-number associated with the Kolmogorov scale $\kappa_\eta = 2\pi/\eta$	127

4.22	Iso-surface of filtered Q-criterion (a), and Q-criterion based on filtered velocity (b) - $Q = 6 \times 10^7 s^{-2}$	127
4.23	Iso-surface of unfiltered Q-criterion (a), Q-criterion filtered with the 12th order filter (b), and the Gaussian filter (c) - $Q = 6 \times 10^7 s^{-2}$	128
4.24	Unfiltered (solid line) and filtered Q-criterion spectrum, with implicit filters from order 4 to 16 and Gaussian filter.	128
4.25	Sketch of the flow. The computational domain size is $12.4h \times 12h \times 2.9h$	129
4.26	Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 3000$,	130
4.27	Side view of non-dimensional vorticity magnitude in the mid-plane, from $x/h = 2$ to $x/h = 10$, $Re_h = 60000$	130
4.28	Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re_h = 3000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark respectively.	131
4.29	Top view of an iso-surface of unfiltered (top) and filtered (bottom) Q-criterion at $Re = 60000$. Vortices located in the upper and lower shear layer are colored in white and dark respectively.	131
4.30	Geometry of the PRECCINSTA swirled burner	132
4.31	Iso-surface of filtered Q-criterion on the 14M mesh with a 12th order filter (a), on the 41M mesh with a 12th order filter (b), on the 110M mesh with a 12th order filter (c) and in the 878M mesh with a 8th order filter(d). Filtering size = 6mm. $\bar{Q} = 0.32 \times 10^8 s^{-2}$	133
4.32	Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 12th order filter (right), on the 110M mesh	134
4.33	Extraction of the PVC with Gaussian filter (left) and 8th order filter (right), on the 878M mesh	134
4.34	Computational cost of the 2 algorithm (complex factorization and real factorization) on an industrial swirl burner (14M cells mesh). Real factorization allows to increase the order up to 16.	136
4.35	Iso-surface of the level set function based on the filtered Q-criterion iso-surface (a) - Iso-surface of the level set function, colored by the color of each closed volume (b) - Iso-surface of the redefined level set function to extract the PVC (c) Iso-surface of the level set function surrounded by smaller vortices (d)	137
4.36	Iso-surface of the level set based on the filtered Q-criterion, with filtering size $\Delta = 6mm$. The mesh consists of 878 million tetrahedra.	138
4.37	Definition of the PVC coordinate system	139
4.38	Example of application of the Pointcloud processing software : given an incomplete and noisy raw scan (b) of the object in (a), a subset of samples shown in red in (c) is randomly selected. These points are iteratively projected onto a skeletal point cloud with a gradually increasing neighborhood size (d-g). After down-sampling, smoothing, and re-centering, the final curve skeleton is obtained (h).[89]	140

4.39	Description of the skeleton extraction process on the PRECCINSTA - 41M case : From a level-set function iso-surface (a), a random down-sampling is performed to select an input data set for the pointcloud library (b), the library computes the skeleton and returns it to the solver (c), the skeleton is interpolated on the 3D grid in order to compute a local curvilinear abscissa (d)	142
4.40	Notations for skeleton points	143
4.41	Propagation of skeleton on grid points. The mesh node X_i (black point), and its closest skeleton node S_n (red point) are considered.	143
5.1	Photographie du banc expérimental MERCATO à l'ONERA.	147
5.2	Description de la géométrie du brûleur MERCATO.	148
5.3	Position axiale des plans de mesures dans la chambre MERCATO - Cas non réactif.	150
5.4	Position axiale des plans de mesures dans la chambre MERCATO - Cas réactif.	150
5.5	Distribution de Rosin-Rammler (ligne pointillée), et distribution discrète utilisée dans la simulation (histogramme).	151
5.6	Domaine de calcul modélisé dans les simulations du banc MERCATO (gauche), et coupe médiane du maillage grossier (droite).	152
5.7	Résolution du maillage à 40M de cellules (gauche), et zoom sur la zone d'injection (droite). Les plus petites cellules ont une taille d'environ $150 \mu\text{m}$ à la sortie du swirler.)	152
5.8	Maillage grossier : 40M de cellules, (gauche), et maillage après un niveau de raffinement homogène : 326M de cellules (droite).	152
5.9	Photographie du spray de carburant SAFIR, issue des travaux de Cessou [27].	154
5.10	Vue en coupe d'un atomiseur pressurisé swirlé et détail des paramètres géométriques. La surface grisée matérialise la nappe liquide, les surfaces hachurées représentent le solide [115].	154
5.11	Topologie réaliste du spray en sortie d'injecteur (gauche), et approximation pour l'injection de particules Lagrangiennes (droite)	154
5.12	Paramètres géométriques du spray en sortie d'injecteur.	156
5.13	Paramètres géométriques de l'injecteur LISA.	157
5.14	Distance à l'axe en fonction du rayon d'injection, du ratio de vitesse axiale et tangentielle, et de la position axiale - Formule analytique de l'Eq. 5.11 (traits épais), et relation approchée de l'Eq. 5.12 (traits fins).	158
5.15	Géométrie 3D du domaine de calcul.	159
5.16	Coupe du maillage dans le plan médian.	159
5.17	Schéma des conditions aux limites utilisées.	159
5.18	Photographie du spray (gauche), et ensemble des particules dans la simulation Lagrangienne (droite).	160
5.19	Particules ayant un diamètre inférieur à $30 \mu\text{m}$ (a) - Particules ayant un diamètre compris entre $30 \mu\text{m}$ et $60 \mu\text{m}$ (b) - Particules ayant un diamètre supérieur à $60 \mu\text{m}$ (c).	161
5.20	Profils de vitesse axiale de la phase liquide (Symbole : Exp - Ligne continue : Simulation).	162
5.21	Evaporation d'une goutte de kérosène : évolution du diamètre et de la température.	164
5.22	Evaporation d'une goutte de kérosène : évolution du terme source de masse (gauche) et d'enthalpie (droite).	164
5.23	Evaporation d'une goutte de kérosène : effet sur le milieu ambiant.	164

5.24	Visualisation des zones de recirculation par une isosurface de vitesse axiale nulle : calcul YALES2 avec raccord d'aspiration (gauche), et calcul AVBP sans raccord d'aspiration [173] (droite).	167
5.25	Représentation des zones de recirculation expérimentales [113] (gauche), dans la simulation AVBP de Sanjose [173] et dans la simulation YALES2 (droite).	167
5.26	Champ instantanés dans le plan médian : vitesse et zones de recirculation matérialisées par des iso-lignes de vitesse axiale moyenne nulle (haut), et ratio de viscosité turbulente sur la viscosité laminaire (bas). Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).	168
5.27	Profils de vitesse gazeuse dans les cinq plans expérimentaux (Symboles : Exp [70] - Ligne traitillée : AVBP [185] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M - Ligne traitillée-pointillée : YALES2 maillage 326M).	169
5.28	Profils de vitesse liquide dans les trois plans expérimentaux (Symboles : Exp [70] - Ligne traitillée : AVBP [185] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M - Ligne traitillée-pointillée : YALES2 maillage 326M).	171
5.29	Champ instantanés dans le plan médian : fraction massique de fuel gazeux (haut), température (milieu) et particules dans les cellules passant par le plan médian, colorée par leur diamètre. Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).	172
5.30	Fraction massique de kérosène et spray coloré par le diamètre des particules dans le plan médian, à 4 instants successifs - Mise en évidence du caractère très instationnaire et périodique de la dynamique du spray.	173
5.31	Iso-surface de critère $Q = 3 \times 10^7 s^{-2}$ (gauche) et de fonction levelset basée sur le critère Q filtré $\bar{Q} = 3 \times 10^7 s^{-2}$ (droite).	173
5.32	Particules Lagrangiennes colorées par la distance au PVC, vues depuis le fond de chambre (a). Le PVC est superposé aux particules pour mettre en évidence la corrélation avec la distribution spatiale des gouttes (b).	174
5.33	Extraction et isolation du PVC : iso-surface de critère Q (a), iso-surface de critère Q filtré (b), iso-surface de fonction levelset (c), downsampling de l'iso-surface (d), reconstruction squelettique (e).	175
5.34	Profil de vitesse axiale tangentielle et radiale dans le PVC (gauche) - Comparaison à des profils analytiques canoniques (droite).	175
5.35	Influence du PVC sur la distribution spatiale des particules : PDF de distance au PVC, r , conditionnée par le diamètre des gouttes, d_p : PDF($r, d_p = d_p^*$) (gauche), et PDF de diamètre conditionnée par la distance au PVC : PDF($d_p, r = r^*$) (droite).	176
5.36	Nombre de Stokes des particules.	177
5.37	Champs instantanés dans le plan médian : vitesse et zones de recirculation matérialisées par des iso-lignes de vitesse axiale moyenne nulle (1ère ligne), fraction de mélange (2ème ligne), fraction massique de kérosène (3ème ligne), terme source de fraction massique de kérosène (4ème ligne) - Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).	179
5.38	Champs instantanés dans le plan médian : température (1ère ligne), terme source d'enthalpie (2ème ligne), facteur d'épaissement (3ème ligne), fraction massique de CO_2 (4ème ligne) - Maillage 40M de cellules (gauche), Maillage 326M de cellules (droite).	180

5.39	Profils de vitesse gazeuse dans les quatre plans expérimentaux (Symboles : Exp [113] - Ligne traitillée : AVBP [80] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M).	181
5.40	Spray de carburant dans la chambre MERCATO (haut), et dans une épaisseur de 2 cm autour du plan médian (bas). Les particules sont colorées par leur température (gauche) et par leur diamètre (droite).	183
5.41	Profils de vitesse liquide dans les quatre plans expérimentaux (Symboles : Exp [113] - Ligne traitillée : AVBP [80] - Ligne continue : YALES2 maillage 40M).	183
5.42	Fraction de mélange et température, à quatre instants successifs - Mise en évidence du caractère périodique de la dynamique du spray.	184
5.43	Fraction massique de kérosène (haut) et de terme source d'enthalpie (bas). Mise en évidence de l'influence du PVC.	185
5.44	Iso-surfaces de levelset $\Phi_T = 0.5$ et $\Phi_Q = 0.5$ (gauche), iso-surface de levelset $\Phi_T = 0.5$ vue du fond de chambre, colorée par les RMS de vitesse (milieu), et représentation schématique de l'enroulement du PVC et de la position du point d'accrochage de la flamme (droite). Les images sont prises à des temps successifs répartis sur un tour de précession du PVC.	186
5.45	Iso-surfaces représentant la flamme (blanc, $\Phi_T = 0.5$), le PVC (orange, $\Phi_Q = 0.5$), et le spray (bleu turquoise), en vue 3D (a), (b), et dans une coupe transverse à 6mm du plan d'injection (c)	187
5.46	PDF de distance au PVC, conditionnée par la surface de flamme (ligne continue), et le spray (ligne discontinue)	187
5.47	Relevé des point d'accrochage de la flamme, et localisation dans la géométrie du brûleur.	188
5.48	Champ instantané de température (a), température filtrée (b), levelset basée sur l'iso-surface de température filtrée $\bar{T} = 1100$ K, et méthode d'identification du point d'accrochage de la flamme.	188
5.49	Localisation et évolution du point d'accrochage de la flamme.	189
5.50	Iso-contours de $\Phi_Q = 0.5$ (rose), de vitesse axiale filtrée $\bar{u}_z = 0$ (orange), $\Phi_T = 0.5$ (bleu clair), fraction massique de kérosène filtrée $\bar{Y}_{kero} = 0.01$ (jaune), terme source d'évaporation filtré $\bar{\omega}_{kero,evap}$ (vert transparent), terme source d'enthalpie filtré $\bar{\omega}_T$ (bleu foncé) et spray dans la zone proche injecteur (vert).	190
5.51	Schéma du mécanisme d'interaction du spray et de la flamme avec le PVC. Vue de coté (a), et coupes transverses (b) et (c).	191
5.52	Indice de Takeno dans le plan médian : les zones en noir indiquent une flamme de diffusion, les zones blanches indiquent une flamme de prémélange.	192
5.53	Scaling sur le calcul non réactif	193
7.1	Mise en évidence de la corrélation entre le PVC et les petits tourbillons environnants	201
7.2	Champs de température (haut), et de fraction de mélange (bas) dans le plan médian, en chimie réduite (gauche), et en chimie tabulée (droite).	202
A.1	Two phase flow simulation of the MERCATO burner : Lagrangian particles representing kerosene droplets are injected at the exit of the swirler in the MERCATO test-cell, to model the fuel spray evaporating in a preheated atmosphere. Droplets diameters are Rosin-Rammler distributed, and particles are displayed as spheres scaled according to the droplet sizes.	236

Liste des tableaux

3.1	Composition du surrogate du kérosène proposé par Luche [123].	75
3.2	Propriétés liquides et gazeuses de l'espèce kérosène.	75
3.3	Propriétés thermodynamiques du surrogate du kérosène.	75
4.1	Common filters and associated Fourier transform	112
4.2	L_2 norm of the difference between filtered solution and analytical solution for various filters	125
4.3	Parameters for the initialization of the homogeneous isotropic turbulent field.	126
4.4	Characteristics of the turbulent field	126
4.5	Comparison of the performances of linear solvers	135
4.6	CPU cost of the 12 th order filter	135
5.1	Points de fonctionnement expérimentaux du brûleur MERCATO et études numériques associées.	149
5.2	Caractéristiques du maillage du brûleur MERCATO.	151
5.3	Conditions aux limites.	153
5.4	Synthèse des paramètres de l'injecteur et du spray.	159
5.5	Paramètres du modèle d'injection.	160
5.6	Synthèse des performances du code pour les deux points de fonctionnement, sur le maillage grossier et le maillage raffiné.	194

Bibliographie

- [1] Sandia : Experimental data archives. <http://www.sandia.gov/TNF/pilotedjet.html>.
- [2] Site internet snecma : Moteur leap. <http://www.snecma.com/-leap-x,381-.html?lang=fr>.
- [3] S.S. Abdurakipov, V.M. Dulin, Y.S. Kozorezov, and D.M. Markovich. Dynamics of large-scale vortices in periodically forced strongly swirling jets and lifted flames investigated by stereo piv and dmd. In *16th Int Symp on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal, 2012.
- [4] D. J. Acheson. *Elementary fluid dynamics*. Oxford University Press, 1990.
- [5] C Angelberger, D Veynante, F Egolfopoulos, and T Poinot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program*, pages 61–82. Citeseer, 1998.
- [6] J. Bardina, J. Ferziger, and W. Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. 1980.
- [7] R.S. Barlow and J.H. Frank. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 1087–1095. Elsevier, 1998.
- [8] D. Barré. Numerical simulation of ignition in aeronautical combustion chambers. 2014.
- [9] G.I Berkooz, P. Holmes, and J. L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual review of fluid mechanics*, 25(1) :539–575, 1993.
- [10] R.W. Bilger, S.B. Pope, K.N.C. Bray, and J.F. Driscoll. Paradigms in turbulent combustion research. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :21–42, 2005.
- [11] M. Bini and W. P. Jones. Particle acceleration in turbulent flows : A class of nonlinear stochastic models for intermittency. *Physics of Fluids (1994-present)*, 19(3) :035104, 2007.
- [12] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 917–925. Elsevier, 1998.
- [13] M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375 :235–263, 1998.
- [14] H. Boughanem. *Evaluation des termes de transport et de dissipation de surface de flamme par simulation numérique directe de la combustion turbulente*. PhD thesis, INSA de Rouen, 1998.
- [15] J. Boussinesq. *Essai sur la théorie des eaux courantes*, 1877.
- [16] I. Boxx, M. Stöhr, C. Carter, and W. Meier. Temporally resolved planar measurements of transient phenomena in a partially pre-mixed swirl flame in a gas turbine model combustor. *Combustion and Flame*, 157(8) :1510–1525, 2010.
- [17] D. Bradley, L. K. Kwa, A. K. C. Lau, M. Missaghi, and S. B. Chin. Laminar flamelet modeling of recirculating premixed methane and propane-air combustion. *Combustion and flame*, 71(2) :109–122, 1988.
- [18] R.S. Brokaw. Approximate formulas for the viscosity and thermal conductivity of gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 29(2) :391–397, 1958.
- [19] C. Brücker. Study of vortex breakdown by particle tracking velocimetry. *Experiments in Fluids*, 14(1-2) :133–139, 1993.

- [20] A. Bruyat. *Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique*. PhD thesis, ISAE Toulouse, 2012.
- [21] J. Burguburu. *Etude expérimentale de la stabilité d'une flamme dans une chambre de combustion aéronautique par recirculation de gaz brûlés et par ajout d'hydrogène*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2012.
- [22] T.D. Butler and P.J. O'Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 16, pages 1503–1515. Elsevier, 1977.
- [23] S. Butterworth. On the theory of filter amplifiers. *Wireless Engineer*, 7 :536–541, 1930.
- [24] P. Bénard. *Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2015.
- [25] J. J. Cassidy and H. T. Falvey. Observations of unsteady flow arising after vortex breakdown. *Journal of Fluid Mechanics*, 41(04) :727–736, 1970.
- [26] V. Caux-Brisebois, A. M. Steinberg, C.M. Arndt, and W. Meier. Thermo-acoustic velocity coupling in a swirl stabilized gas turbine model combustor. *Combustion and Flame*, 161(12) :3166 – 3180, 2014.
- [27] A. Cessou, D. Honoré, and G. Cléon. Safir - simulation avancée des foyers industriels avec recycle. phase 3, rapport final. Technical report, CORIA CNRS UMR 6614, INSA et Université de Rouen, 2010.
- [28] P. Chakraborty, S. Balachandar, and R.J. Adrian. On the relationships between local vortex identification schemes. *Journal of Fluid Mechanics*, 535 :189–214, 2005.
- [29] R.C. Chanaud. Observations of oscillatory motion in certain swirling flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 21(01) :111–127, 1965.
- [30] 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. *Combustion and Flame*, 131(1) :159–180, 2002.
- [31] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. 2000.
- [32] C. Chevalier and F. Pellegrini. Pt-scotch : A tool for efficient parallel graph ordering. *Parallel Computing*, 34(6) :318–331, 2008.
- [33] M.S. Chong, A.E. Perry, and B.J. Cantwell. A general classification of three-dimensional flow fields. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 2(5) :765–777, 1990.
- [34] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104) :745–762, 1968.
- [35] J. Chuang, C. Tsai, and M. Ko. Skeletonisation of three-dimensional object using generalized potential field. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, 22(11) :1241–1251, 2000.
- [36] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids (1994-present)*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [37] M. Colket, T. Edwards, S. Williams, N.P. Cernansky, D.L. Miller, F. Egolfopoulos, P. Lindstedt, K. Seshadri, F. L Dryer, C.K. Law, et al. Development of an experimental database and kinetic models for surrogate jet fuels. In *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, pages 8–11, 2007.
- [38] A. W. Cook and W. H. Cabot. A high-wavenumber viscosity for high-resolution numerical methods. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :594–601, 2004.
- [39] C. B. Da Silva and O. Métais. On the influence of coherent structures upon interscale interactions in turbulent plane jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 473 :103–145, 2002.
- [40] M. Dagaut, P. and Cathonnet. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene : A review of experimental and kinetic modeling. *Progress in energy and combustion science*, 32(1) :48–92, 2006.
- [41] P. Dagaut. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4(11) :2079–2094, 2002.
- [42] O. Desjardins, R.O. Fox, and P. Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics*, 227(4) :2514–2539, 2008.

- [43] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395–8416, 2008.
- [44] T. K. Dey and J. Sun. Defining and computing curve-skeletons with medial geodesic function. In *Symposium on Geometry Processing*, pages 143–152, 2006.
- [45] Y. Dubief and F. Delcayre. On coherent-vortex identification in turbulence. *Journal of Turbulence*, (1), 2000.
- [46] D. Durox, T. Schuller, N. Noiray, and S. Candel. Experimental analysis of nonlinear flame transfer functions for different flame geometries. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :1391 – 1398, 2009.
- [47] S. Elgobashi. An updated classification map of particle-laden turbulent flows. In *IUTAM Symposium on Computational Approaches to Multiphase Flow*, pages 3–10. Springer, 2006.
- [48] N. Enjalbert. Modélisation avancée de la combustion turbulente diphasique en régime de forte dilution par les gaz brûlés. 2011.
- [49] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*, volume 24. Springer, 1994.
- [50] M. Escudier. Vortex breakdown : observations and explanations. *Progress in Aerospace Sciences*, 25(2) :189–229, 1988.
- [51] M.P. Escudier and N. Zehnder. Vortex-flow regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 115 :105–121, 1982.
- [52] A. Eyssartier, B. Cuenot, L.Y.M. Gicquel, and T. Poinso. Using les to predict ignition sequences and ignition probability of turbulent two-phase flames. *Combustion and Flame*, 2013.
- [53] J. H. Faler and S. Leibovich. Disrupted states of vortex flow and vortex breakdown. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 20(9) :1385–1400, 1977.
- [54] B. Farcy. *Analyse des mécanismes de destruction non catalytique des Oxydes d'Azote (DeNOx) et application à la simulation aux grandes échelles (LES) d'un incinérateur*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2015.
- [55] M. Farge. Wavelet transforms and their applications to turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 24(1) :395–458, 1992.
- [56] M. Farge, K. Schneider, and N. Kevlahan. Non-gaussianity and coherent vortex simulation for two-dimensional turbulence using an adaptive orthogonal wavelet basis. *Physics of Fluids (1994-present)*, 11(8) :2187–2201, 1999.
- [57] C.P. Fenimore and H.A. Fraenkel. *Proceedings of the Combustion Institute*, 18 :143–149, 1981.
- [58] J. R. Fessler and J. K. Kulick, J. D. and Eaton. Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow. *Physics of Fluids (1994-present)*, 6(11) :3742–3749, 1994.
- [59] P. Fevrier, O. Simonin, and K.D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas–solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 533 :1–46, 2005.
- [60] R.L.C. Flemmer and C.L. Banks. On the drag coefficient of a sphere. *Powder Technology*, 48(3) :217–221, 1986.
- [61] P. Forzatti. Present status and perspectives in de-nox scr catalysis. *Applied catalysis A : general*, 222(1) :221–236, 2001.
- [62] R. O. Fox, F. Laurent, and M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *Journal of Computational Physics*, 227(6) :3058–3088, 2008.
- [63] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjose, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for kerosene–air premixed flames. *Combustion and Flame*, 157(7) :1364–1373, 2010.
- [64] B. Franzelli, B. Vie, A. and Fiorina, and N. Darabiha. Large eddy simulation of swirling kerosene/air spray flame using tabulated chemistry. In *ASME Turbo Expo 2013 : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages V01AT04A034–V01AT04A034. American Society of Mechanical Engineers, 2013.

- [65] B.G. Franzelli. Impact of the chemical description on direct numerical simulations and large eddy simulations of turbulent combustion in industrial aero-engines. pages 1–254, July 2011.
- [66] R. W. Freund. Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(1) :425–448, 1992.
- [67] D. Galley. Etude de la stabilisation de flammes pré vaporisées prémélangées pauvres. 2006.
- [68] D. Galley, S. Ducruix, F. Lacas, and D. Veynante. Mixing and stabilization study of a partially premixed swirling flame using laser induced fluorescence. *Combustion and Flame*, 158(1) :155–171, 2011.
- [69] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combustion and Flame*, 155(1–2) :247–266, October 2008.
- [70] N. Garcia Rosa. *Phénomènes d’allumage d’un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. PhD thesis, ISAE Toulouse, 2008.
- [71] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 3(7) :1760–1765, 1991.
- [72] H. Ghassemi, S. W. Baek, and Q.S. Khan. Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. *Combustion science and technology*, 178(9) :1669–1684, 2006.
- [73] O. Gicquel. *Développement d’une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : Application au méthane*. PhD thesis, 1999.
- [74] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1901–1908, 2000.
- [75] V. Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhauser, Boston, 1999.
- [76] G. Godel. *Développement d’outils pour la prédiction de la pollution dans une chambre aéronautique*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2010.
- [77] C. Gruselle. *Etude du développement d’une flamme soumise a un gradient de concentration. Rôle de la stratification et des EGR*. PhD thesis, CORIA, 2014.
- [78] A.K. Gupta, D.G. Lilley, and N. Syred. Swirl flows. *Tunbridge Wells, Kent, England, Abacus Press, 1984*, 488 p., 1, 1984.
- [79] G. Haller. An objective definition of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 525 :1–26, 2005.
- [80] G. Hannebique. *Etude de la structure des flammes diphasiques dans les brûleurs aéronautiques*. PhD thesis, 2013.
- [81] G. Hannebique, P. Sierra Sanchez, E. Riber, and B Cuenot. Large eddy simulation of reactive two-phase flow in an aeronautical multipoint burner. *Flow, turbulence and combustion*, 90(2) :449–469, 2013.
- [82] K. Harstad and J. Bellan. Modeling evaporation of jet a, jp-7, and rp-1 drops at 1 to 15 bars. *Combustion and flame*, 137(1) :163–177, 2004.
- [83] J.K. Harvey. Some observations of the vortex breakdown phenomenon. *Journal of Fluid Mechanics*, 14(04) :585–592, 1962.
- [84] R.C. Hendricks, D.T. Shouse, W.M. Roquemore, D.L. Burrus, B.S. Duncan, R.C. Ryder, N.S. Brankovic, A. and Liu, J.R. Gallagher, and J.A. Hendricks. Experimental and computational study of trapped vortex combustor sector rig with high-speed diffuser flow. *International Journal of Rotating Machinery*, 7(6) :375–385, 2001.
- [85] D.H. Hernandez and T.O.M. Noel. Injecteur multi-point pour une chambre de combustion de turbomachine. Technical report, 22 2012.
- [86] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*, volume 26. Wiley New York, 1954.
- [87] H. Holtz and C. T. Leondes. The synthesis of recursive digital filters. *Journal of the ACM (JACM)*, 13(2) :262–280, 1966.

- [88] S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann, and N. Peters. A surrogate fuel for kerosene. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :485–492, 2009.
- [89] H. Huang, S. Wu, D. Cohen Or, M. Gong, H. Zhang, G. Li, and B. Chen. L1 medial skeleton of point cloud. *ACM Transactions on Graphics*, 32 :65 :1–65 :8, 2013.
- [90] Y. Huang and V. Yang. Dynamics and stability of lean-premixed swirl-stabilized combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(4) :293–364, 2009.
- [91] G.L. Hubbard, V.E. Denny, and A.F. Mills. Droplet evaporation : effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18(9) :1003–1008, 1975.
- [92] J. C. R. Hunt, A. A. Wray, and P. Moin. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. pages 193–208, December 1988.
- [93] R. Jackson. Locally averaged equations of motion for a mixture of identical spherical particles and a newtonian fluid. *Chemical Engineering Science*, 52(15) :2457–2469, 1997.
- [94] F. Jaegle. *Large eddy simulation of evaporating sprays in complex geometries using Eulerian and Lagrangian methods*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2009.
- [95] J. Jeong and F. Hussain. On the identification of a vortex. *Journal of fluid mechanics*, 285 :69–94, 1995.
- [96] W. P. Jones, S. Lyra, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of a swirl stabilized spray flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2153–2160, 2011.
- [97] W.P. Jones, C. Lettieri, and S. Marquis, A.J. and Navarro-Martinez. Large eddy simulation of the two-phase flow in an experimental swirl-stabilized burner. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38 :145–158, 2012.
- [98] H. Kalis, S. Rogovs, and A. Gedroics. On the mathematical modelling of the diffusion equation with piecewise constant coefficients in a multi-layered domain. *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, 81(4) :555–575, 2012.
- [99] G. Karypis and V. Kumar. Metis-unstructured graph partitioning and sparse matrix ordering system, version 2.0. 1995.
- [100] F.V. Katopodes, R.L. Street, and J.H. Ferziger. Subfilter-scale scalar transport for large-eddy simulation. In *14th Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, pages 472–475, 2000.
- [101] A. Kaufmann. Towards eulerian-eulerian large eddy simulation of reactive two-phase flows. 2004.
- [102] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of computational physics*, 59(2) :308–323, 1985.
- [103] S. Klainerman and A. Majda. Compressible and incompressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 35(5) :629–651, 1982.
- [104] S.J. Kline and S.K. Robinson. Turbulent boundary layer structure : Progress, status, and challenges. In *Structure of Turbulence and Drag Reduction*, pages 3–22. Springer, 1990.
- [105] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303, 1941.
- [106] M. Kraushaar. *Application of the compressible and low-mach number approaches to large-eddy simulation of turbulent flows in aero-engines*. PhD thesis, INPT, 2011.
- [107] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d’hélicoptère*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2007.
- [108] N.C. Lambourne and D.W. Bryer. *The bursting of leading-edge vortices : some observations and discussion of the phenomenon*. HM Stationery Office, 1962.
- [109] G. Lartigue, U. Meier, and C. Bérat. Experimental and numerical investigation of self-excited combustion oscillations in a scaled gas turbine combustor. *Applied Thermal Engineering*, 24(11-12) :1583–1592, August 2004.

- [110] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion theory and modelling*, 5(4) :537–572, 2001.
- [111] G. Lavergne and R. Lecourt. Tlc deliverable, task2.2.1 multi-point injection systems characterization. Technical report, ONERA DMAE.
- [112] R. Lecourt. Timecop-ae d221a : Report on ignition and blow-out results at ambient conditions. Technical report, ONERA DMAE.
- [113] R. Lecourt, G. Linassier, and G. Lavergne. Detailed characterisation of a swirled air/kerosene spray in reactive and non-reactive conditions downstream from an actual turbojet injection system. In *ASME 2011 Turbo Expo : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages 185–194. American Society of Mechanical Engineers, 2011.
- [114] T Lederlin and H Pitsch. Large-eddy simulation of an evaporating and reacting spray. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, pages 479–490, 2008.
- [115] A. Lefebvre. *Atomization and sprays*, volume 1040. CRC press, 1988.
- [116] A. H. Lefebvre. *Gas turbine combustion*. CRC press, 1998.
- [117] J.P. L gier, T Poinso, and D Veynante. Dynamically thickened flame les model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the summer program*, pages 157–168. Citeseer, 2000.
- [118] T. Leung, N. Swaminathan, and P. A. Davidson. Geometry and interaction of structures in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 710 :453–481, August 2012.
- [119] G. Linassier. * tude exp rimentale et num rique de l’allumage des turbor acteurs en conditions de haute altitude*. PhD thesis, ISAE Toulouse, 2012.
- [120] G. Lodier. Analyse de l’initiation et du d veloppement de l’auto-inflammation apr s compression rapide d’un m lange turbulent r actif : Application au contexte CAI/HCCI. 2013.
- [121] T. Lu and C. K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :1333–1341, 2005.
- [122] O. Lucca-Negro and T. O’doherly. Vortex breakdown : a review. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27(4) :431–481, 2001.
- [123] J. Luche. *Obtention de mod les cin tiques r duits de combustion-Application   un m canisme du k ros ne*. PhD thesis, Universit  d’Orl ans, 2003.
- [124] H.J. Lugt. The dilemma of defining a vortex. In *Recent developments in theoretical and experimental fluid mechanics*, pages 309–321. Springer, 1979.
- [125] J.L. Lumley. Stochastic tools in turbulence. volume 12. applied mathematics and mechanics. Technical report, DTIC Document, 1970.
- [126] U. Maas and S.B. Pope. Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 103–112. Elsevier, 1992.
- [127] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3-4) :185–205, 1985.
- [128] M. Malandain. ? *Simulation massivement parall le des  coulements turbulents   faible nombre de Mach*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2013.
- [129] D. L. Marchisio, J. T. Piktorna, R. O. Fox, R. D. Vigil, and A. A. Barresi. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5) :1266–1276, 2003.
- [130] W. Meier, P. Weigand, X. Duan, and R. Geisendannerthoben. Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame. *Combustion and Flame*, 150(1-2) :2–26, July 2007.

- [131] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510–524, 2007.
- [132] C. Merlin. *Simulation numérique de la combustion turbulente : Méthode de frontières immergées pour les écoulements compressibles, application à la combustion en aval d'une cavité*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2011.
- [133] P. A. Monkewitz and P. Huerre. Influence of the velocity ratio on the spatial instability of mixing layers. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 25(7) :1137–1143, 1982.
- [134] J. B. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, 2005.
- [135] V. Moureau. *Simulation aux grandes échelles de l'aérodynamique interne des moteurs à piston*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [136] V. Moureau, C. Bérat, and H. Pitsch. An efficient semi-implicit compressible solver for large-eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 226(2) :1256–1270, 2007.
- [137] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(2-3) :141–148, 2011.
- [138] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-PDF modeling. *Combustion and Flame*, 158(7) :1340–1357, July 2011.
- [139] L.J. Muzio and G.C. Quartucy. Implementing nox control : Research to application. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(3) :233–266, 1997.
- [140] T. Nabil, W. A. Kareem, S. Izawa, and Y. Fukunishi. Extraction of coherent vortices from homogeneous turbulence using curvelets and total variation filtering methods. *Journal of Turbulence*, 57 :76–86, January 2000.
- [141] R. A. Nicolaides. Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(2) :355–365, 1987.
- [142] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [143] N. A. Okong'o and J. Bellan. Consistent large-eddy simulation of a temporal mixing layer laden with evaporating drops. part 1. direct numerical simulation, formulation and a priori analysis. *Journal of Fluid Mechanics*, 499 :1–47, 2004.
- [144] M. Orain, F. Grisch, E. Jourdanneau, B. Rossow, C. Guin, and B. Trétout. Simultaneous measurements of equivalence ratio and flame structure in multipoint injectors using plif. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6) :373–384, 2009.
- [145] R. K. Otnes and L. Enochson. *Applied time series analysis*, volume 1. Wiley New York, 1978.
- [146] P. Palies. Dynamique et instabilités de combustion des flammes swirlées. pages 1–288, 2010.
- [147] F. Pecquery. *Développement d'un modèle numérique de prédiction des émissions d'oxydes d'azote pour la simulation aux grandes échelles de chambres de combustion aéronautiques*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2013.
- [148] P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 154(1) :67–81, 2008.
- [149] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge university press, 2000.
- [150] N. Peters and B. Rogg. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*. Springer Science & Business Media, 1993.
- [151] B. Pierce, P. Moin, and T. Sayadi. Application of vortex identification schemes to direct numerical simulation data of a transitional boundary layer. *Physics of Fluids (1994-present)*, 25(1) :015102, 2013.

- [152] C.D. Pierce and P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504 :73–97, 2004.
- [153] H. Pitsch. A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143(4) :587–598, 2005.
- [154] H. Pitsch. Large-eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 38 :453–482, 2006.
- [155] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. 2011.
- [156] S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge university press, 2000.
- [157] T. Providakis, L. Zimmer, P. Scoufflaire, and S. Ducruix. Characterization of the coherent structures in swirling flames stabilized in a two-staged multi-injection burner : Influence of the staging factor. *Comptes Rendus Mécanique*, 341(1) :4–14, 2013.
- [158] W.E. Ranz and W.R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog*, 48(3) :141–146, 1952.
- [159] L. Rayleigh. The explanation of certain acoustic phenomena. *Nature*, 1878.
- [160] W. H. Raymond. High-order low-pass implicit tangent filters for use in finite area calculations. *Monthly weather review*, 116(11) :2132–2141, 1988.
- [161] W. H. Raymond and A. Garder. A Review of Recursive and Implicit Filters. *Monthly weather review*, 119(2) :477–495, February 1991.
- [162] J. Reveillon and F. X. Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583 :273–302, 2007.
- [163] O. Reynolds. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Proceedings of the royal society of London*, 35(224-226) :84–99, 1883.
- [164] L.F. Richardson. The supply of energy from and to atmospheric eddies. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, pages 354–373, 1920.
- [165] N. K. Rizk and A. H. Lefebvre. Internal flow characteristics of simplex swirl atomizers. *Journal of Propulsion and Power*, 1(3) :193–199, 1985.
- [166] S. Roux. *Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion : application à des foyers aéronautiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2007.
- [167] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, and C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations. *Combustion and Flame*, 141(1-2) :40–54, April 2005.
- [168] C.W. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, and D.S. Henningson. Spectral analysis of nonlinear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 641 :115–127, 2009.
- [169] A. Sadiki, M. Chrigui, J. Janicka, and M.R. Maneshkarimi. Modeling and simulation of effects of turbulence on vaporization, mixing and combustion of liquid-fuel sprays. *Flow, turbulence and combustion*, 75(1-4) :105–130, 2005.
- [170] P. G. Saffman. *Vortex dynamics*. Cambridge university press, 1992.
- [171] P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*, volume 30. Springer, 1998.
- [172] P. Sagaut and R. Grohens. Discrete filters for large eddy simulation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 31(8) :1195–1220, 1999.
- [173] M. Sanjose. *Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2009.
- [174] M. Sanjosé, J.M. Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinso. Fuel injection model for euler-euler and euler-lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(5) :514–529, 2011.

- [175] T. Sarpkaya. On stationary and travelling vortex breakdowns. *Journal of Fluid Mechanics*, 45(03) :545–559, 1971.
- [176] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31(1) :567–603, 1999.
- [177] L. Schiller and Z. Naumann. A drag coefficient correlation. *Vdi Zeitung*, 77(318) :51, 1935.
- [178] P. Schmid. Applications of the dynamic mode decomposition. CTR Summer School Tutorial, 2012.
- [179] P. J. Schmid. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data. *Journal of Fluid Mechanics*, 656 :5–28, 2010.
- [180] P. J. Schmid. Application of the dynamic mode decomposition to experimental data. *Experiments in fluids*, 50(4) :1123–1130, 2011.
- [181] T. Schmitt, A. Sadiki, B. Fiorina, and D. Veynante. Impact of dynamic wrinkling model on the prediction accuracy using the f-tacles combustion model in swirling premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1) :1261–1268, 2013.
- [182] E. Schneider, A. Maltsev, A. Sadiki, and J. Janicka. Study on the potential of bml-approach and g-equation concept-based models for predicting swirling partially premixed combustion systems : Urans computations. *Combustion and Flame*, 152(4) :548–572, 2008.
- [183] K. Schneider, M. Farge, G. Pellegrino, and M.M. Rogers. Coherent vortex simulation of three-dimensional turbulent mixing layers using orthogonal wavelets. *Journal of Fluid Mechanics*, 534 :39–66, 2005.
- [184] K. Schneider and O. V. Vasilyev. Wavelet methods in computational fluid dynamics*. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :473–503, 2010.
- [185] J.M. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, 2010.
- [186] J.A. Sethian and P. Smereka. Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35(1) :341–372, 2003.
- [187] R. Shapiro. Smoothing, filtering, and boundary effects. *Reviews of Geophysics*, 8(2) :359–387, 1970.
- [188] R. Shapiro. Linear filtering. *Mathematics of computation*, 29(132) :1094–1097, 1975.
- [189] D.T. Shouse. Trapped vortex combustion technology. Technical report, MITE Workshop, 2000.
- [190] P. Sierra Sanchez. Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers. 2012.
- [191] O. Simonin, P. Février, and J. Laviéville. On the spatial distribution of heavy-particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos*. *Journal of Turbulence*, 3(1) :1–40, 2002.
- [192] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 2010.
- [193] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures. part i : Coherent structures. *Quarterly of applied mathematics*, 45(3) :561–571, 1987.
- [194] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : I. the basic experiment. *Monthly weather review*, 91(3) :99–164, 1963.
- [195] R. G. Smith and R. Davis. Frameworks for cooperation in distributed problem solving. *Systems, Man and Cybernetics*, 11(1) :61–70, 1981.
- [196] P.R. Spalart. Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $\tau\theta = 1410$. *Journal of Fluid Mechanics*, 187 :61–98, 1988.
- [197] D.B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Symposium (international) on combustion*, volume 4, pages 847–864. Elsevier, 1953.
- [198] A. M. Steinberg, I. Boxx, M. Stöhr, W. Meier, and C. D. Carter. Effects of flow structure dynamics on thermoacoustic instabilities in swirl-stabilized combustion. *AIAA journal*, 50(4) :952–967, 2012.

- [199] M. Stöhr, I. Boxx, C. Carter, and W. Meier. Dynamics of lean blowout of a swirl-stabilized flame in a gas turbine model combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2953–2960, 2011.
- [200] M. Stöhr, I. Boxx, C. D. Carter, and W. Meier. Experimental study of vortex-flame interaction in a gas turbine model combustor. *Combustion and Flame*, 159(8) :2636–2649, August 2012.
- [201] M. Stöhr, R. Sadanandan, and W. Meier. Phase-resolved characterization of vortex–flame interaction in a turbulent swirl flame. *Experiments in Fluids*, 51(4) :1153–1167, June 2011.
- [202] N. Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2) :93–161, January 2006.
- [203] N. Syred and J.M. Beer. Combustion in swirling flows : a review. *Combustion and Flame*, 23(2) :143–201, 1974.
- [204] N. Syred, C. Wong, V. Rodriguez-Martinez, J. Dawson, and R. Kelso. Characterisation of the occurrence of the precessing vortex core in partially premixed and non-premixed swirling flow. 2004.
- [205] A. Tagliasacchi, H. Zhang, and D. Cohen-Or. Curve skeleton extraction from incomplete point cloud. In *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, volume 28, page 71. ACM, 2009.
- [206] Q. Tang, J. Xu, and S.B. Pope. Probability density function calculations of local extinction and no production in piloted-jet turbulent methane/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :133–139, 2000.
- [207] F. O. Thomas and V. W. Goldschmidt. Structural characteristics of a developing turbulent planar jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 163 :227–256, 2 1986.
- [208] H. A. Van der Vorst. Parallel iterative solution methods for linear systems arising from discretized pde's. *Special course on parallel computing in CFD*, pages 1–39, 2001.
- [209] J.A. Van Oijen and L.P.H. Goey. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161 :113–137, 2000.
- [210] S. Vantiegheem. *Numerical simulations of quasi-static magnetohydrodynamics using an unstructured finite volume solver : development and applications*. PhD thesis, Universite Libre de Bruxelles, 2011.
- [211] L. Vervisch, P. Domingo, G. Lodato, and D. Veynante. Scalar energy fluctuations in large-eddy simulation of turbulent flames : Statistical budgets and mesh quality criterion. *Combustion and Flame*, 157(4) :778–789, 2010.
- [212] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet-flame. *Journal of turbulence*, 5 :1–8, 2004.
- [213] P. Vervisch. *Modélisation des oxydes d'azote et des suies dans les moteurs Diesel*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2012.
- [214] D. Veynante and R. Knikker. Comparison between les results and experimental data in reacting flows. *Journal of Turbulence*, (7), 2006.
- [215] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in energy and combustion science*, 28(3) :193–266, 2002.
- [216] R. Vichnevetsky and J. B. Bowles. *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*, volume 5. Siam, 1982.
- [217] A. Vié. *Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2010.
- [218] B. Vonnegut. A vortex whistle. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 26(1) :18–20, 1954.
- [219] B. Wang. Inter-phase interaction in a turbulent, vertical channel flow laden with heavy particles. part i : Numerical methods and particle dispersion properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(11) :2506–2521, 2010.
- [220] G. Wang, M. Boileau, and D. Veynante. Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158(11) :2199–2213, 2011.

- [221] C.R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *The journal of chemical physics*, 18(4) :517–519, 1950.
- [222] C. G. Willcocks and F. W. B. Li. Feature-varying skeletonization. *The Visual Computer*, 28(6-8) :775–785, 2012.
- [223] F.A. Williams. Turbulent combustion. *the Mathematics of combustion*, 2 :267–294, 1985.
- [224] A. Wulff and J. Hourmouziadis. Technology review of aeroengine pollutant emissions. *Aerospace science and technology*, 1(8) :557–572, 1997.
- [225] J. Xu and S.B. Pope. Pdf calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction. *Combustion and Flame*, 123 :281–307, 2000.
- [226] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 27–34. Elsevier, 1996.
- [227] J. T. Yang, A. C. Chen, S. H. Yang, and K. J. Huang. Flow analysis of spray patterns of pressure-swirl micro atomizers. *Proceedings of PSFVIP-4*, 2003.
- [228] T. Yuu, S. and Ueno and T. Umekage. Numerical simulation of the high reynolds number slit nozzle gas–particle jet using subgrid-scale coupling large eddy simulation. *Chemical Engineering Science*, 56(14) :4293–4307, 2001.
- [229] D. Zeldovich, Y.A. and Frank-Kamenetskii and P. Sadvnikov. *Oxidation of nitrogen in combustion*. Publishing House of the Acad of Sciences of USSR, 1947.
- [230] J. Zhou, R.J. Adrian, S. Balachandar, and T.M. Kendall. Mechanisms for generating coherent packets of hairpin vortices in channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 387 :353–396, 1999.