Simulation DNS de l'interaction flamme-paroi dans les moteurs à allumage commandé

Benoît Leveugle

▶ **To cite this version:**

Benoît Leveugle. Simulation DNS de l'interaction flamme-paroi dans les moteurs à allumage commandé. Autre [cond-mat.other]. INSA de Rouen, 2012. Français. NNT : 2012ISAM0021 . tel-00845226

HAL Id: tel-00845226

https://theses.hal.science/tel-00845226

Submitted on 16 Jul 2013

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 à la

Faculté des Sciences & Techniques de l'Université de Rouen

en vue de l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Rouen

Discipline : Sciences physiques

Spcialité : Mécanique des Fluides, Numérique et Énergétique

par

Benoît LEVEUGLE

Simulation DNS de l'interaction flamme-paroi dans les moteurs à allumage commandé

Thèse soutenue le 13/12/2012

Devant le jury composé de :

M. Bellenoue	Professeur ENSMA-ISAE, Poitiers	
Y. D'Angelo	Professeur des Universités, CORIA, Rouen	Directeur
C. Galizzi	Maître de Conférences INSA, CETHIL, Lyon	
V. Louvet	Ingénieur de Recherche, INRIA NUMED, Lyon	
A. Mura	Chargé de Recherche, ENSMA, Poitier	Rapporteur
J. Reveillon	Professeur des Universités, CORIA, Rouen	Co-Directeur
K. Truffin	Ingénieur de Recherche, IFPen, Rueil-Malmaison	
A. Sadiki	Professeur Technische Universität, Darmstadt	Rapporteur

Table des matières

1 Équations et théorie **21**

1.1 Introduction . . . 22

1.2 Équations résolues par le code Asphodele . . . 23

1.2.1 Équations de Navier Stokes . . . 23

1.2.2 Normalisation/Adimensionnement . . . 24

1.2.2.1 Loi d'état . . . 25

1.2.2.2 Vitesses de correction : . . . 25

1.2.2.3 Conservation de la masse : . . . 26

1.2.2.4 Conservation de la quantité de mouvement : . . . 26

1.2.2.5 Conservation des espèces : . . . 26

1.2.2.6 Conservation de l'énergie sensible : . . . 27

1.2.3 Approximation à bas nombre de Mach . . . 27

1.2.4 Équation de Poisson . . . 29

1.2.5 Le code Asphodele . . . 30

1.3 Simulations Lagrangiennes . . . 32

1.3.1 Approches de calcul . . . 32

1.3.2 Loi d'évolution du mouvement . . . 33

1.3.2.1 Transfert de masse . . . 34

1.3.2.2 Transfert d'énergie . . . 35

1.3.3 Lois d'évaporation . . . 36

1.3.3.1 Loi du d^2 . . . 37

1.3.3.2 Loi complète, par la relation de Clausius-Clapeyron . . . 38

1.3.3.3 Loi simplifiée dépendant de la température . . . 39

1.4 Chimie . . . 41

1.4.1 Réaction étudiée . . . 41

1.4.1.1 Espèces en jeux . . . 41
1.4.1.2 Thermochimie . . . 42
1.4.2 Modélisation . . . 44
1.4.2.1 Chimie complexe . . . 44
1.4.2.2 Principe . . . 45
1.4.2.3 Thermodynamique . . . 45
1.4.2.4 Taux de réaction . . . 46
1.4.2.5 Réaction inverse . . . 47
1.4.2.6 Chimie simple . . . 48
1.5 Solveur Elliptique . . . 50
1.5.1 Introduction . . . 50
1.5.2 Construction de la matrice . . . 51
1.5.3 Conditions aux limites . . . 52
1.5.4 Méthodes itératives . . . 55
1.5.4.1 Gradient Conjugué . . . 55
1.5.4.2 Gradient Conjugué Pré-conditionné . . . 57
1.5.4.3 BICGSTAB . . . 58
1.5.4.4 BICGSTAB(2) . . . 60
1.5.5 Pré-conditionnement multi-grid . . . 62
1.5.5.1 La méthode en bigrid, principe de base . . . 64
1.5.5.2 Red Black Gauss-Seidel . . . 65
1.5.5.3 Geometric multi-grid . . . 67
1.5.5.4 Algorithme final . . . 69
1.6 Turbulence et injection turbulente . . . 72
1.6.1 Transformée de Fourier . . . 72
1.6.2 Turbulence et grandeurs caractéristiques . . . 73
1.6.3 Injection turbulente parallèle . . . 75

2 Méthodes numériques 81
2.1 Introduction . . . 82
2.2 Notions et vocabulaire . . . 82
2.3 Optimisations scalaires . . . 85
2.4 Parallélisation du code . . . 95
2.4.1 Introduction à la notion de calcul parallèle . . . 95

2.4.2 MPI 96
2.4.3 Implémentation au sein d'Asphodele : 98
2.4.4 Poisson : 100
2.4.5 Performances du code 104

3 Interaction d'une flamme gazeuse avec la paroi 107
3.1 Introduction et état de l'art 108
3.1.1 Etat de l'art de l'interaction flamme-paroi 108
3.1.2 Impact de la chimie et de la température du mur 111
3.2 Configuration de test, cas 1D 111
3.2.1 Nombre de Peclet 112
3.2.2 Flux thermique 115
3.3 Objectifs et configuration 116
3.3.1 Configuration étudiée 117
3.4 Modélisation 118
3.4.1 Lois de paroi 118
3.4.2 Le modèle LnKC 121
3.4.3 Loi pour écoulement réactif 123
3.4.4 Modèle Alpha 124
3.4.5 Passage DNS à RANS 128
3.5 Cas 2D laminaire : 132
3.5.1 Grandeurs d'écoulement transverse 132
3.5.2 Grandeurs d'interaction longitudinale 133
3.6 Cas 2D turbulent 139
3.6.1 Vérifications des hypothèses 139
3.6.2 Grandeurs d'interaction longitudinale 140
3.7 Cas 3D turbulent 149
3.7.1 Vérification des profils transverses 149
3.7.2 Profils longitudinaux, modèle alpha 151
3.7.3 Conclusion 160

4 Dispersion en température d'un spray 162

5 Interaction d'une flamme lagrangienne avec la paroi 163
5.1 Etude bibliographique 164

5.2 Etude DNS 165
5.3 Étude longitudinale 166
5.3.1 Évolution de la distance à la paroi 166
5.3.2 Évolution du flux à la paroi (DNS et modèle) 170
5.4 Étude visualisation 2D 174
5.4.1 Pénétration du front de flamme 174
5.4.2 Flamme de Diff/Pre 176
5.5 Modèle d'interaction 182
5.5.1 Flux longitudinaux 182
5.5.2 Flux longitudinaux 185
5.6 Conclusion 187
6.1 Annexe A, normalisation des équations de NS 191
6.1.0.1 Loi d'état 191
6.1.0.2 Vitesses de correction : 192
6.1.0.3 Conservation de la masse : 192
6.1.0.4 Conservation de la quantité de mouvement : 193
6.1.0.5 Conservation des espèces : 194
6.1.0.6 Conservation de l'énergie sensible : 195
6.2 Annexe B : Calcul des coefficients du DF4 197

Table des figures

1 Interactions et échanges au sein du projet INTERMAC 14
2 Configurations rencontrées au sein d'un MAC [Benteboula 2006] 15
3 Comparaison des flux totaux utilisant le modèle d'interaction alpha 18
4 Intégration spatiale des 3 modèles, comparaison avec le flux DNS dans une situation à l'échelle RANS 19
5 Comparaison pour une même configuration de deux approches différentes : une approche Lagrangienne (a) et une approche Eulérienne (b) 19
6 Valeurs pour $\tau_v = 0.5$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible) 20

1.1 Logo utilisé pour la version MPI du code 31
1.2 Évolution de la concentration autour d'une goutte, évaporation [Borghi, Champion, 2000] 37
1.3 Réaction globale du propane avec de l'air, dégagement d'énergie 41
1.4 Apparition de la dissymétrie dans la matrice, conditions de Neumann homogène $\frac{\partial P}{\partial x} = 0$ 53
1.5 Traitements spécifiques sur la matrice de Poisson, cas des coins (corners) et des arêtes (edges) 55
1.6 Principe du multi-grid, Lissage des basses fréquences 63
1.7 Méthode du Bigrid, principe de base à étendre sur plus de niveaux 65
1.8 Méthode du Red-Black Gauss-Seidel, principe du calcul par couleurs 67
1.9 Principe de répartition du maillage, Geometric multi-grid 69
1.10 Opérations de changement de grilles, interpolation et restriction 71
1.11 Injection 2D générée par la méthode de Kraichnan-Celik, champ de vitesse $u = u_1 + u_2$ 80

1.12 Injection 3D générée par la méthode de Kraichnan-Celik, champ de vitesse $u = u_1 + u_2$ 80

2.1 Architecture d'une machine locale, socket X58 pour Intel Nehalem avec chipset LGA 1366 (source x86-secret.com) 84
2.2 Optimisation performante à l'aide des outils GnuGCC, Valgrind et Kcachegrind, tous open source 87
2.3 Optimisation du cache L3, réorganisation des opérations de calculs 89
2.4 Temps de latence et débits pour les différents niveaux de mémoire (prendre le plus contraignant entre deux niveaux) 90
2.5 Accélération d'une opération redondante à l'aide des unités SIMD (**Single Instruction, Multiple DATA**) 92
2.6 Micro Architecture d'un coeur Sandy Bridge, mise en évidence des SIMD et des AVX 93
2.7 Principe du calcul parallèle, exemple concret 96
2.8 Découpage cartésien et organisation MPI cartésienne 98
2.9 Dérivation MPI, principe des communications 99
2.10 Latences de la communication AllReduce en fonction de la taille du message à envoyer [Myricom 2006] 101
2.11 Latences de la communication AllGather en fonction de la taille du message à envoyer [Myricom 2006] 102
2.12 Optimisation sur le multigrid, forte amélioration de la convergence 103
2.13 StrongScaling 105
2.14 WeakScaling 106

3.1 Représentation du raisonnement effectué sur le modèle IFPen. Les valeurs comparées sont en bleu. 109
3.2 Configuration 1D et évolution du front de flamme au cours du temps 112
3.3 Distance flamme/paroi au cours du temps 112
3.4 Flux thermique à la paroi au cours du temps 113
3.5 Evolution des nombres de Peclet au cours du temps 114
3.6 Hypothèse de linéarité du profil de température dans la zone de coincement . . . 115
3.7 Similarité entre l'inverse du flux adimensionné et du nombre de Peclet, en particulier durant l'interaction 116
3.8 Configuration 2D étudiée 117

3.9 Interpolation temporelle du champ de vitesse du canal de pré-calcul, profil de couche limite turbulente établie 118
3.10 Principe des lois de parois avec le modèle k-epsilon [K. Truffin et al] 119
3.11 Surface de flamme réactive interagissant avec la paroi : La surface de flamme totale A_{tot} est la somme de 3 composantes : A_R^I la surface de flamme interagissant avec la paroi, A_R^{NI} la surface de flamme non interagissant, A_{NR} la surface non réactive après coincement. D'après [Truffin et al. 2012] 125
3.12 Surface de flamme réactive interagissant avec la paroi. D'après [Truffin et al. 2012] 126
3.13 Principe d'utilisation des boîtes (Box) et des segments (Seg) 129
3.14 Profils d'η^+ intégré et modélisé avant (pre), durant (-), et après (post) l'interaction 132
3.15 Profil 2D du front de flamme laminaire, Taux de réaction 133
3.16 Distance du front de flamme à la paroi et Peclet correspondant 133
3.17 Angle du front de flamme par rapport à la paroi (en degrés) 134
3.18 Flux de chaleur à la paroi, pic d'interaction 135
3.19 Profils de vitesse longitudinaux, et profil de vitesse pariétale. 136
3.20 Profil longitudinal du taux de réaction, mise en évidence de l'extinction 136
3.21 Profil longitudinal du taux de réaction, mise en évidence de l'extinction 137
3.22 Profil longitudinal des paramètres du modèle alpha 138
3.23 Flux longitudinal avec prise en compte du modèle complet 138
3.24 Profil 2D du taux de réaction instantané, échelle en m 139
3.25 Profils transverses de la couche limite turbulente (moyenne temporelle peu convergée) ainsi que des modèles usuels (équations 3.18 et 3.19) 140
3.26 Impact final de l'hypothèse posée sur η^+ (équation 3.23) 140
3.27 Évolution longitudinale du nombre de Peclet pour le cas 2D turbulent 141
3.28 Angle moyen du front de flamme turbulent par rapport à la paroi 142
3.29 Profil 2D du champs de vitesse convective moyen, échelle de référence ($m.s^{-1}$) . 142
3.30 Profil 2D du champs de vitesse transversale moyen, échelle de référence ($m.s^{-1}$) 142
3.31 Profils de vitesses et de vitesse pariétale en régime turbulent 143
3.32 Profil 2D du taux de réaction moyen (échelle en m) 143
3.33 Taux de réaction moyen du front de flamme turbulent 144
3.34 Profil 2D de $\tilde{T}$ moyen, échelle de référence ($m.s^{-1}$) 144
3.35 Profils moyens d'Alpha, Q et Plissement en régime turbulent 145
3.36 Flux du modèle alpha, sans prise en compte du plissement 146
3.37 Flux du modèle alpha, avec prise en compte du plissement 147

3.38 Flux du modèle alpha, version intégrée à LnKC 147
3.39 Flux moyens intégrés sur la longueur du domaine (type RANS), comparaison avec le flux de référence 148
3.40 Profil de ψ^+ avant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42) 150
3.41 Profil de ψ^+ pendant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42) 150
3.42 Profil de ψ^+ après l'interaction, comparaison avec les équations (3.42) 151
3.43 Profil de θ^+ pendant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42) 152
3.44 Profil de θ^+ après l'interaction, comparaison avec les équations (3.42) 152
3.45 Distance flamme paroi pour le cas 3D 153
3.46 Grandeurs thermodynamiques et variable d'avancement, cas 3D 154
3.47 Comparaison des grandeurs liées $1 - Y_F/Y_F^0$ et $1 - \delta/h$, mise en évidence de la décroissance de l'intensité turbulente 154
3.48 Vitesses et vitesse tangentielle, cas 3D 155
3.49 Angle du front de flamme, convergence vers une flamme parallèle à la paroi, cas 3D 156
3.50 Variables du modèle d'interaction : α, Q et Ξ, cas 3D 156
3.51 Flux de chaleur, total et interagissant 158
3.52 Comparaison des flux d'interaction 158
3.53 Comparaison des flux totaux utilisant le modèle d'interaction alpha 159
3.54 Intégration spatiale des 3 modèles, comparaison avec le flux DNS dans une situation à l'échelle RANS 160
3.55 Rendu 3D d'un champ instantané. Vitesse U en couleur, Front réactif en noir. . 161

5.1 Évolution de la concentration autour d'une goutte, évaporation puis combustion [Borghi, Champion, 2000] 164
5.2 Combustion d'une goutte isolée en micro-gravité [O'Malley, Weiland, 2004] . . . 165
5.3 Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.1$ fixé 167
5.4 Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.5$ fixé 168
5.5 Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.9$ fixé 168
5.6 Nombre de Peclet pour $\tau_p = 0.5$ fixé 169
5.7 Nombre de Peclet pour $\tau_p = 0.9$ fixé 169
5.8 Représentation 3D des Peclets minimums, mise en valeur de la forme en V . . . 170
5.9 Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.1$ fixé 171
5.10 Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.5$ fixé 172

5.11 Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.9$ fixé 172
5.12 Flux à la paroi pour $\tau_p = 0.5$ fixé 173
5.13 Flux à la paroi pour $\tau_p = 0.9$ fixé 173
5.14 Représentation 3D des Flux maximums, mise en valeur de la forme en V 174
5.15 Valeurs pour $\tau_v = 0.1$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible) 175
5.16 Valeurs pour $\tau_v = 0.5$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible) 175
5.17 Valeurs pour $\tau_v = 0.9$ et $\tau_p = 0.9$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible) 176
5.18 Coupe sur le front de flamme, mise en valeur des 3 zones réactives. Champ : indice de Takeno ξ. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible) 176
5.19 Tracé des paramètres de régime de flamme le long de la coupe (fig 5.18) 177
5.20 Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.1$ et différentes valeurs de τ_p 184
5.21 Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.5$ et différentes valeurs de τ_p 184
5.22 Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.9$ et différentes valeurs de τ_p 185
5.23 Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.1$ et différentes valeurs de τ_p 186
5.24 Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.5$ et différentes valeurs de τ_p 186
5.25 Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.9$ et différentes valeurs de τ_p 187

"Ad accedendum ad caelum, terram fodere opportet."

(il faut fouiller terre pour accéder ciel)

†

A André, érudit et grand gamin, ami perdu au cours de ma thèse, qui avait comprit que la vie réside dans le sourire de l'autre.

Introduction Générale

INTERMAC

Devenue l'un des piliers de la politique actuelle et des enjeux économiques, l'environnement est au centre des préoccupations d'avenir et des avancés de la recherche. Dans ce contexte de crise énergétique, l'optimisation des rendements est un souci partagé par l'ensemble des constructeurs automobiles, ainsi que par tous les utilisateurs de systèmes basés sur la combustion d'hydrocarbures.

Dans les MAC (Moteurs à Allumage Commandé), la flamme est susceptible d'atteindre la paroi dès que 30% de la charge est consommée, se traduisant par une proportion élevée de combustible brûlant en proche paroi [Heywood 1988].
La réduction des taux admis par les normes européennes, ainsi que l'apparition de nouvelles technologies de rendement tels le downsizing et l'augmentation du taux de compression augmentant le ratio surface/volume des chambres de combustion, ont accru le besoin d'améliorer la modélisation de l'interaction/flamme paroi par des expressions plus pertinentes et adéquates [Leduc et al. 2003].

Dans le cadre du projet INTERMAC (INTERaction dans les Moteurs à Allumage Commandé), la tâche du CORIA consiste à produire une base de données à l'échelle RANS (provenant de données DNS) afin de tester, valider et modifier le modèle d'interaction développée par IFPen. Ce modèle vise l'ajout d'une composante d'interaction, phénomène non pris en compte par les lois de paroi actuelles.

Ce projet repose sur l'interaction forte entre les différents protagonistes présents (fig 1). Le CORIA et le CETHIL ont travaillé ensemble à la réalisation d'une base de données, les données

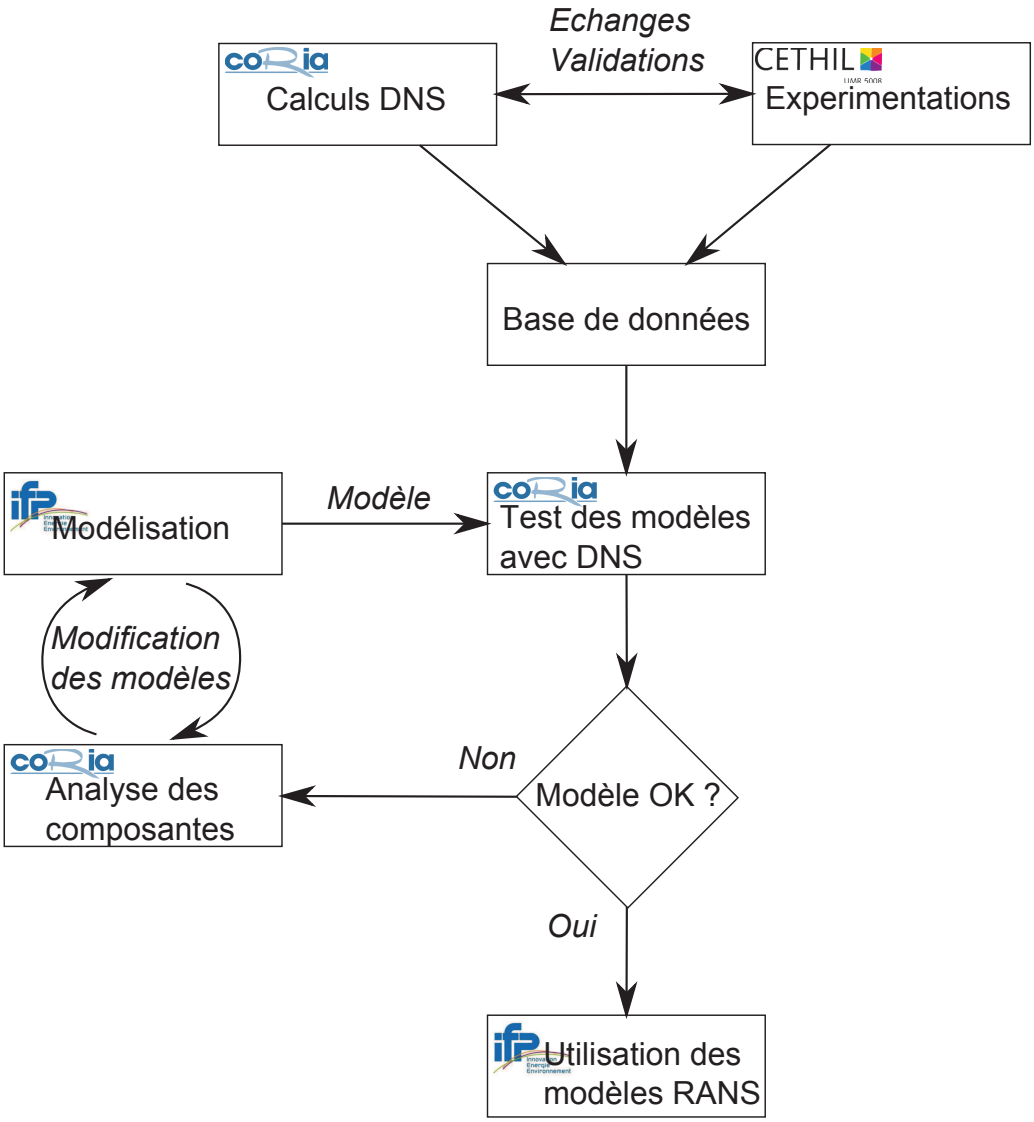


FIGURE 1 – Interactions et échanges au sein du projet INTERMAC

expérimentales servant aussi à valider les résultats du code DNS.
Le CORIA a ensuite utilisé cette base de données pour tester les modèles initiaux proposés par IFPEn, puis en fonction des résultats obtenus, a itéré avec IFPEn pour modifier et améliorer les modèles. Ces tests ont inclus des simulations 2D laminaires, 2D turbulentes, et 3D turbulentes.

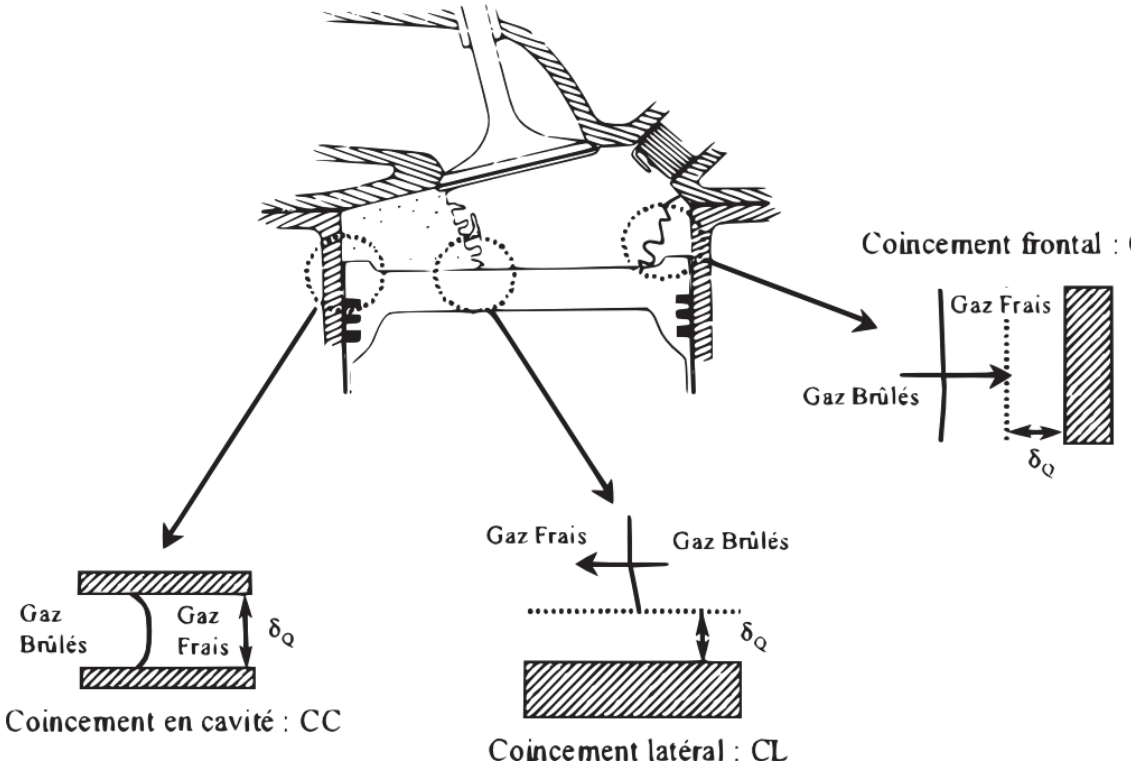


FIGURE 2 – Configurations rencontrées au sein d'un MAC [Benteboula 2006]

La combustion dans un MAC (en fonctionnement homogène) se répartie en quatre étapes : initiation de la combustion à la bougie, croissance du noyau de flamme laminaire, transition vers une flamme turbulente puis extinction au voisinage des parois. La flamme avant l'interaction avec la paroi est donc essentiellement turbulente.

INTERACTION

En général, il est usuel de distinguer 3 types d'interactions distinctes (fig 2) :

- Le coincement frontal (ou Head on Quenching HOQ) : la flamme se propage dans les gaz frais et impacte frontalement la paroi.
- Le coincement latéral (ou Side on Quenching SOQ) : la flamme se propage le long de la paroi et interagit en continu.

– Le coincement cavitaire (ou Crevice Quenching) : la flamme se propage dans une cavité suffisamment étroite pour voir sa courbure continue. Elle interagit sur toute la longueur. Si la cavité est trop étroite, l'interaction provoque l'extinction du front de flamme.

Dans un cas de test classique type HOQ laminaire, l'interaction entre la flamme et la paroi peut être décomposée en 3 étapes (fig 3.3) :

– Le front de flamme consume les gaz frais (à la température T^0, à la fraction massique de fuel Y_F^0) et se propage dans le domaine libre tout en se rapprochant de la paroi froide (à la température T_w). La flamme se propage à la vitesse de flamme laminaire S_L^0.
– La flamme atteint la paroi à la distance de coincement finie δ_Q. L'épaisseur thermique de la flamme atteint la paroi, et le flux généré par cette interaction, de l'ordre du $MW.m^{-2}$ pendant quelques millisecondes, provoque la diminution puis l'extinction du front de flamme. La distance flamme/paroi est minimale et le flux de chaleur absorbé par le mur q_w est maximum (fig 3.4). Ce flux bref et intense provoque une importante fatigue des matériaux de la paroi et peut provoquer l'usure prématurée du moteur.
– La réaction chimique a très fortement diminué, laissant une couche d'imbrûlés entre la paroi et la distance de coincement. Chaleur et espèces diffusent.

La présence d'imbrûlés et d'un flux thermique à la paroi impactent le rendement énergétique global du moteur. Les situations HOQ et SOQ sont les plus représentatives de l'interaction d'une flamme avec les surfaces de la chambre de combustion.

Travaux réalisés

Dans un contexte de crise énergétique majeur, la recherche de l'optimum et de l'efficience revient sur le devant de la scène. Il était hier possible de brûler du combustible sans se soucier des conséquences environnementales, d'exécuter des calculs sans imaginer l'impact sur la consommation des calculateurs, de concevoir des moteurs dans un alliage résistant sans en optimiser au préalable les coûts. La flambée des prix du combustible et des matières premières, l'augmentation des gaz à effets de serre, et la disparition des ressources primaires au profit d'énergies instables ou peu rentables, obligent à une nouvelle vision ainsi qu'à la responsabilité de chacun.

Le travail de cette thèse a entièrement été consacré à la recherche de l'efficacité, en terme d'impact physique avec les études du projet ANR INTERMAC et du projet ANR SIGLE, ou en terme d'impact sur les études elles mêmes avec l'amélioration des performances de calculs.

Le projet INTERMAC, visant la validation d'un modèle et l'amélioration des calculs RANS de l'interaction proche paroi dans les moteurs à allumage commandé, met en avant l'impact significatif du front réactif sur les flux pariétaux locaux, directement lié au stress des matériaux. Cette étude a été menée en collaboration avec IFPen et le CETIL, afin de croiser résultats expérimentaux, résultats de simulation numérique directe, et résultats modélisés.

Le projet SIGLE, visant à la validation d'un modèle eulérien par l'utilisation de simulations lagrangiennes, permet l'utilisation future de simulations LES de jets diphasiques froids, afin notamment de diminuer les temps de calculs de futurs études à l'échelle industrielle.

Le développement continu du code de calcul, ainsi que l'optimisation des performances et la parallélisation, a permis de réaliser ces études malgré la faible disponibilité des ressources de calcul, et à fortement impacté l'efficacité énergétique de la présente et des futures études.

La première partie de ce document sera dédiée aux aspects théoriques et numériques de l'étude, à savoir :

- dans un premier chapitre les équations et hypothèses du code de calcul avec les équations de Navier-Stokes ainsi que la présentation du code de calcul utilisé
- l'aspect théorique du suivi lagrangien pour la résolution de l'interaction entre les particules et le fluide
- les calculs de la chimie régissant le phénomène de combustion
- les algorithmes utilisés pour résoudre l'équation de Poisson ainsi que la démarche de recherche de ces méthodes
- la technique d'injection turbulente utilisée dans les simulations.

Le seconde chapitre regroupe les techniques de codage et développement utilisées pour décupler les performances et renforcer la stabilité du code de calcul. Les optimisations au niveau algorithmique ont permis des gains significatifs (2.49× par exemple sur les opérations de dérivation (DF4) et de convolution (Poisson) en optimisant l'agencement des calculs) et d'excellentes performances parallèles avec la modification de l'algorithme parallèle du multigrid. Cette dernière optimisation consiste en l'ajout d'une communication collective au sein de

du pré-conditionneur multi-grid afin d'éviter les effets de niveau de grille maximum due à la répartition de la mémoire sur les processeurs. Cette modification permet de retrouver un niveau de parallélisme acceptable là où les codes normaux montrent des performances limitées.
Le troisième chapitre portera sur l'étude réalisée par le CORIA dans le cadre du projet INTERMAC, avec la simulation numérique directe de l'interaction entre une flamme en V dans un canal et la paroi froide. Les données de cette simulation ont permis la validation du modèle développée par IFPen, ainsi que la mise en évidence de l'impact de la prise en compte du flux dans les lois de parois classiques. Le gain apporté est significatif avec comme référence la loi de paroi classique LnKC. Le flux donné par les modèles montre une meilleur restitution du phénomène d'interaction tant en espace (fig 3) qu'une fois intégré sur la longueur (fig 4).

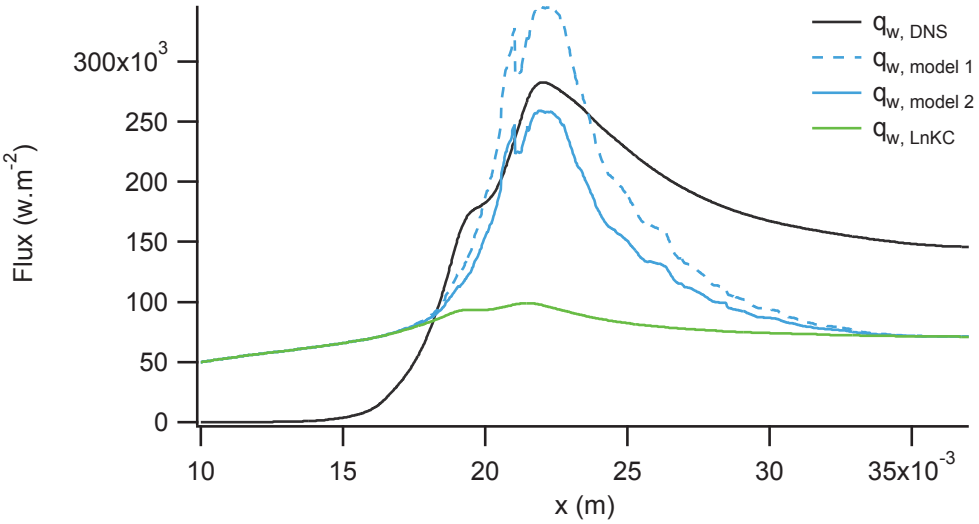


FIGURE 3 – Comparaison des flux totaux utilisant le modèle d'interaction alpha

Le quatrième chapitre sera fourni sous la forme d'une publication, réalisée en partenariat avec l'IFMT de Toulouse dans le cadre du projet SIGLE. L'étude porte sur la validation d'un modèle eulérien développée par l'IMFT en vue de prendre en compte l'impact de la température dans le cas de jets froids. Les calculs réalisés à l'aide de simulations lagrangiennes ont permis la confrontation des résultats et la validation du modèle basé sur le formalisme eulérien mésoscopique (fig 5).

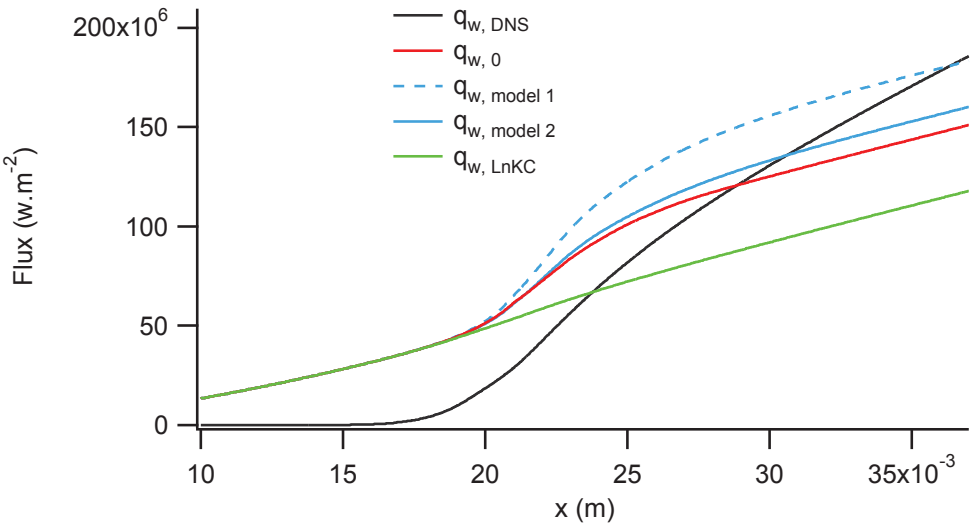


FIGURE 4 – Intégration spatiale des 3 modèles, comparaison avec le flux DNS dans une situation à l'échelle RANS

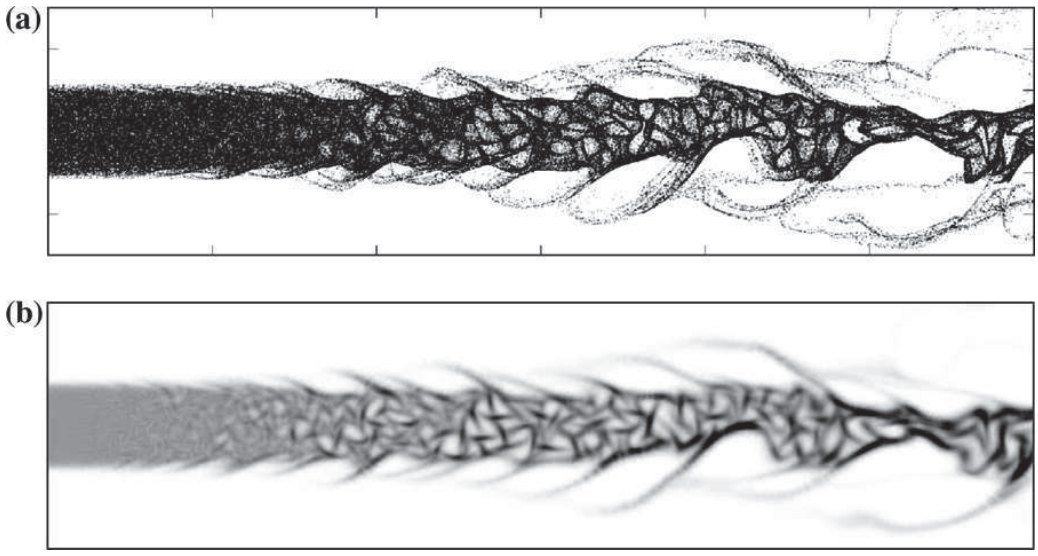


FIGURE 5 – Comparaison pour une même configuration de deux approches différentes : une approche Lagrangienne (a) et une approche Eulérienne (b)

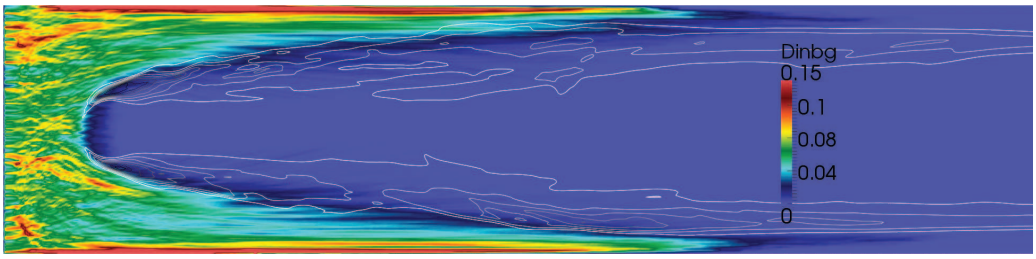


FIGURE 6 – Valeurs pour $\tau_v = 0.5$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible)

Le dernier chapitre regroupera les deux études précédentes avec la simulation de l'interaction flamme/paroi dans le cadre d'une injection sous forme diphasique de combustible liquide, et mettra en évidence l'impact des propriétés de ce dernier sur le flux pariétal ainsi que sur sa composante modélisée. Ce chapitre est un essai pour tester le modèle développé par IFPen, ainsi que visualiser le comportement de la flamme et son impacte sur les grandeurs de l'étude INTERMAC. IL s'agit donc d'une travail non aboutit par manque de temps, mais qui permettra d'ouvrir des pistes pour de futures études, notamment en terme de formation de film liquide à la paroi. Cette étude a permis la mise en évidence de certains phénomènes comme la forte probabilité de formation de film liquide à la paroi (fig 6) ou l'apparition d'un point d'inflexion pour les cas à $\tau_v = 0.5$ lors de l'étude de la distance flamme/paroi ainsi que du flux pariétal. Ces résultats seront utiles à la poursuite d'une étude sur l'interaction diphasique.

Chapitre 1

Équations et théorie

Alors que Surcouf participait à un dîner en présence de ses anciens ennemis britanniques, l'un d'eux lui dit : « Enfin, Monsieur, avouez que vous, Français, vous battiez pour l'argent tandis que nous, Anglais, nous battions pour l'honneur... » Surcouf lui répondit d'un ton calme : « *Certes, Monsieur, mais chacun se bat pour acquérir ce qui lui manque.* »

Surcouf

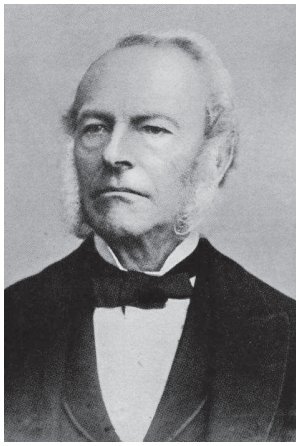
1.1 Introduction

La majeure partie de cette thèse a été dédiée aux calculs numériques sous leur forme la plus précise : les calculs de Simulations Numérique Directe (DNS). Bien que non adaptés à des échelles industrielles, les résolutions DNS permettent une observation des phénomènes localisés de mécanique des fluides et de réactions chimiques, cependant limitée à des domaines de petites dimensions.

Le principe des calculs DNS repose sur de multiples équations et hypothèses qu'il est important d'expliciter en détail. Ce chapitre regroupe l'essentiel des aspects théoriques utilisés par la suite. Dans un premier temps, les équations et grandeurs utilisées au sein du solveur Asphodele seront regroupées et adimensionnées, avant de poser les fondements et les hypothèses des calculs à bas nombre de Mach et de détailler les modèles utilisés pour les simulations lagrangiennes. Dans un second temps, les principes de la chimie concernant l'aspect réactif des simulations de combustion seront abordés. Seront finalement vues les méthodes étudiées et utilisées au cours de cette thèse pour résoudre l'équation de Poisson [1] ainsi que l'injection turbulente dans le domaine.

1. cf champs de pression dynamique P^1, cité dans la première partie de ce chapitre

Claude Louis Marie Henri Navier (1785-1836)



George Gabriel Stokes (1819-1903)

1.2 Équations résolues par le code Asphodele

Les calculs de simulation numérique en mécanique des fluides des milieux réactifs de type DNS font appel au jeu d'équations de Navier-Stokes. Ces équations, bien que relativement complètes, ne suffisent pas à représenter tous les effets présents dans la réalité. Cependant leur implémentation suffit amplement à décrire l'évolution de structures complexes aussi bien aux grandes qu'aux petites échelles de la turbulence.
Il est aussi intéressant de remarquer qu'il n'existe pas de solution analytique générale à ces équations. Elles font parties du lot des **Problèmes du prix du millénaire** qui compte sept défis mathématiques réputés insurmontables, et dont la résolution analytique est récompensée par un prux d'**1 million de dollars** [Problèmes du millénaire].

1.2.1 Équations de Navier Stokes

Ces équations, couramment utilisées au sein du monde industriel et de la recherche, sont à la base de tous calculs réalisés au sein de cette thèse. Leur forme générale est donnée si dessous (avec la notation d'Einstein) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + V_i^C) Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i}\right] + \dot{\omega}_k \tag{1.2}$$

$$\frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + E_i^C) e_{su}}{\partial x_i} = -\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{es} \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \tag{1.4}$$

Avec, en supposant l'hypothèse de Stokes [Chandrasekhar 1961] :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \tag{1.5}$$

Avec u_i la vitesse suivant i, Y_k la concentration massique de l'espèce k, e_{su} l'énergie interne du fluide par unité de masse, p la pression et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses.
Afin d'améliorer les performances du code de calcul (notamment en termes de précision numérique) et de faciliter l'exploitation des résultats, les équations de Navier-Stokes utilisées au sein du code Asphodele sont adimensionnées.

1.2.2 Normalisation/Adimensionnement

Dans la suite de ce document, lorsque cela sera nécessaire et signalé, les variables adimensionnées seront marquées par un signe plus : $.^+$, et les grandeurs dimensionnées resteront sans symbole particulier. Par exemple : $x = x_0 x^+$ avec x la valeur dimensionnée en $m.s^{-1}$, x_0 la valeur dimensionnée de référence en $m.s^{-1}$, et x^+ la valeur adimensionnée et donc sans dimension. Il est à noter que les grandeurs thermodynamiques de référence sont pour leur part symbolisées par l'indice "∞" : T_∞, ρ_∞,... afin de souligner que leurs lois d'état peuvent être appliquées hors domaine.

Les grandeurs générales sont données ci-dessous :

$$\begin{aligned} x &= x_0 x^+ & e &= u_0^2 e^+ \\ u &= u_0 u^+ & T &= T_\infty T^+ \\ t &= \tfrac{x_0}{u_0} t^+ & p &= \rho_\infty \tfrac{R}{W_\infty} T_\infty p^+ \\ \rho &= \rho_\infty \rho^+ \end{aligned}$$

Afin de clarifier le texte, les notations suivantes seront adoptées :

$$\lambda^\bullet = \frac{C_p^+ \mu^+}{RePr} \quad , \quad D_k^\bullet = \frac{\mu^+}{\rho^+ ReSc_k} \quad , \quad \mu^\bullet = \frac{\mu^+}{Re} \tag{1.6}$$

1.2.2.1 Loi d'état

La première équation à adimensionner au sein d'un code faisant appel à la thermodynamique des fluides est l'équation d'état, dans notre cas l'équation des gaz parfaits.

La forme initiale donnée précédemment est la suivante :

$$p = \rho \frac{RT}{W}$$

Une fois, adimensionnée (cf Annexe A), l'équation devient :

$$p^+ = \rho^+ \frac{T^+}{W^+} \tag{1.7}$$

1.2.2.2 Vitesses de correction :

Afin d'éviter une non conservation de la masse et de **compenser la disparition numérique** de certaines espèces (notamment lors de chimies rapides), une vitesse de correction des espèces a été implémentée au sein du code Apshodele (une autre possibilité est d'utiliser une espèce tampon capturant les résidus) :

$$V_i^C = \sum_{k=1}^{N_S} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$$

(avec : $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ et $Re_0 = \frac{\rho_\infty u_0 x_0}{\mu_\infty}$)

$$\begin{aligned} V_i^C &= \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu_\infty \mu^+}{\rho_\infty \rho^+ Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_0 x_i^+} = u_0 \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu^+}{\rho^+ ReSc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \\ &= u_0 \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 V_i^{C+} \quad avec \quad V_i^{C+} = \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \end{aligned} \tag{1.8}$$

Sur le même principe, afin de respecter la conservation de l'énergie, une vitesse de correction

de l'énergie est aussi présente au sein de code :

$$E_i^C = \rho \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$$

$$u_0^2 = M^2 \gamma_\infty (Cp_\infty - Cv_\infty) T_\infty = Cp_\infty T_\infty M^2 (\gamma_\infty - 1)$$

$$E_i^C = u_0 \rho_\infty \rho^+ \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 \rho_\infty \rho^+ Cp_\infty T_\infty \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k}^+ D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+}$$

Et donc :

$$E_i^C = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)} \rho^+ \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k}^+ D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)} E_i^{C+} \tag{1.9}$$

1.2.2.3 Conservation de la masse :

En partant de l'équation de la conservation de la masse donnée précédemment :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0$$

Il est possible d'écrire l'équation normalisée :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0 \tag{1.10}$$

1.2.2.4 Conservation de la quantité de mouvement :

Sur le même principe que la conservation de la masse, en partant de l'équation donnée précédemment :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}$$

Il est possible d'adimensioner cette équation (cf Annexe A), et d'obtenir la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho u_j^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+} = -\frac{1}{\gamma M^2} \frac{\partial p^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_i^+} \tag{1.11}$$

1.2.2.5 Conservation des espèces :

Encore une fois, il suffit de partir de l'équation dimensionnée de NS :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + V_{k,i}) Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i}\right] + \dot{\omega}_k$$

Sur le même principe (Annexe A), l'équation adimensionnée des espèces apparait sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+}\left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+}\right] + \dot{\omega}_k^+ \tag{1.12}$$

Avec $\dot{\omega}_k = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0}\dot{\omega}_k^+$.

1.2.2.6 Conservation de l'énergie sensible :

Nous partons de la forme dimensionnée de la conservation de l'énergie sensible :

$$\frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_{su}}{\partial x_i} = -\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{es}$$

La forme adimensionnée de l'équation est alors la suivante (Annexe A) :

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+}\left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+}\right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty}\frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} \tag{1.13}$$

$$+ M^2(\gamma_\infty - 1)\frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+} + \dot{\omega}_e s^+ \tag{1.14}$$

Avec ici : $\dot{\omega}_e s^+ = \frac{x_0}{\rho_\infty u_0^3} M^2(\gamma_\infty - 1)\dot{\omega}_e s$

1.2.3 Approximation à bas nombre de Mach

Maintenant que les équations sont posées et adimensionnées, il est possible d'expliquer et d'appliquer la simplification commune aux codes low-Mach (LMN).
Il est par ailleurs important avant tout de bien différencier deux notions :

- Un code incompressible (low-Mach) est un code considérant la simulation de milieux fortement incompressibles (telle l'eau ou les gaz à faible vitesse) à des vitesses négligeables par rapport à la vitesse du son dans le milieu. Cela conduit à une pression thermodynamique constante en espace et en temps si le milieu est ouvert. La masse volumique et ainsi la température du milieu sont aussi considérées constantes.

– Un code incompressible dilatable (dilatable low-mach) est un code incompressible prenant en compte les variations de masse volumique et donc de température inhérentes aux réactions chimiques exothermiques ou endothermiques (la combustion dans notre cas).

L'approximation LMN permet de négliger la propagation d'ondes acoustiques qui possèdent des temps de propagation très faibles réduisant les pas de temps de simulation. La méthode utilisée ici est celle proposée par Majda et Sethian [Majda et al. 1985] appliquée à la chimie. Plusieurs approches existent dans la littérature [Cook et al. 1996, Najm et al. 1998]. Une étude mathématique a été menée pour déterminer le domaine de stabilité de cette approximation, pour une grande plage de valeur de fluctuation de température et de conductivité thermique [Alazard 2005]. D'autres études ont démontré que les solutions des écoulements déterminés à partir de l'approximation LMN sont aussi solutions des équations de Navier-Stokes incompressibles [Feireisl et al. 2007]. Cette approximation a même été étendue aux fluides supercritiques [Ouazzani et al. 2007], ainsi que dans des conditions de simulation plus intenses [Hujeirat et al. 2008, Almgren et al. 2005 2006].

L'approximation à bas nombre de Mach se pose comme suit. Soit $\epsilon = \gamma M^2$. Si l'on suppose un nombre de mach suffisamment faible, alors $M \ll 1$ et donc $\epsilon \ll 1$. Il est alors possible de développer les variables de transport en séries de variable ϵ telles que $F = F^{(0)} + \epsilon F^{(1)}$. Dans le cas présent nous nous contenterons de développement asymptotique au premier ordre et seuls les termes d'ordre 0 sont conservés car $\epsilon \ll 1$.
Les équations de Navier Stokes et la loi des gaz parfait régissant le système adimensionné donné précédemment peuvent alors être modifiées pour obtenir leur forme low-mach finale :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0 \tag{1.15}$$

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+}\left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+}\right] + \dot{\omega}_k^+ \tag{1.16}$$

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+}\left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+}\right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty}\frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} + \dot{\omega}_e s^+ \tag{1.17}$$

$$\frac{\partial p^{+\,(0)}}{\partial x_j^+} = 0 \tag{1.18}$$

Il est à noter que le développement appliqué à la pression fait apparaitre deux termes bien distincts.

- $p^{(0)}$ représente la pression thermodynamique uniforme en espace (absence d'acoustique oblige) mais variable en temps si le milieu est fermé (réacteur homogène par exemple).
- $p^{(1)}$ représente la pression dynamique générée par l'écoulement, aussi appelée parfois "pression incompressible" par abus de langage, variable en espace et en temps.

Le développement de l'équation de conservation de la quantité de mouvement est atypique car le terme de pression à l'ordre 1 se conserve :

$$\frac{\partial \rho u_j^{+\,(0)}}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^{+\,(0)}}{\partial x_i^+} = -\frac{\partial p^{+\,(1)}}{\partial x_j^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^{+\,(0)}}{\partial x_i^+} \tag{1.19}$$

1.2.4 Équation de Poisson

Il est maintenant nécessaire de résoudre le champ $p^{+(1)}$, i.e. la "pression incompressible" de l'écoulement. Nous verrons par la suite que la résolution de ce champ est l'élément fondamental du solveur low-Mach.

Simplifions l'écriture de l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_j^+}{\partial t^+} = -\frac{\partial p^{+\,(1)}}{\partial x_j^+} + H_i \quad avec \quad H_i = \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_i^+} - \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+} \tag{1.20}$$

L'avancement en temps du champ de vitesse se fait de la manière suivante, en prenant en compte la correction de pression dynamique :

$$(\rho^+ u_j^+)^{n+1} = (\rho^+ u_j^+)^n + \Delta t^+ \left(H_i^n - \left(\frac{\partial p^{+\,(1)}}{\partial x_j^+} \right)^n \right) \tag{1.21}$$

Considérons ensuite l'avancement en temps, mais sans prendre en compte les effets de pression :

$$(\rho^+ u_j^+)^* = (\rho^+ u_j^+)^n + \Delta t^+ H_i^n \tag{1.22}$$

En soustrayant ces deux équations, nous obtenons :

$$-\left(\frac{\partial p^{+\,(1)}}{\partial x_j^+} \right)^n = \frac{(\rho^+ u_j^+)^{n+1} - (\rho^+ u_j^+)^*}{\Delta t^+} \tag{1.23}$$

L'opérateur de divergence est alors appliqué à cette expression :

$$-\left(\frac{\partial^2 {p^+}^{(1)}}{\partial {x_j^+}^2}\right)^n = \frac{1}{\Delta t^+}\left(\frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^{n+1}}{\partial x_j^+} - \frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^*}{\partial x_j^+}\right) \tag{1.24}$$

Le terme $\frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^*}{\partial x_j^+}$ est aisément obtenu, celui-ci ne nécessitant pas le champ de pression. Le terme $\frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^{n+1}}{\partial x_j^+}$ est pour sa part obtenu grâce à la relation de continuité :

$$\frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^{n+1}}{\partial x_j^+} = -\frac{\partial {\rho^+}^{n+1}}{\partial t^+} \tag{1.25}$$

Le terme $\frac{\partial {\rho^+}^{n+1}}{\partial t^+}$ est obtenu par extrapolation des valeurs précédentes ρ^n, ρ^{n-1}, ρ^{n-2}.

$$\frac{\partial {\rho^+}^{n+1}}{\partial t^+} = f\left(\rho^{n-2}, \rho^{n-1}, \rho^n, \rho^{n+1}\right) \tag{1.26}$$

Nous obtenons alors une équation de Poisson pouvant se résumer sous la forme :

$$\Delta p^+ = F = -\frac{1}{\Delta t^+}\left(-f\left(\rho^{n-2}, \rho^{n-1}, \rho^n, \rho^{n+1}\right) - \frac{\partial(\rho^+ u_j^+)^*}{\partial x_j^+}\right) \tag{1.27}$$

La résolution de cette équation de Poisson sous sa forme implicite a fait l'objet d'une étude particulière au cours de cette thèse, avec la construction d'un solveur de Poisson parallèle. Cette étude sera explicitée par la suite au sein de ce chapitre.

1.2.5 Le code Asphodele

Le code Asphodele développé est un code de DNS type low-Mach à maillage structuré. Le code est apte à simuler des cas 1D, 2D ou 3D avec chimie simple/complexe ainsi que des cas avec suivi lagrangien de particules. Dans les grandes lignes, les caractéristiques du code actuel sont les suivantes :

- DNS Low-Mach dilatable
- 1D, 2D, et 3D (code unifié)
- Maillage structuré à pas fixe suivant l'axe
- Discrétisation en espace : PADE 6 (scalaire) [Lele 1991, Reveillon 2007], DF 4 (scalaire et MPI) (CF Annexe B)
- Discrétisation en temps : Runge Kutta 3 à faible empreinte mémoire [Kennedy et al. 2000]
- Solveur de Poisson : FishPack (scalaire et pseudo-MPI) [Adams et al. 2004], BigFish

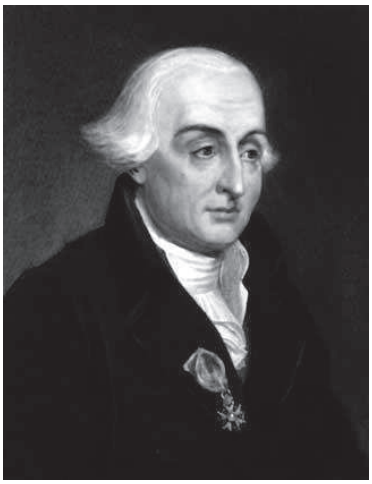
FIGURE 1.1 – Logo utilisé pour la version MPI du code

(scalaire et MPI)
- Cinétique chimique simple ou complexe
- Gaz parfait ou réel
- Suivi lagrangien parallèle (cf chapitre projet SIGLE)
- Injection turbulente type Klein (scalaire) ou Kraichnan (scalaire et MPI) (cf section injection turbulente)

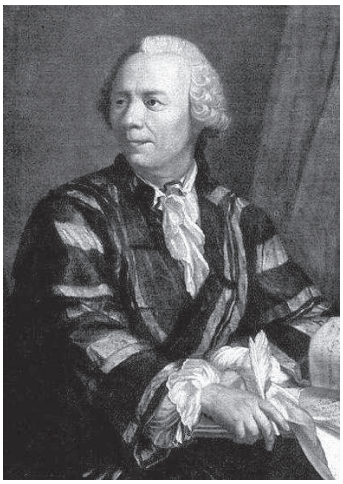
Au départ de la thèse, Asphodele était un code scalaire (i.e. non parallèle) utilisant des méthodes implicites pour résoudre le champ, à savoir un PADE d'ordre 6 en espace pour le calcul des dérivées et la librairie FishPack 90 pour la résolution de Poisson. De plus, malgré une bonne optimisation pour les calculs sur machine vectorielle, de nombreux point restaient à optimiser.

Face aux demandes du projet INTERMAC en termes d'étendue de domaine à simuler en DNS, il fut nécessaire de revoir la stratégie de calcul. La première partie de la thèse a consisté à optimiser le code scalaire, trouver des méthodes de remplacement au PADE et à FishPack aptes à être parallélisables, et pour finir paralléliser le code.

Aujourd'hui le code Asphodele renommé Parasphodele est entièrement parallèle, et les méthodes utilisées pour y parvenir seront décries dans les sections suivantes.



Joseph-Louis Lagrange (1736-1813)



Leonhard Paul Euler (1707-1783)

1.3 Simulations Lagrangiennes

Dans le cadre de cette thèse une étude sur les sprays lagrangiens a également été menée. Elle a tout d'abord été basée sur le projet ANR SIGLE, visant la validation d'un modèle eulérien à l'aide de calculs lagrangiens. Ces résultats ont fait l'objet d'une publication en commun avec l'IFMT de Toulouse (Chapitre 2). Le solveur lagrangien a ensuite été utilisé pour étudier l'interaction flamme/paroi dans les cas d'injection diphasique.
Dans cette partie de présentation des équations utilisées, serons vus les principes de l'étude lagrangienne ainsi que les lois utilisées pour modéliser l'interaction entre le fluide et les gouttes.

1.3.1 Approches de calcul

Il existe deux grandes visions pour résoudre les écoulements comportant du spray disperse : l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne.
L'approche eulérienne est basée sur des calculs statistiques : les gouttes sont considérées par des fonctions de distribution de leur caractéristiques (vitesse, masse, nombre, ...) puis les équations d'évolution de ces fonctions sont résolues.
Cette méthode apporte des facilités de codage parallèle, mais reste moins précise que les calculs discrets. En effet, le choix d'utiliser des modèles précis impose de fait des calculs mathématiques lourds et au final plus coûteux dans certains cas qu'un calcul lagrangien. A l'inverse du calcul eulérien, le calcul lagrangien considère les gouttes individuellement ou par parcelles, ce qui nécessite par ailleurs des lois d'évolution pour évaluer leurs variations temporelles, comme leur

évaporation, leur température, etc.
Dans le cadre de cette thèse, l'étude s'est concentrée sur les calculs lagrangiens, avec un nombre de gouttes variables, allant jusqu'à plus d'un million de gouttes simulées dans le domaine. Les gouttes sont cependant considérées éthérées vis à vis les unes des autres, c'est-à-dire qu'il n'y a pas prise en compte des interactions inter-gouttes, comme les collisions. Il est important de noter que lors de l'évaporation des gouttes, des termes sources locaux apparaissent [Réveillon et al. 2000], et apportent des phénomènes inexistants dans les cas monophasiques (turbulence, régime de flamme, etc).

A noter pour finir les hypothèses suivantes sur la prise en compte des interactions entre les deux phases :

- Transfert d'énergie : gouttes $\longleftrightarrow$ gaz
- Transfert de quantité de mouvement : gouttes $\longleftarrow$ gaz (pas d'influence du mouvement des gouttes sur le mouvement du gaz)
- Transfert de masse : gouttes $\longrightarrow$ gaz (pas de condensation du gaz vers les gouttes)

1.3.2 Loi d'évolution du mouvement

La force de gravité est ici négligée ainsi que la force de pression pour s'intéresser à la force de traînée qui reste prédominante. Considérons une goutte à la position $\mathbf{X}$ à l'instant t, à la vitesse $\mathbf{V}(t)$ et de section $S = \pi D^2$, évoluant dans un liquide à la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{X})$ au niveau de la goutte.

Le principe fondamental de la dynamique donne :

$$m_d \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \sum \mathbf{F} \tag{1.28}$$

Avec $m_d = \frac{\pi \rho_d a^3}{6}$ la masse de la goutte.
La force de trainée est définie par :

$$\mathbf{T} = \frac{\pi}{8} \rho a^2 C_D \, ||\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}|| \, (\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}) \tag{1.29}$$

Avec C_D le coefficient de trainée de la goutte, défini par :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} C_u \tag{1.30}$$

Avec C_u, facteur correctif dû à la turbulence générée en aval de la goutte (Plusieurs formulations empiriques existent pour ce coefficient [Saulnier 2006]), et Re_p, le nombre de Reynolds particulaire, lié à l'écoulement autour de la goutte et à l'interaction de celle-ci sur l'écoulement, définies par :

$$C_u = 1 + \frac{Re_p^{2/3}}{6} \quad , \quad Re_p = \frac{\rho \left|\left|\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}\right|\right| a}{\mu} Re \tag{1.31}$$

Tout cela donne l'équation de mouvement suivante :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{X} - \mathbf{V})}{t_p} \quad , \quad t_p = \frac{\rho_d a^2}{18 C_u \mu} \tag{1.32}$$

1.3.2.1 Transfert de masse

Pour déterminer le transfert de masse de la goutte vers la phase gazeuse, il est nécessaire de réécrire l'évolution de la fraction massique de l'espèce S, composant la goutte, autour de cette dernière [Kuo 2005].
L'équation de transport en coordonnées sphériques est :

$$\rho U_r r^2 \frac{dY_S}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\rho r^2 D \frac{dY_S}{dr}\right) \tag{1.33}$$

Avec la conservation de la masse : $4\pi\rho U_r r^2 = 4\pi\rho(\delta) U_r(\delta)\delta^2 = cste$.
Les conditions aux limites sont les suivantes :

$$Y_S = Y_{S,\infty} \quad a \quad r = \delta_Y \tag{1.34}$$

$$Y_S = Y_{S,\delta} \quad a \quad r = \delta \tag{1.35}$$

$$\rho_\delta U_r(\delta) = -\rho_\delta D\delta \left(\frac{dY_S}{dr}\right)_\delta + \rho_\delta U_r(\delta) Y_{S,\delta} \quad a \quad \delta < r < \delta_Y \tag{1.36}$$

Après intégration, la loi d'évaporation s'écrit finalement :

$$\delta U_r(\delta) = \frac{1}{2} Sh_c D ln(b_\infty - b_\delta + 1) = \frac{1}{2} Sh_c D ln(1 + B_M) \tag{1.37}$$

Le temps caractéristique d'évaporation de la goutte, t_v, est :

$$t_v = \frac{\rho_d \delta^2}{2\rho(\delta)\delta U_r(\delta)} = \frac{\rho_d Sc \delta^2}{Sh_c \mu ln(1 + B_M)} \tag{1.38}$$

Le nombre de Spalding, B_M, est donné par :

$$B_M = \frac{Y_S^{(sat)} - Y_S(\mathbf{X})}{1 - Y_S^{(sat)}} \tag{1.39}$$

Finalement, l'évolution de la surface de la goutte est donnée par

$$\frac{da^2}{dt} = -\frac{a^2}{t_v} \tag{1.40}$$

1.3.2.2 Transfert d'énergie

De la même manière que précédemment, il est possible de partir de l'équation de diffusion de la chaleur en coordonnées sphériques :

$$\rho(\delta) U_r(\delta) r^2 \frac{dCpT}{dr} = \frac{d}{dr}\left(r^2 \lambda \frac{dT}{dr}\right) \tag{1.41}$$

Avec comme conditions aux limites :

$$T = T_\infty \qquad a \quad r = \delta_Y \tag{1.42}$$

$$T = T_\delta \qquad a \quad r = \delta \tag{1.43}$$

$$\lambda\left(\frac{dT}{dr}\right) = h_c(T_\infty - T_{k,\delta}) = \rho(\delta) U_r(\delta) L_v + \frac{Q_l}{\pi a_k^2} \qquad a \quad \delta < r < \delta_Y \tag{1.44}$$

Avec L_v la chaleur latente de vaporisation du liquide de la goutte, et Q_l sa capacité thermique.

En intégrant cette expression et en utilisant la conservation de la masse donnée précédemment pour fermer le système, il est possible d'obtenir le taux d'évaporation W_v (en kg/s) de la goutte défini par :

$$\frac{dm_d}{dt} = -W_v = -4\pi\rho(\delta) U_r(\delta) \delta^2 \tag{1.45}$$

Avec m_d la masse de la goutte : $m_d = \pi \rho_d a^3/6$

Il en ressort l'équation de température de la goutte :

$$\frac{dm_d Cp_d T_d}{dt} = W_v \left(H_c - L_v - T_d C_p\right) \tag{1.46}$$

Sachant que $\frac{dm_d}{dt} = -W_v$, cela donne :

$$m_d \frac{dCp_d T_d}{dt} = W_v \left(H_c - L_v\right) \tag{1.47}$$

Le coefficient de convection normalisé H_c à la surface d'échange de la goutte à la position $\mathbf{X}$ s'écrit :

$$H_c = \frac{C_p \left(T(\mathbf{X}) - T_d\right)}{B_T} \tag{1.48}$$

Les coefficients L_v et Cp_d sont supposés constants, ce qui donne :

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{W_v}{m_d Cp_d}(H_c - L_v) = \frac{W_v}{m_d Cp_d}\frac{Cp}{B_T}\left(T(\mathbf{X}) - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp}\right) \tag{1.49}$$

Par interpolation de la phase porteuse à la position de la goutte, le terme $T(\mathbf{X})$ peut être obtenu, et finalement il vient :

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{6\mu Nu_c}{\rho_d a^2}\frac{Cp}{Cp_d}\frac{ln(1+B_T)}{B_T}\left(T(\mathbf{X}) - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp}\right) = \frac{T(\mathbf{X} - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp})}{t_h} \tag{1.50}$$

avec t_h le temps caractéristique d'évolution de la température de goutte, donné par la relation suivante :

$$t_h = \frac{Pr}{6Nu_c}\frac{Cp_d}{Cp}\frac{\rho_d a^2}{\mu}\frac{B_T}{ln(1+B_T)} \tag{1.51}$$

1.3.3 Lois d'évaporation

Trois grandes lois ont été codées au sein du code Asphodele. La première loi, appelée loi en d^2, est basée sur l'estimation que le taux surfacique d'évaporation des gouttes est constant et ne dépend pas de son environnement. La seconde loi, prend en compte la température, la pression et la saturation du milieu environnant. La dernière loi, basée sur une simplification de la seconde, ne dépend que de la température du milieu.
Afin d'estimer ces lois, il est nécessaire au préalable de résoudre les équations de mécanique des fluides permettant de connaître les profils de couche limite de température et de vapeur à la surface de la goutte.

Considérons un rayon de goutte constant : δ_T et δ_Y sont respectivement respectivement définis

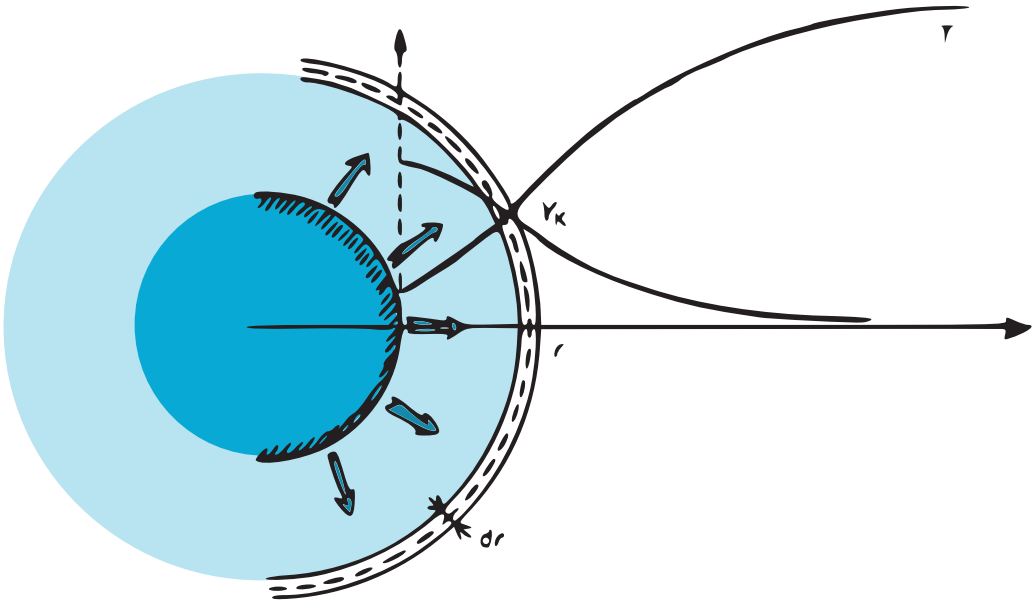


FIGURE 1.2 – Évolution de la concentration autour d'une goutte, évaporation [Borghi, Champion, 2000]

comme les rayons de couche limites de température et de diffusion des espèces. Par ailleurs, un nombre Lewis unitaire donne dans ce cas $\delta_T = \delta_Y$. Il est aussi possible de définir deux nombres adimensionnées :
Le nombre de Sherwood convectif :

$$Sh_c = 2\frac{\delta_Y}{\delta_Y - \delta} \tag{1.52}$$

avec δ le rayon de la goutte. Dans une atmosphère au repos, i.e. sans convection, $\delta_Y \to \infty$ et donc $Sh_c \to 2$.
Et le nombre de Nusselt convectif :

$$Nu_c = 2\frac{\delta_T}{\delta_T - \delta} \tag{1.53}$$

De même, le nombre de Nusselt tend vers 2 quand $\delta_T \to \infty$.
Les champs T et Y_F sont considérés égaux à leur valeur à l'infini : $Y_F(\delta_Y) = Y_F^\infty$ et $T(\delta_T) = T^\infty$.

1.3.3.1 Loi du d^2

Cette loi, valable dans les écoulements à saturation relativement constante, se veut simple face aux lois classiques qui font appel à de nombreuses opérations mathématiques coûteuses en temps de calcul. Il s'agit d'une première approche, suffisante pour tester et valider un code.
Cette loi ne dépendant que du diamètre de la goutte, la loi d'évolution de la masse de la goutte

est donc constante. Ce qui donne alors :

$$\frac{da^3}{dt} = -\frac{6}{\pi\rho_d}\pi\rho_d a Sh_c D ln(1+B_M) \Leftrightarrow \frac{da^2}{dt} = -\frac{4Sh_c\mu}{Sc\rho_d}ln(1+B_M) \tag{1.54}$$

Soit une fois intégré, avec a_0 le diamètre initial de la goute (à $t = 0$) :

$$a^2(t) = -\frac{4Sh_c\mu}{Sc\rho_d}ln(1+B_M)t + a_0 \tag{1.55}$$

et le temps caractéristique d'évaporation de la goutte dans le cas de la loi en d^2 est donné par :

$$t_v = \frac{\rho_d Sc a_0^2}{4Sh_c\mu ln(1+B_M)} \tag{1.56}$$

1.3.3.2 Loi complète, par la relation de Clausius-Clapeyron

Cette loi, beaucoup plus complète, dépend à la fois de la température, de la pression et de la saturation. Dans le cas d'un changement de phase (liquide vers gaz), la relation de Clausius-Clapeyron permet de calculer le nombre de Spalding. A noter que cette relation est valable seulement lorsque le régime se situe loin de l'état critique dans le diagramme des phases.
Par la suite, la goutte sera supposée constituée d'un liquide d'espèce S, et les variables caractéristiques de saturation seront indicées par $.^{sat}$.

La relation de Clausius-Clapeyron fournit :

$$\frac{dP_k^{sat}}{P_k^{sat}} \simeq \frac{L_v dT}{R_S T^2} \tag{1.57}$$

Avec R_S la constante des gaz parfaits liée à l'espèce S.
En intégrant cette dernière relation entre deux états de référence $P_{0,k}$ et $T_{0,k}$, il vient :

$$ln\left(\frac{P_k^{sat}}{P_{0,k}}\right) = -\frac{L_v}{R_S}\left(\frac{1}{T_k^{sat}} - \frac{1}{T_{0,k}}\right) \tag{1.58}$$

Soit :

$$P_k^{sat} = P_{0,k} exp\left(-\frac{L_v}{R_S}\left(\frac{1}{T_k^{sat}} - \frac{1}{T_{0,k}}\right)\right) \tag{1.59}$$

La température de référence $T_{0,k}$ utilisée ici est la température d'ébullition du liquide de la goutte à pression de référence $P_{0,k}$. Il est possible de définir la fraction massique de l'espèce S

par $Y_S = \frac{X_S M_S}{\sum_i X_i M_i}$, ainsi que la fraction molaire de l'espèce S saturée par $X_S^{sat}(\mathbf{X}) = \frac{P^{sat}}{P(\mathbf{X})}$ égale à sa pression partielle divisée par la pression totale.

$$Y_S^{sat} = \left(1 + \frac{1}{X_F^{sat}} \sum_{i \neq S} \frac{X_i M_i}{M_S}\right)^{-1} = \left(1 + \frac{P(\mathbf{X})}{P^{sat}} \sum_{i \neq S} \frac{X_i M_i}{M_S}\right)^{-1} \tag{1.60}$$

Cette définition permet de retrouver directement le nombre de Spalding grâce à la relation 1.39.

1.3.3.3 Loi simplifiée dépendant de la température

La loi vue précédemment permettait de déterminer les paramètres de saturation à la surface de la goutte en fonction de la pression, de la température et de la fraction massique de l'espèce S.
Il est cependant possible de poser deux hypothèses sur cette loi :
Dans un cas simplifié, en considérant que l'espèce S est relativement diluée, la fraction massique se situe généralement entre $0 < Y_S < 0.2$. De plus, les simulations étant effectuées à faible nombre de mach, la pression thermodynamique est supposée constante. Il est donc possible d'estimer que les paramètres de saturation ne dépendent que de la température, i.e. le nombre de transfert $B(T, Y_S, P) \simeq B(T)$. Cela se nomme l'Indexation artificielle de Température (IAT).

Pour commencer, il est supposé que B_M est fonction linéaire de T. Il est alors possible de définir le modèle IAT par :

$$B_M(T) = \Pi(T(\mathbf{X} - T_u)) \tag{1.61}$$

Avec Π constante. La goutte est ici considérée comme étant toujours à son état de saturation à sa surface, avec pour seul paramètre externe T. Un nombre de Spalding théorique $B_{M,0}$ basé sur l'expression de t_v donnée précédemment (1.56) est déduit du temps caractéristique d'évaporation :

$$B_{M,0} = exp\left(\frac{Sc\rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu t_v}\right) - 1 \tag{1.62}$$

Avec a_0 le diamètre initial de la goutte. Le coefficient Π est quant à lui basé sur l'écart entre gaz brûlés T_b et gaz frais T_u.

Ce qui donne :

$$\Pi = \frac{1}{T_b - T_u} B_{M,0} \tag{1.63}$$

Soit finalement :

$$\Pi = \frac{1}{T_b - T_u} \left(\exp\left(\frac{Sc\rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu t_v} \right) - 1 \right) \tag{1.64}$$

Et donc :

$$B_M(T) = \frac{1}{T_b - T_u} \left(\exp\left(\frac{Sc\rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu t_v} \right) - 1 \right) (T(\mathbf{X}) - T_u) \tag{1.65}$$

Le temps d'évaporation pour cette loi IAT est donc finalement :

$$t_v = \frac{\rho_d Sc a_0}{4Sh_c \mu ln(1 + B_M)} \tag{1.66}$$

A l'aide de ce modèle, il est possible de prescrire le temps caractéristique d'évaporation des gouttes sans interférer sur leurs propriétés initiales ou sur les paramètres de la chimie.
C'est ce modèle qui sera utilisée dans la suite des calculs afin de modéliser l'interaction flamme/paroi lagrangienne.

Antoine Laurent de Lavoisier (1743-1794)

Svante August Arrhenius (1859-1927)

1.4 Chimie

Afin d'appréhender dans son ensemble le phénomène d'interaction flamme/paroi, il est nécessaire de s'intéresser à la chimie régissant l'aspect combustion des simulations numériques. Dans le cadre de cette thèse, l'étude se concentrera sur les transferts thermiques à la paroi et non sur la cinétique chimie. En dessous d'une température de paroi de $400K$ les effets de la paroi sur la cinétique deviennent négligeables. L'aspect polluant essentiellement provoqué par les imbrûlés dans la zone de coincement entre la flamme et la paroi froide ne sera pas non plus abordé dans cette étude.

Une première approche "généraliste" a été posée (échelle macroscopique), afin notamment de calculer certaines grandeurs nécessaires au bon déroulement de la simulation. Une approche plus numérique a ensuite été conduite afin de comprendre et d'utiliser les modèles de chimie intégrés aux codes de CFD (échelle microscopique).

Dans un premier temps la partie macroscopique de la réaction, la thermochimie, sera abordée, puis les modèles de chimie numérique, à savoir la chimie complexe et la chimie simple.

1.4.1 Réaction étudiée

1.4.1.1 Espèces en jeux

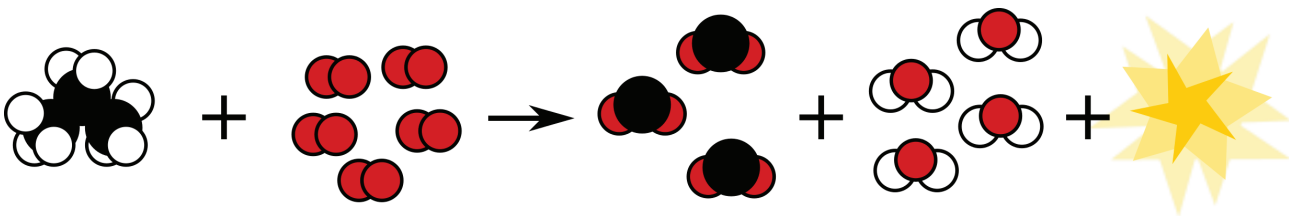


Figure 1.3 – Réaction globale du propane avec de l'air, dégagement d'énergie

La configuration étudiée dans le cadre du projet INTERMAC se compose d'un mélange de méthane (phase de tests) ou de propane (calculs finaux) et d'air à $300K$.
A la stœchiométrie, la réaction associée à la chimie est la suivante :

$$CH_4 + 2\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow CO_2 + 2H_2O + 2 \times 3.76N_2$$
$$C_3H_8 + 5\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 5 \times 3.76N_2$$

Soit :
• f < 1 : combustion pauvre

$$fCH_4 + 2\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow fCO_2 + 2fH_2O + 2 \times 3.76N_2 + 2(1-f)O_2$$
$$fC_3H_8 + 5\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow fCO_2 + 4fH_2O + 5 \times 3.76N_2 + 5(1-f)O_2$$

• f > 1 : combustion riche

$$fCH_4 + 2\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow CO_2 + 2H_2O + 2 \times 3.76N_2 + (f-1)CH_4$$
$$fC_3H_8 + 5\,(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 5 \times 3.76N_2 + (f-1)C_3H_8$$

Cette équation décrivant la réaction à l'échelle macroscopique servira de support à l'ensemble des calculs de chimie effectués au cours de cette thèse. Une vision plus "thermicienne" de la réaction permet ensuite le calcul des grandeurs physiques essentielles au calibrage des simulations.

1.4.1.2 Thermochimie

L'aspect thermique de la réaction de combustion permet le calcul de la température de fin de combustion, grandeur nécessaire à la calibration du modèle de chimie simplifiée (calcul de $\alpha = (T_b - T_u)/T_b$) (éq. 1.75).

Soit la conservation de l'énergie globale :

$$\Delta H_{comb} = \Delta H_{prod}$$

Ce qui peut aussi se mettre sous la forme développée suivante (en fonction des énergies de

formation) :

$$\begin{aligned}\Delta H_{comb} &= \left|\sum n_i \Delta h^0_{f_i}(produits) - \sum n_i \Delta h^0_{f_i}(reactants)\right| \\ &= \left|\left(n_{CO_2}\Delta h^0_{f_{CO_2}} + n_{H_2O}\Delta h^0_{f_{H_2O}} + n_{N_2}\Delta h^0_{f_{N_2}}\right) - \left(n_{CH_4}\Delta h^0_{f_{CH_4}} + n_{O_2}\Delta h^0_{f_{O_2}} + n_{N_2}\Delta h^0_{f_{N_2}}\right)\right|\end{aligned}$$

Gaz simples, pas d'enthalpie de formation (nulle) :

$$\Delta H_{comb} = \left|n_{CO_2}\Delta h^0_{f_{CO_2}} + n_{H_2O}\Delta h^0_{f_{H_2O}} - n_{CH_4}\Delta h^0_{f_{CH_4}}\right|$$

Valeurs dans la littérature (gaz) à $300K$:

$$\begin{aligned}\Delta h^0_{f_{CO_2}} &= -392.52\ kJ.mol^{-1} \\ \Delta h^0_{f_{H_2O}} &= -241.83\ kJ.mol^{-1} \\ \Delta h^0_{f_{CH_4}} &= -74.87\ kJ.mol^{-1}\end{aligned}$$

Soit :

$$\Delta H_{comb} = |-392.52 - 2 * 241.83 + 74.87| = 801.31\ kJ.mol^{-1}$$

Aussi appelé Pouvoir calorifique **inférieur** (car l'eau reste à l'état de vapeur et conserve de ce fait une partie de l'énergie de la réaction, **supérieur** sinon).

Le terme de droite se calcule à partir des tables de chaleurs massiques :

$$\begin{aligned}\Delta H_{prod} &= \sum_{k=1}^{nb_{prod}} \nu_k \int_{T_0}^{Tc} Cp_k(T)dT \\ &= \int_{T_0}^{Tc} Cp_{CO_2}(T)dT + 2\int_{T_0}^{Tc} Cp_{H_2O}(T)dT + 2 \times 3.76 \int_{T_0}^{Tc} Cp_{N_2}(T)dT\end{aligned}$$

Les Cp sont calculés selon la formule suivante :

$$\frac{C_p^0}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4$$

L'inversion de ce système permet l'obtention de la température de fin de réaction. Dans le cas du Propane, gaz utilisé pour les simulations turbulentes 2D et 3D, la température de fin de combustion est estimée à $2266.4K$ par ce calcul.

1.4.2 Modélisation

La description du phénomène de réaction chimique passe par le modèle d'Arrhenius. Celle loi permet le calcul du taux de réaction d'une réaction donnée.
Deux approches ont été étudiées au cours de cette thèse, avec en premier lieu une description fine du phénomène de combustion à l'aide d'un solveur de chimie complexe, puis une approximation nettement moins coûteuse en ressources de calcul avec une chimie à une étape dite chimie simple.

1.4.2.1 Chimie complexe

La chimie complexe permet de prendre en compte de nombreux aspects de la combustion, notamment la présence de radicaux libres ou la production de polluants. Elle fait appel à des tables de cinétique chimique, mesurées expérimentalement et adaptées à des cas particuliers. Elle est extrêmement consommatrice de ressources, aussi bien de calcul que de stockage mémoire. En effet, la chimie complexe nécessite le calcul d'exponentielles (et de puissances), opérations fort couteuses numériquement. De plus, le solveur implicite requiert de lourds calculs matriciels (en particulier les termes de Jacobien des terles sources), sans compter que chaque champ d'espèces doit être stocké en mémoire. Pour remédier à cela, des méthodes de tabulations ont vu le jour (FPI adaptées dans Asphodèle par [Bouali, 2010]), mais n'ont pas fait l'objet d'une étude dans cette thèse car non adaptées aux calculs proche paroi.
Point intéressant, un calcul en chimie complexe peut être fait sur des calculateurs massivement parallèles (i.e. beaucoup de cœurs à faible consommation), leur taux de scaling avoisinant l'optimum, puisqu'il s'agit d'un calcul local au point (pas d'échanges de données entre processeurs).
A noter pour finir que des calculs de chimie complexe ont été effectués au cours de cette thèse, pour des configurations 1D et à l'aide du schéma USC Mech V2 [Wang et al. 2007] adapté aux hydrocarbures. Cependant pour des questions de temps de calculs, il ne fut pas possible de produire des résultats satisfaisant pour être exposés ici.
Avant de s'intéresser aux réactions, il est important de définir ici les différences et les liens entre les grandeurs thermodynamiques usuelles :

Soit X_k la fraction molaire, Y_k la fraction massique, et $[X_k]$ la concentration molaire. Ces

grandeurs sont liées par les relations suivantes :

$$\overline{W} = \sum_{k=1}^{K} X_k W_k$$
$$X_k = \frac{Y_k \overline{W}}{W_k}$$
$$[X_k] = \rho \frac{Y_k}{W_k}$$
$$[X_k] = X_k \frac{\rho}{\overline{W}}$$

Avec W_k la masse molaire de l'espèce k, $\overline{W}$ la masse molaire du mélange et K le nombre total d'espèces.

Les sections suivantes décrivent la manière dont sont calculés les différents taux de réaction, avec leur thermodynamique associée. Cette démarche est importante à détailler, car elle est utilisée au sein du package CHEMKIN pour les calculs de chimie complexe implicite.

1.4.2.2 Principe

La chimie complexe suit un schéma cinétique classique en chaque point du domaine discrétisé, à savoir :

- Charger les K espèces en mémoire.
- Calculer l'ensemble des grandeurs chimiques et thermodynamiques associées $(h_k, C_{p_k}, ...)$à l'aide de la température du champ et des tables de capacité thermique.
- Résoudre l'ensemble des I réactions qui décrivent le schéma cinétique (*Forward* et *Reverse*).
- Calculer l'avancement de chaque espèce k à l'aide de ces taux de réactions ainsi que la variation d'énergie associée.

1.4.2.3 Thermodynamique

Les valeurs des capacités thermiques à pression constante sont données à l'aide de polynômes et de coefficients tabulés [Kee, Rupley, Meeks, 1996]. Il est généralement nécessaire de définir 2 intervalles de température, avec un jeu de coefficients donnés spécifiques à chaque portion.

Au sein du package CHEMKIN II, les polynômes utilisés sont les suivants (avec $a_k n$ les coefficients tabulés) :

$$\frac{C^0_{p_k}}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4$$

Sur le même principe, il est possible d'obtenir les valeurs de l'enthalpie et de l'entropie, utilisées par la suite pour calculer les réactions inverses :

$$\frac{H^0_k}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T_k + \frac{a_{3k}}{3}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5}T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k}$$

$$\frac{S^0_k}{R} = a_{1k}ln(T_k) + a_{2k}T_k + \frac{a_{3k}}{2}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4}T_k^4 + a_{7k}$$

Il est maintenant aisé d'obtenir les autres grandeurs thermodynamiques classiques :

$$C^0_{v_k} = C^0_{p_k} - R$$

$$U^0_k = H^0_k - RT_k$$

$$G^0_k = H^0_k - T_k S^0_k$$

1.4.2.4 Taux de réaction

Il est possible de représenter l'ensemble des réactions chimiques $i = 1$ à I réversible ou irréversible sous la forme suivante :

$$\sum_{k=1}^{K} \upsilon'_{ki}\chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{K} \upsilon''_{ki}\chi_k \tag{1.67}$$

Avec respectivement υ'_{ki} et υ''_{ki} les coefficients stœchiométriques (>= 0) des réactions directes et inverses. Le coefficient stœchiométrique global est défini selon :

$$\upsilon_{ki} = \upsilon''_{ki} - \upsilon'_{ki}$$

Le taux de production lié à chaque espèce k est donnée par la relation suivante :

$$\dot{\omega_k} = \sum_{i=1}^{I} \upsilon_{ki} q_i \tag{1.68}$$

q_i est le taux d'avancement associé à chaque réaction i par la relation suivante :

$$q_i = k_{f_i} \prod_{k=1}^{K} [X_k]^{\upsilon'_{ki}} - k_{r_i} \prod_{k=1}^{K} [X_k]^{\upsilon''_{ki}} \tag{1.69}$$

k_{f_i} et k_{r_i} sont les constantes de réaction respectivement du sens direct "forward", et du sens inverse "reverse". Ces constantes en concentration (mais pas en température) sont définies par la relation suivante :

$$k_{f_i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_i}{R_c T}\right) \tag{1.70}$$

avec A_i la constante du facteur pré-exponentiel, β_i l'exposant de température, et E_i l'énergie d'activation. A noter que ces 3 coefficients sont donnés dans les tables CHEMKIN. Il en va ainsi pour le coefficient de la réaction normale k_{f_i}. k_{r_i} est quant à lui nettement plus délicat à déterminer.

1.4.2.5 Réaction inverse

k_{r_i} s'obtient à l'aide de k_{f_i} et des constantes d'équilibre de chaque réaction i, calculées à l'aide des expressions des enthalpies et entropies des espèces associées à la réaction i. Ce terme vaut :

$$k_{r_i} = \frac{k_{f_i}}{K_{c_i}} \tag{1.71}$$

Avec :

$$K_{c_i} = K_{p_i} \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{K} \upsilon_{ki}} \tag{1.72}$$

Et :

$$K_{p_i} = exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT}\right) \tag{1.73}$$

Les variations Δ font référence au passage de l'état de réactants à l'état de produit des espèces de la réaction i, i.e. :

$$\frac{\Delta S_i^0}{R} = \sum_{k=1}^{K} \upsilon_{ki} \frac{S_k^0}{R}$$

$$\frac{\Delta H_i^0}{RT} = \sum_{k=1}^{K} \upsilon_{ki} \frac{H_k^0}{RT}$$

La combinaison de ces deux réactions (forward et reverse) permet une description fine du phénomène de combustion et de l'épaisseur du front de flamme ainsi que de sa vitesse. Il est cependant important de noter que malgré leur précision, ces calculs dépendent fortement du

modèle cinétique (table) utilisé en entrée. Il est nécessaire d'utiliser un modèle dont le domaine de validité correspond à celui de l'étude.
Cependant, face au coût des calculs induits par cette chimie détaillée, il a été nécessaire de se tourner vers une chimie simplifiée dite à une étape ("one step"), et qui s'est avérée suffisante pour nos études.

1.4.2.6 Chimie simple

La chimie simple, ou "une étape", est en fait un modèle résumant l'ensemble des réactions de chimie complexe en une seule, en ne considérant que les réactifs initiaux et les produits majoritaires. Une réaction "parfaite" en quelque sorte, calibrée avec des valeurs expérimentales afin de refléter la réalité. [Poinsot Veynante 2005]
Il est bien sûr illusoire d'espérer mener des calculs de dégagement de polluants avec cette méthode, mais cette représentation est suffisante pour les calculs de distance de coincement et de flux pariétal lors de l'interaction flamme/paroi.

L'équation régissant la chimie une étape est la suivante :

$$\nu_F Y_F + \nu_O Y_O \rightarrow \nu_P Y_P$$

Avec Y_F, Y_O et Y_P respectivement la fraction massique de fuel, d'oxydant et de produits, et ν_F, ν_O et ν_P les coefficients stœchiométriques correspondants.

Le taux de réaction de cette chimie à une étape est donné par la loi d'Arrhenius :

$$\dot{\omega}_R = K\rho^{n_\rho} Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} exp(-T_a/T) \tag{1.74}$$

Avec K la constante pré-exponentielle, et T_a la température d'activation du mélange. Ce taux de réaction permet de suivre l'évolution des fractions massiques des espèces Y_F, Y_O, Y_P ainsi que l'évolution de la température locale grâce aux équations de conservation suivantes :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} = -\nu_F W_F \dot{\omega}_R \quad , \quad \frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} = -\nu_O W_O \dot{\omega}_R \quad , \quad \frac{\partial \rho T}{\partial t} = \frac{q_0}{C_p(T)} \nu_F W_F \dot{\omega}_R$$

Avec W_F, W_O les masses molaires du fuel et de l'oxydant, C_p la capacité thermique du mélange, et q_0 la chaleur libérée par mole de combustible.

Le coefficient stœchiométrique massique est défini selon :

$$\Phi_s = \nu_O W_O / \nu_F W_F$$

Il est possible de réécrire le terme exponentiel en introduisant deux nouvelles grandeurs adimensionnées [Poinsot Veynante 2005] :

$$\alpha = \frac{T_b - T_u}{T_b} \quad , \quad \beta = \alpha \frac{T_a}{T_b} \tag{1.75}$$

En considérant la valeur T normalisée par la température des gaz frais T_u, l'équation (1.74) peut être réécrite de la façon suivante :

$$\dot{\omega}_R = K \rho^{\nu_\rho} Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} exp\left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T}\right) \tag{1.76}$$

Le calcul de cette simple loi d'Arrhenius, calibrée sur des données expérimentales permet la représentation d'une chimie numérique suffisante dans le cas de notre étude. C'est cette loi simplifiée qui sera utilisée dans toute la suite des calculs DNS, à l'aide d'une version améliorée faisant appel à la méthode KGKAS [Thomine 2011].

Siméon Denis Poisson (1781-1840)
« Petit Poisson deviendra grand pourvu que Dieu lui prête vie. » (lafontaine)

Hermann Ludwig von Helmholtz (1821-1894)

1.5 Solveur Elliptique

1.5.1 Introduction

La résolution de l'équation de Poisson est l'un des éléments majeurs de l'implémentation d'un code type low-Mach. Certaines personnes qualifient même cette partie de "cœur du code" ou "cœur du métier", ce qui n'est pas étranger au temps de calcul requis. Cette équation se retrouve dans de nombreux domaines, et notamment dans l'imagerie avec la méthode de découpage Poisson Matting [Sun et al. 2004].

Résoudre le champ de pression incompressible revient à inverser le système linéaire associé à l'ensemble du domaine. Or, ce type de résolution apporte 2 facteurs handicapants : résoudre ce système coûte excessivement cher en termes de ressources de calcul, et il est impossible pour des questions de taille de la stocker en mémoire.

Il est plus intéressant de stocker la matrice en ne conservant que les termes non nuls, mais il n'est pas possible de stocker sa matrice inverse, qui ne contient que peu ou pas de termes nuls. Une explication par l'exemple est ici de mise :

Considérons un domaine de taille 100×100 points, stocké en double précision. La matrice de Poisson étant de taille $nbpoint \times nbpoint$ (ie ici $(100 \times 100)^2$), cela donne un total en mémoire de $(100 * 100)^2 \times 8\ bits\ /10^{-6} = 800\ mo$, ce qui reste acceptable pour un ordinateur classique.

En considérant maintenant le même domaine, mais en 3 dimensions : $100 \times 100 \times 100$ points, il est possible d'obtenir par le même calcul un total de 8 000 000 $mo = 800\ go$ de mémoire RAM nécessaire pour stocker la matrice inverse. Aucun ordinateur actuel à mémoire partagé, aussi puissant soit-il, ne peut absorber un tel volume. Il est donc difficile d'imaginer qu'une simula-

tion DNS ou LES de plusieurs centaines de millions (voir milliards) de points puisse utiliser un tel principe.

Il est ainsi nécessaire de recourir aux méthodes itératives, c'est à dire résoudre le champ de pression dynamique localement à chaque itération du solveur DNS.

Dans une première partie, la construction de la matrice de Poisson ainsi que ses différents aspects seront analysées. Seront ensuite présentées les méthodes itératives utilisées au sein de cette thèse, ainsi que les méthodes de pré-conditionnement multi-grid. Pour finir, l'aspect optimisation sera évoqué.

Dernier point avant de rentrer dans le vif du sujet : seule la recherche de performances a été visée, au détriment parfois de la conformité à l'algorithme ou aux équations originales.

1.5.2 Construction de la matrice

Le système de Poisson 2D à résoudre, décrit précédemment, est le suivant :

$$\Delta P = F \tag{1.77}$$

Soit en discrétisant l'équation :

$$AP = F$$

Avec A la matrice de discrétisation. En considérant une discrétisation centrée de la dérivée seconde à l'ordre 2, celle-ci est approchée selon :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \approx \frac{P(i+1,j) - 2P(i,j) + P(i-1,j)}{\Delta x^2} + \frac{P(i,j+1) - 2P(i,j) + P(i,j-1)}{\Delta y^2} \tag{1.78}$$

Pour un système de 4×4 points, et en considérant des conditions aux limites périodiques, on peut expliciter la matrice selon :

	$1,1$	$2,1$	$3,1$	$4,1$	$1,2$	$2,2$	$3,2$	$4,2$	$1,3$	$2,3$	$3,3$	$4,3$	$1,4$	$2,4$	$3,4$	$4,4$
$1,1$	4	-1		-1	-1								-1			
$2,1$	-1	4	-1			-1								-1		
$3,1$		-1	4	-1			-1								-1	
$4,1$	-1		-1	4				-1								-1
$1,2$	-1				4	-1		-1	-1							
$2,2$		-1			-1	4	-1			-1						
$3,2$			-1			-1	4	-1			-1					
$4,2$				-1	-1		-1	4				-1				
$1,3$					-1				4	-1		-1	-1			
$2,3$						-1			-1	4	-1			-1		
$3,3$							-1			-1	4	-1			-1	
$4,3$								-1	-1		-1	4				-1
$1,4$	-1								-1				4	-1		-1
$2,4$		-1								-1			-1	4	-1	
$3,4$			-1								-1			-1	4	-1
$4,4$				-1								-1	-1		-1	4

La redondance de l'ensemble est en fait trompeuse. En effet, il est considéré ici un pas d'espace fixe, ce qui ne sera pas toujours le cas dans nos calculs en pratique.
Un point intéressant à noter est que la matrice est pratiquement vide (creuse). Il est possible de ne stocker en mémoire que ses termes non nuls afin de résoudre une partie des problèmes de taille mémoire expliqués précédemment.

1.5.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites de la pression dynamique ont un impact important pour la résolution de Poisson, notamment à cause de leur rôle dans la symétrie de la matrice.
Dans le solveur Asphodele, elles sont implémentées de la manière suivante :

Sortie :
La pression est définie avec une condition de Dirichlet homogène : $P^0 = 0$.
Cette condition aux limites ne perturbe pas la matrice principale, puisqu'elle se situe dans le terme de droite. Elle renforce même la stabilité du système et sa présence sur au moins un axe

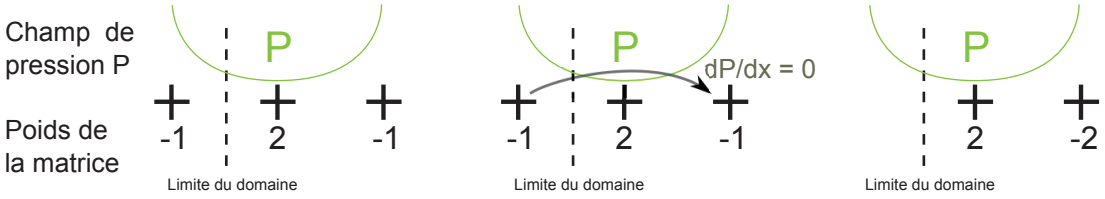


FIGURE 1.4 – Apparition de la dissymétrie dans la matrice, conditions de Neumann homogène $\frac{\partial P}{\partial x} = 0$

est nécessaire au bon déroulement du calcul. En effet, une valeur fixe du champ donne un ou plusieurs points d'accrochage à la méthode itérative qui ne parviendra pas à se stabiliser sans.

Périodicité :

Cette condition peut sembler simple, mais Asphodele supposant que la maille Nx(1) est égale à la maille 1 pour un cas périodique, la matrice n'est plus symétrique. Une simple parade utilisée ici avec succès a consisté à réduire temporairement la taille du champ (i.e. ignorer la dernière maille du champ) avant de faire appel à la méthode itérative.

Entrée et murs : :

Ces conditions sont les plus délicates à utiliser. En effet, le champ de pression incompressible est défini ici par une condition de Von Neumann homogène : $\frac{\partial P^0}{x^n} = 0$, c'est à dire que la dérivée normale est nulle.

Asphodele étant un solveur à maillage non décalé (aussi appelé "colocated", par opposition à un solveur à mailles décalées appelé "staggered"), la condition de Von Neumann apporte une dissymétrie de la matrice et ne permet pas de résoudre le champ avec un solveur de Poisson type Gradient Conjugué simple (fig1.4). En outre, une condition de Von Neumann n'apporte aucun "point d'accroche" au solveur de Poisson (Dirichlet impose une valeur nulle fixée, pas Von Neumann), rendant plus longue la convergence.

Par exemple, le champ étudié ici, composé d'une entrée en $x = 0$, deux murs en $y = 0$ et $y = L_y$ et une sortie en $x = L_x$, donne la matrice suivante :

	1,1	2,1	3,1	4,1	1,2	2,2	3,2	4,2	1,3	2,3	3,3	4,3	1,4	2,4	3,4	4,4
1,1	4	−2			−2											
2,1	−1	4	−1			−2										
3,1		−1	4	−1			−2									
4,1			−1	4				−2								
1,2	−1				4	−2			−1							
2,2		−1			−1	4	−1			−1						
3,2			−1			−1	4	−1			−1					
4,2				−1			−1	4				−1				
1,3					−1				4	−2			−1			
2,3						−1			−1	4	−1			−1		
3,3							−1			−1	4	−1			−1	
4,3								−1			−1	4				−1
1,4									−2				4	−2		
2,4										−2			−1	4	−1	
3,4											−2			−1	4	−1
4,4												−2			−1	4

Il est notable que la présente matrice n'est plus symétrique à cause des conditions aux limites étudiées. Cet aspect aura un impact sur les méthodes utilisées par la suite.

Pour finir, il est nécessaire de prendre en compte l'interaction entre les conditions aux limites et leur impact sur la matrice. En effet, les angles et les coins de la zone de calcul doivent recevoir une attention toute particulière et des valeurs spécifiques en fonction des conditions aux limites qui les entourent (fig 1.5).
La prise en compte de chaque cas particulier ne représente pas de difficulté majeure mais reste longue à implémenter du fait de la diversité des configurations possibles.

Pour finir, il est intéressant d'évoquer que **seule la dérivée** de P est recherchée. Le calcul donne un résultat à une constante près. Il est ainsi possible, dans un cas sans point d'accroche tel un champ entièrement périodique ou un réacteur homogène "full-Neumann", d'imposer un point à 0 pour permettre la convergence du système.

Afin de résoudre l'équation de Poisson tout en compensant les effets de ressources en mémoire, une approche itérative a été étudiée au cours de cette thèse.

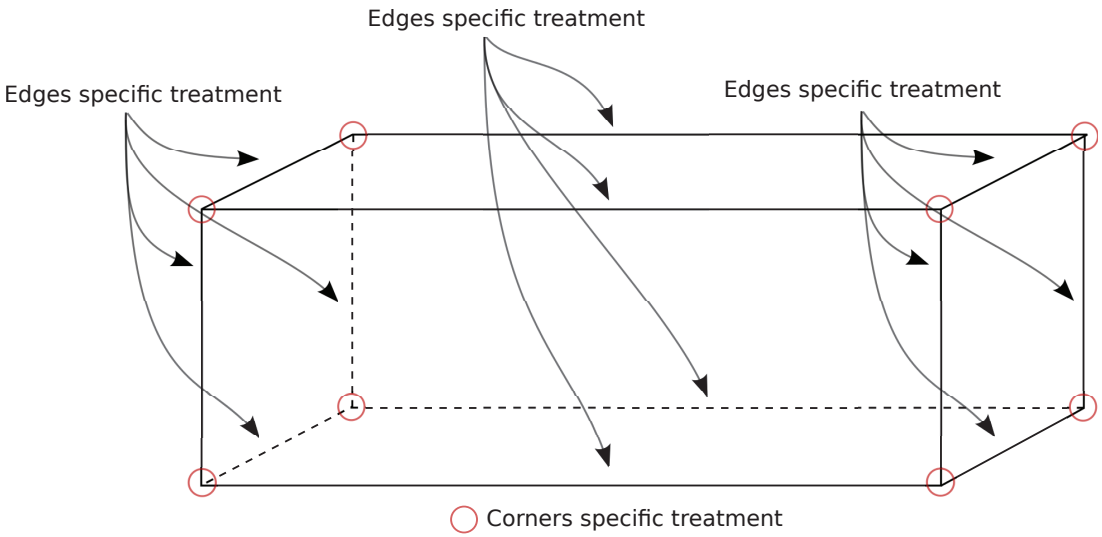


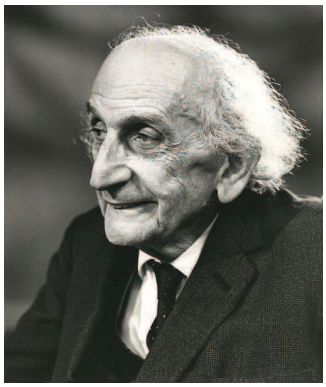
FIGURE 1.5 – Traitements spécifiques sur la matrice de Poisson, cas des coins (corners) et des arêtes (edges)

1.5.4 Méthodes itératives

Une méthode itérative est un algorithme consistant à résoudre un calcul par itérations, avec pour objectif de se rapprocher de la solution à chaque nouvelle itération tout en diminuant le résidu associé. Le processus s'arrête lorsque la précision voulue est atteinte.
Les méthodes itératives sont souvent utilisées pour les calculs parallèles du fait de leur grande facilité à être "découpées". Elles nécessitent cependant d'être couplées à un pré-conditionneur afin d'être performantes et d'éviter un trop grand nombre d'itérations, pouvant amener une accumulation d'erreur.
Ces algorithmes sont extrêmement voraces en ressources CPU, en mémoire ainsi qu'en communications MPI, rendant essentiel une optimisation des calculs.
Certaines de ces méthodes itératives sont des méthodes de Krylov [Van der Vorst 1995]. Il est possible de trouver de plus amples informations sur ces méthodes et leurs aspects mathématiques dans des articles accessibles aux non mathématiciens tel [Ipsen et al. 1982] ou [Gutknecht 2007].

1.5.4.1 Gradient Conjugué

La première méthode étudiée fut le Gradient Conjugué simple, sans pré-conditionnement. Cet algorithme fut imaginée en 1950 simultanément par **Cornelius Lanczos** et **Magnus Hestenes**. Il s'agit d'une méthode itérative qui converge en un nombre fini d'itérations pour une fonctionnelle quadratique. Cet algorithme exposé en détail ici [Van der Vorst 1995] servira de base pour les suivants qui en dérivent.
En considérant la résolution du système $Ax = b$, son algorithme est le suivant :



Cornelius Lanczos (1893-1974)

Magnus Rudolph Hestenes (1906-1991)

Soit la solution initiale x_0 (initial guess), mise à zero ou chargée avec la solution du pas de temps précédent comme point de départ (plus performant). Notons x_i la solution calculée au pas i, et r_0 et r_i respectivement le résidu initial et le résidu (écart entre la solution actuelle et la solution du système à résoudre) au pas i. Soit p_i et q_i des tableaux (vecteurs) de travail, et α, β des variables (scalaires) de travail. L'algorithme suivant itère sur i, et le résidu r_i diminue au fur et à mesure que i augmente. Une fois le résidu souhaité atteint, la solution est contenue dans x_i.

$$
\begin{aligned}
&x_0 = initial\ guess,\ r_0 = b_A x_0 \\
&p_{-1} = 0 \\
&\beta_{-1} = 0 \\
&\rho_0 = (r_0, r_0) \\
&for\ i = 0, 1, 2, ... \\
&\qquad p_i = r_i + \beta_{i-1} p_{i-1} \\
&\qquad q_i = A p_i \\
&\qquad \alpha_i = \frac{\rho_i}{(p_i, q_i)} \\
&\qquad x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \\
&\qquad r_{i+1} = r_i - \alpha_i q_i \\
&\qquad if\ x_{i+1}\ is\ accurate\ enough\ then\ quit \\
&\qquad \rho_{i+1} = (r_{i+1}, r_{i+1}) \\
&\qquad \beta_i = \frac{\rho_{i+1}}{\rho_i} \\
&end
\end{aligned}
$$

Cette méthode est relativement peu coûteuse en terme de ressources (par rapport à celles présentées par la suite), mais doit respecter certaines conditions contraignantes : la matrice

doit impérativement être symétrique et définie positive. Ces conditions sont nécessaires (mais pas suffisantes) pour assurer la convergence de l'algorithme du Gradient Conjugué.

1.5.4.2 Gradient Conjugué Pré-conditionné

Le Gradient Conjugué peut être grandement amélioré par l'ajout d'un pré-conditionneur. Ce pré-conditionneur se trouve sous la forme d'une matrice K, proche de la matrice principale A. Le principe du pré-conditionneur est que le système $KP = F$ peut être facilement résolu et ce à faible coût, ce qui rapproche de la solution principale, notamment si les caractéristiques essentielles de A se retrouvent dans K. Une méthode simple de pré-conditionnement, imparfaite mais présentant un bon début, consiste à utiliser une matrice K^{-1} égale à l'inverse de la diagonale principale de la matrice A. Cela va normaliser le système par le poids de la diagonale et aider à la convergence et à la stabilité du GC.

Le nouvel algorithme, maintenant appelé Gradient Conjugué Pré-conditionné (PCG) est le suivant (les modifications apportées par le préconditionnement par rapport au GC ont été mises en gras), avec K la matrice de préconditionnement et ω_i une variable (scalaire) de travail :

$x_0 = initial\ guess,\ r_0 = b_A x_0$
$p_{-1} = 0$
$\beta_{-1} = 0$
$solve\ \omega_0\ from\ \omega_0 K = r_0$
$\rho_0 = (r_0,\omega_0)$
$for\ i = 0, 1, 2, ...$
$p_i = \omega_i + \beta_{i-1} p_{i-1}$
$q_i = A p_i$
$\alpha_i = \frac{\rho_i}{(p_i,q_i)}$
$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$
$r_{i+1} = r_i - \alpha_i q_i$
$if\ x_{i+1}\ is\ accurate\ enough\ then\ quit$
$solve\ \omega_{i+1}\ from\ \omega_{i+1} K = r_{i+1}$
$\rho_{i+1} = (r_{i+1},\omega_{i+1})$
$\beta_i = \frac{\rho_{i+1}}{\rho_i}$
end

Au sein du solveur d'Asphodele, les conditions de sortie et de périodicité utilisant un Dirichlet permettent l'utilisation d'un PCG simple. Cependant, les conditions de type Von Neumann dues aux murs, aux symétries axiales et aux entrées dé-symétrisent la matrice de Poisson A, empêchant ainsi la convergence et la stabilité du PCG. Comme dit précédemment, cet aspect est provoqué par l'agencement "colocated" du maillage : le point d'inflexion de la dérivée nulle se situe sur le dernier point de maillage, provoquant l'apparition du coefficient -2 pour le point suivant à l'intérieur du domaine (cf fig 1.4).

Afin de résoudre ce problème et pour pouvoir utiliser des matrices plus complexes comme celles apparaissant si l'on introduit des frontières immergées, deux algorithmes plus sophistiqués, le BICGSTAB et le BICGSTAB(2) ont été utilisés pour résoudre le champ de pression incompressible.

1.5.4.3 BICGSTAB

Le BICGSTAB, pour Bi-Conjugate Gradient Stabilized [Van der Vorst 1995], est une méthode itérative permettant l'utilisation de matrices non symétriques au détriment des performances avec un coût de calcul supérieur (un peu plus de 2 fois supérieur au PCG). Cela ressemble

essentiellement à un "double" PCG.
Le jeu de données est exactement le même que pour le PCG, mais doublé. Ainsi il sera possible de repérer deux cœurs de PCG, ainsi que leur liaison. L'algorithme de cette méthode est le suivant :

Initialisation classique

$x_0 = initial\ guess,\ r_0 = b_A x_0$

$\bar{r_0}$ *is an arbitrary vector such that*

$(\bar{r_0}, r_0) \neq 0,\ example\ \bar{r_0} = r_0$

$\rho_{-1} = \alpha_{-1} = \omega_{-1} = 1$

$v_{-1} = p_{-1} = 0$

Itération

$for\ i = 0, 1, 2, ...$

——— **Liaison** ———

$\rho_i = (\bar{r_0}, r_0)$

$\beta_{i-1} = (\rho_i/\rho_{i-1})(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})$

$p_i = r_i + \beta_{i-1}(p_{i-1} - \omega_{i-1} v_{i-1})$

——— **PCG1** ———

$Solve\ \hat{p}\ from\ K\hat{p} = p_i$

$v_i = A\hat{p}$

$\alpha_i = \rho_i/(\bar{r_0}, v_i)$

$s = r_i - \alpha_i v_i$

$if\ \|s\|\ small\ enough\ then$

$x_{i+1} = x_i + \alpha_i \hat{p};\ quit$

——— **PCG2** ———

$Solve\ z\ from\ Kz = s$

$t = Az$

$w_i = (t, s)/(t, t)$

$x_{i+1} = x_i + \alpha_i \hat{p} + \omega_i z$

$if\ x_{i+1}\ accurate\ enough\ thenquit$

$r_{i+1} = s - \omega_i t$

end

Le BICGSTAB est l'algorithme utilisé au sein du solveur parallèle BIGFISH codé pour Parasphodele.

1.5.4.4 BICGSTAB(2)

Une seconde méthode fut implémentée à des fins de tests, le BICGSTAB(2) [Van der Vorst 1995], connu pour sa très grande stabilité. L'algorithme consiste en deux BICGSTAB se suivant couplés à un Generalized Conjugate Residual (GCR). Les BICGSTAB sont nommées "pair" et "impair" ("even" et "odd") , même si le test du résidus n'a lieu qu'une fois par itération globale.

Son algorithme est le suivant :

$x_0 = initial\ guess,\ r_0 = b_A x_0$

$\hat{r_0}$ *is an arbitrary vector such that*

$(\hat{r_0}, r_0) \neq 0,\ example\ \hat{r_0} = r_0$

$\rho_0 = 1; U = 0; \alpha = 0; \omega_2 = 1$

$for\ i = 0, 2, 4, 6, ...$

$\rho_0 = -\omega_2 \rho_0$

even BICG step :

$\rho_1 = (\hat{r_0}, r_i)\,; \beta = \alpha\rho_1/\rho_0; \rho_0 = \rho_1$

$u = r_i - \beta u$

$v = Au$

$\gamma = (v, \hat{r_0})\,; \alpha = \rho_0/\gamma$

$r = r_i - \alpha v$

$s = Ar$

$x = x_i + \alpha u$

odd BICG step :

$\rho_1 = (\hat{r_0}, s)\,; \beta = \alpha\rho_1/\rho_0; \rho_0 = \rho_1$

$v = s - \beta v$

$w = Av$

$\gamma = (w, \hat{r_0})\,; \alpha = \rho_0/\gamma$

$u = r - \beta u$

$r = r - \alpha v$

$s = s - \alpha w$

$t = As$

$GCR(2) - part$:

$\omega_1 = (r, s)\,; \mu = (s, s)$

$\nu = (s, t)\,; \tau = (t, t)$

$\omega_2 = (r, t)\,; \tau = \tau - \nu^2/\mu$

$\omega_2 = (\omega_2 - \nu\omega_1/\mu)\,/\tau$

$\omega_1 = (\omega_1 - \nu\omega_2)\,/\mu$

$x_{i+2} = x + \omega_1 r + \omega_2 s + \alpha u$

$r_{i+2} = r - \omega_1 s - \omega_2 t$

$if\ x_{i+2}\ accurate\ enough\ thenquit$

$u = u - \omega_1 v - \omega_2 w$

end

Cependant, devant la simplicité des matrices étudiées, le BICGSTAB(2) s'est avéré trop gourmand en ressources de calcul face au gain en termes de temps de convergence par rapport au BICGSTAB classique. Le BICGSTAB(2) est en fait plus adapté à des cas moins classiques comme la résolution de Poisson dans des codes non structurés.

1.5.5 Pré-conditionnement multi-grid

Toutes ces méthodes itératives possèdent un défaut majeur : leur temps de convergence est excessivement long. Des centaines voir des milliers d'itérations sont parfois nécessaires pour parvenir à un résidu acceptable. L'ajout d'un pré-conditionneur est absolument nécessaire pour accélérer leur convergence.

La méthode multi-grid introduit un pré-conditionneur efficace et adapté pour seconder une méthode itérative et accélérer sa convergence.
En effet, les méthodes multi-grid apportent un très bon lissage des basses fréquences (du fait de la résolution sur une grille grossière, sans hautes fréquences (fig 1.6)) et une convergence en $O(N)$ avec N le nombre d'inconnues à résoudre, alors que les méthodes itératives classiques type Gradient conjugué convergent en $O(N^\alpha)$ (avec $1 < \alpha \leq 2$) et excellent dans le lissage des hautes fréquences, ce qui se traduit par une forte décroissance du résidu maximum global au cours des premières itérations. Combiner ces deux méthodes permet d'allier leurs avantages pour de faibles inconvénients.

Le principe du multi-grid est relativement simple. Il consiste à effectuer quelques itérations d'une résolution "Low Cost" proche de la résolution réelle et ce en évoluant sur différents niveaux de maillage, nécessitant du coup des interpolations, des restrictions, etc.

Un bon moyen de "sentir" les effets du multi-grid au cours de la convergence de la méthode itérative est de se rappeler que la résolution de Poisson revient à inverser un système linéaire : dans une résolution implicite chaque point doit avoir connaissance des autres. Ainsi, pour que l'information circule d'un point à un autre d'un domaine de 1000 points de large, en considérant un "stencil" (i.e. une largeur de balayage pour la dérivée seconde par itération) de 1 point de chaque côté, il faut 1000 itérations de gradient conjugué simple pour que les extremums du domaine aient connaissance l'un de l'autre. En utilisant un multi-grid, l'information circule plus vite (même si elle est moins précise), la taille du domaine visé étant fortement diminuée. Il est possible d'assister à une convergence bien plus rapide.

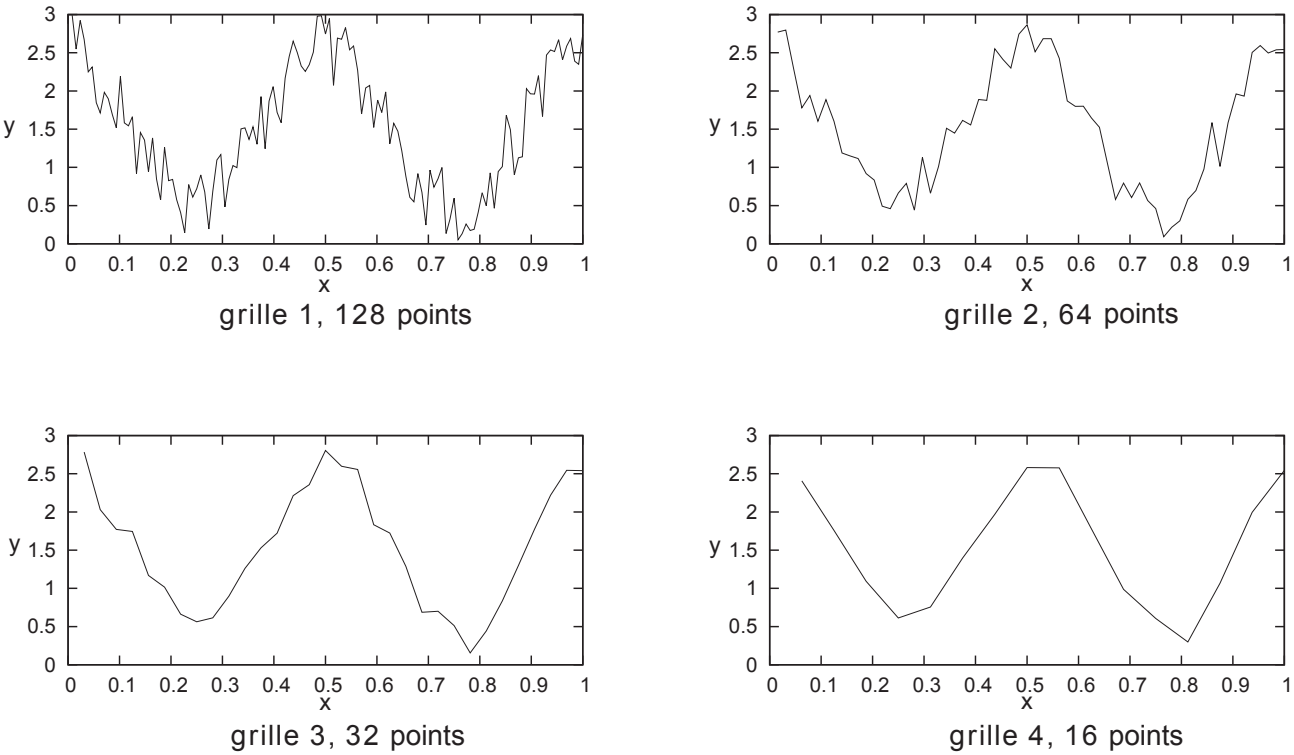


FIGURE 1.6 – Principe du multi-grid, Lissage des basses fréquences

Plusieurs méthodes ont été vues ou étudiées au cours de cette thèse : le Red Black Gauss Seidel, le Weighted Jacobi, et pour la génération de maillage l'Algebraic multi-grid et le Geometric multi-grid.

Il est intéressant de poser dès maintenant les choix effectués et les raisons de ces choix. La méthode Red Black Gauss Seidel [Oh 2003] se veut une méthode simple et efficace pour appréhender le multi-grid. Cependant, le taux de convergence désastreux de cet algorithme et ses contraintes ont poussé à chercher d'autres méthodes. Le Weighted Jacobi est pour sa part aussi simple à mettre en place, et se montre plus performant [Boulder 2005][Strang 2006]. La méthode de génération de maillage d'Algebraic multi-grid [Notay 2010][Napov et al. 2012][Wurst 2009], simplement vue mais non étudiée, permet des facilités d'implémentation et de portabilité dans les cas de maillages non structurés. A l'inverse, la méthode de Geometric multi-grid se veut complexe lors de maillages non structurés mais apporte des gains de performance significatifs par rapport à l'Algebraic [Wurst 2009][Wesseling 2000][Feuchter 2003][Wu et al. 1987]. Asphodele étant un code à maillage structuré, le choix s'est finalement porté sur cette dernière méthode couplée à un Weighted Jacobi qui fut étudiée et codée au sein du code, les difficultés de maillages ne se posant pas ici.

Dans un premier temps, l'algorithme multi-grid générique pour un cas simple à deux grilles

sera présenté, puis le principe sera généralisé à plusieurs niveaux de grilles avant d'aborder en détail les méthodes codées, à savoir le Red Black Gauss Seidel (RBGS) et le Geometric multi-grid (GMG) - Weighted Jacobi.

1.5.5.1 La méthode en bigrid, principe de base

Considérons deux niveaux de calcul (2 grilles donc) : le niveau de calcul "normal" du code représenté par la matrice A_h, le second membre F_h et le vecteur solution P_h, le niveau de calcul grossier représenté par la matrice A_H.

Afin de résoudre Poisson, le problème discret suivant est à calculer :

$$A_h P_h = F_h$$

A partir de ce point, la méthode multi-grid fonctionne comme suit :

Pré-lissage :
La méthode commence par effectuer n itérations de Weighted Jacobi. Une solution approchée $\widetilde{P_h}$ du vecteur solution P_h est alors obtenue.

$$\widetilde{P_h} = L\left(A_h, F_h, n\right)$$

Résidu :
Le résidu de ce système est ensuite calculé :

$$r_h = F_h - A_h \widetilde{P_h}$$

Restriction :
Ce résidu r_h est restreint sur le niveau grossier à l'aide d'un opérateur de restriction q_h^H.

$$r_H = q_h^H r_h$$

Correction grossière :
Il est ensuite possible de calculer la correction sur la grille grossière δP_h.

$$\delta P_H = S\left(A_H, r_H\right)$$

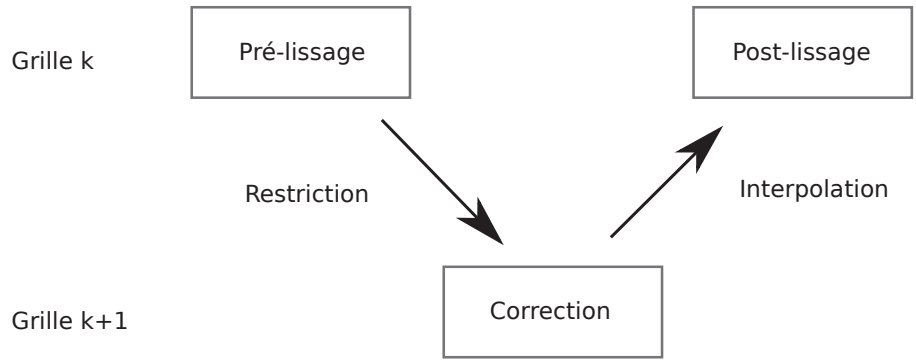


FIGURE 1.7 – Méthode du Bigrid, principe de base à étendre sur plus de niveaux

Prolongement :
La valeur de la correction δP_H est prolongée sur le niveau de calcul fin (celui du code normal) par l'intermédiaire de l'opérateur q_H^h pour obtenir δP_h.

$$\delta P_h = q_H^h \delta P_H$$

Correction fine :
$\widetilde{P_h}$ est mis à jour en appliquant la correction calculée sur la grille grossière :

$$\widetilde{P_h} \leftarrow \widetilde{P_h} + \delta P_h$$

Post-lissage :
Pour finir, il reste à effectuer n' itérations de Weighted-Jacobi.

$$\widetilde{P_h} \leftarrow L'\left(A_h, F_h, n'\right)$$

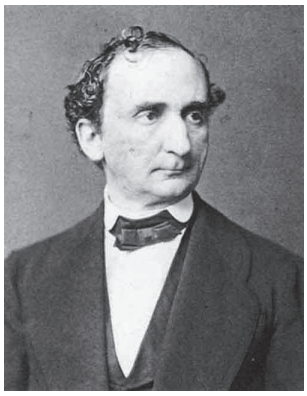
A la fin du calcul, $\widetilde{P_h}$ tend vers P_h.

La méthode multi-grid consiste à appliquer le même principe que la méthode bigrid mais sur plus de niveaux de grilles, afin d'accélérer encore la convergence tout en diminuant le coût de calcul (seuls les premiers niveaux sont coûteux car ce sont ceux qui ont le plus grand nombre de points, et seuls les derniers niveaux apportent un gain significatif sur la convergence).

1.5.5.2 Red Black Gauss-Seidel

Inventée au 19ième siècle, conjointement par **Carl Friedrich Gauss** et **Philipp Ludwig von Seidel**, la méthode de Gauss-Seidel permet une résolution itérative des systèmes linéaires. Cependant, l'algorithme original impose un calcul point après point, rendant caduques les pos-

Johann Carl Friedrich Gauss (1777-1855)



Philipp Ludwig von Seidel (1821-1896)

sibilités de parallélisme.

La méthode du Red Black Gauss Seidel (RBGS), peut être vue comme une variante pour utiliser la méthode de Gauss-Seidel en parallèle. Elle a été implémentée ici comme pré-conditionneur d'un BICGSTAB afin d'accélérer la convergence de ce dernier.
Cet algorithme est très utilisé dans les écoles et les universités, notamment pour sa grande facilité à être codé et compris. Le cas classique consiste à résoudre l'équation de la chaleur en 2D avec des conditions aux limites fixées, puis de paralléliser ce même code avec MPI.
Des solutions analytiques sont connues et permettent de vérifier les résultats.

Considérons l'équation de Poisson standard (Opérateur laplacien) :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = F \tag{1.79}$$

En discrétisant le tout, il est possible d'obtenir la forme suivante :

$$\frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{h_y^2} = F \tag{1.80}$$

En réaménageant cette expression, il est possible d'obtenir :

$$P_{i,j} = \frac{-Fh_x^2h_y^2 + h_y^2(P_{i+1,j} + P_{i-1,j}) + h_x^2(P_{i,j+1} + P_{i,j-1})}{2(h_x^2 + h_y^2)} \tag{1.81}$$

La valeur $P_{i,j}$ peut maintenant être calculée à l'aide des points voisins. Comme il s'agit d'un schéma implicite, c'est ici qu'entre en jeu la méthode RBGS.
Les différents points sont alternativement associés à une couleur (rouge, noir, rouge, noir, ...). Il suffit ensuite de calculer tous les points rouges en fonction des points noirs, puis de calculer

les points noirs avec ces nouveaux points rouges, et ainsi de suite. En itérant le résidu diminue et le résultat final apparait. Cette algorithme est bien sûr autonome, et pourrait, dans l'absolu, être utilisé pour résoudre Poisson. Cependant le nombre d'itérations avant d'atteindre un résidu raisonnable serait tel que ce cas de figure n'est pas envisageable.

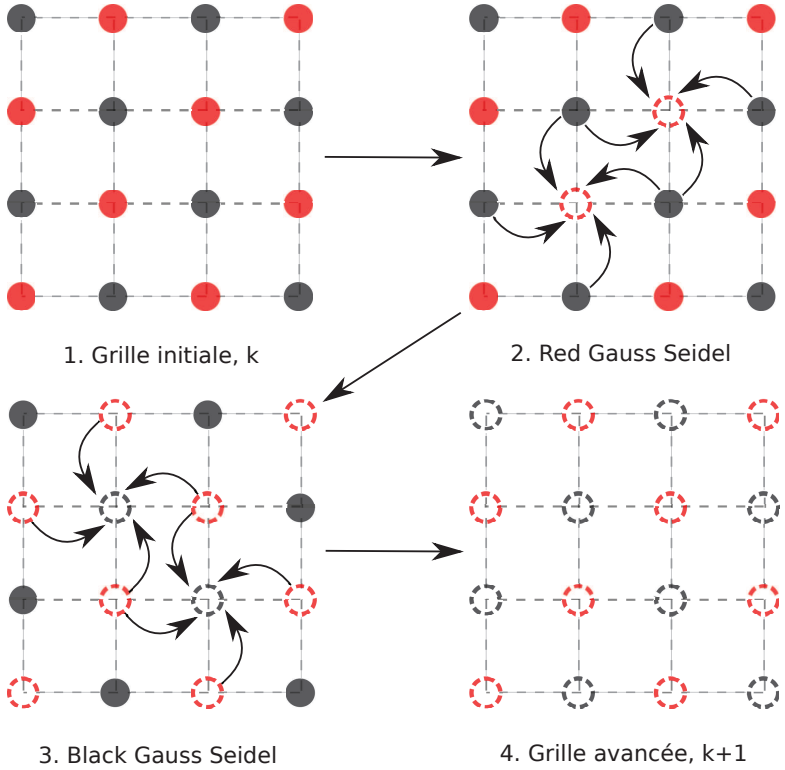


FIGURE 1.8 – Méthode du Red-Black Gauss-Seidel, principe du calcul par couleurs

Le RedBlack Gauss Seidel, bien que simple, montre vite ses limites en terme de conditions aux limites et de performances (faible baisse du résidu). Une méthode proche de type Weighted Jacobi avec un maillage généré à l'aide un Geometric multi-grid a donc été adoptée par la suite afin d'améliorer fortement les performances et la génération des grilles de calculs.

1.5.5.3 Geometric multi-grid

La méthode Geometric multi-grid consiste en différents niveaux de grilles semblables à des maillages. Ces grilles sont de plus en plus grossières afin de lisser les basses fréquences. Les différents niveaux de maillages sont totalement indépendants, le but étant d'avoir un nombre de nœuds décroissant, à savoir dans notre cas 2 fois moins à chaque niveau supplémentaire.
La principale difficulté inhérente à cette méthode réside dans la construction des différents maillages. Dans notre cas, le code étant structuré à pas fixes et non déstructuré, ce problème ne se pose pas.

Une fois cette étape achevée, il reste à calculer les matrices des différents niveaux, i.e. à calculer les matrices de l'opérateur laplacien interpolées sur chaque niveau de grille. Pour cela, un opérateur d'interpolation reposant sur les bases suivantes est utilisé : la valeur centrale de la matrice (diagonale) est calculée à partir des points environnants de la grille de niveau inférieur. Soit :

$$\begin{aligned}
M^{k+1}_{C(i,j)} =& 0.125 \times \left(M^k_{C(ii-1,jj-1)} + M^k_{N(ii-1,jj-1)} + M^k_{E(ii-1,jj-1)} + M^k_{NE(ii-1,jj-1)}\right) \\
&+0.125 \times \left(M^k_{C(ii,jj-1)} + M^k_{N(ii,jj-1)} + M^k_{W(ii,jj-1)} + M^k_{NW(ii,jj-1)}\right) \\
&+0.125 \times \left(M^k_{C(ii,jj-1)} + M^k_{N(ii,jj-1)} + M^k_{W(ii,jj-1)} + M^k_{NW(ii,jj-1)}\right) \\
&+0.125 \times \left(M^k_{C(ii,jj-1)} + M^k_{N(ii,jj-1)} + M^k_{W(ii,jj-1)} + M^k_{NW(ii,jj-1)}\right)
\end{aligned}$$

Avec ii et jj les points sur la grille de niveau inférieur (soit $jj = 2 \times j$ et $ii = 2 \times i$), et E le point à l'Est, N au Nord, NW au Nord-Ouest, etc. Il s'agit ici des points en **rouge** sur la figure 1.9.

La valeur 0.125, en principe fixée à 0.25, est utilisée car donnant de meilleurs résultats au niveau de la convergence. (Pour rappel, le calcul du multi-grid n'a pas d'impact sur la véracité des résultats du BICGSTAB, il ne fait que faciliter sa convergence)

La valeur des points environnants de la matrice est calculée sur le même principe :

$$\begin{aligned}
M^{k+1}_{N(i,j)} &= 0.125 \times \left(M^k_{N(ii-1,jj)} + M^k_{NE(ii-1,jj)} + M^k_{N(ii,jj)} + M^k_{NW(ii,jj)}\right) \\
M^{k+1}_{S(i,j)} &= 0.125 \times \left(M^k_{S(ii-1,jj-1)} + M^k_{SE(ii-1,jj-1)} + M^k_{S(ii,jj-1)} + M^k_{SW(ii,jj-1)}\right) \\
M^{k+1}_{E(i,j)} &= 0.125 \times \left(M^k_{E(ii,jj-1)} + M^k_{NE(ii,jj-1)} + M^k_{E(ii,jj)} + M^k_{SE(ii,jj)}\right) \\
M^{k+1}_{W(i,j)} &= 0.125 \times \left(M^k_{W(ii-1,jj-1)} + M^k_{NW(ii-1,jj-1)} + M^k_{W(ii-1,jj)} + M^k_{SW(ii-1,jj)}\right)
\end{aligned}$$

Soit respectivement sur la figure 1.9 les couleurs **violet**, **vert**, **orange** et **bleu**.

$$\begin{aligned}
M^{k+1}_{SE(i,j)} &= 0.125 * M^k_{SE(ii,jj-1)} \\
M^{k+1}_{NE(i,j)} &= 0.125 * M^k_{NE(ii,jj)} \\
M^{k+1}_{NW(i,j)} &= 0.125 * M^k_{NW(ii-1,jj)} \\
M^{k+1}_{SW(i,j)} &= 0.125 * M^k_{SW(ii-1,jj-1)}
\end{aligned}$$

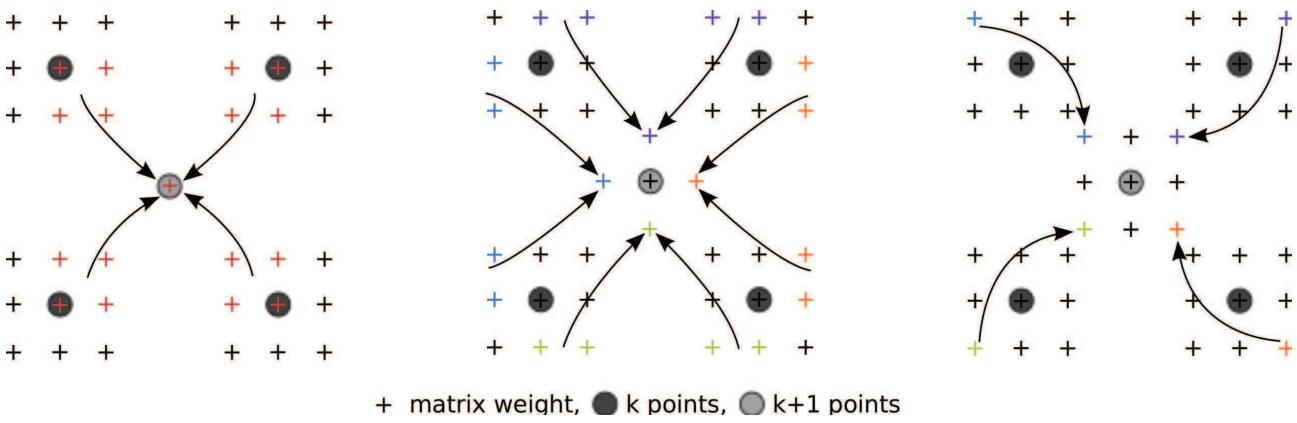


FIGURE 1.9 – Principe de répartition du maillage, Geometric multi-grid

Soit respectivement sur la figure 1.9 les couleurs **orange**, **violet**, **bleu** et **vert**.

Tous ces calculs sont effectués une seule fois au début du calcul, et n'interviennent pas dans les performances du code.

1.5.5.4 Algorithme final

L'algorithme utilisé ensuite en cours de calcul peu s'écrire comme suit, avec K la matrice de préconditionnement, et la solution initiale contenue dans F, ainsi que le résultat final :

Descente dans les niveaux

$U^0 = F/D^-1$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^0)$

$U^1 = U^0 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^0)$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^1)$

$U^0 = U^1 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^1)$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^0)$

$F = F - KU^0$

$Restriction$

Niveau min

$U^0 = F/D^-1$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^0)$

$U^1 = U^0 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^0)$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^1)$

$U^0 = U^1 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^1)$

Montee dans les niveaux

$Interpolation$

$Correction$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^0)$

$U^1 = U^0 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^0)$

$\rightleftarrows Comm_MPI(U^1)$

$U^0 = U^1 - \frac{\omega}{D^-1}(F - KU^1)$

Finalise

$F = U^0$

Les opérations de restriction et d'interpolation consistent à poser 0.25 fois les quatre points adjacents pour la restriction, et l'imposition de la valeur sur les 4 points adjacents pour l'interpolation (fig 1.10).

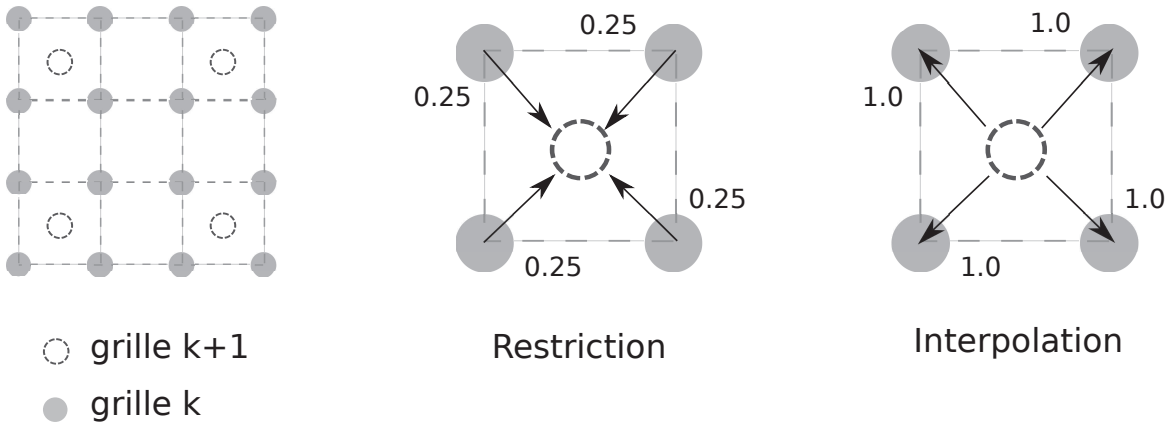
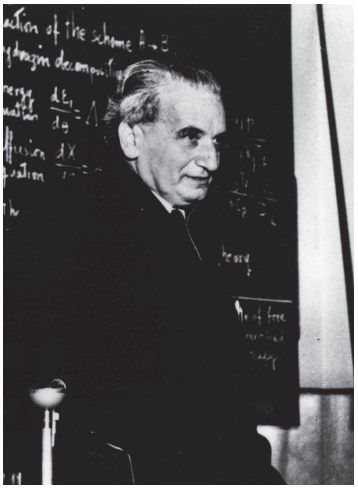


FIGURE 1.10 – Opérations de changement de grilles, interpolation et restriction



Theodore von Kármán (1881-1963)

Andrey Kolmogorov (1903-1987)

1.6 Turbulence et injection turbulente

DANS cette section sera traité l'aspect turbulent de la mécanique des fluides, et notamment la méthode de Kraichnan/Celik [Kraichnan, 1970] d'injection turbulente artificielle se voulant faible consommatrice en ressources de calcul. Cette méthode a été utilisée pour les calculs 2D, ainsi qu'en amont du canal d'injection pour les simulations 3D.
La première partie de cette section rappelle les notions de base de la turbulence, afin d'introduire la seconde partie qui traite de la méthode d'injection turbulente étudiée au cours de cette thèse.

1.6.1 Transformée de Fourier

Afin de développer la méthode de Kraichnan/Celik, il est essentiel de disposer des 2 relations de passage d'un espace à l'autre (normal et spectral). La transformée de Fourier est définie de la manière suivante :

$$\hat{A}(k,t) = \int_{D_{(r)}} A(r) e^{-jkr} d^3r = TF(A(r)) \tag{1.82}$$

Et la transformée inverse :

$$A(r,t) = \int_{D_{(k)}} \hat{A}(r) e^{jkr} d^3k = TF^{-1}(\hat{A}(k)) \tag{1.83}$$

avec $j^2 = -1$.

Il s'agit des relations utilisées par défaut dans les librairies mathématiques de calcul (fftw).

1.6.2 Turbulence et grandeurs caractéristiques

Définition :

En chaque point du champ résolu, il est possible de découpler la vitesse en la somme de sa composante continue et de sa fluctuation.

$$u_i = \overline{u_i} + u_i' \tag{1.84}$$

La présente étude se concentrera sur la turbulence homogène isotrope. Ceci implique deux hypothèses :

- Isotropie : les propriétés de la turbulence sont invariantes par rotation dans le système de coordonnées.
- Homogénéité : les propriétés de la turbulence sont invariantes par translation dans le système de coordonnés.

Corrélation des vitesses :

Le tenseur de corrélation des vitesses entre deux points A et B est défini de la manière suivante :

$$Q_{ij}(A, B, t) = \overline{u_i'(A, t)u_j'(B, t)} \tag{1.85}$$

Avec u' la composante fluctuante de la vitesse, et $\overline{x}$ l'opérateur de moyenne spatiale. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, la valeur du tenseur est uniquement dépendante de la distance r, ce qui permet de poser :

$$Q_{ij}(A, B, t) = Q_{ij}(r, t) \;\; \forall A, B \;\; tels\ que\ r = ||\vec{AB}|| \tag{1.86}$$

Ce qui implique aussi :

$$\overline{u_i'^2} = U_p^2 \;\; \forall A, \; \forall i \;\; (valeur\ en\ r = 0) \tag{1.87}$$

Avec U_p la vitesse turbulente représentative de l'intensité de la turbulence dans chaque direction.

Energie cinétique turbulente :

Il est alors possible de définir l'expression de l'énergie cinétique turbulente de la manière suivante [Baum, Poinsot, 1992] :

$$K = \frac{\overline{u_i' u_i'}}{2} = \frac{3U_p^2}{2} \tag{1.88}$$

Echelle intégrale :

Il est aussi possible de définir les fonctions de corrélation longitudinales et transverses, respectivement $f(r,t)$ et $g(f,t)$, et leurs échelles intégrales associées $\Lambda_f(t)$ et $\Lambda_g(t)$:

$$f(r,t) = \frac{Q_{11}(r,t)}{U_p^2}, \quad \Lambda_f(t) = \int_0^{+\infty} f(r,t)dr \tag{1.89}$$

$$g(r,t) = \frac{Q_{22}(r,t)}{U_p^2}, \quad \Lambda_g(t) = \int_0^{+\infty} g(r,t)dr \tag{1.90}$$

Taux de dissipation :

Le taux de dissipation engendré par la viscosité du milieu ambiant, représentant le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites échelles de turbulence, peut s'écrire de la façon suivante :

$$\epsilon = \nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \tag{1.91}$$

Echelles caractéristiques :

Il est d'usage commun de définir ensuite la turbulence à l'aide de 3 grandeurs caractéristiques : l_d l'échelle de Kolmogorov correspondant aux plus petits tourbillons de la turbulence, u_d la vitesse de retournement de ces tourbillons et enfin τ_d leur temps caractéristique de retournement (à noter qu'évidemment $\tau_d = l_d/u_d$).

$$l_d = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \qquad u_d = (\nu\epsilon)^{1/4} \qquad \tau_d = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \tag{1.92}$$

Nombre de Reynolds turbulent :

Il est possible de définir une grandeur adimensionnée importante en mécanique des fluide : le nombre de Reynolds turbulent, qui compare la diffusivité turbulente $\nu_t \approx U_p\Lambda_f$ à la diffusivité moléculaire ν :

$$Re_T = \frac{U_p\Lambda_f}{\nu} \tag{1.93}$$

Ces valeurs sont liées par les relations suivantes :

$$\frac{\Lambda_f}{l_d} = Re_T^{3/4} \qquad \frac{U_p}{u_d} = Re_T^{1/4} \qquad \frac{T_p}{\tau_d} = Re_T^{1/2} \tag{1.94}$$

Avec T_p le temps intégral logiquement définit par :

$$T_p = \frac{\Lambda_f}{U_p} \tag{1.95}$$

Intensité turbulente :

Enfin, dans le cas d'écoulements turbulents à vitesse moyenne $\overline{u}$ non nulle, ce qui sera presque toujours notre cas, l'intensité turbulente peut être définie selon :

$$I_u = \frac{U_p}{\overline{u}} \tag{1.96}$$

Analyse spectrale :

Le tenseur spectral $E_{ij}(k)$ est relié à la transformée de Fourier du tenseur de corrélation des vitesses définie précédemment :

$$E_{ij}(k,t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{D_{(r)}} Q_{ij}(r) e^{-jkr} d^3r = TF(Q_{ij}(r)) \tag{1.97}$$

Dans le cas d'un écoulement incompressible à turbulence homogène et isotrope, le tenseur $E_{ij}(k)$ est symétrique et peut s'écrire sous la forme suivante [Chassaing, 2000] :

$$E_{ij}(k,t) = \frac{E(k,t)}{\pi k} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \tag{1.98}$$

Avec k et k_i respectivement la norme et une composante de $\overline{k}$, et $E(k,t)$ le spectre d'énergie cinétique turbulente, soit :

$$K = \int_0^\infty E(k,t) dk = \frac{3U_p^2}{2} \tag{1.99}$$

1.6.3 Injection turbulente parallèle

Avant de poser la méthode utilisée en tant que telle, il est important de définir l'approximation de Taylor ainsi que le spectre de Passot-Pouquet, posé par la suite.

Approximation de Taylor :

Dans notre cas, la turbulence injectée est isotrope et homogène, portée par un écoulement moyen sans gradients initiaux suivant les 3 axes. Soit à l'injection :

$$\overline{u} = (\overline{U_1}, 0, 0) \quad avec \quad \frac{\partial \overline{U_1}}{\partial x_i} = 0 \;\; et \;\; \frac{\partial \overline{U_1}}{\partial t} = 0 \tag{1.100}$$

$$\overline{u'} = (u'_1, u'_2, u'_3) \quad avec \quad \overline{u'_i u'_i} = U_p^2 \;\; \forall i \tag{1.101}$$

Comme il est impossible d'estimer en toute rigueur le tenseur spectral à partir de transformées de Fourier spatiales du tenseur des corrélations, **Taylor** proposa en 1938 l'hypothèse que la turbulence reste "gelée" sur la durée de l'échantillonnage, et qu'elle est donc simplement convectée par l'écoulement moyen en entrée $\overline{U_1}$ [Taylor, 1938 ; Bailly, Comte-Bellot, 2003]. Cela permet de poser la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \approx -\overline{U_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \tag{1.102}$$

La mesure du signal temporel en un point permet ainsi d'obtenir les propriétés spatiales de la turbulence à cet endroit.

Passot Pouquet :

Le spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ vu précédemment peut être exprimé sous une forme analytique couramment utilisée et connue sous le nom de Spectre de Passot-Pouquet [Passot, Pouquet, 1987] :

$$E(k) = 16 \frac{U_p^2}{k_e} \left(\frac{k}{k_e} \right)^4 \exp\left(-2 \left(\frac{k}{k_e} \right)^2 \right) \tag{1.103}$$

Cette expression simule un écoulement turbulent à grandes échelles tout en prenant en compte une décroissance exponentielle. Le maximum d'intensité énergétique des tourbillons étant atteint ici au nombre d'onde k_e. Ces tourbillons ont alors une échelle intégrale de $\lambda_e = \frac{2\pi}{k_e}$ et correspondent aux plus grandes échelles de la turbulence. Il est possible de remarquer que l'intégration de ce spectre de 0 à ∞ donne $K = \frac{3U_p^2}{2}$.

Kraichnan/Celik :

L'objectif de cette méthode est de permettre une injection de turbulence artificielle respectant les conditions d'incompressibilité à moindre coût CPU et mémoire. L'algorithme fut proposé par Kraichnan [Kraichnan, 1970] pour un cas incompressible et une turbulence isotrope. Celik et al. [Smirnov et al. 2001] perfectionnèrent la méthode afin de l'adapter à des cas non homogènes

et non isotropes pour des simulations LES.
Le principe est relativement simple : le champ de fluctuations est obtenu à l'aide d'un échantillon d'harmoniques de Fourier aléatoires. Ce signal est ensuite ajouté au champ moyen à l'aide de l'approximation de Taylor vue précédemment. Il est important de noter que ce champ turbulent ne respecte pas les équations de Navier Stokes mais uniquement la continuité, à savoir une divergence nulle.

A l'aide de l'équation (1.82), il est possible d'établir la relation liant le champ fluctuant u' et sa transformée $\hat{u}(k,t)$ dans l'espace spectral au nombre d'onde k :

$$u'(r,t) = \int_{D_{(k)}} \hat{u}(k,t) e^{jkr} d^3k \tag{1.104}$$

avec $j^2 = -1$.

En appliquant l'approximation de Taylor (1.6.3), il est possible de poser l'estimation suivante :

$$\hat{u}(k,t) = \hat{u}(k) e^{j\omega t} \quad avec \quad \omega = k.\overline{u} \tag{1.105}$$

L'équation (1.104) devient alors :

$$u'(r,t) = \int_{D_{(k)}} \hat{u}(k) e^{j(kr+\omega t)} d^3k \tag{1.106}$$

Le champ étudié avec cette méthode est défini incompressible, soit :

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1.107}$$

Ce qui se traduit ici dans l'espace spectral par la perpendicularité entre $\hat{u}(k)$ et le nombre d'onde k :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r} \int_{D_{(k)}} \hat{u}(k) e^{j(kr+\omega t)} d^3k \\ &= \int_{D_{(k)}} \hat{u}(k) \frac{\partial e^{j(kr+\omega t)}}{\partial r} d^3k = \int_{D_{(k)}} \hat{u}(k) jk e^{j(kr+\omega t)} d^3k \end{aligned}$$

Soit :

$$\hat{u}(k).k = 0 \tag{1.108}$$

L'association des équations (1.106) et (1.108) doit alors être approchée d'une manière discrète, à l'aide de séries de Fourier. Le champ fluctuant est ici représenté par une série composée de N modes k^n. Les équations (1.106) et (1.108) deviennent donc :

$$u'(r,t) = \sum_{n=1}^{N} \hat{u}^n(k^n) e^{(jk^n r + j\omega^n t)} \tag{1.109}$$

$$\hat{u}^n.k^n = 0 \ \forall n \tag{1.110}$$

avec $u'(r,t)$ la transformée de Fourier discrète au nombre d'onde k^n du champ fluctuant et $\omega^n = k^n.\overline{u}$ la pulsation discrète. Comme $u'(r,t)$ est un complexe, il est possible de l'écrire sous la forme :

$$\hat{u}^n(k^n) = \hat{v}^n(k^n) + j\hat{w}^n(k^n) \tag{1.111}$$

avec respectivement $\hat{v}^n(k^n)$ et $\hat{w}^n(k^n)$ les parties réelles et imaginaires de $\hat{u}^n(k^n)$.
Comme la vitesse fluctuante u' est réelle dans l'espace physique, elle est égale à son conjugué u'^*. Cette propriété permet de poser :

$$u'(r,t) = u'^*(r,t) = \sum_{n=1}^{N} \hat{u}^{*n}(k^n) e^{(-jk^n r + j\omega^n t)} \tag{1.112}$$

En combinant les équations (1.109) et (1.112), le système composé des équations (1.109) et (1.110) devient :

$$u'(r,t) = \frac{1}{2}\left[\sum_{n=1}^{N} \hat{u}^n(k^n) e^{(jk^n r + j\omega^n t)} + \sum_{n=1}^{N} \hat{u}^{*n}(k^n) e^{(-jk^n r + j\omega^n t)}\right] \tag{1.113}$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \left[\hat{v}^n(k^n)\cos\left(k^n r + \omega^n t\right) + \hat{w}^n(k^n)\sin\left(k^n r + \omega^n t\right)\right] \tag{1.114}$$

$$\hat{v}^n.k^n = 0 \quad et \quad \hat{w}^n.k^n = 0 \ \forall n \tag{1.115}$$

Le principe de la méthode de Kraichnan/Celik consiste ici à générer deux vecteurs $\hat{v}^n$ et $\hat{w}^n$ tout en respectant la condition d'incompressibilité (1.115) et en assurant un spectre $E(k)$ de turbulence homogène à celui attendu. Afin de déterminer $\hat{v}^n$ et $\hat{w}^n$, il est possible de les écrire

sous une forme décomposée :

$$\hat{v}^n = \zeta^n \times k^n \quad et \quad \hat{w}^n = \xi^n \times k^n \ \ \forall n \tag{1.116}$$

Les vecteurs ζ^n et ξ^n sont choisis par tirage indépendant au sein d'une distribution gaussienne isotropique avec un écart type fixé à $\sigma_N = \sqrt{\frac{2}{N}}$ afin de respecter la condition $\overline{u_i' u_i'} = 1$. Les nombres d'onde k^n et les pulsations ω^n sont choisis afin de respecter le spectre de turbulence voulu quand $N \to \infty$. Pour obtenir un spectre de Passot Pouquet (1.103), Kraichnan tire k^n et ω^n d'une distribution gaussienne d'écart type $\frac{1}{2}$. Il est possible d'utiliser cette technique pour tout type de spectre de turbulence désiré en adaptant la distribution d'où sont tirés k^n et ω^n.

Il est possible de remarquer ici un point important de la méthode de Kraichnan/Celik : aucune transformée de Fourier inverse n'est nécessaire, les valeurs de fluctuations étant directement calculées dans l'espace physique. Cela se traduit par un très faible coût CPU face à la plupart des autres méthodes d'injection turbulente.

Il reste ici à poser $k^n.r$ dans l'équation 1.114 à l'aide de l'approximation de Taylor dans le cas des écoulements unidirectionnels :

$$k^n.r = k_1 \overline{U_1} t + k_2 x_2 + k_3 x_3 \tag{1.117}$$

avec $\overline{U_1}$ la vitesse moyenne à l'entrée qui servira de référence à l'amplitude de la turbulence. L'équation 1.114 est alors complète.

Il est aussi remarquable qu'il n'est pas nécessaire ici de stocker un champ 3D complet, seul le plan correspondant à l'entrée est mis en mémoire et recalculé à chaque pas de temps. La méthode de Kraichnan/Celik se veut donc très peu gourmande en mémoire.

Avant de clore cette section sur l'injection turbulente, il me semble important de préciser quelques points :
Une injection synthétique, aussi sophistiquée soit-elle, ne pourra jamais restituer une véritable turbulence. Il sera certes possible de retrouver la décroissance énergétique, mais il manquera certaines structures spécifiques à certaines configurations. Je prends pour exemple les structures dites en "fer à cheval" des écoulements proche paroi. Seul le calcul d'un pré-canal peut permettre de retrouver ces structures et leurs propriétés.

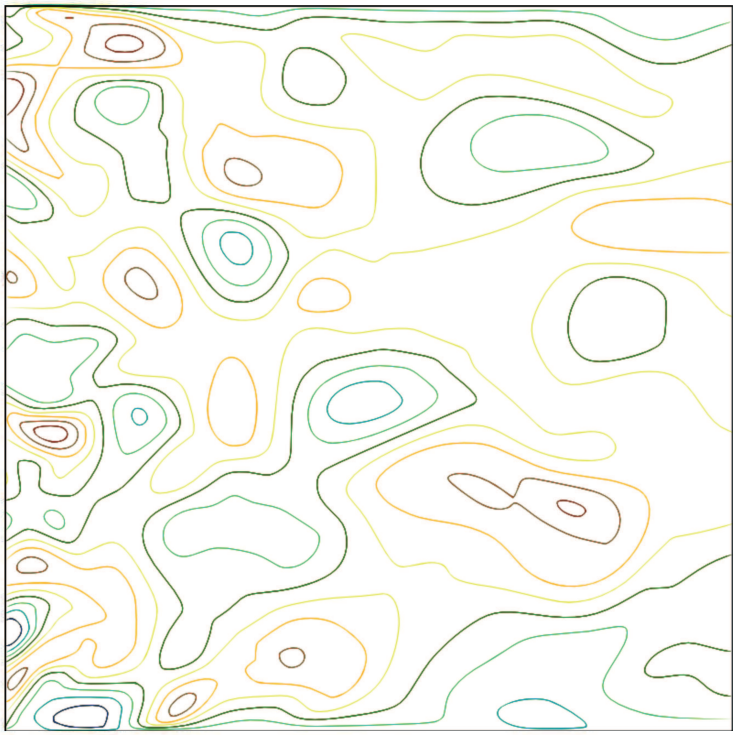


FIGURE 1.11 – Injection 2D générée par la méthode de Kraichnan-Celik, champ de vitesse $u = u_1 + u_2$

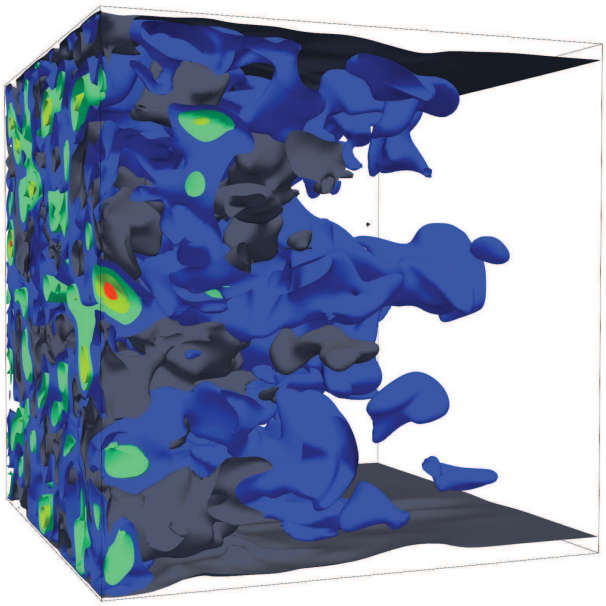


FIGURE 1.12 – Injection 3D générée par la méthode de Kraichnan-Celik, champ de vitesse $u = u_1 + u_2$

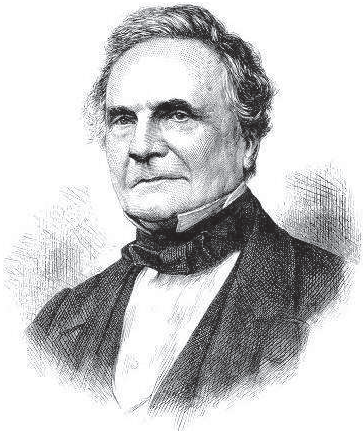
Chapitre 2

Méthodes numériques

"Un bon schéma vaut mieux qu'un long discours."

Napoléon

Joseph Marie Jacquard (1752-1834)



Charles Babbage (1791-1871)

2.1 Introduction

Les optimisations numériques apportées au cours de cette thèse représentent une importante partie du travail effectué. A l'origine une version expérimentale, instable, lente et scalaire, le code est aujourd'hui solide, rapide et efficace, et à même d'être exécuté en parallèle sur des super calculateur. L'utilisation conjointe de méthodes de codage strictes et d'outils de profiling a permit la localisation des noyaux défectueux du code, puis leur optimisation voir leur réécriture. Dans un second temps, les méthodes non parallélisables utilisées ont été mise de côté et remplacées par de nouveaux algorithmes plus aptes au calcul à mémoire distribuée. Pour finir, le code a été entièrement parallélisé, avec une attention particulière sur le solveur de Poisson, élément le plus "énergivore". Une connaissance accrue des méthodes numériques et de l'architecture informatique fut nécessaire à l'accomplissement des divers objectifs présentés par la suite. L'objectif ici fut la recherche des nouvelles méthodes de calculs intensifs, avec pour finalité la rentabilité maximale par heure de calcul utilisée.
Afin de faciliter l'accès à certaines notions délicates, une première section de ce chapitre sera dédiée aux divers éléments introductifs essentiels à la compréhension de la suite du chapitre par le lecteur.

2.2 Notions et vocabulaire

Durant la suite de ce chapitre, l'architecture Intel Nehalem sera utilisée comme référence. Outre ses performances exceptionnelles, cette architecture est actuellement la plus utilisée sur

Augusta Ada King, comtesse Lovelace (1815-1852)

Grace Murray Hopper (1906-1992)

les machines de calculs, locales ou distantes, notamment à cause de son triple canal mémoire.

La figure (2.1) présente une vision schématisée d'une unité de calcul classique. Pour commencer, il est intéressant de regarder le cœur du système, le processeur, puis de faire un tour des éléments de mémoire avant de finir avec les cartes additionnelles (GPU, Réseau, etc).

Le processeur (Ou CPU pour Central Processing Unit) est probablement l'unité de calcul la plus raffinée et la plus complexe du système. Cette puce de silicium est composée de nombreux transistors exécutant des millions d'opérations arithmétiques chaque seconde, tous synchronisés par un circuit d'horloge (d'où la notion de fréquence). Le processeur est composé des unités de calcul, les ALU (Arithmetical and Logical Unit) pour les opérations simples et les FPU (Floating Point Unit) pour les opérations plus complexes, et d'une mémoire cache utilisée pour stocker les informations à traiter, ainsi que les résultats des calculs. La compréhension des niveaux de mémoire (cache L1,L2 et L3) est essentielle à une optimisation performante. Il est par ailleurs important de retenir (car souvent observé au cours de cette thèse) que la fréquence de calcul du processeur ne fait pas tout, loin de là : la taille de la mémoire cache L3 qui représente presque toujours le goulet de ralentissement est l'élément le plus important. Par analogie, il serait inutile d'avoir l'usine et les chaines de production les plus performantes si l'acheminement des matières premières ne suit pas la cadence.

La mémoire vive Ou RAM (Random access memory) est la mémoire où résident les valeurs en cours de calcul. Lorsqu'un code de calcul est exécuté, il est chargé vers la mémoire RAM, puis les différents champs physiques (température, vitesses, etc.) sont stockés dans cette mémoire. La vitesse d'accès de la RAM est bien sûr bien inférieure à celle du cache du processeur, mais bien supérieure à celle du disque dur. A noter que dans notre cas, les fréquences des barrettes de mémoire RAM ont un impact significatif, ainsi que leurs latences, les codes de calcul numérique

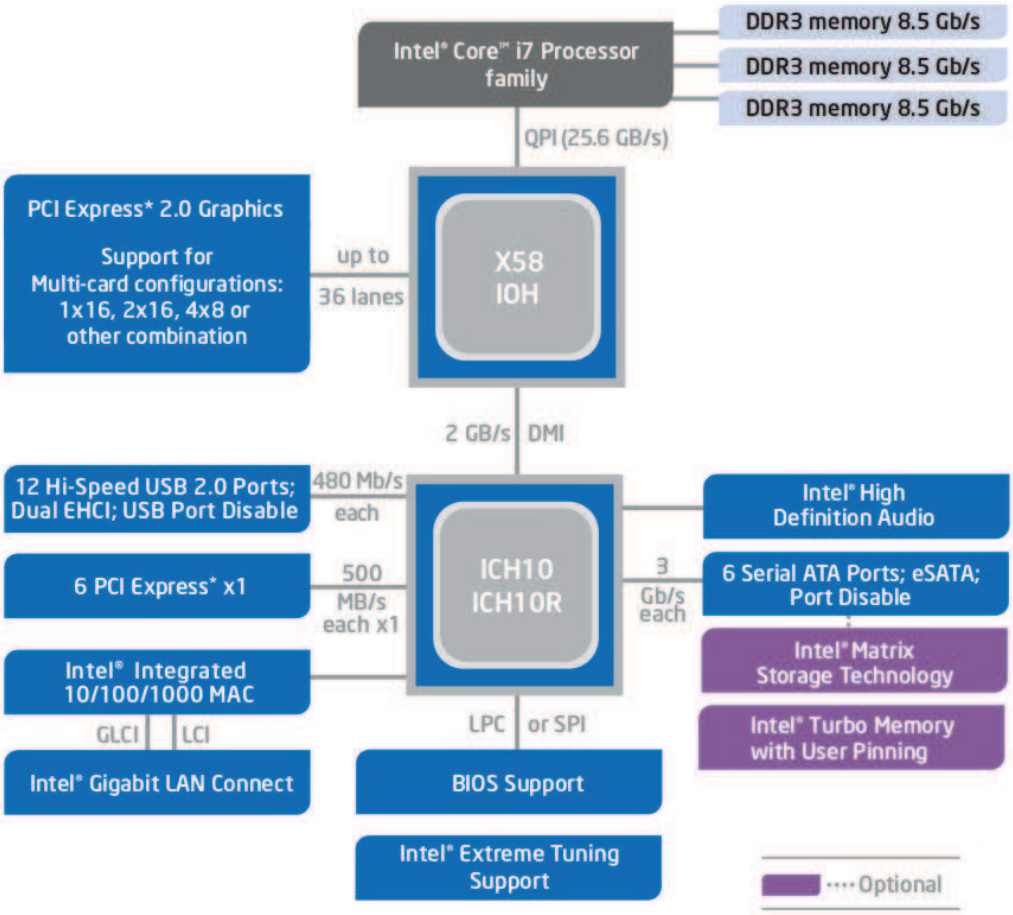


FIGURE 2.1 – Architecture d'une machine locale, socket X58 pour Intel Nehalem avec chipset LGA 1366 (source x86-secret.com)

faisant appel à outrance à cette mémoire. Si elle n'est plus alimentée, la mémoire RAM est effacée.

Les disques durs (Pour HDD pour Hard Disk Drive) sont des unités de mémoire de grande capacité utilisés pour stocker les données en entrée du calcul ainsi que les différents résultats obtenus. L'accès aux informations sur les disques est lent, mais seule cette unité permet de sauver les données une fois l'alimentation coupée.

La carte graphique (Ou GPU pour Graphic Processing Unit) est le circuit graphique permettant des affichages 2D et 3D fluides, allant des jeux vidéo aux post-traitements des calculs numériques en passant par la simple navigation sur Internet. Ces cartes, gourmandes en énergie, peuvent cependant accomplir des miracles correctement utilisées. En effet, leur architecture simplifiée permet des performances hors norme pour peu que les algorithmes de calcul s'y prêtent. Oubliés du monde de la recherche durant de nombreuses années, les GPU sont aujourd'hui au cœur des débats sur le futur du calcul HP avec l'arrivée de langages de programmation accessibles aux chercheurs et aux ingénieurs. Le GPU peut être vu comme une machine complète et autonome : il possède son propre étage d'alimentation, ses unités de calculs, sa mémoire vive dédiée, etc.

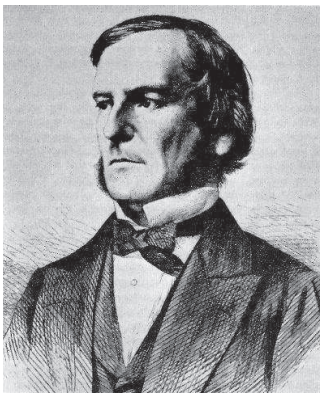
Les puces réseau sont des éléments peu complexes permettant de relier différentes machines ensemble. Un super calculateur peut en fait être vu comme un grand nombre d'unités de calculs indépendantes reliées entre elles par un réseau. Le réseau souffre cependant de débits peu élevés et surtout d'une importante latence (i.e. temps d'attente avant le début d'un transfert de données), impactant significativement les transferts de données.

Le défi du calcul numérique intensif consiste donc à tirer le meilleur de chaque élément, tout en prenant en compte l'impact sur les autres éléments. La première partie de cette thèse a consisté à optimiser le code Asphodele dans sa version scalaire (mono-processeur) avant de le rendre parallèle (multi-processeur).

2.3 Optimisations scalaires

De nombreuses optimisations ont été effectuées au cours de cette thèse. Elles interviennent dans des domaines variés, mais les plus courantes sont regroupées ci-dessous. A noter que bien

Alan Mathison Turing (1912-1954)



George Boole (1815-1864)

évidemment, la phase d'optimisation d'un code ne doit commencer qu'après avoir figé la version du code et s'être assuré de la bonne marche des calculs. En cas de doute, il est préférable de laisser le code tel quel sans chercher à optimiser, le compilateur réalisant la plupart du temps de meilleures optimisations que l'utilisateur.

Localiser et supprimer les opérations coûteuses La première chose à faire, évidente mais pourtant souvent peu respectée, est de réduire au maximum les opérations couteuses, à savoir les divisions, les puissances de nombre réels, les opérateurs mathématiques types exponentiel, cosinus, sinus, etc. Bien souvent, ces opérations sont répétées sans réel intérêt au sein d'une boucle. Les exemples typiques sont les suivants (cas volontairement simplifié, parfois l'opération est bien plus subtilement dissimulée) :

Le code suivant :

```
do j=1,100
  do i=1,100
    A(i,j) = B(i,j)/2.0
    reduc = alpha*0.1+beta
    T(i,j) = C(i,j)*reduc+U(i,j)
    coef = B(1,j)*2.0
    P(i,j) = C(i,j)*coef+U(i,j)
  end do
end do
```

Serait bien mieux optimisé de la manière suivante :

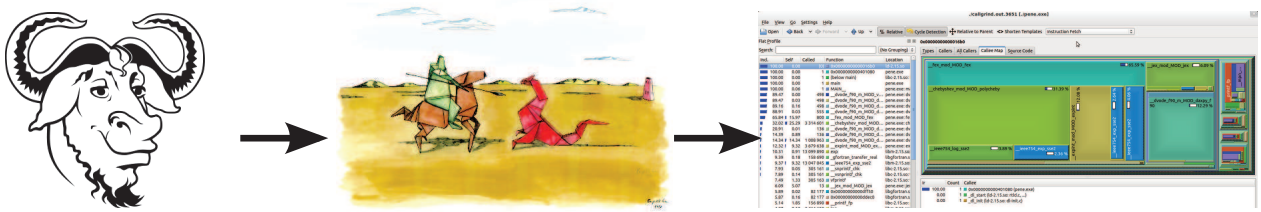


FIGURE 2.2 – Optimisation performante à l'aide des outils GnuGCC, Valgrind et Kcachegrind, tous open source

```
reduc = alpha*0.1+beta
do j=1,100
   coef = B(1,j)*2.0
   do i=1,100
      A(i,j) = B(i,j)*0.5
      T(i,j) = C(i,j)*reduc+U(i,j)
      P(i,j) = C(i,j)*coef+U(i,j)
   end do
end do
```

Une méthode très performante pour localiser les opérations coûteuses et les optimiser consiste à utiliser un "*profiler*", à savoir un programme surveillant l'exécution du code et permettant par la suite de connaitre le pourcentage de temps de calcul utilisé par chaque routine, les opérations les plus appelées, les goulets d'étranglement mémoire, etc. Les meilleur à mon avis pour le debugging et la recherche des hotspots sont le duo Valgrind/callgrind-Kcachegrind avec GCC, ou Intel Vtune Amplifier avec la suite de compilateurs Intel.

Organisation de la mémoire, vectorisation Il est aussi important de noter qu'en Fortran la mémoire n'est pas rangée dans le même ordre qu'en C. En effet, les boucles doivent être utilisées d'une manière inversée (le premier indice sera dans la boucle centrale, et le dernier indice dans la boucle extérieur), sous peine d'une réduction considérable des performances (au lieu d'être lue en continue, la mémoire est lue par intervalles, ce qui affecte notablement les performances).

```
do i=1,100
   do j=1,100
      A(i,j) = C(i,j)*2.0
   end do
end do
```

```
do j=1,100
  do i=1,100
    A(i,j) = C(i,j)*2.0
  end do
end do
```

De même, il est possible d'écrire les boucles d'une manière vectorielle, facilitant la tâche du compilateur et les optimisations réalisées par celui-ci, améliorant souvent les performances et la lisibilité du code :

```
A(:,:) = C(:,:)*2.0
```

Allocation mémoire, écriture fichiers Un autre défaut couramment observé au sein des codes de calculs est l'allocation omniprésente de tableaux à l'entrée des subroutines et leur désallocation en sortie de la routine. Une telle pratique engendre des pertes de temps système liées à l'organisation de la mémoire (fragmentation). Allouer des tableaux de travail dès l'ouverture du code et les laisser alloués permet de remplacer la plupart des tableaux nécessaires aux calculs des routines. Il est aussi préférable de faire passer ces derniers en tant qu'argument plutôt que d'utiliser un Common (entendre par là un module regroupant les variables et partagé entre les routines, il s'agit d'une centralisation), afin de renforcer la portabilité des routines du code.

Autre point mémoire important : l'écriture des fichiers. Il est acceptable d'écrire des données à outrance au sein de boucles, mais si le volume est faible, il est largement préférable d'utiliser un tableau tampon et d'écrire une fois celui-ci plein. L'accès aux disques ralentit **considérablement** un code. Pour pallier à ces défauts, il est possible d'utiliser des librairies I/O tel PHDF5, augmentant grandement les performances d'écriture sur les calculateurs parallèles.

Maximisation du cache CPU, extensions processeur Lors de calculs lourds en terme de volume de données, comme un calcul de dérivée ou au cours des convolutions de Poisson, maximiser le cache L3 du CPU peut engendrer des gains remarquables. En effet, il est préférable de réutiliser des informations encore dans le cache en anticipant certains calculs afin de ne plus avoir à les rappeler par la suite (fig 2.3).

L'explication de ce raisonnement réside dans la simple observation des temps de latence et des débits atteints par les différents niveaux de mémoire. Ainsi, l'accès à une donnée en mémoire

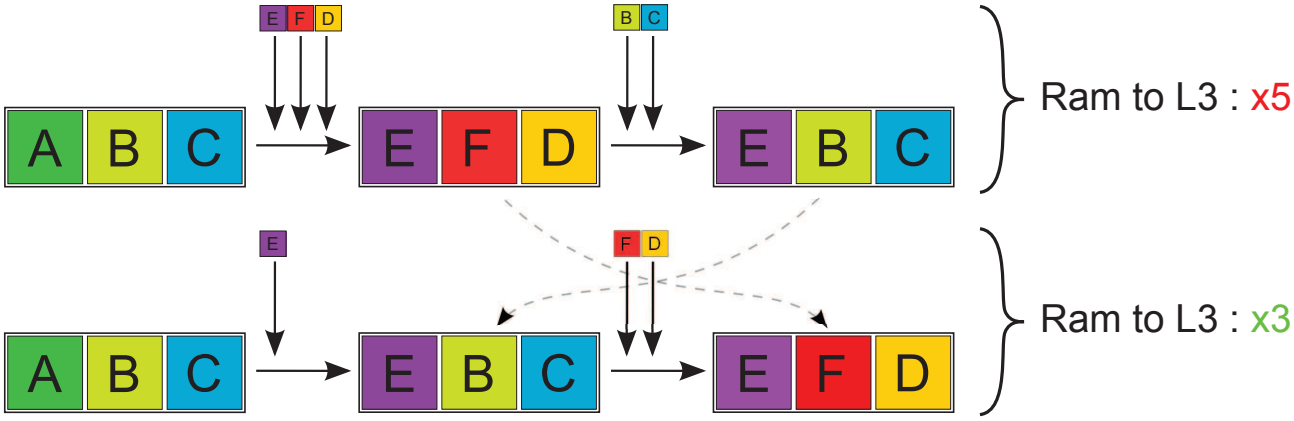


FIGURE 2.3 – Optimisation du cache L3, réorganisation des opérations de calculs

RAM provoque non seulement un temps d'attente important par un temps de réponse élevé, mais aussi un temps de transfert important vers le cache du processeur.

Cette organisation de mémoire permet aussi l'utilisation de traitement par lots (packets), favorisant l'utilisation des instructions types SSE (pour Streaming SIMD Extensions). Dans notre cas, les jeux d'instruction SSE4.1 et SSE4.2 (incluant le 4.1) ont été utilisés.
Suite à plusieurs tests et après discussions avec des ingénieurs Intel, il en est ressorti que la forme la plus optimisée pour les calculs sur Xeon Nehalem avec 8mo de L3 ou 16mo était, pour la boucle de référence suivante (simplifiée) représentant la grande majorité du temps de calcul du solveur elliptique :

Boucle de référence :

```
do j=1,Nx2
  do i=1,Nx1
    DF(i,j) = A(i,j,1) * F(i,j) + A(i,j,2) * F(i-1,j) + A(i,j,3) * &
    F(i+1,j) + A(i,j,4) * F(i,j-1) + A(i,j,5) * F(i,j+1)
  end do
end do
```

Boucle cache optimisée :

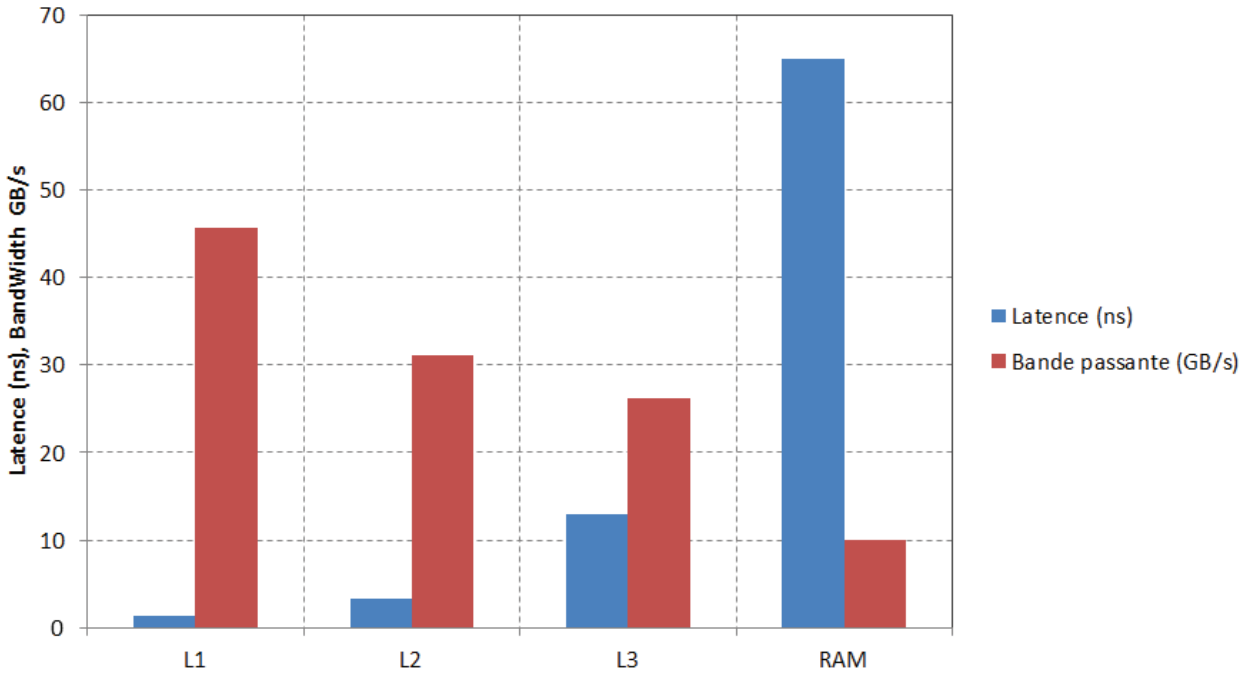


FIGURE 2.4 – Temps de latence et débits pour les différents niveaux de mémoire (prendre le plus contraignant entre deux niveaux)

```
do j=1,Nx2
   do i=1,Nx1
     DF(i,j) = A(i,j,1) * F(i,j)
   end do
   do i=1,Nx1
     DF(i,j) = DF(i,j) + A(i,j,2) * F(i-1,j)
   end do
   do i=1,Nx1
     DF(i,j) = DF(i,j) + A(i,j,3) * F(i+1,j)
   end do
   do i=1,Nx1
     DF(i,j) = DF(i,j) + A(i,j,4) * F(i,j-1)
   end do
   do i=1,Nx1
     DF(i,j) = DF(i,j) + A(i,j,5) * F(i,j+1)
   end do
end do
```

Le calcul est ici découpé de façon à ce que DF et F résident dans le cache, tandis que les

différentes valeurs A(:, :,1 :5) sont chargées dans le cache. Cette organisation évite les copies redondantes, le processeur étant apte à travailler sur une variable tout en pré-chargeant la suivante.

Le second travail a consisté à utiliser des instructions dites SIMD (Single Instruction Multiple Data). L'appellation est explicite : au lieu de faire un calcul par cycle, le CPU exécute deux ou quatre calculs si l'instruction est identique, permettant l'accélération des calculs massifs (fig 2.5), moyennant quelques inconvénients d'organisation mémoire : les tableaux traités doivent **impérativement** être alignés sur 16bits. Un exemple frappant d'utilisation de ces instructions peut être trouvé sur le site dédié d'Intel : un calcul de suivit de particule permettant la restitution du champ de vitesse en fonction de clichés photo à haute cadence est accéléré par 3.8x à l'aide des instructions MPSADBW et PHMINPOSUW du SSE 4.2, sur un processeur de type Westmer, en simple précision. A l'origine, ces instructions sont anciennes (MMX, 3DNow, etc) mais n'ont réellement été exploités que récemment et servent surtout dans les calculs média, avec les traitements d'image et l'encodage/décodage des vidéos, soit sur le plan algorithmique pur la même chose que des calculs de CFD.

Dans le cadre de cette thèse, les calculs s'effectuant en double précision, et sur des processeurs de type Nehalem, les gains maximum théoriques sont de 2x. Avec l'arrivée des AVX (registre doublé, de 128bits à 256bits) des processeurs Sandy Bridge et Ivy Bridge, les gains maximum théoriques s'élèvent à 4x.
Ces unités SIMD se retrouvent aisément sur le schéma de micro architecture (fig 2.6). Il est aussi possible de remarquer les registres de type AVX apparus sur les dernières générations de CPU.

Le tableau suivant récapitule les performances de ces optimisations, en fonction des compilateurs et des modifications apportés :

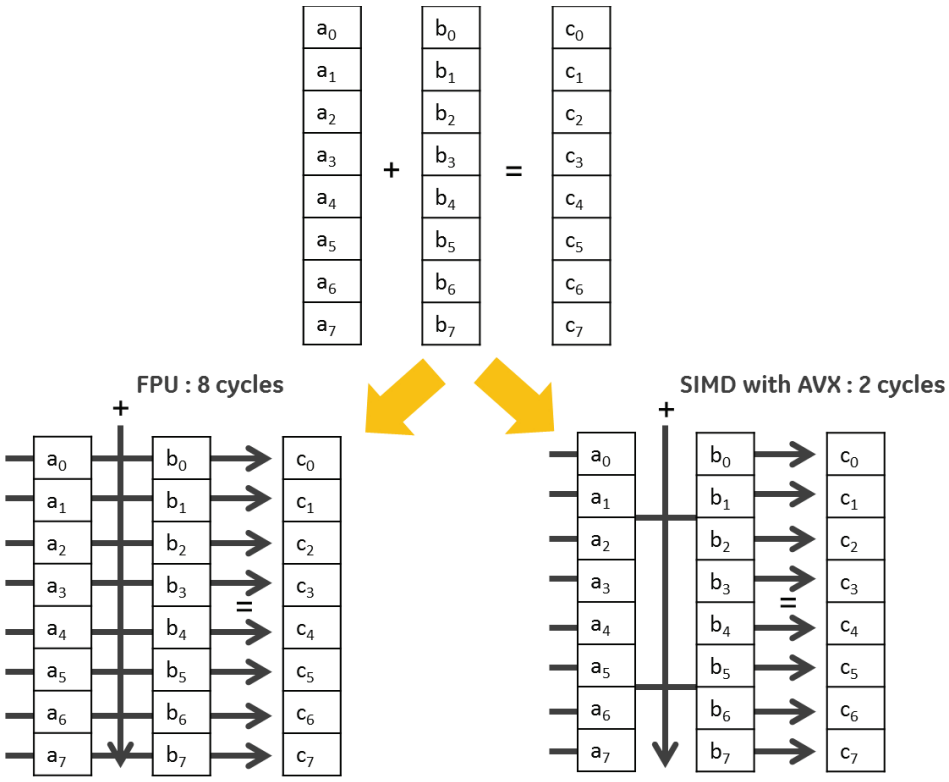


FIGURE 2.5 – Accélération d'une opération redondante à l'aide des unités SIMD (**Single Instruction, Multiple DATA**)

Compilateur	Options de compilation	Type de boucle	Acceleration
gfortran	-O4	référence	1x
	-O4	cache optimisée	0.89x
ifort	-O4	référence	1x
	-O4 et SSE	référence	0.95x
	-O4	cache optimisée	**1.45x**
	-O4 et SSE	cache optimisée	**2.49x**

A noter aussi qu'ifort (Intel) est légèrement plus rapide que gfortran (Gnu) sur la boucle de référence (de l'ordre de 3% à 4%).

Il est intéressant de remarquer que gfortran n'est pas capable d'optimiser une telle boucle, seul ifort est apte à réaliser une telle opération. Les supercalculateurs utilisés au cours de cette thèse étant basés sur le compilateur ifort, ce problème est donc secondaire. Autre point essentiel, l'apport des instructions SSE fournis par les nouvelles générations de processeur. Le passage de 1.45x à 2.49x, soit une accélération de 1.71x grâce aux SSE, est proche du gain maximum théorique de 2x. Bien évidemment, ces instructions sont liées à cette architecture, mais il est possible de compiler le code à l'aide de l'option -axSSE4.2, le rendant légèrement plus lent mais

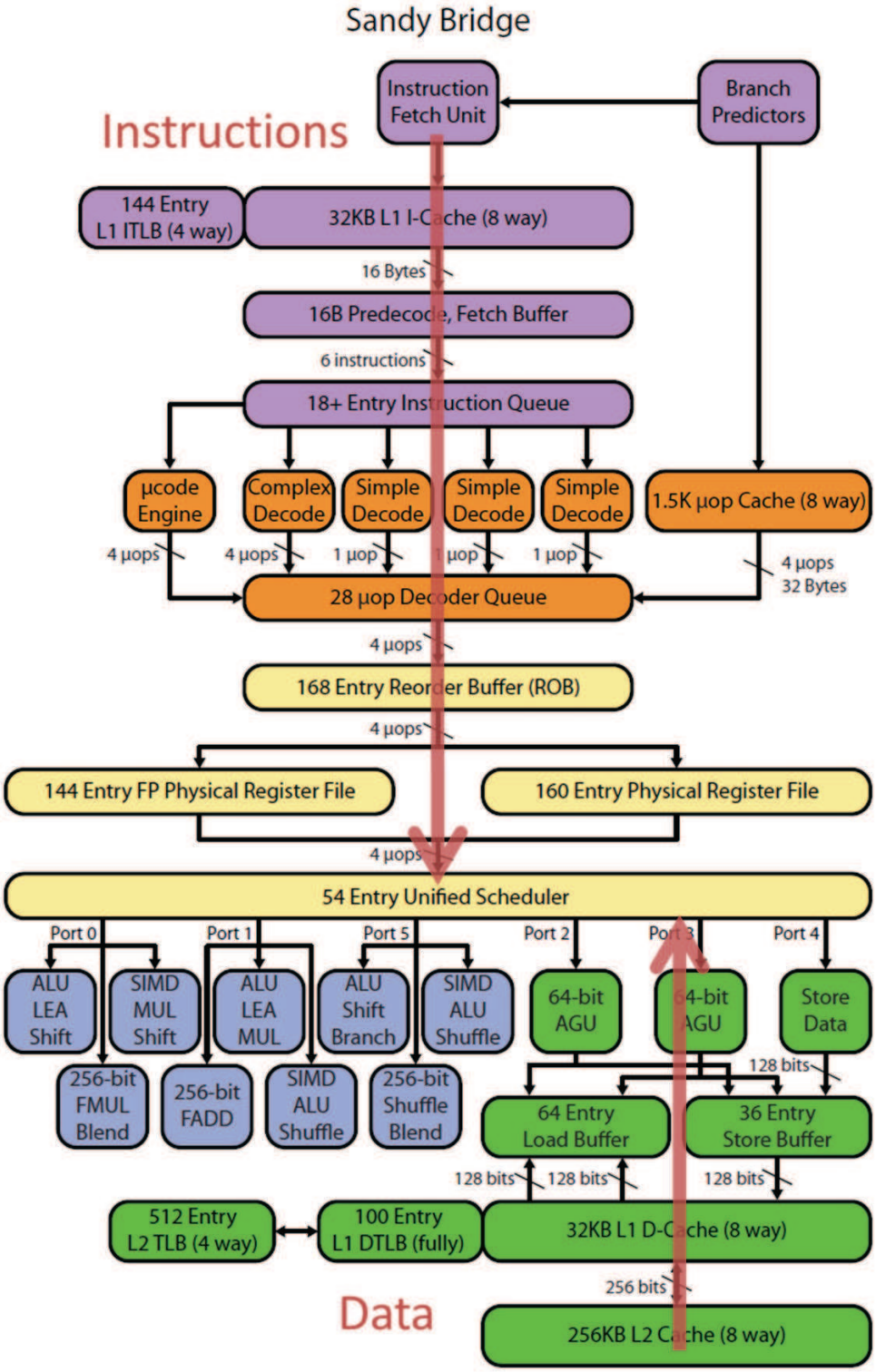


FIGURE 2.6 – Micro Architecture d'un coeur Sandy Bridge, mise en évidence des SIMD et des AVX

Blaise Pascal (1623-1662)

Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716)

portable sur toute machine malgré l'optimisation. Autre possibilité, le pré-processing, méthode explicitée par la suite.
Dernier détail, d'importance : le calcul de Poisson responsable de la grande majorité du temps de calcul en low-mach, est entièrement basé sur ce type de boucles, d'où un gain extrêmement impressionnant sur les calculateurs compatibles.

L'utilisation de librairies Il est souvent recommandé d'utiliser des librairies classiques tel LAPACK, BLAS, SCALAPACK, ATLAS, etc. pour des calculs courants comme les opérations matricielles, ou autres. En effet, ces librairies sont aujourd'hui standards et disponibles sur presque tous les supercalculateurs en versions optimisées. Les gains de performances peuvent parfois être très significatifs.
Une librairie tierce a été utilisée afin de maximiser les performances du solveur de chimie : la librairie **vMKL** (pour **v**ectoriel **M**ath **K**ernel **L**ibrairy). Cette librairie possède de nombreux atouts, notamment celui de réduire le temps de calcul de certaines opérations lourdes comme le calcul de l'exponentielle au prix d'une légère baisse de précision, peu impactant ici en chimie double précision. L'utilisation de la librairie a permis d'observer un gain de **34%** pour une loi Arrhenius standard sur une chimie simple. Ce type d'outil est disponible sur presque tous les supers calculateurs à base d'Intel ou d'AMD. Il est de toutes façons possible d'utiliser un pré-processing adapté afin de générer des segments de code non portables par la suite.

Pre-processing Le pré-processing a été utilisé au sein du code afin de le rendre portable sur tout type d'architectures. En effet, prenons l'exemple de l'optimisation de cache CPU vue précédemment. Utilisée sur une machine utilisant ifort, elle apporte un gain significatif. A l'inverse, utilisée avec le compilateur gfortran, cette optimisation réduit les performances. Le principe du pré-processing est de ne compiler que certaines parties du code, en fonction des

options de compilation choisies. La même méthode a été utilisée pour rendre le code Asphodele utilisable en scalaire comme en MPI.

Par exemple le code :

```
...
#ifdef MPI
call mpi_comm_rank(MPI_COMM_WORLD,rank,ierror)
#else
rank = 0
#endif
...
```

Compilé avec le compilateur gfortran, sans options particulières (*gfortran -cpp moncode.f90*), le compilateur survole en premier lieu le code et ne conserve que les lignes correspondant au flag de compilation.

Options de compilation	**Code lu et compilé au final**
gfortran code.f90	compilation impossible
gfortran -cpp code.f90	rank = 0
gfortran -cpp -DMPI code.f90	call mpi_comm_rank(MPI_COMM_WORLD,rank,ierror)

Ce principe permet au code de s'adapter à l'architecture ou au compilateur utilisé, et de conserver un seul code pour une utilisation scalaire ou une utilisation MPI.

L'ensemble de ces optimisations a permis des gains importants sur l'ensemble du code de calcul. Cependant, face aux coûts des simulations DNS, autant en ressources de calcul qu'en mémoire, il a été nécessaire de paralléliser le code de calcul Asphodele (Asphodele + MPI = Parasphodele).

2.4 Parallélisation du code

2.4.1 Introduction à la notion de calcul parallèle

La notion de parallélisation peut être introduite en utilisant un exemple concret un peu hors contexte : soit un doctorant invitant ses collègues de laboratoire affamés à manger des pâtes.

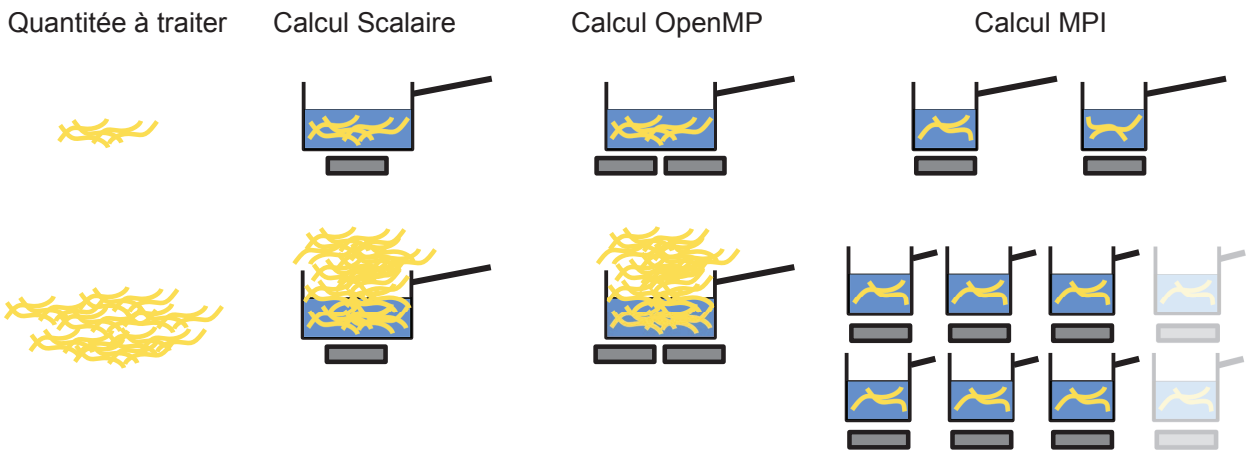


FIGURE 2.7 – Principe du calcul parallèle, exemple concret

Si le nombre de personnes présentes n'est pas trop important, il pourra cuisiner les pâtes dans une seule casserole, sur un feu. Il peut aussi utiliser 2 feux pour aller 2 fois plus vite. Il peut aussi répartir les pâtes dans 2 petites casseroles, et les mettre sur 2 feux.
Mais si le nombre d'invités est trop important, le doctorant ne pourra plus cuisiner avec une casserole normale, et avec ses 2 plaques par manque de capacité (sans compter le temps de cuisson). La seule solution sera de répartir les pâtes au sein d'un grand nombre de petites casseroles sur de nombreux feux (chez les voisins par exemple, d'où le terme de communications).
Le présent raisonnement n'est que peu mathématique (l'hypothèse de linéarité de la vitesse de cuisson des pâtes par rapport à l'apport thermique n'étant probablement pas valable), mais il en va de même pour un code de calcul : tant que la taille des données en mémoire n'est pas trop importante, il est possible de calculer sur une machine locale, voire d'exécuter le calcul sur plusieurs processeurs en travaillant sur la même mémoire (mémoire partagée). Mais si la taille du calcul devient trop imposante, il est alors nécessaire de répartir le calcul sur plusieurs unités de calculs à mémoire non partagée.

Le principe d'utiliser un seul processeur se nomme calcul "scalaire", le principe d'utiliser plusieurs processeurs avec une mémoire partagée se nomme calcul à mémoire partagée (avec OpenMP), et le principe de découper la mémoire sur plusieurs processeurs indépendants se nomme calcul à mémoire distribuée (avec MPI).

2.4.2 MPI

MPI, pour Message Passing Interface, est une implémentation qui permet de découper un calcul lourd sur plusieurs processeurs. MPI s'occupe en fait de gérer les communications qui

vont avoir lieu entre les différents processus. En effet, sauf cas particuliers, lors du découpage d'un domaine de calcul puis du calcul en parallèle, des informations et des données doivent pouvoir circuler entre les processus afin de les accorder sur un même tempo, voire de leur permettre d'effectuer certains calculs (cf suite de cette section). MPI assure donc le rôle de chef d'orchestre de l'ensemble des calculs parallèles.

Pourquoi utiliser MPI ? Lorsque la réalisation de calculs lourds est souhaitée, comme des calculs de chimie complexe ou de la DNS, la puissance d'un processeur même équipé de 4 cœurs, ou la capacité mémoire d'une machine unique, ne sont pas suffisants, un calcul pouvant alors prendre des années ou simplement ne pas pouvoir tourner par manque d'espace. De plus, les dernières générations de processeurs ont quasiment atteint leurs limites physiques, expliquant la stagnation actuelle des fréquences de calcul (autour de 3Ghz à 4Ghz, les processeurs surchauffent au-delà).
Afin de pallier à ce problème, les constructeurs s'intéressent maintenant aux processeurs à plusieurs cœurs tout en conservant la fréquence maximale de 3.5Ghz et en augmentant les performances mémoires et les opérations natives/pré-câblées (comme les sse4.2 vues précédemment). Dans cet environnement propice à la parallélisation des calculs, l'utilisation d'MPI est devenue une nécessité.

Quand utiliser MPI ? Cette question doit être soulevée et mûrement considérée avant de se lancer dans la parallélisation d'un code. En effet, l'algorithme de calcul utilisé doit être parallèle, c'est-à-dire divisible en mémoire et en calculs.

Par exemple, un solveur implicite doit connaitre tous les points du domaine pour résoudre un seul point. Cette procédure de calcul ne pourra pas être distribuée en mémoire et donc non parallélisable. Un autre exemple est la méthode de Gauss-Seidel. Comme l'ensemble des points doit être calculé dans un ordre précis, la mémoire peut être distribuée mais pas le calcul (Chaque processus devra attendre que son voisin ait fini son calcul). Dans ces cas, les calculs ne pourront jamais profiter de la distribution, et l'implémentation de MPI dans le code sera inutile. A l'inverse, le calcul de la viscosité ou les calculs de chimie dépendant seulement des propriétés locales d'un seul point du domaine pour être calculées, sont totalement parallélisables.

Il est intéressant de noter que si les calculs peuvent être distribués mais pas la mémoire, il

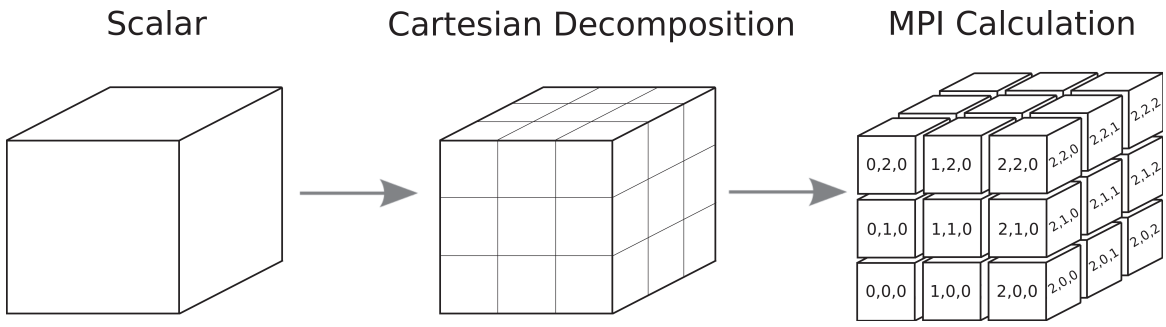


FIGURE 2.8 – Découpage cartésien et organisation MPI cartésienne

est alors possible d'utiliser OpenMP au lieu de MPI. Cependant, les calculs ne peuvent être effectués que sur une machine locale (de 8 à 16 cœurs de calculs, avec un maximum d'environ 200go de mémoire vive). Dans tous les cas, MPI devra si possible être préféré à OpenMP si l'algorithme utilisé le permet. En effet, en local MPI montre souvent des performances équivalentes à OpenMP tout en permettant le futur déploiement du code sur des calculateurs parallèles.

2.4.3 Implémentation au sein d'Asphodele :

Afin de réaliser des calculs complets en DNS, paralléliser le code est rapidement apparu comme une nécessité. L'apprentissage de l'utilisation de MPI [Chergui 2012] et de son implémentation au sein d'un code de calcul ont donc représenté une importante partie de cette thèse. Les lignes suivantes décrivent succinctement les points clés de la parallélisation du code Asphodele en sa version MPI : Parasphodele.

Organisation des threads et Initialisation Au sein du code Parasphodele, MPI initialise en premier lieu une organisation cartésienne des processeurs (Topologie MPI). Cette organisation permet à chaque processus de connaitre ses voisins dans l'espace physique global, simplifiant du coup radicalement les écritures et structurant les communications. Chaque processus récupère la partie de grille qui lui est associée et initialise les champs correspondants à ce domaine (Vitesse, température, etc). A partir de ce moment, chaque processus exécutera les calculs comme s'il était seul, et interagira avec les autres au moment des synchronisations de pas de temps, des dérivées, des conditions aux limites et de la résolution de Poisson.

Communications Afin de réaliser un calcul en commun, les processus ont besoin de communiquer entre eux. MPI joue ici le rôle de gérant de ces communications.

Les communications MPI sont principalement utilisées dans les cas suivants :

– Synchronisation des pas de temps, des maximums et des minimums

– Dérivées (mise en commun des bords des champs)
– Solveur de Poisson (méthode implicite)
– Conditions aux limites de sortie

Les autres calculs comme la chimie ou la thermodynamique sont totalement indépendants d'un point à un autre et ne nécessitent donc pas de communications.

Dérivées Chaque champ nécessitant le calcul d'une dérivé est élargi sur ses bords d'un nombre de points correspondants au stencil de la dérivée (soient 2 points dans le cas du DF4). Ces points sont appelés "*ghost*". Pour rappel, un processus MPI n'a pas accès à la mémoire d'un autre processus. Ces "ghost" contiennent des "images" des points normalement stockés sur les processus voisins dans la topologie MPI. Au cours du calcul de la dérivée, les processus partagent leurs bords par l'intermédiaire de communications MPI et stockent les valeurs dans ces ghosts, afin de réaliser la dérivée de leur champ physique. Considérons une dérivation 2D avec un champ découpé sur 4 processus (fig 2.9) :

– Chaque processus calcule le centre du domaine à dériver.
– Les processus échangent ensuite leurs valeurs aux bords avec leurs voisins, et stockent les valeurs récupérées dans leur "ghost".
– Chaque processus peut terminer le calcul de sa dérivée en utilisant les valeurs des "ghost".

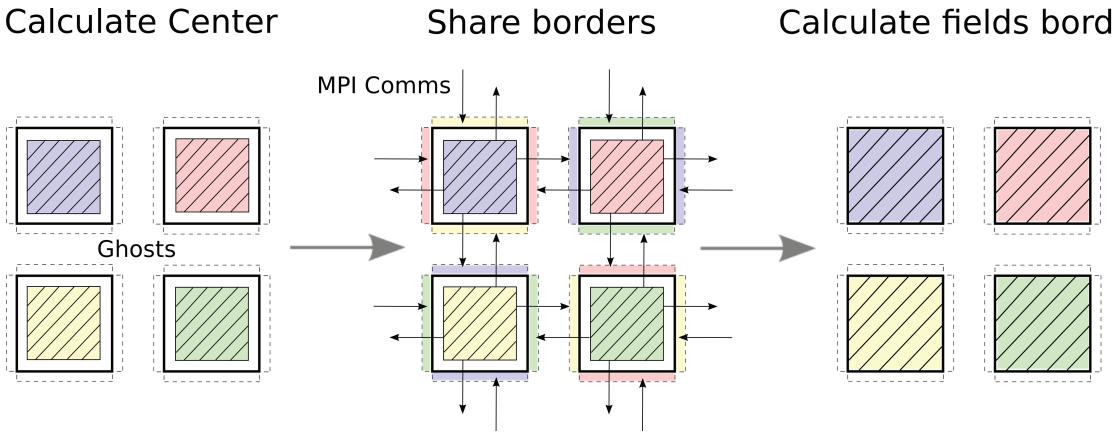


FIGURE 2.9 – Dérivation MPI, principe des communications

Une optimisation simple dans le cas présent consiste à échanger les données des bords tout en calculant la dérivée du centre du domaine. En effet, si le champ est suffisamment grand (notamment pour des cas 3D), le temps de calcul de la dérivée pour la partie centrale du champ de chaque processus permettra de "masquer" le temps des communications. Ce type de communications se nomme : communications désynchronisées.

Conditions aux limites Les conditions aux limites impactent fortement la topologie MPI, notamment la répartition cartésienne des processus. Cependant, seule la condition de sortie bénéficie d'un traitement particulier, avec la mise en commun des valeurs de vitesse convective. Pour cela, un communicateur spécifique à chaque côté/face du domaine est créé au début du calcul.

2.4.4 Poisson :

Le solveur de Poisson est probablement l'élément le plus gourmand en ressources MPI. En effet, il s'agit d'une méthode itérative résolvant une équation implicite.
Le solveur développé dans le cadre de cette thèse, BigFish, combine une méthode de type BICGSTAB et un préconditionneur multigrid. De ce fait, des communications sont nécessaires pour les stencils de la dérivée seconde (le Laplacien) ainsi que pour les mises en commun des min et max, sans compter les communications liées au multigrid. L'ensemble a bénéficié d'une attention toute particulière, avec à la clé une optimisation permettant l'utilisation de l'algorithme sur de nombreux processeurs sans réduction de l'efficacité du multigrid.

Plusieurs optimisations secondaires sont réalisables dans de tels algorithmes, notamment la réduction du nombre de MPI_ALL_REDUCE (communication collective) par l'utilisation d'algorithmes modifiés, l'utilisation de communications non bloquantes, et l'utilisation de communications laissant ouverts les pipelines de communication (appelées communications persistantes).

Mais avant toute optimisation numérique, il est intéressant d'investiguer les possibilités algorithmiques, souvent plus avantageuses.
Il apparaît en effet une limite fortement contraignante : afin d'obtenir le meilleur facteur de convergence et de diminuer au maximum le nombre d'itérations du BICGSTAB, la résolution du préconditionneur multigrid nécessite de descendre sur la grille la plus grossière possible, c'est à dire la grille de $2 * 2$ points (en 2D). Or, en considérant un cas réparti sur 16 processeurs, le dernier niveau possible correspond à 1 point par processeurs, soit au total une grille de $4 * 4$ points. Il manque ici la résolution de la grille $2 * 2$, et au lieu par exemple de converger en 12 IT, le code convergera en 18 IT, ce qui finira par coûter fort cher en continuant à augmenter le nombre de processeurs (croissance du nombre d'itération non linéaire (supérieur)).

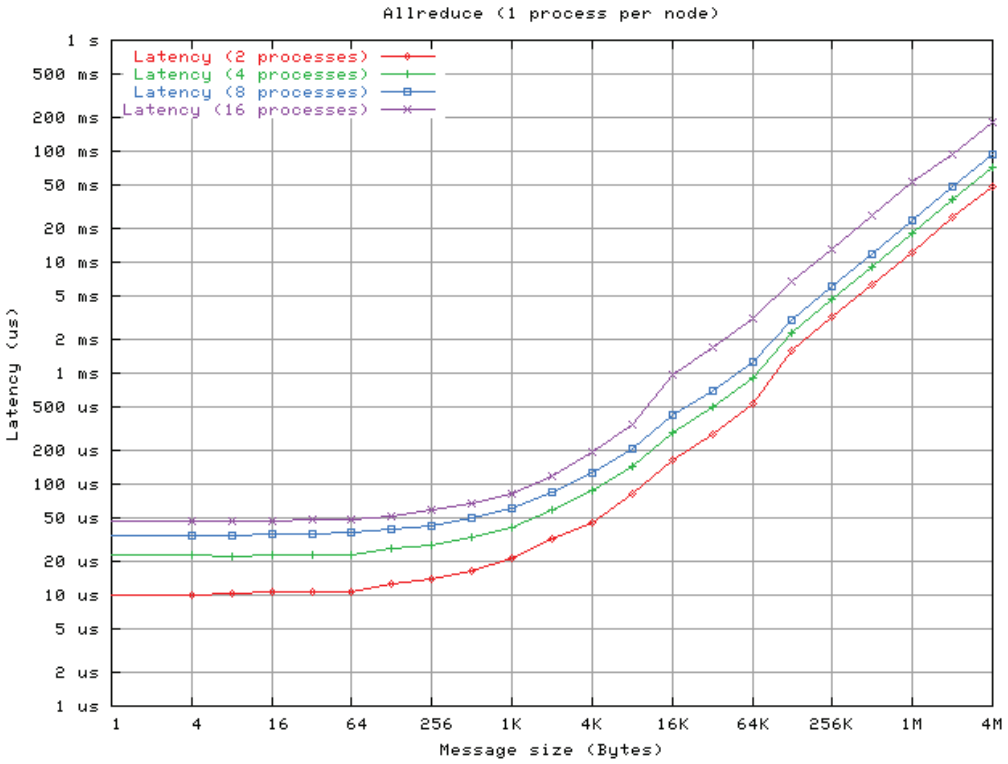


FIGURE 2.10 – Latences de la communication AllReduce en fonction de la taille du message à envoyer [Myricom 2006]

Une optimisation codée au sein d'Asphodele et de BIGFISH a consisté à étudier les latences et temps de transfert de certaines communications lourdes en MPI (notamment en fonction de la taille des éléments à transférer) et d'en rajouter certaines pour au final fortement réduire le nombre d'itérations et donc le temps de calcul.

Considérons les communications collectives **MPI_ALL_REDUCE** et **MPI_ALL_GATHER**. Les courbes de latence suivantes ont été obtenues sur un supercalculateur en n'utilisant qu'un seul nœud par node, afin d'éviter les communications inter-nodes par mémoire partagée (fig 2.10 et fig 2.11) .

Il est possible de voir ici que malgré leurs différents objectifs, ces deux communications prennent sensiblement autant de temps. Or l'algorithme du BICGSTAB fait appel à six MPI_ALL_REDUCE par itérations, et fait appel deux fois au préconditionneur multigrid. Il est donc rentable de rajouter un MPI_ALL_GATHER au sein du préconditionneur, soit deux par itérations du solveur, pourvus que le nombre total d'itérations soit suffisamment réduit.

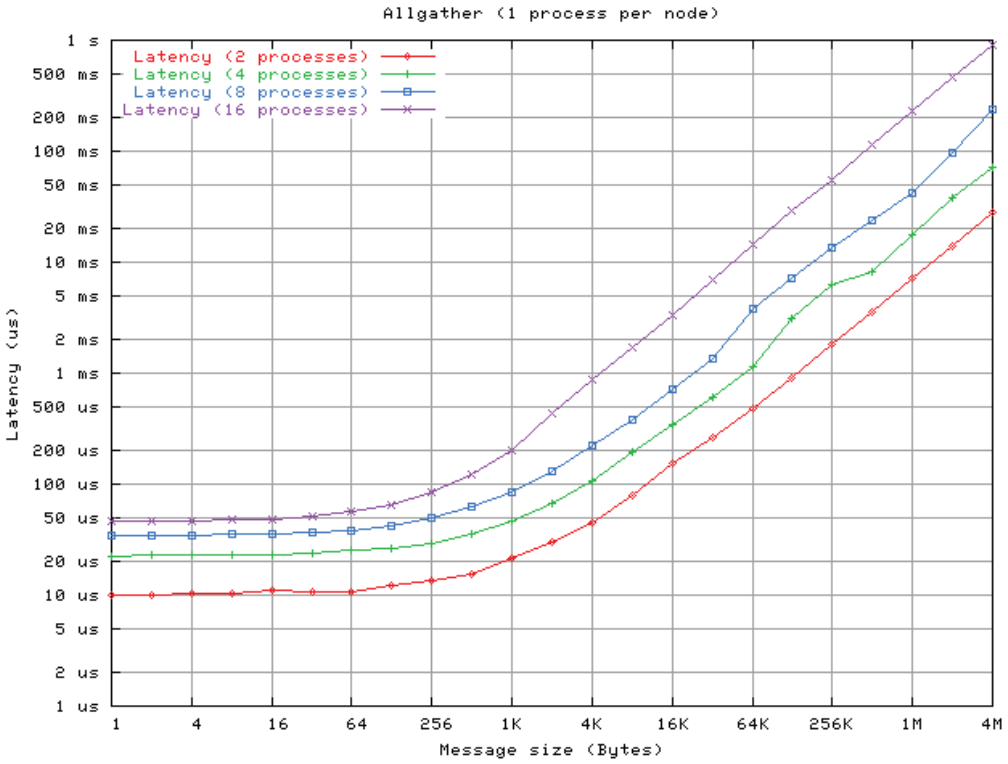


FIGURE 2.11 – Latences de la communication AllGather en fonction de la taille du message à envoyer [Myricom 2006]

L'idée ici est de conserver l'algorithme initial du multigrid, mais de modifier une partie du calcul. Considérons un multigrid à n niveaux (fig 2.12) :

1. Calculer en parallèle une première partie de la descente jusqu'à la limite locale (grille $n-k$), à savoir le moment où il ne reste qu'un point sur l'un des axes. Soit la portion $1 \rightarrow n-k$.
2. Mettre en commun toutes les valeurs restantes à l'aide d'un MPI_ALL_GATHER.
3. Terminer la descente en local, sur chaque processeur. Soit la portion $n-k+1 \rightarrow n$.
4. Remonter en local, jusqu'au niveau de la grille $n-k$. Soit la portion $n \rightarrow n-k+1$.
5. Terminer la montée en parallèle. Soit $n-k \rightarrow 1$.

En terme de coût de communications, cela donne donc :

Algorithme original :

1 IT de Poisson

↪ 1 IT du BICGSTAB

↪ 6 MPI_ALL_REDUCE

↪ 2 Multigrid

↪ Pas de communications collectives

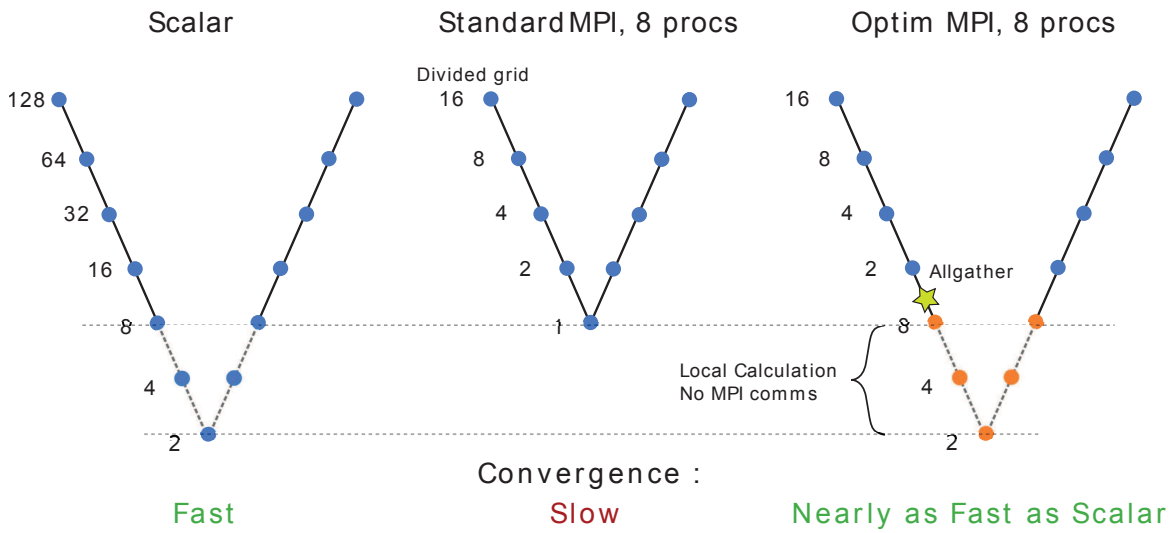


FIGURE 2.12 – Optimisation sur le multigrid, forte amélioration de la convergence

Poids total : 6 communications collectives par IT de Poisson.

Algorithme modifié :

1 IT de Poisson
↪ 1 IT du BICGSTAB
↪ 6 MPI_ALL_REDUCE
↪ 2 Multigrid
↪ 1 MPI_ALL_GATHER

Poids total : 8 communications collectives par IT de Poisson.

En considérant ces communications comme prédominantes en terme de coût temporel (ce qui serait le pire scénario et ne sera jamais le cas, loin de là), l'ensemble est donc rentable pourvu que le nombre d'IT avec la nouvelle méthode soit $6/8 = 0.75$ fois inférieur au nombre d'IT avec la première méthode, ce qui sera en fait le cas dès que les 3 derniers niveaux de grilles sont supprimés. A noter aussi l'élimination par la même occasion de toutes les petites communications point à point des derniers niveaux, et que la reprise en $n - k + 1$ ne nécessite pas de communication particulière, d'où un gain non négligeable car la latence cumulée de ces communications recouvre largement le surcout de la communication collective rajoutée.

Cette modification trouvée au cours de cette thèse permet au final de toujours conserver les même performances de calcul quel que soit le nombre de processeurs utilisés et d'assurer de bonnes performances parallèles.

2.4.5 Performances du code

Pour achever la mise à jour du code Asphodele en sa version optimisée et parallèle Parasphodele et pour valider les performances, il reste à vérifier les performances de scaling sur les calculateurs parallèles.

La version MPI du code utilisant le nouveau solveur de Poisson BigFish a été testée sur la machine Jade 1 du CINES. Des tests de performance ont ainsi été réalisés afin notamment de prouver l'efficacité du solveur implicite et des techniques d'optimisation.

Une première série de calcul appelée "*strong scaling*" a consisté à déterminer le point d'inflexion correspondant au meilleur ratio points par CPU. Comme le solveur de Poisson optimisé impose des puissances de 2, seuls les cas 64*64, 128*128 et 256*256 ont été testés pour la configuration 2D. Pour ce faire, le champ a été fixé à $4097 * 1024 = 4195328$ points, puis le nombre de processeurs a été modifié pour faire varier le nombre de points par tâches et tester les cas précédemment exposés. A noter que la configuration "flamme-paroi en V" a été utilisée pour ce test.

La formule de l'efficacité adimensionnée par la meilleure performance est donnée ici par :

$$Ef_r = \frac{Temps_{simu} \times Nb_{procs}}{Nb_{points} \times Nb_{iterations}} \Longrightarrow Ef_r^+ = Ef_r / Ef_{r_{min}} \tag{2.1}$$

Il est possible de parfaitement observer le point d'inflexion pour des cas à 128×128 points (fig 2.13), le choix du nombre de points pour la suite des simulations sera donc de $128 \times 128 = 16384$ points. A partir de ce constat, il est possible de réaliser un "*weak scaling*" afin de connaitre les possibilités du code en fonction du nombre de cœurs de calcul. Le weak scaling consiste à fixer le nombre de points par processeurs et à augmenter le domaine et donc le nombre de processeurs tout en regardant le temps nécessaires au calcul d'un nombre d'itérations fixé (le pas de temps étant fixe).
Il est à noter que le "*weak scaling*" n'est pas vraiment représentatif pour les simulations implicites comme la nôtre. En effet, la résolution itérative de Poisson va fortement évoluer en

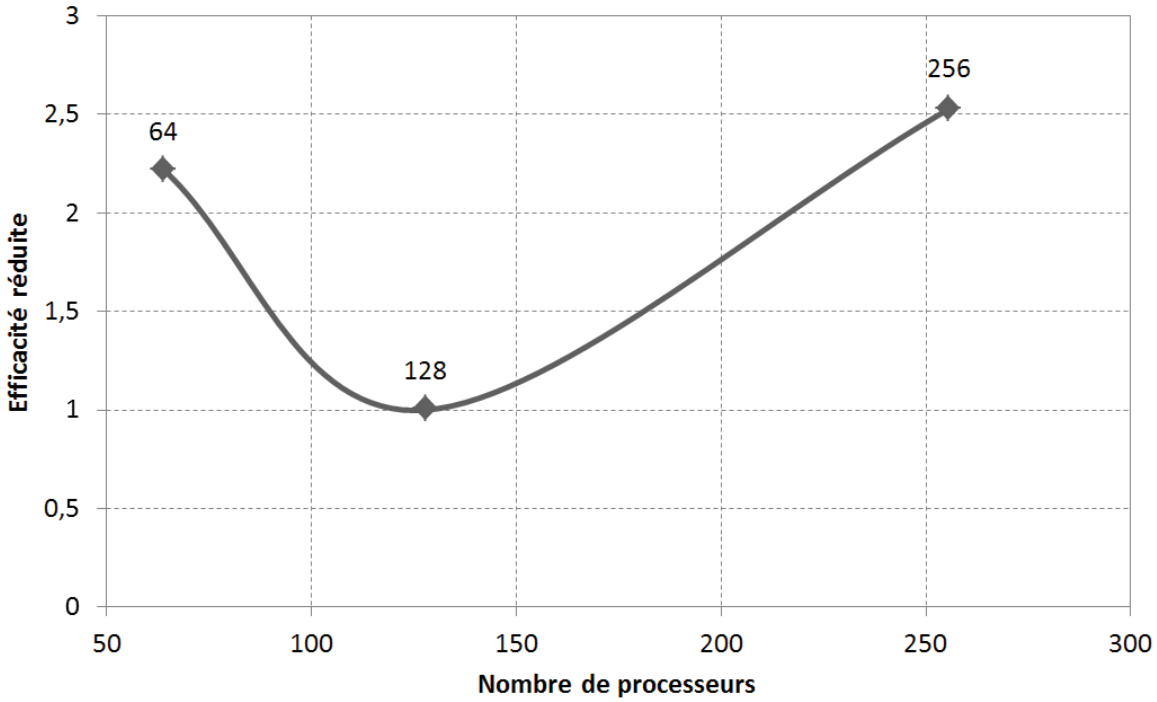


FIGURE 2.13 – StrongScaling

fonction du nombre de points, i.e. le nombre d'itérations nécessaires à la résolution va augmenter avec l'augmentation du nombre de points et donc de processeurs.
Une tentative de dégager des valeurs plus crédibles peut être réalisée par la prise en compte du nombre d'itérations de Poisson, en considérant que Poisson occupe 100% du temps CPU, ce qui serait bien sûr faux mais proche de la réalité. Ces résultats seraient alors dans la zone verte de la figure 2.14.
La formule des performances du code est donnée par la relation suivante :

$$Perf = \frac{Temps_{simu}}{Temps_{ref}} \tag{2.2}$$

Les résultats sont donnés par la figure 2.14.

La valeur de référence étant celle utilisée pour 16 processeurs, valeur très restrictive, il est ainsi possible d'affirmer que le scaling est bon **pour un code implicite**. Bien sûr, ce n'est pas suffisant pour tourner sur des calculateurs tel Babel de l'IDRIS réclamant des scalings excellents (à moins d'utiliser les parties C_p variables du code, voire une chimie complexe, mais non nécessaires ici), cependant ce score est très nettement suffisant pour utiliser Parasphodele sur des calculateurs type Antares, Vargas, Jade ou Titane, d'autant qu'Antares et Titane bénéficient du SSE4.2, accélérant fortement les calculs.

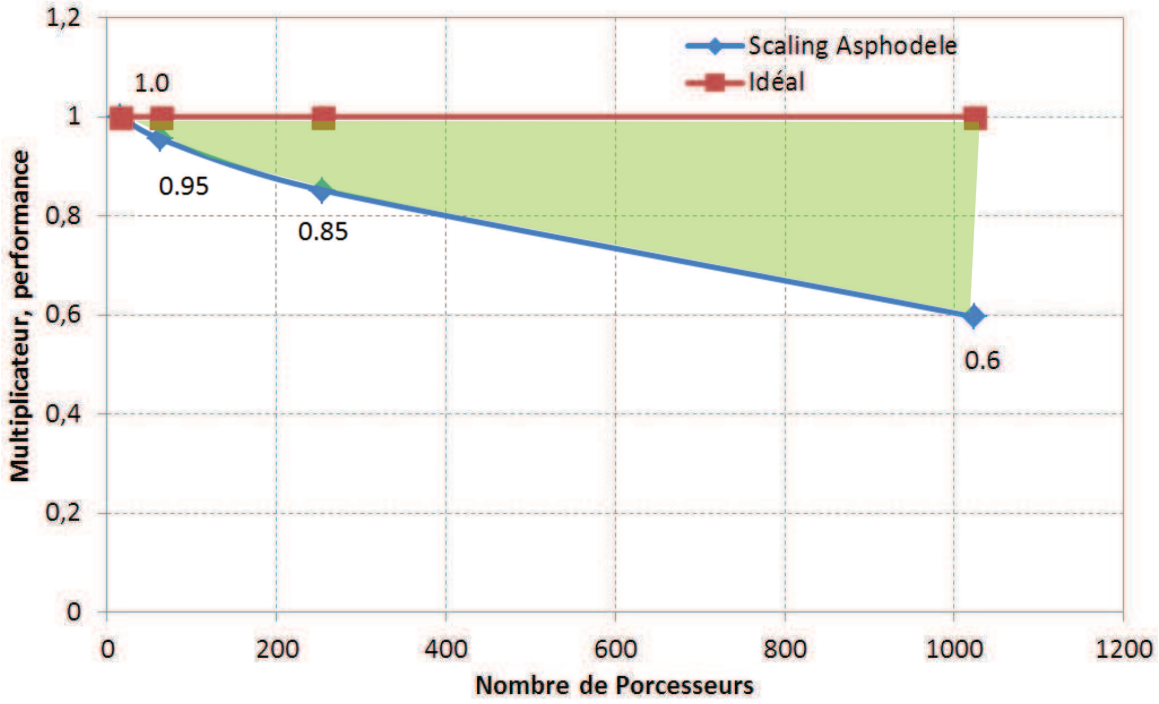


FIGURE 2.14 – WeakScaling

Chapitre 3

Interaction d'une flamme gazeuse avec la paroi

"Nul ne persévère, car chacun à son verre à soi."

Auteur Inconnu

3.1 Introduction et état de l'art

Ce chapitre regroupe Dans un premier temps, les calculs DNS seront testés sur un cas simple 1D afin de vérifier la véracité des grandeurs recherchées. Par la suite le modèle sera testé dans un cas simple 2D laminaire, domaine hors zone de prédilection du modèle (turbulent), puis l'étude se focalisera sur son comportement en cas turbulent 2D et 3D.

Afin de suivre aisément le raisonnement de l'étude, un schéma récapitulatif des étapes ainsi que des flux finaux comparés (en bleu) est a disposition en début de chapitre (fig **??**).

3.1.1 Etat de l'art de l'interaction flamme-paroi

De nombreuses études ont été menées sur l'interaction flamme/paroi. Avec l'expansion des possibilités de calculs et l'amélioration des méthodes de mesures optiques, une grande partie des phénomènes physiques et réactionnels sont aujourd'hui expliqués, bien qu'il subsiste encore quelques zones d'ombres, notamment au niveau des réactions chimiques à la paroi.

Alors qu'étudier d'une manière expérimentale une si petite échelle que la distance en proche paroi est délicat, à cause notamment des perturbations engendrés par la paroi sur les instruments de mesures (faisceaux PIV, etc.), il existe un bon nombre d'articles expérimentaux traitants de cette interaction. [Foucheraet et al. 2003] étudia l'interaction d'une flamme laminaire de méthane dans l'air au sein d'une cuve, [Nishiwaki et al. 1998] étudia le même type de mélange, en régime de transition laminaire/turbulent, et [Boust et al. 2007] se concentra sur une flamme laminaire, mais dans de multiples configurations (HOQ, SWQ) au sein d'une chambre à volume constant et à différentes pressions (0.5-3.5 atm).

De nombreuses études numériques sur l'interaction flamme paroi peuvent être trouvées en régime laminaire. [Dabireaua et al. 2003] utilisa un mélange hydrogène/air pour réaliser des calculs de type HOQ,SWQ en chimie complexe à 750K. [Owston et al. 2007] fit appel au même mélange, mais pour des configurations entre 300K et 1200K, pour des pressions de 1 à 2 atm. [Owston, Vinicio Magi et al. 2007] étendirent l'étude au mélange n-heptane/air pour une configuration de type Cylindre (configuration moteur), à 750K. [De Lataillade et al. 2010] utilisa le même mélange pour une configuration HOQ,SWQ à 300K et à 1 atm. [Kediaa et al. 2011] simula un mélange méthane/air dans une configuration bruleur à 300K et à pression ambiante.

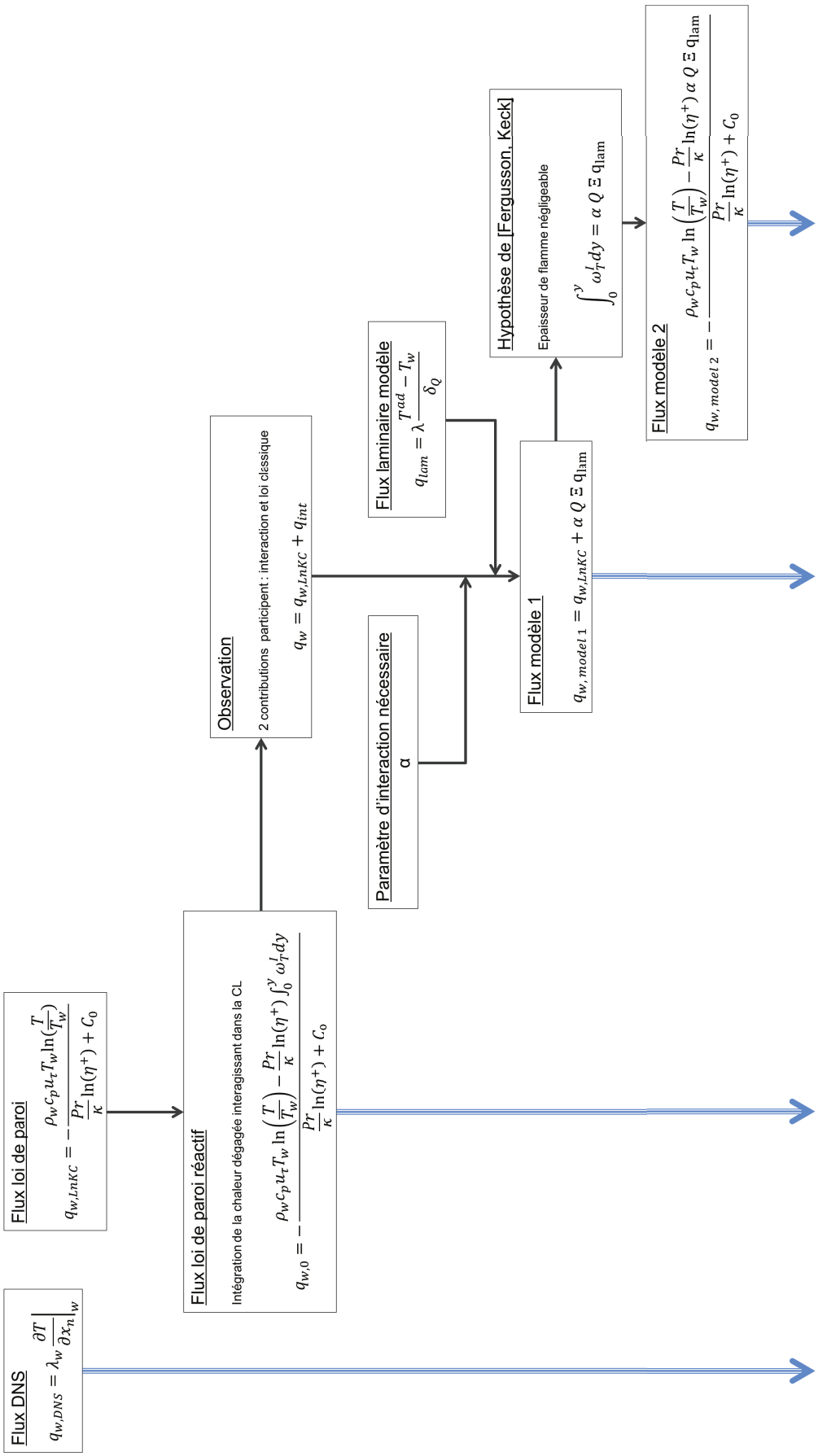


FIGURE 3.1 – Représentation du raisonnement effectué sur le modèle IFPen. Les valeurs comparées sont en bleu.

[Allichea et al. 2010] et [Kurdyumova et al. 2009] simulèrent un mélange méthane/air laminaire avec une chimie simple, dans une configuration de type canal proche de celle l'étude de cette thèse.

Les études en régime turbulent sont plus rares, mais tendent à se démocratiser avec la monté en puissance des calculateurs. [Akselvollb et al. 1996] a étudié un mélange hydrogène/air avec chimie simple dans une configuration canal trubulent. [Wanga et al. 2006] utilisa le même type de chimie pour un mélange de type Polyéthylène/air à 300K et à la pression atmosphérique pour une configuration de type flamme libre. [Madhav Rao Vendra et al. 2012] utilisèrent un mélange de type méthane/air turbulent avec chimie simple à 300K, tandis que [Alshaalan et al. 1998] firent appel à la même configuration, mais à 600K. Pour finir, [Gruber et al. 2010] mis en avant les phénomènes chimiques de l'interaction flamme paroi avec une flamme hydrogène/air en V dans un canal turbulent, résolue avec un solveur de chimie complexe.

3.1.2 Impact de la chimie et de la température du mur

Le choix de la chimie, dans le cas d'études d'interaction flamme/paroi, dépend fortement des données ciblées ainsi que de la température de la paroi.
En effet, afin de rendre compte de la complexité du phénomène, et pour capter les polluants formés ainsi que la quantité exacte d'imbrûlés restants, il est nécessaire d'utiliser un schéma cinétique détaillé. De même, une température de paroi supérieure à 400K amènera l'apparition d'effets à la paroi rendant caduque l'hypothèse d'une paroi inerte et par l'utilisation d'une chimie simplifiée. A noter que la plupart des études se sont concentrées sur l'impact de la paroi sur la structure de la flamme, et non l'inverse (c'est à dire l'impacte de la flamme sur le flux thermique à la paroi).

Plusieurs études avec chimie détaillée ont été menées afin de décrire les mécanismes de l'extinction proche paroi. Récemment, Gruber [Gruber et al. 2010] a simulé une flamme en V au sein d'un canal turbulent avec chimie détaillée et parois froides. Westbrook et al [Westbrook et al. 1981] ont aussi utilisé un calcul numérique pour du méthane à différentes richesses/pressions/température de parois. Ces calculs ont montré des résultats sensiblement identiques :
Si $T < 800K$ dans la zone d'induction, les radicaux diffusent de la zone de combustion vers le carburant et consomment ce dernier pour propager la réaction. Il existe, parmi les réactions du schéma cinétique, des réactions de recombinaison des radicaux qui vont former des composants stables. Ces réactions ne nécessitent pas ou peu d'énergie d'activation, et sont fortement exothermiques. Dans le cas d'une "flamme froide" ($< 800K$), ces réactions de recombinaison deviennent largement majoritaires et le sont au moment où la flamme rentre dans la zone de quenching. Ces réactions deviennent si importantes face aux autres réactions que les radicaux nécessaires pour consommer le carburant disparaissent : la flamme est alors coincée.
Gruber [Gruber et al. 2010] a montré que ces réactions rapides sont accompagnées d'importants dégagements de chaleur, provoquant localement une forte hausse du flux pariétal.

3.2 Configuration de test, cas 1D

La configuration 1D (fig 3.2) correspond au cas Head on Quenching rencontré en configuration moteur. Ce cas simple permet de tester le comportement du code ainsi que de vérifier la concordance des grandeurs habituellement utilisées (fig 3.3 et 3.4) lors des calculs d'interaction flamme/paroi.

Il est aussi possible d'observer les 3 phases temporelles de l'interaction décrites au-dessus : propagation, interaction/extinction, diffusion.

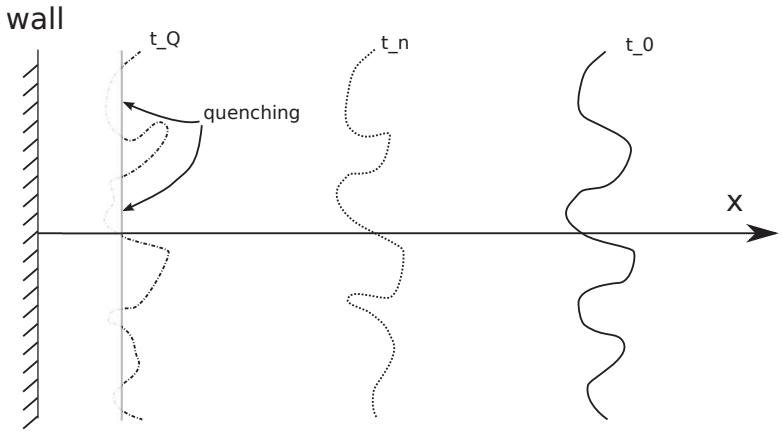


FIGURE 3.2 – Configuration 1D et évolution du front de flamme au cours du temps

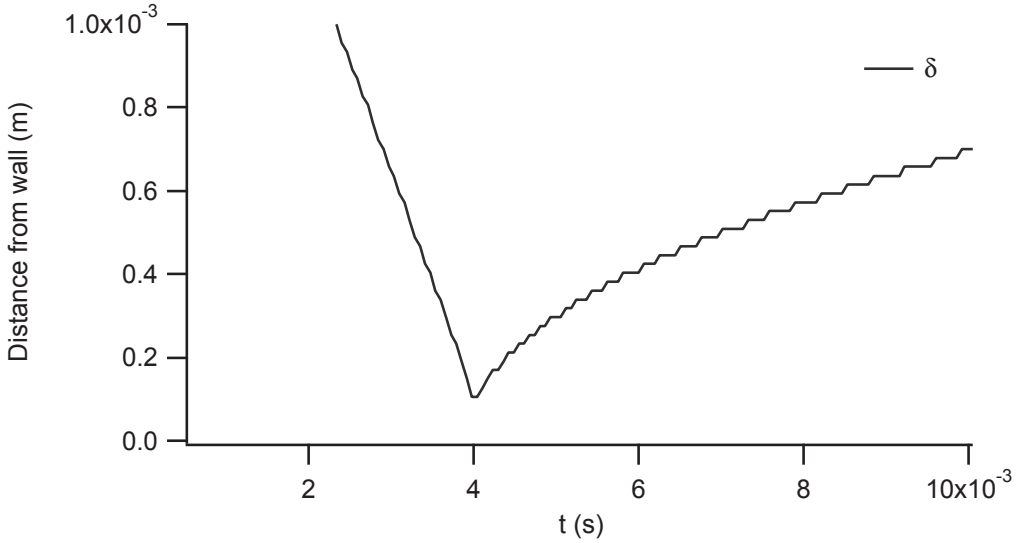


FIGURE 3.3 – Distance flamme/paroi au cours du temps

3.2.1 Nombre de Peclet

Afin de représenter la distance flamme/paroi, il est possible de définir un nombre adimensionné, le nombre de Peclet, permettant de comparer la distance de coincement critique δ_Q à l'épaisseur diffusive de flamme ou à l'épaisseur thermique de flamme. Ce nombre atteint sa valeur minimale (Peclet critique, Pe_Q) au moment de l'interaction avec la paroi, lorsque la flamme atteint sa distance de coincement (fig 3.5).

A configuration donnée et à pression donnée, le nombre de Peclet critique est une constante

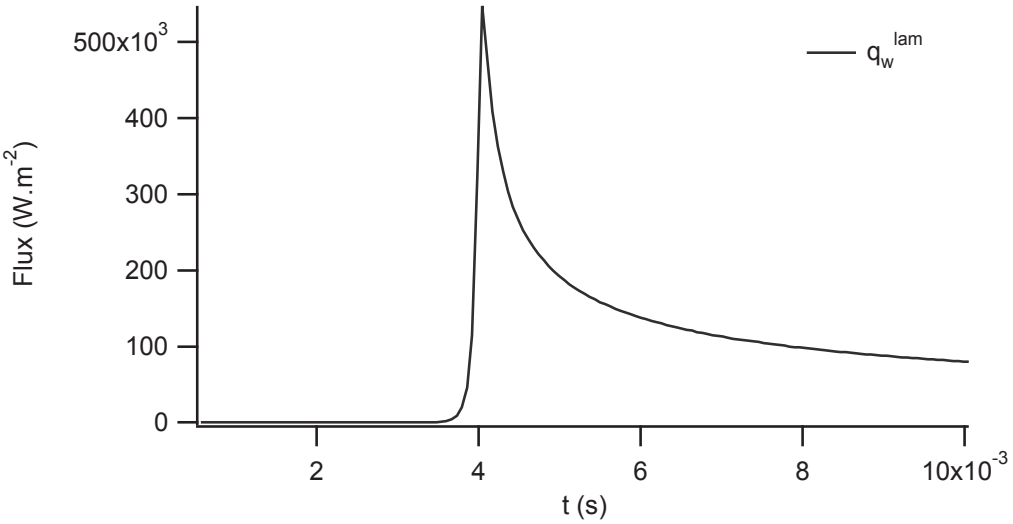


FIGURE 3.4 – Flux thermique à la paroi au cours du temps

pour une configuration de type HOQ. Deux expressions peuvent être utilisées :

Calcul du Peclet à l'aide de l'épaisseur diffusive [Vosen et al. 1985][Ferguson 1977] :

$$Pe_{Q_{diff}} = \frac{\delta_Q}{\delta} \quad avec \quad \delta = \frac{\lambda^u}{\rho^u c_p S_L^0} \tag{3.1}$$

D'une manière générale, les valeurs de $Pe_{Q_{diff}}$ gravitent autour de 3.2, qu'elles proviennent de simulations avec chimie complexe ou simple. Adamczyk et Lavoie [Adamczyk 1978] obtiennent par exemple une valeur proche de 3.5 avec une chimie simple pour un mélange méthanol ou méthane air à différentes richesses, idem pour Westbrook et al. [Westbrook et al. 1981] avec une chimie détaillée. Pour une flamme interagissant parallèlement avec la paroi, Bruneaux [Bruneaux et al. 1996] trouve une valeur d'environ 7. Pour une interaction de type cavitaire, les valeurs varient entre 10 et 50 [Bruneaux et al. 1996][Girard et al. 1983][Angelberger et al. 1997], la flamme se trouvant comprimée entre 2 murs.

Une autre approche basée sur l'épaisseur thermique est utilisée par Popp et Baum [Popp and Baum 1997] ainsi que par Chauvy et al [Chauvy et al. 2010].

Calcul du Peclet avec l'épaisseur thermique :

$$Pe_{Q_{ther}} = \frac{\delta_Q}{\delta} \quad avec \quad \delta = \frac{\left(T^b - T^u\right)}{max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)} \tag{3.2}$$

Pour des simulations avec chimie détaillée avec un mélange méthane/air, Popp et Baum [Popp and Baum 1997] trouvent un $Pe_{Q_{ther}}$ d'environ 0.7 avec une température de paroi T_w de 300K. Chauvy et al [Chauvy et al. 2010] trouvent pour leur part une valeur de 0.38 pour une même température T_w mais avec un mélange d'iso-octane.
Dans le cas présent, la simulation 1D donne l'évolution des nombres de Peclet en fonction du temps (fig 3.5).

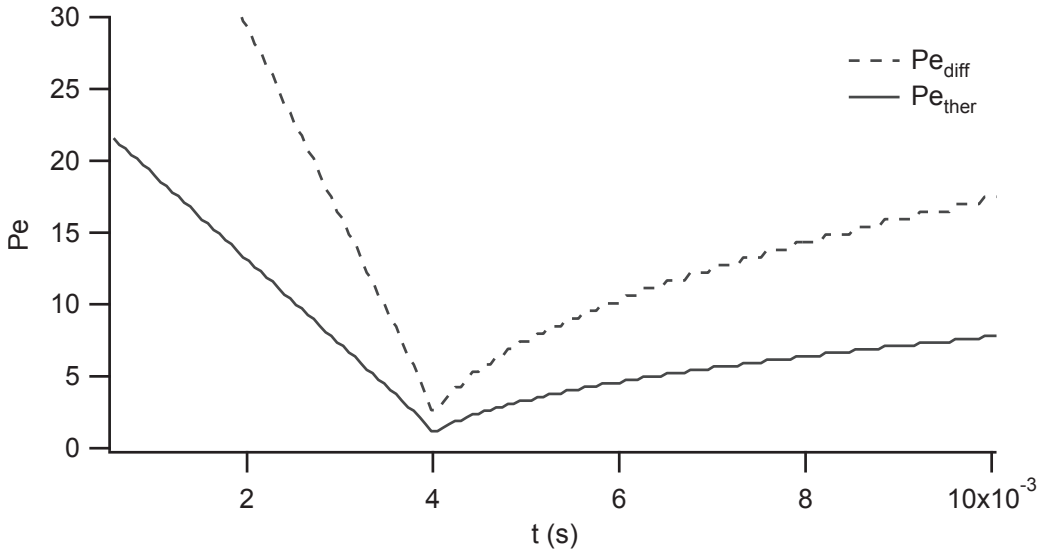


FIGURE 3.5 – Evolution des nombres de Peclet au cours du temps

Les Peclet critiques valent ici, pour un mélange propane/air à la stœchiométrie et à $T_w = 298.15K$:

- $Pe_{Q_{diff}} \approx 3.1$
- $Pe_{Q_{ther}} \approx 1.2$

Ces grandeurs sont conformes aux études exposées plus haut, avec une valeur tout de même élevée pour le $Pe_{Q_{ther}}$, qui peut s'expliquer par la méthode de calcul de la chimie (une étape). Il est possible d'observer un rapprochement à vitesse constante du front de flamme (S_L^0), puis après interaction un écartement du front de flamme toujours légèrement réactif (cf pente de la courbe après interaction (fig 3.5), $S_L \backsim \frac{\partial Pe}{\partial t} < S_L^0$).

3.2.2 Flux thermique

Au cours de l'interaction flamme/paroi en régime laminaire, le flux de chaleur au mur est inversement proportionnel à la distance de coincement [Vosen et al. 1985].

Ce flux de chaleur peut être estimé par un model simple [Ferguson et al. 1977][Vosen et al. 1985] (supposant la linéarité du profil de température dans la zone de coincement, fig 3.6), donné par la formule suivante :

$$q_{lam} = \lambda \frac{T^{ad} - T_w}{\delta_Q} \tag{3.3}$$

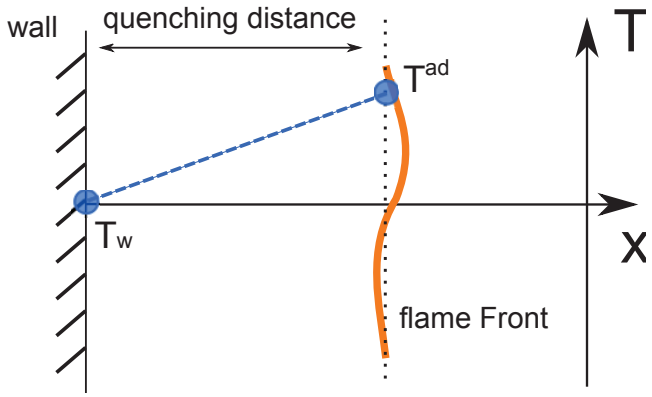


FIGURE 3.6 – Hypothèse de linéarité du profil de température dans la zone de coincement

Ce qui donne dans le cas de notre configuration de test : $q_{lam} \simeq 430\ 000 W.m^{-2}$. Cette valeur servira par la suite de référence pour les calculs du modèle d'interaction.

Dans le cadre du calcul DNS, le flux de chaleur à la paroi est estimé à l'aide du gradient de température à la paroi (fig 3.4), en supposant donc que le flux est entièrement conductif :

$$q_w = \lambda_w \left(\frac{\partial T}{\partial x_n} \right)_w \tag{3.4}$$

Il est aussi possible d'adimensionner ce flux par la puissance thermique de flamme laminaire :

$$\varphi_w = \frac{q_w}{q_l} \quad avec \quad q_l = \rho^u S_L^0 Y_F^u \Delta H_r^0 \tag{3.5}$$

Avec $\Delta H_r^0 = 50.35 * 10^6 J.kg^{-1}$ la chaleur de réaction.

Soit :

$$\varphi_Q \approx \frac{1}{Pe_Q} \tag{3.6}$$

En traçant ces 2 valeurs (fig 3.7), il est possible de se rendre compte du bien-fondé de cette relation, même si le flux reste quasi nul durant la première phase de l'interaction, les gaz proches paroi étant encore frais.

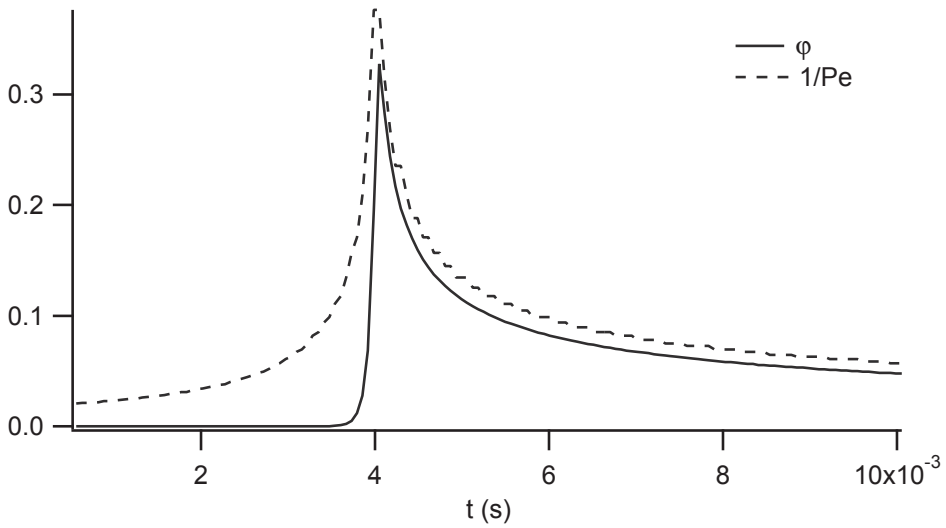


FIGURE 3.7 – Similarité entre l'inverse du flux adimensionné et du nombre de Peclet, en particulier durant l'interaction

3.3 Objectifs et configuration

Maintenant que sont posées les bases de l'interaction flamme paroi, il est temps d'entrer dans le vif du sujet, avec les objectifs et la configuration du projet INTERMAC.

L'objectif du CORIA, au sein du projet INTERMAC, est d'extraire un ensemble de données de simulations 2D et 3D d'interaction flamme paroi en vue de tester, valider et si besoin modifier le modèle développé par IFPen, le modèle Alpha [Truffin et al. 2012]. Pour cela, en accord avec le CETHIL et IFPen, une configuration de type "flamme en V dans un canal" a été retenue (fig 3.8). La flamme vient donc interagir avec la paroi avec un angle donné, et provoque un flux thermique local.
Afin de rendre compatibles les grandeurs (DNS, RANS, Expérimental) et d'extraire des informations pertinentes, de nombreuses procédures complexes et effectuées en parallèle, permettant d'effectuer statistiquement des analyses, ont été développé au sein du code Asphodele.

3.3.1 Configuration étudiée

La configuration étudiée a fortement évolué au cours du projet. La configuration initiale consistant en une flamme en V interagissant avec une paroi unique (comme le cas expérimental). Le choix de passer à une flamme en V interagissant avec un canal fermé, pour des raisons d'influence des conditions aux limites dans le cas de calculs low-mach (la sortie convective

"aspirait" la couche limite et provoquait un étirement des profils) a ensuite été effectué. Autres modifications : la vitesse d'injection et les dimensions du canal. De dimensions Lx = 7 cm, Ly = 4 cm et Lz = 2 cm, la boîte 3D est passée à Lx = 4 cm, Ly = 0.5 cm et Lz = 0.25 cm, pour des raisons de coût de calculs. Il eut été possible de simuler de bien plus grands domaines, mais les ressources de calcul disponibles ne permettant pas l'utilisation de plus de 256 processeurs, un calcul de plus grande envergure n'était pas envisageable.

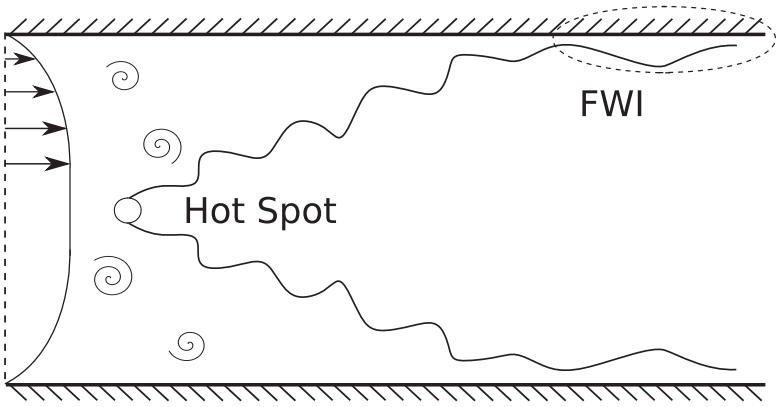


FIGURE 3.8 – Configuration 2D étudiée

Pour finir, les configurations finales retenues ont été les suivantes :

Configuration 2D :

Vitesse d'injection : 5 m.s-1

Dimensions : 6 cm x 0.5 cm

Intensité turbulente en entrée : 23% ($u'/\overline{u}$)

Configuration 3D :

Vitesse d'injection : 5 m.s-1

Dimensions : 4 cm x 0.5 cm x 0.25 cm

Intensité turbulente en entrée : 15% ($u'/\overline{u}$)

Dans le cas de la simulation 3D, il a été nécessaire de coder une injection turbulente par pré-calcul d'un canal laissant la couche limite turbulente s'établir (fig 3.9) . Les profils en sortie sont ensuite stockés et réinjectés en entrée du calcul réactif. Le pas de temps du calcul réactif étant environ 30 fois plus petit que celui du pré-calcul, il est nécessaire d'interpoler les captures à l'aide d'une interpolation linéaire d'ordre 1.

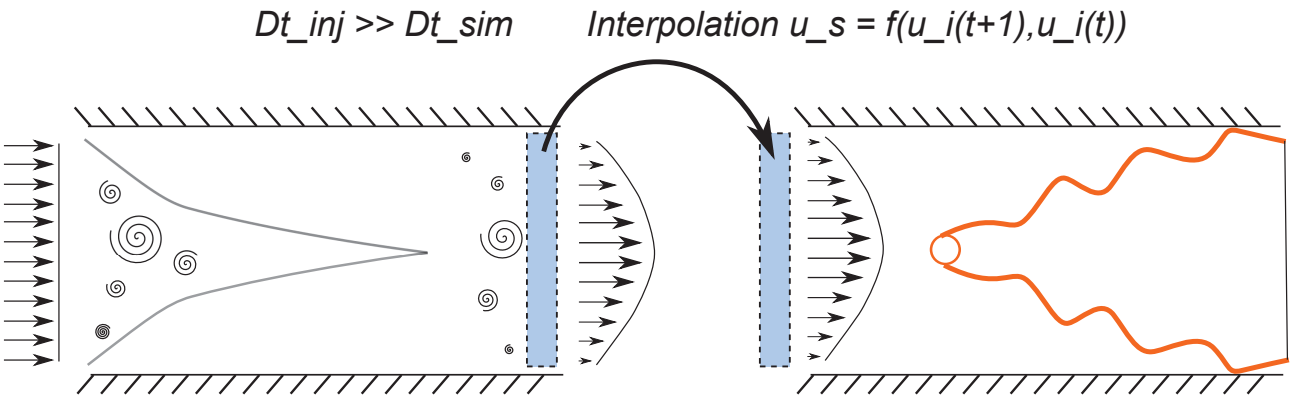


FIGURE 3.9 – Interpolation temporelle du champ de vitesse du canal de pré-calcul, profil de couche limite turbulente établie

3.4 Modélisation

3.4.1 Lois de paroi

Pour pouvoir simuler des écoulements attachés à des nombres de Reynolds élevés, des modèles de parois ont été introduits afin de déterminer des conditions aux limites et éviter de résoudre finement les zones proches des parois. Une loi de paroi classique permet de déterminer les flux pariétaux de quantité de mouvement et de chaleur, ainsi que les quantités turbulentes dans une cellule pariétale (fig 3.10). Elle remplace alors les conditions de non-glissement et d'isothermicité sur la paroi solide par une valeur estimée de la vitesse et de la température dans la couche limite inertielle. Cette méthode permet de capturer correctement les caractéristiques de l'écoulement plus loin de la paroi sans avoir à résoudre toute la couche limite. Les lois de parois permettent de relier les flux pariétaux (contrainte pariétale τ_w et flux de chaleur q_w) aux variables de l'écoulement moyen dans la cellule pariétale, située dans la couche limite où ces lois peuvent être appliquées.

Ces lois reposent néanmoins sur un certain nombre d'hypothèses : écoulement 2D plan, stationnaire à Mach faible et négligent un certain nombre de termes liés notamment aux gradients de pression, à la convection naturelle ou aux flux radiatifs. Elles s'appuient également sur une approche simplifiée de la couche limite. Une sous-couche visqueuse dans laquelle la viscosité turbulente est considérée nulle et une sous-couche inertielle dans laquelle la viscosité turbulente est considérée comme prépondérante par rapport à la viscosité moléculaire.

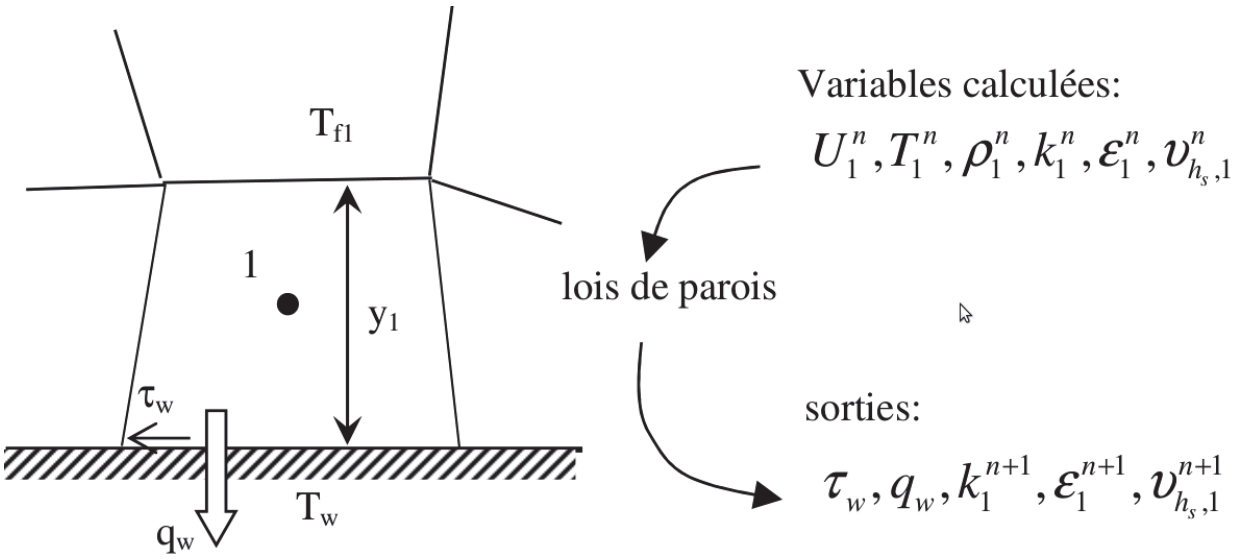


FIGURE 3.10 – Principe des lois de parois avec le modèle k-epsilon [K. Truffin et al]

Les équations de quantité de mouvement utilisées en RANS s'écrivent sous une forme différente des versions vues précédemment (équations moyennées) :

$$0 = \frac{d}{dy}\left((\overline{\mu_t} + \overline{\mu})\frac{d\tilde{u}}{dy}\right) \tag{3.7}$$

$$0 = \frac{d}{dy}\left((\overline{\lambda_t} + \overline{\lambda})\frac{d\tilde{T}}{dy}\right) + \tilde{\dot{\omega}}_T \tag{3.8}$$

Avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur de la flamme. Ce terme sera supposé nul pour le moment, avant d'y revenir par la suite.
Dans ces conditions, les équations de quantité de mouvement et de température peuvent être simplifiées. En les intégrant une première fois à partir de la paroi, le résultat obtenu est :

$$(\mu + \mu_t)\frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w = \mu_w \left(\frac{d\tilde{u}}{dy}\right)_{y=0} \tag{3.9}$$

$$(\lambda + \lambda_t)\frac{d\tilde{T}}{dy} = q_w = \lambda_w \left(\frac{d\tilde{T}}{dy}\right)_{y=0} \tag{3.10}$$

Avec $Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}$ et $\mathrm{Pr}_t = \frac{\mu_t c_p}{\lambda_t}$.
Il est alors possible de poser une vitesse de frottement ainsi qu'une température de frottement

pour caractériser la couche limite :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} = \sqrt{\left(\nu \frac{\partial u}{\partial y}\right)_w} \tag{3.11}$$

Et

$$T_\tau = \frac{q_w}{\rho_w c_p u_\tau} \tag{3.12}$$

Les variables adimensionnés classiques pour des écoulements quasi-anisothermes sont définis par :

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu_w} \quad u^+ = \frac{\tilde{u}}{u_\tau} \quad T^+ = \frac{\tilde{T} - T_w}{T_\tau}$$

$$\mu^+ = \frac{\mu}{\mu_w} \quad \mu_t^+ = \frac{\mu_t}{\mu_w} \quad \rho^+ = \frac{\overline{\rho}}{\rho_w} \tag{3.13}$$

$$\lambda^+ = \frac{\mu^+}{Pr} \quad \lambda_t^+ = \frac{\mu_t^+}{Pr_t}$$

Ce qui permet de réécrire les équations précédentes (3.9) et (3.10) sous une forme adimensionnée :

$$(\mu^+ + \mu_t^+)\frac{d\tilde{u}^+}{dy^+} = 1 \tag{3.14}$$

$$\left(\frac{\mu^+}{Pr} + \frac{\mu_t^+}{Pr_t}\right)\frac{d\tilde{T}^+}{dy^+} = 1 \tag{3.15}$$

La viscosité turbulente est donnée par une expression de type longueur de mélange :

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left|\frac{d\tilde{u}}{dy}\right| \tag{3.16}$$

Avec la longueur de mélange $l_m = \kappa y$ avec $\kappa = 0.41$ la constante de Von Karman. Ce qui donne alors :

$$\mu_t^+ = (\kappa y^+)^2 \frac{d\tilde{u}}{dy} \tag{3.17}$$

En intégrant les équations (3.14) et (3.15) dans la couche limite, il en ressort les expressions suivantes (qui seront utilisées pour le profil d'injection turbulente dans le cas 2D) :

– Sous couche visqueuse ($y^+ < 10.8$) :

$$u^+ = y^+ \quad et \quad T^+ = Pry^+ \tag{3.18}$$

– Sous couche inertielle ($y^+ > 10.8$) :

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} lny^+ + C_{u,0} \quad et \quad T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa} lny^+ + C_{T,0} \tag{3.19}$$

Avec $C_{u,0} = 5.0$ et $C_{T,0} = 3.9$.

3.4.2 Le modèle LnKC

Sont posées dans cette section les bases de la loi de paroi LnKC, développée par C. Angelberger [Angelberger et al. 1997]. Afin de prendre en compte les variations locales de la masse volumique et de la viscosité dans la couche limite, de nouvelles variables adimensionnées sont définies :

$$d\eta^+ = \frac{\nu_w}{\nu} dy^+ \ , \ \ d\psi^+ = \rho^+ du^+ \ , \ \ d\theta^+ = \rho^+ dT^+ \tag{3.20}$$

$\mu_t^+ = \mu_t/\mu_w$ est ici remplacé par $\mu_t^{++} = \mu_t/\mu$. Les équations (3.9) et (3.10) s'écrivent alors :

$$\left(1 + \mu_t^{++}\right) \frac{d\psi^+}{d\eta^+} = 1 \tag{3.21}$$

$$\left(\frac{1}{Pr} + \frac{\mu_t^{++}}{Pr}\right) \frac{d\theta^+}{d\eta^+} = 1 \tag{3.22}$$

A noter ici que dans le cadre du modèle d'interaction et des calculs RANS la valeur de η^+ est elle aussi modélisée. Au lieu d'intégrer sur toute la hauteur, l'équation utilisée sera :

$$\eta^+ = \int_0^{y^+} \frac{\nu_w}{\nu} dy^+ \quad \sim \quad \eta^+ = \frac{\nu_w}{\nu} y^+ \tag{3.23}$$

Cette approximation donnera lieu par la suite à une étude d'impact sur le flux LnKC.
La formulation adimensionnée pour la viscosité turbulente est déduite de l'équation (3.16) :

$$\mu_t^{++} = (\kappa\eta^+) \frac{d\psi^+}{d\eta^+} \tag{3.24}$$

L'intégration des équations (3.37) et (3.38) donne :

$$\eta^+ \leq \eta^+_{c,\psi} \; \psi^+ = \eta^+ \tag{3.25}$$

$$\eta^+ > \eta^+_{c,\psi} \; \psi^+ = \frac{1}{\kappa} ln(\eta^+) + C_{\psi,0} \tag{3.26}$$

$$\eta^+ \leq \eta^+_{c,\theta} \; \theta^+ = Pr\eta^+ \tag{3.27}$$

$$\eta^+ > \eta^+_{c,\theta} \; \theta^+ = \frac{Pr}{\kappa} ln(\eta^+) + C_{\theta,0} \tag{3.28}$$

Avec $C_{\psi,0} = 5.0$ et $C_{\theta,0} = 3.9$ et $\eta^+_{c,\psi}$ et $\eta^+_{c,\theta}$ les valeurs délimitant les sous couches visqueuses et inertielles. Ces valeurs sont posées à $\eta^+_{c,\psi} = 10.8$ et $\eta^+_{c,\theta} = 13.2$. La contrainte de cisaillement est obtenue par une formulation hors équilibre faite de façon à prédire l'annulation du frottement pariétal en un point de décollement de la couche limite :

$$\tau_w = \rho_w C_\mu^{1/4} \tilde{k_1} \frac{\tilde{U_1}}{\Psi_1^+} \tag{3.29}$$

Le choix de la masse volumique ρ_w plutôt que ρ permet de prendre en compte l'augmentation du frottement pendant l'interaction flamme-paroi. Le flux de chaleur peut s'exprimer en utilisant l'hypothèse $\rho_w T_w = \rho T$:

$$q_w = -\frac{\rho_w c_p C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} T_w ln(\tilde{T_1}/T_w)}{\theta_1^+} \tag{3.30}$$

Une autre formulation proche est proposée par Han et Reitz [Han et al. 1997], les différences résident dans le choix des constantes :

$$\tau_w = \rho_w C_\mu^{1/4} \tilde{k_1} \frac{\tilde{U_1}}{\frac{1}{\kappa} ln(\eta_1^+) + 5.5} \tag{3.31}$$

Soit donc le flux de chaleur suivant :

$$q_w = -\frac{\rho_w c_p C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} \tilde{T} ln(\tilde{T} T_w)}{2.1 ln(\theta^+) + 3.9} \tag{3.32}$$

Pour $\eta^+ < \eta^+_{c,\theta}$ ou dans un cas laminaire, la formulation est la suivante :

$$\overline{q}_w = -\frac{\rho_w T_w \overline{c}_p \overline{\nu} ln(\tilde{T}/T_w)}{yPr} \tag{3.33}$$

Soit

$$\overline{q}_{lnkc} = -\overline{\lambda} \frac{\tilde{T} ln(\tilde{T}/T_w)}{y} \tag{3.34}$$

3.4.3 Loi pour écoulement réactif

Le raisonnement précédent est maintenant repris en incluant le taux de dégagement de chaleur moyen de la flamme pendant l'interaction. La contribution de la flamme lorsque celle-ci n'interagit pas avec la paroi sera négligée. Pour cette raison, le taux de dégagement de chaleur vu dans les éqs. (3.7) et (3.8) sera noté $\tilde{\dot{w}}_T^I$. En effet, il s'agit ici de l'effet à modéliser. Cette hypothèse fait partie des modèles développés au cours de ce projet dans [Truffin et al. 2012]. Pour cela, l'hypothèse de stationnarité sera supposée vérifiée, ce qui se justifie dans le cadre d'une configuration flamme en V. Le jeu d'équation (3.9) et (3.10) s'écrit sous la forme suivante :

$$(\mu + \mu_t)\frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w = \mu_w \left(\frac{d\tilde{u}}{dy}\right)_{y=0} \tag{3.35}$$

$$(\lambda + \lambda_t)\frac{d\tilde{T}}{dy} + \int_0^y \tilde{\dot{\omega}}_T^I dy = q_w = \lambda_w \left(\frac{d\tilde{T}}{dy}\right)_{y=0} \tag{3.36}$$

A noter ici que l'intégrale ne dépend pas de y, hauteur de la cellule, car la zone d'interaction de la flamme doit être plus petite que la hauteur de cellule dans un cas RANS. Sur le même principe que (3.37) et (3.38), les équations suivantes sont obtenues :

$$\left(1 + \mu_t^{++}\right)\frac{d\psi^+}{d\eta^+} = 1 \tag{3.37}$$

$$\left(\frac{1}{Pr} + \frac{\mu_t^{++}}{Pr}\right)\frac{d\theta^+}{d\eta^+} - \frac{1}{\overline{q_w}}\int_0^y \tilde{\dot{\omega}}_T^I dy = 1 \tag{3.38}$$

Ce qui remplace le système (3.28) par le système suivant, avec $\mu^+ + = (\kappa\eta^+)^2 d\psi^+ d\eta^+$:

$$\eta^+ \leq 10.8 \; \psi^+ = \eta^+ \tag{3.39}$$

$$\eta^+ > 10.8 \; \psi^+ = \frac{1}{\kappa} ln(\eta^+) + C_{\psi,0} \tag{3.40}$$

$$\eta^+ \leq \eta_{c,\theta}^+ \; \theta^+ = Pr\eta^+ \left(1 + \frac{1}{\overline{q_w}}\int_0^y \tilde{\dot{\omega}}_T^I dy\right) \tag{3.41}$$

$$\eta^+ > \eta_{c,\theta}^+ \; \theta^+ = \frac{Pr}{\kappa} ln(\eta^+) \left(1 + \frac{1}{\overline{q_w}}\int_0^y \tilde{\dot{\omega}}_T^I dy\right) + C_{\theta,0} \tag{3.42}$$

avec $\eta_{c,\psi}^+$ et $\eta_{c,\theta}^+$ introduits précédemment.

Soit donc le flux LnKC suivant, pour $\eta^+ < \eta^+_{c,\theta}$ ou dans un cas laminaire :

$$\overline{q_w} = -\frac{\overline{\rho_w c_p} u_\tau \tilde{T}_w ln(\tilde{T} T_w)}{\frac{Pr}{\kappa}} - \int_0^y \tilde{\omega}^I_T dy \tag{3.43}$$

Et pour $\eta^+ > \eta^+_{c,\theta}$:

$$\overline{q_w} = -\frac{\overline{\rho}_w \overline{c}_p u_\tau \tilde{T}_w ln(\tilde{T}/T_w) - \frac{Pr_t}{\kappa} ln\eta^+ \int_0^y \tilde{\omega}^I_T dy}{\frac{Pr}{\kappa} ln(\eta^+) + C_\theta} = \overline{q_{w,0}} \tag{3.44}$$

Il est possible de voir ici que le flux est basé sur deux contributions, $\overline{q_w} = \overline{q_{LnKC}} + f(\eta^+)\overline{q_I}$. C'est sur cette base qu'a été posé le modèle développé par l'IFPEn, le **modèle alpha**.

3.4.4 Modèle Alpha

La manière utilisée pour modéliser simplement un flux d'interaction laminaire, q_{lam}, a été vue précédemment (équation 3.3).
Dans des cas turbulents, K. Truffin et al. [Truffin et al. 2012] proposent une approche plus adaptée. Le problème majeur est que le profil du taux de dégagement de chaleur dans la couche limite n'est pas connu, car ce dernier n'est pas constant. Dans le contexte RANS, l'objectif est de modéliser la contribution de la flamme en moyenne (d'un point de vue statistique), et en se basant sur les quantités moyennes évaluées à l'échelle de la cellule pariétale.
Pour commencer, le modèle alpha propose d'exprimer le flux de chaleur moyen comme la somme de deux contributions : le flux lié à la différence de température entre le fluide et la paroi (q_{NR}) et le flux lié à la présence de la flamme lors de l'interaction (q_I).

$$\overline{q}_w = \overline{q}_{alpha} = \overline{q}_{loi} + \overline{q}_I \tag{3.45}$$

Le modèle développé par IFPen reprend ainsi l'observation que le flux est basé sur la somme d'une loi de paroi et d'un flux d'interaction. L'idée est ici de modéliser la seconde composante, à savoir q_I.

La figure 3.11 illustre la structure de la flamme dans la cellule de calcul. La surface totale de l'interface est définie par :

$$A_{tot} = \int_V \overline{\Sigma} dV = \int_V \Xi \left|\nabla \overline{c}\right| dV = \Xi A_{mean} \tag{3.46}$$

avec Ξ le plissement turbulent de la flamme et A_{mean} la surface de flamme moyenne délimitant

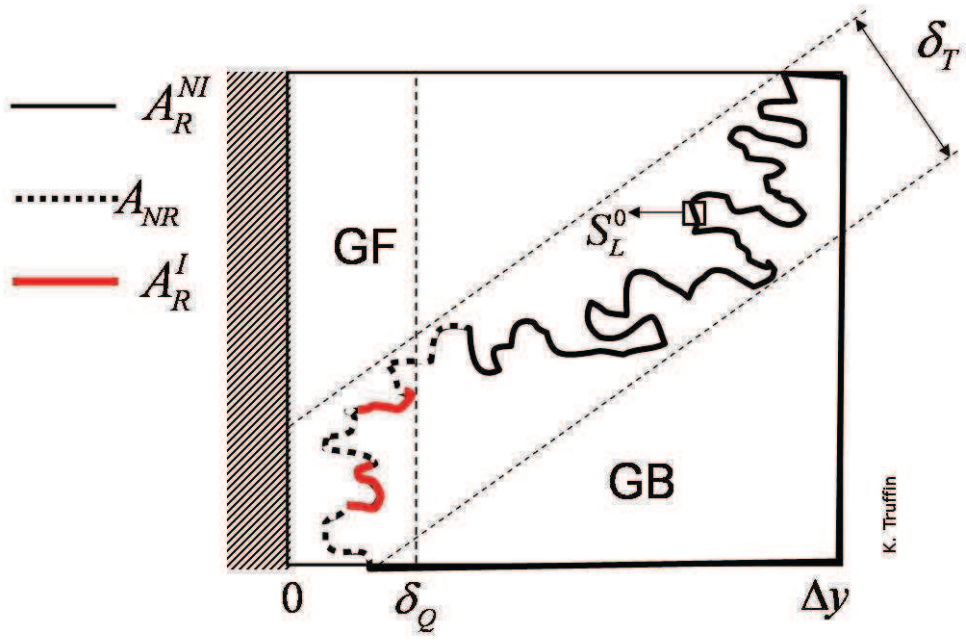


FIGURE 3.11 – Surface de flamme réactive interagissant avec la paroi : La surface de flamme totale A_{tot} est la somme de 3 composantes : A_R^I la surface de flamme interagissant avec la paroi, A_R^{NI} la surface de flamme non interagissant, A_{NR} la surface non réactive après coincement. D'après [Truffin et al. 2012]

le volume des gaz frais et des gaz brûlés. La surface de flamme correspondant à la surface totale d'interface de flamme par unité de volume V est donnée par :

$$< \overline{\Sigma} >= \frac{A_{tot}}{V} = \frac{A_R^{NI} + A_R^I + A_Q}{V} \tag{3.47}$$

avec V le volume de la cellule de calcul. A_R^{NI} et A_R^I sont respectivement la surface de flamme réactive qui n'interagit pas / qui interagit avec la paroi et A_Q est la surface non réactive.

Par la suite, bien que la densité de surface ne soit pas répartie de façon homogène dans la cellule, la notation $\overline{\Sigma}$ sera utilisée à la place de $< \overline{\Sigma} >$.

En se plaçant dans le repère moyen de la flamme (fig 3.12), l'énergie ou le flux thermique qui traverse la face d'aire A_{mean} pendant l'interaction s'exprime par :

$$F_I = \overline{q_I} A_{mean} \tag{3.48}$$

La surface totale de flamme interagissant avec le mur est A_R^I et l'énergie totale liée à l'interaction de cette surface de flamme avec la paroi vaut :

$$F_I = \int_{A_R^I} \overline{q_{lam}} \vec{n} \bullet d\vec{S} = A_R^I < \overline{q_{lam}} >_{A_R^I} \tag{3.49}$$

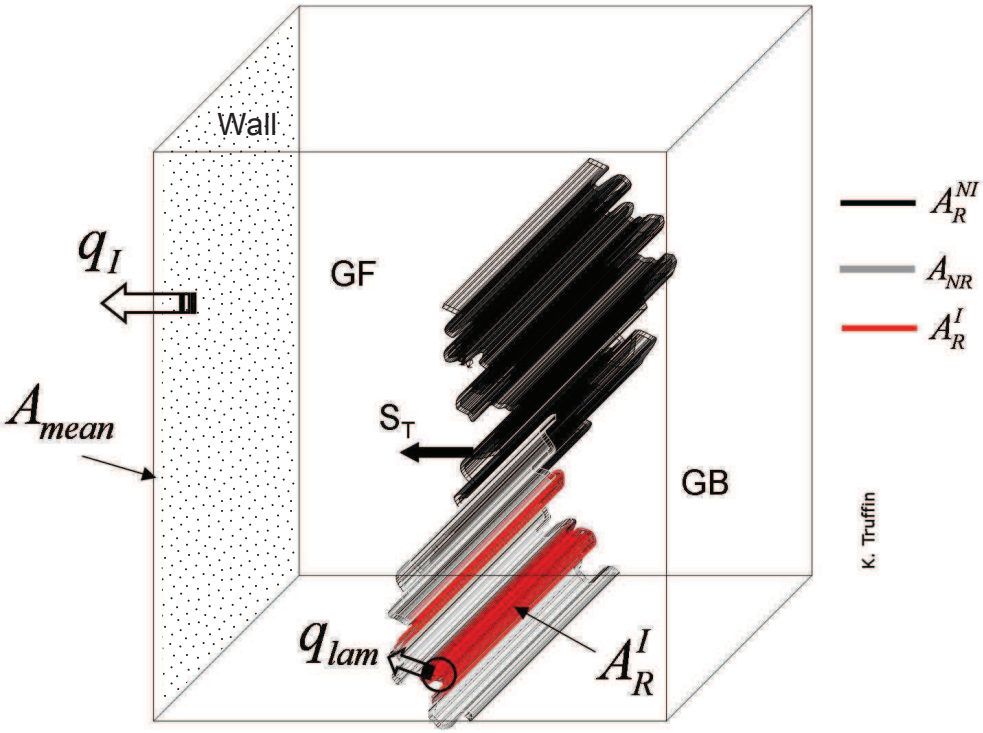


FIGURE 3.12 – Surface de flamme réactive interagissant avec la paroi. D'après [Truffin et al. 2012]

Soit finalement :

$$\overline{q_I} = \frac{A_R^I}{A_{mean}} < \overline{q_{lam}} >_{A_R^I} \tag{3.50}$$

$< \overline{q_{lam}} >_{A_R^I}$ est la moyenne temporelle et spatiale conditionnée à la surface de flamme réactive du flux laminaire maximum pendant l'interaction. Sa modélisation nécessitera une analyse DNS à la fois temporelle et spatiale sur la configuration de la flamme en V turbulente. Pour évaluer $\overline{q_I}$, l'idée consistera à chercher à modéliser le rapport des surfaces dans (3.50). Ce dernier peut se décomposer comme suit :

$$\frac{A_R^I}{A_{mean}} = \frac{A_R^I}{A_R}\frac{A_R}{A_{tot}}\frac{A_{tot}}{A_{mean}} = \alpha_I \, Q_R \, \Xi \tag{3.51}$$

Dans le cas des calculs DNS, il a été décidé de calculer et définir ces valeurs de la façon suivante :

– Fraction de flamme interagissant α :

$$\alpha = \frac{\sum Points\ reactifs\ interagissant}{\sum Points\ reactifs} \tag{3.52}$$

Est dit réactif un point dont le taux de réaction est supérieur à un seuil $\dot{\omega}_{min}$.

Est dit interagissant un point réactif dont le flux correspondant à la paroi est supérieur à un seuil $q_{w_{min}}$.

Une autre définition similaire consiste à dire interagissant un point dont le paramètre de perte d'enthalpie L_H est positif à la paroi, avec [Bruneaux et al. 1996] :

$$L_H = \frac{H_F^0 - H}{H_F^0 - H_P^0} \tag{3.53}$$

Equivalent, dans le cas de chimies simples avec fraction de combustible limitant à :

$$L_H = 1 - (Y + \theta) = 1 - \left(\frac{Y_F}{Y_F^u} + \frac{T - T^u}{T^b - T^u} \right) \tag{3.54}$$

– Proportion de surface de flamme réactive Q :

$$Q = \frac{\sum Points\ reactifs}{\sum Points\ possedant\ un\ gradient\ de\ c} \tag{3.55}$$

Avec c la variable d'avancement : $c = 1 - \frac{Y_F}{Y_F^u}$

– Plissement Ξ :

$$\Xi = \frac{\overline{|\Sigma|}}{|\nabla \overline{c}|} = \frac{\overline{\left| \nabla \left(1 - \frac{Y_F}{Y_F^u} \right) \right|}}{\left| \nabla \left(1 - \frac{\overline{Y_F}}{Y_F^u} \right) \right|} \tag{3.56}$$

Avec ρ^b constante. Dans les approches de type CFM Ezekoye et al. 1992], où le front de flamme est considéré comme une interface infiniment mince, il est possible d'écrire : $\overline{c} = \frac{\overline{\rho}}{\rho^b} \widetilde{c}$, ce qui donne la formulation du plissement utilisée dans le code de calcul RANS :

$$\Xi = \frac{\overline{|\Sigma|}}{|\nabla \overline{c}|} = \frac{\overline{\left| \nabla \left(1 - \frac{Y_F}{Y_F^u} \right) \right|}}{\left| \nabla \frac{\overline{\rho}}{\rho^b} \widetilde{c} \right|} = \frac{\overline{\left| \nabla \left(1 - \frac{Y_F}{Y_F^u} \right) \right|}}{\left| \nabla \frac{\overline{\rho}}{\rho^b} \frac{\overline{\rho c}}{\overline{\rho}} \right|} = \frac{\overline{\left| \nabla \left(1 - \frac{Y_F}{Y_F^u} \right) \right|}}{\left| \nabla \frac{\overline{\rho \left(1 - \frac{Y_F}{Y_F^u} \right)}}{\overline{\rho^b}} \right|} \tag{3.57}$$

Ferguson et Keck [Ferguson et al. 1977] considèrent la flamme laminaire comme une zone de fort gradient de température dont l'épaisseur de réaction est négligeable. Ils relient la perte d'énergie de la flamme au flux conductif dans la zone de quenching.

Il est logique de poser pour une flamme laminaire :

$$\int_0^y \tilde{\omega}_T^I dy = q_{lam} \tag{3.58}$$

Dans un cas turbulent, cela se traduit par :

$$\int_0^y \tilde{\omega}_T^I dy = \alpha_I Q_R \Xi q_{lam} \tag{3.59}$$

Ce qui donne deux formulations possibles pour le flux à la paroi :
– en supposant la somme des deux contributions (loi de paroi et interaction) :

$$\overline{q_I} = \frac{A_R^I}{A_{mean}} < \overline{q_{lam}} >_{A_R^I} \longrightarrow \overline{q_w} = \overline{q_{LnKC}} + \overline{q_I} = \overline{q_{LnKC}} + \alpha_I Q_R \Xi q_{lam} = \overline{q_{w,modele1}} \tag{3.60}$$

– ou à partir de la loi de paroi réactive (3.44) :

$$\overline{q_w} = -\frac{\overline{\rho}_w \overline{c}_p u_\tau \tilde{T}_w ln(\tilde{T}/T_w) - \frac{Pr_t}{\kappa} ln(\eta^+) \alpha_I Q_R \Xi q_{lam})}{\frac{Pr}{\kappa} ln\eta^+ + C_\theta} = \overline{q_{w,modele2}} \tag{3.61}$$

L'objectif est de valider et si besoin d'améliorer le modèle de flux lié à l'interaction d'une part, et la prise en compte de la flamme sur la loi de paroi d'autre part. Il est important de retenir ici les dénominations des 2 modèles, (modèle 1, modèle 2), par la suite il sera toujours fait référence à ces modèles de cette façon.

3.4.5 Passage DNS à RANS

L'un des plus grands défis de ce projet réside dans le passage de données de l'échelle spatiale et temporelle DNS à l'échelle RANS.
La DNS tente une résolution complète des équations de Navier Stokes instationnaires, se traduisant par des pas de temps et des pas d'espace très petits. A contrario, l'approche RANS simule les équations de NS moyennées en temps et en espace, sur des dimensions industrielles. Le passage de données instantanées à des valeurs moyennes temporelles n'est pas en soi une difficulté (car l'hypothèse de stationnarité est valable dans le cas de cette configuration, il suffit d'échantillonner le champ instantané régulièrement, puis de moyenner ces valeurs), mais le passage de données de l'échelle spatiale DNS à l'échelle spatiale RANS dans le cas de calculs multiprocesseurs représente un tout autre défit.
En effet, selon les modalités du projet INTERMAC, les données doivent être fournies sous la forme de "boîtes" de taille RANS, boîtes regroupant des paquets de points moyennés ensemble afin de fournir un signal instationnaire moyenné spatialement. De même, certaines données 1D/2D (pour des champs respectivement 2D/3D) doivent être fournies sous forme de "segments", valeurs projetés sur le plan (x, z) (fig 3.13).

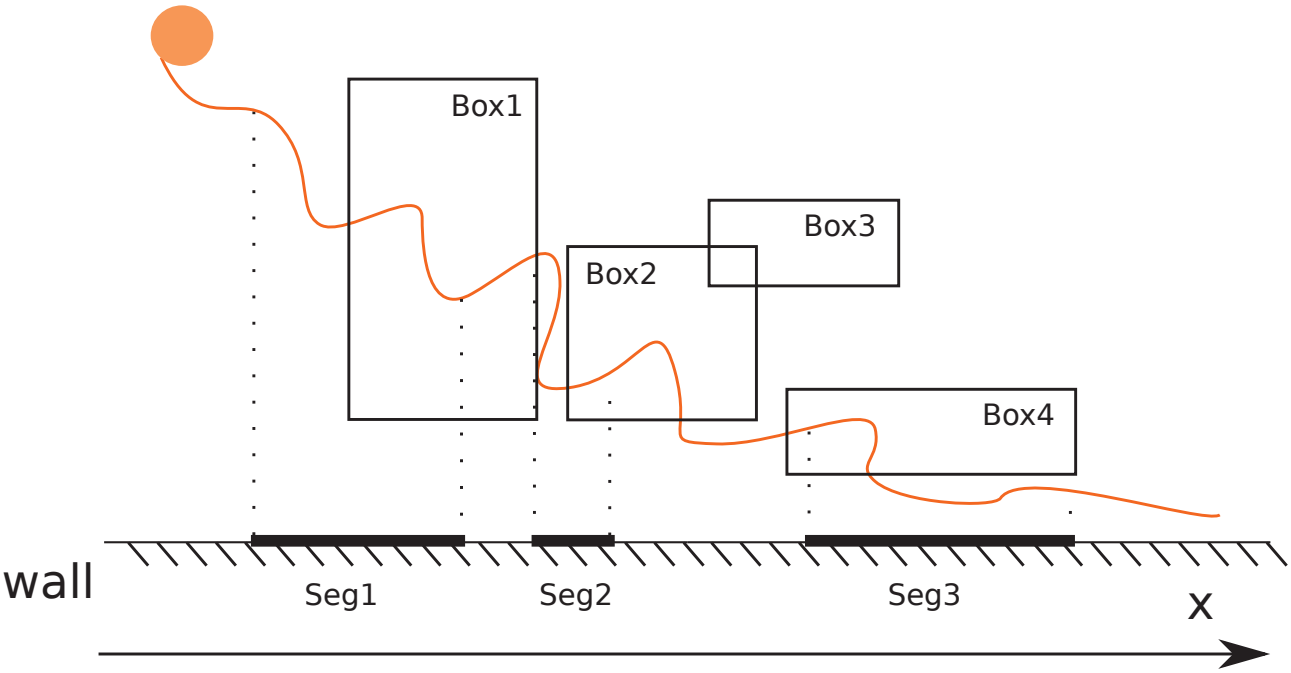


FIGURE 3.13 – Principe d'utilisation des boîtes (Box) et des segments (Seg)

Considérons un champ de vitesse U et un flux pariétal $Flux$. Toutes les N itérations, chaque boîte/segment calcule la moyenne de la valeur des points au sein de son domaine, soit :

$$(1/nbpoints_{boite}) * \sum_{k=1}^{nbpoints_{boite}} U \quad ou \quad (1/nbpoints_{segment}) * \sum_{k=1}^{nbpoints_{segment}} Flux \tag{3.62}$$

puis écrit la valeur dans un fichier, ainsi que le temps t correspondant à cet enregistrement. (En réalité, le code stocke les valeurs dans un buffer afin d'éviter des écritures à chaque itération, l'écriture en fichier puis la réinitialisation du buffer n'ayant lieu que lors des phases de sauvegardes).

La difficulté vient du fait que pour être simple à l'usage, le système ne doit avoir besoin en entrée que d'un fichier texte comportant le nombre de boîtes/segments ainsi que les positions de ces boîtes/segments. Or, du fait de la partition MPI, certaines boîtes sont réparties sur plusieurs processeurs. De même, le front de flamme projeté (ou toute autre valeur sur segment) peut se trouver réparti sur plusieurs processeurs. Il a donc été nécessaire de paralléliser tous ces calculs, à l'aide notamment de communicateurs spécifiques à chaque boîte ou segment. A noter que la routine de calcul des champs moyennés ainsi que des boîtes/segments fait tout de même plus de 2500 lignes à elle seule et a représenté un travail conséquent. Elle met par ailleurs à mal les super-calculateurs avec la création et l'utilisation de milliers de communicateurs (4700 environs

pour le cas 3D), l'allocation d'importantes quantités de mémoire, ainsi que l'utilisation de 7 niveaux de boucles imbriquées.
Dans le cadre de notre étude, nous avons enregistrer les données analysées suivantes :

- Champs 2D/3D complets à instants donnés
- Champs 2D/3D complets moyennés en temps
- Plans 1D/2D (valeurs à la paroi ou projetés) complets moyennés en temps
- boîtes 2D/3D à instants donnés → moyenne temporelle en post pro
- Segments 1D/2D à instants donnés → moyenne temporelle en post pro

Au final, le code calcul les champs/valeurs suivants :

- $\overline{u}, \overline{v}, \overline{w}$ les moyennes de Reynolds (temporelles) des composantes de vitesse
- u', v', w' les fluctuations de vitesse $u' = u - \overline{u}$
- $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ les moyennes de Favre des composantes de vitesse
- $\overline{u'u'}, \overline{'u'v}, \overline{u'w'}, \overline{v'v'}, \overline{v'w'}, \overline{w'w'}$ les corrélations des fluctuations de vitesses
- k l'énergie cinétique turbulente, $k = \frac{1}{2}\left(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}\right)$
- T et $\tilde{T}$ la température et sa moyenne de Favre
- ρ la masse volumique
- Y_F la fraction massique de fuel
- C_p la chaleur massique à pression constante
- $\dot{\omega_F}$ le taux de réaction du combustible
- ν la viscosité cinématique
- λ la conductivité thermique
- C et $\tilde{C}$ la variable d'avancement $c = 1 - \frac{Y_F}{Y_F^u}$ et sa moyenne de Favre
- Σ et $\tilde{\Sigma}$ la densité de surface de flamme et sa moyenne de Favre
- q_w le flux de chaleur pariétal $q_w = -\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial x_n}\right|_{wall}$
- τ_w le frottement pariétal et u_τ la vitesse de frottement pariétal

$$\tau_w = \mu \left[\left.\frac{\partial u}{\partial x_n}\right|_{wall} + \left.\frac{\partial w}{\partial x_n}\right|_{wall} \right] \tag{3.63}$$

$$u_\tau = \left(\frac{\tau_w}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.64}$$

- y^+ la distance au mur adimensionnée $y^+ = y\frac{u_\tau}{\nu_w}$

– L_H le paramètre de perte d'enthalpie [Bruneau et al. 1996]

$$L_H = \frac{H_u^0 - H}{H_u^0 - H_b^0} \tag{3.65}$$

Avec $H = \sum H_i Y_i$, H_u^0 l'enthalpie des gaz frais à T_0 et H_b^0 l'enthalpie des gaz brûlés à T_0. A noter que dans le cas d'une chimie simplifiée (à une étape), ce paramètre peut se mettre sous la forme :

$$L_H = 1 - (Y + \theta) = 1 - \left(\frac{Y_u}{Y_u^0} + \frac{T - T_u}{T_{ad} - T_u}\right) \tag{3.66}$$

– $\Sigma_R = -\dot{\omega_F}/\rho^u Y^b S_L^0$
– α la fraction de flamme interagissante
– Q la fraction de flamme réactive
– Ξ le plissement
– Ψ^+ (cf 3.20)
– θ^+ (cf 3.20)
– η^+ (cf 3.20)
– θ l'angle du front de flamme par rapport à la paroi
– δ la distance du front de flamme à la paroi
– $\widetilde{K_m} =< \nabla.\tilde{u} - \overline{nn} : \nabla\tilde{u} >_s$ et $\widetilde{K_T} =< \nabla.u'' - \overline{nn} : \nabla u'' >_s$ les taux moyens et turbulents d'étirement à la surface de flamme provoqués par l'écoulement moyen et l'écoulement turbulent respectivement [Poinsot et Veynante 2011].
– n_1, n_2, n_3 les composantes du vecteur formé par le gradient de C au niveau du front de flamme

Tout ceci a été codé au cours de la thèse au sein de la routine d'analyse et vérifié puis validé.

3.5 Cas 2D laminaire :

Une première étude 2D laminaire a été réalisée, à l'aide d'un profil d'entrée constant, laissant une couche limite se développer dans le canal et interagir avec la flamme. L'objectif de cette étude a été de pouvoir valider rapidement les grandeurs calculées, les simulations turbulentes à plus haut Reynolds nécessitant des temps de calculs nettement plus longs.

3.5.1 Grandeurs d'écoulement transverse

Avant d'utiliser les modèles de loi de paroi et d'interaction, il est nécessaire de vérifier que le calcul de η^+ est conforme à l'hypothèse posée précédemment. Pour cela, il est possible de tracer (fig 3.14) son profil en 3 positions différentes : avant, pendant et après l'interaction.

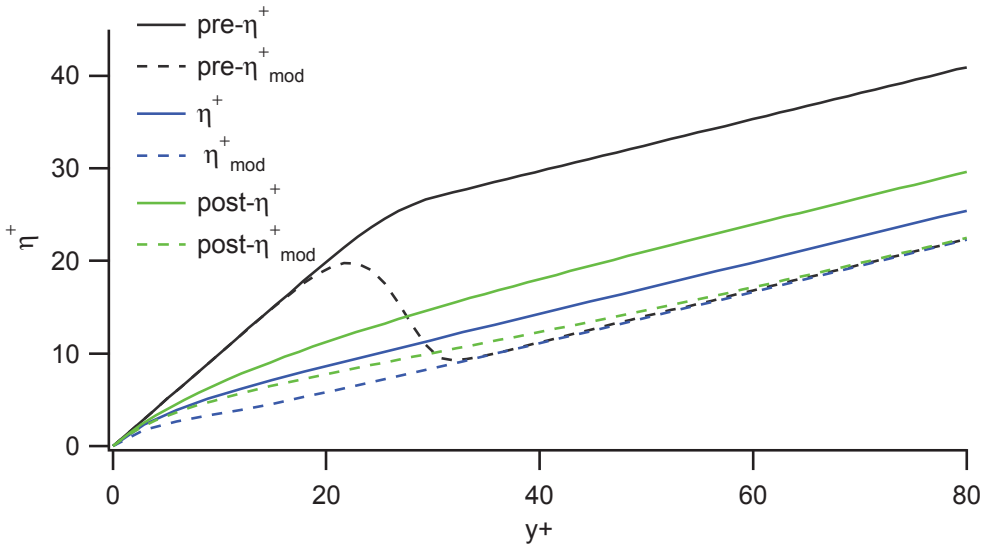


FIGURE 3.14 – Profils d'η^+ intégré et modélisé avant (pre), durant (-), et après (post) l'interaction

Il est clair que l'hypothèse s'avère fausse lorsque le champ n'est pas homogène en température, et donc en viscosité. En effet, avant l'interaction (fig 3.14), il est possible d'observer deux zones bien distinctes : la partie gaz frais entre le mur et la flamme (zone où l'estimation est valable), et la partie gaz brûlés (zone où sont obtenues deux courbes distinctes). La viscosité variant fortement à travers le front de flamme, l'hypothèse que η^+ n'est plus une fonction monotone de y^+ n'est plus vérifiée. Cette variation s'observe aussi à plus faible échelle après l'interaction (fig 3.14), et peut fortement impacter la forme du flux de la loi de paroi LnKC.
Cependant, lors de l'interaction, cette hypothèse ne doit pas poser de problèmes majeurs. Il sera possible de voir par la suite que son impact sur le flux final est de toute façon négligeable, et que cette hypothèse peut être utilisée en pratique pour les calculs.

3.5.2 Grandeurs d'interaction longitudinale

Distance d'interaction, Peclet :
Il est intéressant, afin de se donner une idée du profil du front de flamme, de tracer la distance du maximum du taux de réaction par rapport à la paroi, ainsi que le nombre de Peclet diffusif correspondant (fig 3.16). Il apparaît une forme classique de flamme en V, se propageant du

centre du canal vers les parois pour y interagir. La distance d'interaction est ici d'environ $80\mu m$ et le Pe correspondant de 2.5.
Sur la figure 3.15 apparait une distance d'accrochage du front de flamme derrière le point chaud. Cette distance correspond au temps d'allumage du mélange convecté, le point chaud imposant une gaussienne et non un créneau.

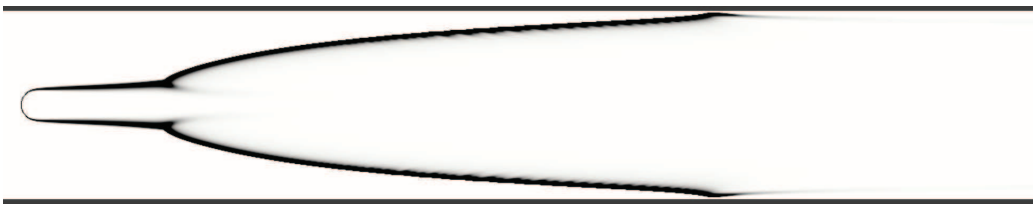


FIGURE 3.15 – Profil 2D du front de flamme laminaire, Taux de réaction

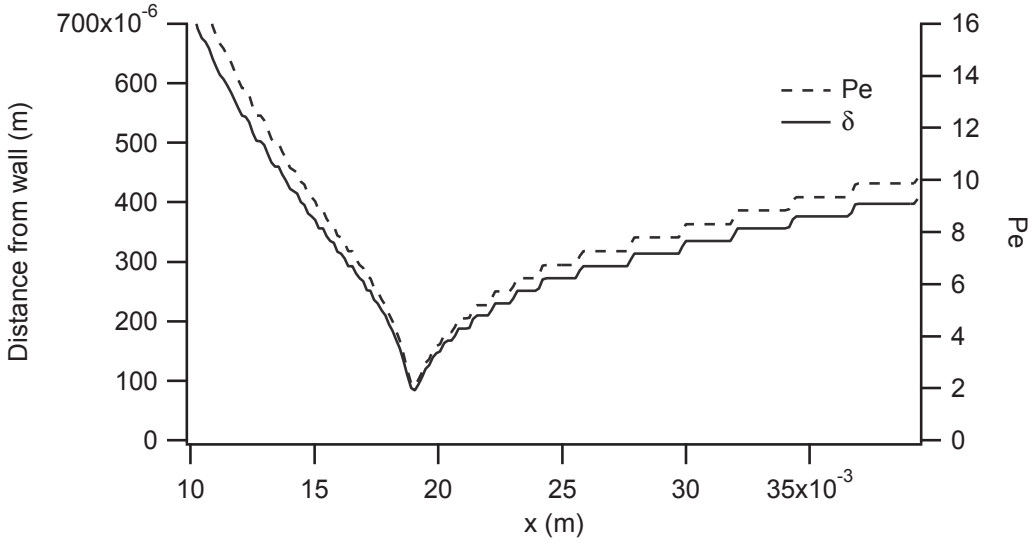


FIGURE 3.16 – Distance du front de flamme à la paroi et Peclet correspondant

Angle du front de flamme :
Le calcul de l'angle moyen du front de flamme (fig 3.17) est fortement perturbé par la méthode d'interpolation, trop peu lisse par rapport au maillage DNS relativement fin. En effet, ici seuls sont pris en compte les deux angles voisins de l'angle du point à calculer. Ainsi, si les deux angles voisins sont nuls, l'angle final est lui même nul, même si le profil du taux de réaction est courbé en ce point. Les résultats sont donc faussés, surtout dans le cas d'une interaction laminaire à forte vitesse (angle proche de 0).

Des méthodes plus performantes ont été implémentées par la suite. Une méthode par spline cubique [Daget 2006] a premièrement été codé, mais une forme plus simple a finalement été retenue et a été utilisée pour le reste des calculs : l'estimation de l'angle par utilisation du gradient de la variable d'avancement C.
Il est à remarquer, malgré le bruit, que la tendance de la variation a été captée : une valeur positive de l'angle (front descendant), puis après interaction une valeur négative (front montant).

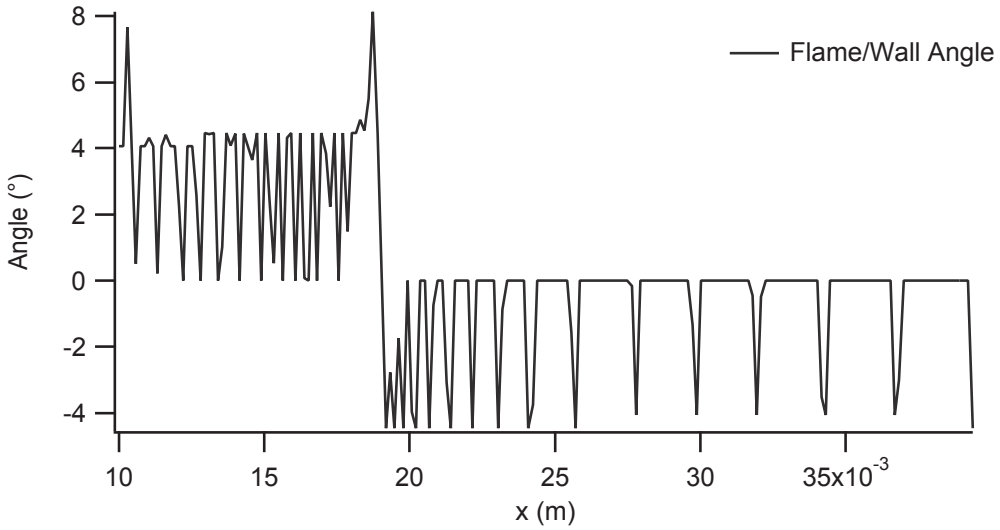


FIGURE 3.17 – Angle du front de flamme par rapport à la paroi (en degrés)

Flux thermique à la paroi :
De la même manière qu'a été calculé le flux DNS pour le cas 1D, il est possible de tracer le flux moyen donné par la configuration flamme en V laminaire (fig 3.18). Il est intéressant de noter l'influence de l'angle dans le cas présent, puisque le flux maximum est ici inférieur d'environ 8-10% au cas 1D HOQ, malgré un angle d'impact relativement faible (environ 10 degrés).

Vitesses d'écoulement :
Concernant les vitesses d'écoulement (fig 3.19), il est possible de remarquer un champ convecté sur x ($U_1 >> U_2$) non établi ($U_2 > 0$) en amont du front de flamme (Le cas test laminaire possède une injection sans profil spécifique, la couche limite se développe donc dès le début du domaine). Puis l'écoulement est repoussé vers la paroi par le front de flamme, provoquant une hausse du taux de frottement pariétal τ_w et de la vitesse pariétale u_τ. Ce phénomène n'est pas anodin sur la distance flamme/paroi (la flamme s'aplanit sur la zone d'interaction), et son impact sera discuté par la suite, dans le cas de l'écoulement turbulent. L'écoulement passe ensuite totalement à travers le front de flamme est se relaminarise tout en accélérant par

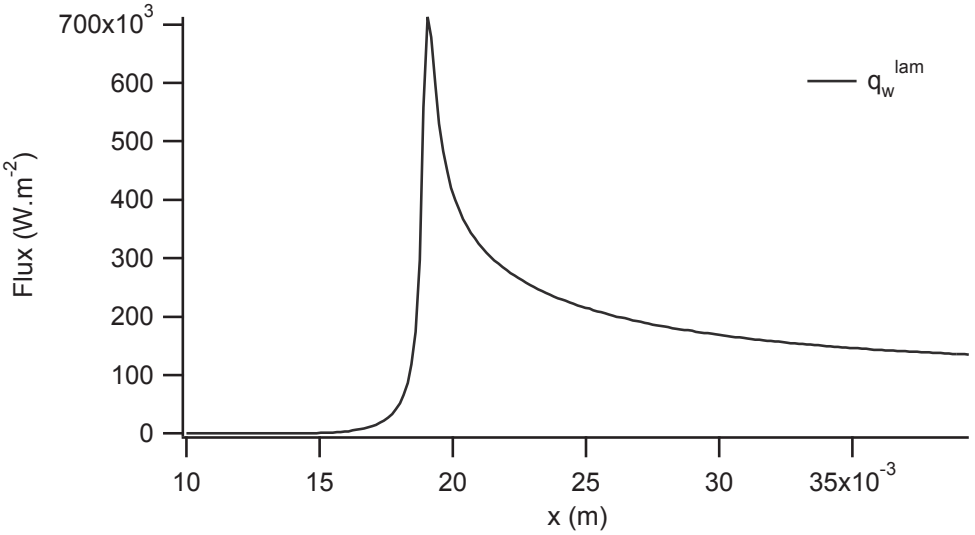


FIGURE 3.18 – Flux de chaleur à la paroi, pic d'interaction

dilatation des gaz brûlés.

A noter la présence d'un effet escalier, du au manque de boîtes de capture dans certaines zones. Ce problème a été résolu par la suite avec l'ajout de plus de boîtes.

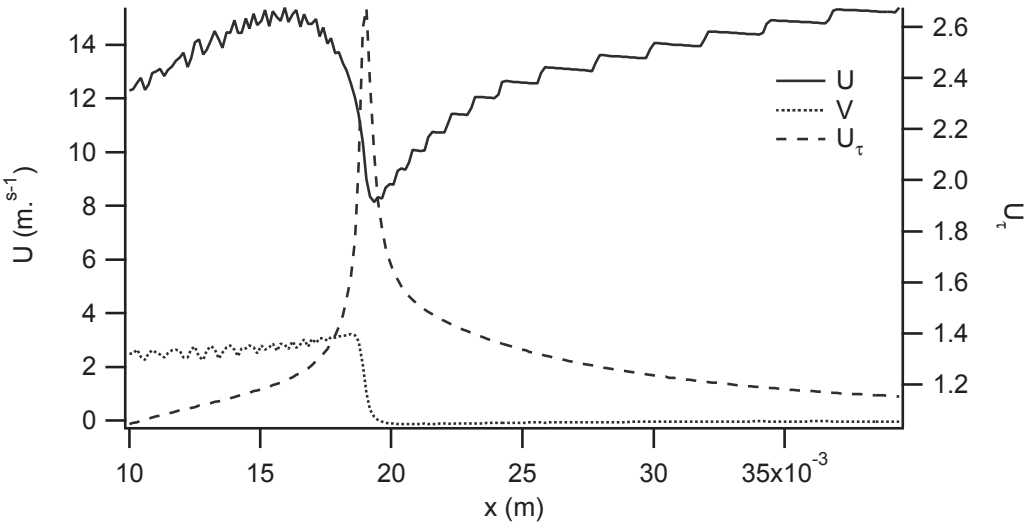


FIGURE 3.19 – Profils de vitesse longitudinaux, et profil de vitesse pariétale.

Taux de réaction :

Le taux de réaction représente quant à lui très bien le phénomène d'extinction après la zone d'interaction, puisqu'il s'effondre totalement au contact du mur (fig 3.20). Le cas laminaire est assez extrême, et dans le cas turbulent cette transition se fera plus en douceur.

Le taux de réaction avant interaction semble varier fortement. Cet aspect est dû à la position

du **maximum** du taux de réaction par rapport à la maille la plus proche. La valeur correcte du taux de réaction est ici le minimum, soit environ $-120kg.m^{-3}.s^{-1}$.

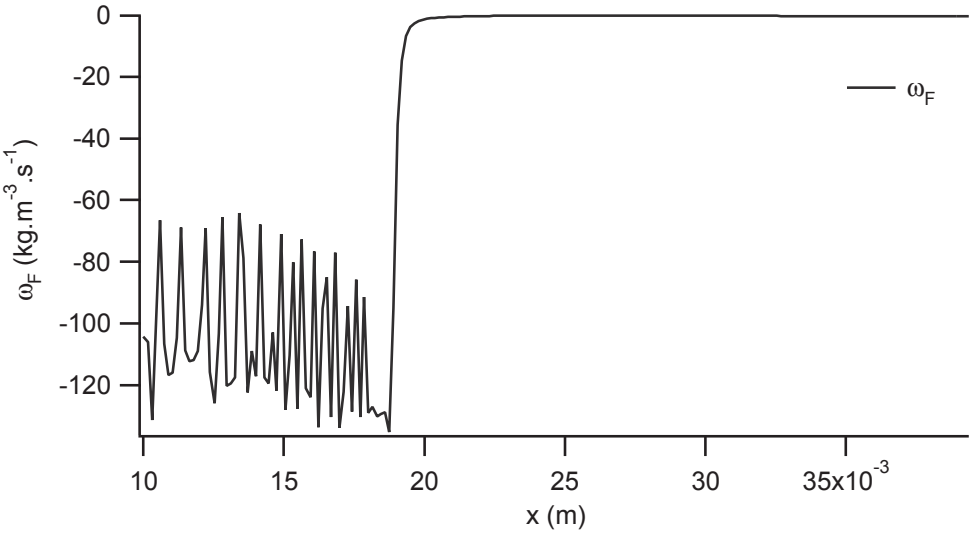


FIGURE 3.20 – Profil longitudinal du taux de réaction, mise en évidence de l'extinction

Flux LnKC laminaire :

Le profil du flux q_{lnkc} est en fait ici entièrement lié au profil de $\tilde{T}$ (3.44), comme observable sur la figure 3.21. Il est intéressant d'observer que la loi de paroi donne un pic de flux au moment de l'interaction, phénomène attendu. Cependant, le cumul des pics d'interaction de cette loi et du modèle alpha surestime un peu le flux total d'interaction laminaire (observable par la suite).

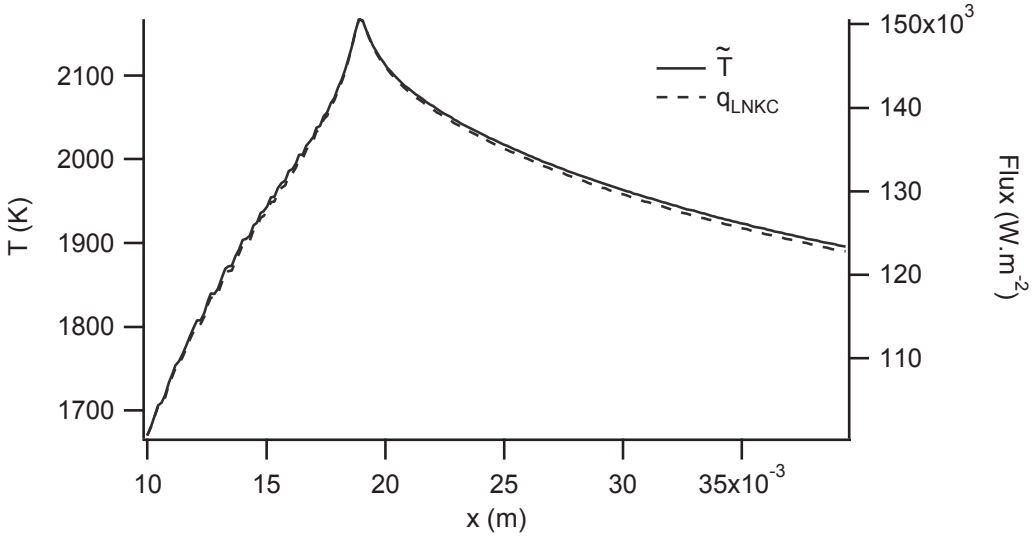


FIGURE 3.21 – Profil longitudinal du taux de réaction, mise en évidence de l'extinction

Flux d'interaction :

Le créneau de α représente la zone d'interaction (fig 3.22) ici d'environ $4.5 \times 10^{-3} m$. L'épaisseur réactive de flamme diminue quant à elle tout au long de l'interaction, permettant de retrouver le "Pic" de flux observé lors des calculs DNS.

Le plissement étant égal à 1 dans le cas d'une flamme laminaire, son étude n'est pas menée ici.

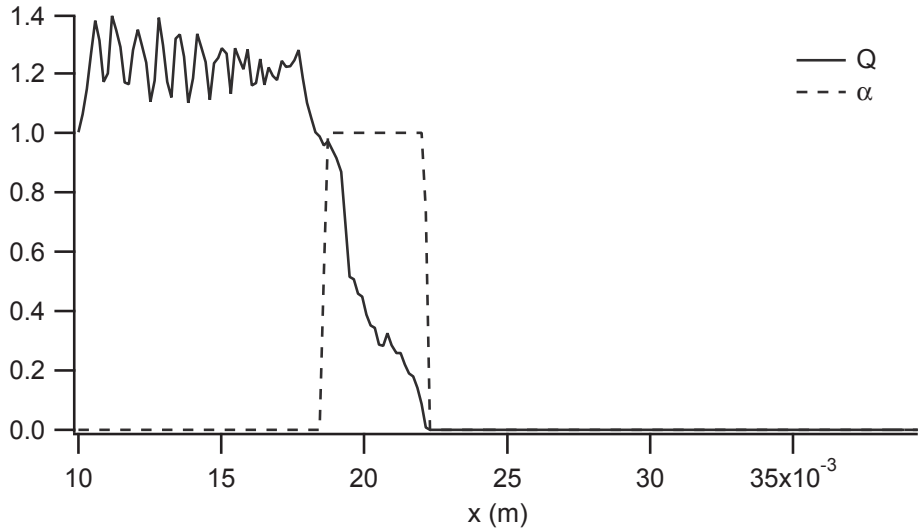


FIGURE 3.22 – Profil longitudinal des paramètres du modèle alpha

Flux total :

Il est possible d'observer deux divergences du modèle 1 par rapport au flux DNS (fig 3.23).

En premier lieu, la loi de paroi sous-estime le flux avant interaction à cause notamment de la loi de paroi. Ensuite, le flux d'interaction est légèrement surestimé, même si l'on retrouve la forme principale donnée par le flux exact. Ces aspects sont dus à l'utilisation de modèles hors de leur zone de validité.

En effet, le modèle LnKC est initialement prévu pour être utilisé en régime turbulent, la version laminaire n'étant qu'un dérivé de la version turbulente, et le modèle d'interaction est pour sa part entièrement dédié aux cas turbulents. Il sera visible par la suite que leur utilisation en régime turbulent est nettement plus adaptée.

3.6 Cas 2D turbulent

Cette étude 2D a été réalisée dans des conditions similaires au cas final 3D. L'objectif a été ici de tester le modèle dans un cas pseudo-réel de simulation en écoulement turbulent. Ce

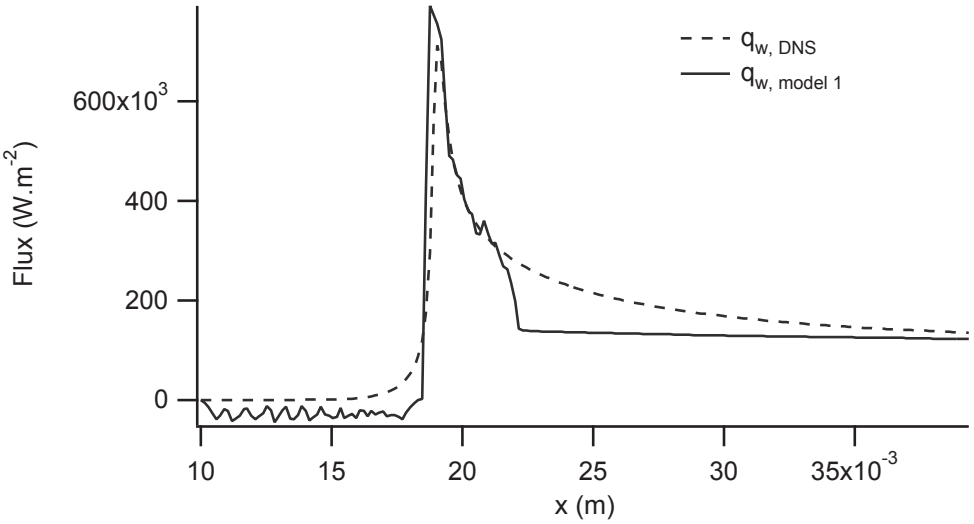


FIGURE 3.23 – Flux longitudinal avec prise en compte du modèle complet

premier calcul a permis de cibler les lacunes des différentes approches utilisées ainsi que de grandement améliorer le code de la routine d'analyse et des routines de post-processing. Suite à la validation du modèle 1 dans cette configuration, un cas 3D a été simulé, et sera discuté par la suite.

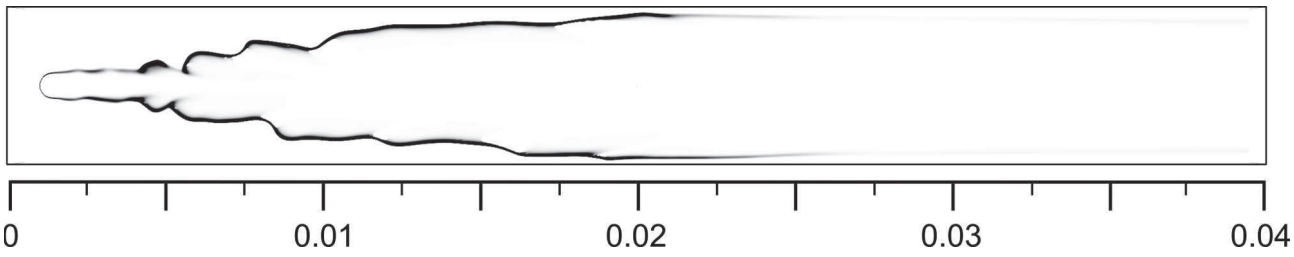


FIGURE 3.24 – Profil 2D du taux de réaction instantané, échelle en m

3.6.1 Vérifications des hypothèses

Profil d'injection :

La première analyse a été de vérifier la conformité du profil en entrée, à savoir l'allure de la couche limite turbulente. En effet, contrairement au cas 3D turbulent, le cas 2D a utilisé une injection de turbulente dite synthétique, à l'aide de la méthode de Kraichnan Celik [Celik et al. 2001]. L'utilisation d'une telle méthode est largement suffisante pour une simulation 2D, la turbulence n'étant de toute façon pas réaliste sans la 3^{ieme} dimension. Au final, il ressort en entrée de domaine un profil respectant les profils de référence d'une couche limite turbulente (fig 3.25) données par les équations 3.18 et 3.19. Il est cependant intéressant de noter une baisse

de la vitesse centrale due à la présence du point chaud proche de l'entrée, agissant comme un obstacle dans l'écoulement.

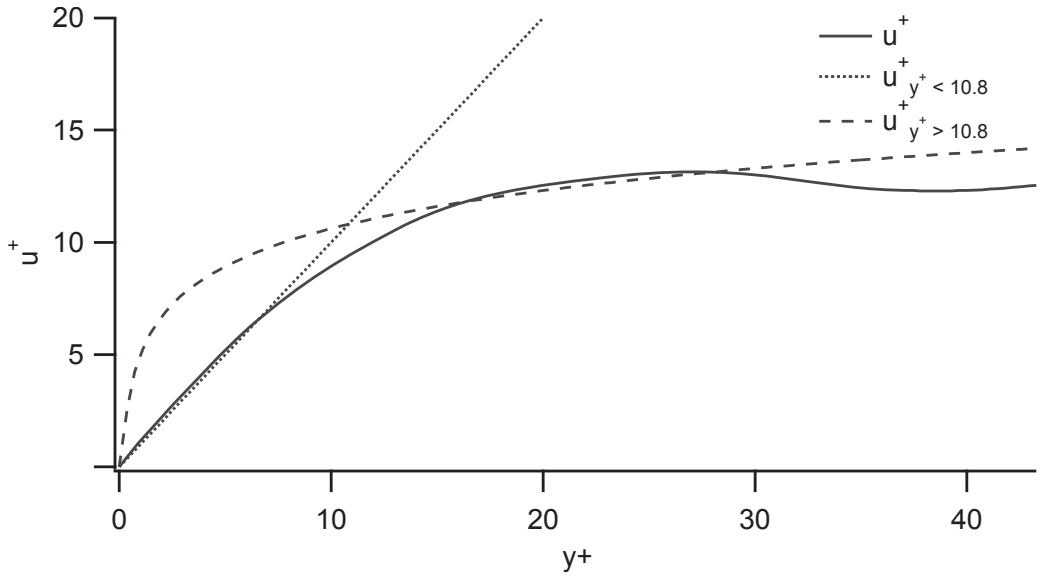


FIGURE 3.25 – Profils transverses de la couche limite turbulente (moyenne temporelle peu convergée) ainsi que des modèles usuels (équations 3.18 et 3.19)

Hypothèse sur η^+ :

Il est important de présenter dès maintenant l'impact de la formulation de η^+ sur le flux LnKC turbulent. En effet, malgré l'écart sur les résultats observés précédemment, l'impact sur l'évolution du flux LnKC est faible (fig 3.26), notamment dans la zone d'utilisation du modèle, à savoir durant la phase d'interaction.

Par la suite, il sera ainsi considéré que la valeur de η^+ utilisée sera celle simplifiée, à savoir $\eta^+ = \frac{\nu_w}{\nu} y^+$.

3.6.2 Grandeurs d'interaction longitudinale

Distance flamme paroi, Peclet :

En traçant le profil moyen de la distance du front de flamme à la paroi ainsi que le Pe, il en ressort une forme classique de flamme en V (fig 3.27) à l'instar du cas 2D laminaire. A noter que le $Pe = 5$ est ici environ 2.5 fois plus grand que dans le cas laminaire. (Forme plus étalée de l'interaction)

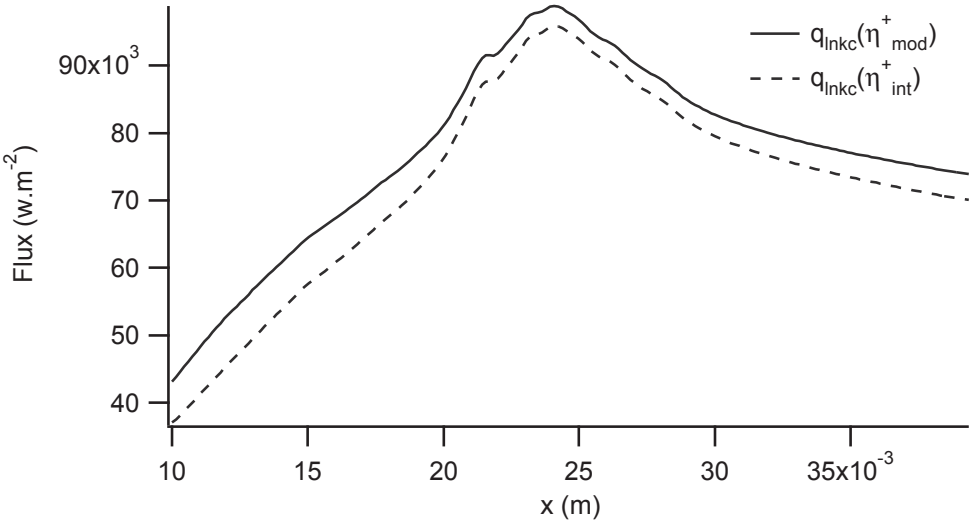


FIGURE 3.26 – Impact final de l'hypothèse posée sur η^+ (équation 3.23)

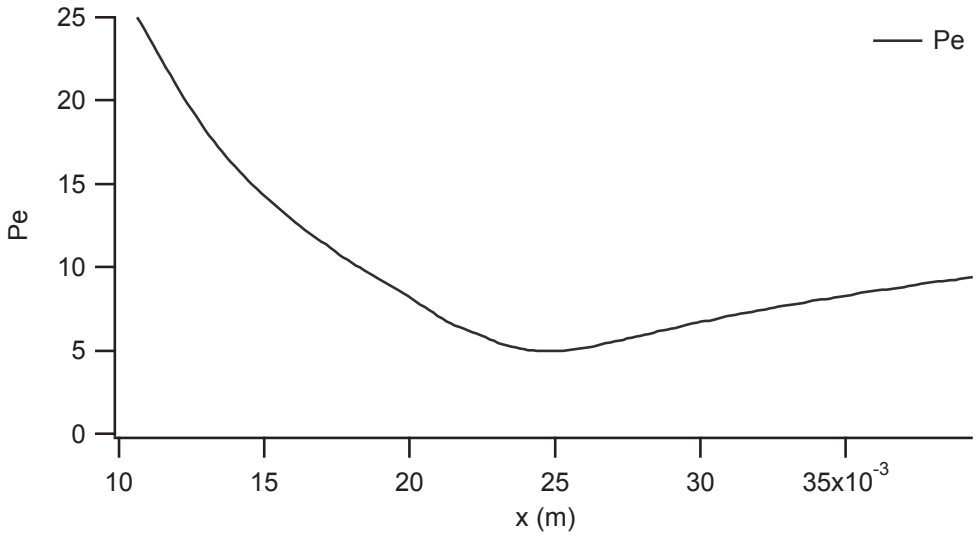


FIGURE 3.27 – Évolution longitudinale du nombre de Peclet pour le cas 2D turbulent

Angle du front de flamme :

L'angle formé entre le front de flamme moyen et la paroi est tout à fait cohérent avec le profil observé. La nouvelle méthode de calcul consistant à utiliser le gradient de c fait par ailleurs ses preuves, le profil étant nettement plus lisible que pour les versions précédentes. La valeur de l'angle moyen est une donnée d'entrée nécessaire pour calculer le paramètre alpha du modèle d'interaction flamme-paroi (pour plus de détails, se référer à [Truffin et al 2012]).

Il faut remarquer ici la décroissance de l'angle vers un profil plan (fig 3.28). Cette décroissance s'effectue en trois étapes bien distinctes observables facilement sur les profils 2D :

- Une décroissance rapide jusqu'à $12 \times 10^{-3} m$. Il s'agit de la zone où le front de flamme se propage librement sans ressentir la présence de la paroi.
- Une diminution plus lente jusqu'à $15 \times 10^{-3} m$. Le front de flamme commence à être repoussé par l'écoulement proche paroi, mais n'interagit pas encore (flux nul). Le front de flamme ressent l'influence de la paroi.
- Un profil plat avec un angle nul jusqu'à $30 \times 10^{-3} m$. Cette zone correspond à la zone d'interaction réactive : le taux de réaction de la flamme est actif, et le flux transmis à la paroi est maximum.

Il est ensuite possible d'observer une reprise de la décroissance de l'angle. Le flux à la paroi est ici induit par les gaz brûlés. Le taux de réaction existe toujours, mais son "front" à valeur très faible se déplace vers la zone centrale du canal, consommant les imbrûlés restants diffusés à partir de la zone de coincement.

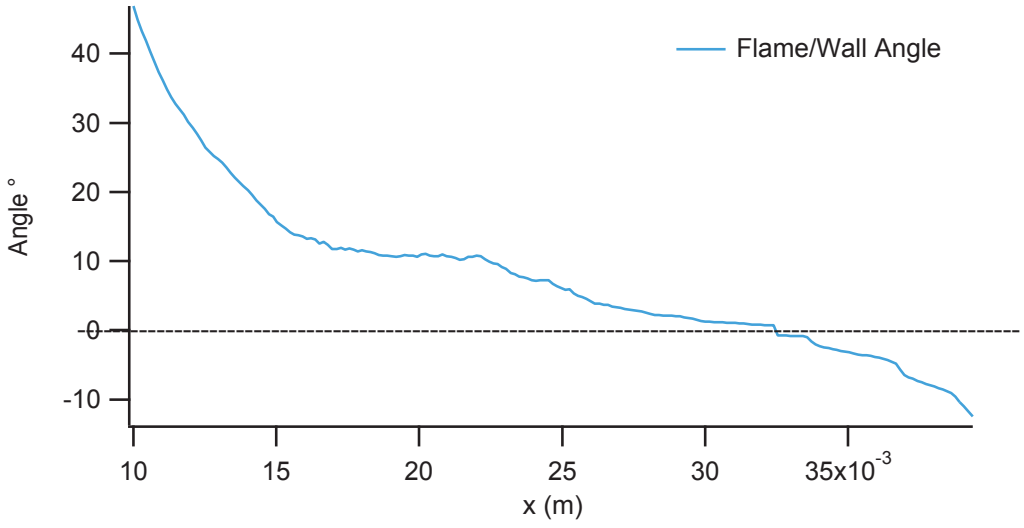


FIGURE 3.28 – Angle moyen du front de flamme turbulent par rapport à la paroi

Profils de vitesse :

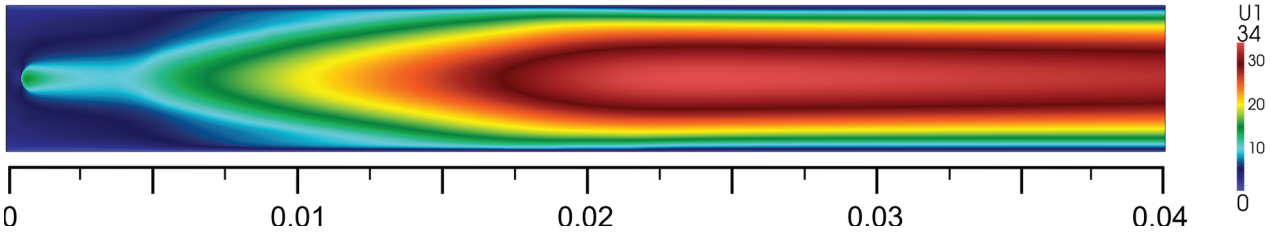


FIGURE 3.29 – Profil 2D du champs de vitesse convective moyen, échelle de référence ($m.s^{-1}$)

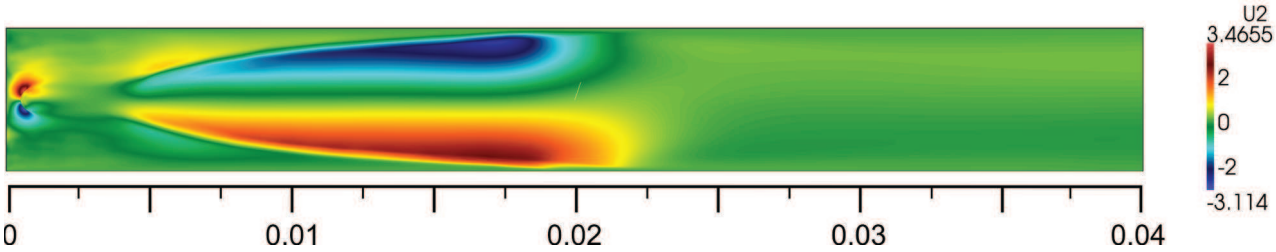


FIGURE 3.30 – Profil 2D du champs de vitesse transversale moyen, échelle de référence ($m.s^{-1}$)

Les profils de vitesse sont similaires aux cas laminaires, même si les écarts sont moins prononcés (fig 3.31).
Il est possible de remarquer la même tendance que précédemment : une augmentation locale de V, ainsi que de u_τ.
Les gaz frais se retrouvent piégés entre le front de flamme réactif et la paroi. L'arrivée de ce front de flamme provoque ainsi une hausse des frottements pariétaux. Une fois le front de flamme passé, les gaz accélèrent verticalement vers la zone centrale du canal (phénomène de poussée par dilatation) ainsi que horizontalement vers la sortie du domaine pour expulser les gaz chauds dilatés.

Taux de réaction :

Le profil du taux de réaction de carburant est pour sa part nettement plus étalé que dans le cas laminaire (fig 3.33). Une décroissance du taux de réaction est observable dans la zone d'interaction. L'intensité de la pente donne une idée des zones de forte interaction. Il subsiste aussi une présence, minime, de ce taux de réaction après la zone d'interaction, preuve de la présence de gaz frais dans la zone de coincement, réagissant par diffusion avec les gaz chauds.

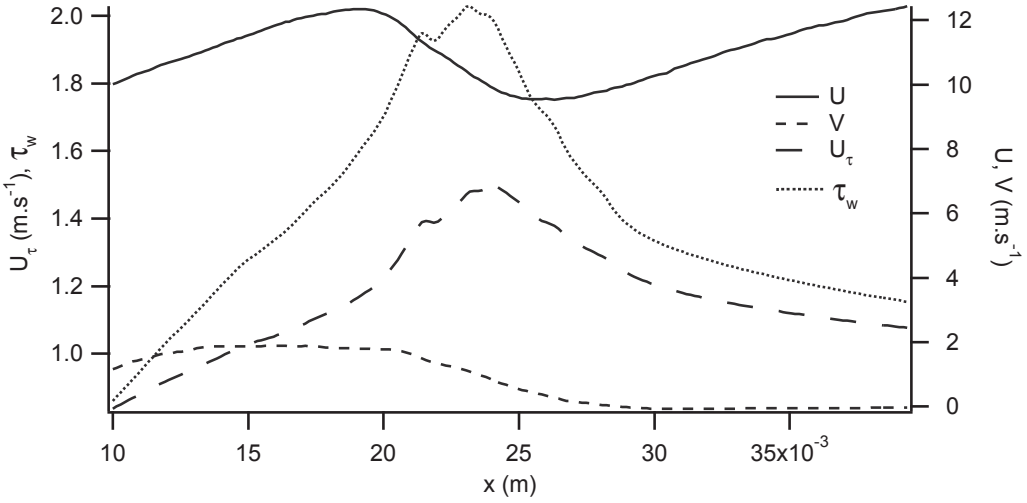


FIGURE 3.31 – Profils de vitesses et de vitesse pariétale en régime turbulent

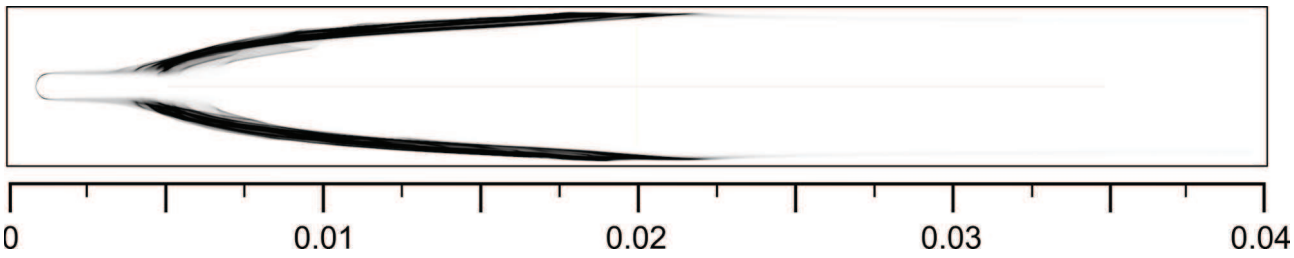


FIGURE 3.32 – Profil 2D du taux de réaction moyen (échelle en m)

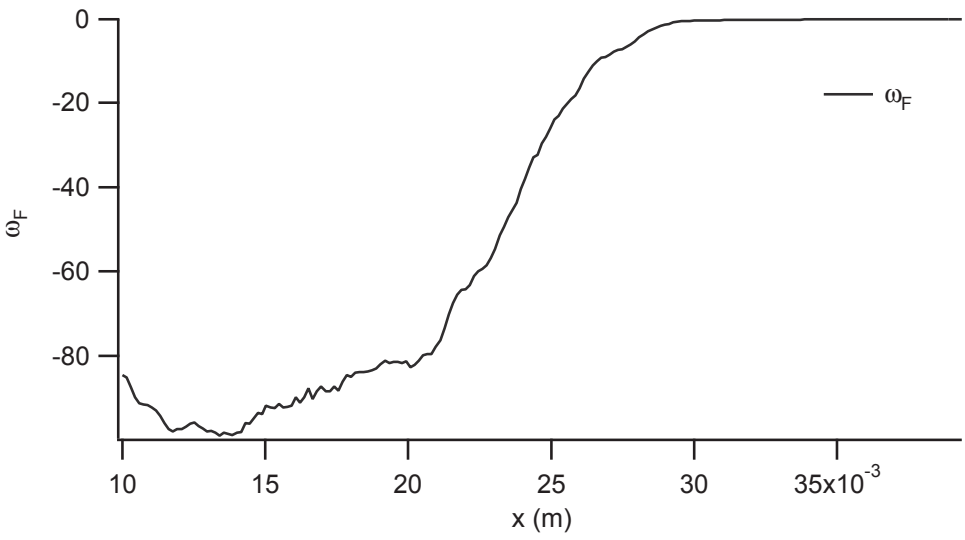


FIGURE 3.33 – Taux de réaction moyen du front de flamme turbulent

Loi de paroi, modèle LnKC :

Le profil de flux estimé par la loi de paroi montre une croissance stable jusqu'à $25 \times 10^{-3}m$ avec un maximum de $98KW.m^{-2}$, point maximum de l'interaction, puis une décroissance plus lente au fur et à mesure que la chaleur diffuse (fig 3.26).
Il est essentiel, pour bien comprendre le comportement de la loi ici, que la boîte (maille RANS) utilisée pour échantillonner les valeurs à l'échelle RANS occupe toute la demi hauteur du canal. Le flux donné par la loi est donc déjà élevé alors que la flamme est encore loin de la paroi, la maille englobant une partie de gaz frais et une partie de gaz brûlés ainsi que le front de flamme. Au moment de l'interaction, la maille englobe la zone de coincement ainsi que les gaz brûlés. La majeure partie de l'énergie n'ayant pas encore été transmise à la paroi, la valeur de $\tilde{T}$ est donc maximale, et le flux maximal donné.
Après l'interaction, l'énergie est absorbée par la paroi, et la chaleur encore contenue dans les gaz brûlés diffuse vers la paroi. Le valeur moyenne de $\tilde{T}$ diminue dans la maille, provoquant une baisse de la valeur donnée par la loi LnKC.

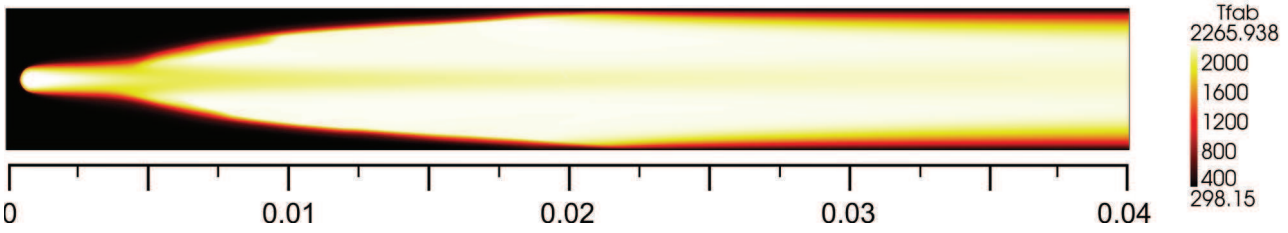


FIGURE 3.34 – Profil 2D de $\tilde{T}$ moyen, échelle de référence $(m.s^{-1})$

Loi d'interaction, Modèle Alpha :
Le tracé des paramètres du modèle alpha (α,Q et Ξ, équation 3.51, figure 3.35) donne lieu à des observations intéressantes :
La valeur de Q se situe aux environs de l'unité avant la zone d'interaction, puis diminue graduellement jusqu'à 0 et atteint cette valeur avant α. Cela se traduit par une fin de profil réactif plus étalée. En effet, α et Q dépendent tous deux du taux de réaction. Une valeur de α non nulle montre la présence d'un front réactif. Dans ce cas, pour que Q soit nul, il faut une zone de $\Sigma = |\nabla c|$ importante, soit une surface étalée. Le front de flamme s'épaissit au fur et à mesure de l'interaction.
Le paramètre α donne un profil semblable à une Gaussienne et montre la présence d'une zone d'interaction prononcée entre $20 \times 10^{-3}m$ et $38 \times 10^{-3}m$.

Enfin, le plissement Ξ stagne à 1.1 avant de montrer une hausse importante en plein cœur de l'interaction. Le calcul du plissement se fait dans chaque maille de calcul, avec cependant un clipping entre les valeurs $0.1 < c < 0.9$ (c la variable d'avancement). Cette méthode évite les parasites extérieurs induits par l'erreur numérique.

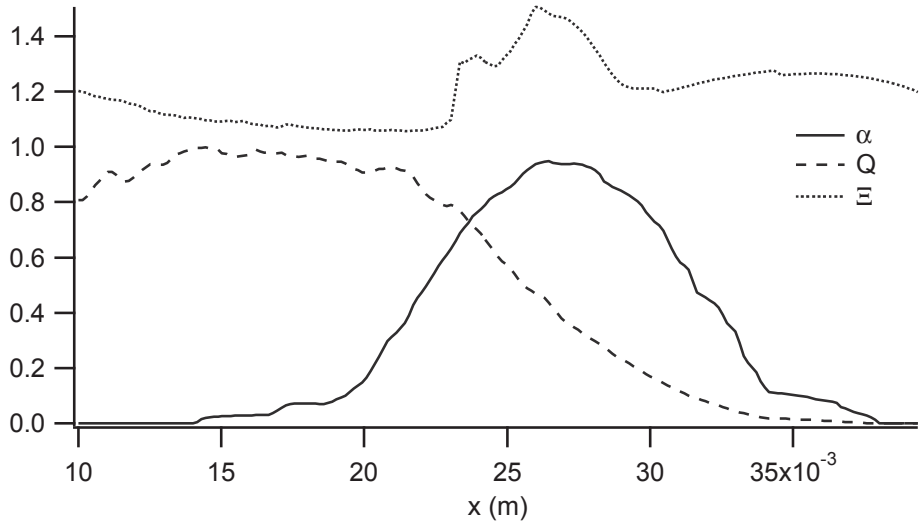


FIGURE 3.35 – Profils moyens d'Alpha, Q et Plissement en régime turbulent

Le modèle d'interaction 1, donné par l'équation (3.50), sans prise en compte du plissement, donne une valeur cohérente et représente le flux d'interaction, non pris en compte par la loi de paroi LnKC (fig 3.36). Il permet la prise en compte de chaque fluctuation du flux DNS (3.4), preuve de l'interaction forte entre les paramètres de la loi d'interaction et le flux DNS. Il est à noter que dans le cas présent le plissement est considéré à 1. Sa valeur oscillera entre 1 et 2 par la suite, ce qui pourra amener le modèle à surestimer légèrement le flux à la paroi. A noter aussi une valeur déjà élevée avant interaction du flux total modélisé q_w (équation 3.60), à cause du modèle LnKC. Comme expliqué précédemment, cette valeur est due à la taille de la maille d'échantillonnage, et ne sera pas pénalisante dans un contexte RANS.
Le profil de $q_{w,modele\ 1}$ surestime ici la valeur maximale du flux DNS de 15% environ. Après la phase d'interaction, la valeur du flux décroît pour retourner à la valeur de q_{LnKC}.

Avec prise en compte du plissement, le modèle 1 surestime le flux à la paroi de près de 25% (fig 3.37). A cause du flux LnKC, la forme pré-interaction est toujours largement surestimée, tandis que la forme post-interaction est pour sa part fortement sous-estimée. Cependant, le pic de flux à l'interaction est correctement reproduit.

Une autre approche avait été posée avant le modèle 2 (équation 3.44), consistant à intégrer

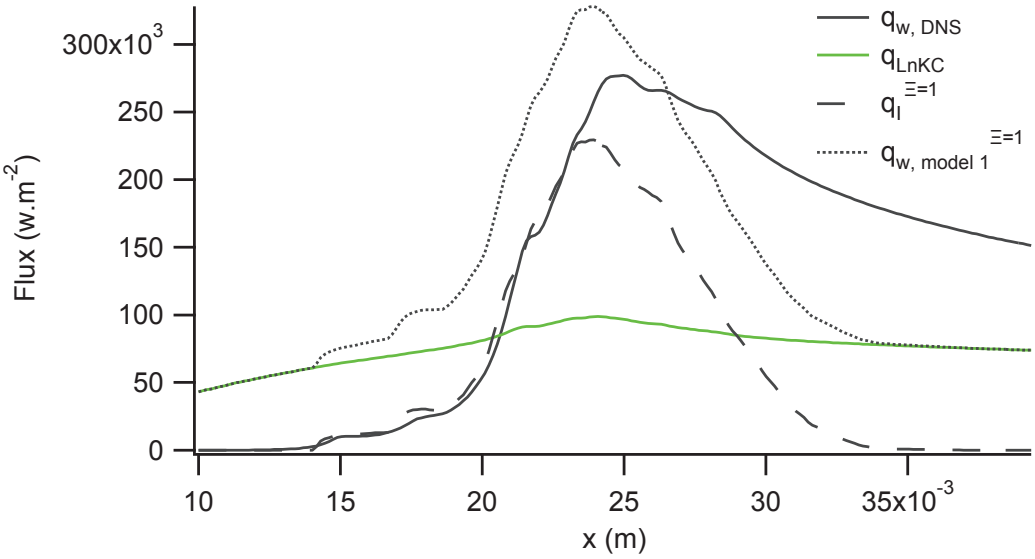


FIGURE 3.36 – Flux du modèle alpha, sans prise en compte du plissement

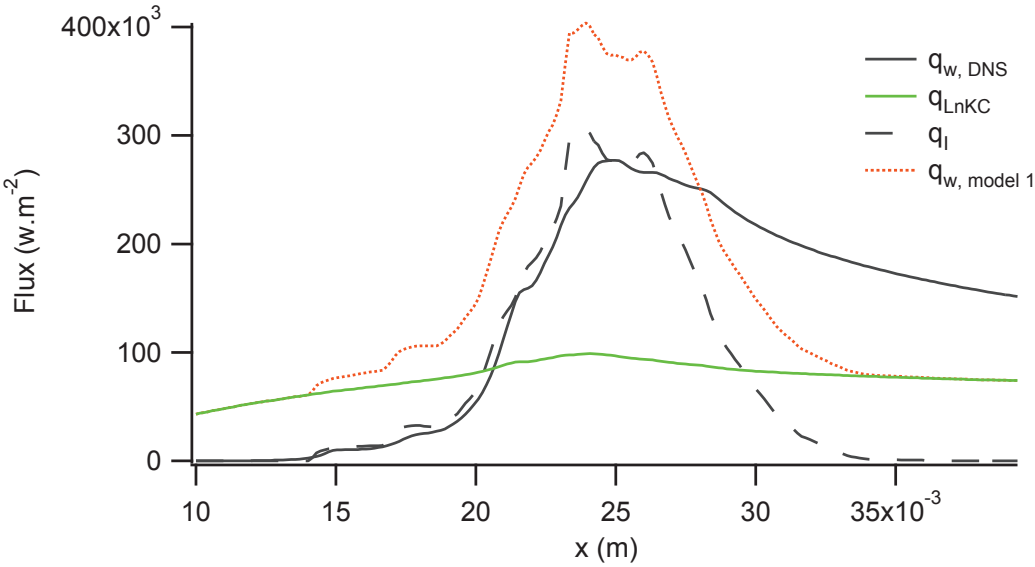


FIGURE 3.37 – Flux du modèle alpha, avec prise en compte du plissement

la loi d'interaction au sein de la loi LnKC pour donner le flux $q_{w,model\ 2}$. Cette seconde version du modèle, permet cette fois de mieux rendre la valeur maximale du flux lors de l'interaction (fig 3.38).

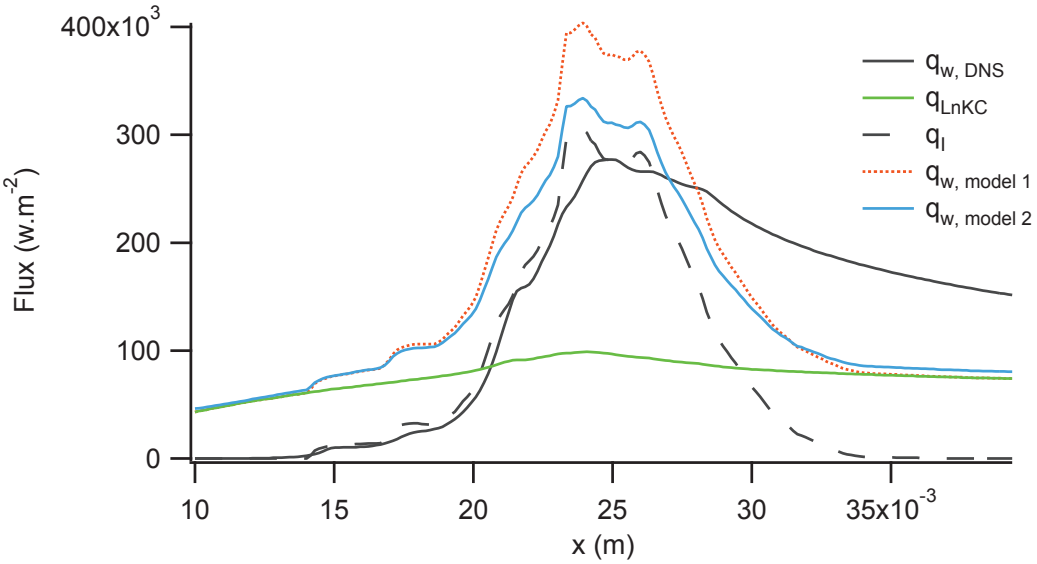


FIGURE 3.38 – Flux du modèle alpha, version intégrée à LnKC

Intégration spatiale :

L'objectif final d'application du modèle étant les simulations RANS, il est maintenant nécessaire pour se rendre compte du bien-fondé de la formulation utilisée de l'intégrer spatialement le long de la zone d'interaction. La zone d'interaction sera supposée correspondant à l'ensemble de la zone où $\alpha > 0$, soit toute la taille du domaine ici.

Les valeurs globales données par chaque flux sont donc de :

- $q_{w,DNS} = 26.5 MW.m^{-1}$
- $q_{LnKC} = 15.5 MW.m^{-1}$
- $q_I = 15.5 MW.m^{-1}$
- $q_{w,model\ 1} = 30 MW.m^{-1}$
- $q_{w,model\ 2} = 27.5 MW.m^{-1}$

Les modèles apportent une amélioration notable à la loi de paroi classique, la loi de paroi LnKC sous-estimant la valeur réelle de moitié. Le modèle d'interaction apporte ici la portion manquante, permettant à la seconde loi étudiée (équation 3.61) de restituer une valeur quasi exacte du flux DNS.

La première approche vue (équation 3.60) surestime le flux DNS de 13%, ce qui reste tout à

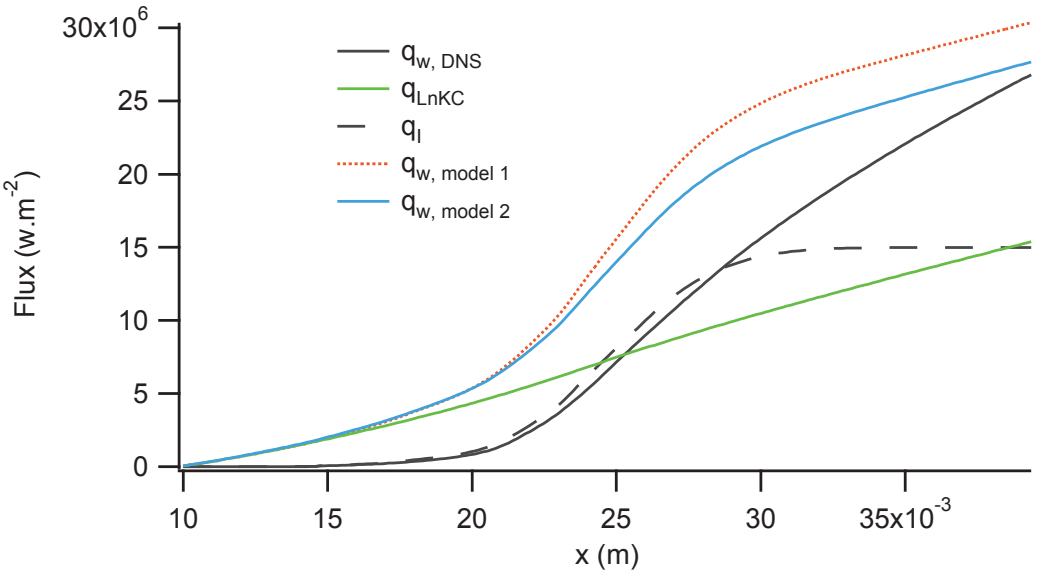


FIGURE 3.39 – Flux moyens intégrés sur la longueur du domaine (type RANS), comparaison avec le flux de référence

fait acceptable.

Une première conclusion pour cette étude 2D est que l'apport des modèles d'interaction développés par K. Truffin et al. est significatif. Il est maintenant nécessaire de mener une étude complète à l'aide d'une simulation 3D.

3.7 Cas 3D turbulent

Les simulations 3D ont été menées sur le calculateur Antares du Crihan (Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie). Malgré les ressources disponibles, il n'a pas été possible de simuler un domaine suffisamment grand pour obtenir une flamme pleinement turbulente. Il sera possible de se rendre compte que la turbulence en entrée est rapidement dissipée, notamment au moment de l'interaction. Il faudra donc se contenter ici d'une flamme relativement peu turbulente, mais qui permet tout de même de dégager plusieurs grandeurs intéressantes.

3.7.1 Vérification des profils transverses

La concordance du champ étudié avec les équations (3.42) est vérifié ici. Pour rappel, les profils vus ici sont :

$$\eta^+ \leq 10.8\ \psi^+ = \eta^+ \tag{3.67}$$

$$\eta^+ > 10.8\ \psi^+ = \frac{1}{\kappa} ln(\eta^+) + C_{\psi,0} \tag{3.68}$$

$$\eta^+ \leq \eta^+_{c,\theta}\ \theta^+ = Pr\eta^+ \left(1 + \frac{1}{\overline{q_w}} \int_0^y \tilde{\dot{\omega}}^I_T dy\right) \tag{3.69}$$

$$\eta^+ > \eta^+_{c,\theta}\ \theta^+ = \frac{Pr}{\kappa} ln(\eta^+) \left(1 + \frac{1}{\overline{q_w}} \int_0^y \tilde{\dot{\omega}}^I_T dy\right) + C_{\theta,0} \tag{3.70}$$

avec et sans la composante de dégagement de chaleur.

Dans la zone avant interaction, le profil DNS de ψ^+ est en bon accord avec la loi de paroi(fig 3.40). La valeur dans la zone centrale du canal est par contre surestimée par le modèle. Cela peut s'expliquer par le fait que l'écoulement se laminarise, l'intensité turbulente ayant déjà fortement décru dans le canal d'injection avant d'être injectée.

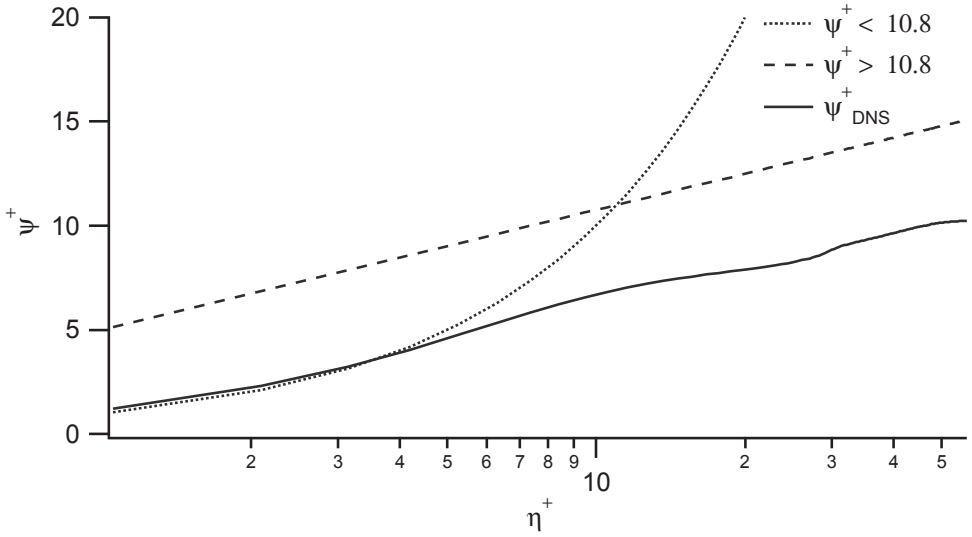


FIGURE 3.40 – Profil de ψ^+ avant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42)

Dans la zone d'interaction, la valeur de ψ^+ se décale par rapport au modèle de sous-couche (fig 3.41). Le profil à diminué, du fait du passage de l'écoulement à travers le front de flamme.

Après l'interaction, le profil de ψ^+ est remonté, à cause notamment de l'accélération du gaz par dilatation après le front de flamme (fig 3.42), provoquant une forte hausse des gradients locaux.

L'étude de la valeur de θ^+ est inutile dans la zone pré-interaction, puisqu'il s'agit de la zone non réactive, et que le fluide frais se trouve à la même température que la paroi.

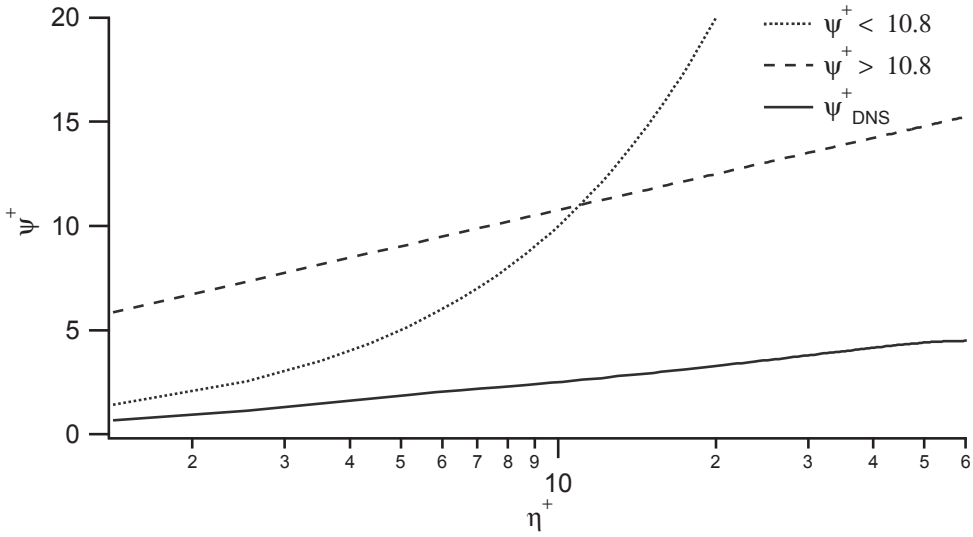


FIGURE 3.41 – Profil de ψ^+ pendant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42)

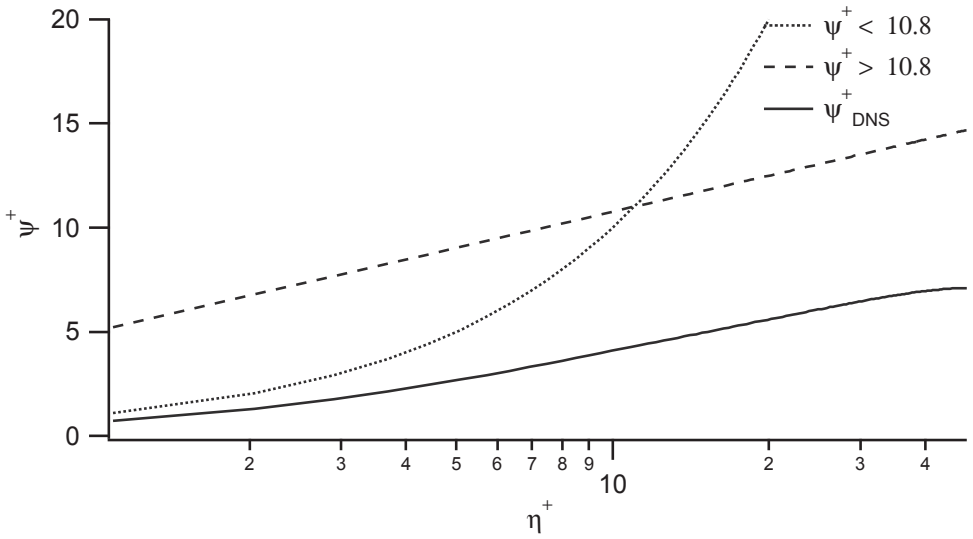


FIGURE 3.42 – Profil de ψ^+ après l'interaction, comparaison avec les équations (3.42)

Le profil de θ^+ observé au moment de l'interaction est fortement sous estimé (fig 3.43). Cette valeur faible est bien sûr cohérente, le front de flamme n'ayant pas encore fini de réagir, le profil thermique de couche limite n'est pas encore établi. La dernière partie sera intéressante à visualiser pour confirmer cette évolution. Les modèles montrent ici des comportements différents : le calcul de référence, sans prise en compte de l'interaction donne la valeur la plus faible. Le modèle 2 montre pour sa part une divergence avec les autres profils et s'écarte fortement des résultats DNS. Il est suivi de près par $q_{w,0}$, calculé à partir du dégagement de chaleur de la flamme.

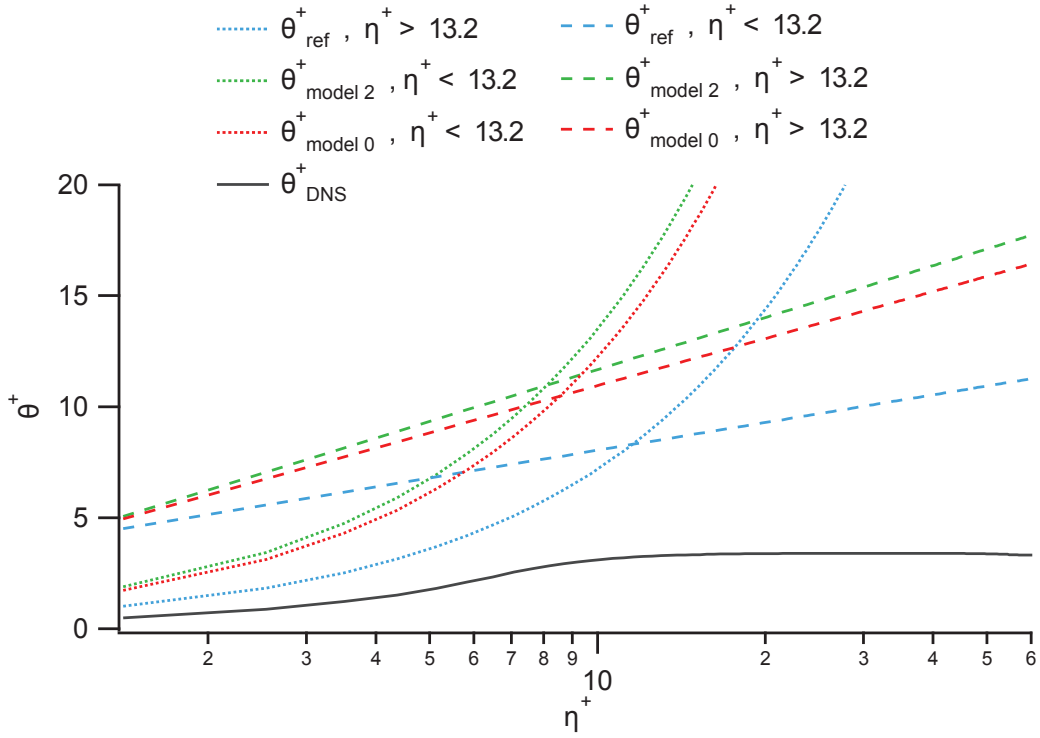


FIGURE 3.43 – Profil de θ^+ pendant l'interaction, comparaison avec les équations (3.42)

Le profil thermique θ^+ après la zone d'interaction se rapproche mieux du modèle, et il est possible d'observer l'établissement d'un profil de couche limite classique (fig 3.44). La valeur du taux de réaction étant maintenant nulle et l'interaction n'ayant plus lieu, le taux de dégagement de chaleur n'apporte rien ici, et les profils modélisés se rejoignent.

Ces valeurs sont suffisamment cohérentes pour montrer que les champs étudiés sont corrects, même si la turbulence n'est pas suffisamment élevée pour estimer une simulation pleinement turbulente.

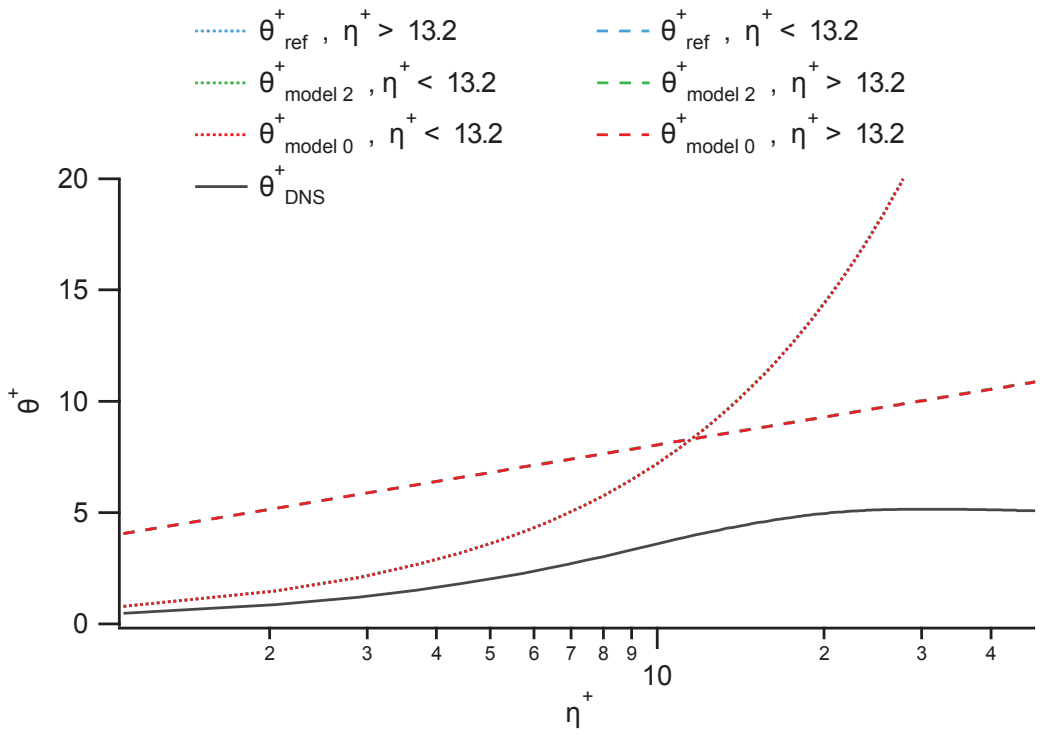


FIGURE 3.44 – Profil de θ^+ après l'interaction, comparaison avec les équations (3.42)

3.7.2 Profils longitudinaux, modèle alpha

Distance flamme paroi La distance flamme-paroi est similaire au cas 2D (fig 3.45). Il ressort ici un profil classique de rapprochement de la paroi, puis d'éloignement par diffusion. La distance minimale à la paroi est ici de $0.195 \times 10^{-3}m$ pour un Peclet diffusif de 4. Il est possible de remarquer ici un point d'inflexion vers $17 \times 10^{-3}m$ jusqu'au point critique δ_Q vers $22 \times 10^{-3}m$. Cette portion correspond au début de l'interaction, la paroi entrant dans le champ d'influence de la flamme provoquant une diminution de la vitesse de rapprochement de la flamme. Cette portion correspond aussi au maximum de τ_w visualisé figure 3.48.

Grandeurs thermodynamiques Les profils moyens sont ici aussi pleinement en accord avec ce que qui avait été vu dans le cas 2D (fig 3.46). La diffusion thermique après l'interaction et l'absorption de l'énergie du fluide par la paroi froide est par ailleurs très bien observable.
Il est aussi important de noter que c n'est pas égal à 1 une fois l'interaction terminée. Il reste donc une portion non négligeable d'imbrûlés.
Il est pour finir intéressant de tracer la valeur de $1 - \delta/h$ avec δ la distance flamme/paroi et h la hauteur de demi canal et de la comparer à $c = 1 - Y_F/Y_F^0$ (fig 3.47). Les valeurs visualisables ici convergent et conservent la même allure. L'écart entre les 2 courbes témoigne de l'épaisseur

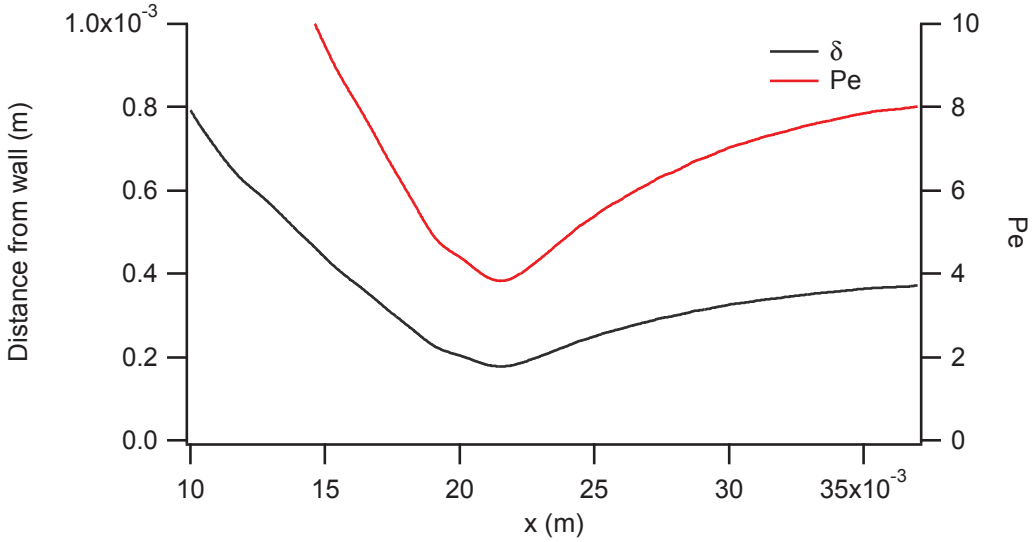


FIGURE 3.45 – Distance flamme paroi pour le cas 3D

de $\Sigma = |\nabla c|$ et montre très clairement une réduction progressive de cette épaisseur, témoin de la réduction de l'intensité turbulente. Une flamme turbulente induit une fois moyennée temporellement une surface plus étalée qu'une flamme laminaire.

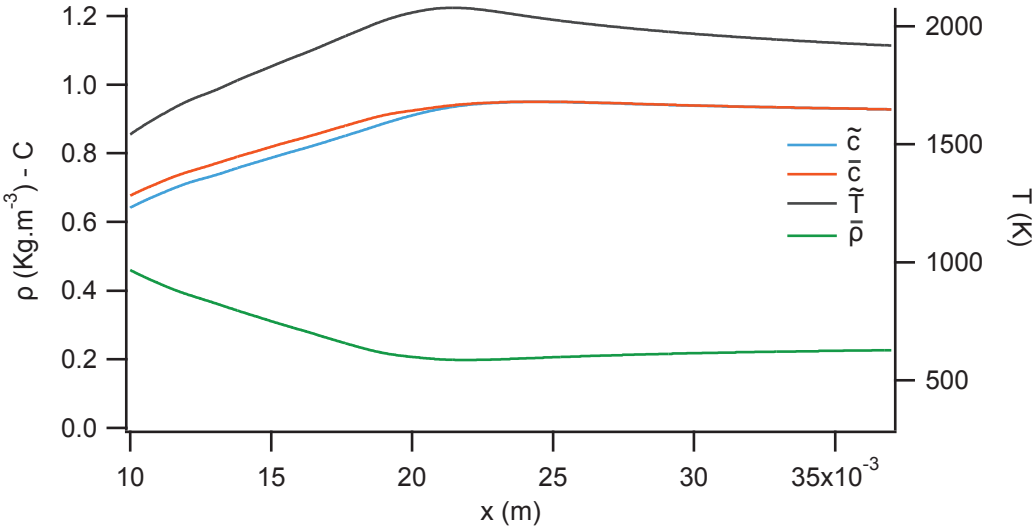


FIGURE 3.46 – Grandeurs thermodynamiques et variable d'avancement, cas 3D

Profils de vitesse Les profils de vitesse sont reportés figure 3.48. Il est possible d'observer encore une fois une forte augmentation du frottement pariétal, ainsi qu'une hausse de la vitesse verticale avant l'interaction.

L'augmentation de τ_w, liée à celle de u_τ, est engendrée par l'arrivée du front de flamme sur la paroi. Il s'agit ici de la rétro-action de la paroi sur le front. Le fluide est localement comprimé entre la flamme visqueuse et la paroi, provoquant une augmentation de u_τ. L'augmentation de

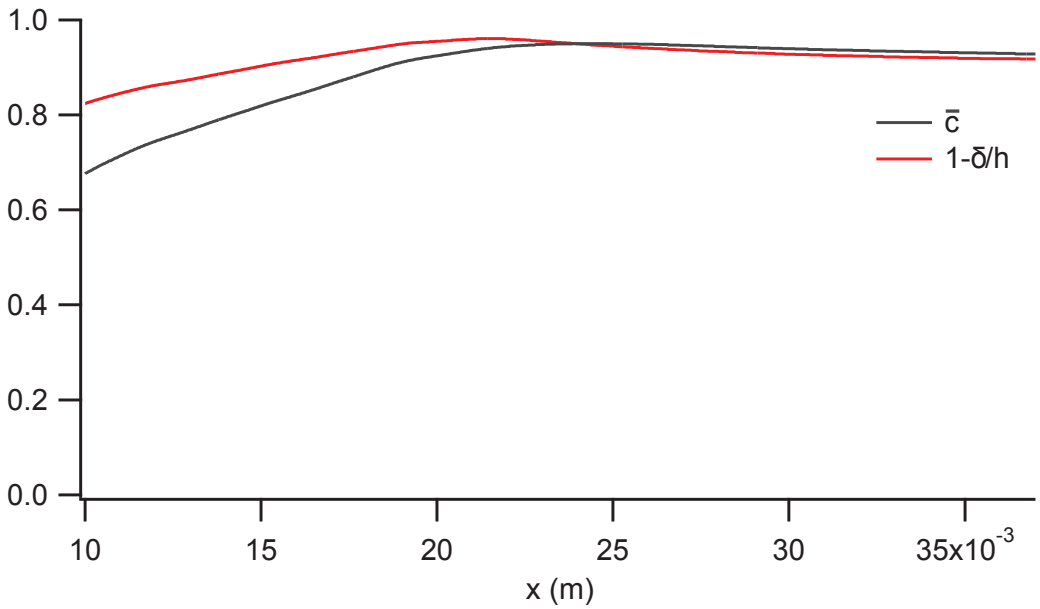


FIGURE 3.47 – Comparaison des grandeurs liées $1 - Y_F/Y_F^0$ et $1 - \delta/h$, mise en évidence de la décroissance de l'intensité turbulente

V est parfaitement observable sur les tracés 2D. Les gaz chauds dilatés accélèrent après le front réactif, le fluide se dirigeant alors vers le centre du canal, provoquant aussi une augmentation de U en direction de la sortie du domaine, pour expulser les gaz brûlés moins denses.

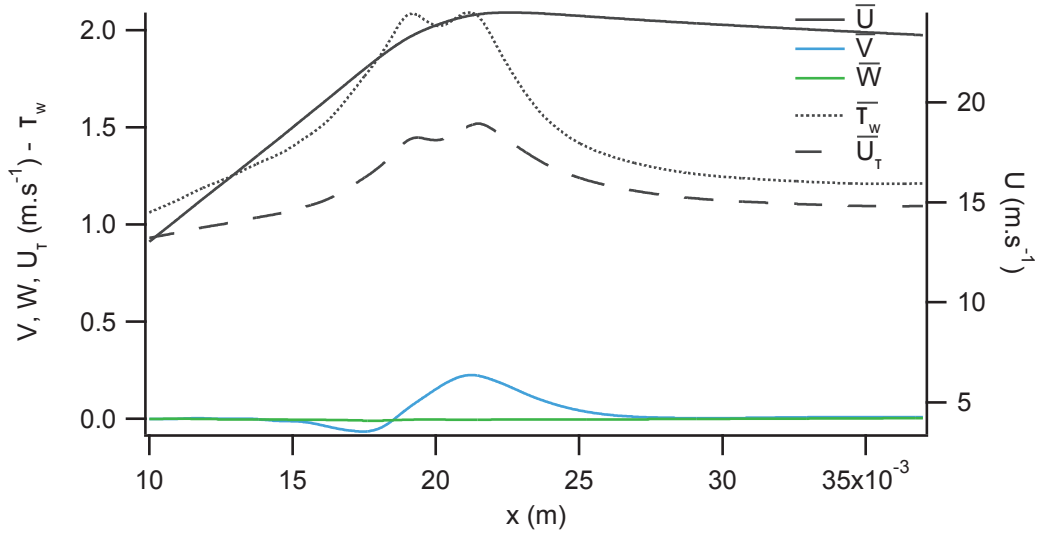


FIGURE 3.48 – Vitesses et vitesse tangentielle, cas 3D

Angle du front de flamme L'angle du front de flamme, calculé à l'aide du gradient de c local, montre une diminution du profil vers une stabilisation à 0^o, i.e. une flamme parallèle à la paroi. A noter trois phases bien distinctes :

– L'angle diminue progressivement jusqu'à $17 \times 10^{-3} m$, position de début d'interaction.

– L'angle chute brutalement au cours de la phase la plus active de l'interaction, i.e. jusqu'à $24 \times 10^{-3} m$.

– L'angle se stabilise autour de zéro, la flamme est alors parallèle à la paroi.

A noter ensuite une valeur négative de l'angle, comme pour le cas 2D. Le front réactif subsistant s'éloigne de la paroi.

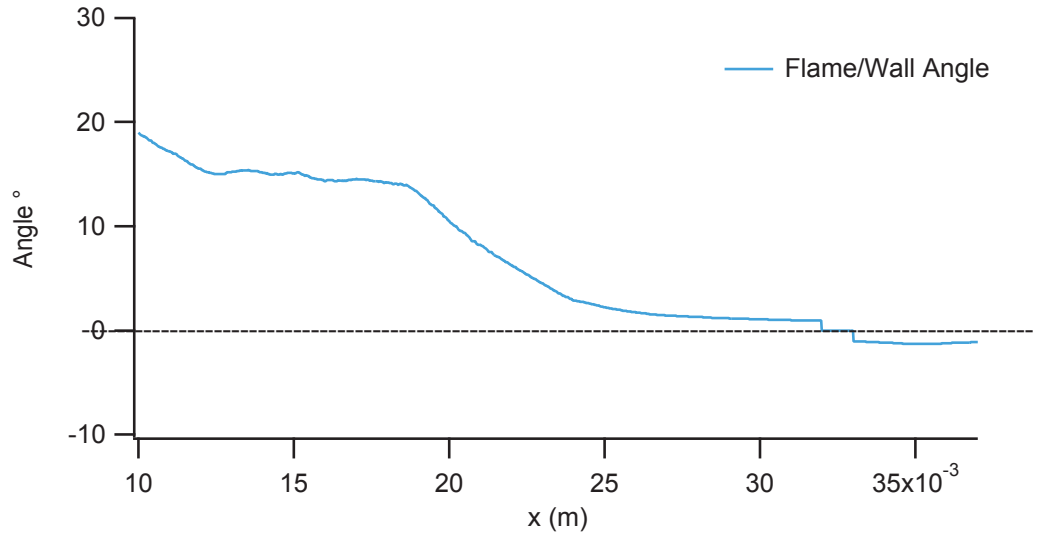


FIGURE 3.49 – Angle du front de flamme, convergence vers une flamme parallèle à la paroi, cas 3D

Modèle alpha et Flux En visualisant les profils de α, Q et Ξ (fig 3.50), il est possible de remarquer que ces valeurs sont moins convergées que dans le cas des études 2D. Cependant l'allure générale est suffisamment marquée pour exploiter les données. Le plissement Ξ est ici encore plus élevé avant et pendant la première phase d'interaction que dans le cas 2D, ce qui tend à montrer l'importance de sa prise en compte.

L'allure des valeurs α et Q est similaire au cas 2D, même s'il ressort une forme un peu différente pour Q avec une valeur plus faible avant la phase d'interaction, de l'ordre de 0.8.

L'étude des flux à la paroi peut être décomposée en 3 parties :

– Le calcul du flux lié à l'interaction uniquement

– Le calcul du flux total

– L'intégration de ce dernier sur le domaine

Calcul du flux lié à l'interaction :

Seront comparés ici le flux liée à la chaleur dégagée par le taux de réaction, ainsi que sa portion

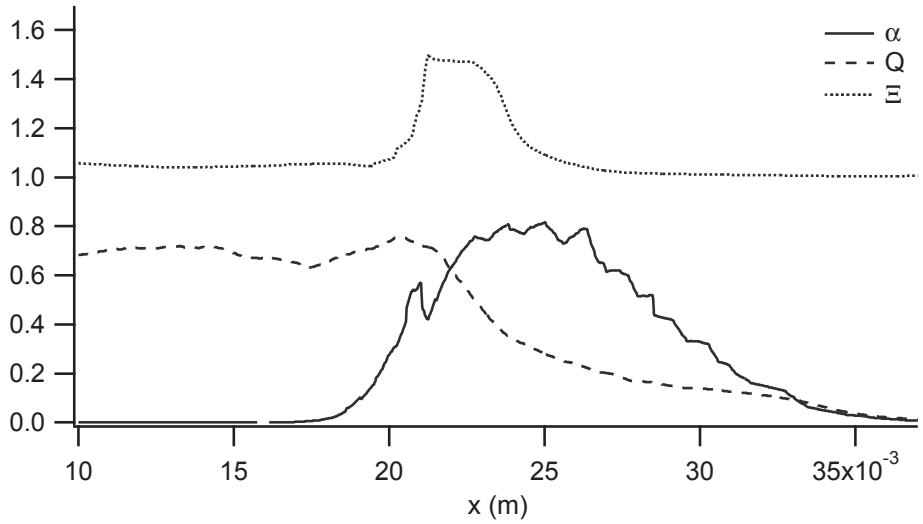


FIGURE 3.50 – Variables du modèle d'interaction : α, Q et Ξ, cas 3D

liée à l'interaction :

$$q_{\dot{w}_T} = \int_0^y \dot{w}_T dy \tag{3.71}$$

$$q_{I,\dot{w}_T} = \int_0^y \dot{w}_T^I dy \tag{3.72}$$

L'hypothèse $\dot{\omega_F^I} = \alpha\dot{\omega_F}$ est posée, car il s'agit de valeurs moyennes convergées. En effet, dans le cadre des calculs DNS, seuls les valeurs séparées de α et de $\dot{w}_T$ ont été capturées et moyennées temporellement, d'où la nécessité de poser cette hypothèse pour accéder à $\dot{\omega_F^I}$.

Soit :

$$q_{I,\dot{w}_T} = \int_0^y \dot{w}_T^I dy = \int_0^y \dot{w}_T \alpha dy = q_{I,0} \tag{3.73}$$

Et le flux donné par le modèle alpha pour les **modèles 1 et 2** :

$$q_{I,model\ 12} = \alpha Q \Xi q_{lam} \tag{3.74}$$

Il est possible d'observer sur la figure 3.51 que la valeur du flux total dégagé par la réaction est relativement constant avant l'interaction. Il diminue ensuite pour devenir nul, et ce sur la zone correspondant à la zone d'interaction. En multipliant cette valeur par le facteur d'interaction α, il est possible d'obtenir la composante d'interaction de ce flux.
La comparaison des deux flux (fig 3.52) montre une tendance similaire, la valeur donnée par le modèle 1 étant supérieure d'environ 17%.

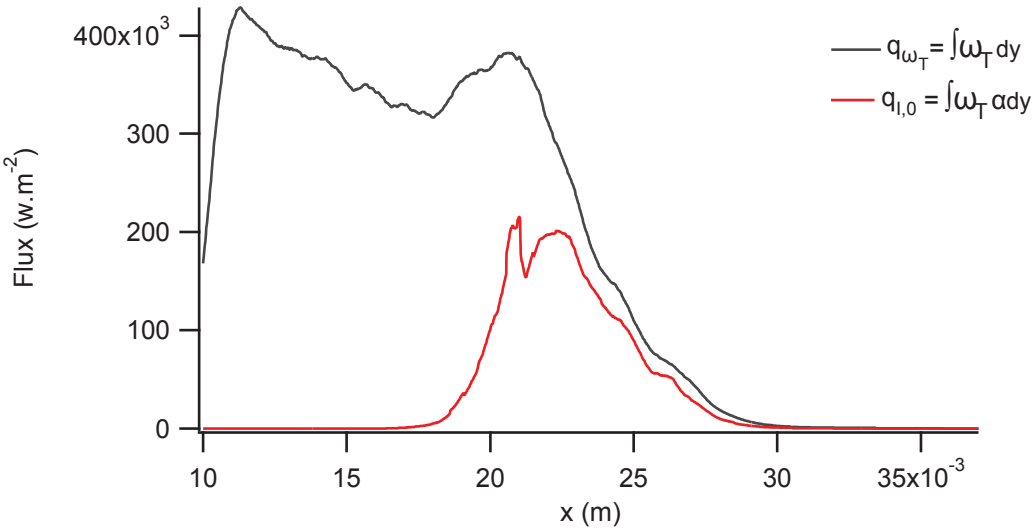


FIGURE 3.51 – Flux de chaleur, total et interagissant

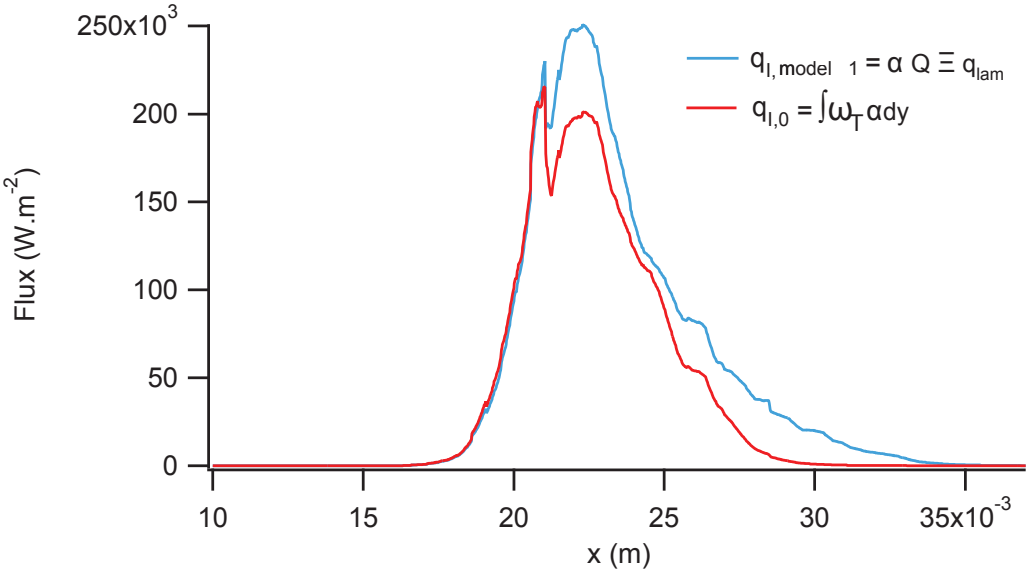


FIGURE 3.52 – Comparaison des flux d'interaction

Calcul du flux total :

Les flux d'interaction sont maintenant utilisés au sein des modèles finaux afin de prédire le flux total à la paroi.

Pour finir, le flux donné par le modèle 1 est comparé à celui donné par le modèle 2, les deux partageant la même source de flux d'interaction. Pour rappel, le modèle 1 est donné par la relation suivante :

$$q_{w,model\ 1} = \alpha Q \Xi q_{lam} \tag{3.75}$$

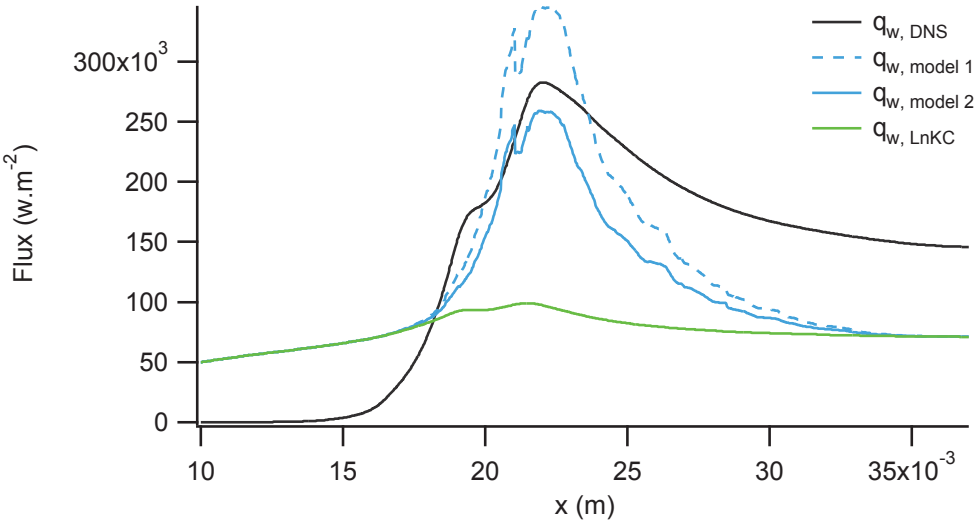


FIGURE 3.53 – Comparaison des flux totaux utilisant le modèle d'interaction alpha

Le modèle 1 montre une valeur bien supérieure du flux maximum avec une valeur avoisinant les $350 KW.m^{-2}$. Les deux modèles entourent le Flux DNS, l'un surestimant la valeur, l'autre la sous-estimant. Il est intéressant de remarquer que les flux ne suivent pas toujours la tendance du flux DNS, et le surestiment largement avant la phase d'interaction, puis le sous-estime après. Cet aspect est dû à la hauteur des "*boxs*" de capture, qui capturent l'ensemble de la demi hauteur du canal, et n'apparaitra pas dans le cadre de calculs RANS.

Intégration sur le domaine :

L'intégration des 3 modèles ainsi que de la valeur de référence, le flux DNS, permet de visualiser ce que donneraient les modèles dans une situation RANS.

Le total des valeurs obtenu est :

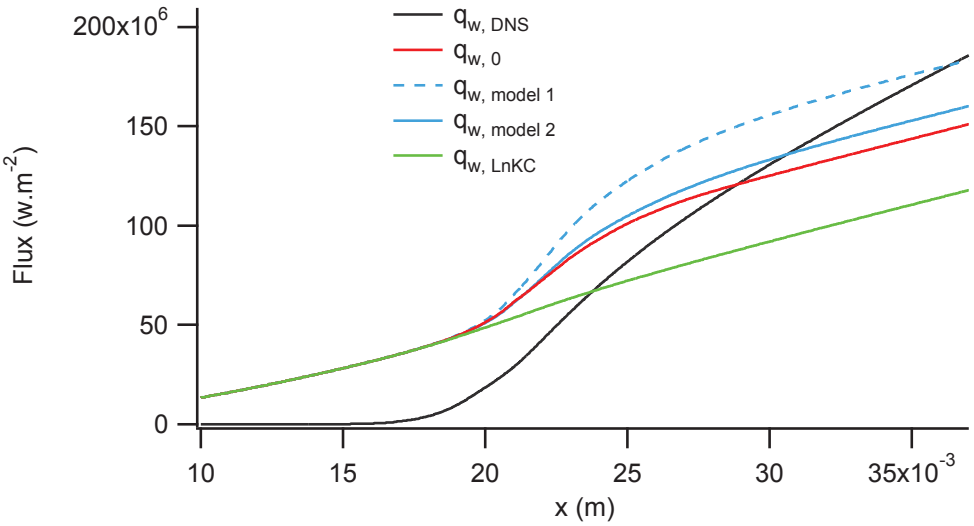


FIGURE 3.54 – Intégration spatiale des 3 modèles, comparaison avec le flux DNS dans une situation à l'échelle RANS

- $q_{w,DNS} = 185 MW.m^{-1}$
- $q_{w,model\ 0} = 150 MW.m^{-1}$
- $q_{w,model\ 1} = 160 MW.m^{-1}$
- $q_{w,model\ 2} = 185 MW.m^{-1}$

Les valeurs se suivent, mais le modèle 2 donne ici une valeur exacte du flux pariétal. Même s'il peut s'agir d'un hasard, à cause notamment de la distance d'intégration, il en résulte tout de même qu'il s'agit de la valeur la plus cohérente. A noter aussi le faible écart entre les modèles 0 et 1, preuve de la cohérence du modèle alpha à l'égard du flux donné par la chaleur à l'interaction. Il serait instructif dans de futures études de calculer les flux modélisés à l'aide de "*boxs*" plus petites, et ainsi vérifier si les valeurs convergent sur le profil donné par le flux DNS.

3.7.3 Conclusion

L'objectif de cette étude consistait à extraire des données d'une simulation DNS afin de tester et valider le modèle d'interaction développé par K. Truffin, dans un cas monophasique turbulent et pré-mélangé.

Malgré l'absence de simulations totalement turbulentes, il a été vérifié que le modèle Alpha apporte une réelle amélioration face aux lois de parois classiques, et permet une meilleure prise en compte des pertes thermiques à la paroi, ainsi que du stress engendré sur les matériaux par le passage de la flamme.

Les valeurs locales, bien que parfois sous ou surestimées, donnent d'excellents résultats une fois intégrées à l'échelle RANS, domaine d'application du modèle.

Par la suite, il serait intéressant de tester le modèle avec des simulations DNS de type compressible, afin de vérifier certains aspects comme la compression du champ de vitesse, ainsi que l'étalement du front de flamme le long de la paroi. Des études en chimie complexe seraient aussi utiles, afin de vérifier l'impact des réactions radicalaires en proche paroi sur le flux donné par le modèle.

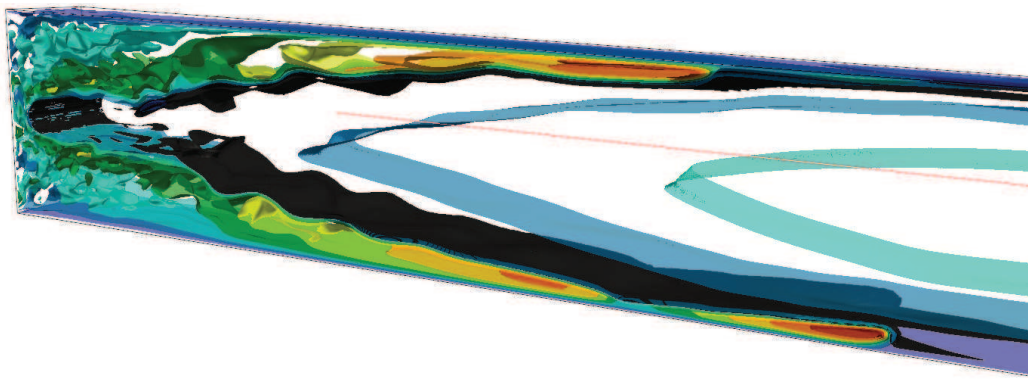


FIGURE 3.55 – Rendu 3D d'un champ instantané. Vitesse U en couleur, Front réactif en noir.

Chapitre 4

Dispersion en température d'un spray

"Si un homme atteint le cœur de sa propre religion, il atteint également le cœur des autres religions."

Gandhi

Chapitre 5

Interaction d'une flamme lagrangienne avec la paroi

« *Vi veri universum vivus vici.* »

(Par le pouvoir de la vérité, j'ai de mon vivant, conquis l'univers).

V

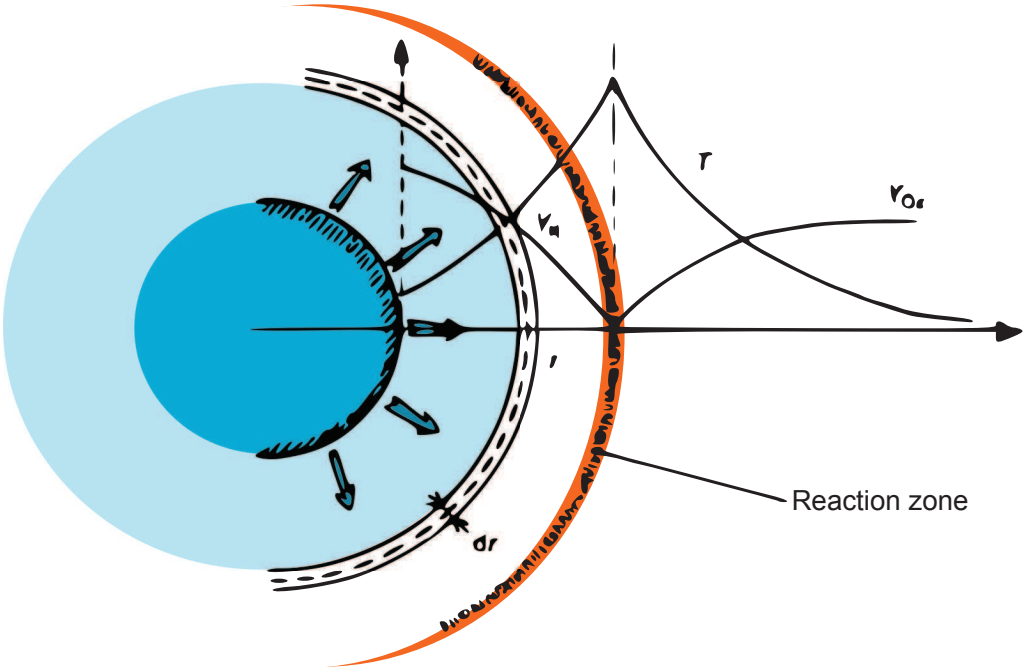


FIGURE 5.1 – Évolution de la concentration autour d'une goutte, évaporation puis combustion [Borghi, Champion, 2000]

L'étude présente ici repose sur l'utilisation conjointe des éléments diphasiques utilisés pour la partie SIGLE de la thèse, et sur les routines d'analyse du projet INTERMAC. L'objectif est de visualiser le comportement d'une flamme en V dans un canal ainsi que son interaction avec la paroi, dans un cas d'injection diphasique de fuel. Pour cela, deux grandeurs caractéristiques seront utilisées : le temps d'évaporation des gouttes τ_v et le temps caractéristique des particules τ_p. Un mappage 3D permettra de ressortir les tendances fortes, et d'aiguiller de futures études sur le sujet vers les possibles points d'inflexions observés. Cette étude n'est pas achevée, mais permet la simulation d'un grand nombre de possibilités de combustibles.

5.1 Etude bibliographique

L'aspect théorique de la combustion diphasique peut être retrouvé dans l'ouvrage de R. Borghi et M. Champion [Borghi, Champion, 2000], qui décrit l'ensemble des aspects théoriques utilisés au sein des codes de calculs.

De nombreuses études ont été conduites expérimentalement sur la combustion des gouttes, ainsi que celle des sprays. La plupart de ces études ont été menées en microgravité, afin d'étudier en détail la combustion d'une ou plusieurs gouttes. TF. O'Malley et KJ. Weiland [O'Malley, Weiland, 2004] étudièrent le comportement d'une goutte isolée en micro gravité, et observèrent

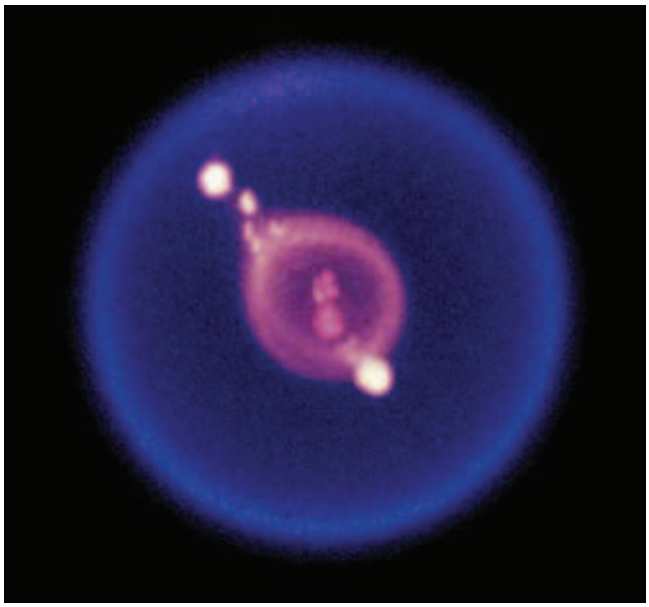


FIGURE 5.2 – Combustion d'une goutte isolée en micro-gravité [O'Malley, Weiland, 2004]

parfaitement l'allure sphérique du front de flamme (fig 5.2). D'autres études, menées à l'aide de gouttes de fort diamètre mirent en évidence des phénomènes comme l'impact du diamètre initial sur le diamètre d'extinction, ou l'impact de l'écoulement sur le taux de réaction [Dietrich, 1996][Bachalo, 1994]. Certaines études validèrent les modèles utilisés en simulation numérique, comme celui de la loi en d^2 [Yang, Avedisian, 1989].

Des simulations DNS en turbulence homogène [Elgobashi & Truesdell 1992] ainsi qu'en turbulence non homogène [Ling et al. 1998] de particules solides ont été menées, avec par la suite la prise en compte de l'effet d'évaporation [Mashayek 1998][Miller et al. (1999, 2000)][Réveillon et al. 2000]. Cependant, peu de simulations DNS de type two-ways (i.e. action du fluide sur les particules ET action des particules sur le fluide) avec combustion ont été réalisées [Mashayek 1999, 2000]. Une étude a été menée par Réveillon [Reveillon et al. 2005] sur la combustion de sprays et la mise en évidence des différents régimes de combustion.

5.2 Etude DNS

Au cours de ce chapitre dédié à l'étude de l'interaction flamme/paroi dans le cas de flammes sprays, les analyses suivantes seront menées :

– Impact des temps caractéristiques diphasiques sur la distance à la paroi
– Impact sur le flux à la paroi, ainsi que le flux intégré sur le domaine
– Impact sur la pénétration des gouttes à travers le front de flamme

– Impact sur le régime de combustion : pré-mélange ou diffusion

– Impact sur le flux donné par le modèle 1 de IFPen

Les temps caractéristiques utilisés comme référence des simulations et qui varieront au fur et à mesure des calculs afin de couvrir un large spectre de combustibles sont :

τ_f le temps caractéristique de flamme, donné par la formule suivante [Poinsot et al. 2005] :

$$\tau_f = 5.0 \frac{D_{th}}{S_L^{0\,2}} \tag{5.1}$$

avec S_L^0 la vitesse de flamme du propane, fixée à $0.4 m.s^{-1}$ et D_{th} le coefficient de diffusion thermique du propane. Cette valeur de temps est fixée suivant l'épaisseur du front de flamme de référence.

τ_v le temps d'évaporation des gouttes. Loi en T, donc

$$\tau_v = \frac{\rho_d Sca_{k,0}}{4 Sh_c \nu^{\bullet} ln(1 + B_M)} \tag{5.2}$$

Son évolution influe sur la rapidité d'évaporation des gouttes. Plus τ_v est grand, plus l'évaporation est rapide.

τ_p le temps caractéristique des particules. Goutte de section S,

$$\tau_p = \frac{\rho_l S}{18 \pi \mu_g} \tag{5.3}$$

Son évolution influe sur la balistique des gouttes, à savoir leur capacité à être entrainée par l'écoulement. Plus τ_p est grand, moins les gouttes sont affectées par l'écoulement environnant.

Les valeurs utilisées seront les 9 possibilités données par les jeux de valeurs initiales : $\tau_v = 0.1;\ 0.5;\ 0.9$ et $\tau_p = 0.1;\ 0.5;\ 0.9$.

5.3 Étude longitudinale

5.3.1 Évolution de la distance à la paroi

L'objectif est ici de définir l'influence des deux paramètres sur la distance flamme/paroi par l'intermédiaire du nombre de Peclet. Comme observé précédemment, cette distance est corrélée au flux maximum transmis et donc au stress du matériau. A noter des difficultés de calcul pour

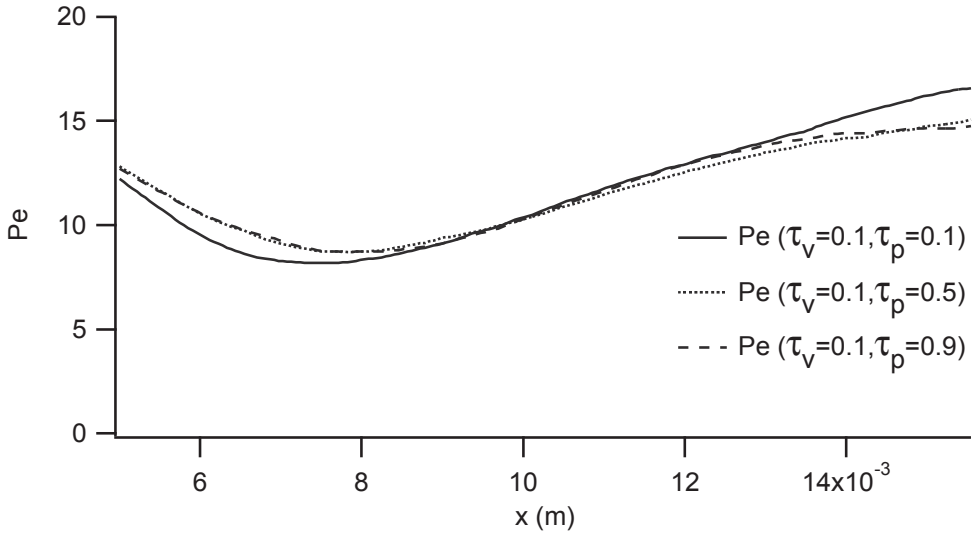


FIGURE 5.3 – Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.1$ fixé

le cas à $\tau_v = 0.9$ et $\tau_p = 0.1$, les données ne seront donc pas utilisées ici, et sa valeur pour la visualisation 3D sera interpolée, contrainte en fait imposée par le logiciel de visualisation.

Évolution de τ_p :
Dans le cas $\tau_v = 0.1$, la valeur de τ_p influence peu (fig 5.3). Les gouttes s'évaporent trop vite pour que l'effet balistique apparaisse. Les distances à la paroi donnent un Peclet de 8 à 9. Le cas $\tau_v = 0.5$ montre une distanciation par rapport à la paroi au fur et à mesure que τ_p augmente (fig 5.4). A noter l'échec de la capture dans une zone, due à une erreur numérique dans la routine dédiée à la détection du front de flamme. Cette erreur est sans influence ici. L'aspect balistique des gouttes apparait, et le front de flamme se retrouve plus étalé sur le domaine. Le cas $\tau_v = 0.9$ montre les même tendances que $\tau_v = 0.5$ (fig 5.5), et il est possible d'observer une convergence des cas $\tau_p = 0.5$ et $\tau_p = 0.9$. Ce dernier aspect s'explique par la lenteur de l'évaporation des gouttes, amenant tous les cas à l'extrémum opposé du cas $\tau_v = 0.1$. Il en ressort deux extrémums, $\tau_v = 0.1$ et $\tau_v = 0.9$, et un cas non convergé entre deux : $\tau_v = 0.5$.

Évolution de τ_v :
L'étude pour $\tau_p = 0.5$ (fig 5.6) montre une augmentation de la distance pariétale ainsi qu'un décalage positif de son minimum avec l'augmentation de τ_v, et une convergence des cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$ (fig 5.7). La similitude de ces deux derniers cas est forte, et se retrouve pour le cas $\tau_p = 0.9$. Fait important, les distances du cas $\tau_v = 0.9$ sont plus faibles que le cas $\tau_v = 0.5$.

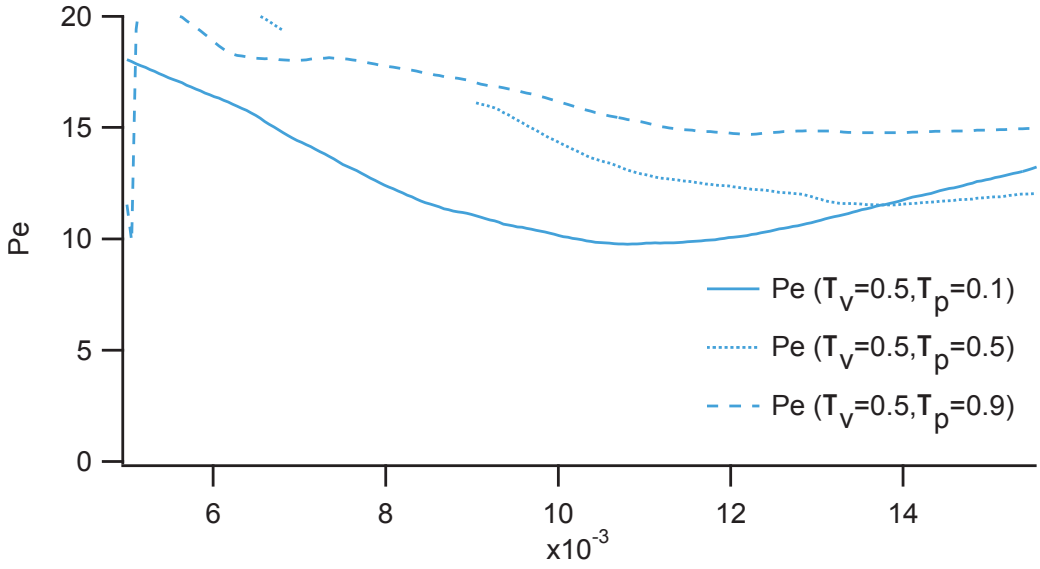


FIGURE 5.4 – Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.5$ fixé

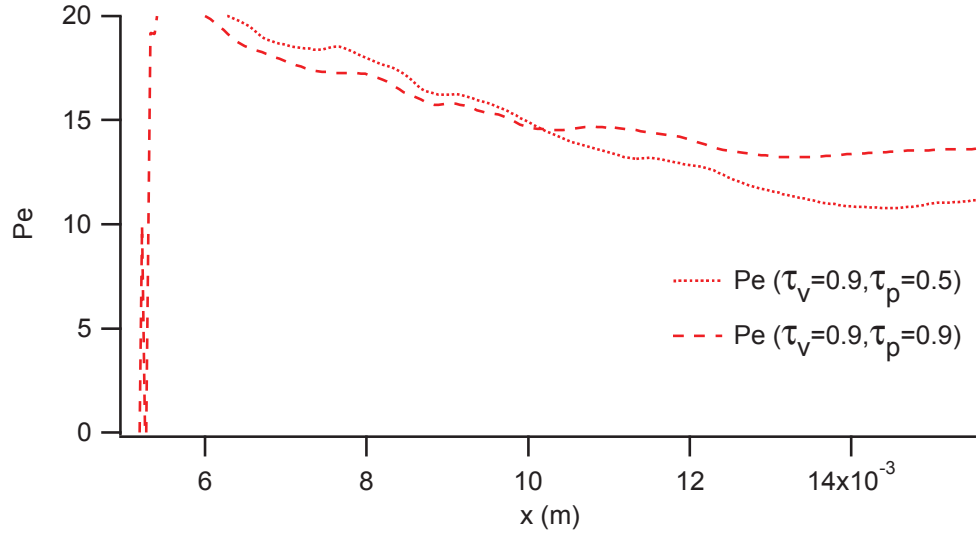


FIGURE 5.5 – Nombre de Peclet pour $\tau_v = 0.9$ fixé

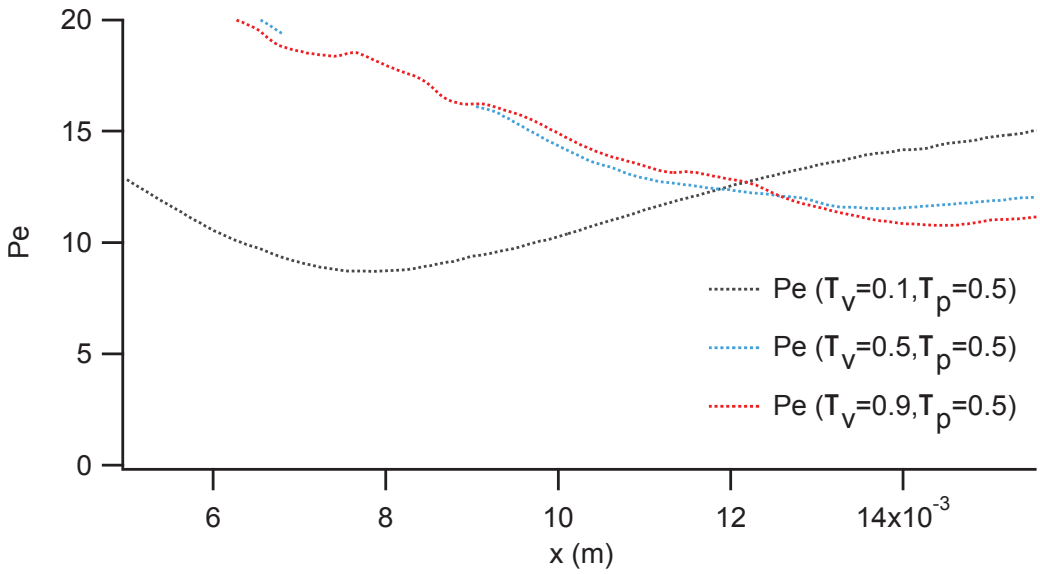


FIGURE 5.6 – Nombre de Peclet pour $\tau_p = 0.5$ fixé

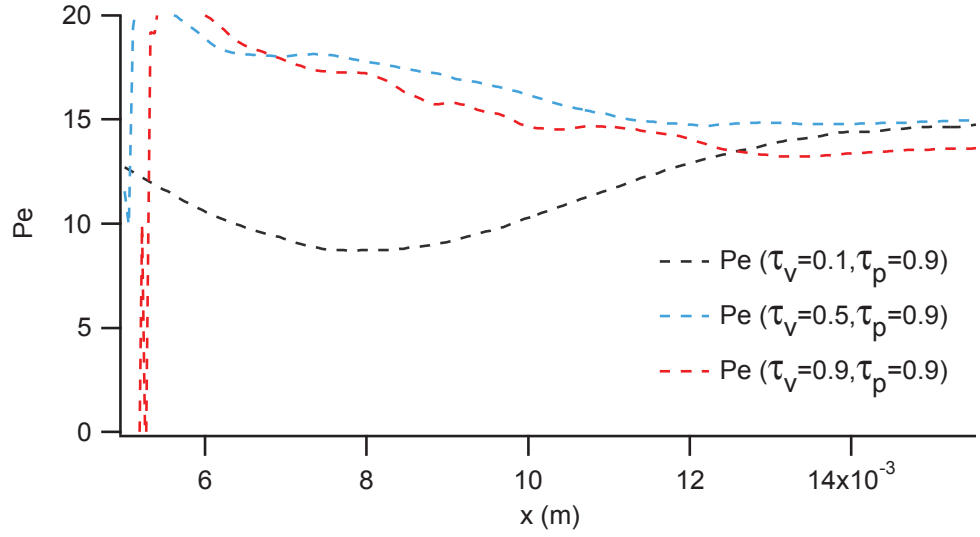


FIGURE 5.7 – Nombre de Peclet pour $\tau_p = 0.9$ fixé

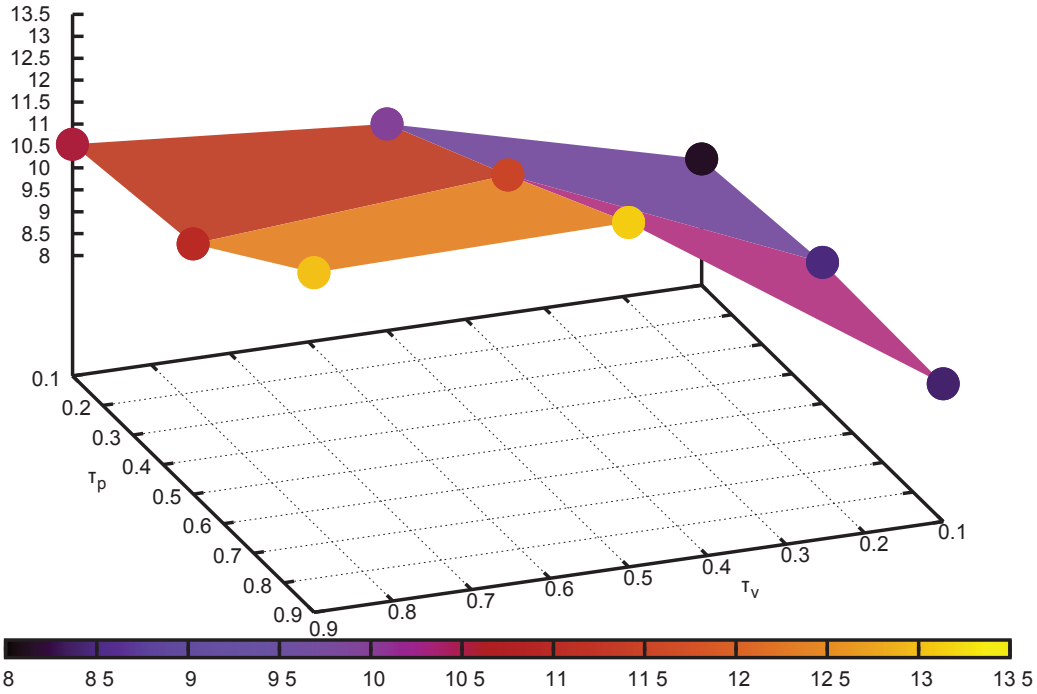


FIGURE 5.8 – Représentation 3D des Peclets minimums, mise en valeur de la forme en V

Cette tendance s'observe bien lors du tracé 3D des minima de chaque simulation (fig 5.8). Ainsi, il apparait une forme en V, avec deux tendances :

– $\searrow \tau_p \implies \searrow Pe$

– $\tau_v = 0.1 \longmapsto 0.5 \implies \nearrow Pe$ et $\tau_v = 0.5 \longmapsto 0.9 \implies \searrow Pe$

Ces tendances vont par ailleurs se retrouver dans la valeur des flux.

5.3.2 Évolution du flux à la paroi (DNS et modèle)

Le calcul du flux, utilisant la même méthode que dans les chapitres précédents, indique ici le stress thermique engendré par la flamme sur la paroi.

Évolution de τ_p :

Le cas $\tau_v = 0.1$ montre des valeurs similaires (fig 5.9), avec tout de même un flux plus prononcé pour le cas $\tau_p = 0.1$ se déclenchant en avance des deux autres. Les cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$ montrent des comportements similaires (fig 5.10 et 5.11), et l'absence du cas $\tau_v = 0.9$ avec $\tau_p = 0.1$ ne permet pas de se prononcer sur la convergence du dernier cas. Cependant, les courbes à $\tau_p = 0.5$ et à $\tau_p = 0.9$ convergent à chaque fois, tandis que le cas $\tau_p = 0.1$, si l'on extrapole son comportement au cas $\tau_v = 0.9$, montre un flux bien supérieur, du même ordre de grandeur que les cas à $\tau_v = 0.1$.

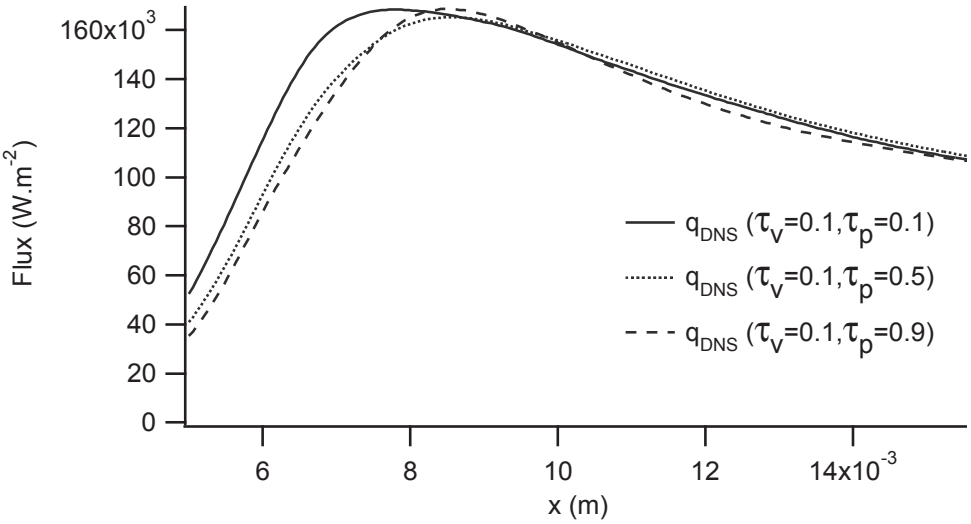


FIGURE 5.9 – Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.1$ fixé

Évolution de τ_v :

Les flux montrent ici un comportement cohérent aux vues des distances à la paroi. Les cas $\tau_v = 0.1$ montrent des flux maximums (fig 5.12 et 5.13), tandis que les cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$ convergent et montrent des flux similaires, plus étalés sur la longueur. Ce comportement s'explique facilement par la dispersion des gouttes et leur résistance au front de flamme, causant une évaporation plus dispersée et un front de flamme moins réactif et plus étalé.

La vue 3D des flux permet une représentation plus simple du stress engendré sur la paroi par les différents cas étudiés (fig 5.14), et montre une forme en V pouvant se résumer sous la forme :

- $\searrow \tau_p \implies \nearrow q_w$
- $\tau_v = 0.1 \longmapsto 0.5 \implies \searrow q_w$ et $\tau_v = 0.5 \longmapsto 0.9 \implies \nearrow q_w$

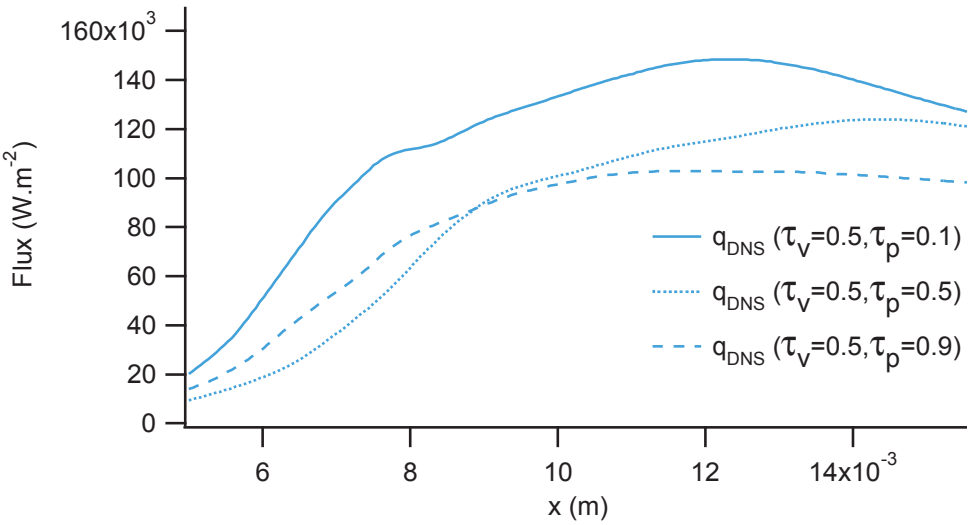


FIGURE 5.10 – Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.5$ fixé

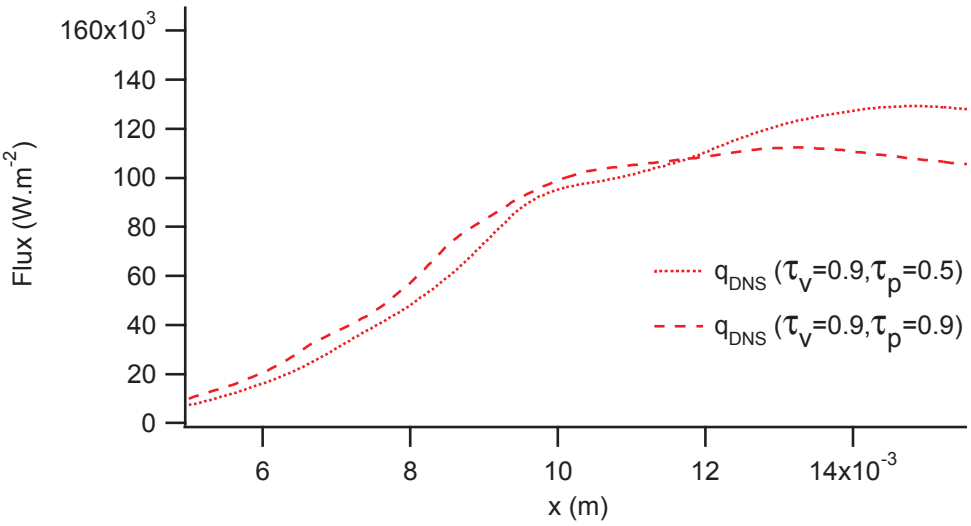


FIGURE 5.11 – Flux à la paroi pour $\tau_v = 0.9$ fixé

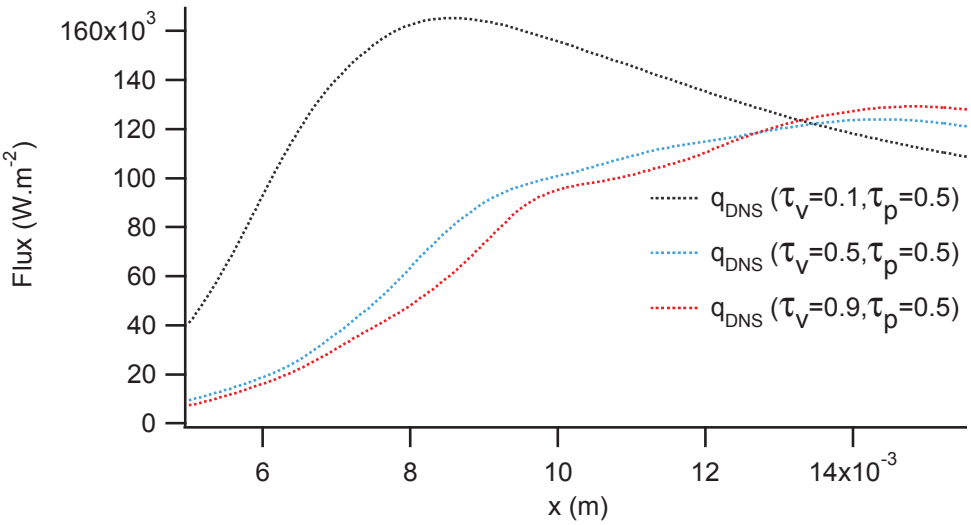


FIGURE 5.12 – Flux à la paroi pour $\tau_p = 0.5$ fixé

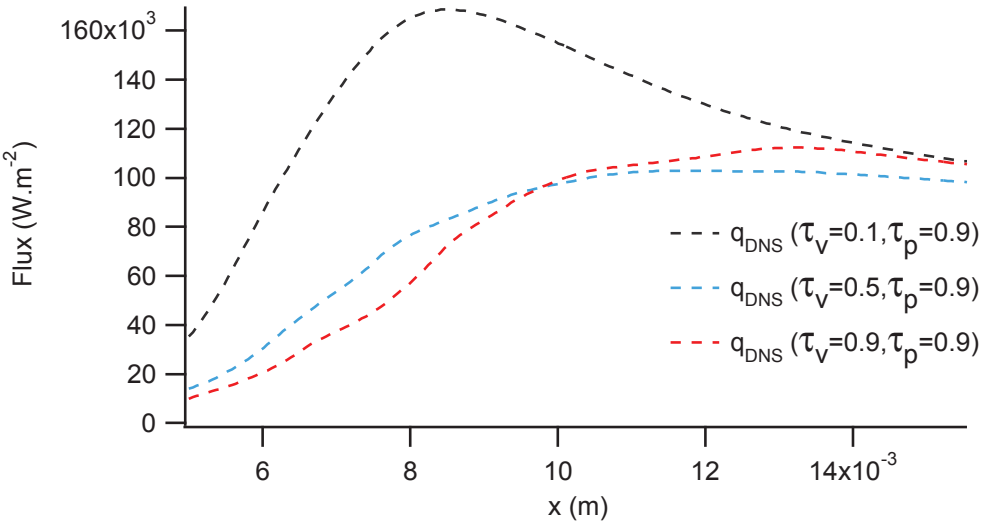


FIGURE 5.13 – Flux à la paroi pour $\tau_p = 0.9$ fixé

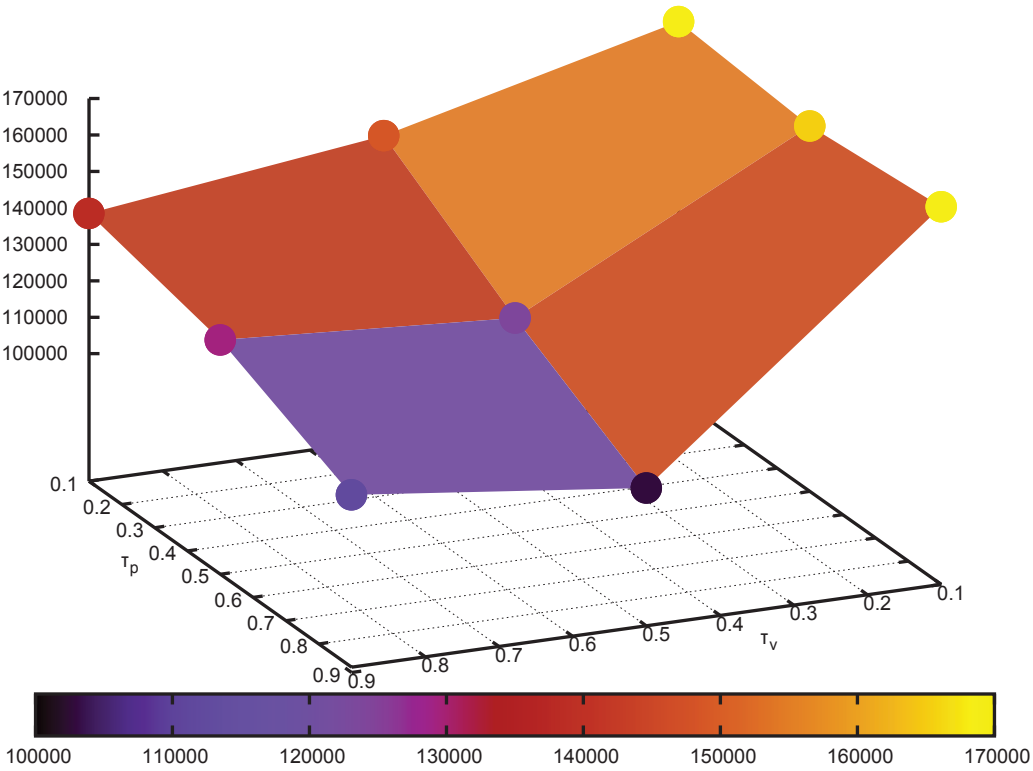


FIGURE 5.14 – Représentation 3D des Flux maximums, mise en valeur de la forme en V

5.4 Étude visualisation 2D

5.4.1 Pénétration du front de flamme

Afin d'étudier la pénétration des gouttes à travers le front de flamme, la méthode la plus efficace consiste à tracer le champ de densité de gouttes par maille, et d'y superposer les iso-contours du taux de réaction, ce dernier étant coloré en fonction de son intensité.

Le cas $\tau_v = 0.1$ à $\tau_p = 0.5$ montre un front de flamme similaire à une simulation en pré-mélange (fig 5.15). La densité de gouttes montre une évaporation rapide, et une disparition des gouttes avant la traversée du front de flamme. Les rares gouttes parvenant à l'intérieur de la flamme (très probablement dans des zones d'extinction locale causée par la turbulence) s'évaporent avant d'atteindre la position moyenne du centre de la flamme. IL est possible de remarquer ici des poches réactives plus intenses juste avant l'interaction avec la paroi, non explicable pour le moment.

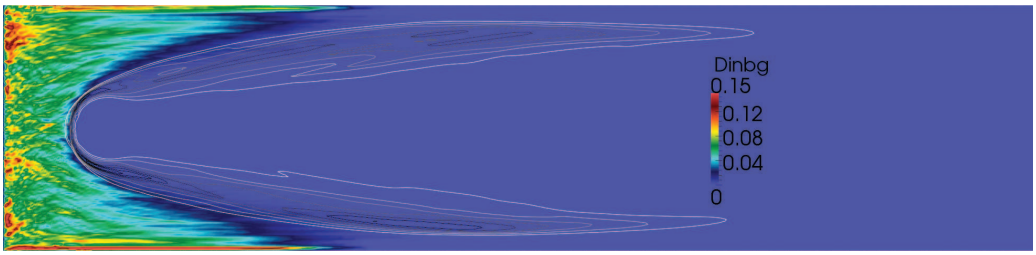


FIGURE 5.15 – Valeurs pour $\tau_v = 0.1$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible)

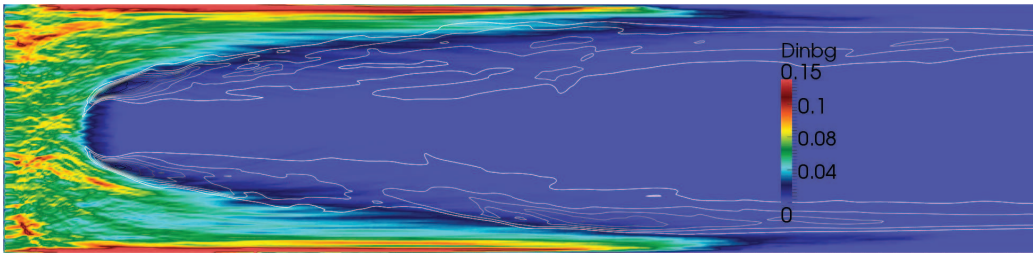


FIGURE 5.16 – Valeurs pour $\tau_v = 0.5$ et $\tau_p = 0.5$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible)

Le cas $\tau_v = 0.5$ à $\tau_p = 0.5$ montre une flamme perturbée ainsi que le passage de gouttes à travers la zone moyenne du front réactif (fig 5.16). La densité de gouttes est ici forte, avec notamment de nombreuses gouttes piégées entre la flamme et la paroi. A noter la présence de gouttes pendant et après la phase d'interaction avec la paroi, le front de flamme plus éloigné de la paroi laisse ici passer de nombreux paquets de gouttes.

Le cas extrême $\tau_v = 0.9$ à $\tau_p = 0.9$ (fig 5.17), avec le taux d'évaporation le plus lent et la balistique de gouttes la plus forte, montre une flamme similaire au cas précédent, avec plus de gouttes à travers le front réactif et une importante quantité de paquets de gouttes entre la flamme et la paroi pendant l'interaction.
Il est intéressant de remarquer la forte présence de gouttes le long de la paroi. Dans un cas de simulations couplées avec un solveur diphasique, les possibilités de création de films liquide semblent importantes, et ce, dés le cas $\tau_v = 0.5$. Ce film pourrait avoir des conséquences importantes sur les flux pariétaux.

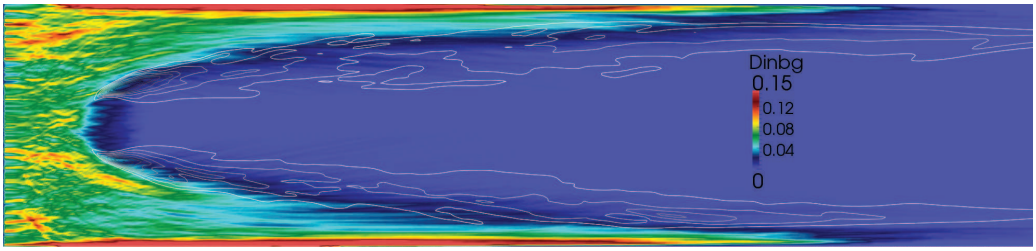


FIGURE 5.17 – Valeurs pour $\tau_v = 0.9$ et $\tau_p = 0.9$. Champ : Densité de gouttes par mailles. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible)

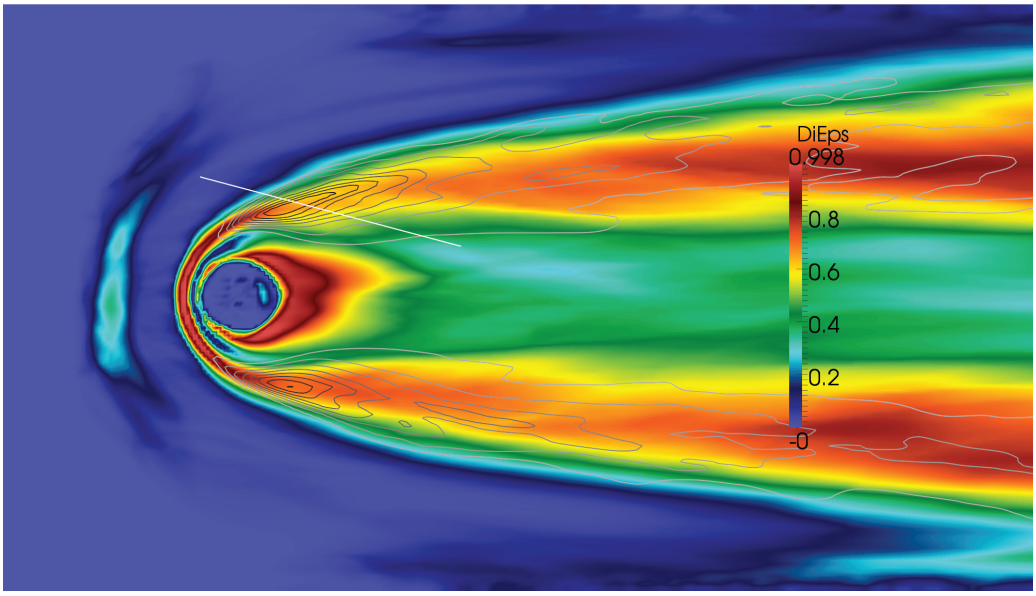


FIGURE 5.18 – Coupe sur le front de flamme, mise en valeur des 3 zones réactives. Champ : indice de Takeno ξ. Lignes : iso-valeurs du taux de réaction (noir réaction max, blanc réaction faible)

5.4.2 Flamme de Diff/Pre

Il est possible d'introduire un paramètre permettant la distinction des fronts de flammes de type flamme de pré-mélange et de type flamme de diffusion. De façon désormais classique, ce paramètre d'indice de flamme de Takeno [Yakhot et al. 1986] normalisé peut se définir selon :

$$\xi = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\nabla Y_F}{|\nabla Y_F|}.\frac{\nabla Y_O}{|\nabla Y_O|}\right) \tag{5.4}$$

Lorsque ξ s'approche de 0, la flamme est en régime de flamme de diffusion, et inversement, lorsque ξ s'approche de 1, la flamme est en régime de pré-mélange.

Le tracé d'une coupe permet ici la représentation de ce phénomène (fig 5.18). Il est en effet possible d'observer ici trois phases (fig 5.19) :

– La concentration de Y_F augmente, mais l'énergie nécessaire à la combustion n'est pas suffisante pour démarrer la réaction.

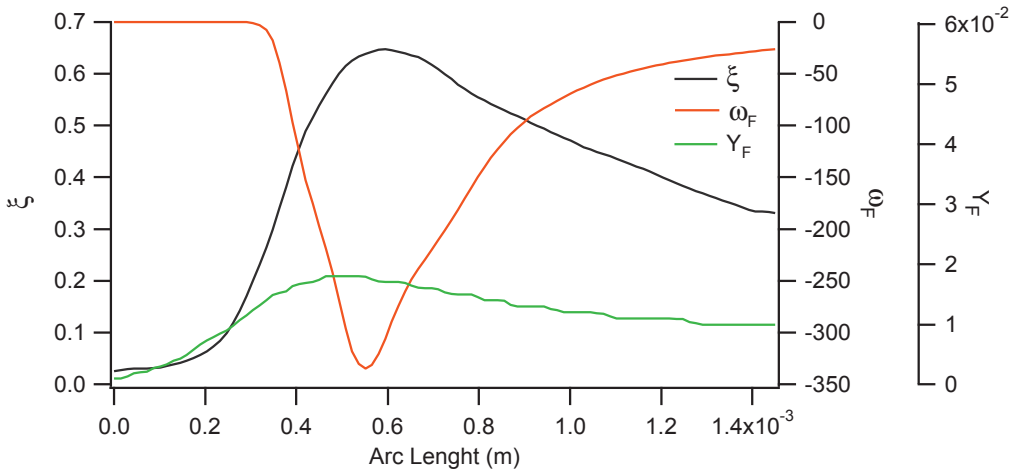


FIGURE 5.19 – Tracé des paramètres de régime de flamme le long de la coupe (fig 5.18)

– La réaction démarre, plus proche d'un cas diffusif que d'un cas de pré-mélange, puis s'accélère pour transiter vers une flamme de type pré-mélange et atteint son maximum d'intensité.
– La concentration de Y_F commence à diminuer, et le taux de réaction diminue pour revenir vers une flamme moins intense, tandis que la valeur de ξ transite à nouveau vers une flamme en régime de diffusion.

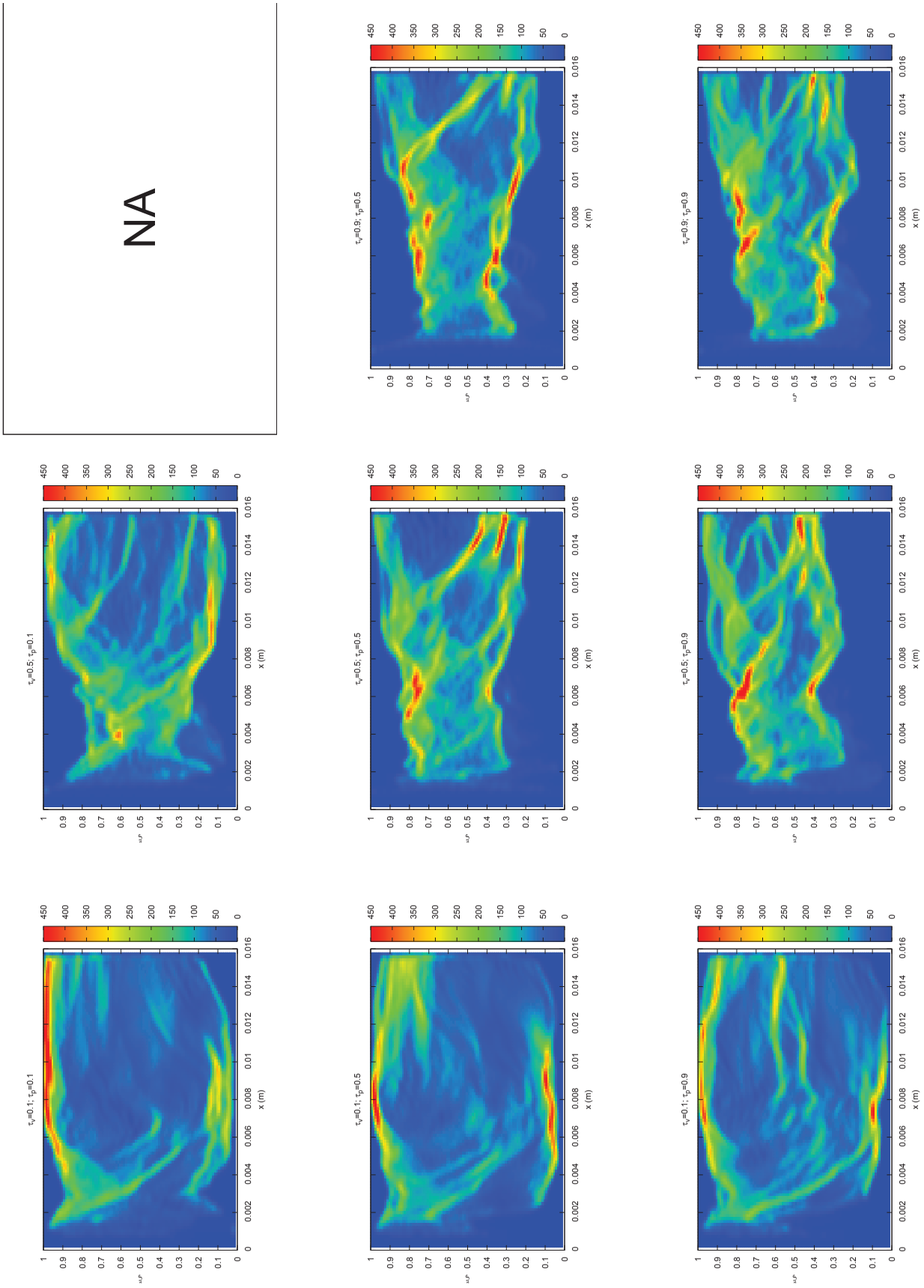
Le front de flamme réactif se compose donc d'une zone en régime de pré-mélange entourée de deux zones en régime de diffusion, la zone après passage du pic réactif maximum étant plus épaisse que la première.

Il est aussi possible de tracer la valeur moyenne, dans tout le champ, du taux de réaction en fonction de ξ et de x, y, et Y_F. Cela donne une idée de la position des différents types de régime de flamme, ainsi que leurs liens avec le mélange.
Les valeurs observées ici sont pour les cas $\tau_v = 0.1, 0.5, 0.9$ à $\tau_p = 0.5$ fixé, ce dernier n'influant que peu sur les rendus observés.

L'analyse se concentre ici sur les tracés de la quantité de flamme réactive suivant ξ et x (figs *regroupement 1*, table 5.1).

Le cas $\tau_v = 0.1$ ne montre pas d'évolution remarquable avec la variation de τ_p. Il est cependant possible de noter la dominance du régime de pré-mélange dans le cas $\tau_p = 0.1$ par rapport aux deux autres.
Le passage à $\tau_v = 0.5$ montre un resserrement des valeurs vers $\xi = 0.55$, avec disparition des extremums, à part pour $\tau_p = 0.1$.
$\tau_v = 0.9$ ne montre pas d'évolution particulière par rapport à $\tau_v = 0.5$, malgré une sensible baisse des valeurs vers $\xi = 0.5$.
Pour finir, il est important de noter que le point chaud, en début de domaine, n'impacte pas sur les résultats car le taux de réaction l'entourant est quasi nul. Cette remarque sera utile par la suite.

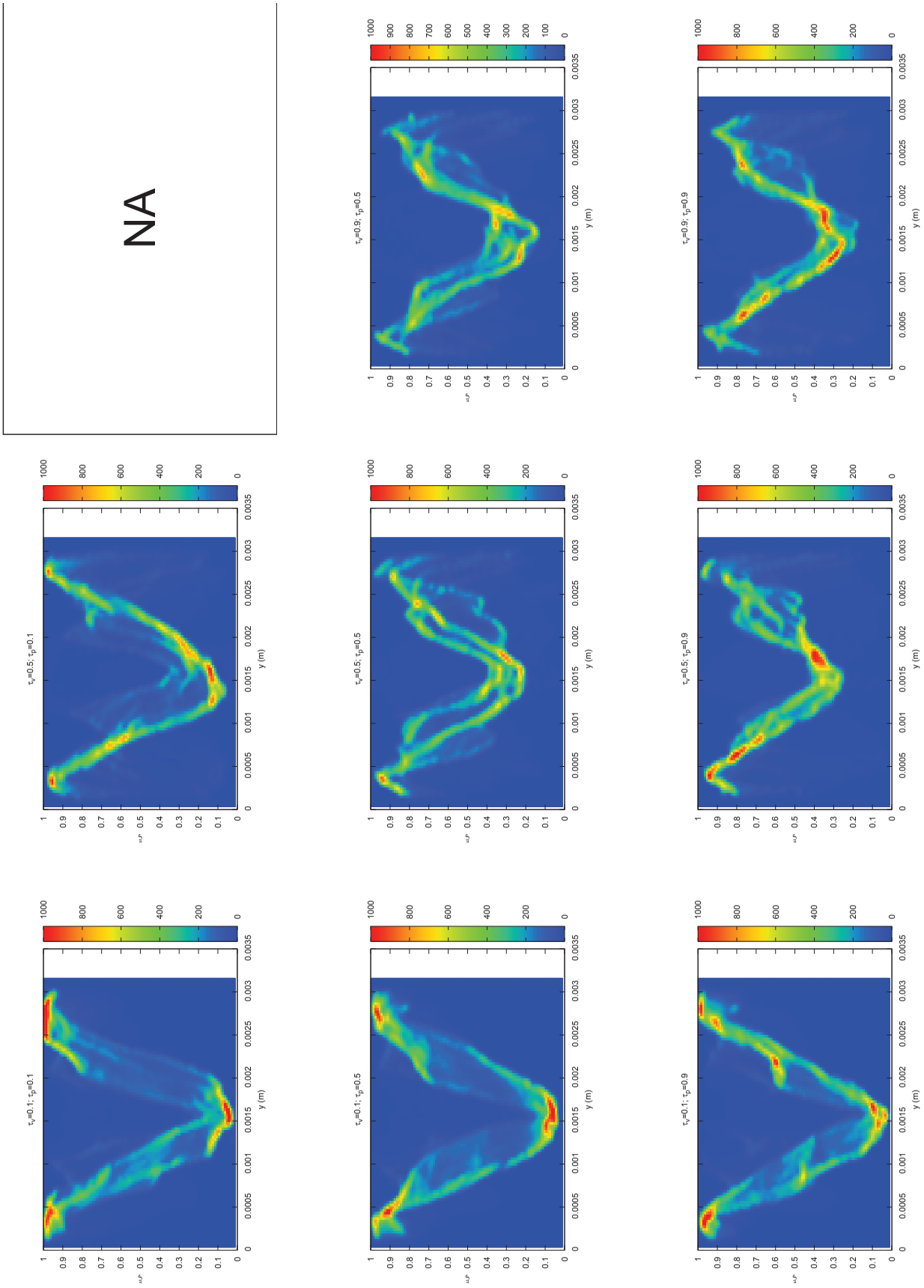
TABLE 5.1 – Scatters suivant x et ξ, *Regroupement 1*



Le tracé des profils suivants y montre des tendances marquées (figs *regroupement 2*, table 5.2). Le régime de flamme en pré-mélange se concentre sur les bords des parois, tandis que le régime de diffusion a lieu principalement dans le centre du domaine. A noter les distances de coincement parfaitement marquées, ainsi que la légère pente de retour vers un régime de diffusion dans la zone de coincement. Il est aussi possible de remarquer deux trainées séparées par une zone non réactive que nous n'avons pas pu analyser faute de temps. Pour finir, comme vu précédemment, le régime de flamme de diffusion dans la zone centrale du canal n'est pas dû au point chaud directement.

Le cas $\tau_v = 0.1$ ne montre pas d'évolution majeure avec l'évolution de τ_p ici. Le passage à $\tau_v = 0.5$ montre la même tendance que précédemment, à savoir un resserrement sur $\xi = 0.55$, avec la disparition des extremums, l'augmentation de τ_p apportant la disparition des régimes totalement pré-mélange ou diffusion au profit d'un régime hybride. Les cas à $\tau_v = 0.9$ ne montrent eux pas de nette évolution, avec tout de même une diminution de ξ moyen, soit le passage vers un régime plus diffusif.

TABLE 5.2 – Scatters suivant y et ξ, *Regroupement 2*



L'évolution des valeurs suivant Y_F (figs *regroupement 3*, table 5.3) montre une concentration du régime diffusif tandis que les flammes en régime de prémélange sont étalées sur un plus grand domaine de Y_F, d'où l'apparence moins forte de ce régime. Il est ainsi possible de poser la tendance suivante : $\nearrow Y_F \longrightarrow \nearrow \xi$.
Le cas $\tau_v = 0.1$ ne montre pas de différences majeures pour l'évolution de τ_p. Le passage à $\tau_v = 0.5$ montre un resserrement des valeurs comme dans les cas précédents. Les valeurs s'estompent pour $\tau_v = 0.9$, signe d'une étalement des régimes. Il est aussi possible de remarquer une légère baisse de ξ moyen.

5.5 Modèle d'interaction

L'objectif de cette section est de tester le comportement du modèle développé par IFPen dans le cas de simulations lagrangiennes. Malgré l'importance des fluctuations observées pour ces modèles, notamment à cause du fort plissement causé par les gouttes, seule la valeur intégrée intéressera pour le test du modèle.

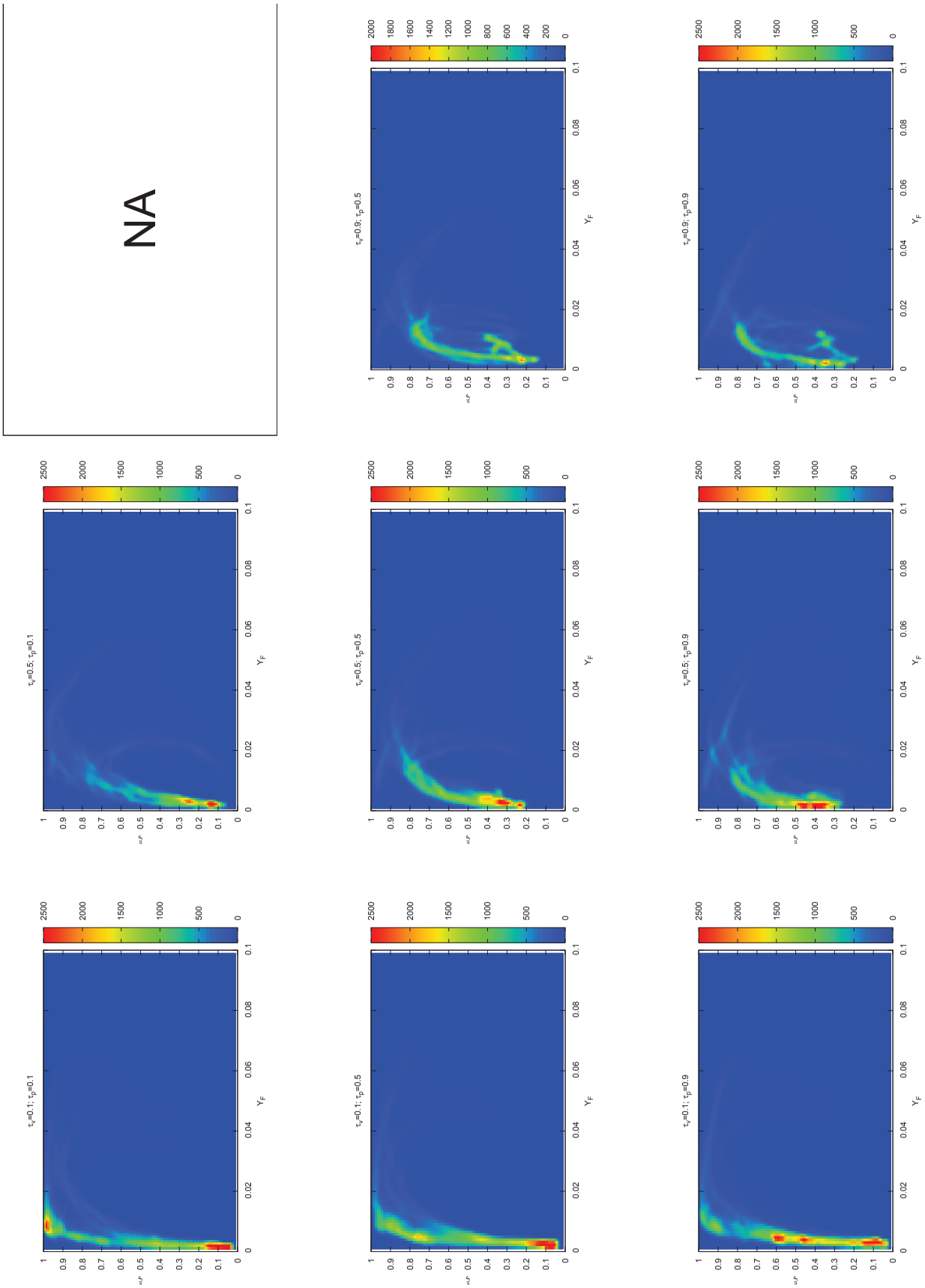
5.5.1 Flux longitudinaux

Le calcul des flux longitudinaux repose sur les mêmes équations que celles vues précédemment (chapitre 3).
Pour le cas $\tau_v = 0.1$, la valeur du flux d'interaction surestime le flux DNS d'environ $15 - 18\%$ (fig 5.20). Le flux se résorbe ensuite plus rapidement que le flux DNS, et la forme générale laisse présager une valeur intégrée de q_I conforme aux attentes.

Le cas $\tau_v = 0.5$ montre des valeurs fortement perturbées (manque de convergence), mais donne cependant les tendances observables (fig 5.21). Les flux maximums sont surestimés de plus de 40% par endroit. A noter toutefois la bonne concordance des croissances et décroissances du flux, données par les paramètres α et Q, le plissement Ξ étant la cause des perturbations. Le domaine n'est ici pas assez grand pour les simulations à faible évaporation, la flamme sortant du domaine conçu pour la configuration monophasique. Il est encore possible d'observer le point d'inflexion correspondant au flux maximum. Cet aspect de distance sera à prendre en compte lors du calcul des valeurs intégrées.

Le cas $\tau_v = 0.9$ sort du domaine d'étude (fig 5.22), mais reste dans les mêmes ordres de grandeurs que le cas $\tau_v = 0.5$, comme observé dans les précédentes études. Le flux modélisé est

TABLE 5.3 – Scatters suivant Y_F et ξ, *Regroupement 3*



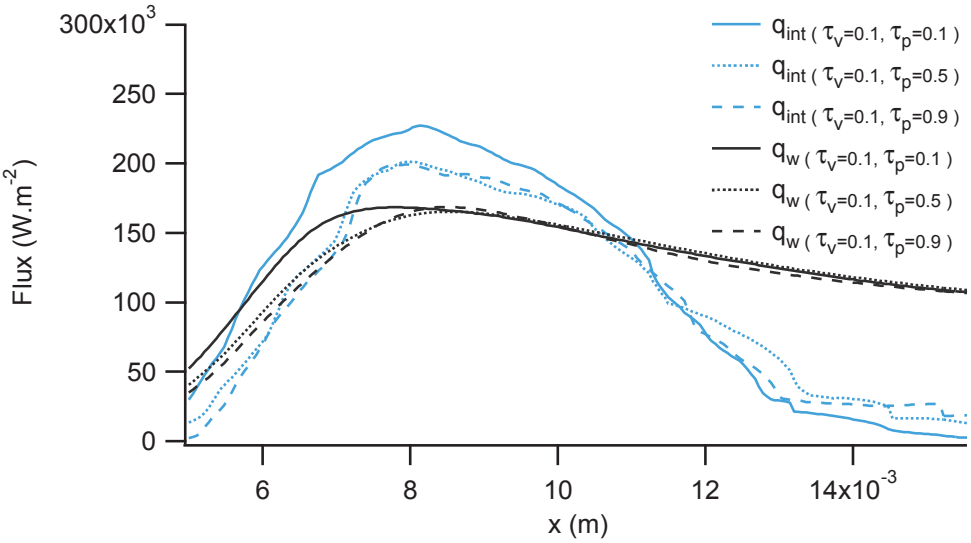


FIGURE 5.20 – Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.1$ et différentes valeurs de τ_p

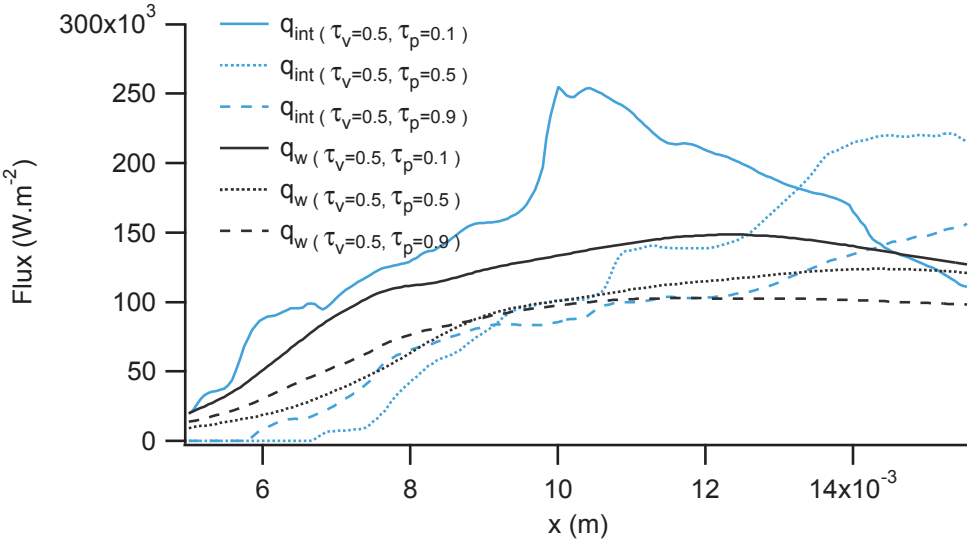


FIGURE 5.21 – Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.5$ et différentes valeurs de τ_p

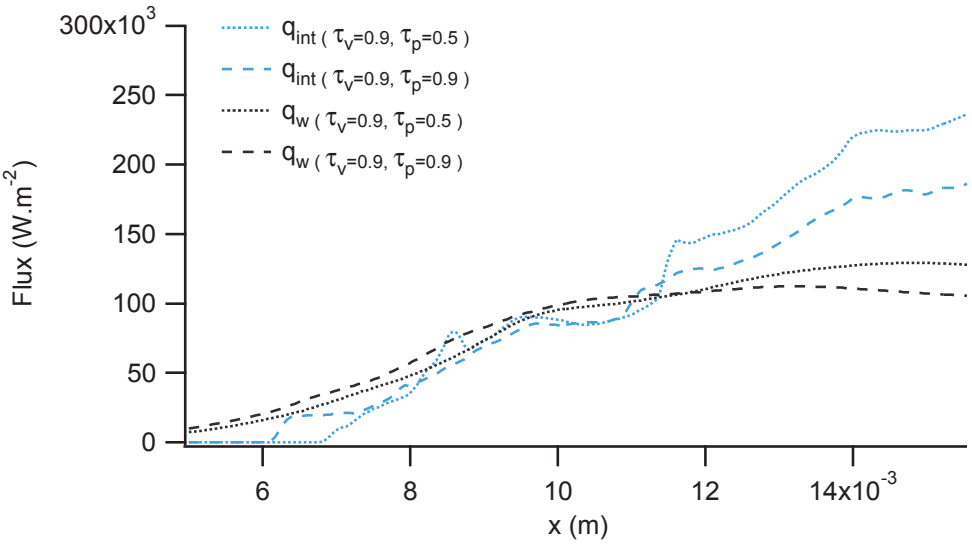


FIGURE 5.22 – Flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.9$ et différentes valeurs de τ_p

tout à fait compatible avec le flux DNS durant la phase de début d'interaction, puis surestime le pic d'environ 40%.

Il est maintenant intéressant d'intégrer les différents flux afin d'estimer leur comportement en situations RANS. Point important : l'ensemble du domaine n'étant pas présent pour les cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$, il sera essentiel de prendre en compte cet aspect.

5.5.2 Flux longitudinaux

Le cas $\tau_v = 0.1$ vois ses flux converger pour toutes les valeurs de τ_p (fig 5.23). Les flux d'interaction modélisés donnent une valeur inférieure, ce résultat étant cohérent en l'absence de la composante "loi de paroi". Les valeurs sont par ailleurs stabilisées pour les modèles, et leur valeur finale est conforme au flux DNS.

Les cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$ donnent des profils similaires, et surestiment les valeurs (fig 5.24 et 5.25). Cependant, il est à prendre en compte que dans le cas $\tau_v = 0.1$, au même point d'interaction (pic de flux, en $x = 8mm$ pour $\tau_v = 0.1$, en $x = 12mm$ pour $\tau_v = 0.5$ et en $x = 15mm$ pour $\tau_v = 0.9$), la valeur du flux intégré est supérieur au flux DNS avant de repasser à des valeurs inférieures. Même si l'écart observé ici est bien supérieur (surtout pour $\tau_p = 0.1$), les valeurs semblent converger par la suite. Le comportement du modèle d'interaction devrait donc être cohérent avec le flux DNS.

Pour conclure sur le modèle, il est possible d'affirmer ici que son comportement donne d'excellents résultats pour $\tau_v = 0.1$. De plus, ses valeurs intégrées donnent, dans la limite de notre configuration d'étude, de bons résultats pour les cas $\tau_v = 0.5$ et $\tau_v = 0.9$, avec une réserve pour

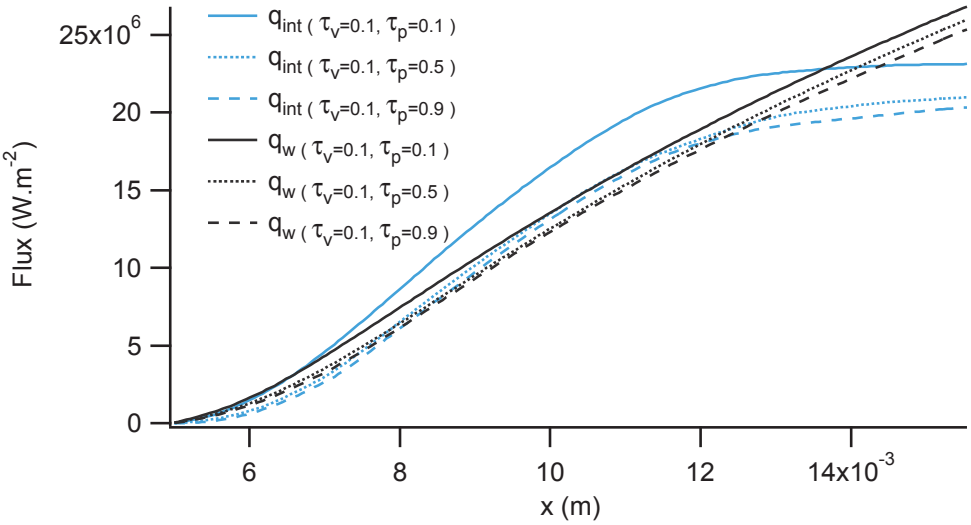


FIGURE 5.23 – Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.1$ et différentes valeurs de τ_p

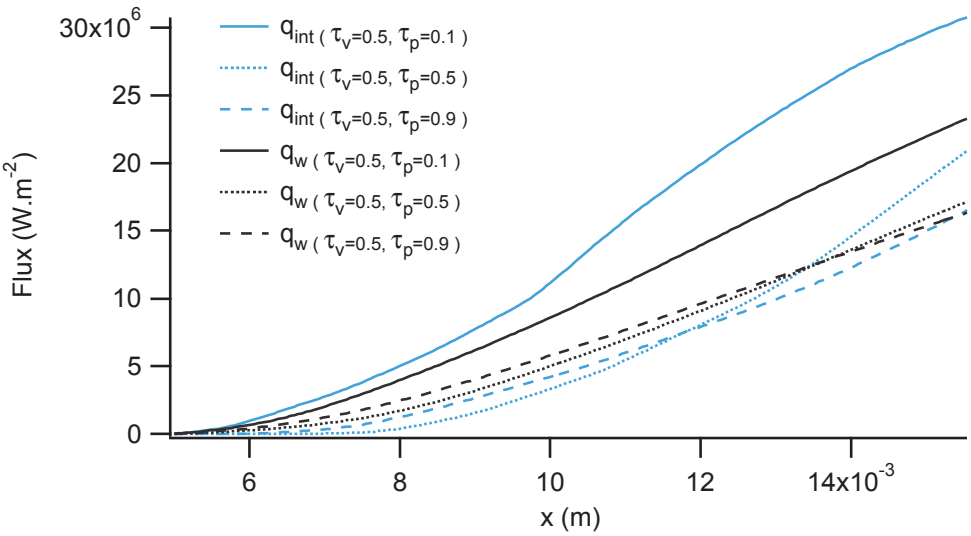


FIGURE 5.24 – Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.5$ et différentes valeurs de τ_p

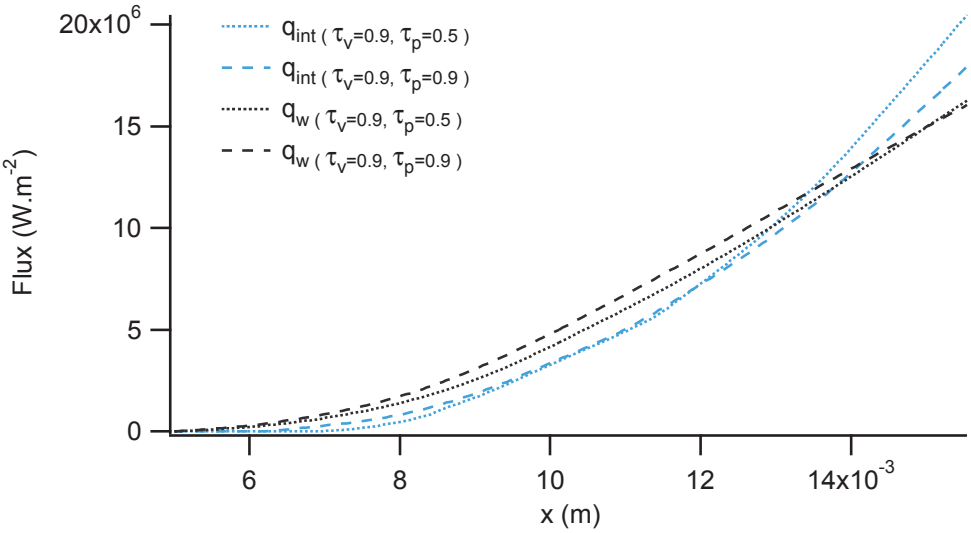


FIGURE 5.25 – Valeurs intégrées sur x du flux à la paroi, pour $\tau_v = 0.9$ et différentes valeurs de τ_p

les cas $\tau_p = 0.1$ dans ce domaine. Il sera intéressant de mener une étude ultérieure sur ces bases, avec prise en compte de l'étalement du front de flamme sur un domaine bien plus long.

5.6 Conclusion

Cette étude a donc permi l'analyse de l'impact du passage d'une injection monophasique à une injection sous forme de particules fluides sur l'interaction flamme/paroi. Les résultats ont mis en avant un étalement du front entrainant une distance flamme/paroi supérieure ainsi qu'un flux moindre.

L'apparition d'un régime de flamme diffusif a fortement impacté la structure de la flamme, et mérite une étude approfondie, notamment en terme de régime de flamme proche paroi.

Pour terminer, le modèle d'IFPen a montré un excellent comportement, et plus précisément dans le cas de fuel légers à évaporation rapide. Malheureusement, la faible taille du domaine de simulation n'a pas permis de conclure entièrement quand à l'aspect des résultats une fois les flux intégrés sur la longueur.

Conclusion Générale

Cette thèse a permis l'amélioration et l'optimisation de plusieurs points et ce dans de multiples domaines initialement éloignés.

Le second chapitre a mis en avant les importantes améliorations apportées au code de calculs, ainsi que les optimisations sur la réalisation de calculs dans le cadre des calculateurs parallèles, avec des facteurs d'accélération significatifs. Il a ainsi été possible d'observer des gains sur des opérations coûteuses, notamment :

- sur la résolution de Poisson avec un algorithme parallèle modifié permettant le scaling du code avec une efficacité de 0.6 pour 1024 processeurs par rapport aux 16 de référence
- sur les opérations de convolution avec un gain net de $2.49X$ en améliorant les échanges mémoire et en utilisant des instructions pré-câblées
- sur les calculs mathématiques avec une accélération de 34% sur la loi d'Arrhenius grâce à une librairie externe.

Le code Asphodèle a été entièrement parallélisé, et sa stabilité renforcée.

Le troisième chapitre a montré l'apport du modèle développé par IFPen, avec une prise en compte du pic de flux d'interaction synonyme d'une augmentation de plus de $0.2MW.m^{-2}$ par rapport au flux de référence donné par la loi de paroi. Une fois intégrées, les valeurs donnent un flux total cohérent avec le flux donné par la DNS. Le choix entre les 2 versions du modèle reste à faire, mais la proximité des résultats impose de plus amples investigations pour les départager, notamment en situation RANS.

Le quatrième chapitre, réalisé en partenariat avec l'IMFT, a permis la mise en évidence de l'importante corrélation entre le modèle eulérien et les simulations lagrangiennes dans un cas de calculs d'un jet plan turbulent anisotherme, avec une attention particulière sur l'injection

turbulente afin de faire correspondre les deux codes utilisés. Ce modèle montre d'excellents résultats pour des particules à faible ou moyenne inertie, mais diverge pour des cas à faible nombre de Stockes thermique($St_\theta = 8$). Il a ensuite donné lieu à une publication dans le journal "International Journal of Heat and Mass Transfer".

Le dernier chapitre a permis de montrer le comportement de l'interaction flamme paroi dans le cas d'un apport de fuel par particules avec suivit lagrangien. Cette étude est encore au stade d'essai, mais elle montre les bon résultats du modèle de IFPen dans un cas d'injection diphasique de combustible, ainsi que les différents régimes de flamme observables dans ce type de configuration. Ces données couvrent un vaste domaine de combustibles et permettront aux études futures de directement cibler le comportement à prévoir.

Il sera intéressant par la suite de mener de plus amples analyses, notamment en terme de dimensions de domaines afin de profiter d'une turbulence plus développée et de Reynolds plus élevés, la présente étude ayant été fortement limitée par les ressources de calcul.

Annexes

6.1 Annexe A, normalisation des équations de NS

Les grandeurs générales sont données ci-dessous :

$$\begin{aligned} x &= x_0 x^+ \qquad & e &= u_0^2 e^+ \\ u &= u_0 u^+ \qquad & T &= T_\infty T^+ \\ t &= \tfrac{x_0}{u_0} t^+ \qquad & p &= \rho_\infty \tfrac{R}{W_\infty} T_\infty p^+ \\ \rho &= \rho_\infty \rho^+ \end{aligned}$$

Afin de clarifier le texte, les notations suivantes seront adoptées :

$$\lambda^\bullet = \frac{C_p^+ \mu^+}{RePr} \quad , \quad D_k^\bullet = \frac{\mu^+}{\rho^+ ReSc_k} \quad , \quad \mu^\bullet = \frac{\mu^+}{Re} \tag{6.1}$$

6.1.0.1 Loi d'état

La première équation à adimensionner au sein d'un code faisant appel à la thermodynamique des fluides est l'équation d'état, dans notre cas l'équation des gaz parfaits.

La forme initiale donnée précédemment est la suivante :

$$p = \rho \frac{RT}{W}$$

Soit :

$$p = p_\infty p^+ = \rho_\infty \rho^+ \frac{RT_\infty T^+}{W_\infty W^+}$$

Or :

$$p_\infty = \rho_\infty \frac{RT_\infty}{W_\infty}$$

Donc :

Une fois, adimensionnée (cf Annexe A), l'équation devient :

$$p^+ = \rho^+ \frac{T^+}{W^+} \tag{6.2}$$

6.1.0.2 Vitesses de correction :

Afin d'éviter une non conservation de la masse et de **compenser la disparition numérique** de certaines espèces (notamment lors de chimies rapides), une vitesse de correction des espèces a été implémentée au sein du code Apshodele (une autre possibilité est d'utiliser une espèce tampon capturant les résidus) :

$$V_i^C = \sum_{k=1}^{N_S} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$$

(avec : $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ et $Re_0 = \frac{\rho_\infty u_0 x_0}{\mu_\infty}$)

$$\begin{aligned} V_i^C &= \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu_\infty \mu^+}{\rho_\infty \rho^+ Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_0 x_i^+} = u_0 \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu^+}{\rho^+ ReSc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \\ &= u_0 \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 V_i^{C+} \quad avec \quad V_i^{C+} = \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \end{aligned} \tag{6.3}$$

Sur le même principe, afin de respecter la conservation de l'énergie, une vitesse de correction de l'énergie est aussi présente au sein de code :

$$E_i^C = \rho \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$$

$$u_0^2 = M^2 \gamma_\infty (Cp_\infty - Cv_\infty) T_\infty = Cp_\infty T_\infty M^2 (\gamma_\infty - 1)$$

$$E_i^C = u_0 \rho_\infty \rho^+ \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 \rho_\infty \rho^+ Cp_\infty T_\infty \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k}^+ D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+}$$

Et donc :

$$E_i^C = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)} \rho^+ \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k}^+ D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)} E_i^{C+} \tag{6.4}$$

6.1.0.3 Conservation de la masse :

En partant de l'équation de la conservation de la masse donnée précédemment :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0$$

Et en remplaçant par les relations données au-dessus, il est possible de réécrire l'équation :

$$\frac{\partial \rho_\infty \rho^+}{\partial \frac{x_0}{u_0} t^+} + \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ u_0 u_i^+}{\partial x_0 x_i^+} = 0$$

Et donc :

Il est possible d'écrire l'équation normalisée :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0 \tag{6.5}$$

6.1.0.4 Conservation de la quantité de mouvement :

Sur le même principe que la conservation de la masse, en partant de l'équation donnée précédemment :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}$$

Et en remplaçant par les relations données au-dessus, il est possible de réécrire l'équation. Le terme de pression nécessite une démarche plus particulière. Si l'on considère le nombre de Mach :

$$M = \frac{u}{c} = \frac{u}{\sqrt{\gamma \frac{R}{W} T}} \Leftrightarrow \frac{R}{W} T = \frac{u^2}{\gamma M^2}$$

Il est alors possible d'adimensionner la pression :

$$\frac{\partial p}{\partial x_j} = \frac{\partial \rho_\infty \frac{R}{W_\infty} T_\infty p^+}{\partial x_0 x_j^+} = \frac{\partial \rho_\infty \frac{u_0^2}{\gamma_\infty M^2} p^+}{\partial x_0 x_j^+} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{\gamma_\infty M^2 x_0} \frac{\partial p^+}{\partial x_j^+}$$

Les autres termes ne présentent pas de difficultés majeures :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} = \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ u_0 u_j^+}{\partial \frac{x_0}{u_0} t^+} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0} \frac{\partial \rho^+ u_j^+}{\partial t^+}$$

$$\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ u_0^2 u_i^+ u_j^+}{\partial x_0 x_i^+} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0} \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+}$$

$$\begin{aligned}\tau_{ij} &= \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\\ &= \mu_\infty\mu^+\left(\frac{\partial u_0 u_i^+}{\partial x_0 x_j^+}+\frac{\partial u_0 u_j^+}{\partial x_0 x_i^+}\right)-\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_0 u_k^+}{\partial x_0 x_k^+}\delta_{ij}\\ &= \frac{\mu_\infty u_0}{x_0}\left[\mu^+\left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+}+\frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+}\right)-\frac{2}{3}\mu^+\frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+}\delta_{ij}\right]\end{aligned}$$

On isole alors le terme constant et μ^+ :

$$\frac{\mu_\infty\mu^+ u_0}{x_0}=\frac{\mu_\infty\mu^+ u_0^2\rho_\infty}{x_0 u_0\rho_\infty}=\frac{\mu^+ u_0^2\rho_\infty}{Re_0}=\mu^\bullet u_0^2\rho_\infty$$

Soit au final :

$$\frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_i}=\frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0}\frac{\partial\tau_{ij}^+}{\partial x_i^+}\quad avec\quad \tau_{ij}^+=\mu^\bullet\left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+}+\frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+}\right)-\frac{2}{3}\mu^\bullet\frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+}\delta_{ij}$$

En divisant l'équation de quantité de mouvement adimensionnée par $\frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0}$, on obtient la forme finale suivante :

Il est possible d'adimensioner cette équation (cf Annexe A), et d'obtenir la forme suivante :

$$\frac{\partial\rho u_j^+}{\partial t^+}+\frac{\partial\rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+}=-\frac{1}{\gamma M^2}\frac{\partial p^+}{\partial x_j^+}+\frac{\partial\tau_{ij}^+}{\partial x_i^+}\tag{6.6}$$

6.1.0.5 Conservation des espèces :

Encore une fois, il suffit de partir de l'équation dimensionnée de NS :

$$\frac{\partial\rho Y_k}{\partial t}+\frac{\partial\rho(u_i+V_{k,i})Y_k}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_i}\right]+\dot\omega_k$$

Et de remplacer par les relations précédentes :

$$\frac{\partial\rho_\infty\rho^+ Y_k}{\partial\frac{x_0}{u_0}t^+}+\frac{\partial\rho_\infty\rho^+ u_0(u_i^++V_{k,i}^+)Y_k}{\partial x_0 x_i^+}=\frac{\partial}{\partial x_0 x_i^+}\left[\rho_\infty\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_0 x_i^+}\right]+\dot\omega_k$$

Soit :

$$\frac{\rho_\infty u_0}{x_0}\frac{\partial\rho^+ Y_k}{\partial t^+}+\frac{\rho_\infty u_0}{x_0}\frac{\partial\rho^+(u_i^++V_{k,i}^+)Y_k}{\partial x_i^+}=\frac{\rho_\infty}{x_0^2}\frac{\partial}{\partial x_i^+}\left[\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_i^+}\right]+\dot\omega_k$$

Le terme de diffusion doit être traité un peu différemment ici : (rappel : $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ et $Re_0 = \frac{\rho_\infty u_0 x_0}{\mu_\infty}$)

$$\frac{\rho_\infty}{x_0^2} D = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0^2 u_0} \frac{\mu}{\rho Sc} = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\mu^+}{\rho^+ Sc} \frac{\mu_\infty}{x_0 u_0 \rho_\infty} = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\mu^+}{Re_0 \rho^+ Sc} = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} D^\bullet$$

Soit donc :

$$\frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k$$

Et donc :

Sur le même principe (Annexe A), l'équation adimensionnée des espèces apparait sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k^+ \tag{6.7}$$

Avec $\dot{\omega}_k = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \dot{\omega}_k^+$.

6.1.0.6 Conservation de l'énergie sensible :

Nous partons de la forme dimensionnée de la conservation de l'énergie sensible :

$$\frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_{su}}{\partial x_i} = -\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{es}$$

$$e_s = \int_{T_0}^{T} Cp dT - \frac{RT}{W}$$

$$e_s = \int_{T_\infty T_0^+}^{T_\infty T^+} Cp_\infty Cp^+ d(T_\infty T^+) - \frac{R_\infty R^+ T_\infty T^+}{W_\infty W^+} = Cp_\infty T_\infty e_s^+$$

Terme de gauche :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_{su}}{\partial x_i} &= \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ Cp_\infty T_\infty e_{su}^+}{\partial \frac{x_0}{u_0} t^+} + \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ u_0 u_i^+ Cp_\infty T_\infty e_{su}^+}{\partial x_0 x_i^+} \\ &= \frac{\rho_\infty Cp_\infty T_\infty u_0^3}{x_0 u_0^2} \left(\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} \right) \end{aligned}$$

Or, on a :

$$u_0^2 = M^2\gamma_\infty(Cp_\infty - Cv_\infty)T_\infty = Cp_\infty T_\infty M^2(\gamma_\infty - 1)$$

Soit donc :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_{su}}{\partial x_i} &= \frac{\rho_\infty Cp_\infty T_\infty u_0^3}{x_0 u_0^2}\left(\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+}\right)\\ &= \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0 M^2(\gamma_\infty - 1)}\left(\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+}\right)\end{aligned}$$

Terme de diffusion thermique :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i} + E_i^C\right) &= \frac{\partial}{\partial x_0 x_i^+}\left(\lambda\frac{\partial T_\infty T^+}{\partial x_0 x_i^+} + \frac{u_0^3\rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)}E_i^{C+}\right)\\ &= \frac{\partial}{\partial x_0 x_i^+}\left(\frac{Cp_\infty T_\infty u_0^3\rho_\infty}{u_0^2}\frac{\lambda}{\rho_\infty Cp_\infty u_0 x_0}\frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + \frac{u_0^3\rho_\infty}{M^2(\gamma_\infty - 1)}E_i^{C+}\right)\end{aligned}$$

En utilisant la relation suivante donnée précédemment :

$$\lambda^\bullet = \frac{Cp^+\mu^+}{Re_0 Pr} = \frac{\lambda}{\rho_\infty Cp_\infty u_0 x_0}$$

Soit donc :

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i} + E_i^C\right) = \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0}\frac{1}{M^2(\gamma_\infty - 1)}\frac{\partial}{\partial x_i^+}\left(\lambda^\bullet\frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+}\right)$$

Terme de pression :

$$\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho_\infty \frac{R}{W_\infty} T_\infty p^+ u_0 u_i^+}{\partial x_0 x_i^+} = \frac{\partial \rho_\infty \frac{u_0^2}{\gamma_\infty M^2} p^+ u_0 u_i^+}{\partial x_0 x_i^+} = \frac{\rho_\infty u_0^3}{\gamma_\infty M^2 x_0}\frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+}$$

Pour finir il est nécessaire de traiter le terme de dissipation visqueuse, sur le même principe que pour la conservation de quantité de mouvement.

$$\begin{aligned}\tau_{ij} &= \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\\ &= \rho_\infty u_0^2\left[\mu^\bullet\left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+}\right) - \frac{2}{3}\mu^\bullet\frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+}\delta_{ij}\right] = \rho_\infty u_0^2\tau_{ij}^+\end{aligned}$$

Soit au final :

$$\frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} = \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0} \frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+}$$

En rassemblant tous ces termes, on obtient l'équation :

$$\frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0 M^2(\gamma_\infty - 1)} \left(\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} \right) = \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0} \frac{1}{M^2(\gamma_\infty - 1)} \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) - \frac{\rho_\infty u_0^3}{\gamma_\infty M^2 x_0} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} + \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0} \frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+} + \dot{\omega}_e s$$

Ce qui peut nettement se simplifier pour obtenir la forme finale :
La forme adimensionnée de l'équation est alors la suivante (Annexe A) :

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} \tag{6.8}$$

$$+ M^2(\gamma_\infty - 1) \frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+} + \dot{\omega}_e s^+ \tag{6.9}$$

Avec ici : $\dot{\omega}_e s^+ = \frac{x_0}{\rho_\infty u_0^3} M^2(\gamma_\infty - 1) \dot{\omega}_e s$

6.2 Annexe B : Calcul des coefficients du DF4

Developmement en série de Taylor :

$$f_{n+b} = \frac{(b * \Delta_x)^{k-1}}{(k-1)} f^{k-1} \tag{6.10}$$

$$
\begin{aligned}
f_{n-2} &= f_n^0 - 2\Delta_x f_n^1 + 2\Delta_x^2 f_n^2 - \frac{4\Delta_x^3}{3} f_n^3 + \frac{2\Delta_x^4}{3} f_n^4 + O(\Delta_x^5) \\
f_{n-1} &= f_n^0 - \Delta_x f_n^1 + \frac{\Delta_x^2}{2} f_n^2 - \frac{\Delta_x^3}{6} f_n^3 + \frac{\Delta_x^4}{24} f_n^4 + O(\Delta_x^5) \\
f_{n+0} &= f_n^0 \\
f_{n+1} &= f_n^0 + \Delta_x f_n^1 + \frac{\Delta_x^2}{2} f_n^2 + \frac{\Delta_x^3}{6} f_n^3 + \frac{\Delta_x^4}{24} f_n^4 + O(\Delta_x^5) \\
f_{n+2} &= f_n^0 + 2\Delta_x f_n^1 + 2\Delta_x^2 f_n^2 + \frac{4\Delta_x^3}{3} f_n^3 + \frac{2\Delta_x^4}{3} f_n^4 + O(\Delta_x^5)
\end{aligned}
$$

Sous forme matricielle :

$$
\begin{pmatrix} f_{n-2} \\ f_{n-1} \\ f_n \\ f_{n+1} \\ f_{n+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -2\Delta_x & 2\Delta_x^2 & -\frac{4\Delta_x^3}{3} & \frac{2\Delta_x^4}{3} \\ 1 & -\Delta_x & \frac{\Delta_x^2}{2} & -\frac{\Delta_x^3}{6} & \frac{\Delta_x^4}{24} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \Delta_x & \frac{\Delta_x^2}{2} & \frac{\Delta_x^3}{6} & \frac{\Delta_x^4}{24} \\ 1 & 2\Delta_x & 2\Delta_x^2 & \frac{4\Delta_x^3}{3} & \frac{2\Delta_x^4}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_n^0 \\ f_n^1 \\ f_n^2 \\ f_n^3 \\ f_n^4 \end{pmatrix}
$$

Nous cherchons ici la dérivé première, soit f_n^1. Il suffit donc d'inverser le système pour obtenir les coeficients voulus.

Methode d'inversion : afin de rendre le calcul peu couteux en temps, on déplace les Δ_x^k sur le vecteur de droite. La matrice résultante est alors inversible soit par un système simple, soit avec une calculatrice formel. On trouve donc au final :

$$
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12} & -\frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{12} \\ -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & 0 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} \\ -\frac{1}{2} & 1 & -2.5 & -1 & \frac{1}{2} \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{n-2} \\ f_{n-1} \\ f_n \\ f_{n+1} \\ f_{n+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_n^0 \\ f_n^1 \Delta_x \\ f_n^2 \Delta_x^2 \\ f_n^3 \Delta_x^3 \\ f_n^4 \Delta_x^4 \end{pmatrix}
$$

Soit donc pour le cas qui nous interesse :

$$
f_n^1 = f'_n = \frac{f_{n-2} - 8f_{n-1} + 8f_{n+1} - f_{n-2}}{12\Delta_x} \tag{6.11}
$$

Sur le même principe, il est possible de retrouver les valeurs des coeficients pour les dérivées premières décentrées, et les coefficents pour les dérivées secondes centrées et décentrées :

forme de la dérivée première : $f'(x_i) = \frac{\sum a_k f(x_{i+k})}{12h}$

x_{i-4}	x_{i-3}	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	x_{i+3}	x_{i+4}	Erreur
3	-16	36	-48	25					$h^4/5$
	-1	6	-18	10	3				$h^4/20$
		1	-8	0	8	-1			$h^4/30$
			-3	-10	18	-6	1		$h^4/20$
				-25	48	-36	16	-3	$h^4/5$

Forme de la dérivée seconde : $f''(x_i) = \frac{\sum a_k f(x_{i+k})}{12h^2}$

x_{i-5}	x_{i-4}	x_{i-3}	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	x_{i+3}	x_{i+4}	x_{i+5}	Erreur
-10	61	-156	214	-154	45						$137h^4/180$
	1	-6	14	-4	-15	10					$13h^4/180$
			-1	16	-30	16	-1				$h^4/90$
				10	-15	-4	14	-6	1		$13h^4/180$
					45	-154	214	-156	61	-10	$137h^4/180$

Bibliographie

A.A. Adamczyk and G.A. Lavoie, Laminar Head on Flame Quenching : A Theoretical Study, SAE Transactions 87 (1978), SAE Paper 780969.

John C. Adams, Paul N. Swarztrauber, Roland Sweet, 2004, FISHPACK - Efficient FORTRAN Subprograms for the Solution of Separable Elliptic Partial Differential Equations

K. Akselvollb, T. Poinsot, J.H. Ferzigerb, G. Bruneaux 1996, Combustion and Flame Volume 107, Issues 1–2, October 1996, Pages 27–36, IN3, 37–44 Flame-wall interaction simulation in a turbulent channel flow

T. Alazard. Low mach number limit of the full navier-stokes equations. ArXiv., 2005.

A.S. Almgren, J.B. Bell, C.A. Rendleman and M. Zingale. Low mach number modeling of type 1a supernovae, II energy evolution. ArXiV, 2006.

A.S. Almgren, J.B. Bell, C.A. Rendleman and M. Zingale. Low mach number modeling of type 1a supernovae. ArXiV, 2005.

Tareq M. Alshaalan, Christopher J. Rutland 1998, Symposium (International) on Combustion Volume 27, Issue 1, 1998, Pages 793–799 Turbulence, scalar transport, and reaction rates in flame-wall interaction

C. Angelberger, Contributions à la modélisation de l'interaction flamme-paroi et des flux pariétaux dans les moteurs à allumage commandé, thèse Cerfacs / PSA, 1997

C. Angelberger, T. Poinsot, B. Delhaye, Improving near-wall combustion and wall heat transfer modelling in SI engine computations, SAE paper 972881, 1997.

W.D. Bachalo, Symposium (International) on Combustion, Volume 25, Issue 1, 1994, Pages 333–344, Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion, Injection, dispersion, and combustion of liquid fuels

C. Bailly and G. Comte-Bellot. Turbulence. CNRS Editions, 2003.

M. Baum and T. Poinsot. A direct numerical simulation code for studies of combustion phenomena. Technical Report 920201, Laboratoire EM2C du CNRS et de l'Ecole Centrale de Paris, 1992.

S. Benteboula, 2006, thèse 'Résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach : application à l'étude de l'anneau de vorticité à masse volumique variable' Univ. Marne la Vallée

R. Borghi et M. Champion, 'Modélisation et Théorie des Flammes', Edition Technip, 402 p., Publications de l'Institut Français du Pétrole, 2000.

Zakaria Bouali, 2010, Phd "Etude de l'auto-allumage dans un moteur avec prise en compte de la présence d'une phase liquide dispersée – développement de modèles de sous-maille."

Boulder *http* : *//amath.colorado.edu/courses*/7400/2005*Spr/notes/chap*2.*pdf*, 2005

B. Boust, J. Sotton, S.A. Labuda, M. Bellenoue 2007, Combustion and Flame Volume 149, Issue 3, May 2007, Pages 286–294 A thermal formulation for single-wall quenching of transient laminar flames

G. Bruneaux, Etude Asymptotique, Simulation Numérique Directe et Modélisation de l'Interaction Flamme Turbulente Prémélangée –Paroi, thèse IFP / Ecole Centrale Paris, 1996.

S. Chandrasekhar. Hydrodynamic and hydromagnetic stability. Oxford University Press., pages 11-14, 1961.

P. Chassaing. Turbulence en mécanique des fluides, Analyse du phénomène dans une perspective de modélisation à l'usage de l'ingénieur. Institut National Polytechnique de Toulouse, 2000

M. Chauvy, B. Delhom, J. Reveillon, F.-X. Demoulin, Flame/Wall Interactions : Laminar Study of Unburnt HC Formation, Flow Turb. and Combust. 84 (2010) 369-396.

J. Chergui, I. Dupays, D. Girou, P.-F. Lavallée, D. Lecas, P. Wautelet, MPI – Version

4.1 – Avril 2012

A. W. Cook and J. Riley. Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. Journal of Computational Physics, 129 :263 ?283, 1996.

F Dabireau, B Cuenot, O Vermorel, T Poinsot 2003, Combustion and Flame Volume 135, Issues 1–2, October 2003, Pages 123–133 Interaction of flames of H2 + O2 with inert walls

N. Daget 2006-03-21, CERFACS, Construction du spline cubique

A. De Lataillade, F. Dabireau, B. Cuenot, T. Poinsot 2002, Proceedings of the Combustion Institute Volume 29, Issue 1, 2002, Pages 775–779 Flame/wall interaction and maximum wall heat fluxes in diffusion burners

D.L. Dietrich, J.B. Haggard Jr., F.L. Dryer, V. Nayagam, B.D. Shaw, F.A. Williams, Symposium (International) on Combustion, Volume 26, Issue 1, 1996, Pages 1201–1207, Droplet combustion experiments in spacelab

Elgobashi, S. & Truesdell, G. 1992 Direct numerical simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. J. Fluid Mech. 242, 655–700.

O. Ezekoye, R. Greif, R. Sawyer, Increased surface temperature effects on wall heat transfer during unsteady flame quenching, in : 24thSymp. (Int.) on Combust., The Combustion Institute, 1992, pp. 1465–1472.

E. Feireisl and A. Novotny. The low mach number limit for the full navier-stokes-fourier system. Arch. Rational Mech. Anal., 186 :77 ?107, 2007.

C. Ferguson, J. Keck, On laminar flame quenching and its application to spark ignition engines, Combust. Flame 28 (1977) 197–205

C.R. Ferguson and J.C. Keck, Combust. Flame 28 (1977) 197-205

D. Feuchter, I. Heppner†, S.A. Sauter, G. Wittum, Bridging the gap between geo-

metric and algebraic multi-grid methods (extended version). 2003

F Foucher, S Burnel, C Mounaim-Rousselle, M Boukhalfa, B Renou, M Trinité 2003, Experimental Thermal and Fluid Science. Volume 27, avril 2003, Issue 4, Pages 431–437 Flame wall interaction : effect of stretch

I. Gallagher, « Autour des équations de Navier-Stokes » — Images des Mathématiques, CNRS, 2010.

A. Girard andJ.C. Leyer, Proc. of the Ninth ICODERS, Poitiers, 1983

A. Gruber, R. Sankaran, E.R. Hawkes and J.H. Chen, Turbulent flame-wall interaction : a direct numerical simulation study, J. Fluid Mech. 658 (2010) 5-32.

M. H. Gutknecht, A Brief Introduction to Krylov Space Methods for Solving Linear Systems, ETH Zurich, Seminar for Applied Mathematics. 2007

Z. Han et R.D. Reitz, A temperature wall function formulation for variable-density turbulent flows with application to engine heat transfer modeling, Intt. J. Heat Mass Transfer 40 (1997) 613-625.

J. Heywood, Internal Combustion Engine Fundamentals, Mc-Graw-Hill Eds, 1988.

A. Hujeirat, F.-K. Thielemann, J. Dusek and A. Nusser. Compressed low mach number flows in astrophysics : a non-linear newtonian numerical solver. Astronomy and Astro-physics, 2008.

Ilse C.F. Ipsen and Carl D. Meyer, The Idea Behind Krylov Methods. 1982

K.S. Kediaa, H.M. Altayb, A.F. Ghoniemc 2011, Proceedings of the Combustion Institute Volume 33, Issue 1, 2011, Pages 1113–1120 Impact of flame-wall interaction on premixed flame dynamics and transfer function characteristics

C. A. Kennedy, M. H. Carpenter, R. Michael Lewis, Applied Numerical Mathematics 35

(2000) 177–219, Low-storage, explicit Runge–Kutta schemes for the compressible Navier–Stokes equations

Takafumi Kojima, Kazuie Nishiwaki 1997, SAE Review Volume 18, Issue 1, January 1997, Pages 11–17 Modeling of flame-wall interaction for combustion and heat transfer in S.I. engines

R.H. Kraichnan. Diffusion by a random velocity field. Phys. Fluids , 13 :22–31, 1970

K.K. Kuo, Principle of Combustion, John Wiley and Sons, 2005

Vadim N. Kurdyumov, Gianmarco Pizza, Christos E. Frouzakis, John Mantzaras 2009, Combustion and Flame Volume 156, Issue 11, November 2009, Pages 2190–2200 Dynamics of premixed flames in a narrow channel with a step-wise wall temperature

P. Leduc, B. Dubar, A. Ranini, G. Monnier, Downsizing of gasoline engine : an efficient way to reduce co 2 emissions, Oil & Gas Sci. and Tech. Rev. IFP58 (1) (2003) 157–127

Ling, W., Chung, J., Troutt, T. & Crowe, C. 1998 Direct numerical simulation of a three-dimensional temporal mixing layer with particle dispersion. J. Fluid Mech. 358, 61–85

C. Madhav Rao Vendra, J.X. Wen, V.H.Y. Tam 2012, Journal of Loss Prevention in the Process Industries Available online 5 May 2012 Numerical simulation of turbulent flame–wall quenching using a coherent flame model

A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. Combustion Science and Technology., 42 :185 ?205, 1985.

Mashayek, F. 1998 Direct numerical simulations of evaporating droplet dispersion in forced lowmach number turbulence. Intl J. Heat Mass Transfer 41, 2601–2617.

Mashayek, F. 1999 Simulations of reacting droplets dispersed in isotropic turbulence. AIAA J. 37,1420–1425.

Mashayek, F. 2000 Numerical investigation of reacting droplets in homogeneous shear turbu-

lence. J. Fluid Mech. 405, 1–36

Miller, R. & Bellan, J. 1999 Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas

Miller, R. & Bellan, J. 2000 Direct numerical simulation and subgrid analysis of a transitional droplet laden mixing layer. Phys. Fluid 12, 650–671.

Miller, R. & Bellan, mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. J. Fluid Mech. 384, 293–338.

Mounir Allichea, Pierre Haldenwangb, Salah Chikhc 2010, Combustion and Flame Volume 157, Issue 6, June 2010, Pages 1060–1070 Extinction conditions of a premixed flame in a channel

Myricom, Performance of MPICH-GM 1.2.5..10, Uniprocessor (UP) case (one process per node), 2006, http ://www.myricom.com/scs/performance/Myrinet-2000/MPICH-GM-NEW/

H.N. Najm, P.S. Wyckoff and O.M. Knio. A semi-implicite numerical scheme for reacting ?ow. Journal of Computational Physics, 143(2) :381 ?402, 1998.

A. Napov and Y. Notay, An algebraic multigrid method with guaranteed convergence rate, SIAM J. Sci. Comput., vol. 34, pp. A1079-A1109, 2012.

K. Nishiwaki, Takafumi Kojima, 1998, Heat Transfer A flame-wall interaction model for combustion and heat transfer in S.I. engines

Y. Notay, Aggregation-based algebraic multigrid for convection-diffusion equations, SIAM J. Sci. Comput., vol. 34, pp. A2288-A2316, 2012.

Y. Notay, An aggregation-based algebraic multigrid method, Electronic Transactions on Numerical Analysis, vol 37, pp. 123-146, 2010.

Seungseok Oh, An Introduction to Parallel Partial Differential Equation Solvers, : A be-

hind story of mgrid.f, April 7, 2003 **Terence F. O'Malley and Dr. Karen J. Weiland** , NASA, 2004, NASA Glenn Research Center in Cleveland, Ohio

J. Ouazzani and Y. Garrabos. A new numerical algorithm for low mach number supercritical ?uids. ArXiV, 2007.

R. Owston, V. Magi1, J. Abraham 2007, International Journal of Hydrogen Energy Volume 32, Issue 12, August 2007, Pages 2094–2104 Interactions of hydrogen flames with walls : Influence of wall temperature, pressure, equivalence ratio, and diluents

R. Owston, Vinicio Magi, John Abraham 2007, Combustion and Flame Volume 148, Issue 3, February 2007, Pages 127–147 A numerical study of thermal and chemical effects in interactions of n-heptane flames with a single surface

T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. J. Fluid Mech. , 181 :441–466, 1987.

T. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and numerical combustion. 2005.

T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, 3rd Edition, R.T. Edwards, 2011.

P. Popp and M. Baum, Analysis of wall heat fluxes, reaction mechanisms and unburnt hydrocarbons during the head-on quenching of a laminar methane flame, Combust. Flame 108 (1997) 327-348.

Problèmes du millénaire, http :fr.wikipedia.orgwikiProbl%C3%A8mes_du_prix_du_mill%C3%A9naire

J. Réveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling : A single droplet model (sdm). Combustion and flame, 2000.

J. Reveillon, PADE 6, 2007, $http : www.mathworks.commatlabcentralfileexchange19959 - 6th - order - pade - derivativecontentpade_6thorder_derivativespade_test.m$

Réveillon, J. & Vervisch, Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes, J. Fluid Mech. (2005), vol. 537, pp. 317–347.

Réveillon, J. & Vervisch, L. 2000 Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling : A single droplet model (sdm). Combust. Flame 121, 75–90.

Robert J. Kee, Fran M. Rupley, and Ellen Meeks, 1996, "A FORTRAN CHEMICAL KINETICS PACKAGE FOR THE ANALYSIS OF GAS-PHASE CHEMICAL AND PLASMA KINETICS"

C. Saulnier. Modélisation numérique tridimensionnelle de l'écoulement réactif triphasique gaz-goutte-particule au sein d'un réacteur à lit fluidisé FFC. PhD thesis, Ecole doctorale TYFEP, 2006.

A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. Trans. ASME. J. Fluids Eng. , 123 :359–371, 2001

G. Strang, 2006, ITERATIVE METHODS , http ://ocw.mit.edu/courses/mathematics/18-086-mathematical-methods-for-engineers-ii-spring-2006/readings/am62.pdf

Jian Sun, Jiaya Jia, Chi-Keung Tang, Heung-Yeung Shum, ACM SIGGRAPH conference proceedings, Poisson Matting, 2004

G. I. Taylor, 1938, The Spectrum of Turbulence, Proc. R. Soc. Lond. A 476-490

O. Thomine, Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques, CORIA, 2011

K.Truffin et al. Turb. Heat and Mass Transfer 7, 2012

Henk A. Van der Vorst, Parallel Iterative Solution Methods for Linear Systems arising from Discretized PDE's, Mathematical Institude, University of Utrecht. 1995

S.R. Vosen, R. Greif and C.K. Westbrook, Unsteady heat transfer during laminar flame

quenching, 20th Symp. (Int.) on Combustion (1985) 75-83.

Hai Wang, Xiaoqing You, Ameya V. Joshi, Scott G. Davis, Alexander Laskin, Fokion Egolfopoulos, and Chung K. Law, USC Mech Version II. High Temperature Combustion Reaction Model of H2/CO/C1-C4 Compounds. http ://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm, May 2007.

Yi Wanga, Arnaud Trouvé 2006, Combustion and Flame Volume 144, Issue 3, February 2006, Pages 461–475 Direct numerical simulation of non premixed flame–wall interactions

P. Wesseling and C.W. Oosterlee, Geometric Multigrid with Applications to Computational Fluid Dynamics, 2000

C.K. Westbrook, A.A. Adamczyk, G.A. Lavoie, A numerical study of laminar flame wall quenching, Combust. Flame 40 (1981) 81-99.

CHIN-TIEN WU AND HOWARD C. ELMAN, A COMPARISON OF GEOMETRIC AND ALGEBRAIC MULTIGRID FOR DISCRETE CONVECTION-DIFFUSION EQUATIONS. 1987

M. Wurst, 2009 ,Multigrid Methods and their application in CFD, TU München

Yakhot, A., Orszag, S., Yakhot, V. & Israely, M. 1986 Renormalization group formulation of large-eddy simulation. J. Sci. Comput. 4, 139–158

J.C. Yang, C.T. Avedisian, Symposium (International) on Combustion, Volume 22, Issue 1, 1989, Pages 2037–2044, The combustion of unsupported heptane/hexadecane mixture droplets at low gravity