

# Rapport de Stage de fin d'études

## Solveur de nouvelle génération : Extension à la combustion

Auteur : HERMET Florian

---



Tuteur de Stage : BOUSSUGE Jean-François

---



---

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique  
42 Avenue Coriolis - 31057 TOULOUSE CEDEX 1- FRANCE  
Tel : +33 5 61 19 31 31 - Fax : +33 5 61 19 30 00  
[http : //www.cerfacs.fr](http://www.cerfacs.fr) - e-mail : [secretar@cerfacs.fr](mailto:secretar@cerfacs.fr)

## Table des matières

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introduction</b>  | <b>3</b>  |
| 1.1      | Considération Générale . . . . .   | 3         |
| 1.2      | CERFACS . . . . .  | 3         |
| 1.3      | Description de mon travail . . . . .   | 3         |
| 1.4      | Méthode des Différences Spectrales . . . . .   | 4         |
| 1.5      | Combustion en CFD . . . . .  | 4         |
| <b>2</b> | <b>Méthode des différences spectrales</b>  | <b>6</b>  |
| 2.1      | Description de la méthode des différences spectrales en 1D . . . . .   | 6         |
| 2.1.1    | Notation et principe général . . . . .   | 6         |
| 2.1.2    | Position des points solutions . . . . .  | 6         |
| 2.1.3    | Localisation des points flux et extrapolation sur ces points . . . . .   | 7         |
| 2.1.4    | Traitement aux interfaces des cellules - Solveur de Riemann . . . . .  | 8         |
| 2.1.5    | Construction et différenciation du flux polynomial . . . . .   | 8         |
| 2.2      | Transformation isoparamétrique . . . . .   | 9         |
| 2.3      | Traitement du terme de diffusion . . . . .   | 10        |
| 2.4      | Discrétisation temporelle . . . . .  | 11        |
| 2.5      | Algorithme final . . . . .   | 12        |
| 2.6      | Le code de calcul JAGUAR . . . . .   | 12        |
| <b>3</b> | <b>Implémentation de la combustion dans JAGUAR</b>   | <b>13</b> |
| 3.1      | Passage du mono-espèce au multi-espèces dans JAGUAR . . . . .  | 13        |
| 3.1.1    | Système d'équation . . . . .   | 13        |
| 3.1.2    | Implémentation dans JAGUAR . . . . .   | 14        |
| 3.1.3    | Conditions aux limites et solveur de Riemann . . . . .   | 15        |
| 3.1.4    | Flux de diffusion et de convection pour les espèces . . . . .  | 16        |
| 3.2      | Équations et variables thermodynamiques . . . . .  | 16        |
| 3.2.1    | Lecture des bases de données des espèces et du mélange . . . . .   | 16        |
| 3.2.2    | Calcul des propriétés thermodynamiques . . . . .   | 18        |
| 3.2.3    | Calcul des coefficients de diffusion . . . . .   | 18        |
| 3.2.4    | Mise à jour de la température . . . . .  | 19        |
| 3.3      | Calcul du flux de chaleur . . . . .  | 20        |
| 3.4      | Chimie . . . . .   | 21        |
| 3.5      | Validation de l'implémentation de la combustion : Simulation d'une flamme de pré-mélange<br>1D Méthane/Air . . . . . | 21        |
| 3.5.1    | Paramètre de la simulation . . . . .   | 21        |
| 3.5.2    | Résultats et discussions . . . . .   | 22        |
| 3.6      | Discussion sur les oscillations de pression . . . . .  | 24        |
| 3.6.1    | Méthode permettant de gérer les oscillations de pression . . . . .   | 25        |
| <b>4</b> | <b>Simulation d'un cas industriel non réactif avec JAGUAR : The Volvo Bluff Body</b>                                 | <b>26</b> |
| 4.1      | Description de la simulation . . . . .   | 26        |
| 4.2      | Domaine de résolution . . . . .  | 26        |
| 4.3      | Paramètres de la simulation . . . . .  | 27        |
| 4.4      | Résultats et discussions . . . . .   | 27        |
| <b>5</b> | <b>Conclusion</b>  | <b>30</b> |
|          | <b>Annexe A : Interpolation polynomiale</b>  | <b>31</b> |

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Annexe B : Résolution du taux de réactions intervenant sur les équations des espèces</b> | <b>34</b> |
| <b>Annexe C : Simulation d'une flamme de diffusion 1D</b>                                   | <b>35</b> |
| <b>Annexe D : Résultats de la simulation Volvo avec JAGUAR</b>                              | <b>37</b> |

---

# 1 Introduction

---

## 1.1 Considération Générale

Durant les quarante dernières années, le rôle du numérique dans la mécanique des fluides (CFD) n'a cessé de croître. Dans les laboratoires, ce développement a suivi l'implantation des premiers ordinateurs ainsi que celui des premiers supercalculateurs. La CFD, c'est par la suite étendue jusqu'au monde de l'industrie. Les entreprises ont compris immédiatement l'intérêt que la CFD pouvait leur apporter. En effet, cet outil permet de traiter facilement plusieurs formes de géométries ou plusieurs types d'écoulements de manière assez rapide et à moindre coût alors que cela n'est absolument pas envisageable avec la réalisation d'expériences. Pour toutes ces raisons, l'industrie a fourni beaucoup d'efforts pour introduire et réaliser des codes de calculs efficaces.

Une équipe de chercheurs du CERFACS a décidé de se focaliser sur le développement des Méthodes Spectrales Discontinues à Ordre Élevé. Les méthodes spectrales sont une technique de discrétisation d'équation différentielle (comme les différences finies, les éléments finis ou encore le volume fini), le terme ordre élevé traduit une erreur numérique très faible par rapport à la solution que l'on souhaite représenter, tandis que le terme discontinu traduit une discontinuité de la solution entre chaque cellule du maillage. Le CERFACS développe actuellement un code de calcul, JAGUAR, qui fonctionne avec ce type de discrétisation. Ce code de calcul permet de résoudre des problèmes aéronautiques. Le but de mon stage a été de l'étendre à des problèmes liés à la combustion.

## 1.2 CERFACS

Le CERFACS (Centre de Recherche et de Formation Avancé en Calcul Scientifique) est un centre de recherche fondamentale et appliquée, créé en 1987, spécialisé dans la modélisation et la simulation numérique. Par ses moyens et son savoir-faire en calculs hautes performances, il traite des grands problèmes scientifiques et techniques de recherche publique et industrielle.

Les équipes du CERFACS réunissent des physiciens, des mathématiciens appliqués, des analystes numériques, des informaticiens qui conçoivent et développent des méthodes et solutions logicielles innovantes répondant aux besoins des secteurs de l'aéronautique, du spatial, du climat, de l'énergie et de l'environnement.

Impliqué dans des projets d'envergure nationale et internationale, ce laboratoire travaille en forte interaction avec ses sept actionnaires : AIRBUS Group, CNES, EDF, Météo France, ONERA, SAFRAN et TOTAL. Il a en outre noué des partenariats avec le CNRS (Unité de recherche associée), l'IRIT (laboratoire commun), le CEA et l'INRIA (accords de coopération).

Environ 150 personnes y travaillent, dont 130 chercheurs et ingénieurs venant de divers pays dans le monde. Lors de mon stage, j'ai intégré l'équipe CFD qui est la formation la plus importante du CERFACS et qui travaille notamment sur toutes les problématiques de combustion, de turbomachines, d'aéronautiques internes ainsi que d'aéronautiques externes. Mon travail a été réalisé sous la direction de Jean-François BOUSSUGE qui a assuré le bon déroulement de mon stage ainsi que son suivi. Il a su me conseiller pour que mon stage avance au mieux, je le remercie pour tout cela. Je souhaite également remercier Valentin JONCQUIÈRES pour toute l'aide qu'il m'a apportée durant le stage.

## 1.3 Description de mon travail

L'objet de mon stage a été d'implémenter les principes de la combustion, tel que le traitement du multi-espèces, de la chimie et de la thermodynamique, à l'intérieur du solveur JAGUAR. Pour rappel, il

existe principalement trois méthodes spectrales d'ordre élevé. La méthode la plus ancienne est la méthode Discontinuous Galerkin qui a été expliquée premièrement par Read and Hill en 1973 [26]. C'est une adaptation de la méthode des éléments finis, la différence se trouve entre les fonctions tests qui ne sont pas les mêmes (uniquement des polynômes dans le cas du Discontinuous Galerkin) et dans le fait que la méthode discontinuous Galerkin n'est pas une méthode continue comme peut l'être les éléments finis. Il y a une discontinuité de la solution à l'interface entre deux cellules. Afin de traiter les discontinuités à l'interface entre les cellules, différents solveurs de Riemann sont développés, pour permettre de déterminer la valeur de la solution à l'interface. Bien que cette technique soit apparue il y a une quarantaine d'année, l'implémentation de cette méthode afin de résoudre les équations de Navier-Stokes est bien plus récente et date de Bassi and Rebay en 1997 [1]. Parmi les méthodes discontinues, d'autres ont émergées comme la méthode des Spectral Volume expliquée par Wang [33] qui consiste en une adaptation à ordre élevé de celle des volumes finis. L'approche qui a retenu toute mon attention durant mon stage est la méthode des différences spectrales puisque c'est celle-ci qui est implémentée dans JAGUAR et dont je vais détailler tous les principes dans la suite de mon rapport.

Une fois l'implémentation de la combustion dans JAGUAR réalisée, j'ai essayé de valider la combustion sur plusieurs cas tests tel qu'une flamme 1D pré-mélangée ou encore une flamme de diffusion 1D. Ces cas tests ont permis de mettre en évidence certains problèmes de la Différence Spectrale par rapport aux phénomènes ayant lieu durant une combustion telle que la difficulté des méthodes Spectrales à gérer de forts gradients de température. J'ai donc réalisé une grande période de bibliographie durant mon stage pour comprendre pourquoi la Différence Spectrale n'arrive pas à gérer de forts gradients et pour savoir quels types de techniques doivent être implémentés dans le code pour permettre de gérer les forts gradients. La dernière partie de mon stage a consisté à mettre en oeuvre la simulation numérique d'un cas industriel non réactif avec JAGUAR qui sera expliqué en partie 4.

## 1.4 Méthode des Différences Spectrales

La méthode des différences spectrales a été introduite par Kopriva et Kalias en 1995 [12] pour les maillages basés sur des cellules hexaédriques. Cette méthode a été mise de côté jusqu'en 2006 quand Liu, Vinokur et Wang [15],[16] ont proposé une formulation générale pour les tétraèdres. En 2007, Wang, Liu and Sun ont soumis une extension pour traiter les maillages non structurés composés d'hexaèdre. Sans entrer dans les détails, la méthode SD (Spectral Difference) a plusieurs avantages. Elle permet de contrôler localement la précision de la solution grâce au degré du polynôme qui représente la solution à l'intérieur d'une cellule. Elle a de très fortes aptitudes avec le HPC (High Performance Computing), en effet l'algorithme global a besoin uniquement des points de la cellule et des points de ses voisins directs. Le stencil est vraiment minimal et l'implémentation pour le calcul parallèle est relativement facile. De plus, des simulations avec des maillages non structurés peuvent être réalisées assez aisément puisque le stencil est faible.

## 1.5 Combustion en CFD

La compréhension des systèmes de combustion est essentielle pour plusieurs applications telles que les turbo-machines, ou les moteurs à explosion. Injection de carburant et d'oxydant, pré-mélangé ou non, avec de la turbulence ou non sont de multiples phénomènes présents dans la combustion qui sont difficiles à comprendre et à modéliser. La CFD permet de simuler des écoulements réactifs complexes qui ne sont pas prédictibles avec des méthodes analytiques et sont très difficiles à reproduire de manière expérimentale. La combustion est caractérisée par des structures d'écoulement complexes qui sont couplées avec une réaction chimique, des instabilités de choc ainsi qu'une flamme. Pour implémenter la combustion dans un solveur, il faut donc prendre en compte tous ces phénomènes couplés à Navier-Stokes.

Les méthodes spectrales discontinues ne sont pas familières avec ce type de physique très complexe à représenter. Cependant, le développement des méthodes spectrales discontinues pourrait s'avérer être un outil tout à fait remarquable pour traiter efficacement et avec précision les problèmes de combustion.

Les méthodes discontinues d'ordre élevé, avec leur précision, pourraient permettre de résoudre de manière réaliste les structures les plus complexes présentes dans un écoulement réactif. De plus, elles offrent la possibilité d'avoir un raffinement nommé  $h/p$ . En effet, la solution est représentée par un polynôme de degrés  $p$  dans les méthodes spectrales. Le degré de ce polynôme permet d'avoir un raffinement à l'intérieur même de la cellule. Ce raffinement  $h/p$  permet de considérer des maillages grossiers pour résoudre des problèmes avec précision tout en ayant un coût de calcul modéré. En effet, cela permet de diminuer la dispersion numérique dans des zones où il y a des structures complexes et offre aussi la possibilité d'avoir un raffinement plus grossier dans les zones qui nous intéressent moins.

Certains travaux dans la littérature ont été trouvés concernant la simulation des phénomènes de combustion avec la méthode Discontinuous Galerkin, les travaux les plus avancés sont notamment ceux de Y.Lv and M.Ihme à Stanford [20]. Le développement de solveurs, simulant les phénomènes de combustion avec des méthodes spectrales d'ordre élevé, a notamment été le sujet d'un séminaire que j'ai présenté durant mon stage. Ces développements sont très récents [18], [19], [20] et peu nombreux dans la littérature. Y.Lv et M.Ihme ont mis au point différentes méthodes permettant de traiter des problèmes d'oscillations sur la pression ou des méthodes permettant d'assurer la positivité de la densité ainsi que de la pression [21]. Aucun article concernant la combustion avec les différences spectrales n'a été trouvé, c'est ce qui a motivé le CERFACS à proposer ce stage. Ainsi implémenter la combustion dans un solveur SD (Spectral Difference) fait réellement partie des enjeux de la recherche actuelle.

## 2 Méthode des différences spectrales

Cette partie est une introduction pour expliquer l'aspect mathématique de cette méthode qui est utilisée dans JAGUAR. La méthode SD (Spectral Difference) sera expliquée en 1D dans le cas d'une équation d'advection-diffusion.

### 2.1 Description de la méthode des différences spectrales en 1D

#### 2.1.1 Notation et principe général

Pour expliquer le principe de la différence spectrale (SD) dans une configuration 1D. Nous allons considérer l'équation 1D suivante :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

avec  $\mathcal{F}$  le flux qui définit le flux advectif et le flux diffusif. Ensuite, nous allons considérer un maillage composé de plusieurs segments 1D.

Le principe de l'approche SD est de supposer que le vecteur solution  $Q$  peut être représenté comme un polynôme de degrés  $p$  dans chaque cellule du maillage. L'équation 2.1 implique que la dérivée du flux  $\mathcal{F}$  soit un polynôme de degrés  $p$ . Donc le flux  $\mathcal{F}$  est un polynôme de degrés  $p+1$  par intégration. De cette façon, le nombre de points solutions nécessaires pour décrire le polynôme solution de degrés  $p$  est  $p+1$  à l'intérieur de chaque segment du maillage et  $p+2$  pour représenter le flux. Ainsi la différence spectrale requiert un maillage "échelonné" pour résoudre la solution. Les points solutions sont entourés par les points flux dans le but de résoudre le flux sur ces points flux.

#### 2.1.2 Position des points solutions

Dans le but de déterminer la position des points solutions, plusieurs méthodes existent mais la plus répandue et la plus efficace est celle des points de GAUSS. Cette technique permet de déterminer  $p+1$  points à l'intérieur d'un segment du maillage afin de pouvoir caractériser le polynôme solution. Les points sont déterminés de la manière suivante :

$$X_S = \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2s-1}{2N}\right) \right] \quad \text{avec } s \in [1, N] \quad (2.2)$$

Ces points sont situés dans l'intervalle  $[0,1]$ , une transformation isoparamétrique est donc nécessaire pour les adapter aux segments du maillage qui ne sont pas nécessairement de longueur 1 (voir en 2.2)

Prenons un exemple. Supposons que l'on choisisse un polynôme de degré 2 pour décrire la solution  $Q$ . Ainsi l'initialisation de la solution sur ces points solutions est donc possible.

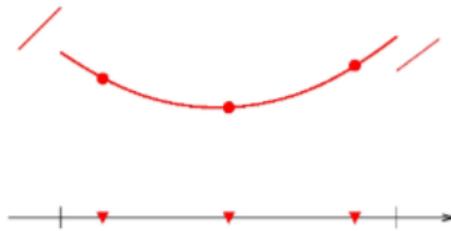


FIGURE 2.1: Étape 0 : Points solutions sur le segment et interpolation polynomiale du second ordre de la solution

### 2.1.3 Localisation des points flux et extrapolation sur ces points

À cause de l'équation 2.1, le polynôme flux doit être un polynôme de degrés  $p+1$  car sa dérivée doit être de degré  $p$ . Il faut donc  $p+2$  points pour déterminer le flux  $\mathcal{F}$ . Ces points sont appelés points flux.

La définition des points flux est essentielle dans le but de résoudre le flux. Les points de flux externes à un segment et internes doivent être calculés afin de déterminer le flux  $\mathcal{F}$ . Les points flux externes correspondent aux points de chaque extrémité du segment tandis que les points flux internes sont calculés grâce aux racines des polynômes de Legendre définis comme la solution de l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)P'_n(x)] + n(n-1)P_n(x) = 0, \quad P_n(1) = 1 \quad (2.3)$$

Avec  $P_n(x)$  le polynôme représentant la solution.

Les points flux et solutions sont décrits en Fig 2.2 pour un polynôme solution d'ordre 3 dans l'intervalle  $[0,1]$



FIGURE 2.2: Position des points solutions (disques) et positions des points flux(carré)

Pour calculer le flux sur ces points flux une extrapolation de la solution  $\mathcal{Q}$  est nécessaire en utilisant une interpolation Lagrangienne. L'interpolation Lagrangienne utilise une base de polynômes de Lagrange de degrés  $p$ , définis comme telle :

$$h_i(x) = \prod_{s=1, s \neq i}^{p+1} \left( \frac{X - X_S}{X_i - X_S} \right) \quad (2.4)$$

La représentation polynomiale de la solution dans chaque cellule sera une combinaison linéaire de ces polynômes de Lagrange et sera solution au point  $x_j$  :

$$L(X) = \sum_{j=0}^{p+1} y_j h_j(X) \quad (2.5)$$

Pour notre exemple ( $p=2$ ), la solution au point flux est représentée en Fig 2.3.

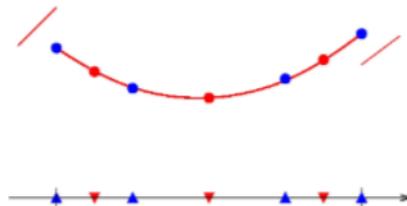


FIGURE 2.3: Étape 1 : Extrapolation de la solution aux points flux, rouge : points solutions, bleu : points flux

Après que la solution  $Q$  ai été obtenue sur les points de flux, nous pouvons déterminer  $\mathcal{F}$  aux points flux comme une combinaison linéaire de  $Q$ . Par exemple dans le cas du flux advectif,  $\mathcal{F}$  sera calculé en multipliant la valeur de  $Q$  aux points flux par la vitesse du problème  $c$ . C'est un peu différent pour le flux diffusif, cela sera expliqué en 2.3.

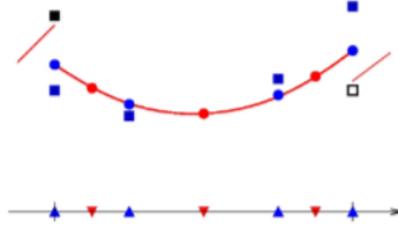


FIGURE 2.4: Étape 2 : Résolution du flux  $\mathcal{F}$  aux points flux

#### 2.1.4 Traitement aux interfaces des cellules - Solveur de Riemann

Comme la méthode est réalisée sur chaque segment, c'est évident qu'il y aura deux valeurs différentes sur chaque interface de chaque segment. La méthode est discontinue. Pour palier cette discontinuité, il faut utiliser un solveur de Riemann. Un solveur de Riemann permet de déterminer une valeur unique à l'interface d'une cellule. Nous estimons donc le flux à l'interface grâce à un solveur de Riemann. Différents solveurs de Riemann seront utilisés suivant le problème devant lequel on fait face. Différents solveurs de Riemann sont implémentés dans JAGUAR, comme le solveur de Roe ou le solveur AUSM UP + [11] [27].

#### 2.1.5 Construction et différenciation du flux polynomial

Grâce aux solveurs de Riemann, la valeur du flux sur chaque point flux est maintenant unique (Fig 2.5). La représentation polynomiale de la solution sur chaque point flux peut être construite avec les polynômes de Lagrange sur chaque cellule, Fig 2.6.

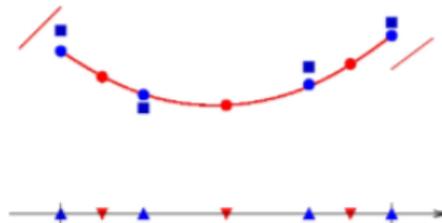


FIGURE 2.5: Étape 3 : Flux unique à l'interface grâce au solveur de Riemann

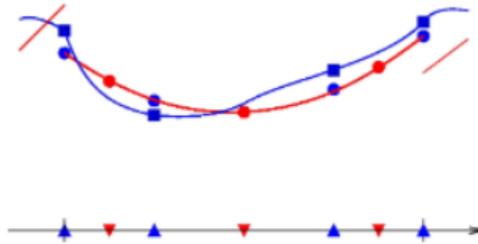


FIGURE 2.6: Étape 4 : Construction d'un nouveau polynôme aux points flux

Ce nouveau polynôme de degrés  $p+1$  sur une cellule est globalement continu et peut être différencié sur chaque segment afin d'obtenir le terme  $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x}$  (Fig 2.7). Ainsi, nous connaissons le second terme de l'équation 2.1 à chaque points solutions et à chaque pas de temps.

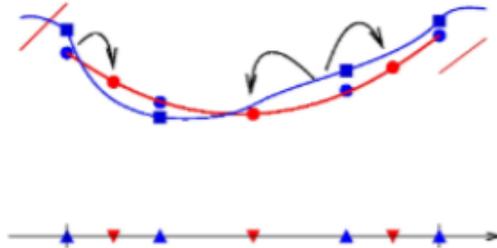


FIGURE 2.7: Étape 5 : Discrétisation du polynôme flux aux points solution

## 2.2 Transformation isoparamétrique

Avec pour objectif, d'appliquer la méthode de façon la plus simple possible, une transformation isoparamétrique est considérée. Ainsi, toutes les étapes seront réalisées dans un domaine isoparamétrique, dit de référence. Cette transformation isoparamétrique transforme le volume initial de chaque cellule dans un segment de référence  $[-1,1]$  en 1D et  $[-1, 1]^3$  en 3D. Cette transformation est donc propre à chaque segment ou cellule du maillage suivant que l'on soit en 1D, 2D ou 3D. Cette transformation isoparamétrique permet de résoudre chaque équation dans un volume de référence pour chaque cellule.

Cela est pratique puisque chaque cellule peut être différente notamment lorsque l'on travaille avec des maillages instrués.

Supposons un problème 1D, nous pouvons définir une transformation  $X$  qui permet de passer des coordonnées  $\mathcal{I}$  qui sont dans le domaine de référence aux coordonnées  $x$  qui se situent dans le domaine réel.

$$x = X(I) \quad (2.6)$$

La forme de la fonction  $X$  peut être trouvée en [12]. Dans la suite, je vais expliquer seulement le cas 1D, le principe est le même en 2 ou 3 dimensions. En 1D la matrice Jacobienne devient un nombre :

$$\mathcal{J} = \frac{dX}{dI} \quad (2.7)$$

C'est facile de définir une transformation isoparamétrique qui transforme le segment physique  $[x_i, x_{i+1}]$  en un domaine de référence  $[-1,1]$  :

$$\begin{cases} X(I) = AI + B \\ X(-1) = x_i \\ X(1) = x_{i+1} \end{cases} \quad (2.8)$$

La transformation isoparamétrique est donc définie de la manière suivante :

$$X(I) = \frac{\Delta x(I)}{2}I + \frac{x_i + x_{i+1}}{2} \quad (2.9)$$

avec la jacobienne  $\mathcal{J} = \frac{\Delta x(I)}{2}$ .

La transformation change la valeur de la solution, en effet chaque composante du vecteur  $\mathcal{Q}$  est modifiée de la façon suivante :

$$\bar{\mathcal{Q}} = \mathcal{J}\mathcal{Q} \quad (2.10)$$

De plus l'équation 2.1 est aussi impactée par cette transformation isoparamétrique, cette équation dévient :

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{Q}}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial x} = 0 \quad (2.11)$$

Pour le flux advectif  $F = F_{adv} = c\mathcal{Q}$ , on en déduit donc :

$$\overline{F_{adv}} = F \quad (2.12)$$

Cependant pour le flux diffusif cela est un peu différent puisque le flux diffusif est la dérivée de la solution  $F_{diff} = D \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial I}$ , dans ce cas là on a donc :

$$\overline{F_{diff}} = D\mathcal{J}\bar{\mathcal{Q}} = D\mathcal{J}^2\mathcal{Q} \quad (2.13)$$

Chaque cellule est modifiée par sa propre transformation avec un facteur  $\mathcal{J}$  pour la solution est  $\mathcal{J}^2$  pour le flux diffusif. Le terme advectif n'est lui pas affecté par cette transformation isoparamétrique.

À l'interface entre deux cellules, deux transformations doivent être considérées si le pas d'espace  $\Delta x$  n'est pas constant.

### 2.3 Traitement du terme de diffusion

Le traitement du terme de diffusion est un peu différent de celui d'advection, en effet le flux de diffusion est la dérivée de la solution.

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial x} \quad (2.14)$$

Dans ce cas la dérivée de la solution a besoin d'être résolue avant la dérivation du flux  $\mathcal{F}$ . La plupart des solveurs de Riemann, ne sont pas consistants pour la diffusion. D'autres solveurs de Riemann existent, cependant le plus connue est le schéma centré, aussi appelé schéma de Sun [31]

Les étapes pour traiter le terme de diffusion sont les suivantes :

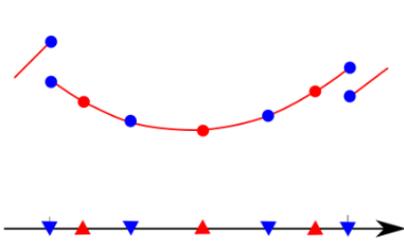


FIGURE 2.8: Étape 1 : Extrapolation de la solution (•) aux points flux (▼)

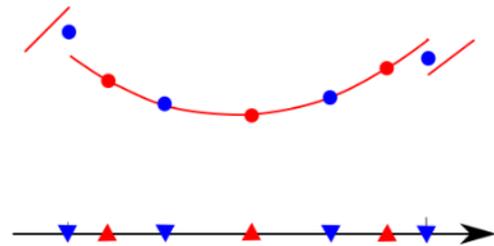


FIGURE 2.9: Étape 2 : Résolution de la solution (•) à l'interface en moyennant à droite et à gauche de l'interface

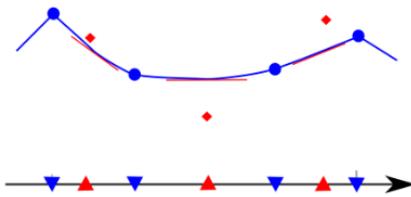


FIGURE 2.10: Étape 3 : Construction du polynôme continu (—) aux points flux et résolution de la dérivée (◆) aux points solutions

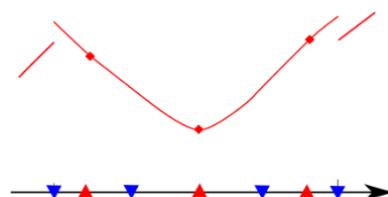


FIGURE 2.11: Étape 4 : Définition de la dérivée (—) aux points solutions

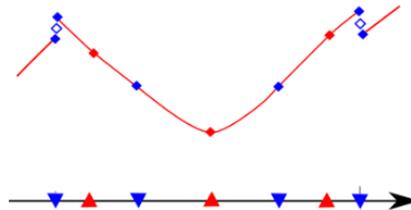


FIGURE 2.12: Étape 5 : Extrapolation de la dérivée aux points flux (◆)

## 2.4 Discrétisation temporelle

L'intégration temporelle doit être prudemment choisie pour minimiser la dispersion et la dissipation numérique. La SD (Spectral Difference) est une méthode d'ordre élevé et utiliser une mauvaise intégration temporelle peut réduire fortement les performances de cette méthode. Plusieurs intégrations temporelles sont utilisées dans JAGUAR. La plus précise est une méthode de Runge-Kutta à 6 étapes optimisées, proposée par Bogey and Bailly [2]. Cet algorithme reprend la méthode classique de Runge-Kutta avec 6 étapes avec des coefficients optimisés. L'algorithme explicite à 6 étapes permettant de passer de l'itération  $n$  à l'itération  $n + 1$  fonctionne comme suit :

$$\begin{cases} u^0 = u^n \\ u^l = u^n + \alpha_l \Delta t F(u^{l-1}) \\ u^{n+1} = u^6 \end{cases} \quad (2.15)$$

Avec  $\alpha_l$  les coefficients optimisés et  $\Delta t$  le pas de temps.

## 2.5 Algorithme final

Pour résumer, l'algorithme qui permet de résoudre l'équation différentielle 2.1 consiste pour une étape du Runge Kutta à :

1. Détermination des points solutions,  $x_s$ , et des points flux,  $x_j$ .
2. Déterminer les variables conservatives à l'itération  $n$  aux points solutions  $(\overline{Q})_i$   
Extrapoler la solution aux points flux  $(\overline{Q})_f$ , en utilisant une interpolation Lagrangiennes et une transformation isoparamétrique (Division par la Jacobienne  $\mathcal{J}$ ).
3. Suivant le type de flux :

### Flux Advectif :

- Résolution du flux sur les points flux intérieurs :  $\overline{\mathcal{F}} = c \cdot \overline{Q}$ .
- Résolution du flux à l'interface grâce à un solveur de Riemann.
- Construction du polynôme représentant le flux advectif de degré  $p+1$  grâce aux  $p+2$  points flux calculés précédemment.

### Flux Diffusif :

- Résolution de la solution à l'interface en moyennant les 2 valeurs.
- Construction du polynôme passant par les points flux et calcul de sa dérivée aux points solutions.
- Définition de la dérivée aux points solutions.
- Extrapolation de la dérivée aux points flux et calcul de la dérivée à l'interface.
- Construction du polynôme représentant le flux diffusif de degré  $p+1$  passant par les  $p+2$  points flux.

4. Différenciation du flux polynomial au points solutions en utilisant la dérivée exacte du polynôme de Lagrange.

Après avoir déterminé le terme  $\frac{\partial \overline{\mathcal{F}}}{\partial x}(i)$  qui est un polynôme d'ordre  $p$ , nous pouvons déterminer  $(\overline{Q})_i$  à l'itération  $n + 1$  en utilisant la méthode d'intégration temporelle décrite précédemment en 2.4.

## 2.6 Le code de calcul JAGUAR

JAGUAR (*proJect of an Aerodynamic solver using General Unstructured grids and high ordeR schemes*) est un code de CFD actuellement développé au CERFACS. Il a été créé pour répondre à deux problématiques. La première étant le développement des approches spectrales dans la communauté de la CFD et le CERFACS a besoin d'un tel code pour se placer et rester compétitif dans la communauté. La seconde vient du fait qu'une des principales activités du CERFACS concerne la LES (Large Eddy Simulation) qui consiste à résoudre les plus grandes échelles de la turbulence à l'intérieur d'un écoulement turbulent et à modéliser les plus petites avec un modèle de sous-maille. La LES demande une puissance de calcul assez importante à cause du pas de temps qui est très faible ainsi que du nombre de degrés de liberté qui est très important (notamment proche paroi). Si les approches spectrales permettent de donner des résultats aussi bons que les codes de LES classiques mais avec un coût de calcul plus faible, cela pourrait être préféré aux codes classiques de LES actuel. En plus de cela, l'approche spectrale permet d'avoir une très haute précision.

JAGUAR est écrit en fortran90 et peut traiter les problèmes 2D ou 3D. Il traite les équations de Navier-Stockes. Les maillages lus par JAGUAR sont des maillages hexaédriques et le format des maillages lus est le format GMSH. Il peut aussi bien lire les maillages structurés que non structurés. Pour finir, il peut être utilisé aussi bien en séquentiel qu'en parallèle.

Le but de mon stage est d'implémenter la combustion dans JAGUAR. Pour cela, il y a plusieurs étapes à réaliser, le codage du multi-espèces, des propriétés chimiques des différentes espèces ainsi que des réactions qui se produisent. D'autre part, la prise en compte de la température et de son influence sur les propriétés thermodynamiques devra aussi être codée.

### 3 Implémentation de la combustion dans JAGUAR

Ce travail a été le plus conséquent de mon stage et a occupé la majeure partie de mon temps. Le code de calcul JAGUAR a été créé pour résoudre des problèmes de mécanique des fluides et notamment lorsque que l'on se trouve dans des cas compressibles toutefois, ce code de calcul ne permet pas de traiter des problèmes multi-espèces avec réaction chimique.

Dans le déroulement de la combustion, une multitude d'espèces intervient et chacune de ces espèces doit être bien comprise afin de modéliser au mieux ce mécanisme. Des processus chimiques et thermodynamiques interagissent lors de la combustion. Il faut donc en tenir compte. Par conséquent, plusieurs implémentations dans le code doivent être réalisées :

1. Ajout des équations de conservations des espèces, lesquelles permettent de décrire la diffusion ainsi que l'advection de ces espèces.
2. Ajout de l'impact de la température et des propriétés thermodynamiques, qui ne sont plus constantes dans notre cas, sur les variables conservatives.
3. Ajout des différents termes sources sur l'équation de l'énergie ainsi que l'ajout du taux de réactions sur les équations des espèces. Pour cela, une chimie réduite ou détaillée ainsi que les détails de la cinétique chimique seront considérés.

En plus de la combustion, j'ai implémenté de nouvelles conditions à la limite dans le code. La première a été une condition d'injection reposant sur la vitesse, la température ainsi que la fraction massique des espèces. La seconde est une condition de sortie relaxée sur la pression (NSCBC) [23]. Cela permet d'éviter au maximum les ondes numériques qui apparaissent lorsque la condition de sortie n'est pas relaxée. Pour finir, j'ai modifié les solveurs de Riemann présents dans le code pour prendre en compte le multi-espèce et le fait que les propriétés thermodynamiques ne soient plus constantes.

#### 3.1 Passage du mono-espèce au multi-espèces dans JAGUAR

La première étape pour implémenter la combustion dans JAGUAR est d'étendre le système de variable conservative résolu aux multi-espèces. Nous avons donc besoin de rajouter autant d'équations que d'espèces présentes dans le procédé de combustion. Ainsi chaque densité sera traitée séparément, l'équation de la conservation de la masse n'a donc plus de raisons d'exister. Dans cette section, je vais détailler les équations permettant de traiter un problème multi-espèces.

##### 3.1.1 Système d'équation

Les équations permettant de traiter l'évolution d'un écoulement compressible réactif sont les suivantes :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P \delta_{ij} - \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho E u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial u_i (P \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T + \mathcal{Q}_r \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_k u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{jk}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (3.3)$$

L'indice  $k$  fait référence à la  $k^{eme}$  espèce et ne suit pas les règles de sommation, contrairement aux indices  $i$  et  $j$  qui suivent les règles classiques de sommation. L'équation 3.3 doit être résolue pour toutes les

espèces intervenant dans la réaction chimique ayant lieu. Il y a donc  $4+N$  équations à résoudre, qui correspondent respectivement à la conservation de la quantité de mouvement, à la conservation de l'énergie totale et à la conservation de la masse pour les espèces. Les symboles  $\rho, u_i, E, \rho_k$  correspondent respectivement à la densité, le vecteur vitesse, l'énergie totale par unité de masse et la densité de chaque espèce.

La densité d'une espèce est définie comme telle :

$$\rho_k = \rho Y_k \quad (3.4)$$

Avec  $k = 1$  à  $N$  et  $N$  le nombre d'espèces présent dans le système.

Le terme source  $\dot{\omega}_T$  représente le dégagement de chaleur durant le procédé et  $\dot{\omega}_k$  le taux de réaction de chaque espèce. Ces deux termes seront développés dans la section 3.4.

### 3.1.2 Implémentation dans JAGUAR

#### • Ajout des nouvelles variables conservatives

Tout d'abord, les équations des espèces ont besoin d'être rajoutées et d'être validées. Nous rajoutons donc de nouvelles variables conservatives les  $\rho_k$ . Le vecteur qui contient la solution est déjà composé des variables conservatives suivantes :  $\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E$ .

Deux voies différentes s'offrent à nous. Soit nous créons un vecteur différent de ce vecteur solution dans lequel seront stockés les  $\rho_k$ , soit nous augmentons la taille du vecteur solution qui existe déjà. La seconde méthode a été retenue pour des raisons de simplicité. Dans la plupart des sous-routines, la présence des espèces dans le vecteur solution n'est pas nécessaire et donc cela rajoute du temps de calcul mais nous avons quand même opté pour ce choix-là. Le but du stage est d'implémenter la combustion dans le solveur, une fois que cela sera fait, les problèmes liés à l'optimisation pourront être réfléchis. L'ancien vecteur solution devient donc :

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_k \\ \vdots \\ \rho_n \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

#### • Que faire de l'ancienne équation sur la conservation de la masse ?

Une particularité des équations de Navier-Stokes multi-espèces est la non-résolution de l'équation de la conservation de la masse. Nous avons conservé cette équation dans le but de vérifier à la fin de chaque boucle temporelle que nous retrouvons bien l'égalité suivante :

$$\rho = \sum_k^N \rho_k \quad (3.6)$$

Supprimer la variable  $\rho$  lorsque l'on résout des problèmes multi-espèces est une tâche assez complexe, car elle intervient dans la plupart des sous-routines. De plus, si on la supprime quand on simule du multi-espèces il faudrait changer de place la position de  $\rho$  dans le vecteur solution et le mettre en 5<sup>ème</sup> position. Ainsi lorsque que l'on serait en multi-espèces on viendrait écraser cette composante avec  $\rho_1$  et cette composante correspondrait à  $\rho$  en mono-espèce. Nous avons donc décidé de la garder. Cependant, lorsque la combustion sera bien implémentée, ce changement pourra être réalisé afin d'optimiser les temps de calcul du solveur.

#### • Correction sur la densité

Un paramètre primordial à respecter pour les problèmes multi-espèces est que la somme de toutes les fractions massiques des différentes espèces soit égale à 1, à chaque pas de temps, n'importe où dans le domaine :

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (3.7)$$

Durant le calcul, les valeurs des fractions massiques peuvent varier, cependant l'égalité précédente 3.7 doit rester vérifiée. Ainsi à la fin de chaque boucle temporelle pour toutes les cellules, nous avons mis en place cette condition afin qu'elle soit respectée. Si elle n'est pas respectée c'est-à-dire si  $\sum_k^n y_k \neq 1$  alors nous reportons l'erreur sur la fraction massique de l'espèce non réactive. Par exemple, dans le cas d'une flamme  $CH_4/Air$ , nous reportons cette erreur sur le  $N_2$  qui n'est pas réactif. Ainsi la fraction massique du diazote concentre toutes les erreurs numériques présent dans le calcul. En combustion, les espèces non réactives ne nous intéressent que moyennement, c'est pour cela qu'on se permet de réinjecter toutes les erreurs numériques sur ces espèces là.

### 3.1.3 Conditions aux limites et solveur de Riemann

#### Conditions aux limites

Dans la réalisation d'un solveur les conditions à la limite sont une partie très délicate à gérer. Certaines conditions à la limite sont implémentées dans JAGUAR mais elles ne traitent que le mono-espèce et ne sont pas trop adaptées à la combustion. En effet, elles sont faites pour de l'aéronautique externe. La condition d'injection est par exemple basée, sur le nombre de Mach, ce qui n'est pas réellement adapté aux divers problèmes de combustion.

J'ai donc dans un premier temps modifié les conditions aux limites qui étaient implémentées pour les adapter aux multi-espèces. J'ai ensuite créé une condition à la limite d'injection basée sur le débit entrant, que j'ai aussi adapté aux multi-espèces.

Cependant, imposer une vitesse en entrée ou une pression en sortie n'est pas suffisant pour obtenir des résultats corrects en combustion. Des ondes sont réfléchies sur les conditions à la limite et cela ne permet pas à l'énergie acoustique de quitter le domaine. Une accumulation de cette énergie peut avoir lieu dans le domaine et cela peut causer des résultats non physique ou même faire cracher le calcul. Nous avons donc besoin de coder une condition à la limite relaxée afin d'éviter ce phénomène là. Ces conditions s'appellent les Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) inventées par T.Poinsot et S.Lele [23]. J'ai donc implémenté une condition à la limite relaxée pour l'injection et une relaxée sur la pression en sortie. Certains détails sur l'implémentation des conditions aux limites peuvent être trouvés dans les articles suivants : [23] et [32].

#### Solveur de Riemann

Les solveurs de Riemann, permettant de traiter la discontinuité de la solution à l'interface de chaque cellule du maillage, doivent être modifiés et adaptés aux multi-espèces. J'ai donc adapté tous les solveurs de Riemann présents dans JAGUAR, tels que le solveur de Roe, Rusanov, Slau, Ausm+ up et le solveur centré. Tous ces solveurs ont des caractéristiques différentes et sont décrits plus en détails dans les articles

suivants : [11],[27].

### 3.1.4 Flux de diffusion et de convection pour les espèces

Le flux de diffusion sur les espèces est calculé de la manière suivante :

$$F_{D_k} = -\rho \left( D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_j} \right) \quad (3.8)$$

Avec  $X_k = Y_k \frac{W}{W_k}$  la fraction molaire de chaque espèce. Je n'ai pas considéré de vitesse de correction de diffusion puisque dans la plupart des cas de pré-mélange cette vitesse de correction est totalement négligeable. Cependant, cela devra être ajouté à une future version de JAGUAR afin de modéliser au mieux la physique présente dans un processus de combustion.

Le flux convectif est lui calculé classiquement :

$$F_{C_k} = U \rho Y_k \quad (3.9)$$

## 3.2 Équations et variables thermodynamiques

Une fois l'implémentation du multi-espèces, nous devons implémenter les lois de la thermodynamique ainsi que des tables pour calculer les propriétés thermodynamiques telles que le  $C_p$ , le  $C_v$ , le  $\gamma$  ou  $r_k$  en fonction de la température qui n'est plus constante en combustion. La température varie énormément dans tous les problèmes de combustion, nous devons donc prendre en compte son influence sur les variables thermodynamiques.

Énormément de variables sont dépendantes de l'espèce que l'on considère ou du mélange que l'on envisage ainsi que de la température du mélange, on a donc besoin de remettre à jour la température pendant le calcul. La température dépend du problème et est sujette à de fortes variations qui vont influencer les variables conservatives puisque le  $\nabla T$  intervient sur l'équation de l'énergie totale à travers le flux de chaleur. La température doit donc être mise à jour dans le calcul afin de recalculer les variables conservatives à chaque itération.

### 3.2.1 Lecture des bases de données des espèces et du mélange

Lors d'un problème multi-espèces, chaque espèce a ces propres propriétés thermodynamiques. Ainsi, l'implémentation d'une base de données regroupant les propriétés de toutes les espèces utiles pour simuler un processus de combustion doit être implémentée. De plus, les espèces ont des propriétés différentes lorsqu'elles sont en contact avec d'autres espèces (réaction chimique), ainsi ces propriétés là doivent aussi être implémentées dans une base de données pour savoir qu'elles espèces réagissent ensemble. Le solveur AVBP utilise une base de données où les propriétés de plusieurs espèces utiles pour la combustion sont détaillées ainsi qu'une autre ou toutes les propriétés chimiques (réaction, schéma cinétique détaillée) sont implémentées.

La première étape a donc été de modifier JAGUAR pour lui permettre de lire ces deux bases de données et de vérifier que les valeurs lues soient exactes. Le fichier d'entrée de JAGUAR a été totalement modifié pour permettre à l'utilisateur de choisir la réaction et le schéma cinétique qu'il désire lors de sa simulation. La base de données contenant les informations de la réaction chimique entre l'air et le  $CH_4$  pour une cinétique à 2 étapes ressemble à ceci :

```

!-----
! Reactive mixture CH4/AIR. Reduced chemistry, 2S-BFER scheme.
!-----
mixture_name = CH4-AIR-2S-BFER_FLAMMABLE
validity_info = 300-700K/1-12atm
transport = computed
combustion_chemistry = reduced_pea
species_name = CH4 CO2 CO O2 H2O N2
species_Schmidt_number = 0.7d0 0.7d0 0.7d0 0.7d0 0.7d0 0.7d0
viscosity_law = power
mu_ref = 1.8405d-5
T_ref = 300.d0
viscosity_law_coeff = 0.6759d0
prandtl_number = 0.7d0

```

```

! 2S-BFER Reaction #1 : CH4 + 1.5 O2 => CO + 2 H2O
!-----
react_name = CH4-AIR-2S-BFER-1
react_species_number = 4
react_species_name = CH4 O2 CO H2O
react_stoich_coeff = -1.d0 -1.5d0 1.d0 2.d0
react_Arrh_fwd_coeff = 0.5d0 0.65d0 0.d0 0.d0
react_Arrh_bwd_coeff = 0.d0 0.d0 0.d0 0.d0
react_preexp = 4.9d9
react_act_energ = 35500.0d0
react_temp_exp = 0.d0

! 2S-BFER Reaction #2 : CO + 0.5 O2 <=> CO2
!-----
react_name = CH4-AIR-2S-BFER-2
react_species_number = 3
react_species_name = CO O2 CO2
react_stoich_coeff = -1.d0 -0.5d0 1.d0
react_Arrh_fwd_coeff = 1.d0 0.5d0 0.d0
react_Arrh_bwd_coeff = 0.d0 0.d0 1.d0
react_preexp = -2.0d8
react_act_energ = 12000.0d0
react_temp_exp = 0.7d0

```

La lecture de ces bases de données n'est pas évidente puisque le solveur doit être capable de lire des variables de différents types, réel (viscosité), entier, chaîne de caractères (loi de viscosité), tableau de réel (Nombre de Schmidt) ou tableau de chaîne de caractère (Nom des espèces présent dans la réaction).

### 3.2.2 Calcul des propriétés thermodynamiques

Une fois que les différentes propriétés du mélange et des espèces sont lues, le solveur doit être capable de mettre à jour les différentes propriétés thermodynamiques et les différents coefficients de diffusion intervenant.

Tout d'abord, grâce à la base de données contenant les informations sur les espèces, nous devons être capables de calculer l'énergie interne, la constante spécifique des gaz parfaits ainsi que les capacités calorifiques de chaque espèce.

La base de données contient principalement la masse molaire de l'espèce, qui permet de calculer la constante spécifique des gaz parfaits :

$$r_k = \frac{R}{W_k} \quad (3.10)$$

ainsi que l'enthalpie sensible tabulée tous les 100K de 0 à 5000K.

Cela nous permet de calculer l'énergie sensible :

$$e_k(T_i) = \int_{T_0}^T C_{v,k} dT = h_k(T_i) - r_k T_i \quad (3.11)$$

avec  $T_i$  la température tabulée tous les 100K et  $T_0 = 0K$  la température de référence.

Par la suite pour déterminer l'énergie sensible à la température  $T$ , nous utilisons une interpolation linéaire :

$$e_k(T) = e_k(T_i) + (T - T_i) \frac{e_k(T_{i+1}) - e_k(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (3.12)$$

De la même façon, nous pouvons déterminer les capacités calorifiques massiques  $C_{p,k}$  et  $C_{v,k}$  tous les 100K :

$$C_{p,k}(T_i) = \frac{h_k(T_i)}{T_i} \quad (3.13)$$

$$C_{v,k}(T_i) = \frac{e_k(T_i)}{T_i} \quad (3.14)$$

Nous faisons ensuite une interpolation linéaire, pour déterminer  $C_{p,k}(T)$  et  $C_{v,k}(T)$  comme nous l'avons fait pour  $e_k(T)$ .

Réaliser une interpolation linéaire dans un solveur d'ordre élevé peut paraître étrange, cependant, j'ai aussi implémenté dans le solveur JAGUAR deux autres types d'interpolations qui sont elles polynomiales et donc à l'ordre 2 en erreur. Une première basée sur les polynômes de la NASA [3] et une seconde basée sur le modèle de Showmate [30]. Ces méthodes sont détaillées dans l'annexe A. La comparaison de ces méthodes sur une flamme 1D sera faite dans la partie 3.6

### 3.2.3 Calcul des coefficients de diffusion

La viscosité dépend de la température, elle doit donc être actualisée durant le calcul. La loi standard de Sutherland est utilisée pour calculer la viscosité dynamique en fonction de la température :

$$\mu = c_1 \frac{T^{\frac{3}{2}}}{T + c_2} \left( \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (3.15)$$

Avec  $c_1$  et  $c_2$  qui dépendent de l'espèce et sont présents dans la base de données.

La conductivité thermique est calculée grâce à la viscosité, au  $C_p$  déterminé dans la section 2.1, et au nombre de Prandtl présent lui aussi dans la base de données.

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (3.16)$$

Le coefficient de diffusion des espèces est déterminé de la façon suivante :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho S_{c,k}} \quad (3.17)$$

C'est une expression simplifiée puisque l'on considère  $S_{c,k}$  constant. D'autres lois, telle que celle de Bird et Al, pourraient être utilisées mais dans la plupart des cas nous considérons une chimie simplifiée donc cela n'a pas vraiment de sens.

### 3.2.4 Mise à jour de la température

Pour toutes les raisons expliquées précédemment, nous devons mettre à jour la température à chaque itération durant le calcul. Pour cela, nous nous sommes servis de l'énergie interne.

Connaissant toutes les variables conservatives, nous pouvons en déduire l'énergie interne grâce à l'énergie totale et la vitesse.

$$\rho e_{int} = \rho E - \frac{1}{2} \rho U^2 \quad (3.18)$$

Connaissant l'énergie interne à la température  $T$  et l'énergie interne tabulée tous les 100K nous pouvons en déduire la température grâce à une interpolation linéaire.

La mise à jour de la température ainsi que des propriétés thermodynamiques à partir de l'énergie interne calculée en 3.18 a été sujette à beaucoup de questions tout au long de mon stage. En effet cette mise à jour via l'énergie interne induit des erreurs sur la pression que je détaille dans l'Annexe C. La subroutine permettant la mise à jour de la température est détaillée ci-dessous :

```

subroutine updatelocalTemp( solution , temp , iElement )

real(JR) , dimension(:), intent(in) :: solution
real(JR) , intent(inout) :: temp
integer:: iElement
real(JR) :: invRo , u , v , w , normu , eint , elo , ehi , fr
integer :: ind , indpass , ivarspecies , thermo_table_cnt , nSolP , lap
character(len=512):: routine , message
real(JR) , dimension (nVars -5):: Deltah , yk , hk , rwmol
real(JR):: x0 , x1 , Rbar , R , gamma , Cp , Cv , f , fprime , invJaco
integer:: icoeff

    thermo_table_cnt=51
    invRo=JAG_ONE / solution(1)
    u = solution(2)*invRo
    v = solution(3)*invRo
    normu = u * u + v * v + w * w
    eint=solution(5)*invRo - JAG_HALF*normu
    ind = 1
    indpass =0
    do while ( indpass==0 )
        elo = JAG_ZERO
        ehi = JAG_ZERO

```

```

do ivarspecies = 1, nVars-5
  elo = elo + solution(ivarspecies+5) * gas%ek(ind+1, ivarspecies) * invRo
  ehi = ehi + solution(ivarspecies+5) * gas%ek(ind+2, ivarspecies) * invRo
end do

if ( eint <= ehi ) then
  if ( eint >= elo ) then
    fr = (eint - elo) / (ehi - elo)
    Temp = ( ind + fr ) * 100.0
    indpass = 1
  else
    ind = ind - 1
  end if
else
  ind = ind + 1
  ind = MIN(ind, thermo_table_cnt-2)
  if ( ind == thermo_table_cnt-2 ) THEN
    fr = (eint - elo) / (ehi - elo)
    Temp = ( ind + fr ) * 100.0
    indpass = 1
  end if
end if
end do
end subroutine

```

### 3.3 Calcul du flux de chaleur

Grâce à la température qui vient d'être actualisée, nous pouvons déterminer le flux de chaleur durant le calcul qui intervient sur l'équation de l'énergie.

Le flux de chaleur dans un écoulement réactif multi-espèces est défini comme tel :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N (h_k Y_k V_{k,i}) = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \rho \sum_{k=1}^N \left( h_k Y_k D \frac{\nabla Y_k}{Y_k} \right) \quad (3.19)$$

Nous avons négligé le second terme de l'équation dans le solveur car ce terme est un terme de diffusion qui est très faible comparé au flux de chaleur par conduction qui lui est très important dans un cas de combustion.

Afin de calculer le gradient de température, deux méthodes existent. La première, que j'ai implémenté dans le code, est basée sur la température que l'on connaît puisqu'on vient de la mettre à jour dans le calcul. C'est un calcul classique d'un gradient à partir de la variable que l'on connaît. Le détail de cette méthode n'a pas trop d'intérêt. La seconde méthode, que je vais détailler, est basée sur l'équation d'état :

$$P = \rho R T \quad (3.20)$$

$$\nabla T = \nabla \left( \frac{P}{\rho R} \right) \quad (3.21)$$

$$= \frac{1}{R} \left( \frac{\rho \nabla P - P \nabla \rho}{\rho^2} \right) \quad (3.22)$$

Le gradient de pression est lui connu à partir de l'équation de l'énergie :

$$P = (\gamma - 1) \left( \rho E - \frac{\rho u^2}{2} \right) \quad (3.23)$$

$$\nabla P = (\gamma - 1) \left( \nabla (\rho E) - \left( \nabla \rho \frac{u^2}{2} + 2\rho u \nabla u \right) \right) \quad (3.24)$$

Cette deuxième méthode s'est avérée donnant les mêmes résultats pour un temps de calcul 20% plus faible. On a donc retenu cette seconde méthode pour la suite.

### 3.4 Chimie

L'implémentation de la chimie à travers les termes sources est la dernière étape de l'implémentation de la combustion dans le solveur. L'ajout du terme source peut s'avérer être quelque chose de délicat.

Les effets chimiques dans le modèle de combustion sont décrits par une loi classique d'Arrhenius écrit pour chaque réactif et chaque produit. Les détails des expressions des termes sources seront expliqués dans l'Annexe B.

Le dégagement de chaleur est lui calculé à partir du taux de réaction de chaque espèce calculé de la manière suivante :

$$\dot{\omega}_k = - \sum_k^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^\circ \quad (3.25)$$

La chimie peut être validée sur un cas test d'une flamme de diffusion  $CH_4/AIR$  avec une cinétique à 2 étapes. Ce cas test est détaillé dans l'Annexe A.

### 3.5 Validation de l'implémentation de la combustion : Simulation d'une flamme de pré-mélange 1D Méthane/Air

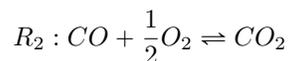
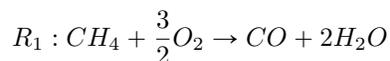
Le cas standard pour valider l'implémentation de la combustion dans le solveur est la simulation d'une flamme 1D. Nous avons simulé la flamme  $CH_4/AIR$ . Nous avons choisi dans un premier temps de simuler une flamme de pré-mélange car les phénomènes de diffusion sont faibles et donc cela est plus facile à simuler. La vitesse, la pression, la température, les densités de chaque espèce, le dégagement de chaleur ainsi que les taux de réactions seront comparés avec une simulation d'AVBP.

#### 3.5.1 Paramètre de la simulation

JAGUAR ne peut traiter les cas 1D, nous allons donc considérer un problème 2D. La géométrie est un carré de 0.02cmx0.02cm. Le maillage est un quadrillage régulier de 64x64. Le degré du polynôme choisi pour la simulation est  $p=4$  et le schéma de Runge-Kutta utilisé est un schéma d'ordre 6 optimisé pour la SD. Le solveur de Rieman considéré est le solveur de Roe adapté aux multi-espèces. Les conditions aux limites utilisées sont basées sur une condition d'injection classique et une condition de sortie sur la pression qui est relaxée. Les conditions à la limite sont résumées dans le tableau suivant :

| Entrée/Sortie : | $U_n$  | $U_t$ | T   | $Y_{N_2}$ | $Y_{O_2}$ | $Y_{CH_4}$ | Pression |
|-----------------|--------|-------|-----|-----------|-----------|------------|----------|
| Valeurs :       | 0.2815 | 0     | 300 | 0.7328    | 0.2227    | 0.0445     | 101325.0 |

La flamme pré-mélangée a une température initiale  $T_i = 300K$ , une pression  $P = 1atm$  et une richesse de  $\Phi = 0.8$ . La cinétique chimique considérée est une chimie réduite à 2 étapes :



$R_1$  est une réaction irréversible tandis que  $R_2$  est une réaction réversible. L'initialisation de la solution se fait déjà à un état d'équilibre. Nous initialisons la solution grâce à un fichier solution de CANTERA. Il a donc fallu coder un outil permettant de lire le fichier solution de CANTERA dans JAGUAR.

### 3.5.2 Résultats et discussions

La simulation de la flamme 1D  $CH_4/AIR$  avec JAGUAR est comparée à une flamme 1D simulée avec AVBP. La plupart des variables telles que la densité, la vitesse ou la température semblent extrêmement bien prédits par JAGUAR. Cependant nous rencontrons certains problèmes sur la pression, nous avons un pic de pression sur la flamme, là où le gradient de température est le plus élevé. Une multitude de simulations ont été réalisées notamment avec des maillages extrêmement raffinés au niveau du gradient de température cependant ce pic de pression (même s'il était plus faible) persistait. De plus ce pic de pression grandit au cours du calcul jusqu'à faire crasher le calcul. Les méthodes spectrales semblent mal gérer les forts gradients de température. J'ai consacré une grande partie de mon stage à essayer de comprendre pourquoi il apparaît et comment faire pour lutter contre ce phénomène.

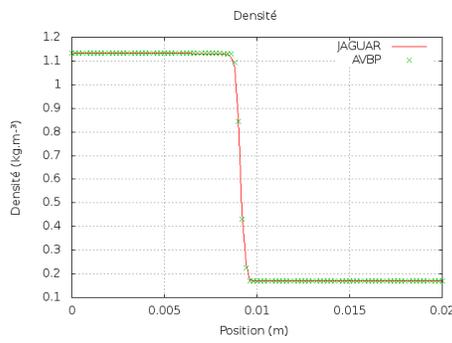


FIGURE 3.1: Profil de la densité

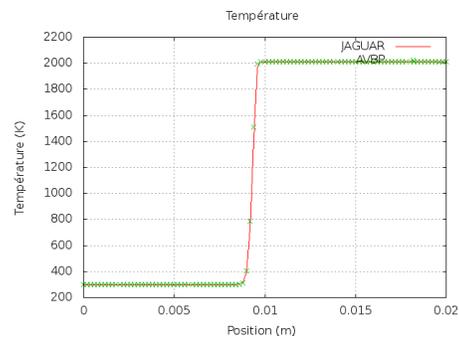


FIGURE 3.2: Profil de température

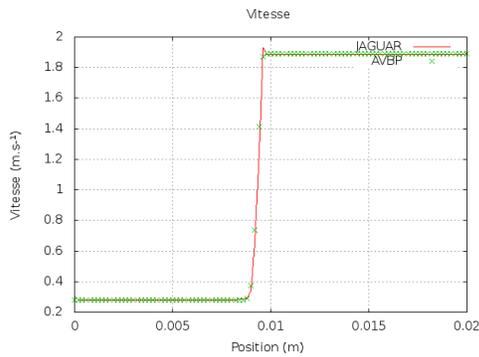


FIGURE 3.3: Profil de vitesse

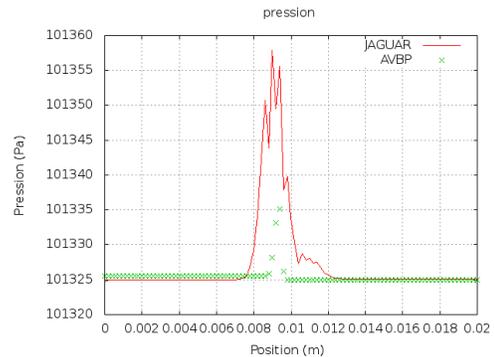


FIGURE 3.4: Profil de pression

Concernant les résultats de la partie chimique, le dégagement de chaleur et les différents taux de réaction semblent effectivement bien en accord avec AVBP. Le calcul de la vitesse de flamme théorique confirme que JAGUAR prédit bien la partie chimique :

$$S_L = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \dot{\omega}_T dx}{\rho_1 Y_F^1 Q} \quad (3.26)$$

Nous retrouvons la même valeur que théoriquement,  $S_L = 0.2815 \text{ m.s}^{-1}$

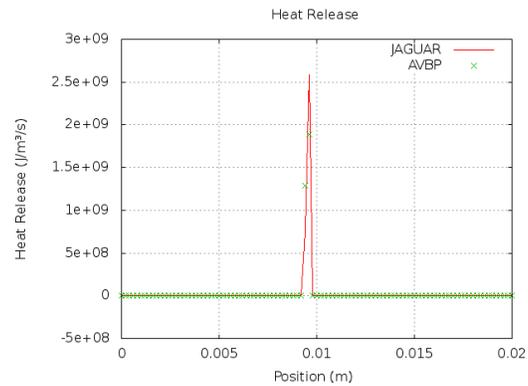


FIGURE 3.5: Profil du dégagement de chaleur

Concernant les profils des densités des espèces, les résultats de JAGUAR montrent un excellent accord avec AVBP. Ils ne semblent pas réellement perturbés par les oscillations de pression, ce qui est plutôt encourageant. Le cas test de la flamme 1D de diffusion a été réalisé afin de valider la bonne implémentation de la chimie dans le code. Ce cas est détaillé dans l'Annexe C.

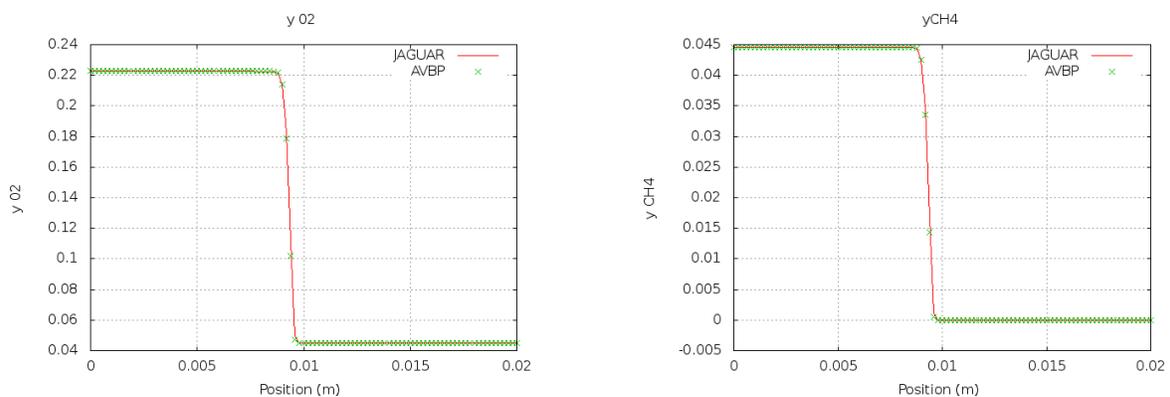


FIGURE 3.6: Profil des espèces réactives

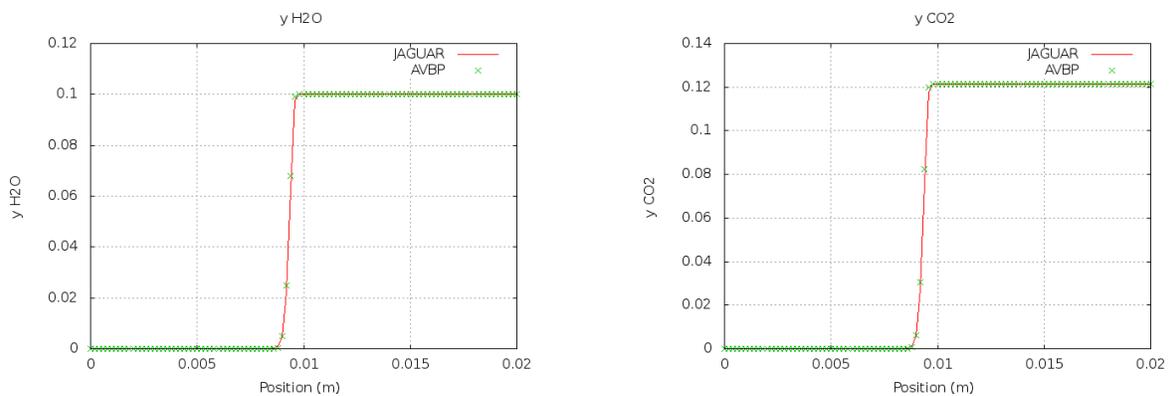


FIGURE 3.7: Profil des espèces produites

### 3.6 Discussion sur les oscillations de pression

Essayer de gérer les oscillations de pression à l'interface de la flamme, à l'endroit où les gradients de température sont les plus forts, m'a occupé pendant une grande partie de mon stage. J'ai donc essayé une multitude de tests, à des degrés de polynôme différents (pair comme impair), avec des maillages extrêmement raffinés notamment sur l'interface de la flamme, sans résultat probant.

La manière de calculer la pression, en passant par l'énergie :

$$P = (\gamma - 1) \left( \rho E - \frac{1}{2} \rho U^2 \right) \quad (3.27)$$

ou en passant par l'équation d'état des gaz parfaits :

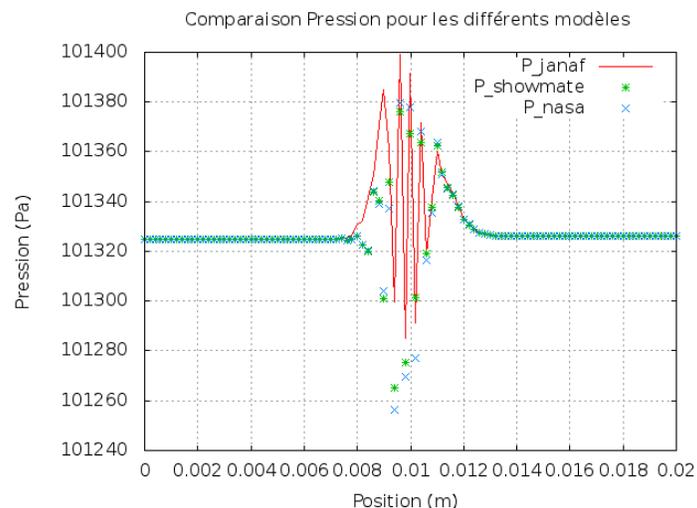
$$P = \rho r T \quad (3.28)$$

n'influe pas sur les oscillations, les deux méthodes donnent le même résultat ce qui est plutôt encourageant.

J'ai pu remarquer durant mon stage que les oscillations apparaissaient lors de l'actualisation des variables thermodynamiques et des propriétés thermodynamiques des espèces. Ces diverses mises à jour induisent de légères oscillations qui se répercutent sur la pression. Comme expliqué dans l'annexe A, plusieurs types d'interpolations existent pour mettre à jour la température et les propriétés thermodynamiques :

- Interpolation linéaire (JANAF)
- Interpolation polynomiale de type NASA
- Interpolation polynomiale de type Showmate

À la traversée de la flamme, la température passe de 300K à 2000K, nous changeons donc plusieurs fois de table dans le cas JANAF ainsi que de coefficients dans les cas polynomiaux. Comme énoncé dans l'annexe A, les changements de coefficients sont moins nombreux lors d'une interpolation polynomiale (coefficients tabulé tous les 1000K dans le cas de la NASA contre 100K dans le cas JANAF) or ce sont ces changements de tables ou de coefficients qui créent des pics sur la pression. On est donc en mesure de penser qu'une interpolation polynomiale donnera de meilleurs résultats que l'interpolation linéaire. Il n'en est malheureusement rien comme le prouve la figure suivante :



L'interpolation polynomiale ne permet pas de donner de meilleurs résultats. En plus de cela, une interpolation polynomiale de type NASA ou Showmate est très gourmande en temps de calcul comparée à une interpolation linéaire de type Janaf.

### 3.6.1 Méthode permettant de gérer les oscillations de pression

Dans la littérature et notamment dans les articles de Y.Lv et M.Ihme, les problèmes d'oscillations de pression dans des écoulements réactifs sont mis en évidence pour les méthodes spectrales et notamment la Discontinuous Galerkin. Y.Lv et M.Ihme ont réussi à gérer ces problèmes d'oscillations de pression comme le décrivent plusieurs de leurs articles, [20], [19] et [18], qui montrent la simulation d'un cas classique de combustion turbulente ainsi qu'une simulation de détonation.

Afin de gérer ces problèmes d'oscillations, Y.Lv et M.Ihme donnent dans leurs articles [20] et [21] une méthode permettant de gérer ces oscillations parasites de pression. Pour gérer les oscillations de pression, Y.Lv et M.Ihme proposent de coupler plusieurs procédés ensemble. Une méthode permettant d'assurer la positivité de la pression, un senseur pour détecter les forts gradients et l'implémentation d'une viscosité artificielle à appliquer lorsque l'on est en présence de forts gradients afin de permettre une dissipation plus importante.

La méthode permettant d'assurer la positivité de la pression est basée sur l'entropie. En supposant qu'à l'itération  $n + 1$  l'entropie est supérieure ou égale à l'entropie de l'itération  $n$ , nous pouvons en déduire une inégalité sur la pression :

$$\frac{p(U^{n+1})}{\rho^\gamma(U^{n+1})} \geq \exp(\text{Min}(s(U^n))) \quad (3.29)$$

Cette inégalité permet d'assurer la stricte positivité de la pression et de la masse volumique.

Le senseur est lui aussi basé sur l'entropie. L'entropie résiduelle définie comme suit :

$$R_s = -\frac{\partial \rho s}{\partial t} - \frac{\partial \rho u_k s}{\partial x_k} \quad (3.30)$$

est un bon moyen de capter les forts gradients. Puisque si  $R_s$  est nulle alors la solution est lisse mais si  $R_s$  devient négatif alors la solution n'est plus lisse et nous sommes en présence d'un fort gradient.

Ainsi si  $R_s$  est négatif Y.Lv et M.Ihme appliquent une viscosité artificielle, définie comme suit :

$$\mu_{artificiel} = (\beta - 1) \frac{C_1(p)}{C_2(p)} a h \quad (3.31)$$

Les coefficients sont déterminés via une analyse de stabilité et se doivent d'être ajustés à chaque cas que l'on simule.

Cette viscosité est appliquée de la manière suivante :

$$\mu_{nouveaux} = \mu_{visqueux} + \mu_{artificiel} \quad (3.32)$$

L'application de cette méthode donne de très bons résultats comme l'énonce l'article [17]. Cette méthode élimine les oscillations parasites de pression. Pour que JAGUAR devienne un code de calcul efficace permettant de gérer les problèmes de combustion, je pense que l'implémentation d'une méthode de ce genre est obligatoire. Cependant le fait que cette méthode fonctionne pour la Discontinuous-Galerkin ne garantit pas forcément que cette méthode soit applicable à la Différence Spectrale.

## 4 Simulation d'un cas industriel non réactif avec JAGUAR : The Volvo Bluff Body

La dernière partie de mon stage a consisté à la simulation d'un cas industriel non-réactif avec JAGUAR. La simulation d'une multitude de cas tests a déjà été réalisée avec JAGUAR, cependant la simulation d'un cas industriel n'a jamais été faite. Cette simulation nous a permis d'en connaître un peu plus sur la robustesse de JAGUAR en terme de maillage et sur l'utilité des conditions à la limite présente dans le code.

### 4.1 Description de la simulation

La configuration Volvo consiste en une chambre de section rectangulaire ( $0.12\text{m} \times 0.24\text{m}$ ) avec un corps non-profilé (sous forme d'un prisme) situé à l'intérieur. La taille totale de la chambre est de  $1.50\text{m}$ . Le prisme est centré en  $x = 0.82\text{m}$ , sa profondeur s'établit sur toute la profondeur du domaine et la taille des ses côtés est de  $0.04\text{m}$ .

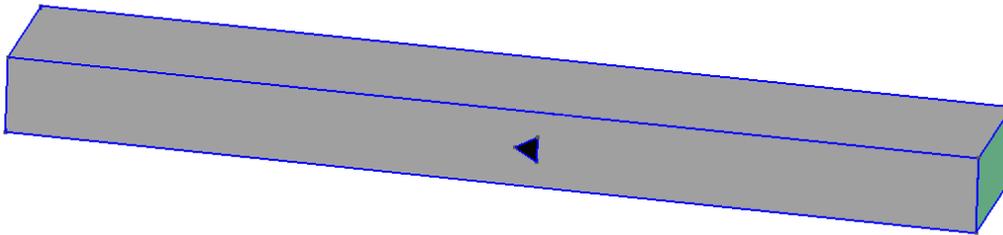


FIGURE 4.1: Domaine de simulation du cas Volvo

La configuration Volvo est un bon prototype pour investiguer les instabilités de combustion [7] ainsi que pour savoir si un code de calcul arrive à bien prédire ou non la combustion turbulente. Dans notre cas les problèmes de pression n'étant pas réglés, nous ne pouvons pas réaliser ces cas avec de la combustion. Nous avons donc décidé de mettre en place le cas et de regarder seulement le cas non-réactif. C'est ce qui a été mon travail durant la dernière partie de mon stage. Le cas non-réactif présente plusieurs intérêts, en effet le prisme crée des instabilités hydrodynamiques ainsi nous pouvons observer une allée de Von Karman qui se crée à l'aval du prisme. De plus cette simulation permet de voir si JAGUAR est robuste pour ce type de simulation, avec énormément de turbulences, ou non. Les expériences de la configuration Volvo (cas non-réactif et cas réactif) ont été réalisées [5] et une multitude de données expérimentales ont été extraites. Cela va nous permettre de comparer la simulation JAGUAR avec les données expérimentales.

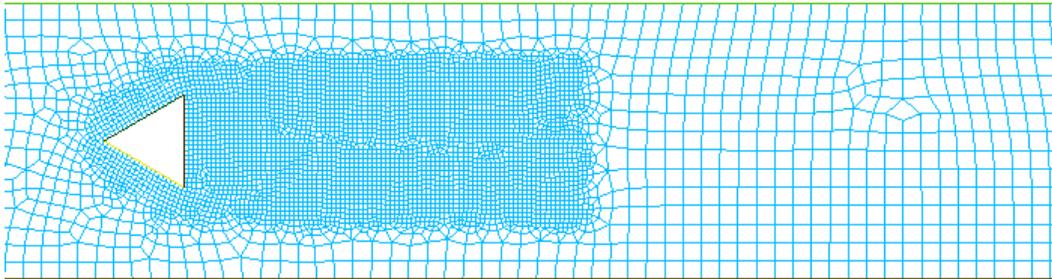
### 4.2 Domaine de résolution

Concernant le domaine de résolution, nous avons décidé de procéder à la simulation sur le domaine entier comme cela a été accompli par AVBP [7]. D'autres simulations ont été réalisées avec d'autres codes, et notamment en Discontinuus Galerkin par M.Ihme et L.Lv à Stanford. Leur simulation a été opérée sur un domaine tronqué afin d'avoir un temps CPU moins important. Cependant cette expérience est vraiment sensible à tous les paramètres, nous avons donc fait le choix de faire la simulation sur le domaine entier au risque d'avoir un temps CPU relativement important, environ 8000h CPU.

Le maillage de la géométrie a été effectué sous le logiciel GMSH, en effet JAGUAR a été codé de façon à ne lire seulement que les fichiers GMSH. GMSH est un logiciel open source de maillage. J'ai donc appris à me servir de ce logiciel durant mon stage afin de mailler la configuration Volvo. De plus, un élément

important à connaître est que JAGUAR ne lit, actuellement, que des mailles hexahédriques. Ce qui peut s'avérer un vrai casse tête sous GMSH lorsque l'on fait un maillage non structuré. Le maillage se doit d'être raffiné en aval du prisme afin de bien capter les structures tourbillonnaires qui se détachent de chaque côté du prisme. Dans l'article de Guang [8], il a été montré que l'impact de la couche limite sur le développement des structures tourbillonnaires n'est pas primordial ainsi nous n'avons pas sur-maillé proche du prisme et nous ne captions donc pas précisément la couche limite.

La première simulation a été réalisée pour un degré de polynôme  $p = 2$  ce qui équivalait à environ 2 millions de degrés de liberté, Une seconde simulation a été réalisée à  $p = 3$ .



2

FIGURE 4.2: Maillage du cas Volvo

### 4.3 Paramètres de la simulation

Pour réaliser la simulation, nous initialisons de l'air dans le domaine à une vitesse constante axiale de 16.6 m/s qui correspond à un  $Re = 48000$ . Les conditions à la limite que nous imposons sont une condition de mur sans glissement sur le prisme ainsi que sur les murs du domaine. Concernant l'entrée, la condition à la limite une vitesse d'injection axiale ( $u=16.6\text{m/s}$ ). En sortie nous contraignons une pression égale à la valeur de pression atmosphérique.

Un premier calcul a été effectué sans qu'aucune des conditions à la limite à l'entrée et la sortie ne soient relaxées. Ce calcul n'a pas abouti, en effet lorsque le premier tourbillon arrivait sur la sortie, nous avons une forte réflexion dans le domaine qui ne permettait pas de continuer le calcul. La condition à la limite ne permettait pas aux tourbillons, formés grâce aux prismes, de quitter le domaine. J'ai donc mis en place des NSCBC en entrée (relaxée sur la vitesse) et en sortie (relaxée sur la pression) afin de permettre aux tourbillons et à l'énergie acoustique de quitter le domaine sans réflexion. Une autre solution aurait pu être envisagée, celle d'agrandir le domaine et dé-raffiner en sortie afin d'avoir une forte dissipation des tourbillons et de ne pas avoir de réflexion importante en sortie. Ainsi nous aurions repoussé la condition de pression qui pose toujours quelques problèmes en CFD. Le pas de temps considéré est de  $3.5 \cdot 10^{-7}$  s soit  $CFL = 0.25$ .

### 4.4 Résultats et discussions

Dans notre cas nous nous intéressons uniquement à l'hydrodynamique, le champs de vitesse présenté en figure 4.3 montre l'apparition des tourbillons à l'aval du prisme. Nous observons que dans un premier temps le comportement de la couche de cisaillement est dicté par une instabilité de Kelvin-Helmoltz alors que le sillage est lui dicté par une instabilité de Benahrd Von-Kerman, qui est caractérisé par la convection de vortex contra-rotatif. On peut s'apercevoir de plus que la couche limite adhère au mur puisque le  $Re$  est relativement modéré. La dynamique de l'écoulement est donc régie par la couche de cisaillement ainsi que le sillage à l'aval du bluff body. La simulation 3D, montre que la couche de cisaillement est quasi bi-dimensionnelle dans le sens de l'envergure tandis que le détachement tourbillonnaire est lui fortement

tri-dimensionnel.

Les résultats obtenus avec JAGUAR sont comparés à l'expérience dont les données ont été obtenues dans l'article [5]. Ils sont de plus comparés au code de Discontinuous Galerkin de M.Ihme et Y.Lv à Stanford [34] et aux récents résultats d'AVBP [7].

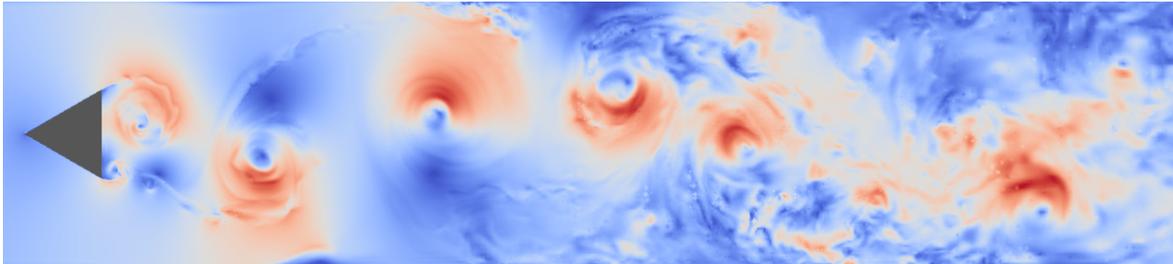


FIGURE 4.3: Champ de vitesse instantané à l'aval du bluff body

Les vitesses sont moyennées sur 320ms ce qui correspond à 4 temps convectifs dans la chambre entière. Nous avons comparé les vitesses, axiale et transverse, moyennées dans le temps à  $x$  fixée. Ainsi que la vitesse moyenne axiale au centre du canal dans la zone aval du prisme.

Les profils de vitesse axiale (Fig 4.4) permettent de mettre en évidence une zone de recirculation juste derrière le prisme. JAGUAR arrive à capter avec succès le profil de l'écoulement moyen derrière le prisme. Il obtient d'aussi bons résultats que le code de Discontinuous Galerkin de Stanford et les deux montrent un très bon accord avec l'expérience. Les résultats en  $p = 3$  donnent cependant de meilleurs résultats que ceux en  $p = 2$  ce qui est cohérent puisque l'on raffine plus. Concernant les profils de vitesse transverse (Fig 4.5), l'écart avec l'expérience peut s'expliquer par l'absence de turbulence en entrée lors de notre simulation ce qui n'est pas le cas dans l'expérience, même si les résultats en  $p = 3$  sont sensiblement meilleurs que ceux en  $p = 2$ . Ainsi dans l'expérience, il y a déjà 5% de turbulence lorsque le fluide arrive sur le prisme alors que dans notre cas il n'y en a pas.

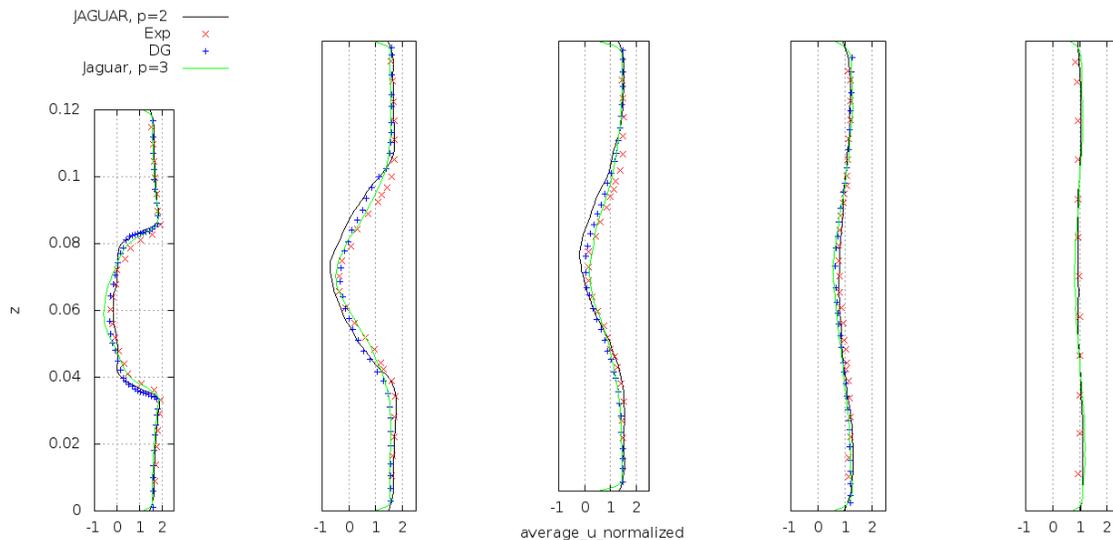


FIGURE 4.4: Vitesse axiale moyenne pour  $x=1.5\text{cm}$ ,  $x=3.8\text{cm}$ ,  $x=6.12\text{cm}$ ,  $x=15\text{cm}$  et  $x=37.6\text{cm}$

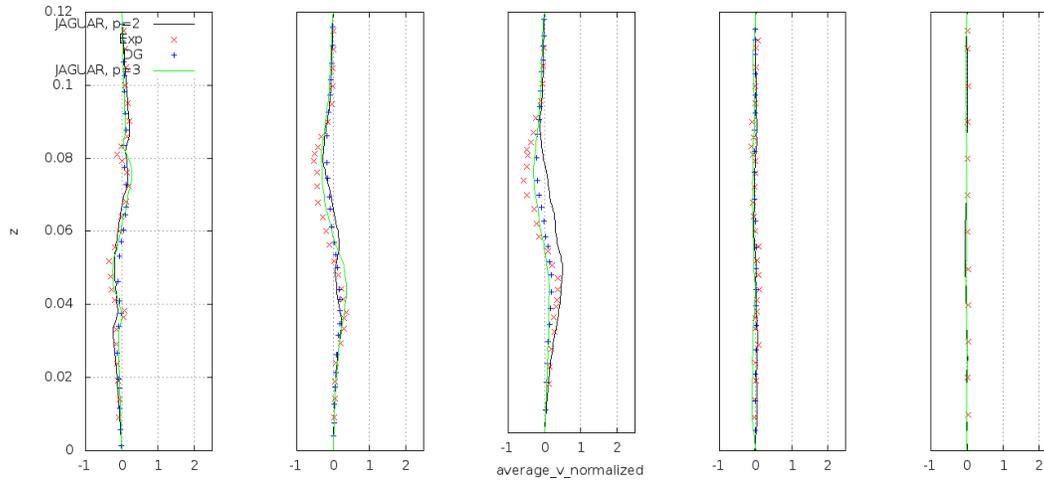


FIGURE 4.5: Vitesse transverse moyenne pour  $x=1.5\text{cm}$ ,  $x=3.8\text{cm}$ ,  $x=6.12\text{cm}$ ,  $x=15\text{cm}$  et  $x=37.6\text{cm}$

Le profil de vitesse axiale le long du domaine met en évidence la zone de recirculation derrière le prisme ainsi que la zone de ré-accelération du fluide loin du prisme. Ces 2 zones sont relativement bien captées par JAGUAR même si les résultats en  $p = 3$  ne sont pas aussi bons qu'attendus. Les différences avec AVBP et l'expérience peuvent encore s'expliquer par l'absence de turbulence en entrée ce qui n'est pas le cas de l'expérience et d'AVBP. De plus le nombre de degrés de liberté dans la simulation d'AVBP est supérieur à celui des simulations de JAGUAR. D'autres résultats de notre simulation sont donnés dans l'annexe D.

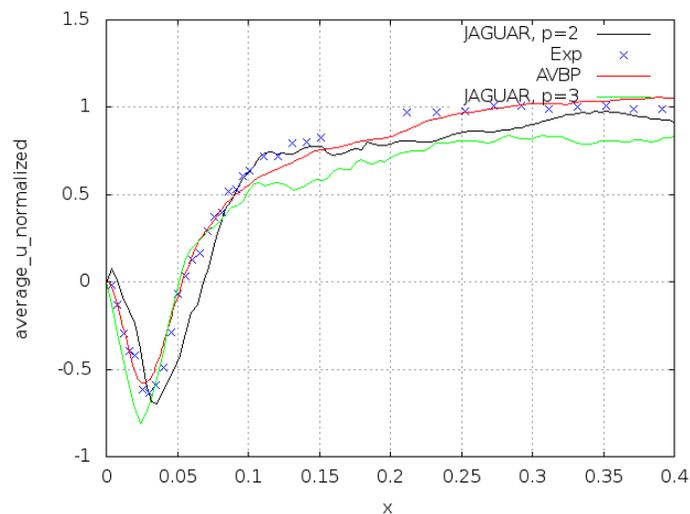


FIGURE 4.6: Vitesse axiale moyenne commençant aux prisme

Pour conclure sur ce cas, nous pouvons affirmer que JAGUAR donnent d'excellents résultats sur un cas non réactif. Pour rapprocher nos résultats de l'expérience, nous devrions jouer sur deux paramètres. L'augmentation du degré du polynôme, nous voyons que nous avons de meilleurs résultats en  $p = 3$  qu'en  $p = 2$  et nous pouvons donc espérer avoir d'encore meilleurs résultats si nous passons en  $p = 4$ , ce qui permettrait de raffiner encore plus et donc de capturer encore plus précisément la physique contenue dans notre cas. Puis de mettre en place un calcul avec de l'injection turbulente en entrée ce qui permettrait de capturer encore mieux la zone de recirculation présente derrière le prisme.

## 5 Conclusion

---

Mon stage s'est déroulé en deux parties. La première a consisté en la compréhension de la méthode des différences spectrales et à l'implémentation de la combustion dans JAGUAR, la deuxième, en la simulation d'un cas industriel non-réactif avec JAGUAR. Plus de 4 mois ont été nécessaires afin d'implémenter la combustion, de corriger les bugs, de mettre en place différents modèles de calculs des variables et propriétés thermodynamiques. Plusieurs cas tests ont été effectués afin de vérifier la cohérence des diverses phases de l'implémentation de la combustion. Le cas test de la flamme de diffusion 1D permet de valider la mise en place du multi-espèces et de la chimie. Le cas test de la flamme 1D pré-mélangés et les différents cas tests présentés dans l'Annexe A permettent aussi d'approuver les différents stades de la mise en place de la combustion dans JAGUAR. Seules des oscillations parasites sur la pression persistent. J'ai effectué un énorme travail de recherche afin de trouver un moyen permettant d'effacer ces oscillations de pression. Cependant mon travail ne consistait pas à élaborer un modèle tel que celui décrit dans la section 3.6.1.

Le travail effectué durant mon stage a permis d'élucider les travaux partiellement réalisés en terme de combustion dans JAGUAR [10]. En particulier, le fait qu'une interpolation polynomiale ne permette pas de régler les problèmes d'oscillations de pression lors d'un fort gradient de température. Le fait que, la définition de la pression dans JAGUAR n'a que peu d'importance, puisque toutes les formulations (soit à partir de l'énergie, soit à partir de la loi des gaz parfaits) sont équivalentes et donnent les mêmes résultats après la correction de différents bugs. Il en est de même sur la façon de calculer le flux de chaleur (soit à partir du gradient de pression, soit à partir de la température). Toutes ces méthodes ne se valent pas en terme de temps de calcul, cependant elles donnent les mêmes résultats ce qui est plutôt cohérent. Après avoir passé plusieurs semaines à régler les problèmes d'oscillations de pression, je pense que l'implémentation d'une méthode comme celle décrite dans la section 3.6.1 ou d'un solveur de Riemann adapté à la combustion, comme celui décrit dans l'article [25] sera obligatoire pour pouvoir simuler proprement des cas de combustion avec un code de différence spectrale.

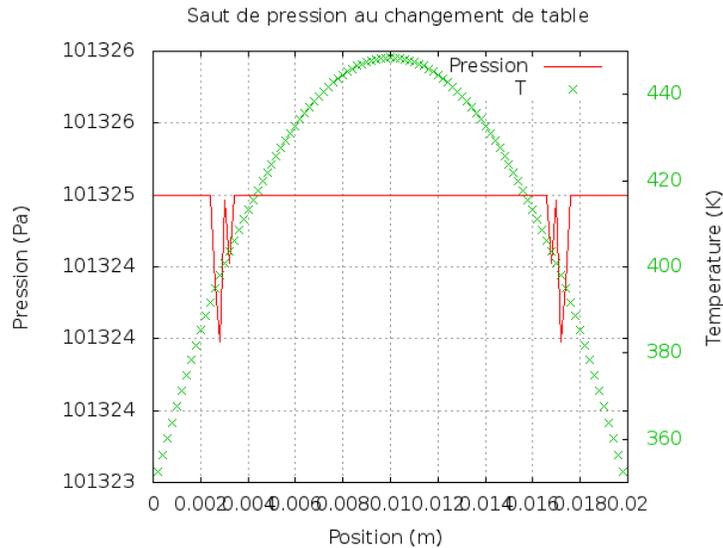
Pour la dernière partie de mon stage, j'ai effectué la simulation d'un cas industriel non-réactif avec JAGUAR. Cela n'avait jusqu'alors jamais été expérimenté ce code et cela a permis d'approfondir les connaissances sur ce code (le type de maillage, le ratio entre les mailles). On peut en conclure que ce logiciel autorise des dé-raffinements très importants par rapport aux codes de CFD classiques. Grâce à ce cas, nous nous sommes rendus compte que les conditions aux limites qui sont codées dans la version officielle de JAGUAR limitent fortement les simulations que l'on peut accomplir avec ce code. L'implémentation de conditions aux limites plus élaborées est nécessaire afin d'exécuter des simulations complexes. Cependant, JAGUAR obtient d'excellents résultats comme le démontre les résultats énoncés dans la section 4.4. C'est extrêmement encourageant pour le futur de ce solveur. Concernant l'avenir de ce solveur, le CERFACS et l'ONERA vont collaborer sur la partie énergétique dans JAGUAR. Les connaissances mutualisées entre ces deux grands centres de recherches, permettront très certainement d'obtenir des avancées notables dans la simulation de la combustion avec un code de différence spectrale.

D'un point de vue personnel, ce stage a été très enrichissant. J'ai amélioré et développé mes compétences dans la programmation d'un code de calcul, ainsi qu'affiné mes connaissances dans différents types de méthodes et schémas numériques. J'ai aussi découvert et expérimenté une multitude de nouveaux logiciels : JAGUAR, GMSH, AVBP et ANTARES. Enfin grâce à la dernière partie de mon stage j'ai consolidé mes acquis en simulation numérique. Le CERFACS, centre de recherche mondialement reconnu pour son expertise, est un excellent laboratoire pour parfaire son apprentissage. Les conversations, les présentations et les meetings pratiqués au quotidien avec les personnes qui nous entourent permettent de perfectionner les connaissances générales acquises en mécanique des fluides lors du cursus d'ingénieur à l'ENSEEIH.

## Annexe A : Interpolation polynomiale

La température doit être calculée et actualisée pendant le calcul. Or nous résolvons seulement les variables conservatives, connaissant donc  $\rho E$  nous pouvons déterminer la température. Pour cela, plusieurs solutions s'offrent à nous, la solution la plus basique, décrite dans le rapport, consiste à faire une interpolation linéaire entre l'enthalpie tabulée tous les 100K et la température.

Nous pouvons voir, sur le cas test suivant, que le fait que l'enthalpie soit tabulé tous les 100K pose des problèmes au moment où la température change de table. En effet cela crée des pics de pression tous les 100K :



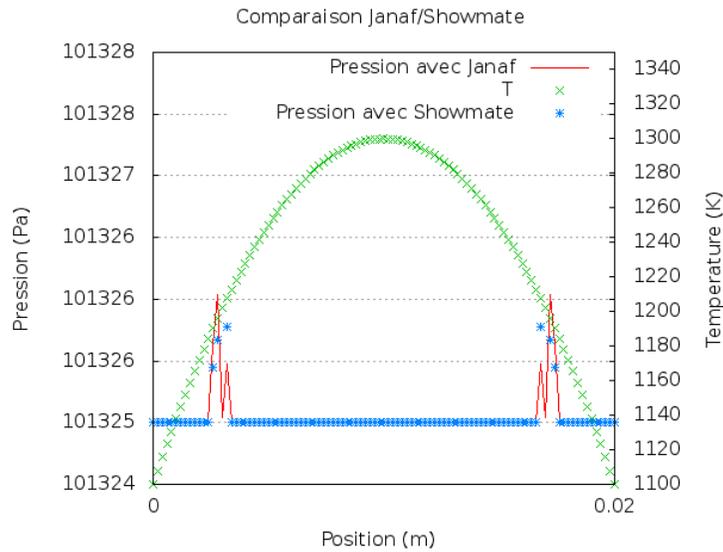
Pour essayer de lutter contre ces pics, j'ai implémenté dans un premier temps le showmate modèle, qui consiste en une interpolation polynomiale de la température à partir de l'énergie. Les propriétés thermodynamiques telles que le  $C_p$  ou le  $C_v$  sont déterminées via une interpolation avec la température qui vient d'être calculée. Cette interpolation commet une erreur de degrés 2 et plus une erreur de degrés 1 comme c'est le cas avec l'interpolation linéaire. Le showmate modèle est défini comme suit [3] :

$$H^\circ - H_{298.15}^\circ = AT + \frac{Bt^2}{2} + \frac{Ct^3}{3} + \frac{Dt^4}{4} - \frac{E}{t} + F - H \quad (\text{A.1})$$

$$C_p^\circ = A + Bt + Ct^2 + Dt^3 + \frac{Et^2}{2} \quad (\text{A.2})$$

Avec  $C_p$  la capacité calorifique en  $J/mol/K$ ,  $H^\circ$  l'enthalpie standard en  $kJ/mol$  et  $t = \text{Temperature}(K)/1000$ . Les coefficients dépendent de la gamme de température ainsi que de l'espèce que l'on considère.

Cependant, ce modèle ne règle pas les problèmes présentés dans la figure ci-dessus. En effet lorsque que nous changeons de gamme pour les coefficients, comme c'est le cas à 1200K pour le CH4 qui est considéré ici dans ce cas test, nous observons aussi un pic sur la pression :



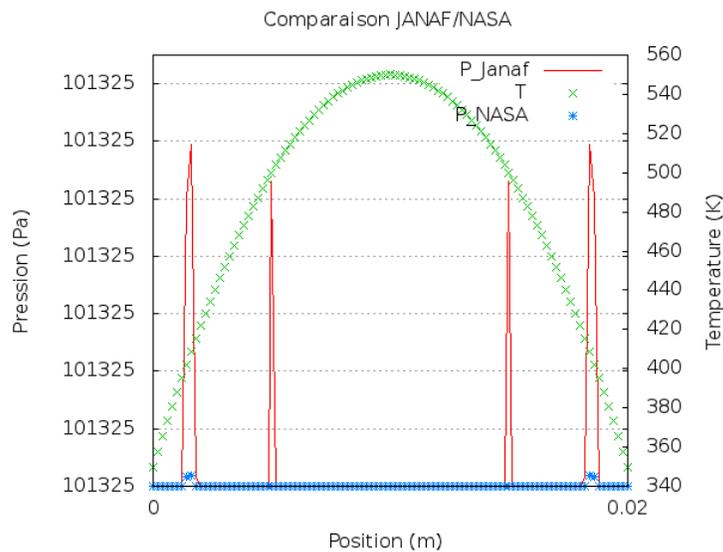
Cependant, ces pics sont moins nombreux car les changements de tables ne s'effectuent plus tous les 100K mais sont plus espacés.

J'ai implémenté un autre modèle d'interpolation polynomiale qui se base sur les polynômes de la NASA [30], qui sont définis comme tel :

$$\frac{H}{RT} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \tag{A.3}$$

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \tag{A.4}$$

Avec les coefficients  $a_i$  des coefficients qui dépendent de l'espèce que l'on considère et qui sont tabulés tous les 1000K. On s'attend donc à avoir un pic à 1000K lorsque que l'on change de coefficients :



On s'aperçoit que l'on a un pic, cependant ce pic est moins important qu'avec l'interpolation linéaire classique. Ce modèle peut paraître optimal, mais il n'a pas été retenu car les temps de calculs sont trop importants par rapport à une interpolation linéaire classique et la précision n'est pas réellement améliorée. Sur une flamme 1D, nous verrons dans le rapport que les résultats entre une interpolation linéaire et une interpolation polynomiale sont les mêmes, ce qui explique notre choix.

## Annexe B : Résolution des taux de réaction des espèces

Pour détailler le calcul du taux de réaction, nous considérons un système de M espèces réagissant à travers N réactions. :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu_{kj} \mathcal{M}_k \quad \text{pour } j = 1, M \quad (\text{B.5})$$

Avec les  $\mathcal{M}_k$  qui représentent l'espèce k,  $\nu'_{kj}$  et  $\nu_{kj}$  sont les coefficients stoechiométriques de l'espèce k dans la réaction j.

Le taux de réaction pour chaque espèce k est la somme des taux de réactions produite par toutes les réactions M :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (\text{B.6})$$

Où  $\mathcal{Q}_j$  est le taux de progrès de la réaction. Pour que la combustion commence, il faut la présence des espèces réactives ainsi que d'une température assez élevée.

Ce taux de progrès de la réaction j est défini comme  $\mathcal{Q}_j$  :

$$\mathcal{Q}_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu_{kj}} \quad (\text{.7})$$

Avec  $K_{fj}$  et  $K_{rj}$  les taux de la réaction j respectivement dans le sens direct de la réaction et dans le sens inverse de la réaction. Ces termes constituent un problème central dans la modélisation des problèmes de combustion.

$K_{fj}$  est défini comme tel :

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{T_{aj}}{T}\right) \quad (\text{.8})$$

et  $K_{rj}$  :

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{\left(\frac{p_0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right)} \quad (\text{.9})$$

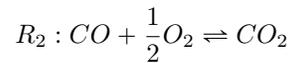
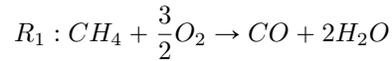
Dans le solveur, pour arriver à calculer  $\mathcal{Q}_j$ , il faut connaître la constante pré-exponentielle, l'exposant de la température et l'énergie d'activation pour chaque réaction. Il faut donc que ces données soient spécifiées dans la base de données relatives aux réactions entre les espèces.

## Annexe C : Simulation d'une flamme de diffusion 1D

### Paramètre numérique de la simulation :

Ce cas test permet de valider l'implémentation des termes sources dans le code. Il consiste en injectant du côté gauche, d'un domaine 2D considéré comme carré, du fuel ici du  $CH_4$  et du côté droit l'oxydant (ici de l'Air). L'objectif de ce cas est de vérifier que la formation ainsi que la proportion des différents produits de la réaction ayant lieu entre le  $CH_4$  et l'Air est cohérente.

Le mécanisme chimique considéré est le même que dans le cas de la flamme de prémélange, c'est à dire une chimie à 2 étapes et à 6 espèces :



La simulation est initialisée à une pression  $P = 1\text{Atm}$  et les espèces réactives sont initialisées et injectées de manière à avoir une richesse  $\Phi = 0.8$ . L'initialisation des réactifs est montrée ci-dessous :

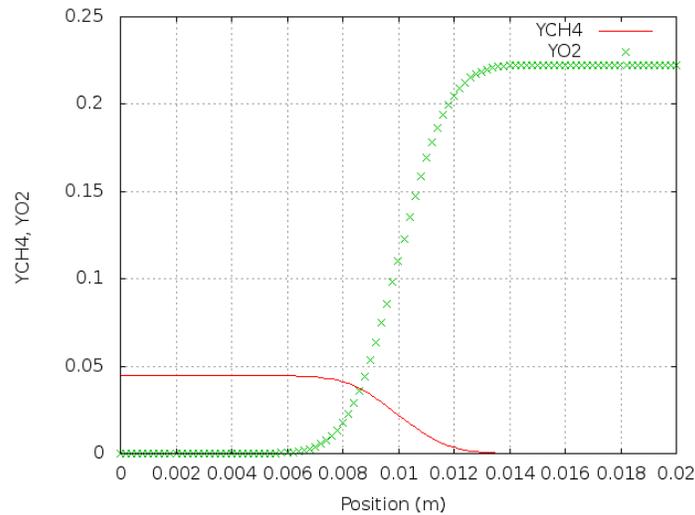


FIGURE .1: Profil des espèces réactives

### Résultats :

La figure ci-dessous montre l'évolution des fractions massiques des produits peu après leur apparition. Nous pouvons observer que la fraction massique d'eau est environ deux fois plus grande que celle du  $CO$  ce qui semble cohérent avec la première équation du mécanisme chimique. Les fractions massiques de  $CO$  et de  $CO_2$  sont décalées ce qui est cohérent avec le mécanisme. Le monoxyde de carbone se situe sur le côté gauche de la flamme ce qui est normal puisque dès que le  $CO$  est en contact avec de l'oxygène il va réagir pour donner du  $CO_2$ , c'est ce qui explique que le  $CO$  soit présent d'avantage du côté gauche. Cela explique aussi pourquoi le  $CO$  et le  $CO_2$  sont décalés. Toutes ces remarques nous permettent d'affirmer que la chimie est bien implémentée dans JAGUAR.

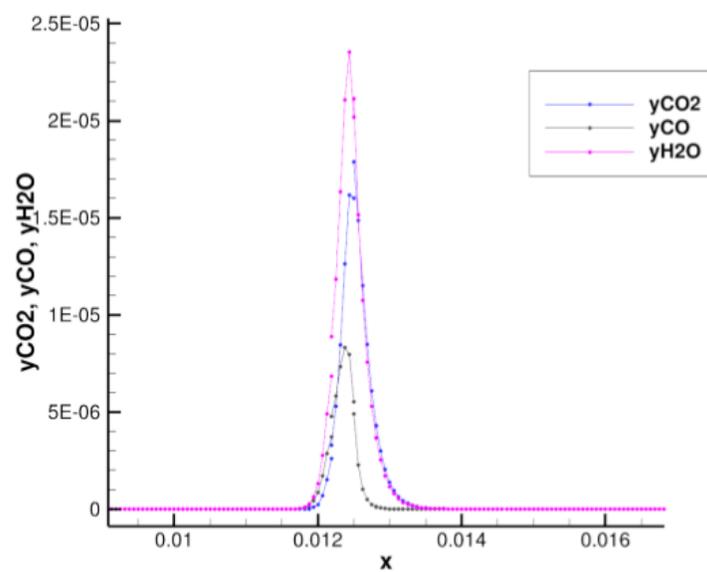


FIGURE .2: Profil des espèces produites

## Annexe D : Résultats de la simulation Volvo avec JAGUAR

La figure ci-dessous représente le champ de vitesse axiale moyennée dans le temps. L'écoulement accélère lors de son passage à côté du prisme ce qui est dû à la conservation du débit. Nous observons très clairement la couche de cisaillement provenant des bords du prisme, la zone de recirculation derrière le prisme ainsi que le sillage à l'aval de celui-ci.

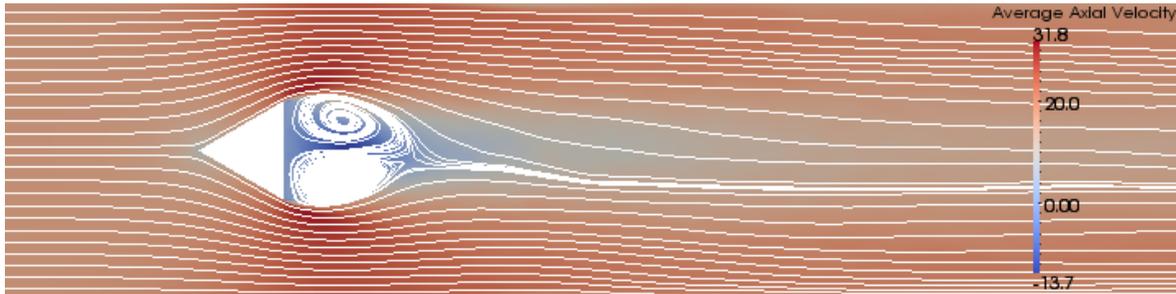


FIGURE .3: Champ de la vitesse moyenne axiale et lignes de courant

Les courbes ci-dessous représentent les vitesses RMS axiales et transverses qui sont définies de la manière suivante :

$$U_{RMS} = \sqrt{\langle u^2 \rangle - \langle u \rangle \langle u \rangle} \quad (D.10)$$

Les vitesses RMS axiales et transverses calculées avec JAGUAR montrent de très bons accords aux différentes positions avec l'expérience. JAGUAR semble montrer de meilleurs accords que les résultats de Discontinuous Galerkin. La vitesse RMS met en valeur les endroits où la turbulence est importante. Nous observons que lorsque nous nous éloignons du prisme, les effets du sillage sont de plus en plus négligeables rendant les profils de vitesse RMS relativement plats et proches de zéro.

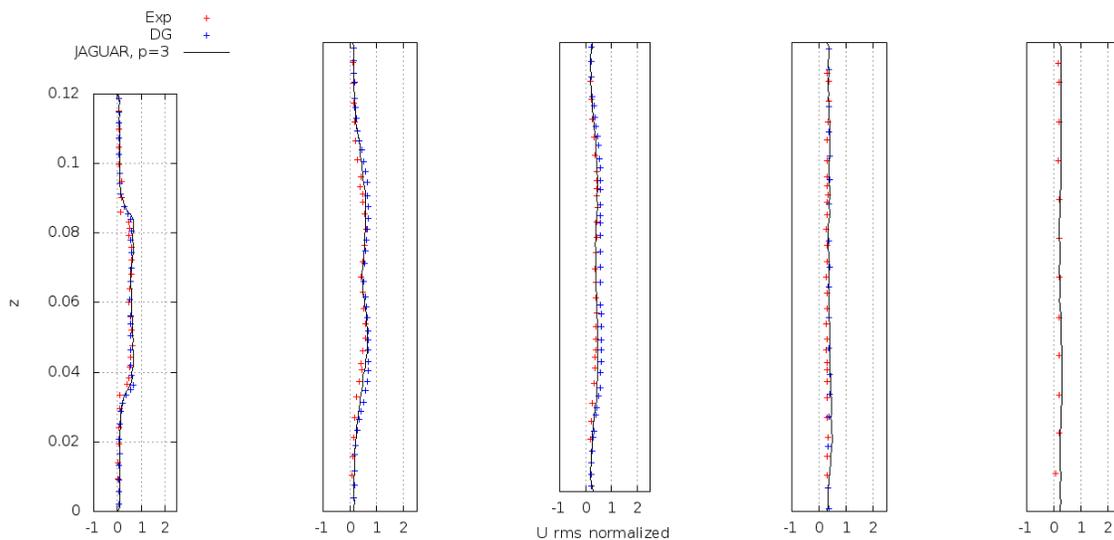


FIGURE .4: Vitesse RMS axiale pour  $x=1.5\text{cm}$ ,  $x=3.8\text{cm}$ ,  $x=6.12\text{cm}$ ,  $x=15\text{cm}$  et  $x=37.6\text{cm}$

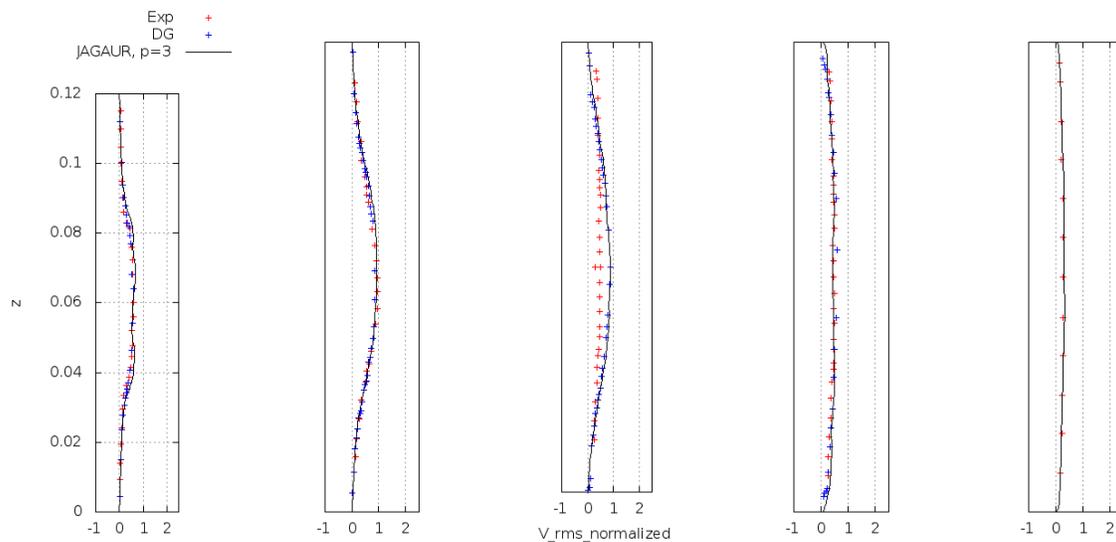


FIGURE .5: Vitesse RMS transverse pour  $x=1.5\text{cm}$ ,  $x=3.8\text{cm}$ ,  $x=6.12\text{cm}$ ,  $x=15\text{cm}$  et  $x=37.6\text{cm}$

## Bibliographie

---

- [1] F BASSI et S REBAY. "A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations". In : *Journal of Computational Physics* (1997), p. 267–279.
- [2] C BOGEY et C BAILLY. "A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations." In : *Journal of Computational Physics* (2004), p. 194–214.
- [3] J BONNIE, G SANFORD et M RENO. "Coefficients for calculating Thermodynamic and Transport Properties of individual Species". In : *NASA Technical Memorandum* (1993).
- [4] *Cantera Documentation*. <http://www.cantera.org/docs/sphinx/html/cti/species.html>. 2017.
- [5] P COKS, V SNAKARAN et M SOTERIOU. "51st AIAA Aerospace Sciences Meeting AIAA". In : *AIAA* (2013), p. 1–29.
- [6] Yang GELAN, Jin HUIXIA et Bai3 NA. "A Numerical Study on Premixed Bluff Body Flame of Different Bluff Apex Angle". In : *Mathematical Problems in Engineering* (2013).
- [7] A GHANI et al. "LES of longitudinal and transverse self-excited combustion instabilities in a bluff-body stabilized turbulent premixed flame." In : *Combustion and Flame* 162 (2015), p. 4075-4083-129.
- [8] Li HUA-GUANG, Sung HONG-GYE et Yang VIGOR. "A Large-Eddy-Simulation Study of Combustion Dynamics of Bluff-Body Stabilized Flames". In : *Combustion, Science and Technology* (2016).
- [9] V JONCQUIÈRES. "Analysis of the Spectral difference Method for Combustion". In : (2015).
- [10] Valentin JONCQUIÈRES. "Analysis of the Spectral Difference Method for combustion". In : *Master Thesis at CERFACS* (2015).
- [11] K KITAMURA et M.S LIOU. "Comparative study of ausm-family schemes in compressible multiphase flow simulations." In : *Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Big Island, Hawaii, July 9-13, Paper ICCFD7-3702*, (2012).
- [12] D.A KOPRIVA et J.H KOLIAS. "A conservative staggered-grid Chebyshev multidomain method for compressible flows." In : *Journal of Computational Physics* (1996), p. 244–261.
- [13] M. KUZMIN. "Spectral difference method for the Euler equations on unstructured grids". In : *MSc ISAE SupAero and CERFACS* (2012).
- [14] M. LEMESLE. "Analysis of several extensions for the spectral difference method to handle discontinuity". In : *MSc in Applied Mathematics* (2014).
- [15] Y LIU, M VINOKUR et Z.J WHANG. "Spectral Difference method for unstructured grids I : Basic formulation". In : *Journal of Computational Physics* (2006), p. 780–801.
- [16] Y LIU, M VINOKUR et Z.J WHANG. "Spectral (finite) Volume Method for conservation laws on unstructured grids V : Extension to three dimensional systems." In : *Journal of Computational Physics* (2006), p. 454–472.
- [17] Eric LV Yuand Ching et Matthias IHME. "Shock-Capturing Methods for High-Order Discontinuous Galerkin Schemes". In : *AMS Seminar Series* (2016).
- [18] Y LV et M IHME. "Computational analysis of re-ignition and re-initiation mechanisms of quenched detonation waves behind a backward facing step". In : *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), p. 1963–1972.
- [19] Y LV et M IHME. "Development of discontinuous galerkin method for detonation and supersonic combustion". In : *51 st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 7-10 January, Grapevine, Texas, AIAA Paper* (2013).

- [20] Y LV et M IHME. "Discontinuous Galerkin method for multicomponent chemically reacting flows and combustion". In : *Journal of Computational Physics* 270 (2014), p. 105–137.
- [21] Y LV et M IHME. "Entropy-bounded discontinuous Galerkin scheme for Euler equations." In : *Journal of Computational Physics* 295 (2015), p. 715–739.
- [22] I. MARTER. "Handling different h and p refinements in the framework of spectral difference method". In : *MSc in Applied Mathematics, Université Pau et Pays de l'Adour and CERFACS* (2013).
- [23] T.J POINSOT et S.K LELLE. "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows." In : *Journal of Computational Physics* (1992), p. 104–129.
- [24] G PONNUTHURAI et al. "LES-PDF Modeling of Flame Instability and Blow-out in Bluff-Body Stabilized Flames". In : *AIAA* (2009).
- [25] K Prabhu RAMADAS. "An Approximate Riemann Solver for Thermal and Chemical Nonequilibrium Flows". In : *NASA Contractor Report* (1994).
- [26] W.H REED et T.R HILL. "Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Technical Report, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA, Tech., Report LUUR". In : (1973), p. 73–279.
- [27] E SHIMA et K KITAMURA. "On new simple low-dissipation scheme of ausm-family for all speeds." In : *7th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 5 - 8 January, Orlando, Florida, AIAA Paper 2009-136* (2019).
- [28] A SJUNESSON, S OLOVSONN et B SJOBLOM. "10th International Symposium on Air Breathing Engines". In : *Nothigham, England* (1993), p. 385–393.
- [29] National Institute of STANDARDS et TECHNOLOGY. *Model Validation for Propulsion Workshop*. <https://community.apan.org/wg/afrlrg/mvpws/p/mvp1-case-volvo-bluff-body>. 2016.
- [30] National Institute of STANDARDS et TECHNOLOGY. *NIST Chemistry Book*. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. [Online; accessed August 2017]. 2017.
- [31] Y SUN, Z.J WANG et Y LIU. "High-order multidomain spectral difference method for the Navier-Stokes equations on unstructured hexahedral grids." In : *Communications in Computational Physics* 2 (2007), p. 310–313.
- [32] *The AVBP Handbook*. <http://www.cerfacs.fr/cfd/avbp.html>. 2011.
- [33] Z.J WANG. "Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids : Basic formulation". In : *Journal of Computational Physics* (2002), p. 210–251.
- [34] Hao WU et al. "Flame Experiment and Comparison of Finite-Volume and Discontinuous-Galerkin Schemes". In : *AIAA* (2017).