

Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)*

Présentée et soutenue le *14 Novembre 2024* par :

Nicolas ODIER

Contribution à la simulation aux grandes échelles pour les systèmes de
production énergétique

JURY

SOFIANE KHELLADI
ERIC LAMBALLAIS
JÉRÔME BOUDET
GUILLAUME BALARAC
BÉNÉDICTE CUENOT
LAURENT TERRAY
JEAN-LUC ESTIVALEZES

Professeur - LIFSE
Professeur - Institut P'
M. Conférence. HDR - LMFA
Professeur - LEGI
Professeur - Eindhoven / SAFRAN
Chercheur HDR - CECI
Professeur - ONERA

Rapporteur
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Examineur
Examineur

École doctorale et spécialité :

MEGEP : Dynamique des fluides

Unité de Recherche :

CERFACS

Parrain :

Jean-Luc ESTIVALEZES

Table des matières

Introduction	5
1 Contexte général	7
2 Curriculum Vitae	11
2.1 Encadrement	14
2.1.1 Doctorants	14
2.1.2 Post-Doctorants	15
2.1.3 Stagiaires M2	15
2.2 Projets (Montages, participations)	16
2.2.1 Projets Européens	16
2.2.2 Projets Nationaux (ANR)	17
2.2.3 Autres projets	17
2.2.4 Projets industriels	17
2.2.5 Heures de calcul	18
2.3 Activités de formation	19
2.4 Publications	19
3 Simulations aux grandes échelles pour les écoulements liquide-gaz	25
3.1 Développement de méthodes numériques pour la SGE de l'atomisation	27
3.1.1 Préambule : Méthodes existantes, et choix réalisés	27
3.1.2 Méthodes multi-fluides 3 et 4 equations : système d'équations	30
3.1.3 Fermetures thermodynamiques	32
3.1.3.1 Loi d'état cubique	32
3.1.3.2 Loi Noble Abel Stiffened Gas	33
3.1.4 Validation des méthodes pour les écoulements sous-critiques, compressibles	34
3.1.5 Couplage de méthodes Eulerienne et Lagrangienne.	36
3.1.6 Prédiction lagrangiennes pour spray-flamme en configuration complexe .	38
3.2 Physique des jets liquides cisailés par un gaz rapide	41
3.2.1 Motivations	41
3.2.2 Film liquide cisailé et jets coaxiaux	44
3.2.3 Effets de pression, évaporation, combustion	46
4 Simulation aux grandes échelles en turbomachines	53
4.1 Motivations et contexte	56
4.2 Conditions limites d'entrées et sorties pour les turbomachines	57
4.2.1 Pression totale, température totale	57

4.2.2	Conditions de sortie	58
4.2.3	Enthalpie totale, débit, giration	58
4.2.4	Méthodes d'injection de turbulence synthétiques	59
4.2.5	Spectral Proper Orthogonal Decomposition (SPOD)	62
4.3	Approches pour la réduction du coût de calcul	64
4.3.1	Réduction de Nombre d'Aubes (RNA)	64
4.3.2	Profile Transformation Approach (PTA)	66
4.3.3	Chorochronie et SGE	68
4.3.4	Méthode à pas de temps local.	69
4.4	Défis liés au contexte "wall-modeled LES"	70
4.4.1	Adaptation de maillage	71
4.4.2	Modélisation de "film cooling"	72
4.4.3	Amélioration des modèles de paroi implémentés dans AVBP	75
4.4.4	Machine-learning et modélisation pariétale	78
4.5	Investigation physique des écoulements 3D instationnaires en turbomachines	85
4.5.1	Couplages inter-composants	85
4.5.2	Comparaison expérience, (U)-RANS, et LES	85
4.5.3	Opérateurs de moyenne, et quantités conservées pour la LES en turbomachine	87
5	Méthodes numériques	93
5.1	Motivations	95
5.2	Rappels sur les schémas existants d'AVBP	95
5.3	Analyse numérique pour TurboAVBP et approche Local Time Stepping	97
5.4	Limitations des schémas actuels	97
5.5	Amélioration des schémas d'AVBP	100
6	Perspectives générales	105
6.1	Écoulements diphasiques et physico-chimie hétérogène	105
6.2	Écoulements en turbomachines	107
6.3	Méthodes numériques	108
6.4	Lien avec la plus grande échelle	109
	Bibliographie	110

Introduction

Ce document présente mes activités de recherche, dédiées à la simulation aux grandes échelles des systèmes de production d'énergie. Ce projet de recherche propose de développer des méthodes de modélisation, ainsi qu'une analyse physique des phénomènes intervenant au sein de ces systèmes. Après une contextualisation de la recherche dans le domaine de l'énergie, je présente les projets auxquels je participe, ainsi que mes activités de recherche, s'organisant autour de 3 grands thèmes. Enfin, je dresse mes perspectives de travail.

Chapitre 1

Contexte général

Le 6ème rapport d'évaluation du GIEC, publié en 2021-2022, permet une analyse fine de l'état actuel du climat [176], l'évaluation des impacts [178], et les moyens de mitigation [177]. On peut y trouver qu'à politique inchangée, le monde se dirige vers un réchauffement compris entre 2.2 et 3.5° par rapport à 1850, avec une valeur médiane de 3.2° en 2100 ([177]). L'incertitude associée à ces valeurs est grande, mais celles-ci correspondent quoi qu'il en soit à un monde dangereux (Fig. 1.1). Si je vis comme mes grands-parents, et que le monde suit cette trajectoire, je connaîtrai ce monde hostile. Nos enfants le connaîtront avec certitude.

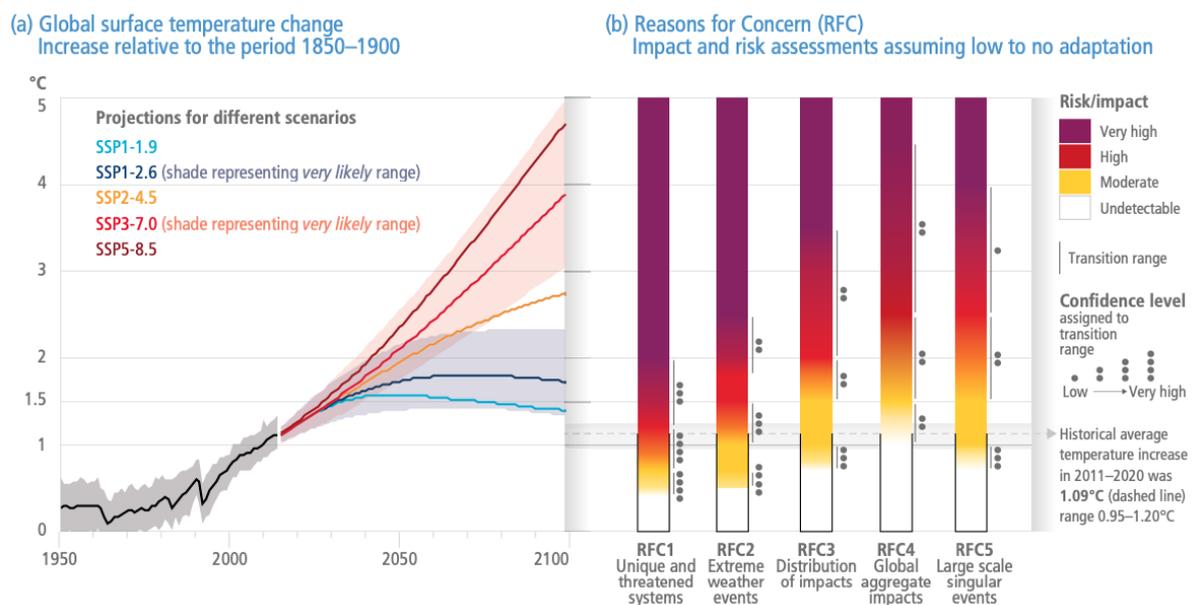


FIGURE 1.1 – Impacts et risques associés à une élévation de température moyenne de la surface terrestre par rapport à 1850. [178].

Les solutions technologiques ne peuvent en aucun cas permettre à elles seules les réductions d'émission de gaz à effet de serre requises pour limiter le réchauffement climatique à des niveaux limitant la dangerosité de l'environnement pour vie d'ici la fin du siècle. Nous avons en effet nécessairement besoin d'actions immédiates, drastiques, de politiques très volontaristes (Fig. 1.2,

[177]). La recherche ne peut répondre à un besoin d'action immédiate. L'avenir du monde est avant tout entre les mains des acteurs du monde politique, industriel, économique et financier, social, et des citoyens.

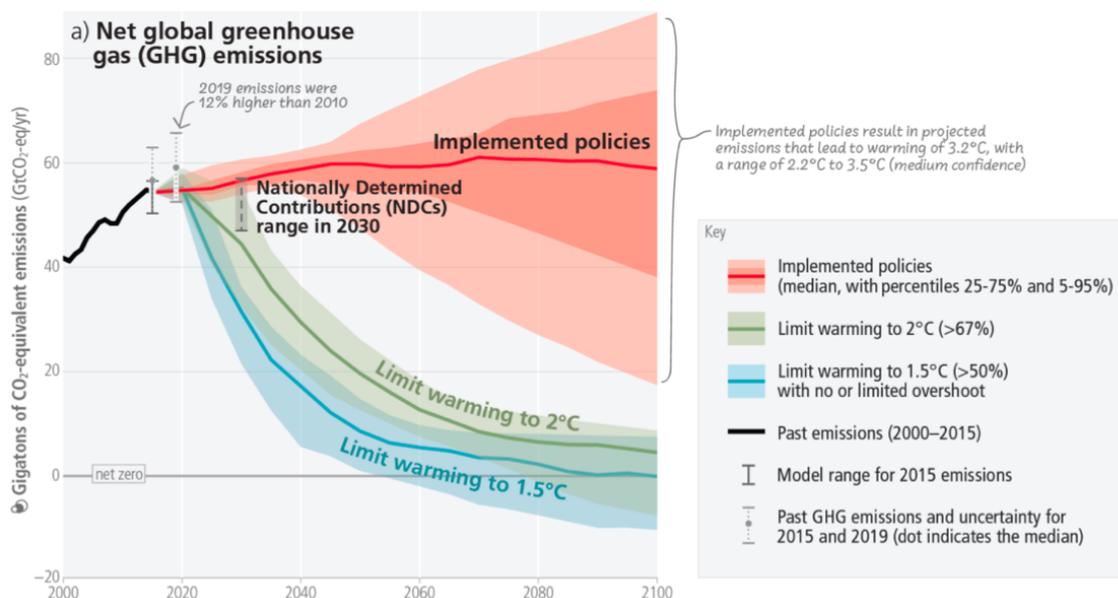


FIGURE 1.2 – Politiques de réduction des émissions globales pour limiter le réchauffement global. Une action immédiate est requise. ([177]).

Une transformation profonde des secteurs de l'industrie, de l'énergie, des transports est (entre autres domaines) est cependant également nécessaire à moyen terme (Fig. 1.3). C'est à ces (seuls) besoins que peut répondre la recherche. Les politiques de recherche mises en place entre 2010 et 2019 ont ainsi permis une réduction des coûts des technologies "bas carbone" (solaire, éolien, batteries), et ont aidé à leur diffusion [177].

Concernant les systèmes de production¹ énergétique, les moyens les moins onéreux avec le plus grand potentiel de réduction des émissions sont aujourd'hui le solaire et l'éolien ([177]). Il est nécessaire de progresser sur l'efficacité énergétique de nos systèmes, et d'augmenter la diversification des sources. Un travail d'électrification robuste et efficace est également requis. Pour ce qui concerne le secteur du transport, le premier moyen d'action est, comme pour le secteur énergétique, la maîtrise de la demande. Pour l'aviation et le transport maritime, l'utilisation de bio-carburants, éventuellement d'hydrogène à "faible émission", d'ammoniac sont requis. Les moyens de production associés à ces carburants doivent cependant bénéficier de réduction de coûts pour une mise en oeuvre effective.

Dans ce cadre, mon travail est dédié à la simulation aux grandes échelles des écoulements compressibles, réactifs, éventuellement multiphasiques, intervenant dans les systèmes de production d'énergie. Ce travail se nourrit fortement des applications propulsives spatiales, et aéronautiques, qui ont le bon goût d'induire de très fortes contraintes en terme de technologie, et impliquent une physique très variée et complexe.

1. Nous parlerons ici de "production" d'énergie, bien qu'il s'agisse d'un abus de langage, puisque les systèmes industriels "convertissent" ou "échantent" de l'énergie.

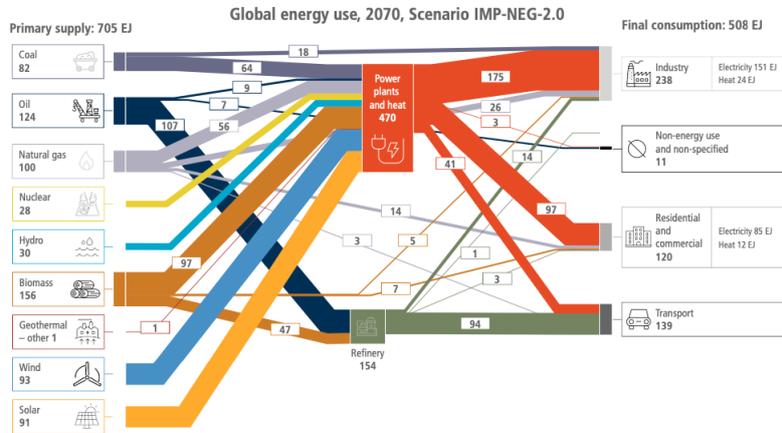
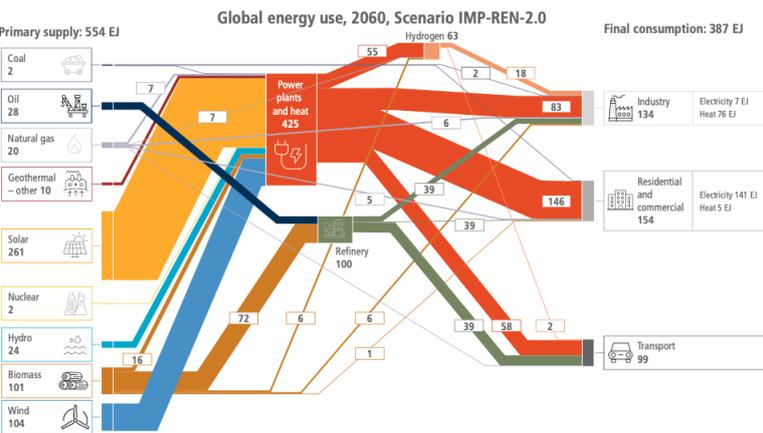
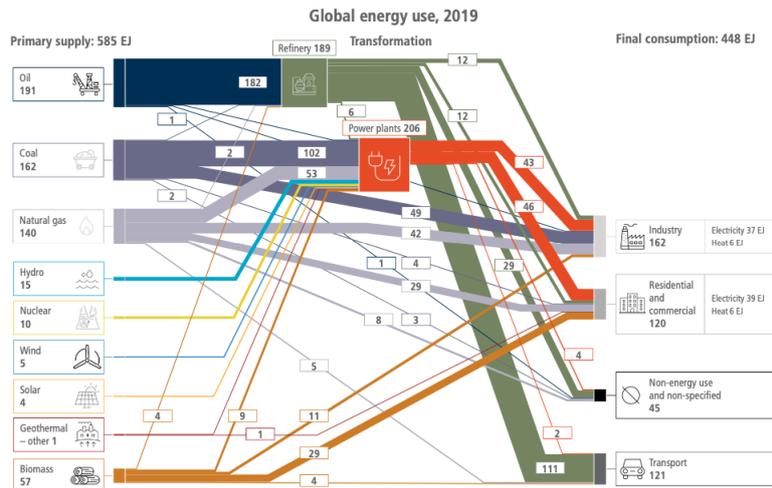


FIGURE 1.3 – Usage de l'énergie. Aujourd'hui (en haut), scénarii potentiels 2060 et 2070 [177].

Le développement de nouvelles technologies propulsives ou de production d'énergie, nécessite la prédiction de l'évolution complète du cycle thermodynamique (dans le cas d'un cycle), depuis l'entrée d'air éventuelle, sa compression, l'injection de carburant et sa combustion, la détente au travers des différents étages de turbine, l'échappement (ou la capture éventuelle) des divers polluants et gaz à effets de serre, tout en sachant prédire avec fiabilité la performance du système et éventuellement les limites d'opérabilité. Il est également crucial d'assurer une transition rapide, et fiable, de la recherche académique vers le secteur industriel, pour permettre de rapides changements de technologies.

Si les travaux que je présente sont aujourd'hui principalement portés par le secteur de l'aéronautique, ils sont parfaitement transposables à d'autres types de système de production, en particulier terrestres (qui ont moins de contraintes technologiques, et d'opérabilité), ou pour le transport maritime.

Mes travaux se concentrent sur la modélisation et la compréhension des écoulements diphasiques, intervenant dans les systèmes d'injection du carburant, ainsi que sur la modélisation des écoulements en turbomachine. Ce travail n'aborde pas les aspects liés à la modélisation de la combustion turbulente, abordés par mes collègues spécialistes au CERFACS. Enfin, une part de plus en plus importante de mes travaux est dédiée aux méthodes numériques, afin de capturer des physiques précises pour des coûts abordables. Ces thèmes sont présentés dans ce manuscrit, après une description de mon curriculum vitae, et avant une présentation des perspectives de recherche.

Chapitre 2

Curriculum Vitae

NICOLAS ODIER

Researcher in Computational Fluid Dynamics
CERFACS ◊ 42 Avenue Gaspard Coriolis ◊ Toulouse, France

odier@cerfacs.fr

RESEARCH INTERESTS

Large-Eddy Simulations
Turbomachinery flows
Two-phase flows, sprays and liquid jet atomization
Wall-bounded, turbulent and compressible flows
Numerical methods
High Performance Computing
Wind turbine flows

EDUCATION

PhD Thesis Grenoble University. <i>Grenoble, France.</i>	2011-2014
Nuclear engineering diploma National School of Energy, Water and Environment. <i>Grenoble, France.</i>	2008-2011
Preparatory courses Lycée Champollion. <i>Grenoble, France.</i>	2006-2008
Baccalauréat with honors Lycée Champollion. <i>Grenoble, France.</i>	2006

EXPERIENCE

Senior researcher <i>CERFACS</i>	2019 - Present <i>Toulouse, France</i>
<ul style="list-style-type: none">· Large-Eddy Simulations for turbomachinery· Large-Eddy Simulations for spray atomization· Numerical methods for Large-Eddy Simulations· Supervision, Training· Projects management	
Postdoctoral researcher <i>CERFACS</i>	2015 - 2019 <i>Toulouse, France</i>
<ul style="list-style-type: none">· Large Eddy Simulations for turbomachinery flows· Numerical methods and physical modeling for accurate and real configurations· Industrial collaboration with SAFRAN	
PhD Thesis <i>LEGI</i>	2011 - 2014 <i>Grenoble, France</i>
<ul style="list-style-type: none">· Numerical study of turbulence / liquid jet interactions.· Direct Numerical simulations of air-assisted liquid jets.· Investigation of mechanisms for large-scale jet instability.	
Engineer <i>Radioprotection and Nuclear Safety French Institut (IRSN)</i>	2011 <i>Paris, France</i>

- Analysis of incidents in nuclear facilities other than nuclear power plants (Laboratories, industrial plants, dismantling facilities)

Research assistant

2010

Laboratory of Subatomic Physics and Cosmology

Grenoble, France

- Experimental, parametric study on a centrifugal bubble separator for a molten-salt nuclear reactor. Image processing and analysis.

COLLABORATIONS

Academic

- Pierre Boivin. M2P2 (Marseille University)
- Thomas Schmitt. EM2C (Ecole CentraleSupélec)
- Alexis Giauque. LMFA. University of Lyon
- Nicolas Garcia Rosa, Adrien Thacker. ISAE-Supaéro Toulouse
- Stéphane Moreau. Sherbrooke University
- Marlène Sanjosé. Montréal University
- Ulrich Rude. University of Erlangen
- Lionel Matuszewski. ONERA
- Annafederica Urbano. ISAE-Supaéro
- Michael Bauerheim. ISAE-Supaéro
- Max Chevalier, Oliver Teste. IRIT
- Patrick Gallinari, Taraneh Sayadi. Sorbonne Université

Industrial collaborations

- SAFRAN (Safran Helicopter, Safran Aircraft, SafranTech)
- CNES
- ArianeGroup
- TOTAL Energies
- AIRBUS
- ONERA

REVIEW ACTIVITY

Reviewer for Journal of Computational Physics, Physics of Fluids, International Journal of Multiphase Flow, Combustion and Flame, Proceedings of the Combustion Institute, ASME TurboExpo, Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences.

PRACE projects

OTHER INVOLMENTS

CERFACS trainings

Organizing committee for the International Conference on Multiphase flows 2025 (ICMF2025)

Chairman for the 5th International Seminar on Non-Ideal Compressible Fluid Dynamics (NICFD 2024)

2.1 Encadrement

Cette section détaille les co-encadrements de thèse auxquels j'ai participé. Ces travaux sont réalisés en collaboration avec Laurent Gicquel, Florent Duchaine pour le thème des écoulements en turbomachine, Bénédicte Cuenot, Pierre Boivin et Thomas Schmitt pour les écoulements diphasiques, et Michael Rudgyard pour les méthodes numériques.

2.1.1 Doctorants

- **Shubham Agarwal** (2019-2022). "Développement d'une méthodologie prédictive du refroidissement par film sur aubages".
Directeur : Laurent Gicquel, Co-direction : Florent Duchaine, Nicolas Odier (33%)
- **Clovis Gout** (2019-2022). "Méthodes numériques pour la simulation aux grandes échelles LES mono-canal d'étages de turbomachines".
Directeur : Laurent Gicquel, Co-direction : Florent Duchaine, Nicolas Odier (33%)
- **Benjamin Martin** (2019-2022). "Méthodes numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles du couplage entre plusieurs composants d'une turbomachine".
Directeur : Florent Duchaine. Co-direction : Laurent Gicquel, Nicolas Odier (33%)
- **Julien Carmona** (2019-2022). "Modélisation des phénomènes diphasiques dans des injecteurs aéronautiques de type Airblast".
Directeur : Bénédicte Cuenot. Co-direction : Nicolas Odier (50%), Pierre Boivin
- **Thomas Lafarge** (2019-2022). "Lattice Boltzmann method for multiphase flows".
Directeur : Bénédicte Cuenot. Co-direction : Nicolas Odier (50%), Pierre Boivin
- **Thibault Gioud** (2020-2023). "Large Eddy Simulations for atomization in subcritical liquid rocket engines".
Directeur : Nicolas Odier (dérogation). Co-direction : Thomas Schmitt, Bénédicte Cuenot
- **Medhi Cizeron** (2021-2024). "Modélisation de parois pour la Simulation aux Grandes Échelles d'écoulements de turbomachines".
Directeur : Florent Duchaine. Co-direction : Laurent Gicquel, Nicolas Odier (50%)
- **Jérôme Dabas** (2021-2024). "Développement de modèles réduits basés sur l'approche de la simulation aux grandes échelles pour le dimensionnement et le contrôle des fermes éoliennes flottantes".
Directeur : Laurent Gicquel, Co-direction : Florent Duchaine, Nicolas Odier (50%)
- **Benoit Peden** (2022-2025). "Simulation aux grandes échelles de l'atomisation, en conditions évaporantes et réactives".
Directeur : Jean-Christophe Jouhaud. Co-direction : Nicolas Odier (50%), Pierre Boivin
- **Raphaël Costes** (2022-2025). "Modélisation de paroi pour la prédiction des transferts thermiques en chambre de combustion aéronautique".
Directeur : Laurent Gicquel. Co-direction : Nicolas Odier (50%), Michael Rudgyard
- **Alexis Boudin** (2023-2026) : "Méthodes numériques avancées pour la simulation aux grandes échelles de turbomachines".
Directeur : Laurent Gicquel. Co-direction : Nicolas Odier (33%), Michael Rudgyard

- **Gregory Uhl** (2021-2024). "Analyse numérique de l'interaction entre une chambre de combustion rotative à détonation et une turbine axiale".
Directeur : Marc Bellenoue, Thierry Poinso. Co-direction : Nicolas Odier (20%), Said Taïleb
- **Giulio Pelenghi** (2024-2027). "Impact de la poussée variable sur la stabilité et les performances de la combustion des moteurs-fusées à propergol liquide".
Directeur : Annafederica Urbano. Co-direction : Thomas Schmitt, Nicolas Odier (33%)

2.1.2 Post-Doctorants

- **Luc Potier** (2019). Termes de bords dans les schémas numériques d'AVBP.
- **Carlos Pérez Arroyo** (2019-2022). Vers la simulation aux grandes échelles d'un moteur complet.
- **Dorian Dupuy** (2019-2021). Modélisation de film-cooling.
- **Dorian Dupuy** (2021-2022). Apprentissage machine pour la simulation aux grandes échelles d'écoulements pariétaux décollés.
- **Nicholas Treleaven** (2020-2021). Modèles lagrangiens pour la simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques réactifs.
- **Camille Castells** (2021-2023). Méthodes Lattice-Boltzmann pour la simulation aux grandes échelles d'écoulements éoliens.
- **Marcos Onofre Ramos** (2023-2024). Méthodes d'interface diffuse pour la simulation aux grandes échelles d'injecteurs aéronautiques.
- **Prasannabalaji Sundaram** (2023-2025). Méthodes numériques avancées pour AVBP.
- **Fernando Gonzales** (2024-2026). Méthodes pour l'apprentissage machine en mécanique des fluides.
- **Ananth Sivaramakrishnan** (2024-2026). Simulations aux grandes échelles d'écoulements en turbine basse pression, et opérateurs de moyenne thermodynamique.

2.1.3 Stagiaires M2

- **Jérôme Dabas** (2019 ; M1). Développement d'une condition limite pour la simulation aux grandes échelles d'écoulements en turbomachine.
- **Ludovic Plumain** (2020). Investigation des couplages paramétriques des modèles de paroi en simulation aux grandes échelles.
- **Medhi Cizeron** (2020). Développement et validation d'un outil numérique pour l'étude de la dispersion de gouttelettes chargées en agents infectieux dans des environnements clos.
- **Jérôme Dabas** (2021 ; M2). Simulation aux grandes échelles d'écoulements éoliens.
- **Alexis Boudin** (2021). Turbulence injection methods for Large-Eddy Simulations.
- **Benoit Peden** (2021). Impact de la prédiction de l'atomisation primaire par méthode d'interface diffuse.

- **Nicolas Pepin** (2021 ; M1). Evaluation des méthodes Level-Set du code YALES pour la simulation d'écoulements liquide-gaz.
- **Enzo De Souza** (2022). Implémentation de lignes actuatrice pour la simulation aux grandes échelles d'éoliennes.
- **Balázs Vincze** (2022). Large Eddy Simulation of an optimized cooling system of a turbine vane.
- **Soufiane Mrini** (2023). Exploration of the potential of self-supervised learning for numerical fluid dynamics substitution modeling.
- **Clara Massat** (2024). Vers les modèles de fondation pour la simulation aux grandes échelles.
- **Elisa Bourrel (M1)** (2024). Influence de coefficients de transport dans une méthode d'interface diffuse.

2.2 Projets (Montages, participations)

Cette section détaille mes implications (montages, coordination, et participations) au sein des divers projets dans lesquels j'ai pu être impliqué. Ces projets sont à la fois financés par des fonds publics (ANR, projets européens, fondation STAE), industriels, et des fonds propres CERFACS.

2.2.1 Projets Européens

- **INNO4SCALE** : Projet EuroHPC. 2024-2025.
Participation au projet. 93 k€. *Online learning for Large Eddy Simulations cogeneration.*
- **OFFWIND-DT** : Projet Horizon RIA. 2024-2027. (*projet refusé*)
Montage de la partie CERFACS. 300 k€. *LES pour modélisation bas ordre d'écoulements éoliens offshore.*
- **HERMES** : Projet Horizon RIA. 2023-2026.
Responsable de la partie CERFACS. Task leader. 295k€
Injection supercritique pour production d'énergie terrestre.
- **HE-ART** : Projet Clean-Aviation. 2023-2026.
Participation au projet. 315 k€
Forts taux de turbulence en turbomachine.
- **CIRRUS** : Horizon 2020 / Clean Sky JU. 2020-2023.
Participation au projet. 618k€. *Impact du diphasique sur les instabilités thermo-acoustiques.*
- **HIFI-TURB** : Horizon 2020. 2019-2022.
Participation au projet. 300k€
Machine-learning pour la modélisation de sous-maille.
- **MAGISTER** : Horizon 2020. 2017-2021.
Participation au projet. 280k€
Méthodes numériques pour les systèmes d'injection de turbine aéronautiques.

2.2.2 Projets Nationaux (ANR)

- **PHLUSIM.** Projet ANR PRC, 2023-2027.
Participation au montage, à la coordination, et au projet (Leader CERFACS). 553k€. *Towards foundational models for CFD.*
- **MADIRAN.** Projet ANR JCJC, 2021-2025.
Montage et coordinateur du projet. 260k€. *Interfaces diffuses pour l'atomisation multiphysique.*

2.2.3 Autres projets

- **Montages de projets financement sur fonds propres CERFACS**
 - **Post-doctorat Dorian Dupuy.** 2021-2022.
Montage et suivi du projet.
Loi de paroi et Machine-learning
 - **Post-doctorat Prasannabalaji Sundaram.** 2023-2025
Montage et suivi du projet.
Ordre élevé dans AVBP (reconstruction cubique et interface prismes / tetrahèdres)
 - **Post-doctorat Fernando Gonzales** 2024-2026.
Montage et suivi du projet. Collaboration IRIT.
"Foundational models" pour la CFD. Machine-learning pour la génération d'écoulements pariétaux 2024-2026.
 - **Thèse Luc Verani.** 2024-2027
Montage et suivi du projet. Co-financement CERFACS-ONERA.
Formalisme unifié pour interfaces diffuses sous- et supercritiques.
- **Thèse Audrey Klinger** Thèse CNES-ArianeGroup. 2024-2027.
Combustion multi-régimes en moteur fusée LOx/GCH₄.
- **Thèse J. Dabas** Contrat doctoral pour normalien. 2021-2024.
Montage et suivi du projet.
LES pour écoulements éoliens.
- **MORRITOS** : Projet RTRA (Fondation STAE). 2019-2020.
Participation au projet. 70k€
Modélisation de paroi refroidie en LES.
- **SIMACO3FI** : Projet RTRA (Fondation STAE). 2015-2017.
Participation au projet. 120k€
Validation d'ordre élevé de la LES en configuration réelle de turbomachine.

2.2.4 Projets industriels

- **SAFRAN-CIRT, moyennes thermodynamiques.** 2024-2026.
Montage et responsable du projet. 100k€
Moyennes thermodynamiques instationnaires en turbomachine.
- **MOSCITOO.** Safran-Airbus. 2024-2026
Montage, suivi et participation au projet. Responsable des aspects émissions. 620k€
Trainées de condensation pour les carburants alternatifs

- **TOTAL carburants marins.** 2024-2026
Montage, suivi et participation au projet. 213k€
Carburants alternatifs pour la marine
- **TOTAL Eolien.** 2021-2023.
Montage, suivi et participation au projet. 211 k€
Méthodes LBM pour les écoulements éoliens.
- **CEFORA.** Safran-DGAC. 2021-2024.
Participation au montage, au suivi et au projet.
Robustisation des méthodes LES pour un transfert vers l'industrie.
- **ATOM.** SafranTech-DGAC. 2019-2024.
Participation au projet.
Vers la simulation aux grandes échelles d'un moteur complet.
- **Industrialisation AVBP.** Safran. Depuis 2019
Responsable du projet. 120k€ annuel.
Industrialisation de l'outil AVBP pour la turbomachine.
- **AITEC2.** Safran / DGAC. 2017-2018
Participation au projet. 70k€
Vers des méthodes numériques avancées pour le contexte cell-vertex.

2.2.5 Heures de calcul

Mon activité est basée sur la simulation numérique haute performance. Elle s'accompagne naturellement d'un besoin de ressources de calcul. Les projets notables permettant l'accès à ces ressources sont listés ci-dessous.

- **Grands Challenges**
 - **Session spéciale TGCC.** Grand Challenge GENCI (AdastrA). 15Mh CPU. (2024)
Combustion spray-flamme pour les biocarburants. Montage et participation au projet.
 - **SAGRADO.** Grand Challenge GENCI (AdastrA). 500kh GPU. (2023)
Simulation aux grandes échelles d'une ferme éolienne. Montage et participation au projet.
 - **NOCTURAL.** Grand Challenge GENCI (AdastrA). 25Mh CPU. (2023)
Transport de point chaud par LES 360° d'une chambre de combustion et bi-turbine intégrées. Participation au projet.
- **Projets PRACE**
 - **FULLEST.** Vers la simulation aux grandes échelles d'un moteur complet. 31.5Mh CPU. (2020).
 - **CornerLES.** Simulation aux grandes échelles d'une décollement de coin (Collaboration avec SafranTech). 20.5Mh CPU. (2020).
 - **CFDforCOVID.** Simulation aux grandes échelles de dispersion d'agents pathogènes. 10Mh CPU. (2020).
 - **X-VAMPA.** Simulation aux grandes échelles pour l'atomisation d'un injecteur réel. 4Mh CPU. (2012).

- **Projets GENCI**

Implication forte dans les projets GENCI du LEGI (2011-2014) et du CERFACS (depuis 2015). Environ 10-15MhCPU/an. Porteur d'un projet en 2021 (4MhCPU) et en 2024 (15MhCPU).

2.3 Activités de formation

Cette section détaille les activités d'enseignement, ou de formation dans lesquelles j'ai pu être impliqué.

- **Travaux pratiques de mécanique des fluides.** ENSE3, Grenoble. 2011-2014.

Vacations, 106h équivalent TD, étudiants de seconde année d'école d'ingénieurs (M1).

- **Formation Turbomachine.** CERFACS. Depuis 2016.

Formation annuelle de 3 jours. Montage du contenu de la formation (en collaboration avec F.Duchaine, L.Gicquel, J. Dombard). Interventions (Cours magistraux et exercices pratiques). <https://cerfacs.fr/event/bases-theoriques-pour-la-simulation-aux-grandes-echelles?start=1717372800&end=1717545600>

- **Formation AVBP.** CERFACS. Depuis 2016.

Formation bi-annuelle d'une semaine. Co-responsable de la formation.

Montage de certains cours magistraux (méthodes numériques, conditions limites.)

Interventions (Cours magistraux, travaux pratiques).

<https://cerfacs.fr/event/methodes-numeriques-pour-la-simulation-aux-grandes-echelles?start=1713744000&end=1714089600>

- **Bases théoriques pour la simulation aux grandes échelles.** CERFACS. Depuis 2018.

Formation annuelle de 3 jours. Montage d'un cours magistral (LES et erreurs numériques, modélisation LES, modèles de paroi, injection de turbulence). Intervention.

<https://cerfacs.fr/event/bases-theoriques-pour-la-comprehension-et-lanalyse-de-simulation?start=1728864000&end=1729036800>

- **Introduction aux turbomachines** IPSA. Depuis 2023.

Cours d'introduction aux turbomachines, pour les étudiants 1ere année de l'IPSA. 12h de cours, 8h de TD et 4h de BE.

Montage du cours, en collaboration avec J. Dabas et B. Peden (Doctorants). Les cours et TD sont donnés par les doctorants.

- Habilitation aux fonctions de maître de conférence (CNU 60, 2018-2022).

2.4 Publications

Under review for publications in refereed journals

- [4] T. Gioud, T. Laroche, T. Schmitt, B. Cuenot, and **N. Odier**. “An Eulerian-Lagrangian framework for spray prediction in a Large-Eddy Simulations context.” (Under review for *Computers and Fluids*).
- [3] B. Martin, L. Cheng, M. Rudgyard, and **N. Odier**. “A new class of Taylor-Petrov-Galerkin schemes using quadratic reconstruction.” (Under review for *Journal of Computational Physics*).
- [2] G. Uhl, S. Taileb, S. Zurbah, **N. Odier**, T. Poinso, and M. Bellenoue. “Large-Eddy Simulation of an ejector integrated in a Rotating Detonation Engine Cycle.” (Under review for *Physics of Fluids*).
- [1] G. Uhl, S. Taileb, S. Zurbah, **N. Odier**, T. Poinso, and M. Bellenoue. “Phenomenological Aerodynamic Analysis of an Ejector Exposed to Large Inlet Pulsations.” (Under review for *Journal of Propulsion and Power*).

Publications in refereed journals

- [23] S. Agarwal, **N. Odier**, F. Duchaine, L. Gicquel, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Efficient Global Optimization of a laidback fan-shaped cooling hole using Large-Eddy Simulation.” In: *Applied Thermal Engineering* 236.May 2023 (2024).
- [22] D. Dupuy, **N. Odier**, and C. Lapeyre. “Using graph neural networks for wall modeling in compressible anisothermal flows.” In: *Data-Centric Engineering* 5 (2024), e10. DOI: 10.1017/dce.2024.7.
- [21] J. Carmona, N. Treleaven, **N. Odier**, and B. Cuenot. “Lagrangian Simulation Methodology for Large-Eddy Simulations of Prefilming Air-Blast Injectors.” In: *Journal of Propulsion and Power* (2023), pp. 1–19. DOI: 10.2514/1.b39057.
- [20] D. Dupuy, **N. Odier**, and C. Lapeyre. “Data-driven wall modeling for turbulent separated flows.” In: *Journal of Computational Physics* 487 (2023), p. 112173. DOI: 10.1016/j.jcp.2023.112173.
- [19] D. Dupuy, **N. Odier**, C. Lapeyre, and D. Papadogiannis. “Modeling the wall shear stress in large-eddy simulation using graph neural networks.” In: *Data-Centric Engineering* 4 (Mar. 2023), e7. DOI: 10.1017/dce.2023.2. https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S2632673623000023/type/journal%7B%5C_%7Darticle.
- [18] B. Péden, J. Carmona, P. Boivin, T. Schmitt, B. Cuenot, and **N. Odier**. “Numerical assessment of Diffuse-Interface method for air-assisted liquid sheet simulation.” In: *Computers and Fluids* 266 (2023), p. 106022. DOI: 10.1016/j.compfluid.2023.106022.
- [17] B. Martin, F. Duchaine, L. Gicquel, **N. Odier**, and J. Dombard. “Accurate Inlet Boundary Conditions to Capture Combustion Chamber and Turbine Coupling With Large-Eddy Simulation.” In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 144.2 (2022), pp. 1–12. DOI: 10.1115/1.4052099.
- [16] N. Treleaven, D. Laera, J. Carmona, **N. Odier**, Y. Gentil, J. Dombard, G. Daviller, L. Gicquel, and T. Poinso. “Coupling of Combustion Simulation with Atomisation and Filming Models for LES in Swirled Spray Flames.” In: *Flow, Turbulence and Combustion* (2022). DOI: 10.1007/s10494-022-00342-w.
- [15] S. Agarwal, L. Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, and J. Dombard. “Analysis of the Unsteady Flow Field Inside a Fan-Shaped Cooling Hole Predicted by Large-Eddy Simulation.” In: *Journal of Turbomachinery* 143.March (2021), pp. 1–11. DOI: 10.1115/1.4050121.

- [14] S. Blanchard, **N. Odier**, L. Gicquel, C. Cuenot, and F. Nicoud. “Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation.” In: *Phys. Fluids* 33.July (2021), pp. 1–12. DOI: 10.1063/5.0063728.
- [13] J. Carmona, **N. Odier**, O. Desjardins, A. Misdariis, B. Cuenot, and A. Cayre. “A comparative study of direct numerical simulation and experimental results on a prefilming airblast atomization configuration.” In: *Atomization and Sprays* 31.8 (2021), pp. 9–32. DOI: 10.1615/atomizspr.2021037399.
- [12] F. Duchaine, M. Cizeron, **N. Odier**, J. Dombard, S. Marchall, N. François, and T. Poinso. “High-Performance Computational Fluid Dynamics for Virus Propagation predictions in Closed Domains.” In: *International Journal of Computational Fluid Dynamics* (2021).
- [11] D. Dupuy, A. Perrot, **N. Odier**, L.Y.M Gicquel, and F. Duchaine. “Boundary-condition models of film-cooling holes for large-eddy simulation of turbine vanes.” In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 166 (2021), p. 120763.
- [10] T Lafarge, P Boivin, **N. Odier**, and B Cuenot. “Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows.” In: *Physics of Fluids* 33.8 (2021), pp. 1–21. DOI: 10.1063/5.0061638.
- [9] B. Martin, F. Duchaine, L. Gicquel, and **N. Odier**. “Generation of Realistic Boundary Conditions at the Combustion Chamber / Turbine Interface Using Large-Eddy Simulation.” In: *Energies* 14.12 (2021), pp. 1–23.
- [8] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L. Gicquel, B. Martin, **N. Odier**, and G. Staffelbach. “Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine: Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part I: Methodology and initialisation.” In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* May (2021), pp. 1–16. DOI: 10.33737/jgpps/133115.
- [7] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L. Gicquel, B. Martin, **N. Odier**, and G. Staffelbach. “Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine: Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part II: Comparison against stand-alone simulations.” In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* May (2021), pp. 1–16. DOI: 10.33737/jgpps/133116.
- [6] A. Perrot, L. Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, and T. Grosnickel. “Unsteady Analysis of Heat Transfer Coefficient Distribution in a Static Ribbed Channel for an Established Flow.” In: *Journal of Turbomachinery* 143.December (2021), pp. 1–13. DOI: 10.1115/1.4051490.
- [5] D. Dupuy, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, F. Duchaine, and T. Arts. “Analysis of the effect of intermittency in a high-pressure turbine blade.” In: *Physics of Fluids* (2020).
- [4] **N. Odier**, A. Thacker, M. Harnieh, G. Staffelbach, L.Y.M Gicquel, F. Duchaine, N. García Rosa, and J.D. Mueller. “A mesh adaptation strategy for complex wall-modeled turbomachinery LES.” In: *Computers and Fluids* (2020).
- [3] **N. Odier**, M. Sanjosé, L. Gicquel, T. Poinso, S. Moreau, and F. Duchaine. “A characteristic inlet boundary condition for compressible, turbulent, multispecies turbomachinery flows.” In: *Computers & Fluids* 178 (Jan. 2019), pp. 41–55.
- [2] **N. Odier**, G. Balarac, and C. Corre. “Numerical analysis of the flapping mechanism for a two-phase coaxial jet.” In: *International Journal of Multiphase Flow* 106 (2018), pp. 164–178.
- [1] **N. Odier**, G. Balarac, C. Corre, and V. Moureau. “Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream.” In: *International Journal of Multiphase Flow* 77 (Dec. 2015), pp. 196–208.

Paper in refereed international conference proceedings

- [26] M. Cizeron, L. Gicquel, F. Duchaine, and **N. Odier**. “Implementation of a TBLE-based wall model with pressure gradient in a massively parallel solver.” In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2024*. June. London, United Kingdom, 2024, pp. 1–10.

- [25] J. Dabas, G. Staffelbach, **N. Odier**, F. Duchaine, and L. Gicquel. “GPU-accelerated actuator-disk Large-Eddy Simulation for wind farm flows.” In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2024*. June. London, United Kingdom, 2024, pp. 1–14.
- [24] B. Peden and **N. Odier** Boivin. “Implementation and validation of an evaporation solver in a diffuse interface method for airblast applications.” In: *9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*. June. Lisbon, Portugal, 2024.
- [23] Gregory Uhl, Said Taileb, Stéphan Zurbach, **N. Odier**, Thierry Poinot, and Marc Bellenoue. “Numerical Analysis of an Ejector under Pulsating Inflow Characteristic of RDC Exhaust Conditions.” In: *AIAA Scitech 2024 Forum*. January. Orlando, Florida, 2024, pp. 1–12.
- [22] V. Balazs, S. Agarwal, **N. Odier**, L. Gicquel, and F. Duchaine. “Optimization of a fan-shaped film-cooling jet and its implementation in a high-pressure turbine vane with large-eddy simulations.” In: *ASME Turbo expo 2023*. Boston, Massachusetts, 2023, pp. 1–15.
- [21] A. Boudin, J. Dombard, F. Duchaine, L. Gicquel, **N. Odier**, S. Lavagnoli, G. Lopes, L. Simonassi, and C. Uribe. “Analysis of Wakes Interactions in a High-Speed Low-Pressure Turbine Cascade Using Large-Eddy Simulations.” In: *15th European Conference on Turbomachinery Fluid dynamics & Thermodynamics, ETC15*. Budapest, Hungary, 2023.
- [20] S. Agarwal, L. Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Large Eddy Simulation Based Optimization of a Fan-Shaped Cooling Hole Geometry to Enhance Cooling Performance.” In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2022*. 2022.
- [19] J. Dabas, L.Y.M. Gicquel, **N. Odier**, and F. Duchaine. “GT2022-82096 LARGE EDDY SIMULATIONS OF WIND TURBINE FLOWS Phd student.” In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2022*. Rotterdam, 2022.
- [18] T. Gioud, **N. Odier**, B. Cuenot, T. Schmitt, D. Saucereau, and M. Martin-Benito. “Injection modelling in LOX/GCH4 rocket engines with a diffuse interface method.” In: *8th edition of the 3AF International Conference on Space Propulsion*. Estoril, Portugal, 2022.
- [17] S. Agarwal, Gicquel L.Y.M, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Autonomous large eddy simulations setup for cooling hole shape optimization.” In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. Virtual, Online, 2021, pp. 1–11.
- [16] C. Gout, J. Dombard, F. Duchaine, L.Y.M. Gicquel, and **N. Odier**. “Assessment of profile transformation for turbomachinery large eddy simulations - from academic to industrial applications.” In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. Virtual, Online, 2021, pp. 1–13.
- [15] T. Laroche, **N. Odier**, T. Schmitt, M. Pelletier, and B. Cuenot. “A diffuse interface method with real-gas thermodynamic equilibrium closure applied to capillary problems.” In: *ICLASS 2021, 15th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Edinburg, UK, 2021, pp. 1–8.
- [14] B. Martin, F. Duchaine, L. Gicquel, **N. Odier**, and Dombard J. “Accurate inlet boundary conditions to capture combustion chamber and turbine coupling with large eddy simulation.” In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. Virtual, Online, 2021, pp. 1–14.
- [13] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, and **N. Odier**. “Numerical investigation of the interaction between gas-turbine engine components with dynamic mode tracking.” In: *ASME Turbo Expo 2021: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2021, pp. 1–10.
- [12] S. Agarwal, F. Duchaine, Gicquel L.Y.M, **N. Odier**, and J. Dombard. “Analysis of the unsteady flow field inside a fan-shaped cooling hole predicted by Large-Eddy Simulation.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.

- [11] S. Agarwal, Gicquel L.Y.M, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Effet of in-hole vortical structures on the cylindrical hole film-cooling effectiveness.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [10] J. Dombard, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, K. Leroy, S. Le Guyader, J. Démolis, S. Richard, and T. Grosnickel. “Evaluation of the capacity of RANS/URANS/LES in predicting the aerodynamic performance of a state-of-the-art high-pressure turbine - effect of load and off-design operation.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [9] M. Harnieh, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, and J. Dombard. “Loss predictions in the high-pressure film-cooled turbine vane of the Factor project by mean of wall-modeled Large Eddy Simulation.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [8] M. Harnieh, **N. Odier**, J. Dombard, F. Duchaine, and L. Gicquel. “Loss predictions in the high-pressure film-cooled turbine blade cascade T120D by mean of wall-resolved Large Eddy Simulation.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020, pp. 1–11.
- [7] B. Martin, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, J. Dombard, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Wall-resolved Large-Eddy Simulation of the LS89 cascade using an explicit local time-stepping method.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [6] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, G. Exilard, S. Richard, N. Buffaz, and J. Démolis. “Large-Eddy Simulation of an integrated high-pressure compressor and combustion chamber of a typical turbine engine architecture.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [5] A. Perrot, L.Y.M Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, and T. Grosnickel. “Unsteady Analysis of heat transfer coefficient distribution in a static ribbed channel for an established flow.” In: *ASME Turbo Expo 2020: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. 2020.
- [4] **N. Odier**, T. Poinso, F. Duchaine, L. Gicquel, and S. Moreau. “Inlet and outlet characteristics boundary conditions for large eddy simulations of turbomachinery.” In: *ASME Turbo Expo 2019: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. Phoenix, AZ, USA, 2019, pp. 1–11.
- [3] **N. Odier**, A. Thacker, F. Duchaine, L. Gicquel, G. Staffelbach, N. García Rosa, G. Dufour, and J.D. Mueller. “Evaluation of Integral Turbulence Scale Through the Fan Stage of A Turbofan Using Hot Wire Anemometry and Large Eddy Simulation.” In: *ASME Turbo Expo 2018: Turbomachinery Technical Conference & Exposition*. Oslo, Sweden, 2018, pp. 1–13.
- [2] **N. Odier**, F. Duchaine, L. Gicquel, G. Dufour, and N. García Rosa. “Comparison of LES and RANS prediction with experimental results of the fan of a turbofan.” In: *12th European Turbomachinery Conference*. Stockholm, Sweden, 2017, pp. 1–14.
- [1] **N. Odier**, G. Balarac, and C. Corre. “Numerical simulations of a liquid sheet surrounded by a fast stream: interaction between phase interface dynamics and coherent vortices.” In: *10th European Fluid Mechanics Conference*. Copenhagen, Denmark, 2014.

Invited talks

- [4] **N. Odier**. “Sciences dures, lois molles.” In: *L’histoire à venir. Au nom de la loi !* Académie des Sciences et Belles-Lettres de Toulouse, 2024.
- [3] **N. Odier**, F. Duchaine, L.Y.M Gicquel, and J. Dombard. “Integrated combustion chamber / high-pressure turbine Large-Eddy Simulation.” In: *Combustor-Turbine Wall-Heat Transfer Modeling Workshop*. Technologies Research Center (UTRC), East Hartford, CT, USA, 2019.
- [2] **N. Odier**, F. Duchaine, and L.Y.M Gicquel. “Vers la simulation d’un moteur aéronautique complet par couplage de codes fluides instationnaires (*in French*).” In: *STAE Foundation Fall Meeting*. Toulouse, France, 2017.

- [1] **N. Odier**, G. Balarac, and C. Corre. “Simulation numérique directe d’écoulements diphasiques : étude de la dynamique de jets liquides cisailés (*in French*).” In: *Journée utilisateurs CIMENT*. Grenoble, France, 2014.

Chapitre 3

Simulations aux grandes échelles pour les écoulements liquide-gaz

Chapter 3, selected publications

- [8] T. Gioud, T. Laroche, T. Schmitt, B. Cuenot, and **N. Odier**. “An Eulerian-Lagrangian framework for spray prediction in a Large-Eddy Simulations context.” In: (). (Under review for *Computers and Fluids*).
- [7] J. Carmona, N. Treleaven, **N. Odier**, and B. Cuenot. “Lagrangian Simulation Methodology for Large-Eddy Simulations of Prefilming Air-Blast Injectors.” In: *Journal of Propulsion and Power* (2023), pp. 1–19. DOI: 10.2514/1.b39057.
- [6] B. Péden, J. Carmona, P. Boivin, T. Schmitt, B. Cuenot, and **N. Odier**. “Numerical assessment of Diffuse-Interface method for air-assisted liquid sheet simulation.” In: *Computers and Fluids* 266 (2023), p. 106022. DOI: 10.1016/j.compfluid.2023.106022.
- [5] N. Treleaven, D. Laera, J. Carmona, **N. Odier**, Y. Gentil, J. Dombard, G. Daviller, L. Gicquel, and T. Poinso. “Coupling of Combustion Simulation with Atomisation and Filming Models for LES in Swirled Spray Flames.” In: *Flow, Turbulence and Combustion* (2022). DOI: 10.1007/s10494-022-00342-w.
- [4] J. Carmona, **N. Odier**, O. Desjardins, A. Misdariis, B. Cuenot, and A. Cayre. “A comparative study of direct numerical simulation and experimental results on a prefilming airblast atomization configuration.” In: *Atomization and Sprays* 31.8 (2021), pp. 9–32. DOI: 10.1615/atomizspr.2021037399.
- [3] T. Lafarge, P. Boivin, **N. Odier**, and B. Cuenot. “Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows.” In: *Physics of Fluids* 33.8 (2021), pp. 1–21. DOI: 10.1063/5.0061638.
- [2] **N. Odier**, G. Balarac, and C. Corre. “Numerical analysis of the flapping mechanism for a two-phase coaxial jet.” In: *International Journal of Multiphase Flow* 106 (2018), pp. 164–178.
- [1] **N. Odier**, G. Balarac, C. Corre, and V. Moureau. “Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream.” In: *International Journal of Multiphase Flow* 77 (Dec. 2015), pp. 196–208.

Une part importante de mes travaux est dédiée à l'injection du carburant liquide dans les chambres de combustion, que ce soit pour l'industrie aéronautique, spatiale, marine, ou pour la production d'énergie terrestre. La modélisation fiable de l'injection du carburant liquide reste en effet une problématique majeure pour les simulations aux grandes échelles. Cet écueil est regrettable car cette injection liquide pilote au premier ordre l'efficacité de combustion, les instabilités thermo-acoustiques, la production de polluants et les suies. La prédiction fine de tous ces éléments est bien évidemment cruciale pour la conception des moteurs des deux prochaines décennies, qui devront fonctionner avec de nouveaux carburants. Si la prédiction des émissions polluantes est la première préoccupation pour les moteurs de demain, la problématique de l'opérabilité de ces moteurs n'est pas moins importante. Les questions de l'allumage du spray, du rallumage en altitude, de la prédiction des limites d'extinction, et des interactions liquide-paroi en conditions réactives sont également critiques pour les nouvelles conceptions et carburants. Aussi, la prédiction de l'injection liquide doit pouvoir couvrir l'ensemble des points de fonctionnement pouvant être rencontrés. Mes travaux sont ainsi consacrés d'une part, à la modélisation numérique de ces écoulements, avec divers niveaux de représentativité, ainsi qu'à l'étude de la physique à grande échelle de ces jets cisaillés.

Ces travaux ont été réalisés via mes propres travaux de doctorat, ainsi que les thèses de Julien Carmona et Benoit Peden pour ce qui concerne l'investigation des phénomènes physiques des jets cisaillés. Les thèses de Thomas Lafarge, Julien Carmona, Thibault Gioud, Benoit Peden, ont été consacrées à la modélisation numérique de ces écoulements. Ces travaux ont été financés par l'institut Carnot Energies du Futur, la Commission Européenne, SAFRAN, CNES, ArianeGroup, l'Agence Nationale pour la Recherche, et ont bénéficié des moyens de calcul du mésocentre CIMENT, de GENCI, de Météo-France, et de PRACE.

3.1 Développement de méthodes numériques pour la SGE de l'atomisation

3.1.1 Préambule : Méthodes existantes, et choix réalisés

La prédiction des phénomènes de combustion requiert elle-même la prédiction fine de l'injection du carburant, et de son atomisation, dans un contexte pressurisé, réactif. Cette prédiction numérique reste l'un des grands challenges de la modélisation numérique actuelle, en particulier de par la nécessité de discrétiser des quantités discontinues à l'interface, ainsi que par la nature très multi-échelles du problème. Plusieurs approches bien connues dans la littérature permettent d'aborder le problème. La majeure partie des approches classiques (Méthodes de capture d'interface raides, méthodes d'interfaces diffuses, méthodes lagrangiennes) ont été abordées dans le cadre de mes travaux, bien que ceux-ci se concentrent aujourd'hui clairement sur le développement de méthodes d'interfaces diffuses dites "multi-fluides", ainsi que leur couplage avec des méthodes lagrangiennes.

La première approche consiste à tendre vers des approches de type "DNS"¹. Dès lors, si l'on accepte le coût de calcul important, il est possible de prédire les instabilités interfaciales (Carmona et al. [36]), les phénomènes à grande échelle de battement d'un jet ou d'une nappe liquide (Odier et al. [168, 167]). Il existe également des configurations, et points de fonctionnements pour lesquels la prédiction numérique des caractéristiques du spray soit désormais possible. La Fig. 3.1 illustre par exemple le film liquide et le spray en aval d'un injecteur de type "airblast"

1. Notons le terme "DNS" est probablement imprécis dans un contexte multi-physiques. On pourrait préciser "DNS pour la turbulence incompressible", et "vers la DNS de l'interface liquide-gaz".

académique, ainsi que les distributions de taille de gouttes en aval, selon le seuillage considéré pour le champ de Volume of Fluid (VOF). Toutefois, la convergence en maillage de ce type d'approche reste un point délicat, en particulier s'il l'on s'intéresse à des régimes d'écoulements variés. Notons par ailleurs que cette simulation a été réalisée à l'aide d'un code incompressible, cartésien (NGA [61]), non adapté aux géométries complexes. Un scaling de l'écoulement a été considéré dans ce travail pour la prédiction de la dynamique du film liquide, tout en réduisant le nombre Reynolds gazeux de l'écoulement, et ainsi le coût de calcul (1.2 million d'hCPU). L'analyse des phénomènes d'atomisation, est alors permise, mais cette modification pourrait avoir des conséquences sur la physique d'une flamme éventuelle. Si ces travaux permettent la génération d'une base de données de validation pour les méthodes de type "LES", abordées ci-après dans le manuscrit, ils ne seront pas un candidat pour les simulations de configurations réelles.

La majeure partie de mes travaux s'effectue via des méthodes numériques de type Volume-Finis, ou Elements-Finis. On trouvera quelques exceptions dans ce manuscrit. En particulier, les méthodes de type Lattice-Boltzmann ont été investiguées dans le cadre de la thèse de Thomas Lafarge ([128]), car semblent très prometteuses dans un contexte incompressible ([89, 77, 211, 243]). Cette thèse aura également permis l'investigation des méthodes d'interface diffuses de type "phase-field", issues des travaux précurseurs de Van der Walls [210]), Korteweg [122], Cahn et Hilliard [33]. Nous avons souhaité rester dans un formalisme purement LBM pour traiter ces écoulements, et travaillé pour étendre ces méthodes à un contexte compressible. Les travaux de Lafarge [127] ont aboutis à un formalisme "phase-field", permettant l'usage d'une loi d'état quelconque, de proposer un cadre théorique solide pour les méthodes LBM de types "gradient de couleur (Rothman et Keller [209])". Notons que s'il s'agit bien d'une méthode de type phase-field, le terme de tension de surface pris en compte via un terme source (une collision supplémentaire) basé sur la courbure de l'interface, et non par l'advection-diffusion du paramètre d'ordre, qui traduit usuellement l'évolution d'un potentiel thermodynamique (Antanovskii [7], Anderson et al. [6], Jacqmin [111], Jamet et al. [115]). Ces travaux m'auront convaincu de l'intérêt potentiel des méthodes de type "phase-field" pour des phénomènes de type micro-physique, mais restent toutefois proche d'un cadre "DNS", et ne seront pas retenus par la suite pour des applications réelles. Les travaux menés au laboratoire EM2C par Nayigizente [160] sur une approche similaire dans le logiciel AVBP confirment ce sentiment.

Les méthodes lagrangiennes ont permis de grands succès pour la prédiction des sprays de carburants en chambre aéronautique. Ces méthodes ont peu à peu remplacées les méthodes mésoscopiques de type Euler-Euler. Le détail de ces méthodes peut être trouvé dans [220, 206, 112]. Le développement du modèle FIMUR (Sanjosé et al. [212]), ou modèles assimilés dans d'autres solvers modélisant l'injection des gouttes lagrangiennes à la sortie d'un injecteur aéronautique a permis la simulation fiable de diverses configurations réalistes ou réelles ([101, 121, 226, 79, 138, 183, 65, 224]). Cependant, la grande faiblesse de ce modèle est son besoin de connaître a-priori la distribution des tailles de gouttes à injecter. Cette quantité est bien souvent inconnue, ou éventuellement caractérisée à froid, en conditions non-réactives. Aussi, sa paramétrisation est bien souvent délicate en pratique. De plus, l'interaction du spray avec la dynamique instationnaire de la chambre n'est pas prise en compte dans cette approche purement lagrangienne.

Aussi, la suite de mes travaux est dédiée à l'étude, et à la modélisation des sprays dans un contexte réactif pour des applications réelles, par des approches d'interface diffuses, dites "multi-fluides". L'objectif de ces travaux est double. Le premier objectif est de s'affranchir de la connaissance a-priori d'une distribution de taille de gouttes à imposer dans la simulation pour une prédiction réaliste. Nous avons ainsi besoin de développer des méthodes prédisant, sur des

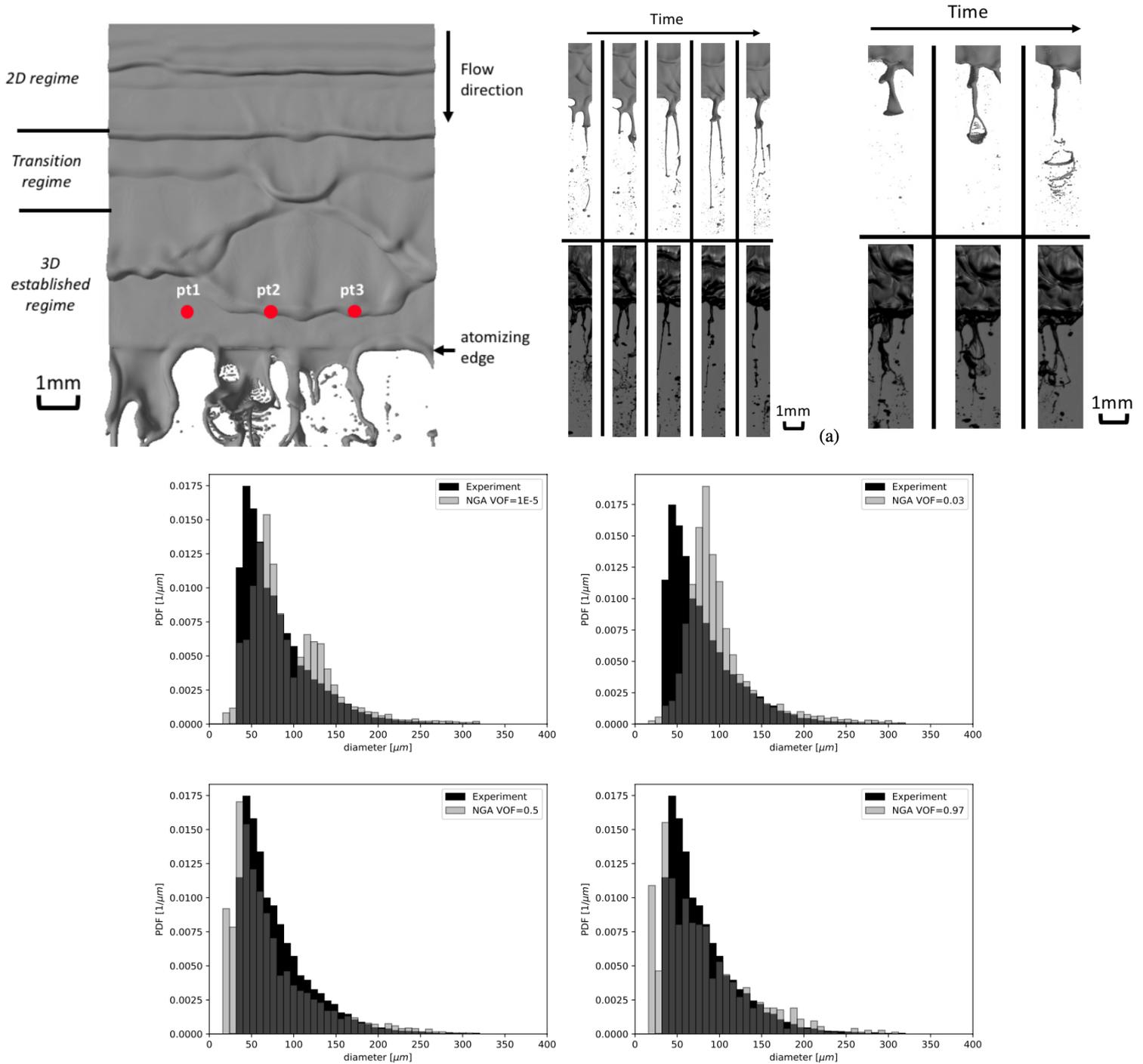


FIGURE 3.1 – Densité de probabilité de taille de gouttes en aval d'une configuration simplifiée de type "Airblast", par une méthode de type "Volume-of-Fluid", selon le seuil de fraction de volume liquide considéré pour l'algorithme de détection de contours CCL (Carmona et *al.* [36]).

maillages LES éventuellement grossiers, les premières grosses structures liquides générées par la brisure du liquide. Ces grosses structures alimenteront ensuite des modèles, qui prédiront le spray de sous-maille. Mes travaux se sont principalement penchés aujourd'hui sur une représentation lagrangienne de ce spray de sous-maille, et plus particulièrement sur le transfert d'un formalisme eulérien, vers un formalisme lagrangien. Le second objectif de ces travaux est de permettre un meilleur couplage dynamique de la phase liquide dense avec l'environnement gazeux de la chambre de combustion. En particulier, les effets de pression, d'évaporation, d'interaction avec l'acoustique sur la dynamique du spray sont aujourd'hui inconnus, et mal (ou pas) pris en compte par une représentation purement lagrangienne du spray.

Enfin, l'un des objectifs de ces travaux, même si cela s'inscrit aujourd'hui plutôt en perspectives, est une meilleure modélisation lagrangienne dans un contexte réactif, et une meilleure représentation du spray de sous-maille.

3.1.2 Méthodes multi-fluides 3 et 4 equations : système d'équations

Les méthodes d'interfaces diffuses² dites multi-fluides sont un bon candidat pour décrire un liquide dans un contexte réactif, compressible, multi-espèces, sur un maillage type LES³, car caractérisent le liquide et le gaz sur la base du simple transport des quantités thermodynamiques usuelles de la mécanique des fluides compressible multi-espèces. Ces approches "multi-fluides" considèrent un mélange de liquide et de vapeur dans la région d'interface, contrairement aux méthodes phases-field qui nécessitent la connaissance de l'évolution d'un potentiel dans la région d'interface.

Les méthodes décrites ici sont détaillées dans Peden et *al.* [184], et la thèse de Thibault Gioud [94] et Gioud2024 [92] pour les éléments de validation de l'implémentation du calcul de la tension de surface dans AVBP. La philosophie générale de ces développements consiste à considérer le même système d'équations que celui usuellement considéré dans AVBP, pour la résolution de Navier-Stokes compressible, multi-espèces, réactif, auquel nous ajoutons un terme source \mathbf{F}_σ pour les efforts de tension de surface, selon la proposition non-conservative proposée par Perigaud et Saurel [190]. Une discussion sur ce choix peut être trouvée dans Peden et *al.* [184]. Quelle que soit l'approche considérée, nous assumons l'équilibre thermique et mécanique du système, autrement dit que l'éventuelle interface liquide-gaz consiste en un mélange d'espèces, partageant la même pression P , la même vitesse \mathbf{u} continue, la même température T , et la même masse volumique ρ . Une égalité des potentiels de Gibbs peut éventuellement être considérée dans le cas d'une fermeture thermodynamique de type cubique, pour simplifier le calcul d'équilibre thermodynamique ([186]). Le système d'équations s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \bar{\mathbf{I}}) = \mathbf{F}_\sigma + \nabla \cdot (\mu \bar{\boldsymbol{\tau}}) \quad (3.2)$$

2. Cette appellation est en fait assez impropre. En effet, si l'interface n'est en effet pas une véritable discontinuité, certaines approches peuvent toutefois prédire des fronts très raides, si les méthodes numériques utilisées le permettent.

3. Notons que la description fine de l'interface par une méthode d'interface diffuse peut se révéler plus chère qu'avec une approche de type capture d'interface raide (VOF ou Level-Set), comme vu dans la thèse de Carmona [35]. Cependant, l'objectif ici est bien une prédiction approchée, sur un maillage dégradé, non adapté aux méthodes "sharp interfaces".

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \mathbf{u}) = \mathbf{u} \mathbf{F}_\sigma + \nabla \cdot (\mu \bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) = 0 \quad (3.4)$$

où P , E , ρ , \mathbf{u} , k sont respectivement la pression, l'énergie totale, la masse volumique, la vitesse du mélange, et k est relatif à l'espèce chimique transportée. Dans le cadre du modèle 3 équations (Pelletier *et al.* [186]), chacune des espèces chimiques est transportée à part entière (Y_1 , Y_2 , etc.), et un calcul d'équilibre thermodynamique permet la détermination de la fraction volumique de liquide. Dans le cadre du modèle 4-équations (Saurel *et al.* [213]), les fractions liquides et gazeuses de chacune des espèces sont transportée séparément ($Y_{1,liq}$ et $Y_{1,vap}$, etc...). La région d'interface est alors vue comme un mélange où chacune des espèces occupe son propre volume, et celles-ci partagent la même pression. Cette dernière hypothèse est équivalente à la loi de Dalton, comme démontrée par Chiapolino *et al.* [46]. Les termes visqueux s'expriment de la façon suivante. Le tenseur des contraintes visqueuses est

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = -\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} \bar{\mathbf{I}} + 2\mu \bar{\mathbf{S}} \quad (3.5)$$

avec $\bar{\mathbf{S}}$ le tenseur des déformations $\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$. Le flux d'énergie est calculé de façon classique

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \mathbf{v}_k \quad (3.6)$$

où les vitesses de diffusion \mathbf{v}_k des espèces k sont calculées par l'approximation de Hirschfelder *et al.* [105] corrigée

$$\mathbf{v}_k = -D_k \frac{\nabla X_k}{X_k} + \mathbf{v}_c \quad (3.7)$$

avec X_k la fraction molaire de l'espèce k , et la vitesse de correction \mathbf{v}_c est introduite pour assurer la conservation de la masse $\sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{v}_k = \mathbf{0}$:

$$\mathbf{v}_c = -D_k \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (3.8)$$

Une loi de mélange permet le calcul des coefficients de viscosité dynamique μ et de conduction thermique λ :

$$\mu = \alpha_l \mu_l + \alpha_g \mu_g \quad (3.9)$$

$$\lambda = \alpha_l \lambda_l + \alpha_g \lambda_g \quad (3.10)$$

Les coefficients μ_l et λ_l sont considérés indépendants de la température pour la phase liquide, ils évoluent selon une loi de Sutherland dans la phase gazeuse (éventuellement une loi de Chung [49] adaptée aux mélanges pour les applications moteur fusée). Le terme de tension de surface est calculé classiquement selon une approche proposée par Brackbill *et al.* [28], Eq. 3.11 :

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \alpha_l = \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} \right) \nabla \alpha_l \quad (3.11)$$

où κ est la courbure de l'interface, calculée à partir du champ de fraction volumique de liquide $\alpha_l = \frac{V_l}{V}$, avec V le volume. Le calcul d'une dérivée spatiale d'ordre 2 dans le contexte non-structuré, et "cell-vertex" d'AVBP est un exercice délicat. Plusieurs choix sont possibles (approche dite "4 delta", ou "2 delta"). Le choix est fait ici d'une approche "4 delta", favorisant la robustesse du calcul de cette dérivée seconde aux éventuels bruits numériques pouvant impacter le champ de fraction volumique de liquide. Des éléments de discussion peuvent être trouvés dans la thèse de Thibault Gioud. Le calcul de la fraction volumique de liquide diffère selon le choix du modèle 3 ou 4 équations considéré. Dans le cadre d'une approche 3 équations, on définit :

$$\rho = \alpha_l \rho_l + (1 - \alpha_l) \rho_g \quad (3.12)$$

où ρ_l et ρ_g sont déterminés à partir d'un calcul d'équilibre thermodynamique et d'une tabulation de la courbe de saturation (voir sous-section 3.1.3.1 sur la fermeture thermodynamique cubique), soit encore :

$$\alpha_l = \frac{\rho - \rho_{g_{sat}}}{\rho_{l_{sat}} - \rho_{g_{sat}}} \quad (3.13)$$

Dans le cadre d'une approche "4-équations", la fraction volumique de liquide est directement déduite de la fraction volumique de l'espèce liquide transportée ⁴

$$\alpha_l = \frac{\rho Y_l}{\rho_l} \quad (3.14)$$

3.1.3 Fermetures thermodynamiques

3.1.3.1 Loi d'état cubique

Plusieurs fermetures thermodynamiques sont possibles pour les écoulements sous-critiques. Dans la lignée des travaux réalisés en conditions supercritiques, nous utilisons d'une part des lois d'état dites cubiques, à l'instar de celle proposée par Peng et Robinson [187], Eq. 3.15.

$$P_{PR} = \frac{\rho r T}{1 - b\rho} - \frac{a(T)\rho^2}{1 + 2b\rho - \rho^2} \quad (3.15)$$

Cette loi d'état est en réalité valable hors de la région binodale, illustrée en rouge sur le diagramme de Clapeyron Fig. 3.2. Sous la courbe de saturation, un calcul d'équilibre thermodynamique approché est réalisé, et permet d'obtenir l'isobare permettant de satisfaire les conditions de masse volumique, et énergie (ou température). Les quantités $\rho_{g_{sat}}$ et $\rho_{l_{sat}}$ sont alors connues, et permettent de remonter à la fraction volumique de liquide α_l via l'Eq. 3.13. Ce calcul d'équilibre se base préalablement sur la tabulation des conditions de saturation, sous la forme de variables réduites. Le détail des calculs d'équilibre thermodynamiques mono-composant, et multi-composants peuvent se trouver dans les thèses de Milan Pelletier [185] réalisée à l'EM2C, et dans la thèse de Thibault Gioud [94]. L'approximation réalisée lors du calcul de l'équilibre consiste à assumer l'égalité des fractions massiques d'espèces dans chacune des phases ($Y_{k,v} = Y_{k,l}$) comme proposé par Pelletier [186]. Cette approche a été considérée dans un contexte moteur fusée dans le cadre de la thèse de Thibault Gioud, et un premier démonstrateur a également été investigué sur un injecteur aéronautique.

4. Notons qu'à l'heure actuelle, une unique espèce liquide est transportée. Des travaux futurs permettront une modélisation multi-liquides.

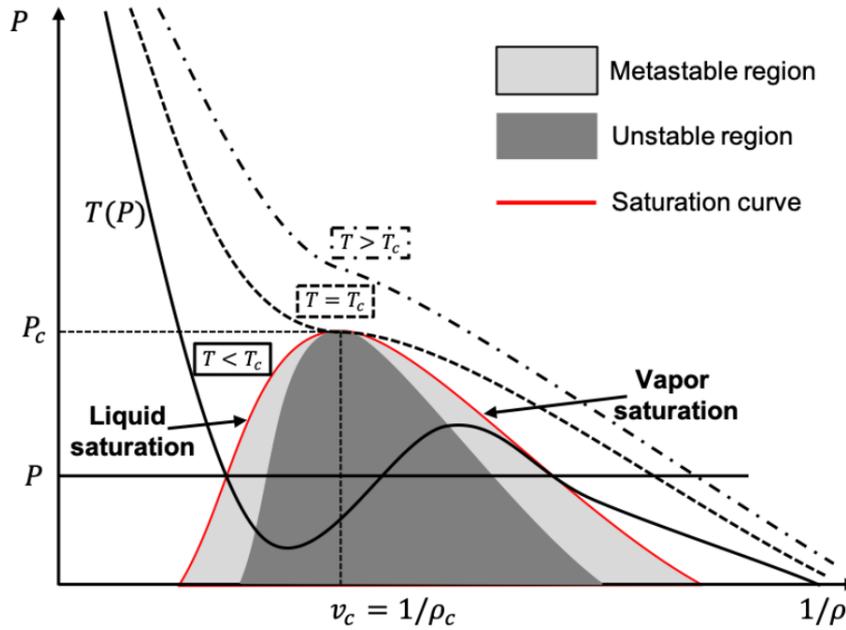


FIGURE 3.2 – Diagramme de Clapeyron.

3.1.3.2 Loi Noble Abel Stiffened Gas

Afin de préserver l'hyperbolicité du système d'équations, [133] propose d'utiliser une loi d'état pour chaque phase et de relier les isotropes du diagramme de Clapeyron via un processus cinétique plutôt qu'en suivant le trajet thermodynamique passant par la zone spinodale. En pratique, cela signifie que le liquide et sa vapeur sont transportés dans les simulations numériques par deux équations distinctes. Les deux phases peuvent exister localement mais elles occupent leur propre volume et répondent à leur propre comportement thermodynamique. Lorsque les conditions de saturation sont atteintes, un équilibre local est calculé et le transfert de masse entre les phases liquide et gazeuse se fait par l'intermédiaire de termes sources dans les équations de transport. Dans le contexte multi-composants, la pression partielle P_k du k -ième composant s'écrit ainsi :

$$P_k = \frac{\rho_k(\gamma_k - 1)C_{v,k}T_k}{1 - \rho_k b_k} - P_{\infty,k}, \quad (3.16)$$

avec ρ_k , γ_k , $C_{v,k}$, b_k et $P_{\infty,k}$ respectivement la masse volumique, coefficient adiabatique, capacité thermique à volume constant, covolume, et constante caractéristique du liquide. Le covolume b_k et la constante caractéristique $P_{\infty,k}$ sont nuls en phase gazeuse, relaxant ainsi la loi d'état à la loi des gaz parfaits. L'énergie interne, l'enthalpie, l'entropie, et vitesse du son s'écrivent :

$$e_k = \frac{P_k + \gamma_k P_{\infty,k}}{P_k + P_{\infty,k}} C_{v,k} T_k + q_k, \quad (3.17)$$

$$h_k = \gamma_k C_{v,k} T_k + b_k P_k + q_k, \quad (3.18)$$

$$s_k = C_{v,k} \ln \left(\frac{T_k^{\gamma_k}}{(P_k + P_{\infty,k})^{\gamma_k - 1}} \right) + q'_k, \quad (3.19)$$

$$c_k^2 = \frac{\gamma_k (P_k + P_{\infty,k})}{\rho_k (1 - \rho_k b_k)}, \quad (3.20)$$

où q_k , q'_k sont l'énergie interne et l'entropie de référence. Cinq paramètres sont donc à déterminer, $C_{v,k}$, γ_k , $P_{\infty,k}$, q_k et q'_k . Une méthodologie pour la détermination de ces coefficients est proposée dans Le Métayer et *al.* [133], sur la base de la courbe de saturation. Boivin et *al.* [22] proposent de se baser sur une régression des propriétés thermodynamiques du liquide et du gaz loin de la saturation, améliorant ainsi la validité de cette équation d'état sur une large gamme de températures, tout en ayant une bonne prédiction des conditions de saturation, tant que la pression est inférieure à la pression critique. Cette méthode est particulièrement adaptée aux cas de combustion en présence d'une phase liquide. Notons enfin que les coefficients thermodynamiques 3.20 sont dérivés de façon à obtenir dans le liquide une vitesse du son égale à celle du gaz, pour ne pas être limité par le pas de temps acoustique dans la phase liquide.

3.1.4 Validation des méthodes pour les écoulements sous-critiques, compressibles

Divers travaux ont été réalisés pour permettre l'utilisation de ces méthodes dans un contexte compressible, réactif, multi-espèces. Le premier travail réalisé dans le cadre de la thèse de Benoit Peden a consisté en la dérivation de la matrice jacobienne des flux pour l'utilisation d'une loi d'état de type NASG (l'exercice avait été mené par Pelletier [186] pour une loi d'état cubique). Le détail des calculs se trouve dans Peden et *al.* [184]. Ces travaux permettent ainsi l'usage de conditions limites caractéristiques (Poinot and Lele [197], Okong'o and Bellan [174]), ainsi que l'utilisation des schémas numériques de type Two-Step Taylor-Galerkin (Selmin [219], Quartapelle [202], Colin et Rudyard [51]), illustrés Fig. 3.3.

Un algorithme d'évaporation (Chiapolino et *al.* [46]) a été implémenté pour le modèle 4-équations et l'équation d'état NASG (dans le cas d'une loi d'état cubique, c'est directement le calcul de l'équilibre thermodynamique qui réalise l'évaporation), et validé dans le cadre des thèses de Julien Carmona et Benoit Peden. Cet algorithme permet de déterminer les termes $\dot{\omega}_{k,i}$ à ajouter dans les termes de droite des Eqs. 3.4 pour que la pression partielle de l'espèce condensable satisfasse l'équilibre liquide-vapeur, approximé par une loi d'Antoine (suivant la proposition de Boivin et *al.* [22]). La figure 3.4 illustre des exemples de validation, sur des cas de tubes à choc 1D, ou sur la vitesse du front d'évaporation de la configuration expérimentale de Simões-Moreira et Shepherd [228].

L'extension de la loi d'état NASG à des capacités calorifiques variables en fonction de la température a été réalisée. Il s'agit de considérer une capacité calorifique constante dans le liquide, et la tabulation usuelle des capacités calorifique ($C_{p,k}(T)$, $C_{v,k}(T)$) dans la partie gazeuse, tout en assurant une continuité de l'enthalpie. Ceci permet la réalisation de simulations réactives, en utilisant la loi d'état NASG. La figure 3.5 illustre une flamme de pré-mélange H2-O2 (mécanisme de [23]) avec les lois d'état gaz parfait et NASG, superposée.

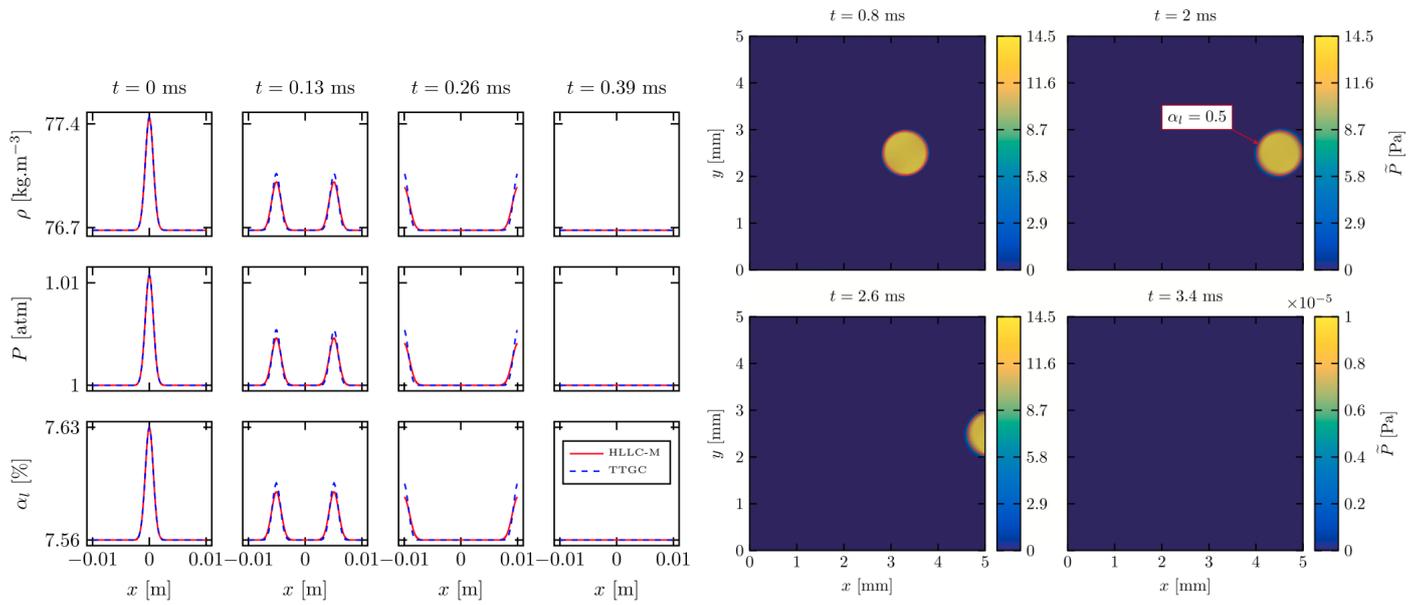


FIGURE 3.3 – Interaction onde acoustique / sortie NSCBC pour les schémas HLLC et TTGC (gauche), et interaction goutte / sortie NSCBC (Peden *et al.* [184]).

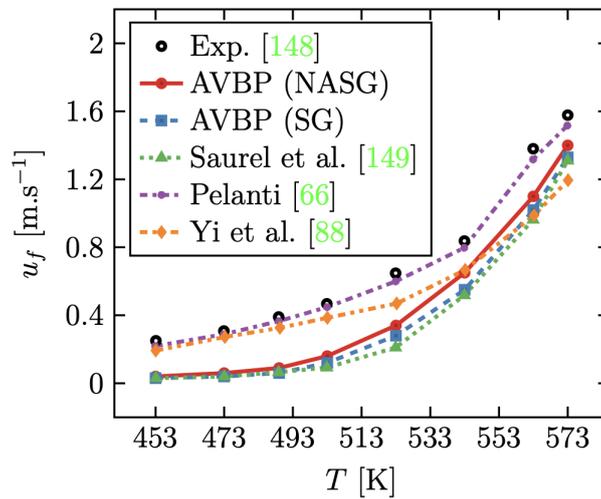


FIGURE 3.4 – Vitesse du front d'évaporation pour l'expérience de [228]. Comparaison de divers résultats numériques et expérimentaux.

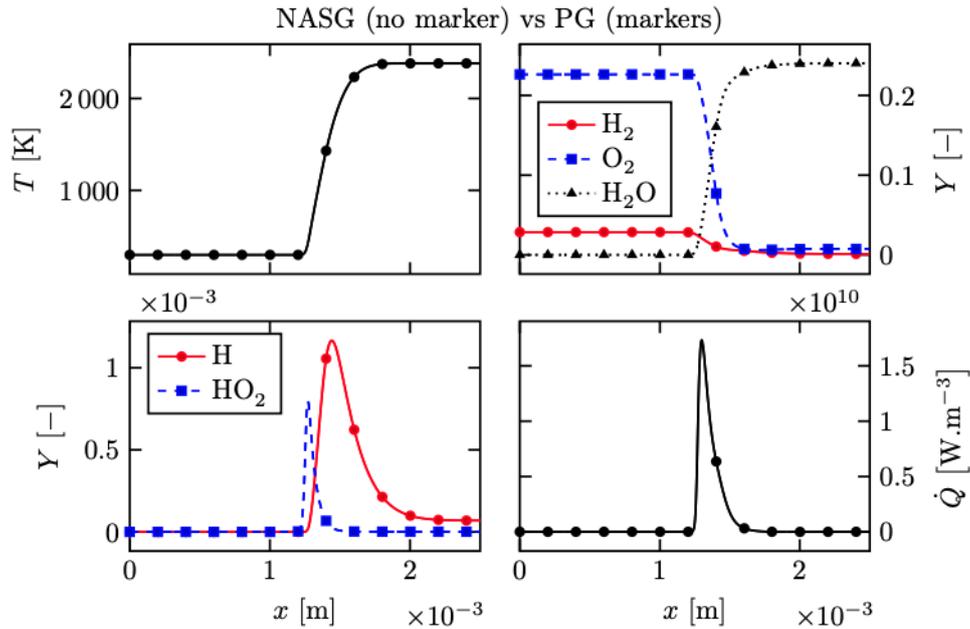


FIGURE 3.5 – Flamme de pré-mélange H₂-O₂ avec lois d'état gaz parfait (traits pleins) et NASG (marqueurs).

Enfin, un travail important fut l'implémentation et la validation des efforts de tension de surface, validée sur les cas-tests classiques du saut de pression de Laplace à travers une goutte au repos, sur des cas d'oscillations de gouttes (Figure 3.6) dans Peden *et al.* [184] ou dans la thèse de Thibault Gioud [94]. Des études sur l'impact de l'épaisseur initiale d'interface sur les résultats sont menées dans les thèses de Lafarge et Gioud, avec des méthodes numériques et thermodynamiques différentes, pour des résultats semblables. Il existe une épaisseur d'interface optimale pour un maillage et une courbure donnée, pour un calcul optimal des efforts de tension de surface.

A l'heure actuelle, rien n'interdit à l'interface de se diffuser de façon importante sous l'effet des efforts visqueux. Deux stratégies s'offrent désormais à nous. La première peut consister à laisser l'interface se diffuser, en lui associant une vision statistique, accolée d'une modèle de sous-maille qui représenterai un spray de sous-maille. Une seconde approche pourrait être d'apporter une certaine quantité d'anti-diffusion (Shukla *et al.* [225], Chiodi *et al.* [47]), pour contrôler l'épaississement de l'interface, et maintenir des premières structures liquide peu diffusées par le cisaillement. Ces deux approches seront investiguées dans le cadre de travaux futurs, et pourront alors éventuellement nécessiter de repenser le couplage avec le formalisme lagrangien, décrit ci-après.

3.1.5 Couplage de méthodes Eulerienne et Lagrangienne.

Ces méthodes d'interfaces diffuses décrites ci-dessus permettent ainsi la prédiction de la dynamique de la nappe liquide, ainsi que du détachement des premières grosses structures liquides. Un algorithme permettant la détection, et le transfert de structures liquides fermées vers une description lagrangienne a été développé (Gioud *et al.* [94, 92]), dans un contexte massivement

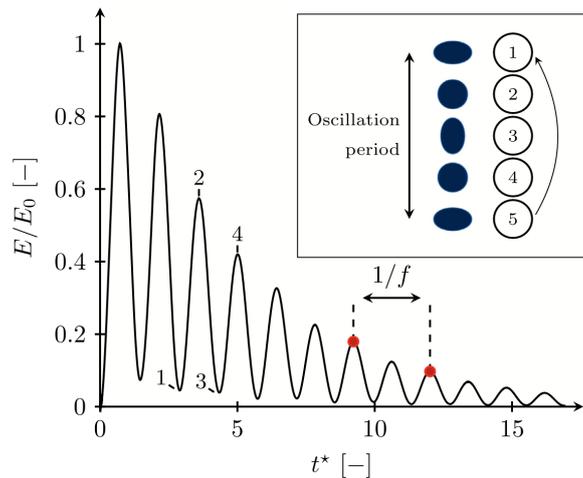


FIGURE 3.6 – Oscillation d’une goutte initialement déformée sous l’effet de la tension superficielle.

parallèle. La philosophie générale de l’algorithme est illustrée sur la Fig. 3.7. Comme évoqué en préambule (sous-section 3.1.1), cette transition vers un formalisme lagrangien permet ensuite d’alimenter un modèle d’atomisation secondaire ([95, 96, 8]), qui se charge d’assurer la robustesse de la prédiction du spray au niveau de raffinement de maillage.

La prédiction du coeur liquide par une approche eulérienne, couplée à la prédiction du spray par une approche lagrangienne a été appliquée avec succès sur une configuration de Jet-in-Crossflow, investiguée expérimentalement par Song *et al.* [231]. L’allure générale du jet prédit par cette approche est illustrée Fig. 3.8, ainsi que les champs moyens eulériens, et lagrangiens.

Si la trajectoire globale du jet, requérant une bonne description du coeur liquide eulérien, est sensible au raffinement du maillage, les résultats statistiques du spray (D_{32} et distribution de taille de gouttes) sont prédits avec justesse sur différents niveaux de résolution en aval (Fig. 3.9). Ceci est en particulier permis par la considération d’un modèle d’atomisation secondaire des particules lagrangiennes ([95, 96, 8]). Enfin, la pertinence de la prise en compte du coeur liquide est clairement démontrée par des comparaisons avec des injections liquide purement lagrangiennes (LAG1, LAG2 sur la Fig. 3.9). Ces simulations purement lagrangiennes permettent éventuellement une prédiction pertinente de la trajectoire du jet si elles sont suffisamment bien paramétrées, mais ne permettent en aucun cas une bonne prédiction des caractéristiques du spray (Fig. 3.9). Ces injections lagrangiennes ne sont pas en mesure de prédire le point de stagnation du jet d’air sur le coeur liquide, et donc la topologie du champ aérodynamique en aval du coeur liquide. En particulier, la bulle de recirculation en aval de l’injection liquide, le sillage se développant en aval, et la dispersion des gouttes de part et d’autre du coeur liquide illustrés par la Fig. 3.8 sont nécessaires pour la bonne prédiction du spray final. Une prédiction précise de l’aérodynamique est nécessaire pour une bonne prédiction des vitesses relatives entre les particules lagrangiennes et le champ eulérien, qui sont le point d’entrée du modèle d’atomisation secondaire. Des travaux sur la simulation d’un jet-in-crossflow avec une approche purement lagrangienne ont été réalisés au CERFACS dans le cadre de la thèse de Balazs Vincze, pour lesquels il aura fallu imposer aux particules lagrangiennes une fluctuation artificielle de vitesse radiale égale à 50% de la vitesse

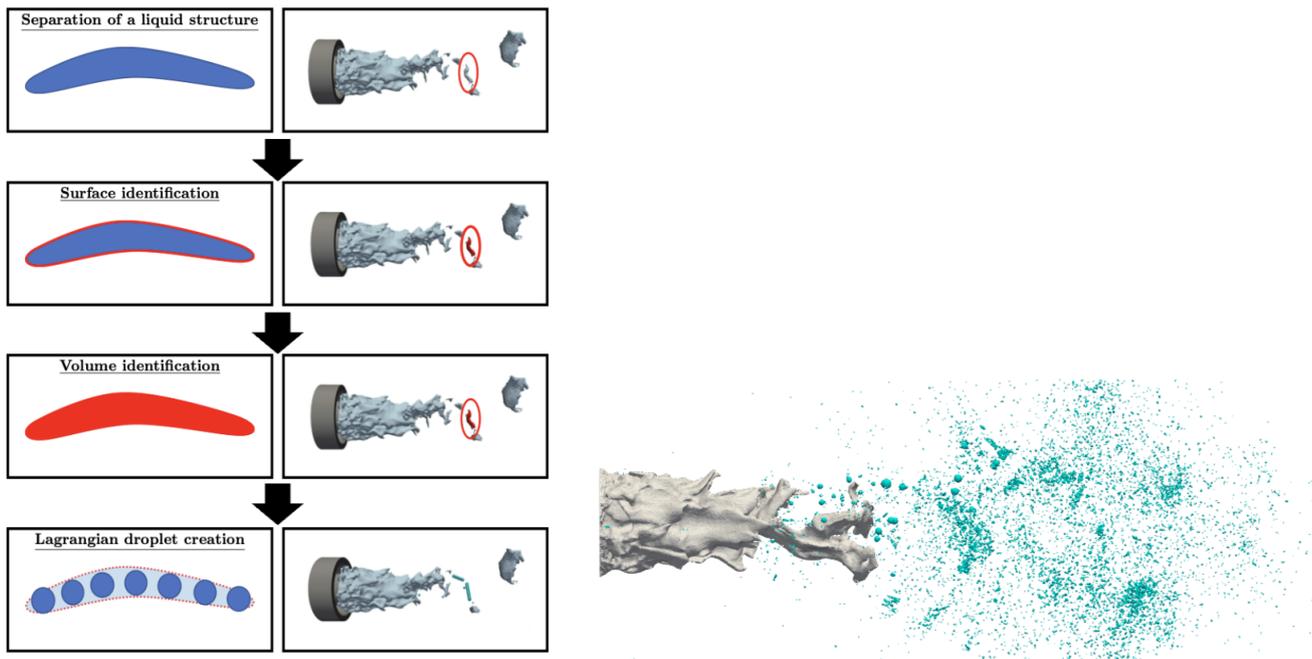


FIGURE 3.7 – Algorithme de transition Euler-Lagrange : Principe général (gauche), application sur un jet coaxial (droite). Gioud et *al.* [94, 92].

d'injection, pour retrouver la dispersion spatiale sur spray attendue.

De la même façon, dans un contexte moteur-fusée, la pertinence de la prise en compte du coeur liquide par rapport à une approche purement lagrangienne est démontrée dans la thèse de Thibault Gioud. La figure 3.10 (gauche) illustre la distribution du champ de pression au sein de la chambre du combustion, et met clairement en avant une amélioration de la prédiction sur les simulations M1 à M2 (coeur liquide par un modèle 3-équations), par rapport à une injection du liquide sous forme lagrangienne (thèse de S. Blanchard). Cette meilleure distribution du champ de pression permet alors une meilleure position spatiale de la flamme, et ainsi une meilleure prédiction des flux de chaleur pariétaux (Fig. 3.10 droite).

Notons que la faiblesse de notre approche pointée ci-dessus sur la trajectoire du jet pourraient être adressée par des travaux futurs sur des méthodes d'adaptation de maillage, et ne devrait pas se retrouver pour les injecteurs de type airblast, pour lesquels la nappe liquide est alignée avec l'écoulement.

Plusieurs travaux en cours s'attachent désormais à l'application de ces méthodes sur des injecteurs réels. L'effet de la modification du carburant est évidemment la suite à court terme.

3.1.6 Prédictions lagrangiennes pour spray-flamme en configuration complexe

Certains travaux ont concernés l'amélioration de modèles lagrangiens existants pour des applications sur des configurations réelles. En particulier, le modèle d'atomisation de bout de lèvres PAMELA proposé par Chaussonnet et *al.* [44] dans un contexte de plaque plane académique

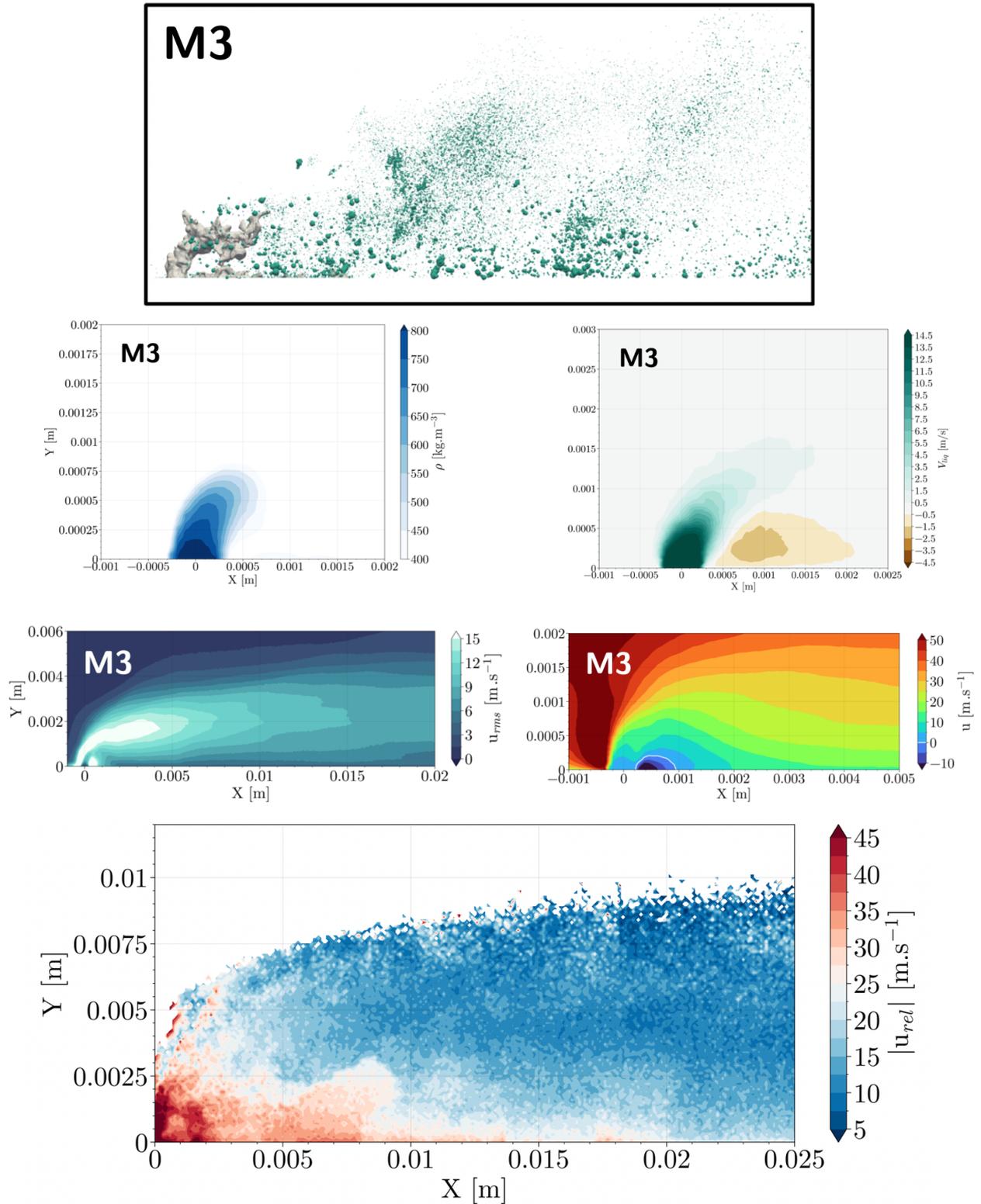


FIGURE 3.8 – Coulage Euler-Lagrange pour un Jet-in-Crossflow : Allure générale du jet (en haut), champs moyens eulériens (au centre), champ moyen lagrangien de vitesse relative (en bas). ([94, 92].)

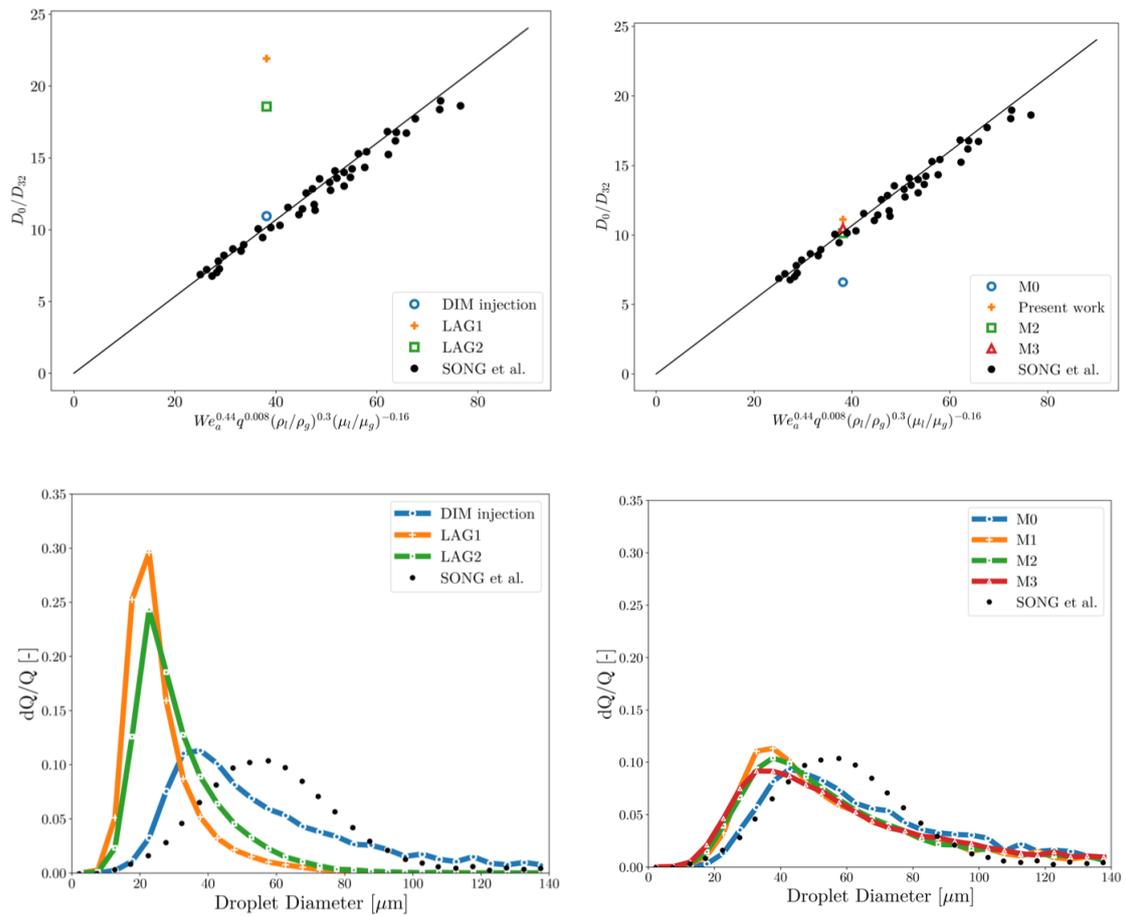


FIGURE 3.9 – Diamètres moyens et distributions de tailles de gouttes sur le JICF décrit par une méthode Euler-Lagrange. A gauche : Comparaison injection Lagrangienne seule et transition EL. A droite : Sensibilité au maillage de la méthode de transition EL.

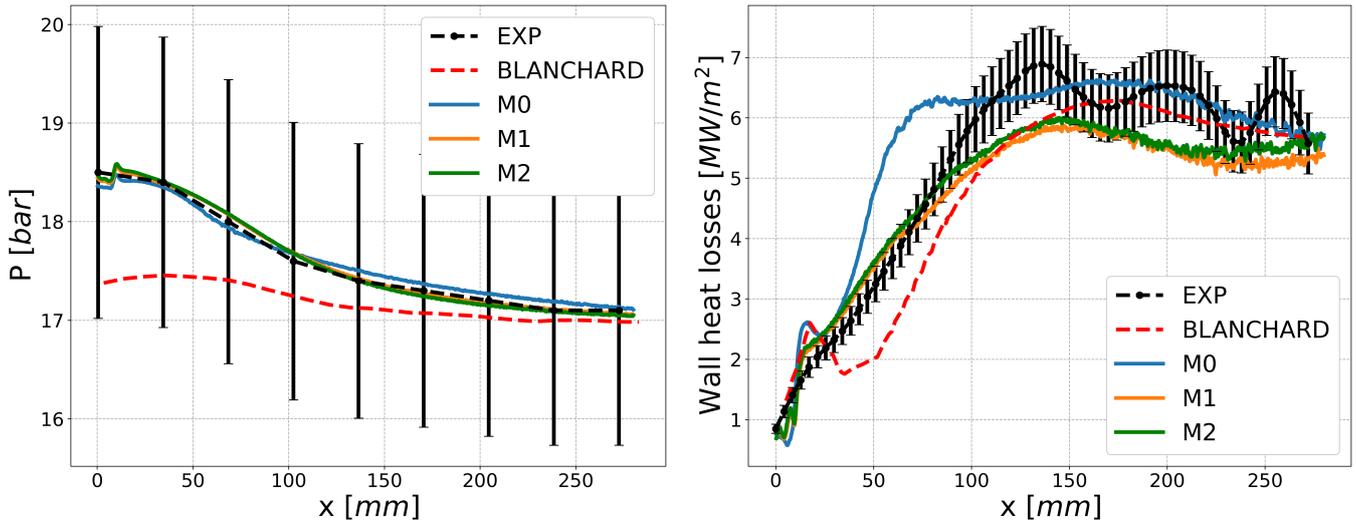


FIGURE 3.10 – Profils du champ de pression, et flux de chaleur pariétaux, pour un écoulement sous-critique, réactif. Comparaison avec une injection purement lagrangienne (Blanchard).

a été revisité dans Carmona et *al.* [37], notamment pour se passer du besoin de la connaissance a priori de grandeurs utilisateurs (épaisseur de film liquide ou une longueur caractéristique de film), difficiles à définir sur une géométrie réelle. Ce modèle revisité, associé à un modèle d’atomisation secondaire, a permis la prédiction des caractéristiques du spray (D_{32} et vitesse des gouttes) sur un injecteur réel, illustrées Fig. 3.11.

De la même façon, le couplage des modèles d’injection FIMUR ([212]), film ([179]) et d’atomisation secondaire ([95, 96, 8]) couplés ont permis la prédiction, en conditions froides ainsi que réactives des caractéristiques du spray sur la configuration SICCA, investiguée expérimentalement au laboratoire EM2C [199, 238]. Notons cependant que pour les caractéristiques spécifiques de cette configuration (absence de véritable lèvres, nombres de Webers relativement faibles mettant en difficultés les hypothèses du modèle d’atomisation secondaire), les paramètres des modèles ont dus être revisités. Les résultats, illustrés sur la Fig. 3.12 permettent toutefois une bonne prédiction du spray réactif (SMD et vitesses des particules). Cette étude pointe certaines pistes d’amélioration des modèles classiques pour des conditions d’utilisation en dehors de leurs hypothèses.

3.2 Physique des jets liquides cisailés par un gaz rapide

3.2.1 Motivations

Malgré l’abondante littérature sur les processus d’atomisation depuis les années 50 (Lefebvre [136], Dumouchel [67]), une compréhension fine, et surtout une prédiction fiable des caractéristiques d’un spray dans un système d’injection réel n’est aujourd’hui pas atteinte. Pour des raisons pratiques, l’immense majorité des études académiques expérimentales considère des écoulements d’eau et d’air à pression atmosphérique. Ces études consistent majoritairement à comprendre la cascade d’instabilités interfaciales menant à la désintégration du jet (Marmottant et Villermaux [142]), ou à la dérivation de corrélations basées sur les mesures réalisées au laboratoire, c’est-

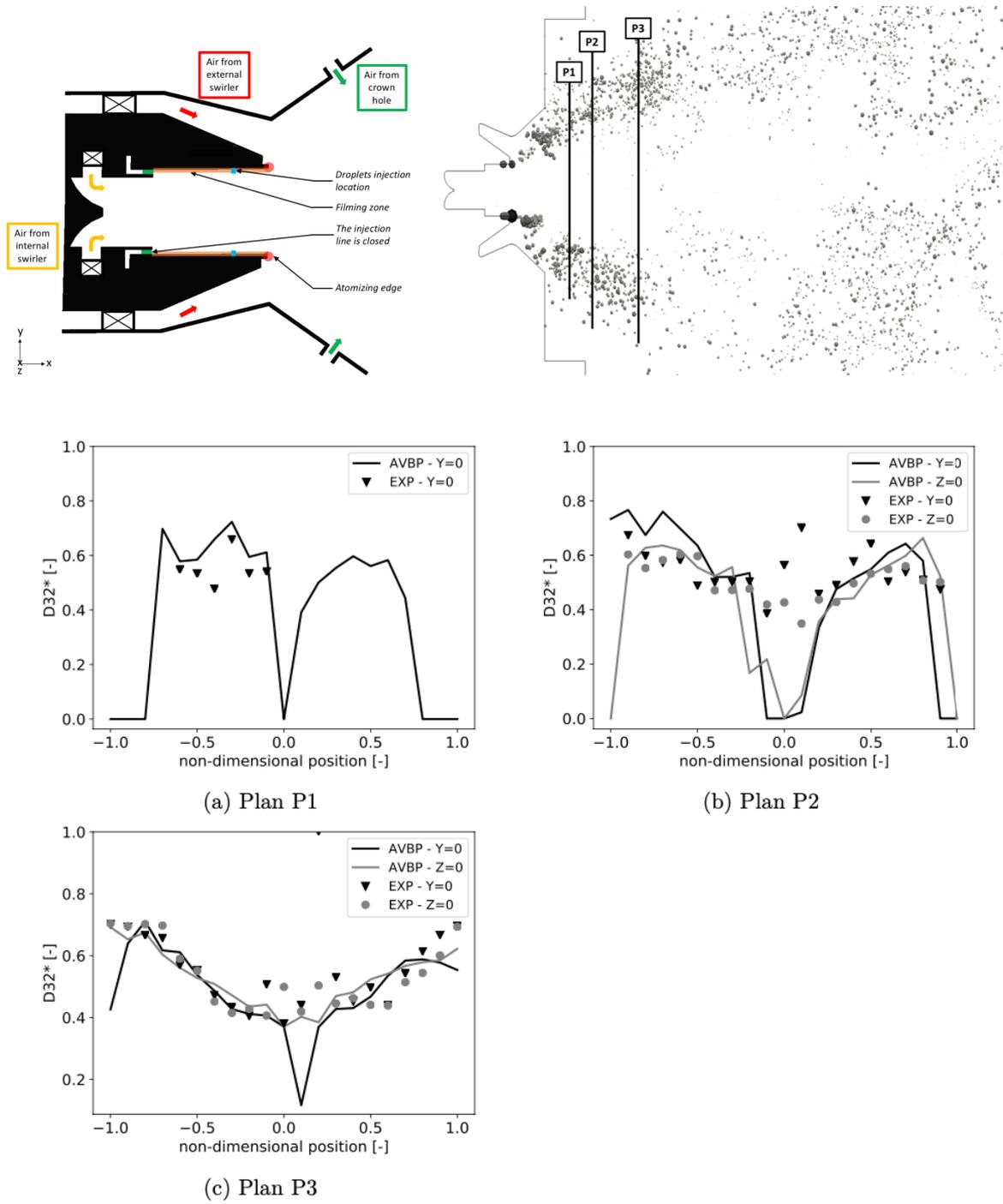


FIGURE 3.11 – Prédiction numérique du spray sur un injecteur réel de turbine à gaz aéronautique (Carmona et al. [37]).

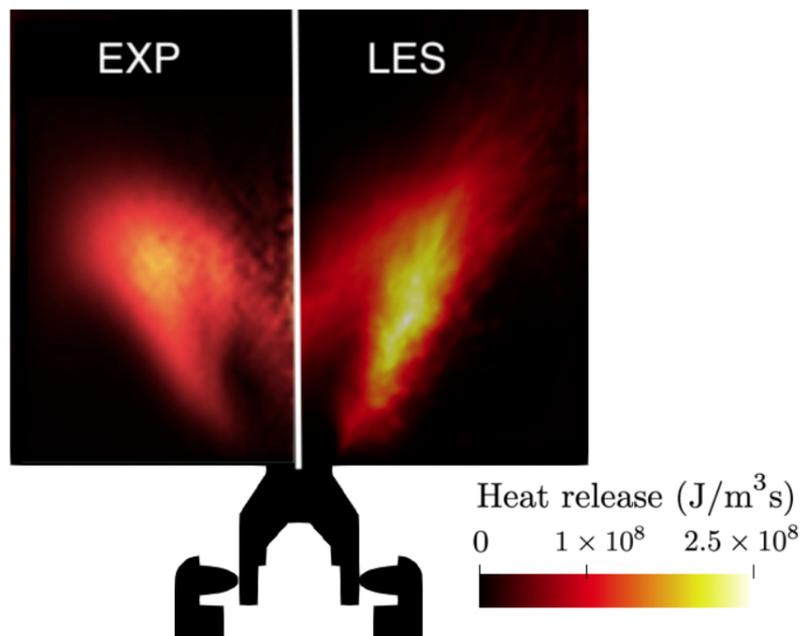
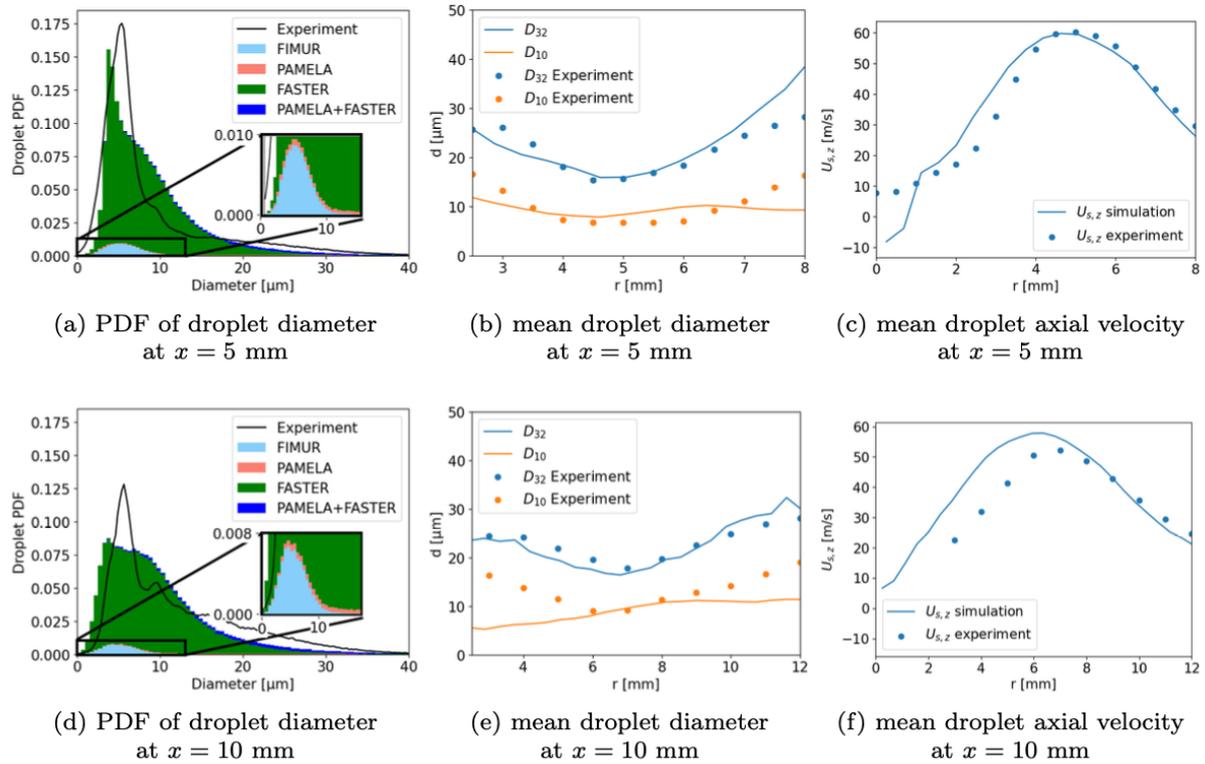


FIGURE 3.12 – Injecteur SICCA : distribution, taille, et vitesse de gouttes en conditions réactive. Dégagement de chaleur.

à-dire loin des conditions pressurisées et chaudes d'une chambre de combustion. Les conditions réelles de la chambre de combustion peuvent alors modifier la dynamique et les caractéristiques finales du spray par rapport à la prédiction précédente, et le système est alors susceptible de ne plus atteindre les objectifs d'efficacité de combustion, ou d'émission de polluants pour lequel il a été conçu. De plus, les conditions de fonctionnement varient fortement pendant le décollage, la croisière et l'atterrissage, couvrant une large plage de débits et de pressions. Les études académiques et industrielles se concentrent le plus souvent sur les régimes nominaux, tandis que les régimes non optimaux, conduisant à une atomisation de mauvaise qualité, sont rarement étudiés. De tels régimes sont cependant critiques dans la conception et la certification des moteurs aéronautiques, en particulier pour le réallumage en altitude des avions et les limites d'extinction pauvre pour les moteurs d'hélicoptères.

Aussi, mes travaux relatifs à l'investigation physique des phénomènes d'atomisation concernent d'une part, la dynamique à grande échelle d'un jet liquide-gaz, et d'autre part, l'investigation des effets de pression, d'évaporation, éventuellement d'interaction avec un front de flamme sur les processus d'atomisation.

3.2.2 Film liquide cisailé et jets coaxiaux

Le début de mon activité scientifique s'est concentré sur la physique des interfaces liquide-gaz cisillées par un gaz rapide. L'une des questions adressée par mes travaux [168] et [167] est le comportement du jet liquide plan, ou coaxial en fonction de nombres adimensionnels pouvant caractériser le jet. Ces études ont été réalisées dans des conditions normalisées ($U_l = 1$, $\rho_l = 1$, $H_l = 1$), afin d'essayer de dégager des tendances, en particulier par la modification du rapport des masses volumiques. En effet, comme indiqué en préambule, certaines corrélations ad-hoc permettent de retrouver les caractéristiques du spray (angle, longueur de pénétration, SMD) en conditions pressurisées (quelques éléments de discussion peuvent être trouvés dans Zhang et *al.* [249]). Cependant, lorsqu'il s'agit de s'intéresser aux aspects instationnaires de ces jets (instabilités interfaciales, ou phénomène de "flapping" de la nappe liquide (Delon et *al.* [60])), il n'existe pas de corrélation faisant consensus, pas plus de que nombres adimensionnels bien identifiés pour caractériser ces instabilités. Les nombreuses échelles de longueurs et vitesses caractéristiques de ces écoulements ont en effet toutes un effet significatif sur la dynamique. Aussi, mes travaux ont consistés en l'évaluation des corrélations existantes dans des conditions numériques idéalisées (le tableau 3.1 illustre par exemple l'écart que l'on peut trouver entre les corrélations de la littérature et des résultats numériques normalisés sur la fréquence de battement d'un jet plan), en l'investigation de l'effet de certains paramètres adimensionnels pouvant caractériser le jet sur la dynamique, ainsi qu'en l'étude des mécanismes physiques menant à la déstabilisation à grande échelle du jet.

Des mécanismes d'instabilité à grande échelles différents sont mis en avant pour la géométrie plane ([168]) et coaxiale ([167]), qui comporte un rayon de courbure supplémentaire. Dans les deux configurations le liquide est accéléré sous l'effet du cisaillement gazeux, réduisant alors l'épaisseur liquide. Dans la configuration plane, une instabilité interfaciale donne naissance à une région de vorticités gazeuses, modifiant localement le champ de pression dynamique, et propulsant ainsi la nappe liquide d'un côté ou de l'autre du plan de symétrie. Dans la configuration coaxiale, les instabilités interfaciales sont susceptibles de s'appairer deux à deux lors de l'accélération du liquide, générant ainsi une large structure liquide, susceptible de se déstabiliser globalement. Ce mécanisme est illustré figure 3.13.

L'appariement de vagues interfaciales sera retrouvé plus tard, avec d'autres méthodes numériques, sur des configurations de films liquides cisillés. Tout d'abord, avec une méthode de

Author	Proposed correlation	Result with author's proposition	Present study [168]
Carentz [34]	$f_{flapp} = 0.1\sqrt{M}$	$f_{flapp} = 0.19 \left(\frac{U_2}{H_1}\right)$	$f_{flapp} = 0.113 \left(\frac{U_2}{H_1}\right)$
Fernandez [81]	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_{min}} = \left(\frac{\rho_2(U_2-U_{min})c_{inj}}{\mu_l}\right)^{\frac{4}{5}} \left(\frac{\delta}{\delta_\omega}\right)^{\frac{3}{2}}$	Not computable ^a	
Carvalho et al. [39]	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.13M^{0.38}$	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.211$	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.68$
Larricq-Fourcade [130] ^b	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.0034 \left(\frac{\rho_2(U_2-U_{min})^2}{\rho_1U_1^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\delta}{\delta_\omega}$	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.0155$	$\frac{f_{flapp}H_1}{U_1} = 0.68$

a. Proposition involves injector chord length c_{inj} specific to the experimental set-up

b. With $\delta_\omega = \frac{(U_2-U_1)}{\frac{2U_2}{\sigma_2}}$

TABLE 3.1 – Comparison of the flapping frequency computed in the present numerical experiment with existing propositions.

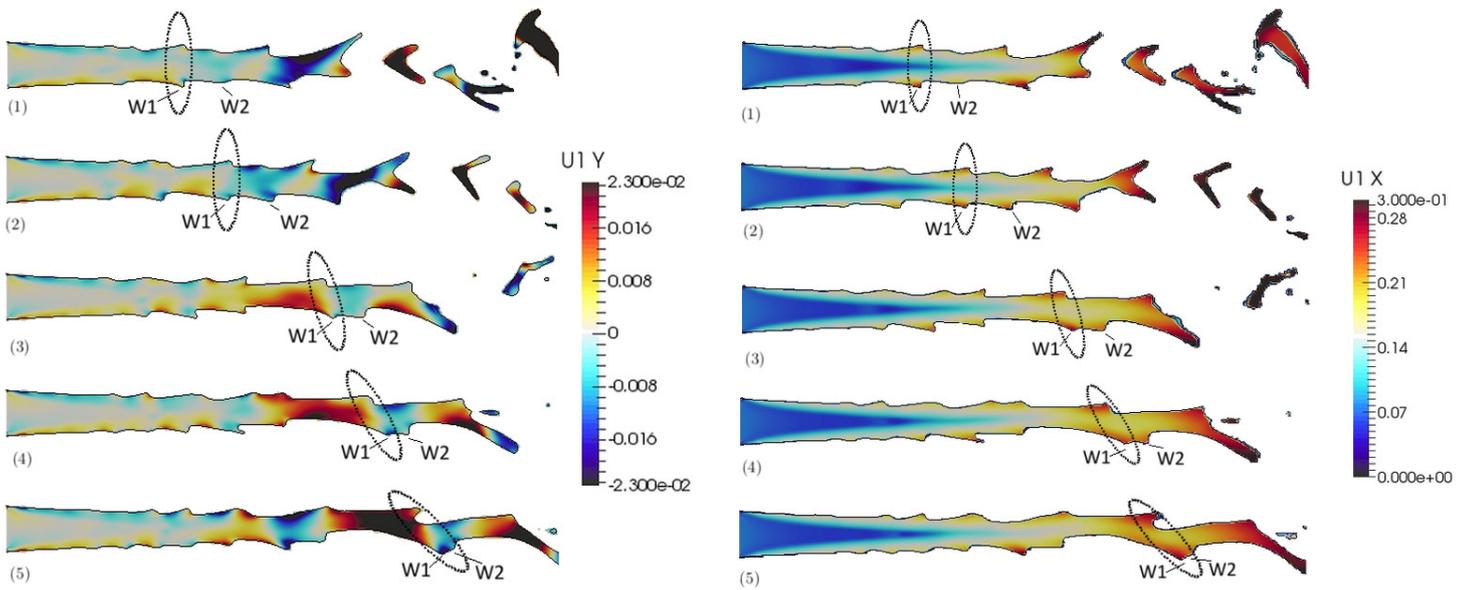


FIGURE 3.13 – Appariement de vagues interfaciales pour un jet coaxial (issues de l'instabilité de KH). (YALES2)

type Volume Of Fluid (VOF) dans Carmona *et al.* [36], illustré Fig. 3.14, puis avec une méthode d'interface diffuse dans Peden *et al.* [184]. Ces phénomènes d'appariement de vagues modifient la fréquence des instabilités de l'interface (un doublement de la fréquence est observé dans Odier *et al.* [167], Carmona *et al.* [36], Peden *et al.* [184]).

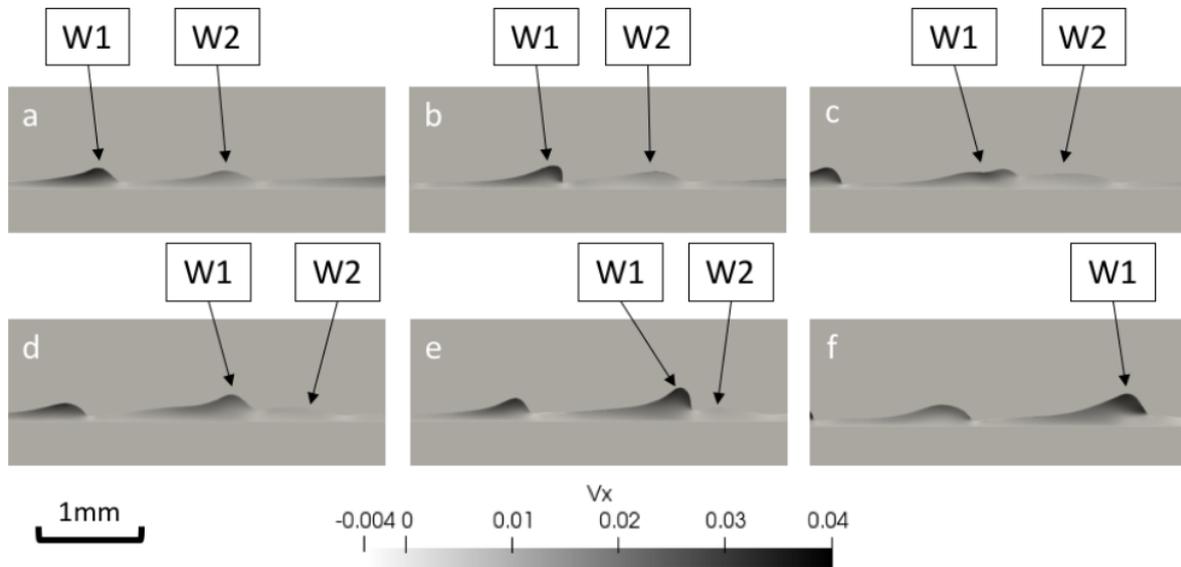


FIGURE 3.14 – Appariement de vagues interfaciales pour un film liquide (issues de l'instabilité de KH). (NGA)

La compréhension de ces instabilités de surface sont importantes pour l'aval du jet. En effet, dans le cadre des films liquide cisailés, les instabilités de surface peuvent modifier l'instationnarité de la région éventuelle d'accumulation en aval de la lèvres, et ainsi l'atomisation en aval (atomisation en ligaments, ou en sacs). Dans le cas de la nappe liquide plane ou du jet coaxial, même si les mécanismes différent, la fréquence de battement du jet est directement reliée à l'instabilité primaire de l'interface (Fig. 3.15). Aussi, ces instabilités interfaciales naissant dès l'injection du carburant pilotent potentiellement l'instationnarité du spray dans la chambre, susceptible de se coupler aux instabilités thermo-acoustiques générales de la chambre.

Un sujet que je n'ai que trop peu traité (brièvement approché, dans le cadre de ma propre thèse ou celle de B. Peden), est la sensibilité des ces instabilités aux conditions limites, en particulier, au profil de vitesse imposé à l'entrée du domaine (et profils d'espèces, de masse volumique pour les approches compressibles). Il est en particulier connu que la nature même (convective ou absolue) des instabilités observées est sensible à ces conditions limites (Fuster *et al.* [180, 86, 152, 27]). Les erreurs numériques sont alors susceptibles de jouer un rôle primordial dans la prédiction des instabilités primaires. Cette analyse constitue par ailleurs un premier bon plaidoyer pour des méthodes numériques robustes, que nous étudierons au Chapitre 5.

3.2.3 Effets de pression, évaporation, combustion

Dans la version idéalisée de ([142, 106, 15]), les processus d'atomisation résultent d'une cascade d'instabilités. Une instabilité de type Kelvin-Helmholtz génère la création d'une vague

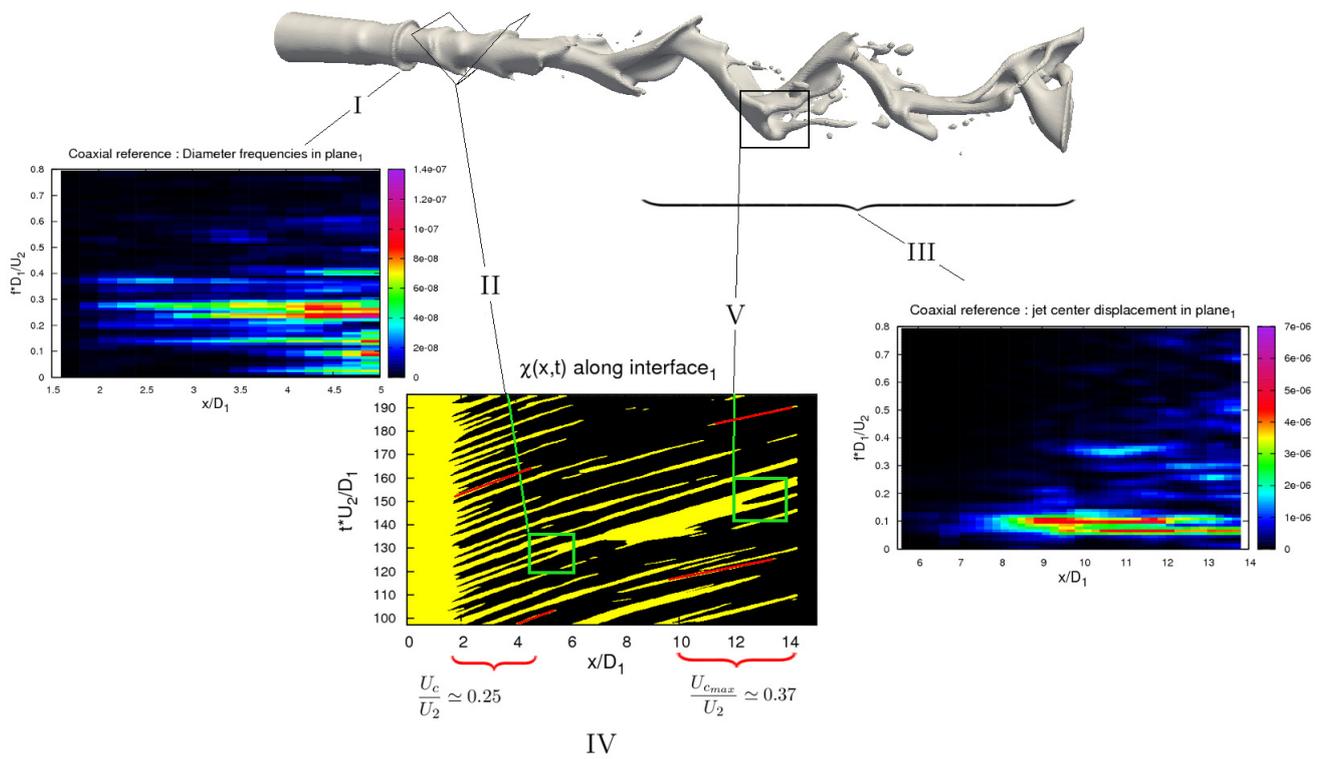


FIGURE 3.15 – Lien entre instabilité primaire et battement à grande échelle d'un jet coaxial.

interfaciale, appelée instabilité primaire, elle-même sujette à une instabilité de type Rayleigh-Taylor (instabilité secondaire), menant à la création d'un ligament. Ce ligament est quant à lui sujet à une instabilité de type Rayleigh-Plateau, se brisant alors en goutte primaire. Enfin, les mécanismes d'atomisation secondaires (Pilch et Erdman [193], Faeth et al. [76], Guildenbecher et al. [99]) brisent cette goutte primaire jusqu'à atteindre un équilibre des efforts convectifs, de cisaillement et de tension superficielle. Les effets de pression et de l'évaporation sur cette succession d'instabilités sont à ma connaissance, soit mal connus (pour les effets de pression), soit quasiment inconnus (pour les effets de l'évaporation).

Dès les années 1980, plusieurs études ont tenté de proposer des corrélations pour transcrire les tailles de gouttes observées des conditions atmosphériques vers des conditions pressurisées (Jasuja [117], Lefebvre [135], Bhayaraju et Hassa [17]). Les études récentes de Chaussonnet et al. [43] et Brend et al. [29] se concentrent plus particulièrement sur la physique spécifique des injecteurs de type "airblast", et notent l'importance des phénomènes instationnaires auxquels est sujet le film en amont de la lèvres sur les caractéristiques du spray, ainsi que le rôle joué par la région d'accumulation de liquide en aval de la lèvres. Si ces derniers auteurs s'accordent sur le fait que les effets de pression sont plus généralement liés à des effets d'efforts aérodynamiques, l'impact des effets de pression reste surtout caractérisé par des corrélations établies sur des configurations bien spécifiques, et mettent en jeu des nombres adimensionnels caractéristiques basées sur des échelles caractéristiques potentiellement non mesurables sur d'autres configurations. Une rare étude des effets de pression sur les mécanismes de l'instabilité primaire a été récemment proposée par Zhang et al. [248] sur un jet coaxial visqueux, et montre l'apparition d'un mode pulsé, généré par les anneaux interfaciaux que nous avons mis en évidence dans Odier et al. [167]. Les auteurs montrent un raccourcissement du coeur liquide, et que l'effet de pression peut s'apparenter à un effet de $M = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2}$, ou de Weber gazeux $We_g = \frac{\rho_g U_g D}{\sigma}$. A l'inverse, les conditions d'injection à basse pression sont étudiées par Dumouchel et al. [68] pour une configuration de jet Diesel, qui notent une importance significative des phénomènes de cavitation pouvant avoir lieu au sein même de l'injecteur. La récente étude de Luo et al. [141] propose alors de préciser les contributions des efforts aérodynamiques, turbulents, tout autant que l'impact de l'éventuelle cavitation, sur la topologie du spray d'un jet Diesel et sur les tailles de gouttes. Cette dernière étude montre que les effets de cavitation et de turbulence au sein du liquide peuvent être aussi importants que les effets aérodynamique du gaz. Malgré ces quelques études, les effets de pression sur les mécanismes physiques en jeu, et plus particulièrement sur les caractéristiques instationnaires des sprays restent largement méconnus.

De même, quelques rares travaux se sont intéressés à l'effet de l'évaporation sur ces instabilités de façon individuelles. Des études de stabilité linéaire (Hsieh [108], Nayak et Chakraborty [159], Chan et al. [41]) se sont intéressées à l'instabilité de Kelvin-Helmholtz (KH) et Rayleigh-Taylor (RT) en présence de transfert de masse et de chaleur. Elles montrent que ces transferts sont susceptibles de réduire la stabilité de l'interface sujette à une instabilité KH, et au contraire d'augmenter la stabilité d'une interface sujette à une instabilité RT. Ces résultats théoriques n'ont cependant pas été confirmés de manière expérimentale, et l'impact de l'évaporation sur le processus complet au sein d'un injecteur réel n'est pas connu. Au-delà de l'impact de l'évaporation, les conditions réactives sont également à même de modifier les topologies des jets diphasiques. Différents travaux ont montré l'allongement de la distance de pénétration du jet en conditions réactives d'un jet Diesel (Bardi et al. [12]) ou des coeurs liquides des configurations moteur-fusée (Fdida et al. [78] Suslov et al. [232]). L'interaction d'une interface liquide-gaz avec un front de flamme reste très peu étudiée et très mal connue. Cependant, des interactions complexes interviennent dans les systèmes réels, où des gouttes non complètement évaporées

peuvent traverser le front de flamme, menant à des flammes stratifiées, ou divers régimes de combustion hétérogène, qui dépendent des rapports des temps caractéristiques d'évaporation et de combustion (Reveillon et *al.* [205], Rochette et *al.* [208], Masri [149]).

Ainsi, mes travaux récents tâchent de profiter des méthodes numériques préalablement développées pour apporter des éléments permettant de mieux appréhender les effets de pression, d'évaporation, et d'interaction avec un front de flamme. L'un des objectifs est le développement de modèles réduits, dont des corrélations pour les effets de pression, ou des modèles lagrangiens pour la problématique goutte-flamme.

La méthode d'interface diffuse 4-équations couplée à l'équation d'état NASG aura permis, probablement pour la première fois, l'investigation de l'effet de pression sur la dynamique des instabilités interfaciales d'un film liquide cisailé (Peden et *al.* [184]). La Figure 3.16 (gauche) illustre l'évolution de la fréquence d'instabilité primaire (KH) du film liquide en fonction de la pression statique imposée dans le domaine, et confirme de manière numérique l'évolution de la fréquence d'instabilité primaire prédite par des analyses de stabilité linéaires par divers auteurs (Raynal [204], Ben Rayana [15], Matas et *al.* [151]) dans des contextes incompressibles. Ces études stipulent que la fréquence de l'instabilité primaire varie comme $f_{axi} = \frac{U_c}{\lambda_{axi}}$, où $U_c = \frac{\sqrt{\rho_g U_g + \sqrt{U_l U_l}}}{\sqrt{\rho_g + \sqrt{\rho_l}}}$, et $\lambda_{axi} = C_{axi} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g} \delta_g}$, avec δ_g l'épaisseur de couche limite gazeuse. Cette figure 3.16 (droite) illustre également que la, ou les fréquences principales trouvées en aval (au-delà de $x/H_l = 1$) semblent elles peu dépendre du niveau de pression. Des travaux supplémentaires restent requis pour une bonne compréhension de ces fréquences aval, qui seront à même d'impacter la dynamique du spray dans la chambre de combustion.

Les travaux en cours s'attachent désormais à comprendre l'impact du flux de masse généré par l'évaporation sur les fréquences de l'interface (Fig. 3.17). Les mécanismes d'évaporation viennent en particulier épaissir la couche limite gazeuse, réduisant ainsi le cisaillement local, de même que les effets de pression dynamique. L'épaississement de cette couche limite gazeuse est alors à l'origine de l'allongement des coeurs liquides intacts observés en moteur Diesel et fusée. Nous avons ainsi pu observer dans le contexte moteur-fusée, des différences significatives sur la longueur du cône liquide, dans le contexte froid et dans le contexte réactif ([93]). Les méthodes numériques présentées au début du chapitre permettent aujourd'hui l'investigation des interactions interface liquide-gaz / flamme, comme illustré Fig. 3.18.

L'ensemble des travaux présentés dans ce chapitre visent à une meilleure prédiction numérique, et description physique de nos sprays intervenant dans les chambres de combustion. Mes travaux n'ont à ce jour pas concernés la modélisation de la combustion turbulente de ce spray, ce sujet étant traité par mes collègues spécialistes dans l'équipe CFD du CERFACS. L'énergie thermique générée par cette combustion est alors transformée sous forme d'énergie mécanique, grâce à l'intégration d'une turbine en aval de la chambre de combustion. L'analyse numérique des écoulements en turbomachine, présentée au chapitre suivant, est le second pilier de mes travaux de recherche.

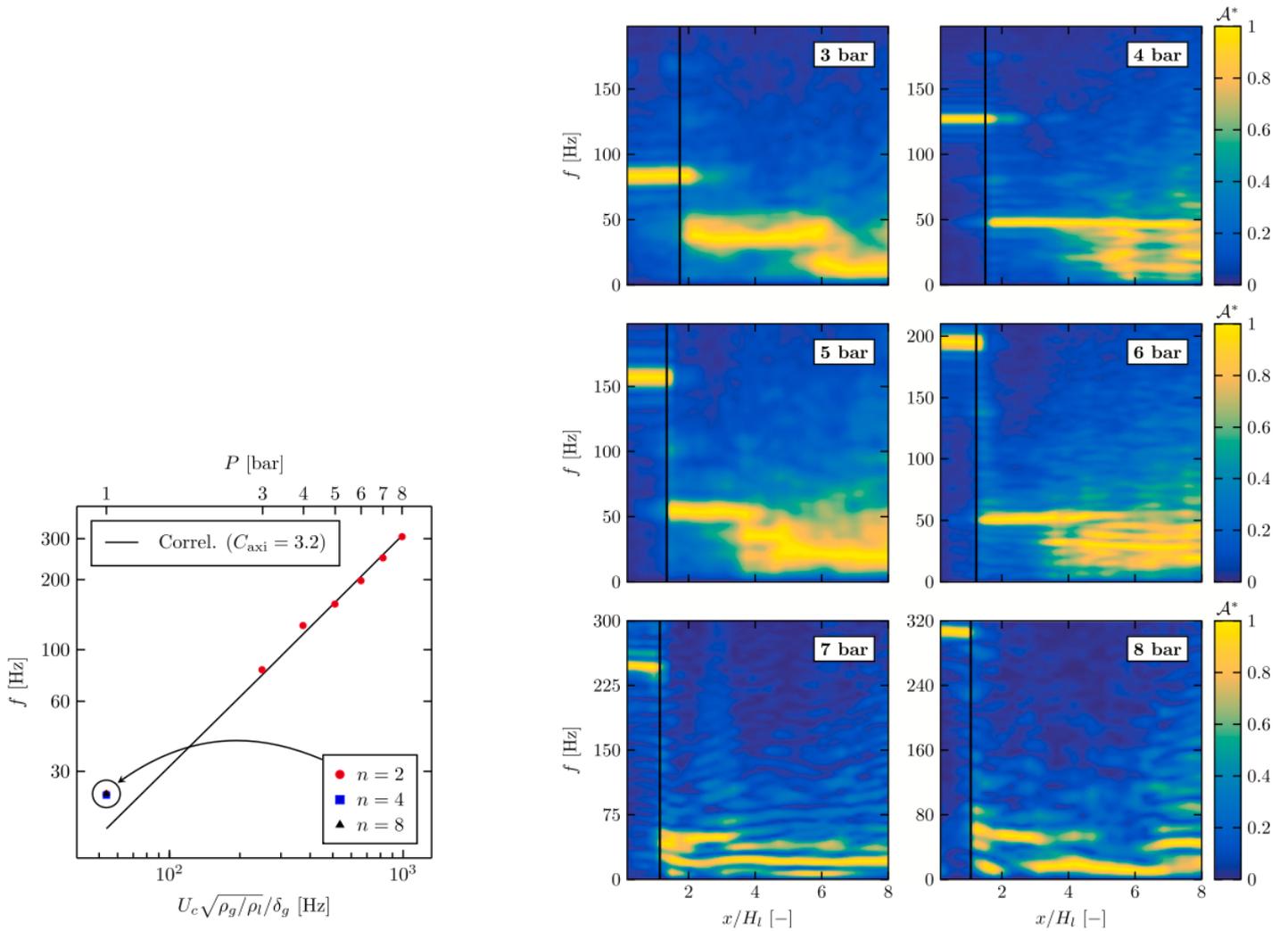


FIGURE 3.16 – Effet de la pression sur les fréquences d’instabilités interfaciales. Evolution de la fréquence d’instabilité primaire (à gauche), spectrogrammes complets (à droite). (Peden et al. [184]).

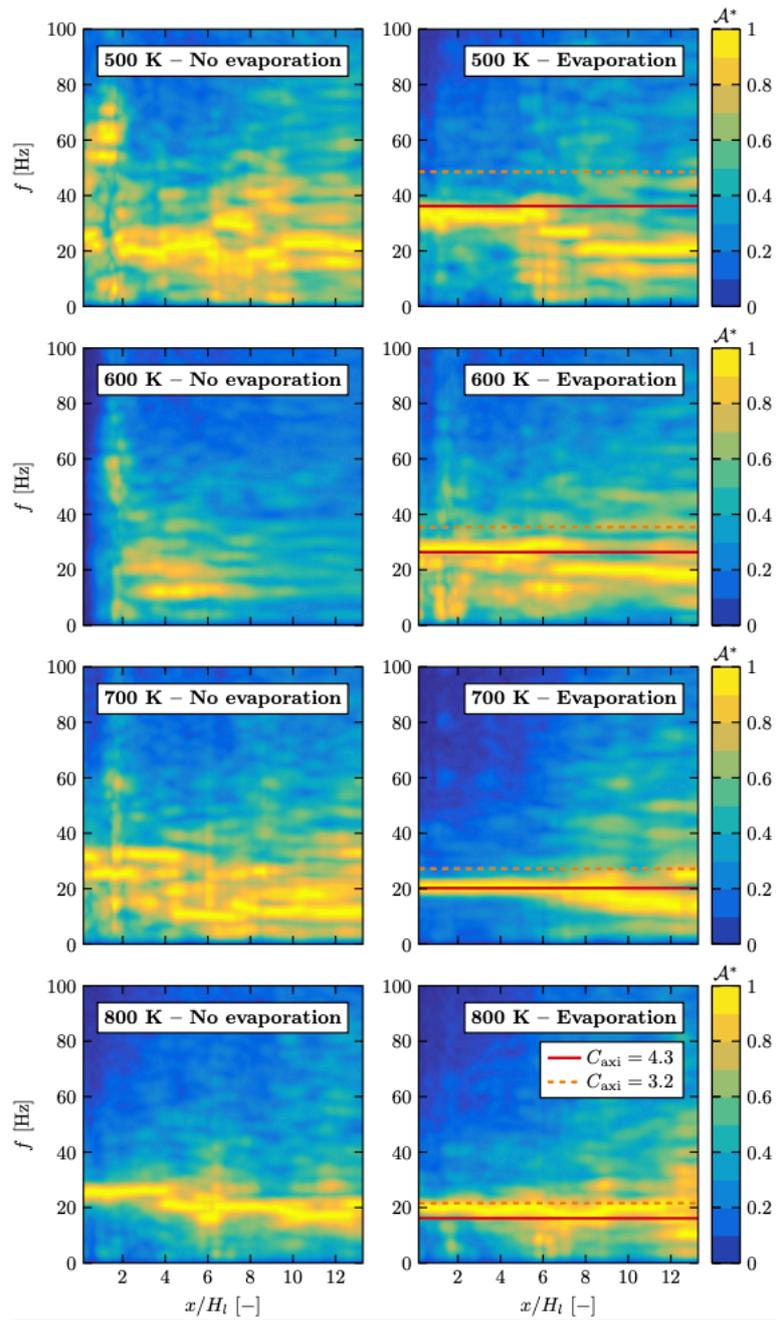


FIGURE 3.17 – Effet de l'évaporation sur les fréquences d'instabilités interfaciales.

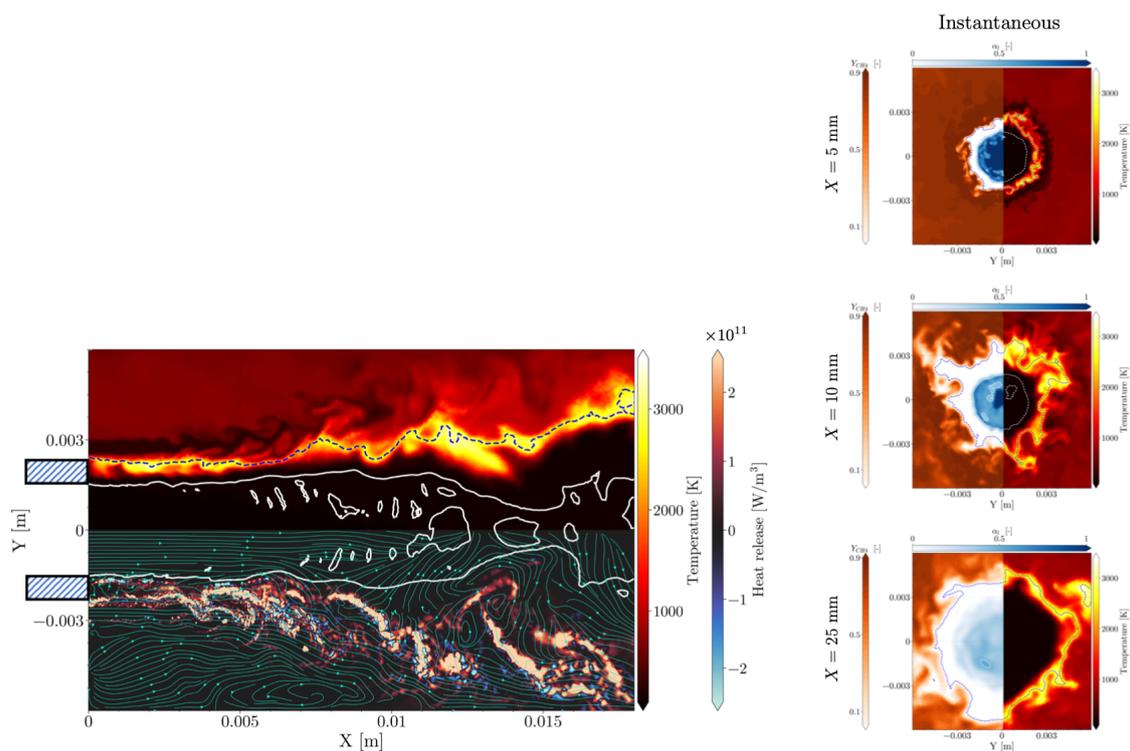


FIGURE 3.18 – Interaction flame - interface liquide-gaz.

Chapitre 4

Simulation aux grandes échelles en turbomachines

Chapter 4, selected publications

- [15] S. Agarwal, **N. Odier**, F. Duchaine, L. Gicquel, D. Bonneau, and M. Slusarz. “Efficient Global Optimization of a laidback fan-shaped cooling hole using Large-Eddy Simulation.” In: *Applied Thermal Engineering* 236.May 2023 (2024).
- [14] D. Dupuy, **N. Odier**, and C. Lapeyre. “Using graph neural networks for wall modeling in compressible anisothermal flows.” In: *Data-Centric Engineering* 5 (2024), e10. DOI: 10.1017/dce.2024.7.
- [13] D. Dupuy, **N. Odier**, and C. Lapeyre. “Data-driven wall modeling for turbulent separated flows.” In: *Journal of Computational Physics* 487 (2023), p. 112173. DOI: 10.1016/j.jcp.2023.112173.
- [12] D. Dupuy, **N. Odier**, C. Lapeyre, and D. Papadogiannis. “Modeling the wall shear stress in large-eddy simulation using graph neural networks.” In: *Data-Centric Engineering* 4 (Mar. 2023), e7. DOI: 10.1017/dce.2023.2. https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S2632673623000023/type/journal%7B%5C_%7Darticle.
- [11] B. Martin, F. Duchaine, L. Gicquel, **N. Odier**, and J. Dombard. “Accurate Inlet Boundary Conditions to Capture Combustion Chamber and Turbine Coupling With Large-Eddy Simulation.” In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 144.2 (2022), pp. 1–12. DOI: 10.1115/1.4052099.
- [10] S. Agarwal, L. Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, and J. Dombard. “Analysis of the Unsteady Flow Field Inside a Fan-Shaped Cooling Hole Predicted by Large-Eddy Simulation.” In: *Journal of Turbomachinery* 143.March (2021), pp. 1–11. DOI: 10.1115/1.4050121.
- [9] S. Blanchard, **N. Odier**, L. Gicquel, C. Cuenot, and F. Nicoud. “Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation.” In: *Phys. Fluids* 33.July (2021), pp. 1–12. DOI: 10.1063/5.0063728.
- [8] D. Dupuy, A. Perrot, **N. Odier**, L.Y.M Gicquel, and F. Duchaine. “Boundary-condition models of film-cooling holes for large-eddy simulation of turbine vanes.” In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 166 (2021), p. 120763.
- [7] B. Martin, F. Duchaine, L. Gicquel, and **N. Odier**. “Generation of Realistic Boundary Conditions at the Combustion Chamber / Turbine Interface Using Large-Eddy Simulation.” In: *Energies* 14.12 (2021), pp. 1–23.
- [6] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L. Gicquel, B. Martin, **N. Odier**, and G. Staffelbach. “Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine: Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part I: Methodology and initialisation.” In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* May (2021), pp. 1–16. DOI: 10.33737/jgpps/133115.
- [5] C. Pérez Arroyo, J. Dombard, F. Duchaine, L. Gicquel, B. Martin, **N. Odier**, and G. Staffelbach. “Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine: Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part II: Comparison against stand-alone simulations.” In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* May (2021), pp. 1–16. DOI: 10.33737/jgpps/133116.
- [4] A. Perrot, L. Gicquel, F. Duchaine, **N. Odier**, J. Dombard, and T. Grosnickel. “Unsteady Analysis of Heat Transfer Coefficient Distribution in a Static Ribbed Channel for an Established Flow.” In: *Journal of Turbomachinery* 143.December (2021), pp. 1–13. DOI: 10.1115/1.4051490.
- [3] D. Dupuy, L.Y.M Gicquel, **N. Odier**, F. Duchaine, and T. Arts. “Analysis of the effect of intermittency in a high-pressure turbine blade.” In: *Physics of Fluids* (2020).

- [2] **N. Odier**, A. Thacker, M. Harnieh, G. Staffelbach, L.Y.M Gicquel, F. Duchaine, N. García Rosa, and J.D. Mueller. “A mesh adaptation strategy for complex wall-modeled turbomachinery LES.” In: *Computers and Fluids* (2020).
- [1] **N. Odier**, M. Sanjosé, L. Gicquel, T. Poinso, S. Moreau, and F. Duchaine. “A characteristic inlet boundary condition for compressible, turbulent, multispecies turbomachinery flows.” In: *Computers & Fluids* 178 (Jan. 2019), pp. 41–55.

4.1 Motivations et contexte

Les approches de type Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) s'avèrent très performantes pour la conception des aubages, et la prédiction des écoulements en turbomachine de façon générale. Ces simulations RANS se trouvent cependant limitées lorsque le régime de fonctionnement n'est plus nominal, et que des instabilités sont susceptibles d'apparaître. La prédiction de divers écoulements importants est ainsi mise en difficulté par les approches RANS. La prédiction des écoulements en compresseur proche de la ligne de pompage est par exemple particulièrement importante pour le contexte de l'hélicoptère, où les machines sont sujettes à de nombreux et soudains changements de régime. Ces écoulements complexes, naturellement instables, mettent à mal les méthodes RANS, et peuvent bénéficier des approches LES. L'augmentation des températures de foyer, afin de maximiser l'efficacité isentropique du cycle thermodynamique, induit également des besoins très importants de prédiction aérothermique fine dans la turbine haute pression. Il est alors nécessaire de capturer avec précision le mélange pariétal. Les turbines basse pression sont quant à elles sujettes à des transitions laminaire - turbulent des couches limites, et leur prédiction est également cruciale pour la minimisation des pertes aérodynamiques associées. La prédiction même de ces pertes requiert la capacité de prédiction de la dissipation de l'énergie cinétique par les structures turbulentes de l'écoulement. Pour toutes ces raisons, si les méthodes basse fidélité (outils 0D, 1D, et RANS) restent, et resteront les outils indispensables à la conception, la simulation aux grandes échelles est un complément qui devient de plus en plus indispensable lors de l'étape de conception. Notons que les nouveaux cycles (dont le fluide de travail peut être concentré en CO₂, afin de permettre sa capture) amènent également leurs lots de particularités [18, 221, 91, 150], et nécessitent également une capacité de prédiction précise.

Je suis arrivé au CERFACS après le développement de l'outil appelé alors "TurboAVBP" ([239, 55]), et les premières simulations de configurations académiques, ainsi que les premières démonstrations en géométries complexes (Papadogiannis et *al.* [182, 181], Koupper et *al.* [124, 123]). Mon travail a consisté dès mon arrivée à la validation fine de ces simulations en géométrie complexe, au développement de méthodes permettant l'accessibilité de la LES au monde de l'industrie, et à l'amélioration de la modélisation.

Les grandes problématiques liées à ces écoulements internes sont la prescription adéquate des conditions limites d'entrée et sortie, la modélisation fiable des écoulements pariétaux, éventuellement le couplage entre composants d'une turbomachine. Ces éléments sont généralement de taille importante, et les pas de temps associés pour satisfaire la stabilité numérique d'un schéma temporel explicite font naître un besoin de méthodes permettant de réduire les coûts de calcul. Nous aborderons aussi les spécificités physiques liées à l'étude de ces phénomènes 3D instationnaires, dans un contexte où la comparaison avec l'expérience, et les simulations RANS est requise, et n'est pas forcément directe. Enfin, un besoin de méthodes numérique précises est évidemment requis pour ces écoulements. Ce thème fait l'objet du dernier chapitre.

Ces travaux ont été réalisés via mes propres travaux de post-doctorat (et mes travaux en cours), les thèses de Shubham Agarwal, Clovis Gout, Benjamin Martin, Medhi Cizeron, co-encadrés avec Laurent Gicquel et Florent Duchaine. Les travaux de post-doctorat de Dorian Dupuy, Carlos Pérez-Arroyo, ainsi que le travail qui débute avec Ananth Sivaramakrishnan ont également significativement apporté. Enfin, les travaux de Master de Jérôme Dabas, Ludovic Plumain, Alexis Boudin, Soufiane Mrini et le stage de Clara Massat ont également apporté des contributions importantes.

4.2 Conditions limites d'entrées et sorties pour les turbomachines

4.2.1 Pression totale, température totale

La mise en données d'une simulation numérique d'un élément de turbine à gaz (soufflante, compresseur, turbine) nécessite l'imposition de conditions limites, fournies par un bureau d'étude, ou par des mesures expérimentales. Ces éléments sont, à l'entrée, le plus souvent caractérisés par la pression d'arrêt isentropique (pression totale), la température d'arrêt isentropique (température totale), ainsi que le débit, la giration, et éventuellement la composition chimique en gaz brûlés. C'est principalement le fait que les sondes de mesure expérimentales fournissent aisément ces grandeurs d'arrêt isentropiques qui explique cette caractérisation. Les simulations instationnaires, compressibles, nécessitent l'usage de conditions limite caractéristiques [197] permettant l'imposition des grandeurs désirées à l'entrée (ou la sortie) du domaine, tout en assurant l'évacuation des ondes acoustiques du domaine de calcul. J'ai proposé une dérivation des ondes caractéristiques à imposer à l'entrée d'une simulation aux grandes échelles, pour l'imposition non réfléchissante de la pression totale, température totale, la direction de l'écoulement et la composition d'espèces chimiques dans Odier et *al.* [171]. Cette référence [171] propose également un couplage avec une injection de turbulence synthétique par le biais des ondes caractéristique. La proposition faite est relativement "naïve", se base sur les travaux de Guezennec et Poinso [98] pour l'injection vorticité lors de l'imposition caractéristique de la vitesse et de la température. Si les ondes acoustique et de cisaillement permettant l'imposition des grandeurs moyennes sont respectivement \mathcal{L}_+ , \mathcal{L}_{t_1} , \mathcal{L}_{t_2} , alors celles permettant de superposer une fluctuation syntétique de vitesse turbulente s'écrivent Eqs. 4.1 à 4.3.

$$\mathcal{L}_{+turb} = \mathcal{L}_+ + \frac{\partial u'_1}{\partial t} \quad (4.1)$$

$$\mathcal{L}_{t_1turb} = \mathcal{L}_{t_1} + \frac{\partial u'_2}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\mathcal{L}_{t_2turb} = \mathcal{L}_{t_2} + \frac{\partial u'_3}{\partial t} \quad (4.3)$$

où $\frac{\partial u'_i}{\partial t}$ sont les dérivées temporelles des fluctuations de vitesse syntétiques produites par l'approche de Kraichan [125]. Mes travaux en cours s'attachent à proposer une formulation bien plus rigoureuse, dans laquelle les ondes générées par ces fluctuations syntétiques sont dérivées, et ajoutées aux ondes permettant l'imposition des quantités moyennes. Notons que pour cette référence Odier et *al.* [171], la définition retenue pour les expressions de la pression totale, et température totale sont :

$$T_t = T_s \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \quad (4.4)$$

$$P_t = P_s \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (4.5)$$

faisant ainsi l'hypothèse d'un gaz idéal, pour lequel les capacités calorifiques C_p et C_v sont indépendantes de la température et de la composition. Nos travaux ultérieurs ont cependant mis en évidence l'importance de la considération d'un gaz non idéal, en particulier pour les

écoulements présentant des gradients importants de composition chimique, de nombre de Mach et des niveaux de température élevés. Ces conditions sont celles effectivement rencontrées dans les architectures modernes de turbine à gaz. Dans ce cas, la température totale se déduit de l'enthalpie totale selon :

$$H_{t_{var}} = H(T_{t_{var}}) = \int_{T_s}^{T_{t_{var}}} C_p(T, Y_k) dT \quad (4.6)$$

et la pression totale s'écrit :

$$P_{t_{var}} = P_s e^{\int_{T_s}^{T_i} \frac{C_p(T)}{rT} dT} \quad (4.7)$$

L'extension du travail présenté dans Odier et *al.* [171] à ces expressions a été réalisée dans le cadre du stage de Jérôme Dabas [53], où les ondes caractéristiques à imposer à l'entrée du domaine de calcul pour l'imposition de $P_{t_{var}}, T_{t_{var}}$ pour des capacités calorifiques variables sont explicitées.

4.2.2 Conditions de sortie

La référence Odier et *al.* [170] propose une condition de sortie présentant un certain intérêt pratique lors de simulations réelles de turbomachine. Elle consiste en une loi de vanne, permettant d'adapter automatiquement la pression de sortie imposée afin de viser un débit cible. Ces travaux ont notamment trouvé un écho pour les simulations de turbomachines avec le code de calcul ProLB ([161]). Nous verrons en effet dans la section 4.5 la difficulté d'atteindre à la fois le bon taux de compression, et le bon débit en turbomachine dans un contexte de simulation aux grandes échelles. Cette difficulté est directement liée à la difficulté de prédire finement les pertes aérodynamiques pour ces géométries complexes. Nous détaillerons dans la sous-section 4.4.1 une méthodologie d'adaptation de maillage pour adresser cette problématique.

4.2.3 Enthalpie totale, débit, giration

Ce travail en cours¹ étend le travail réalisé dans Odier et *al.* [171], et permet désormais l'imposition caractéristique de l'enthalpie totale (sans faire d'hypothèse de gaz idéal), débit massique, giration, et fractions massiques d'espèces chimiques. La bonne maîtrise de l'enthalpie totale imposée à l'entrée d'un étage de turbomachine est en effet primordiale pour la prédiction de la puissance mécanique. Une mauvaise imposition de la pression totale, température totale peut mener à des erreurs non négligeables sur l'enthalpie totale imposée dans le système. Les hypothèses de gaz idéal ou non peuvent être une source d'erreur, particulièrement lorsque les niveaux et les gradients de températures sont élevés, ou lorsque les gradients de fractions d'espèces sont marqués. La figure 4.1 illustre les différences observées sur un profil moyen en sortie de chambre de combustion, selon les formalismes adoptés pour la définition de l'enthalpie totale. La variable $H_{t_{var}}$ est directement construite à partir de l'énergie totale transportée, alors que la variable $H_{t_{cte}}$ fait l'hypothèse d'un gaz idéal (cette figure 4.1 illustre en plus les éventuelles différences observées lors de l'usage d'une simple moyenne spatiale $\langle \phi \rangle$ ou pondérée par le débit $\frac{\langle \rho u \phi \rangle}{\langle \rho u \rangle}$ pour la construction du profil moyen spatial).

Les ondes caractéristiques à imposer pour cette condition limite s'écrivent Eqs. ?? à ?? :

1. Non publié, soumission imminente

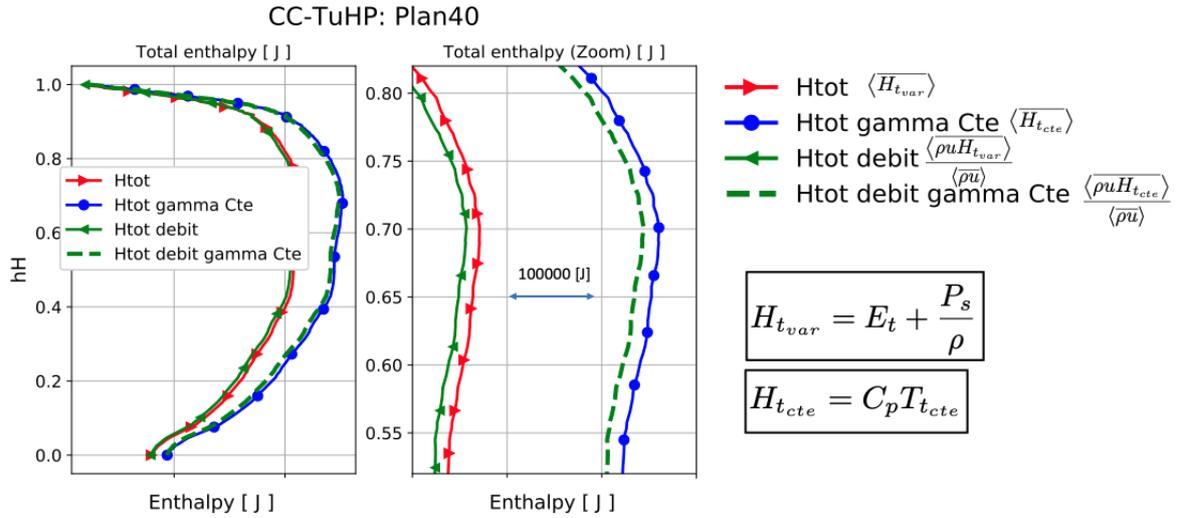


FIGURE 4.1 – Effet de l’hypothèse de gaz idéal sur le profil d’enthalpie totale, au plan 40.

Ce formalisme est validé sur les cas académiques déjà investigués dans [171], et appliqué avec succès sur une configuration sur un étage de turbine (configuration FACTOR). Cette condition limite est également d’un intérêt significatif pour les perçage des trous de refroidissement des turbines haute-pression. Elle permet en effet de maîtriser l’enthalpie et le débit supplémentaire imposé par ces perçages, et ainsi estimer le rendement de l’étage, qui peut s’écrire selon le formalisme de Hartsel (Hartsel [103], Young et Horlock [247], Horlock et Torbidoni [107]) Eq. 4.8 :

$$\epsilon_{Hart} = \frac{(m_g + m_c)(h_{02} - h_2)}{m_g(h_{01g} - h_{2Sg}) + m_c(h_{01c} - h_{2Sc})} \quad (4.8)$$

où les notations correspondent à la Figure 4.2 (tirée de Young et Horlock [247])

Ce travail est désormais étendu pour permettre l’injection de turbulence synthétique. Dans ce cadre, la dérivée temporelle des fluctuations d’enthalpie totale H_t , de débit, Mach, énergie cinétique liée à la fluctuation de vitesse est véritablement calculée.

4.2.4 Méthodes d’injection de turbulence synthétiques

Dans le cadre du stage de master, puis du doctorat d’Alexis Boudin, la méthode d’injection de turbulence sythétique proposée par Kraichnan [125], puis étendue par Smirnov et al. [230] pour permettre un champ turbulent anisotrope a été revisitée pour les besoins spécifiques des turbomachines. Les travaux réalisés se sont concentrés sur l’implémentation de l’approche proposée par Bailly et al. [11], qui permet de choisir le spectre d’énergie à considérer pour les fluctuations de vitesse, et permet également de modifier localement l’échelle de turbulence intégrale imposée (ce qui permettra une meilleure représentativité des couches limites (Pirozzoli [195])). Enfin, nous avons profité de ces travaux pour proposer la capacité d’imposer un champ de perturbations périodique en espace, et ce également pour des configurations axi-périodiques (secteurs de turbomachines).

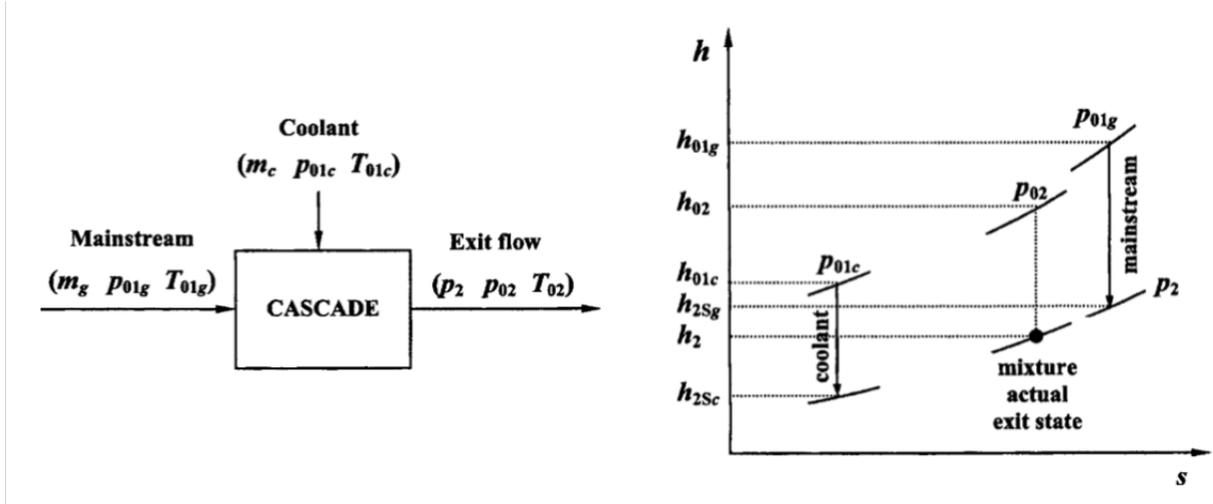


FIGURE 4.2 – Cycle thermodynamique pour une turbine refroidie (d’après Young et Horlock [247])

L’approche proposée par Kraichnan [125] consiste à générer un vecteur de fluctuations de vitesse en sommant N modes gaussiens pour construire un champ de fluctuations stationnaire, homogène, isotrope, à divergence nulle $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ suivant Eq. 4.9 :

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N \left[p_i^n \cos(\kappa_e \lambda_j^n x_j + \omega^n(t)) + q_i^n \sin(\kappa_e \lambda_j^n x_j + \omega^n(t)) \right] \quad (4.9)$$

où κ_e est l’échelle de longueur la plus énergétique, λ_j^n est la j -th composante du n -th vecteur d’onde λ^n , et ω^n est la pulsation du n -th mode. Les coefficients p_i^n et q_i^n dans Eq. 4.9 sont les composantes des vecteurs \mathbf{p}^n et \mathbf{q}^n , définis comme $\mathbf{p}^n = \xi^n \wedge \lambda^n$, and $\mathbf{q}^n = \zeta^n \wedge \lambda^n$, où ξ_j^n et ζ_j^n sont des variables aléatoires. La définition de \mathbf{p}^n et \mathbf{q}^n permet d’assurer l’incompressibilité, par définition du produit vectoriel, $\lambda^n \cdot \mathbf{p}^n = \lambda^n \cdot \mathbf{q}^n = 0$. Les vecteurs tridimensionnels \mathbf{p}^n et \mathbf{q}^n sont explicités Eq. 4.10 :

$$\mathbf{p}^n = \begin{pmatrix} \xi_2^n \lambda_3^n - \xi_3^n \lambda_2^n \\ \xi_3^n \lambda_1^n - \xi_1^n \lambda_3^n \\ \xi_1^n \lambda_2^n - \xi_2^n \lambda_1^n \end{pmatrix} \quad \mathbf{q}^n = \begin{pmatrix} \zeta_2^n \lambda_3^n - \zeta_3^n \lambda_2^n \\ \zeta_3^n \lambda_1^n - \zeta_1^n \lambda_3^n \\ \zeta_1^n \lambda_2^n - \zeta_2^n \lambda_1^n \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Les variables aléatoires ξ_j^n et ζ_j^n sont tirées dans des distributions normales $\mathcal{N}(0, 1)$, tandis que les composantes des vecteurs d’ondes aléatoires λ_j^n sont choisies dans des distributions $\mathcal{N}(0, 1/2)$. Dans la limite $N \rightarrow \infty$, cette formulation permet ainsi de satisfaire de le spectre d’énergie de Passot-Pouquet Eq. 4.11 :

$$E_4(k) = \left(\frac{2}{3}k^*\right) \frac{16}{\kappa_e} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\kappa}{\kappa_e}\right)^4 \exp(-2\kappa^2/\kappa_e^2) \quad (4.11)$$

L’extension proposée par Smirnov et al. [230] permet ensuite l’imposition d’un champ de fluctuations non homogènes en espace, satisfaisant un tenseur de Reynolds donné. Si cette extension permet une meilleure représentation des couches limites, elle reste toutefois limitée à l’imposition d’un spectre d’énergie gaussien, ainsi qu’à une échelle intégrale unique. Plutôt que de

choisir les modes dans une distribution donnée pour respecter un spectre donné, Bailly et *al.* [11] considèrent une distribution uniforme de modes, et modifient l'énergie de chacun des modes pour satisfaire le spectre d'énergie souhaité de la turbulence. Le champ de vitesse fluctuant est alors introduit selon l'Eq. 4.12

$$\underline{u}'(\underline{r}) = \sum_{n=1}^N [\hat{u}^n \cos(\underline{k}^n \underline{r} + \psi^n) \underline{a}^n + \hat{u}^n \sin(\underline{k}^n \underline{r} + \psi^n) \underline{b}^n]. \quad (4.12)$$

où les coefficients \hat{u}^n dépendent du mode tiré, et sont déterminés sur la base du spectre d'énergie considéré selon :

$$\hat{u}^n(k^n) = \sqrt{2E(k^n)\Delta k^n} \quad (4.13)$$

avec $E(k^n)$ l'énergie du $n - ieme$ mode k^n choisi dans le spectre considéré, et Δk^n le pas de discrétisation de la distribution uniforme des modes. Cette approche permet donc la considération de spectres quelconques. La Figure 4.3 illustre l'énergie résolue sur un maillage typique (en traits pleins) et théoriques (en pointillés) obtenue à l'aide des spectres de Passot-Pouquet et Von-Karman-Pao. Si ce dernier spectre permet en effet une meilleure représentativité physique, il nécessite aussi un maillage permettant la capture des petites échelles pour assurer l'énergie cinétique cible ($150m^2s^{-2}$ ici).

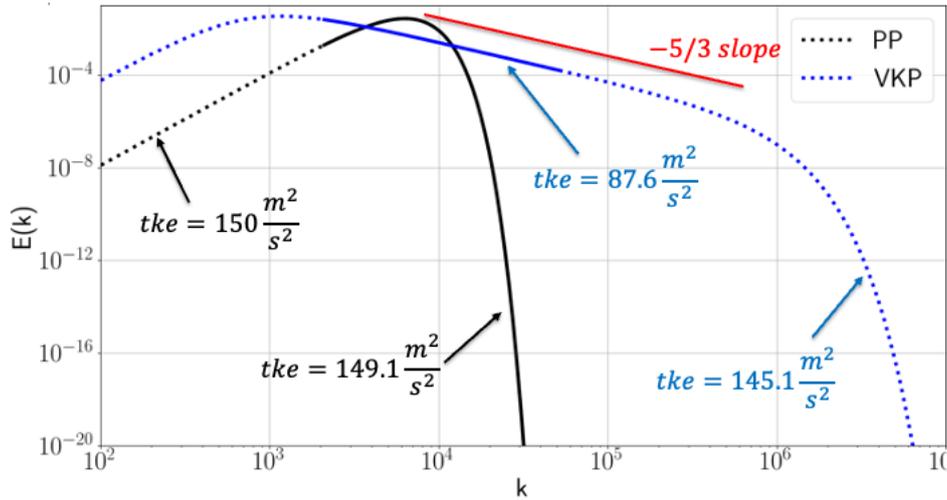


FIGURE 4.3 – Spectres Passot-Pouquet et Von-Karman Pao.

En plus de bénéficier des avantages de cette nouvelle approche, nous pouvons également tirer partie de la formulation Eq.4.13 pour périodiser le champ de fluctuations. L'idée est d'imposer des coefficients $\hat{u}^n(k^n)$ périodiques en espace, en imposant des pas de nombres d'onde Δk^n multiples de la longueur périodique. Chacun des modes aléatoires est projeté dans la direction de périodicité sur le mode le plus proche respectant

$$\underline{k} \cdot \underline{d} = N \frac{2\pi}{L_d} \quad \text{avec} \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

où \underline{d} est la direction de périodicité ($||\underline{d}|| = 1$) et L_d la longueur de la périodicité. La distribution des modes devient alors non uniforme. L'amplitude de chacun d'eux est calculée selon l'Eq. 4.13, où Δk_n n'est plus constant :

$$\Delta k_n = \frac{k_{n+1} - k_{n-1}}{2} \quad (4.15)$$

La figure 4.4 (en haut) illustre un champ de vitesse à l'entrée d'un canal turbulent périodique. Un changement de variable des coordonnées cartésiennes vers des coordonnées cylindriques permet l'application de la méthode à des domaines de secteurs périodiques de turbomachine (Fig. 4.4, en bas).

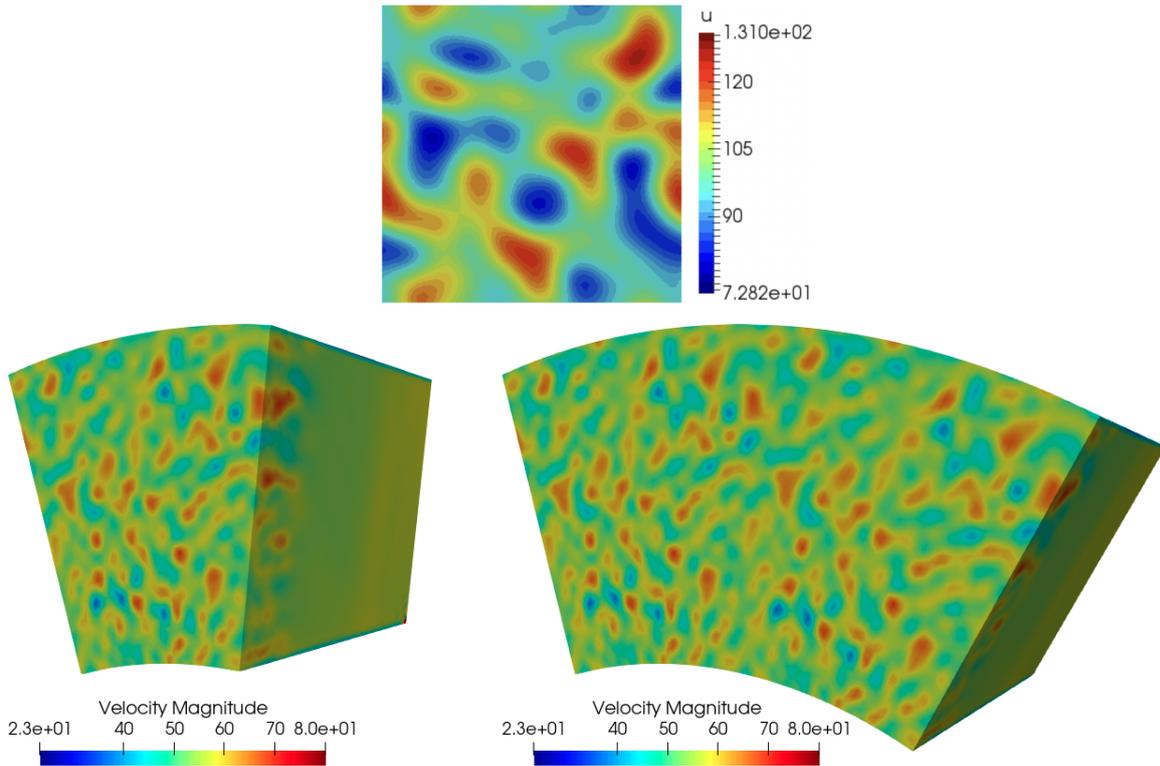


FIGURE 4.4 – Canal périodique turbulent (en haut), secteur axi-périodique (en bas : secteur (à gauche) et secteur dupliqué (à droite))

4.2.5 Spectral Proper Orthogonal Decomposition (SPOD)

La capacité de générer des fluctuations représentatives de la turbulence à l'entrée d'un domaine de turbomachine est cruciale pour une bonne la prédiction de l'aérodynamique ([48, 38, 114, 242, 154, 216]), en particulier la prédiction des écoulements secondaires (décollements, transition de couche limite, écoulements de coin,...), et donc par conséquent, pour une bonne prédiction des pertes aérodynamiques. Deux difficultés sont posées par les méthodes d'injection de turbulence synthétique. La première est relative à la méthode en elle-même, qui assume un spectre idéalisé, et nécessite la connaissance d'une échelle caractéristique de la turbulence, bien souvent inconnue à l'avance.

La seconde difficulté concerne le lien entre fluctuations du champ de vitesse et de température. S'il existe des liens connus théoriques les couches limites compressibles (Strong Reynolds

Analogy, [156, 250]), ou pour des configurations de couches de mélanges ou turbulence homogène isotrope (Voir l'ouvrage de Chassaing et *al.* [42] pour une revue de ces physiques compressibles), aucune théorie n'existe pour l'écoulement en sortie de combustion, fortement swirlé, dont les fluctuations de température sont générées par la flamme. Il est clairement montré dans la littérature que l'utilisation d'une analogie de Reynolds en sortie de chambre de combustion pour représenter les fluctuations de température n'est pas satisfaisante ([118, 120, 119]).

Une partie des travaux menés dans le cadre de la thèse de Benjamin Martin (Martin et *al.* [145, 146]) est dédiée à la génération d'une condition limite d'entrée de turbine réaliste. L'approche est basée sur la décomposition d'une base de données instationnaire (idéalement issue d'un calcul couplé chambre de combustion - turbine) selon une approche Spectral Proper Orthogonal Decomposition (SPOD, [233, 215, 214]). La décomposition SPOD de la base de donnée instationnaire extraite du calcul couplé est réalisée sur le vecteur des fluctuations \mathbf{q} Eq. 4.16

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \rho' \\ u' \\ v' \\ w' \\ T' \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

Cette approche a le mérite de construire des modes orthogonaux pour le produit scalaire spatio-temporel, variants en temps et en espace. Elle permet donc de respecter la cohérence spatio-temporelle des structures énergétiques. Les fluctuations imposées au calcul turbine sont reconstruites selon la méthodologie proposée par Ghate et *al.* [90], sur la base de la décomposition SPOD préalablement réalisée. La reconstruction contient alors l'ensemble de l'information thermodynamique, aux fréquences considérées, permettant de reproduire une instationnarité réaliste, ainsi que des corrélations vitesse-température représentatives. Le champ instationnaire imposé à l'entrée du domaine turbine peut être reconstruit complètement ou partiellement, selon le nombre de fréquences considérées (Fig. 4.5).

Les résultats obtenus ont montré l'apport de cette approche. La figure 4.6 illustre la distribution de fluctuations de température (T_{rms}) sur la peau de l'un des distributeurs considéré. La simulation F90 correspond à une reconstruction contenant 90% de l'énergie initiale de la base de donnée instationnaire, la simulation S2 à une condition d'entrée statique avec une distribution spatiale de vitesse, température. La simulation T2 correspond enfin à la pratique usuelle, c'est-à-dire l'imposition de cartographies spatiales statiques pour les vitesses en température, ainsi qu'un niveau d'énergie cinétique turbulente cible. L'apport de l'approche pour un objectif de prédiction aérothmique est clair sur cette figure. Elle permet ainsi l'étude de la turbine isolée, tout en prenant en compte l'instationnarité représentative de la chambre de combustion. Une discussion détaillée sur les coûts de calcul et de stockage est menée dans la thèse de Benjamin Martin. La Figure 4.7 synthétisant les divers coûts de calcul est éloquent : une simulation réaliste (c'est-à-dire avec un niveau de représentativité équivalent à un calcul couplé chambre-turbine) est possible pour un coût 9% supérieur à une simulation usuelle d'étage de turbine isolée. Cette approche a désormais fait ses preuves sur diverses configurations industrielles réelles.

Cette condition limite permet ainsi la réduction significative du temps de calcul, et offre ainsi aux industriels une piste très intéressante pour l'utilisation de la simulation aux grandes échelles dans leur contexte. D'autres pistes de réduction de coût de calcul sont investigués dans

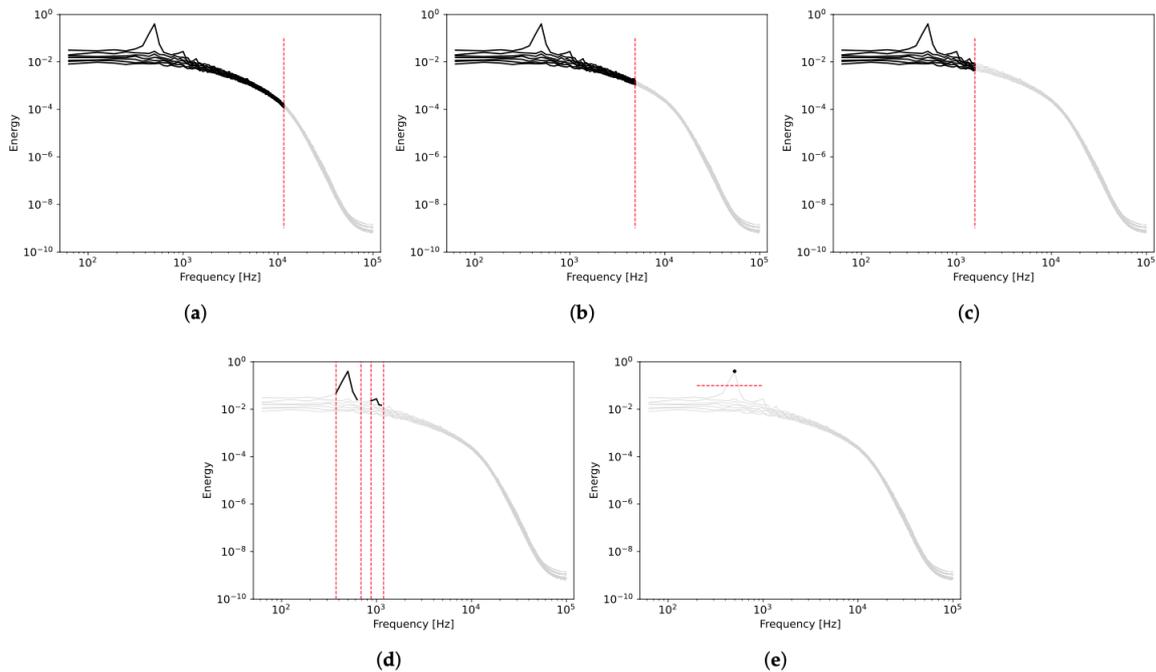


FIGURE 4.5 – Différentes reconstructions considérées pour l'imposition de fluctuations thermodynamiques à l'entrée d'une simulation turbine isolée.

mes travaux, décrits ci-après.

4.3 Approches pour la réduction du coût de calcul

Nous avons noté en préambule qu'un transfert efficace du monde de la recherche vers les industriels est capital pour la mise en œuvre effective de nouveaux concepts. Une partie significative de mes travaux est non scientifique, et dédiée à l'industrialisation de l'outil AVBP pour la turbomachine. J'ai ainsi développé une interface graphique permettant des mises en données très variées, et assure un support aux industriels. Mes travaux au CERFACS ont contribué (et continuent de le faire) à permettre l'usage plus systématique de la simulation aux grandes échelles en turbomachine directement chez les industriels, par les ingénieurs des bureaux d'étude, n'ayant aucune expérience particulière en simulation aux grandes échelles.

Les sujets scientifiques investigués via les thèses de Clovis Gout et Benjamin Martin sont présentés ci-après.

4.3.1 Réduction de Nombre d'Aubes (RNA)

Les différents éléments de turbomachines sont composés de nombres premiers d'aubes et pales pour éviter la résonance des modes acoustiques propres au rotor et au stator (Tyler et Sofrin, [237]). Aussi, la simulation aux grandes échelles de configurations réelles s'avère le plus souvent délicate, ne serait-ce que par l'étendue azimutale possible pour la géométrie à investiguer

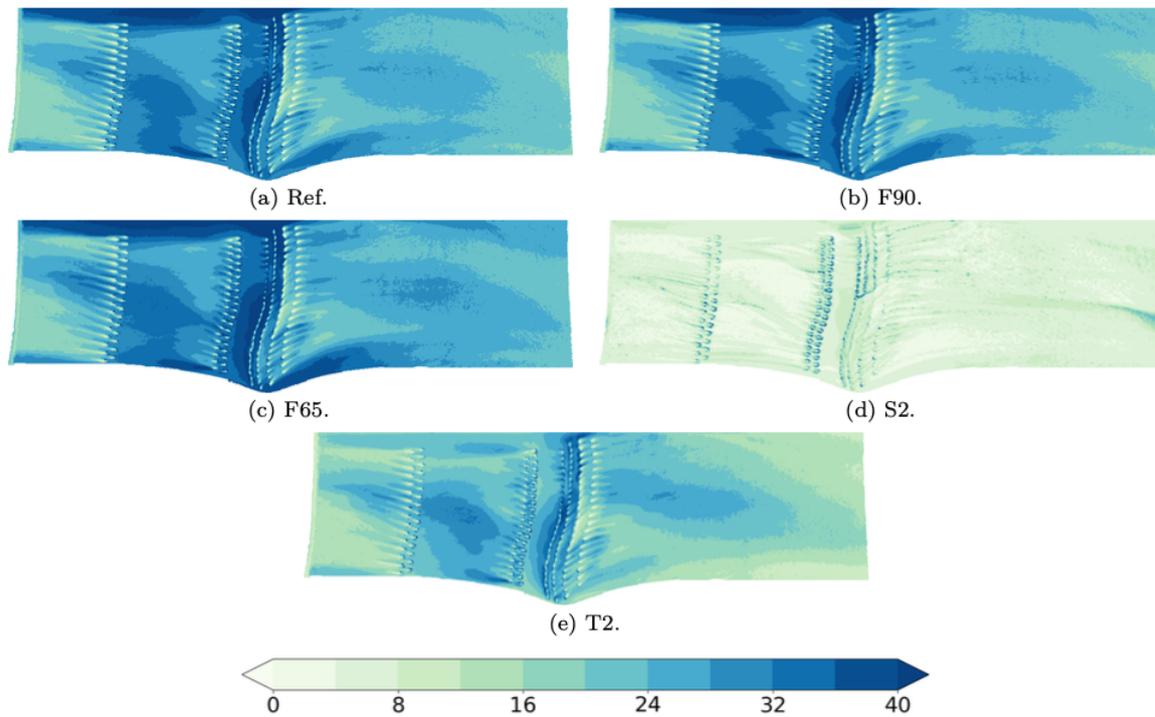


FIGURE 4.6 – Prédiction aérothermique selon les reconstructions considérées. Reconstruction contenant 90% de l'énergie totale (F90), et imposition fixe d'une cartographie spatiale de champs moyens, plus énergie cinétique turbulente (T2) ([145]).

	Coût CPU adimensionné par le cas CL standards pour la simulation de 0.1 s	Différence relative par rapport à la condition limite standard
Ref.	3.375	+ 237.5 %
CL standards : S0, T0, S2, T2	1.0	-
CL réalistes : F99, F90, F65, F20, F10	1.089	+ 8.9 %

FIGURE 4.7 – Coûts de calcul pour diverses simulations.

numériquement. Pour permettre la réalisation d'un secteur périodique ayant la même étendue périodique azimutale entre le rotor et le stator, une première approche est la Réduction (ou ajout) du Nombre d'Aubes (RNA). Il s'agit d'une technique relativement "simple" à mettre en oeuvre, et largement utilisée dans la communauté CFD, sous réserve de disposer d'outils de CAO. Une, ou plusieurs, aube(s) ou pale(s) sont ajoutées ou enlevées à la géométrie initiale, tout en conservant la solidité (rapport corde sur distance inter-aube). La conservation de ce rapport permet en effet de ne pas modifier la distribution de pression (charge) autour de l'aubage, et donc les performances aérodynamiques (Rai et Madavan [203]).

Pour la configuration de la soufflante du DGEN-380, le stator simulé numériquement comporte 40 aubes de stator au lieu des 42 de la géométrie réelle, ce qui induit une mise à l'échelle de la corde de $40/42 \simeq 0.95$. Nous montrons en effet dans Odier et *al.* [169] que les performances aérodynamiques sont numériquement très bien prédites, et dans Odier et *al.* [172, 173], que les moyennes de phase le sont également. Les intensités de turbulence, et la prédiction des échelles intégrales de turbulence sont quand à elles avant tout dépendantes de la modélisation (maillage et modèle de paroi) considérée. Ces travaux auront permis, probablement pour la première fois, de valider finement les prédictions aérodynamiques sur une configuration réelle de turbomachine à l'aide d'une approche modélisée en paroi et mis à l'échelle géométriquement. Les quantités de validation avec la mesure expérimentale sont en particulier les grandeurs RMS, mais aussi spectres de turbulence, et corrélations 2 temps caractéristiques des grandeurs turbulentes qui se font rares dans la littérature ([236]).

4.3.2 Profile Transformation Approach (PTA)

Une autre méthodologie de réduction a été investiguée dans le cadre de la thèse de Clovis Gout, dite "Profile Transformation Approach" (PTA). L'approche, initialement proposée par Fourmaux [84] est appliquée au contexte de la simulation aux grandes échelles, et présentée dans Gout et *al.* [97]. Plutôt que de modifier la géométrie de la turbomachine, c'est l'écoulement lui-même qui est distordu. Pour ce faire, une transformation homotétique des coordonnées est réalisée de part et d'autre de l'interface rotor-stator, permettant l'échange des variables conservatives via la méthodologie MISCOG ([239, 55]). Une configuration 2D pour laquelle les secteurs rotor et stator ne présentent pas la même étendue azimutale est illustrée Fig. 4.8.

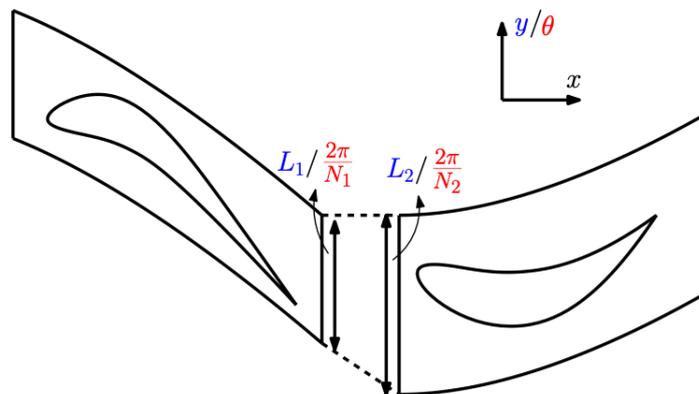


FIGURE 4.8 – Configuration PTA. 2D, 3D.

Les variables conservatives, exprimées sous la forme d'un vecteur ω , sont échangées de part et d'autre de l'interface, en subissant une transformation homotétique. La transformation des coordonnées du domaine 2, afin de réaliser l'échange vers le domaine 1 s'écrit $f^{2 \rightarrow 1}(\zeta^2, t)$. Les variables conservatives échangées dans ce domaine 1 sont $\omega(\zeta^1, t)$, obéissant à l'Eq. 4.17 :

$$\omega(\zeta^1, t) = \omega\left(f^{2 \rightarrow 1}(\zeta^2, t)\right) \quad (4.17)$$

En 2D, la modification des coordonnées ζ^i intervenant dans f s'écrit :

$$y^{(1)} = R(y^{(2)} - y_{min}^{(2)}) + y_{min}^{(1)}, \quad (4.18)$$

avec $R = \frac{L_1}{L_2}$ le ratio de compression (ou dilatation), L_1 et L_2 les dimensions transverses périodiques des domaines (1) et (2), et y_{min} est choisi comme point de référence. De même,

$$y^{(2)} = \frac{1}{R}(y^{(1)} - y_{min}^{(1)}) + y_{min}^{(2)}. \quad (4.19)$$

Cette transformation géométrique simple a certaines conséquences sur la physique, en particulier sur les équations de conservation (Masse, quantité de mouvement et énergie, Eqs. 4.20 à 4.22), dans lesquelles un terme d'erreur $\frac{1}{R}$ apparaît alors.

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho u_i]\right) \Big|_{(2)} = \left(1 - \frac{1}{R}\right) \frac{\partial}{\partial y^{(2)}} [\rho^{(2)} v^{(2)}], \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} [\rho u_j] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho u_j u_i + p \delta_{ji}]\right) \Big|_{(2)} &= \left(1 - \frac{1}{R}\right) \times \left[\left(\frac{\partial}{\partial y^{(2)}} [\rho^{(2)} u^{(2)} v^{(2)}]\right) \delta_{j1} + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\partial}{\partial y^{(2)}} [\rho^{(2)} v^{(2)} v^{(2)}] + \frac{\partial p^{(2)}}{\partial y^{(2)}}\right) \delta_{j2} \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} [\rho E_t] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho(E_t + p)u_i]\right) \Big|_{(2)} = \left(1 - \frac{1}{R}\right) \times \frac{\partial}{\partial y^{(2)}} [\rho^{(2)} v^{(2)} (E_t^{(2)} + p^{(2)})], \quad (4.22)$$

Notons qu'en pratique, le ratio R est toujours peu différent de 1. Notons également que la prise en compte de la transformation du temps a également été investiguée dans la thèse de Clovis, améliorant les résultats sur des configurations académiques 2D. Difficile à étendre au 3D, elle n'est pas retenue pour les configurations industrielles. Nous montrons dans Gout et *al.* [97] que cette approche "PTA" très simple à mettre en oeuvre (plus simple qu'une méthode RNA nécessitant la modification de la géométrie), permet de très bon résultats pour la prédiction des performances aérodynamiques de turbomachines réelles (le compresseur CREATE et un étage de turbine haute pression réelle). Nous montrons surtout l'apport en terme de coût de calcul par rapport au calcul périodique, pour les faibles niveau d'erreur relatives entre configuration périodique et PTA. Ces chiffres sont reportés dans les tableaux 4.1 et 4.2.

Cette approche a aujourd'hui été étendue aux configurations multi-étages, et appliquée sur une géométrie réelle de bi-turbine, montrant un gain CPU de 30 par rapport au calcul 360° (domaine PTA de 24 millions de cellules, contre 730 millions de cellules pour le domaine 360°), ainsi que de très bons résultats sur les performances de la machine, ou pour les quantités turbulentes (énergie cinétique turbulente). Elle est aujourd'hui utilisée par des ingénieurs en bureau d'étude.

Reduced mass flow	Compression ratio flow	Flow angle	CPU gain
-0,09%	-0,08%	0,20%	3,17

TABLE 4.1 – Configuration CREATE : Comparison of relative difference between the periodic and PTA simulations.

Reduced mass flow [%]	Flow angle [°]	Isentropic efficiency [%]	CPU gain
0.2	-1.4	-0,17	2.24

TABLE 4.2 – Turbine Tech800 : Performance comparison between the periodic and PTA simulations.

4.3.3 Chorochronie et SGE

Plus complexe que la méthodologie "PTA", une approche dite "chorochronique" est investiguée dans la thèse de Clovis Gout. Initialement proposée par Erdos *et al.* [75], elle permet de considérer des étendues azimutales différentes entre domaines rotor et stator en considérant une périodicité spatio-temporelle entre les conditions limites hautes et basses (en 2D, gauche et droite en 3D), en réinjectant en haut un signal mesuré sur la condition limite basse, un temps t_{choro} dans le passé. La figure 4.9 illustre l'approche :

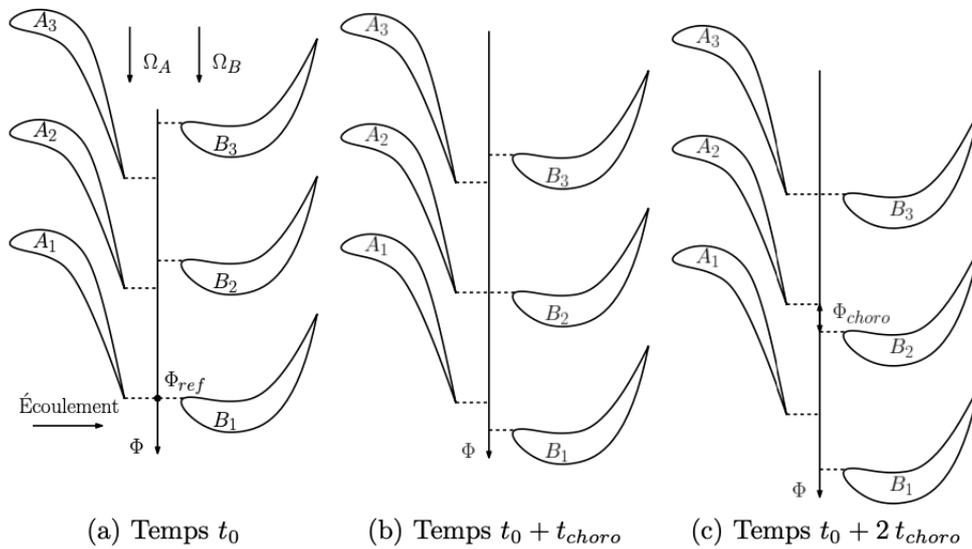


FIGURE 4.9 – Chorochronie d'un étage de turbomachine : périodicité spatio-temporelle.

L'écoulement que voient A1 et B1 au temps t_0 est identique à l'écoulement vu par A2 et B2 au temps $t_0 + t_{choro}$, de même pour A3 et B3 au temps $t_0 + 2t_{choro}$. Une périodicité spatio-

temporelle est donc bien mise en évidence, l'écoulement se répète avec une période temporelle t_{choro} et une période angulaire Φ_{choro} .

Si ce type de conditions limites est bien connu en RANS, son application au cadre de la simulation aux grandes échelles est très limité. Des travaux avaient été réalisés dans la thèse de Gaëlle Mouret [157], dans le logiciel elsA de l'ONERA. Ses travaux se sont concentrés sur les méthodes de compression de la base de données à stocker. Une démonstration de cas d'application est faite dans sa thèse, et des travaux récents confirment le potentiel de la méthode pour des prédictions LES sur des configurations réelles [83, 82]. Une difficulté connue de l'approche est la convergence de la simulation, ne serait-ce que dans un contexte URANS [45, 137]. Le travail de Clovis Gout met en lumière deux aspects clés pour une application pratique de l'approche dans un contexte instationnaire, compressible. Le premier point est la nécessité de considérer un "double canal" pour l'enregistrement de la solution au centre, non-perturbé par la condition limite azimuthale, avant sa réimposition aux conditions limites un temps t_{choro} plus tard. Cette technique, investiguée par le passé par différents auteurs ([19, 153, 100]), s'est révélée cruciale pour permettre l'établissement d'un écoulement transitoire stable dans notre contexte turbulent, ainsi que pour s'affranchir d'un effet de mémoire présent en considérant un simple canal. Le second point clé des travaux de Clovis est la considération de conditions limites azimuthales caractéristiques, permettant l'évacuation de l'acoustique parasite. Notons que les traitements caractéristiques considérés prennent en compte les termes transverses des ondes, comme proposé dans [246, 245, 139]. Plus particulièrement, un traitement hybride NSCBC - Dirichlet a permis la mise en pratique de simulations LES chorochroniques. Le résidu (divergence des flux) corrigé R_{CL}^C à la condition limite s'écrit alors :

$$R_{CL}^C = \kappa \left(R_{CL} - R_{CL}^{ent} + R_{CL}^{ent,C} \right) + (1 - \kappa) R_{Choro} \quad (4.23)$$

où R_{CL} est le résidu prédit par le schéma numérique, R_{CL}^{ent} la contribution calculée par le schéma correspondant aux ondes entrante (et donc fausse, car les ondes entrantes ne sont pas connues), $R_{CL}^{ent,C}$ la correction apportée par la méthode NSCBC, et R_{Choro} le résidu mesuré un certain temps T_{Choro} dans le passé au centre du double canal, réimposé à la condition limite. Le coefficient κ est choisi égal à $\kappa = 0.5$, si bien que la moitié du résidu imposé est caractéristique, l'autre moitié imposée, ce qui permet une bonne application de la condition limite, comme illustré sur la Figure 4.10.

Les travaux menés dans la thèse de Clovis Gout auront enfin concernés le traitement de l'interface rotor-stator, permettant alors une démonstration de l'approche sur une tranche 2D du compresseur CREATE.

4.3.4 Méthode à pas de temps local.

La possibilité de coupler 2 simulations par l'outil TurboAVBP a été utilisée pour permettre la mise en place de simulations à "pas de temps local" dans la thèse de Benjamin Martin ([143]). Cette approche permet de soulager le coût de calcul d'une simulation dont le pas de temps explicite est limité par une région restreinte, évitant alors aux nombreuses autres cellules d'itérer le schéma numérique pendant des pas de temps non nécessaires. Le schéma de principe de la méthode est illustré Fig. 4.11. Des applications sur diverses configurations ont été réalisées, depuis un canal turbulent, la pale de turbine LS89 (dans la configuration MUR129 (Martin et al. [147])), jusqu'à la configuration FACTOR illustrée Fig. 4.12, pour laquelle un speedup de $S_p = 1.9$ est mesuré, par rapport à la simulation de référence non-subdivisée en différents sous-domaines. Cette approche a depuis été utilisée dans un contexte industriel, sur des géométries

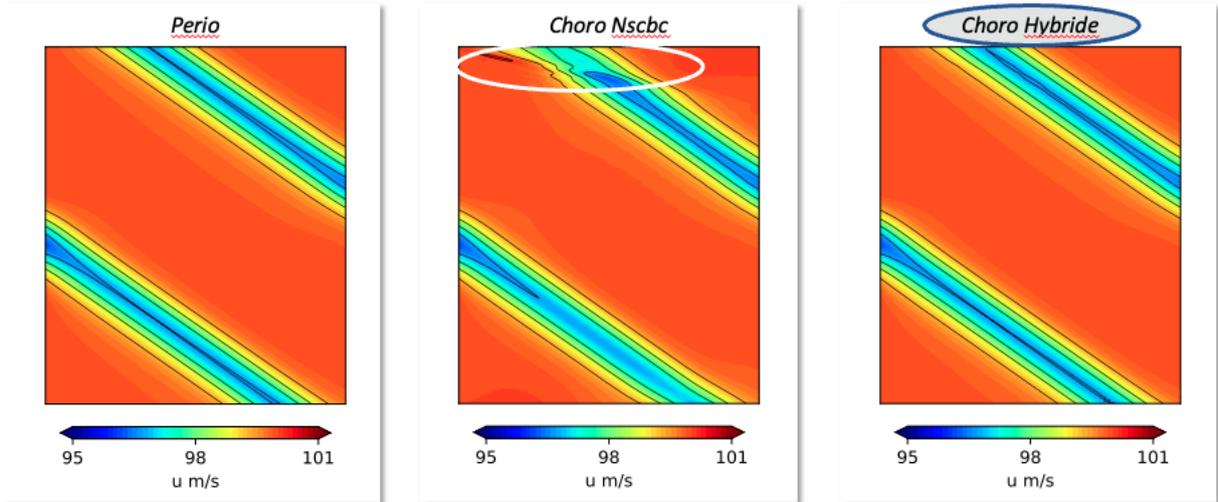


FIGURE 4.10 – Chorochronie et NSCBC : traitement "hybride".

réelles.

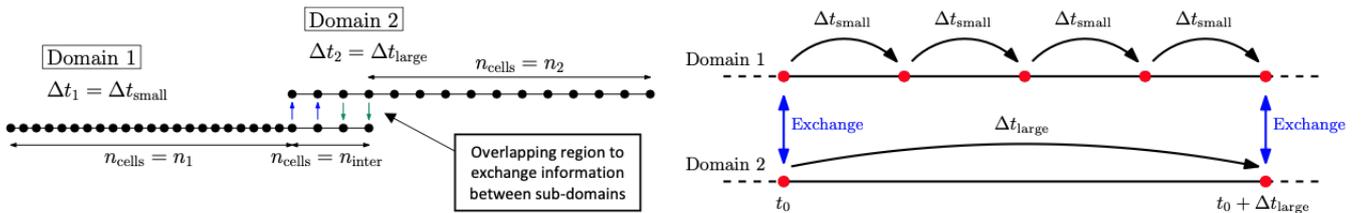


FIGURE 4.11 – Principe de l'approche pas de temps local : Division du domaine complet en sous-domaines, ayant chacun son pas de temps explicite. Synchronisation des domaines tous les Δt_{large} .

4.4 Défis liés au contexte "wall-modeled LES"

Une modélisation pariétale fiable est requise dans le contexte de la turbomachine pour permettre des simulations de configurations réelles à un coût abordable. Ce contexte induit des écoulements pariétaux complexes, tridimensionnels, instationnaires, potentiellement transitionnels, en présence de courbure et de gradient de pression. Tout ce qui n'est donc pas conforme aux hypothèses permettant d'établir une loi logarithmique, sur laquelle repose actuellement nos modèles de paroi. Les couplages avec l'implémentation numérique, le modèle de sous-maille, est un point à ne pas négliger. Le contexte des turbines haute pression est associé au besoin spécifique de modéliser le refroidissement pariétal, par injection de film d'air frais. L'adaptation éventuelle du maillage doit tenir compte de la modélisation de paroi.

Les pistes investiguées pour répondre à ces défis sont présentés dans cette section.

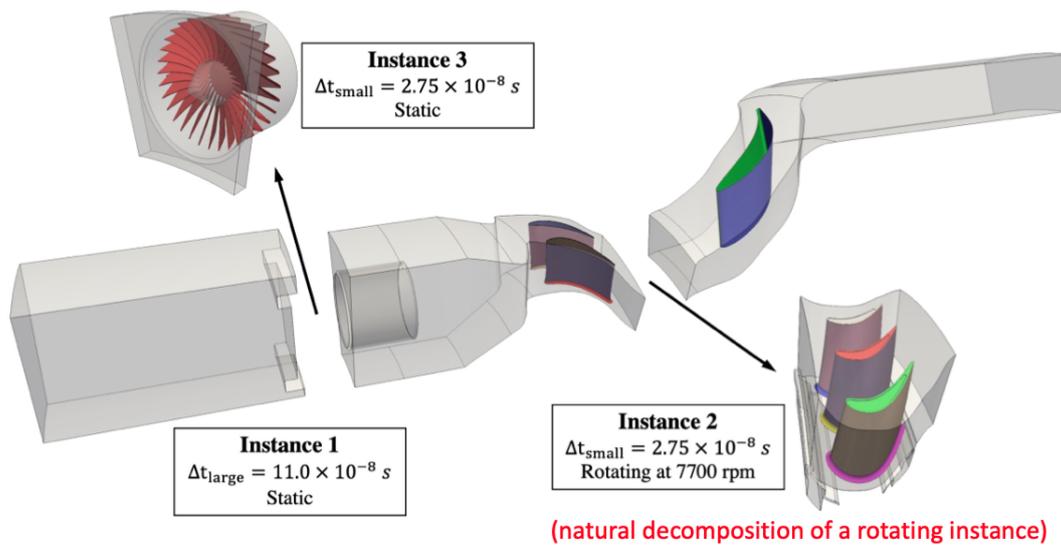


FIGURE 4.12 – Configuration FACTOR : division en sous-domaines. Instance 2 et 3 ayant un faible pas de temps explicite.

4.4.1 Adaptation de maillage

Les simulations aux grandes échelles en turbomachine sont en pratique réalisées en imposant les conditions d'arrêt isentropique à l'entrée du domaine, et la pression statique en sortie. Le débit dans la machine est donc subit. Nos premières simulations (Odier *et al.* [169]) ont montré la difficulté de prédire simultanément le bon taux de compression (ou détente), ainsi que le bon débit. Cette difficulté peut s'expliquer par la difficulté de prédiction des pertes aérodynamiques (ou production d'entropie) dans ce contexte modélisé en paroi, où des écoulements complexes sont présents, tels que des tourbillons de jeu, de coin, des couches limites susceptibles de décoller, des sillages transportés sur de longues distances, ... Dans la continuité des travaux de Daviller *et al.* [54], j'ai proposé une méthodologie d'adaptation de maillage permettant de capturer les pertes d'énergie cinétique au sein de l'écoulement (hors paroi), tout en assurant une taille de maille pariétale assurant un bon comportement du modèle de paroi (Odier *et al.* [173]). Cette méthodologie permet ainsi une meilleure capture du point de fonctionnement général de la machine, ainsi que des écoulements secondaires tels que l'écoulement de jeu, les sillages et divers tourbillons usuels, que même un expert aurait du mal à mailler a-priori (Fig. 4.13, 4.14). Cette stratégie de maillage est désormais une pratique courante chez nos partenaires industriels.

Notons que dans la référence [172], des tests sont réalisés en comparant différentes implémentations de modèles de paroi (une implémentation "glissante", et une "non-glissante" ([113])), ainsi que différents types de maillages (un maillage hybride contenant des prismes, et un maillage entièrement composés de tétraèdres). Certaines différences sont notées et discutées sur les champs moyens. Des différences flagrantes sont notables sur les champs instantanés (Fig. 4.15), et motivent alors plusieurs travaux ultérieurs. Nous verrons en particulier dans la sous-section 4.4.3 des travaux de modélisation physique permettant d'assurer un meilleur couplage entre le modèle de paroi et le modèle LES, ainsi que des travaux purement numériques présentés dans le chapitre 5, dédiés à une meilleure intégration du traitement des conditions limites au sein du

schéma numérique, ou un meilleur comportement des schémas sur des maillages déformés, ou hybrides prismes-tétraèdres.

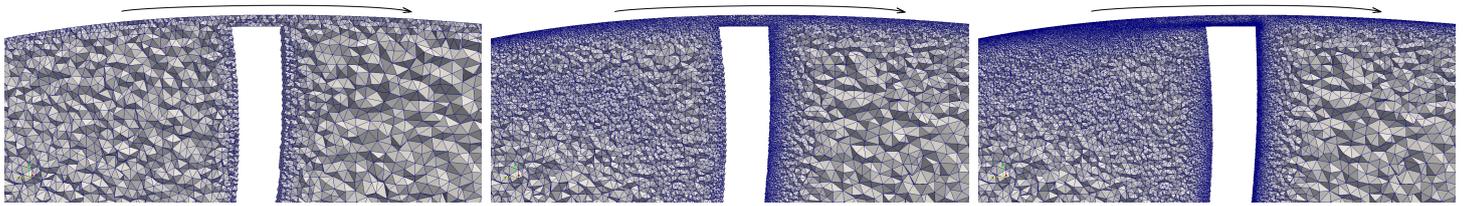


FIGURE 4.13 – Zoom on tip gap region. Coarse mesh (left), "AD1" (center), "AD2" (right).

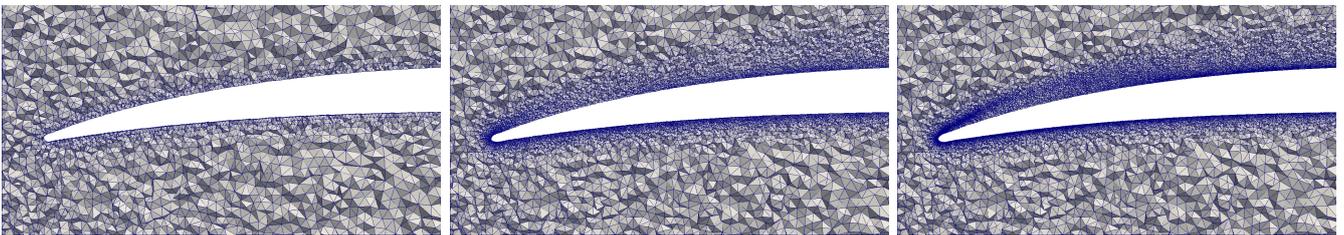


FIGURE 4.14 – Zoom on rotor leading edge at $h/H=60\%$. Coarse mesh (left), "AD1" (center), "AD2" (right)

4.4.2 Modélisation de "film cooling"

L'aérothermie des turbines haute-pression est l'une des grandes problématiques technologique, conséquente de l'augmentation des températures de foyer ainsi que de la plus grande compacité des machines. Pour protéger les matériaux, des films d'air frais sont créés le long des parois par l'injection d'air prélevé au compresseur via des percages des aubes et pales. Du point de vue numérique, les défis relatifs à la prédiction aérothermique sont liés à la finesse des échelles intervenant dans les processus de mélange pariétaux. Les travaux du CERFACS sur le sujet, commencés avant mon arrivée, s'inspirent de la modélisation numérique des trous de refroidissement que l'on peut trouver en chambre de combustion (Bizzari et *al.* [20]). Les travaux de Maël Harnieh proposent sur la base de [20] une modélisation des trous de refroidissement pour les turbines haute pression (Harnieh et *al.* [102]). Ces trous sont moins nombreux, et surtout bien plus larges qu'en chambre de combustion. Ces travaux notent le probable besoin de prise en compte de la non-homogénéité des profils de vitesse et température en sortie de trou de refroidissement, et concluent à manque d'activité turbulente dans le film d'air frais résultant des simulations modélisées en paroi via le modèle proposé dans Harnieh et *al.* [102].

Dans le cadre du (premier) post-doctorat de Dorian Dupuy, nous avons proposé ([71]) une modélisation de paroi, prenant en compte à la fois les effets des profils de vitesse et température non uniformes, ainsi qu'une injection de turbulence (éventuellement non uniforme) en sortie de percage. Ces travaux permettent, sur des maillages LES, la prédiction de jets réalistes, permettant ainsi une bonne prédiction du flux de chaleur. La Figure 4.16 illustre divers jets obtenus sur maillages LES pour des trous modélisés, selon un profil de vitesse uniforme (UI), non-uniforme

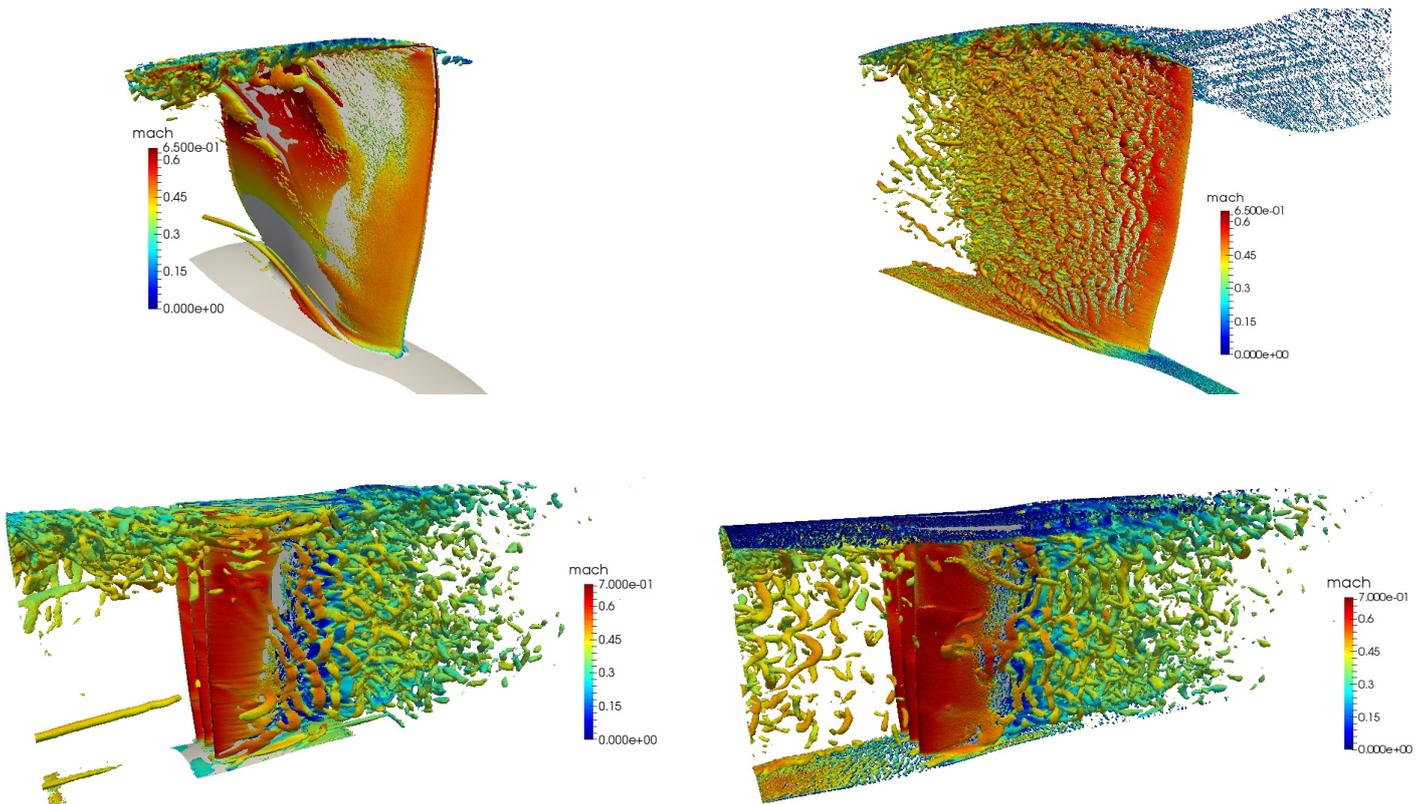


FIGURE 4.15 – Implementation "glissante" (à gauche) ou "non-glissante" (à droite) du modèle de paroi, effet sur les structures tourbillonnaires.

(NI), avec injection de turbulence ou non (TUI, TNI) en sortie de perçage. Ces écoulements sont à comparer à la référence, résultant d'un perçage résolu. Ces travaux montrent l'apport significatif de la prise en compte d'un profil de vitesse non uniforme, couplé à une injection de turbulence. Pour les perçages non cylindriques (shaped-hole), un besoin additionnel d'adaptation de maillage dans le sillage du jet est noté. Ces travaux montrent qu'il en soit le besoin de compréhension de l'écoulement au sein du perçage, pour sa modélisation.

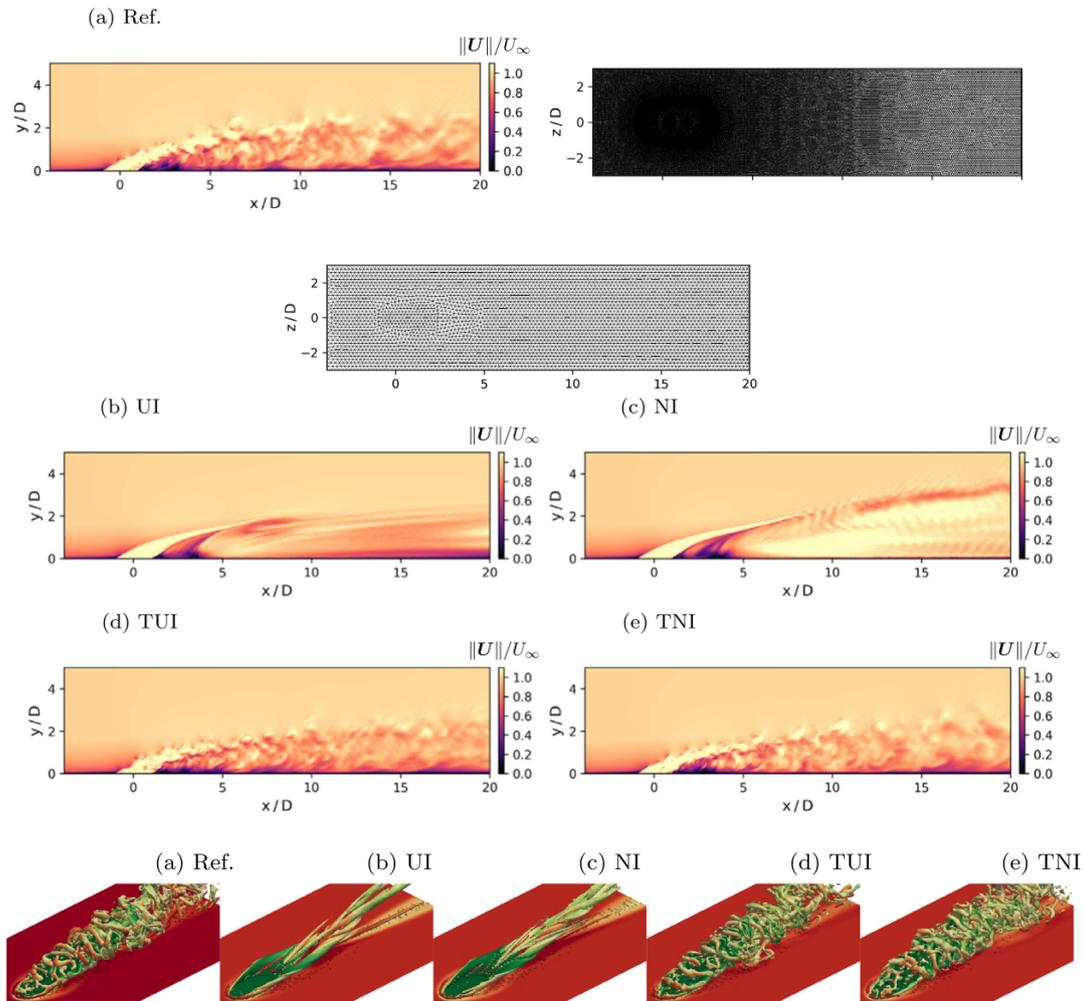


FIGURE 4.16 – Modélisation de trous de refroidissement ([71]).

Cette thématique est adressée dans la thèse de Shubham Agarwal. L'activité instationnaire au sein des perçages est étudiée, ainsi que son impact sur les structures tourbillonnaires en sortie de perçage, et leur conséquences sur le refroidissement pariétal. Ces travaux ([1, 2], [3]) confirment l'importance de l'écoulement au sein du perçage sur la prédiction aérothermique en aval. La géométrie du perçage impacte évidemment directement le développement des structures au sein du trou, et leur mélange en aval du jet. Aussi, nous proposons dans [5] d'utiliser les simulations aux grandes échelles pour l'optimisation de la forme du perçage, pour maximiser les refroidissement pariétal. Une base de données initiale de quarante Simulations aux Grandes Echelles (SGE) convergées est tout d'abord établie, pour diverses valeurs des paramètres de la

forme du trou. Une fonction objectif à minimiser est définie, sur la base d'une température de paroi. Un modèle surrogate de l'espace des paramètres est construit, permettant de définir le jeu de paramètres minimisant la fonction objectif. Une nouvelle simulation est alors réalisée avec la géométrie optimale, permettant d'affiner la base de données. Le nouveau modèle surrogate conduit alors à un nouveau jeu de paramètres optimaux. La convergence est atteinte lorsque l'erreur entre la prédiction du modèle surrogate et la simulation LES est suffisamment faible. Notons que pour chaque nouvelle géométrie, un maillage grossier, puis son raffinement automatique sont réalisés. Ces travaux, illustrés Fig. 4.17, ont nécessité le développement d'un outil automatique permettant la gestion de la CAD, et de son maillage.

Dans le contexte industriel, les simulations aux grandes échelles ne vont pas remplacer les simulations RANS pour le dessin des turbomachines. Cependant, pour certaines applications précises, comme l'évaluation des comportements des points de fonctionnement "hors-design", ou la prédiction aérodynamique, il se peut qu'elles deviennent incontournables.

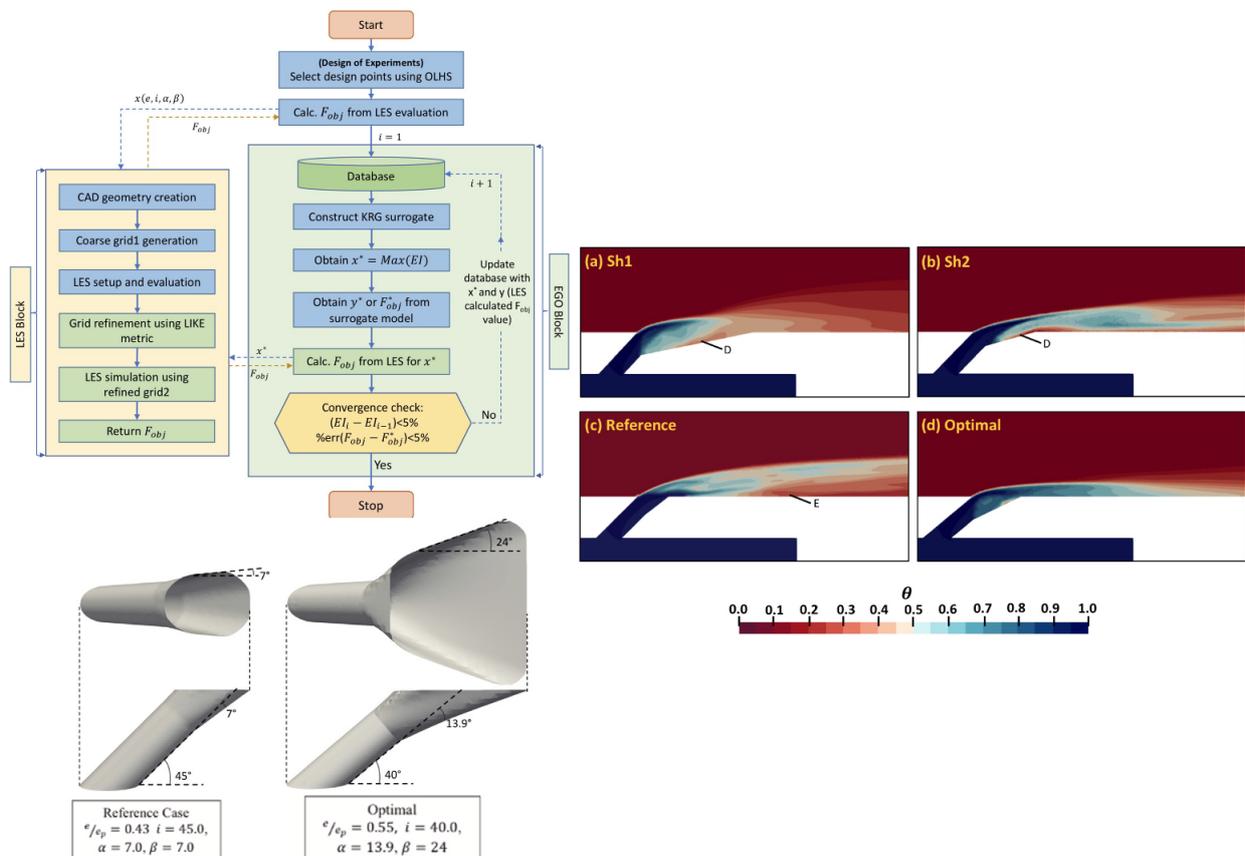


FIGURE 4.17 – Optimisation de la forme du perçage par simulations aux grandes échelles (Agarwal et al. [4, 5]).

4.4.3 Amélioration des modèles de paroi implémentés dans AVBP

Les modèles de paroi sont nécessaires pour la simulation aux grandes échelles de configurations réelles de turbomachines, dont les nombres de Reynolds ne permettent pas la résolution des

couches limites. Sur les configurations réelles, les résultats de l'équipe ont montrés que l'utilisation d'un modèle de paroi permet d'être prédictif sur les performances générales de la machine ([58, 56, 169, 172, 173, 63, 57, 64]), et ce aussi bien en conditions nominales qu'en dehors de ces conditions nominales. Nous montrons cependant dans Odier et al. [172, 173] que la topologie des écoulements secondaires peut ne pas être captée correctement, en particulier les décollements de coins, ou les régions de décollement. De même, la prédiction de l'aérothermie à l'aide d'un modèle de paroi s'avère délicate. Ne serait-ce que sans modèle de paroi, les travaux de Segui et al. [217] et Dupuy et al. [72] auront nécessité un maillage particulièrement résolu proche paroi (587 millions de cellules au total, dont 270 millions de prismes dédiés à la couche limite) sur la configuration académique MUR235 de la pale LS89 [10] pour une bonne prédiction du flux de chaleur. Nos essais réalisés via les travaux de Ludovic Plumain [196] ou Dupuy et al. [73] pour une telle prédiction dans un contexte modélisé en paroi ont lamentablement échoués, avec environ 100% d'erreur sur la prédiction du flux de chaleur. En effet, ce contexte de paroi modélisée ne permet pas la prédiction fiable de la turbulence de sous-maille au sein de la première maille, requise pour la prédiction du flux de chaleur. Les travaux de Dupuy et al. [72] ont montré que le niveau d'intermittence de la couche limite est un élément clé pour la prédiction du flux de chaleur. Aussi, des travaux restent nécessaires pour une bonne prédiction des phénomènes 3D, instationnaires, intermittents, qui peuvent avoir leur importance sur la topologie de l'écoulement, ou sur des phénomènes d'échanges de chaleur pariétaux.

Les modèles de paroi utilisés classiquement héritent des hypothèses du contexte RANS, et sont appliqués tels quels dans nos simulations aux grandes échelles. Les modèles de sous-maille WALE [163] et Sigma [164], initialement conçus pour un bon comportement proche paroi, sont eux construits dans un contexte "Wall-resolved". Ce couplage de modèles, chacun utilisé en dehors de ses hypothèses de base est connu pour induire un "Log-layer mismatch" ([31, 194, 25, 244, 24]) sur des configurations de canaux plans, c'est-à-dire un décalage entre le profil de vitesse et la loi logarithmique au-delà du premier point de paroi. Jaegle et al. [113] avaient noté que l'utilisation du modèle de sous-maille WALE [163] est susceptible d'induire des gradients de vitesse relativement élevés proche paroi, pouvant mener à des oscillations de la vitesse de glissement, tandis que le modèle de Smagorinsky [229] lisse ces effets, par sa viscosité de sous-maille plus élevée proche paroi. L'utilisation du modèle de Smagorinsky [229] dans un contexte loi de paroi est ainsi devenue une préconisation de calcul. Cependant, ce modèle de sous-maille est connu pour être particulièrement dissipatif, et un modèle de type WALE [163] ou Sigma [164] est clairement plus adapté. Ceci est vrai pour les écoulements internes qui nous intéressent ici, présentant des régions de cisaillement ou de rotation (typiquement écoulement de jeu), et d'autant plus vrai lorsqu'une flamme est présente dans le domaine.

Une partie de mes travaux est donc dédiée à une modélisation de paroi qui permette une bonne représentativité de la physique des écoulements internes multi-physiques, dans un contexte de simulation aux grandes échelles. Lors de mes premiers travaux sur le DGEN-380 ([172]), j'ai pu mesurer la sensibilité des résultats au type de modélisation de paroi considérée (avec ou sans glissement en paroi)². Dans le cadre du stage de Ludovic Plumain [196], nous avons tâché de caractériser la sensibilité des résultats aux différents types de couplages physico-numériques possibles : type de maillage (tétraédrique pur, ou hybride prismes-tétraèdres), type de modélisation de paroi (avec ou sans glissement), modèle de sous-maille (Smagorinsky, WALE, Sigma) sur différentes configurations : Canal turbulent, cascade académique LS89, turbine académique MT1. Si peu de différences sont notées sur les profils moyens des configurations de type "turbomachine",

2. Ce point n'est pas abordé dans mes publications, mais les résultats sont tout aussi sensibles à l'éventuelle viscosité artificielle introduite pour stabiliser le schéma numérique

des différentes importantes apparaissent sur le canal turbulent, ainsi que sur les quantités instationnaires. Ceci souligne ainsi l'attention à porter à ce types de couplages pour les configurations présentant des phénomènes "fins" (Accoustique, transfert thermique, instationnarité de la couche limite).

Nous avons proposé d'adresser la problématique du "log-layer mismatch" avec l'utilisation des modèles WALE ou Sigma dans la thèse de Simon Blanchard (Blanchard *et al.* [21]). Sur la base d'un modèle de longueur de mélange algébrique et d'un modèle d'énergie cinétique turbulente [198], nous avons proposé un modèle permettant l'ajout de fluctuations de gradient de vitesse au modèle de sous-maille, afin de représenter l'activité turbulente sous-évaluée avec un modèle de paroi. Ceci permet d'augmenter artificiellement la viscosité de sous-maille dans la première maille, (ce qui permet de se rapprocher des résultats connus avec Smagorinsky), sans entacher l'écoulement dans la veine. Ces travaux permettent une réduction du phénomène de log-layer mismatch, et ainsi une amélioration de la prédiction du frottement pariétal.

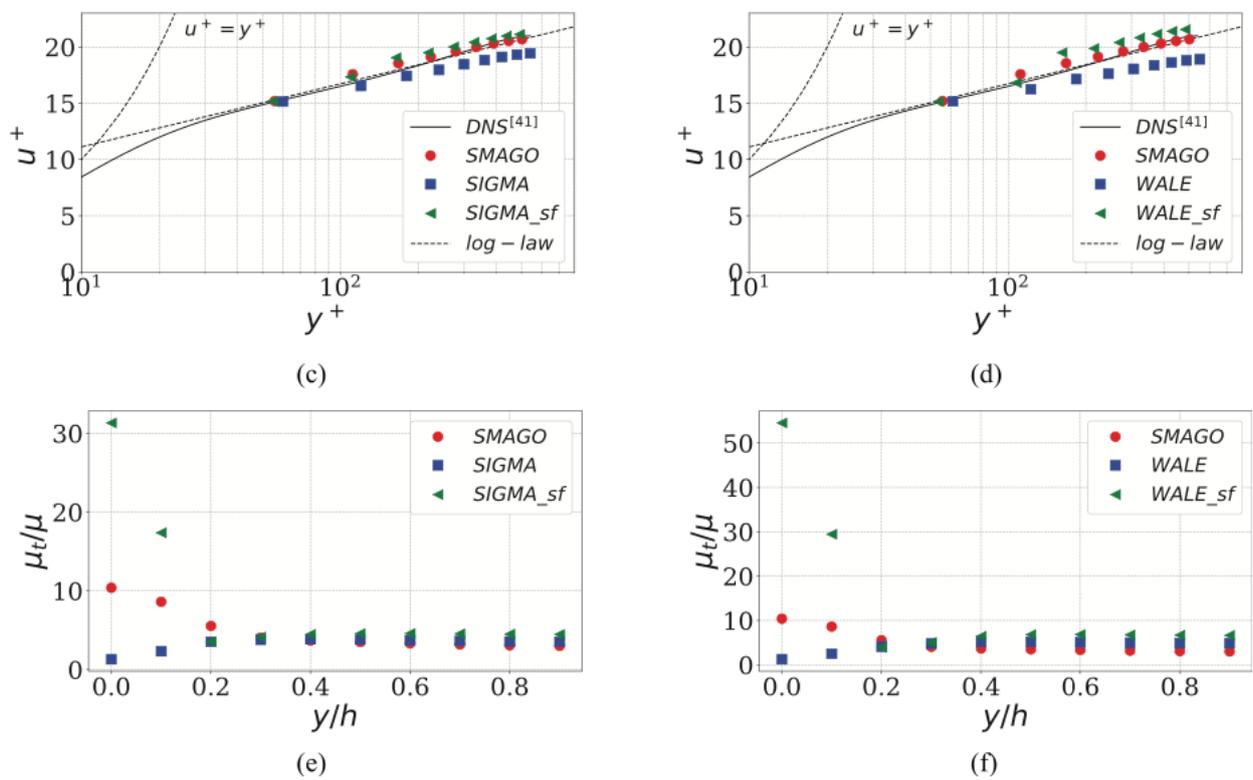


FIGURE 4.18 – Effet du modèle de fluctuations sur les profils de vitesse et viscosité de sous-maille.

Les travaux en cours de la thèse de Medhi Cizeron (2021-2024) poursuivent ceux initiés lors de la thèse de Simon Blanchard. Nous tâchons ici d'inclure 2 éléments. Le premier est la prise en compte du terme de gradient de pression via la résolution d'une équation différentielle ordinaire 1D pour le champ de vitesse proche paroi (modèle de type Thin Boundary Layer Equation, TBLE [31]). Cette approche requiert alors un modèle de viscosité turbulente prenant en compte l'effet de gradient de pression. Le modèle de Duprat *et al.* [69] est retenu. Nous montrons également le besoin d'un lissage temporel des données instantannées LES pour la résolution de l'ODE, par

une moyenne exponentielle glissante. Les résultats obtenus sur une configuration avec gradient de pression (colline périodique, Fröhlich et *al.* [85]) sont illustrés Fig. 4.19.

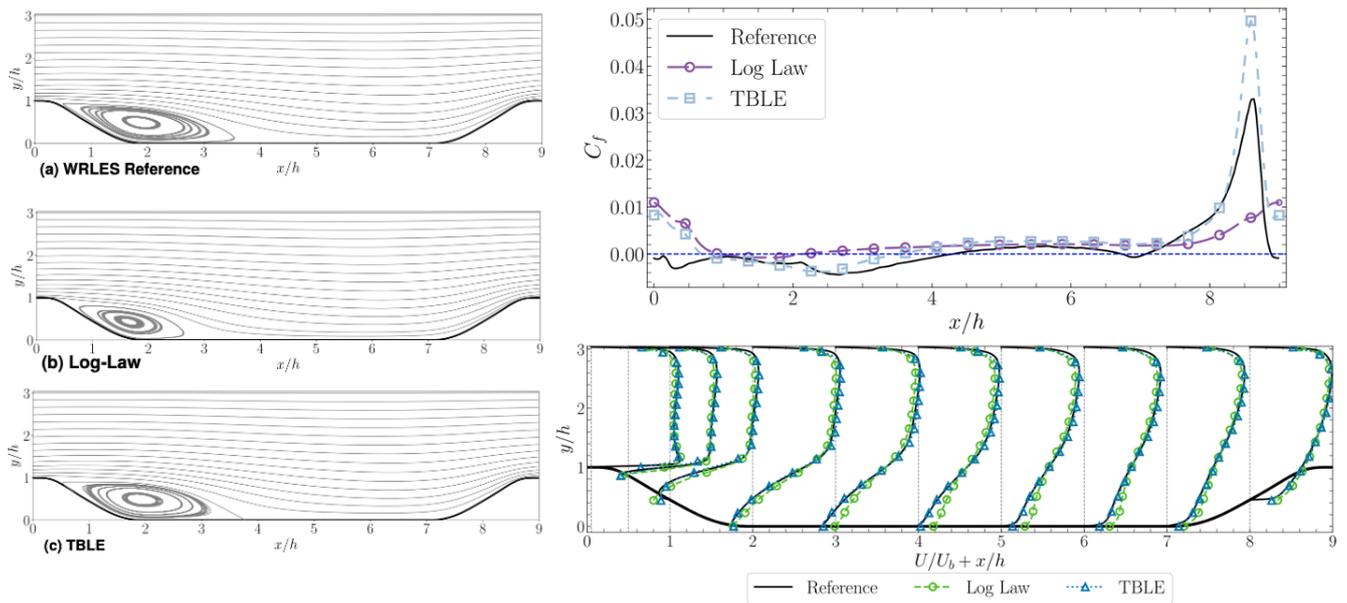


FIGURE 4.19 – Loi de paroi TBLE avec gradient de pression, application sur une colline périodique (Cizeron et *al.* [50]).

Le second élément, faisant l'objet de travaux en cours, est l'extension du modèle de Blanchard à toute une région proche paroi, plutôt qu'à la première cellule uniquement. L'objectif est de tendre vers une modélisation de paroi "zonale", plutôt que de limiter la modélisation localement à la première cellule. Le ratio des viscosités de sous-maille générées par l'opérateur du modèle WALE et par l'opérateur du modèle de Smagorinsky permet notamment la création d'une métrique, sur laquelle sur baser pour l'atténuation ou non des fluctuations du modèle de Blanchard dans l'ensemble du domaine de calcul.

4.4.4 Machine-learning et modélisation pariétale

J'ai proposé en 2021 à Corentin Lapeyre de mettre à profit les techniques d'apprentissage machine pour le développement de modèles de paroi. Une partie de cette motivation se trouve dans la vision géométrique, auto-similaire que l'on peut associer à une couche limite ([234, 148, 110]), par le fait que certains auteurs notent la présence de grosses structures (d'une taille caractéristique de 5 à 6 épaisseur de couche limite) contribuant de façon majeure au frottement pariétal ([109, 59]). Un modèle (analytique) permettant la prédiction du coefficient de frottement par l'analyse d'images instantanées de couches limites turbulentes avait été récemment proposé ([251]) sur la base de cette description structurale de la couche limite. L'objectif initial était donc de développer des modèles analysant la structure de l'écoulement dans la région externe pour en prédire le frottement pariétal, pour les conditions physiques que les modèles analytiques de paroi usuels ne savent pas traiter (recirculation, transition, intermittence...).

Une base d'apprentissage contenant des écoulements résolus en paroi, "les plus variés pos-

sibles", a été initiée au CERFACS. Réunir (et maintenir) cette base de données, provenant de laboratoires et de codes différents est un défi en soi. La clé de l'entraînement consiste en une normalisation des données, permettant d'unifier les échelles de valeur de frottements rencontrées dans la base de données, ainsi que d'unifier les résultats provenant d'équations incompressibles et compressibles. Cette mise à l'échelle peut être vue comme une transformation d'échelles, qui modifie le nombre de Mach sans modifier le Reynolds de l'écoulement, et qui est donc valable dans la limite des écoulements isothermes quasi-incompressibles.

Cette base de données a permis tout d'abord le développement d'un modèle, fonctionnel sur maillage cartésien, permettant la prédiction d'un écoulement décollé (Dupuy et *al.* [70]), pour des configurations non incluses dans la base d'entraînement. Les résultats *a-priori* de ces travaux, illustrés Fig. 4.20, mettent en avant le besoin de prendre en compte une information tridimensionnelle en entrée du modèle (tant vis-à-vis des composantes normales et transverses du champ de vitesse à considérer, que par le besoin d'un stencil spatial plutôt qu'un point isolé).

Les premiers résultats *a-posteriori* montrent une nette amélioration vis-à-vis du modèle de paroi usuel pour la prédiction d'une zone de recirculation. La configuration investiguée ne fait pas partie de la base d'entraînement. Ce résultat, illustré Fig. 4.21 est d'autant plus notable que la base d'apprentissage reste malgré tout très limitée. Là encore, l'application d'un modèle non purement local permet une nette amélioration des prédictions.

Ces premiers travaux sont étendus aux maillages non structurés (Dupuy et *al.* [74]), afin de pouvoir traiter des géométries complexes, de turbomachine notamment. Le modèle repose alors sur un "graphnet" ([13, 192, 252]), considérant le maillage non structuré comme un graphe, et capable de communications entre les noeuds, le long des arrêtes (Fig. 4.22). Ces travaux (tout comme les travaux sur maillages cartésiens), requièrent le développement d'outils efficaces permettant l'apprentissage sur cartes GPU, le couplage d'un modèle de type "machine-learning" à un calcul CFD ([222]). Les travaux de Dupuy et *al.* [74] ont permis de reproduire des résultats intéressants en aval d'une marche descendante, mais également d'adresser pour la première fois, une configuration de type turbomachine³. Si les résultats ne sont pas strictement meilleurs que les modèles analytiques usuels, il s'agit toutefois d'une démonstration de la faisabilité technique, et de la pertinence scientifique de l'approche pour des écoulements complexes.

Enfin, ces travaux sont étendus aux écoulement non-isothermes, dans le but de prédire le flux de chaleur pariétal en plus du frottement. La mise à l'échelle des données d'entraînement est donc reconsidérée pour permettre une transformation d'échelles, qui modifie le nombre de Mach sans modifier le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl de l'écoulement. Ce modèle reste donc valable dans la limite des écoulements faiblement compressibles. Le modèle est entraîné à la fois sur des données incompressibles isothermes et compressibles anisothermes afin d'apprendre à la fois le frottement et le flux de chaleur pariétal sur une base de données la plus variée possible. La configuration MUR2235 de la pale LS89, non incluse dans la base d'entraînement et connue comme un cas particulièrement délicat dans la littérature est ciblée comme objectif de ce travail. La figure 4.23 illustre les niveaux de résolution pariétaux pour la configuration "Wall-resolved" (587 millions de cellules) et "Wall-modeled" (47 millions de cellules), ainsi que les visualisations des écoulements sur cette configuration.

Les résultats de frottements pariétaux et flux de chaleur sont illustrés Fig. 4.24. Là encore, si les résultats ne sont pas parfaits, il doit être noté que la prédiction du flux de chaleur, et du frottement est significativement améliorée par rapport à la loi de paroi couplée vitesse-température de Cabrit et *al.* [32], et que la base de données d'entraînement reste très limitée

3. Rappelons que l'immense majorité des travaux existants dans ce domaine se limitent à des résultats *a-priori*, sur des configurations de canaux plans.

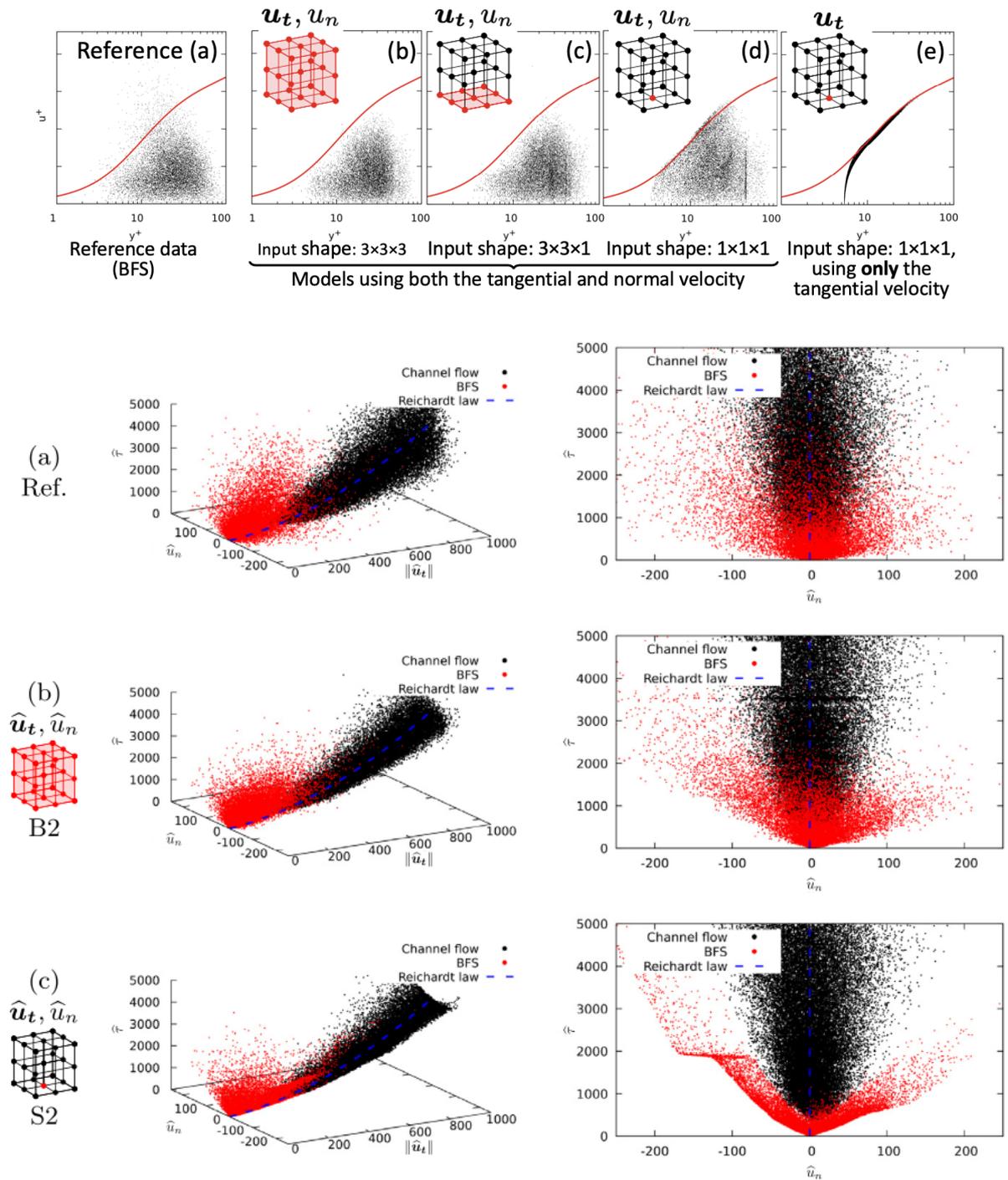


FIGURE 4.20 – Résultats a-priori en géométrie "complexe". Besoin de considérer une information 3D.

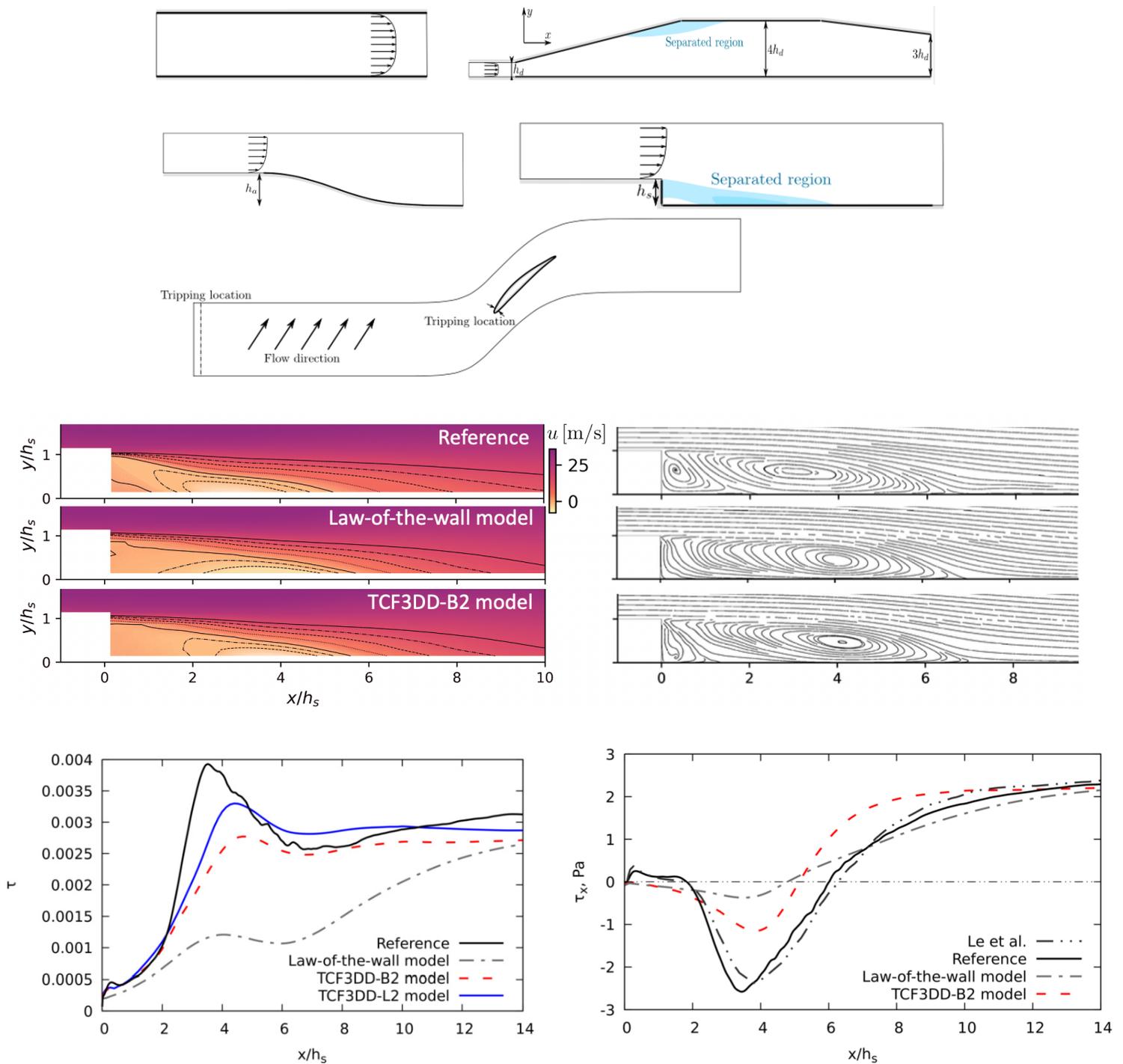


FIGURE 4.21 – Base de données ayant servi à l'apprentissage (en haut). Résultats *a-posteriori* pour la prédiction d'une région de recirculation avec un modèle de paroi entraîné sur les données ("TCF3DD"), et comparaison avec le modèle analytique ("Law-of-the-wall"). Le maillage est cartésien.

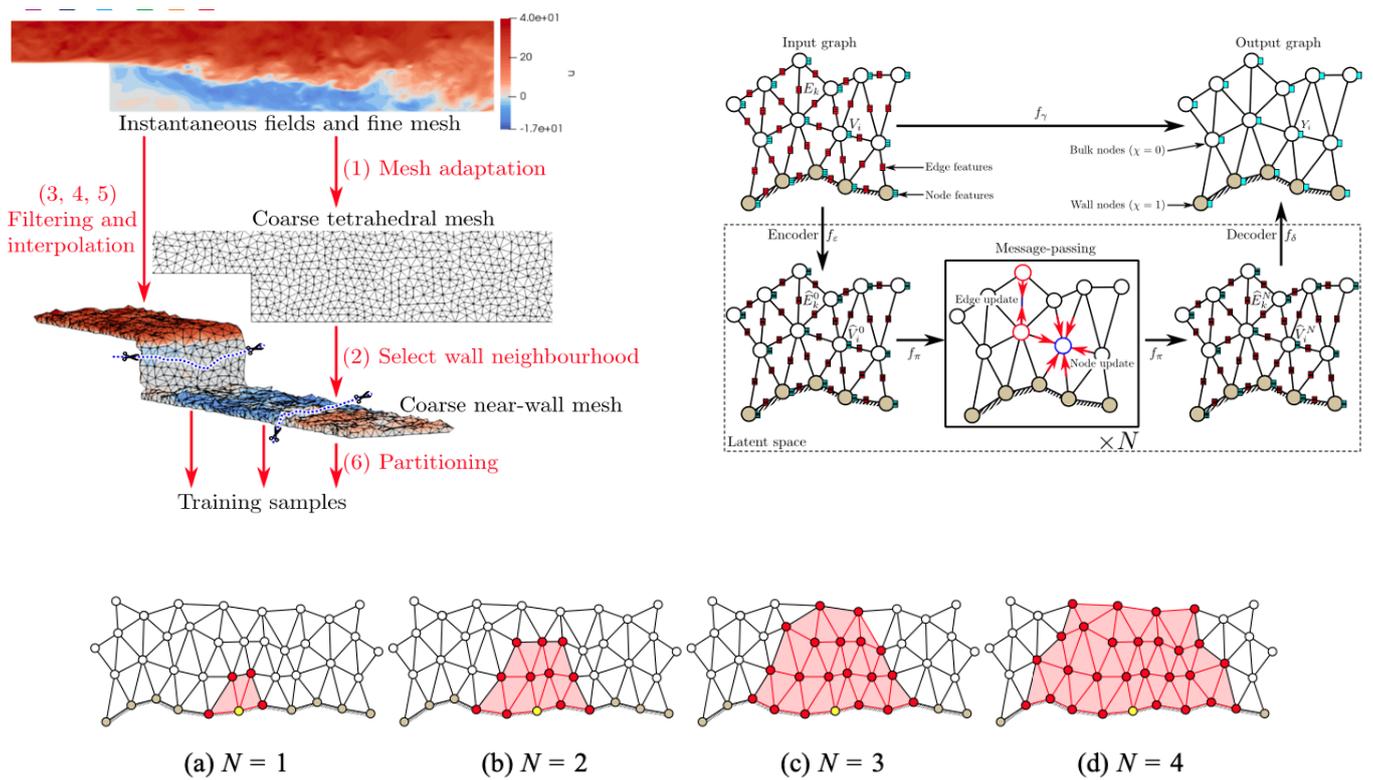


FIGURE 4.22 – Réseau de neurones sur graphe (Graph-Neural Network, GNN). Effets du nombre d'étapes de communications sur le stencil de l'information considérée comme entrée du modèle.

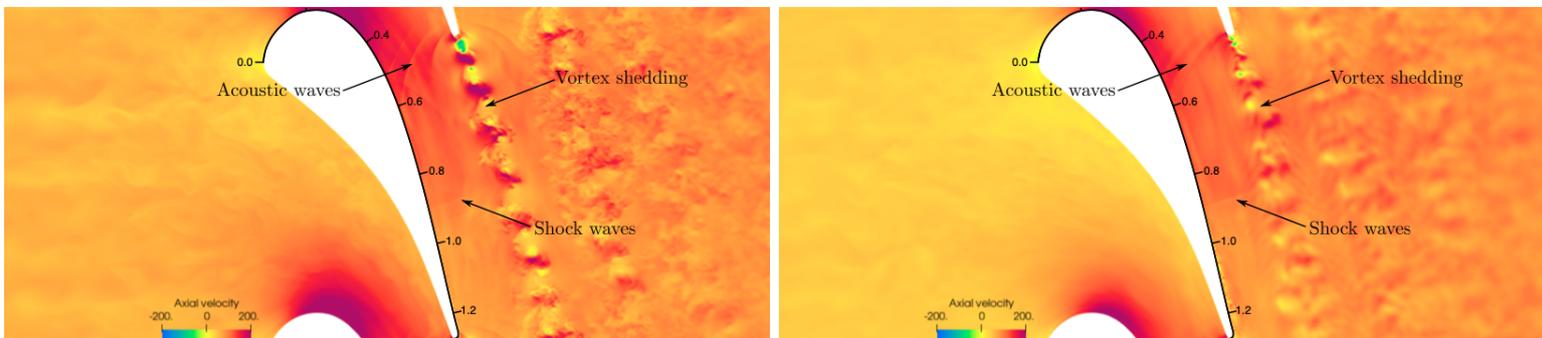
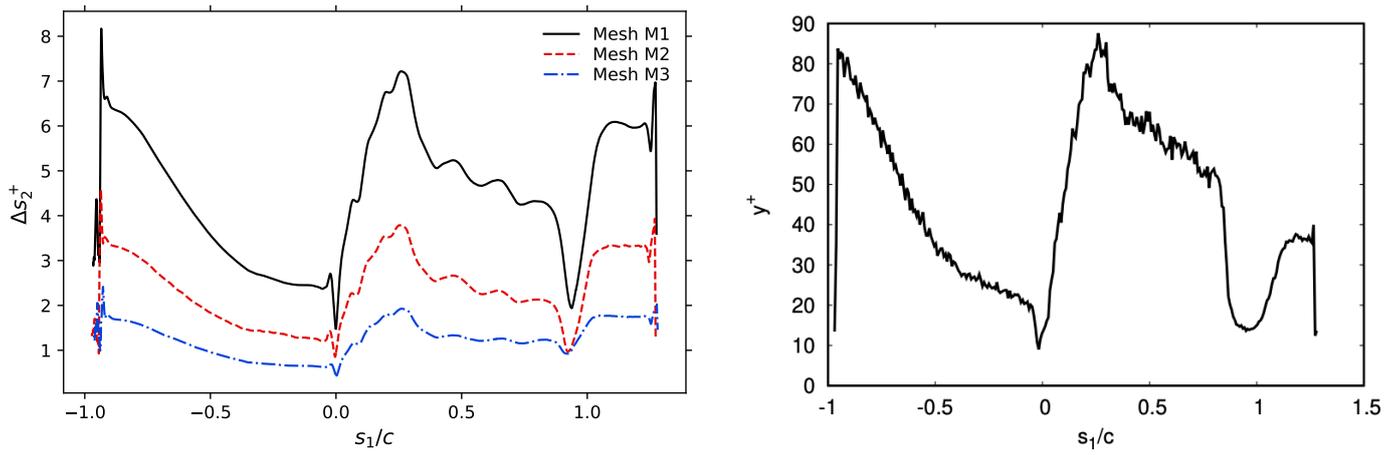


FIGURE 4.23 – Configuration MUR235. "Wall-resolved" à gauche (Maillage M3, 587 millions de cellules), "Wall-modeled LES" à droite (47 millions de cellules).

pour un réel entraînement de qualité (il est aussi important de garder en tête que l'inférence *a-posteriori* d'un tel modèle sur une géométrie complexe est aussi en soi un fait notable). Ces travaux confirment le potentiel de ces méthodes pour la prédiction, sur maillages "wall-modeled", des écoulements hors équilibre et à masse volumique variable.

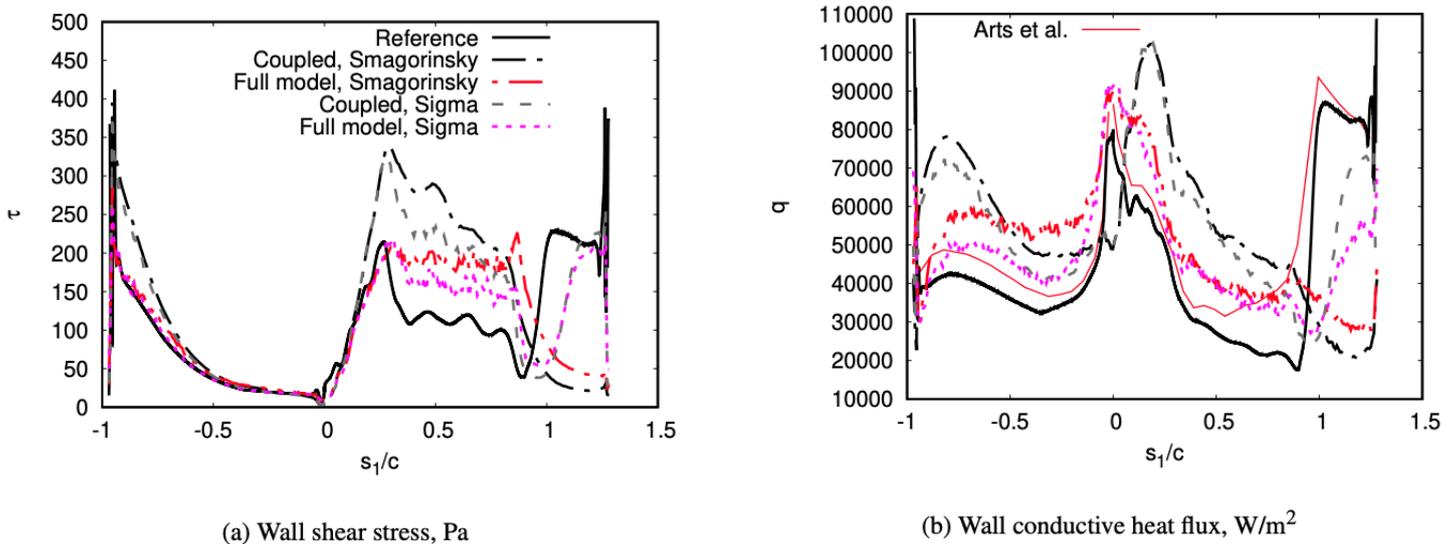


FIGURE 4.24 – Résultats pour la configuration "Wall-modeled LES" MUR235. Frottement pariétal (à gauche), flux de chaleur pariétal (à droite).

Ces travaux se poursuivent aujourd'hui dans le cadre de l'ANR PHLUSIM, ainsi que dans le cadre du post-doctorat de Fernando Gonzales (en collaboration avec l'IRIT). Les travaux commencés dans le cadre du stage de Soufiane Mrini ([158]), puis dans le stage en cours de Clara Massat consistent à pousser les développements réalisés ci-dessus pour l'obtention de modèles génératifs. Dans ce contexte, le modèle ne se satisfait plus de prédire le frottement (ou flux de chaleur) pariétal en fonction de l'écoulement environnant, mais génère un écoulement proche paroi, représentatif d'une réalisation turbulente probable, conduisant par ailleurs à un frottement et flux de chaleur probable. C'est d'une part une façon de tendre vers une modélisation régionale instationnaire de la couche limite, contrairement aux modèles locaux de parois algébriques usuels basés sur des hypothèses d'instationnarité. Enfin, c'est également une façon de progresser sur la problématique de la généralisation de ce type de modèles, ainsi que sur le passage robuste des *a-priori* vers les résultats *a-posteriori*. L'une des pistes envisagée pour les aspects liés à la généralisation sont les modèles dits "de fondation", capables d'apprendre des tâches variées, et de faire face à des contextes nouveaux et variés.

L'objectif de ces travaux n'est pas de se débarrasser de la compréhension physique d'un écoulement pariétal. Ils ont été au contraire motivés par l'espoir de capturer les structures géométriques de l'écoulement. C'est une façon d'essayer de représenter autrement l'espace des paramètres auxquels appartiennent nos écoulements, et donc éventuellement de mettre en lumière des dimensions importantes à ne pas négliger pour une éventuelle modélisation. Les travaux de Dorian Dupuy m'ont ainsi conforté dans le fait la modélisation des écoulements de paroi doit

passer par une approche "régionale", non purement locale⁴.

4.5 Investigation physique des écoulements 3D instationnaires en turbomachines

Au-delà des travaux pour la modélisation des écoulements en turbomachine, l'étude de la physique de ces écoulements est également un sujet abordé dans le cadre de mes travaux. Certains aspects sont détaillés ici.

4.5.1 Couplages inter-composants

Si les conditions limites développées dans les sections décrites ci-dessus permettent une meilleure représentativité des écoulements pour les LES d'étages isolés, elles ne permettent cependant pas, ou mal, de représenter les couplages instationnaires ayant lieu entre les composants. Aussi, nous avons investigué ces effets de couplage, notamment au travers du couplage compresseur chambre [9, 200] ou d'un calcul soufflante / compresseur / chambre [188, 189], désormais étendu à la turbine. Dans [9, 200], nous avons investigué une simulation couplée compresseur-chambre, comparée à une simulation chambre isolée, comme usuellement réalisé. Les fluctuations du champ de pression générées par le compresseur se propagent en aval dans la chambre de combustion, et induisent des fluctuations importantes de dégagement chaleur, ainsi qu'une flamme légèrement différente de la flamme en chambre isolée. Ces fluctuations de dégagement de chaleur se traduisent en fluctuations du champ de pression et température à l'entrée de la turbine éventuelle. Ainsi, si les niveaux de température en sortie de chambre sont similaires, les phénomènes physiques instationnaires qui y ont lieu diffèrent significativement. De même, nous montrons dans [189] que le choc en amont du rouet compresseur génère des ondes acoustiques de fortes amplitudes, remontant l'écoulement jusqu'à la soufflante, modifiant alors complètement la topologie des couches limites et sillages (Fig. 4.25). De façon générale, si les performances générales de la machine ne sont pas modifiées par les effets d'intégration, les champs moyens, RMS, et les caractéristiques spectrales le sont fortement. Notons que les caractéristiques spectrales expérimentalement mesurées par Brown et Sutliff [30] témoignent des effets d'intégration mis en évidence dans nos simulations.

4.5.2 Comparaison expérience, (U)-RANS, et LES

La comparaison de résultats issus de LES à des résultats expérimentaux, ou issus de simulations RANS est un exercice délicat, et ce pour plusieurs raisons. Au-delà des difficultés inhérentes à la mesure expérimentale, la comparaison avec ces mesures souffre tout d'abord des différentes échelles de temps pouvant être obtenues. La figure 4.26, issue de Odier et *al.* [172], illustre la convergence temporelle du calcul d'une échelle intégrale de turbulence pour deux signaux expérimentaux, caractérisés par des taux de turbulence plus ou moins élevés, sur la base d'autocorrélations temporelles. La fenêtre temporelle accessible par LES est également présentée, et montre que l'évaluation de cette échelle intégrale temporelle peut différer de l'ordre de 20% par rapport au résultat expérimental, par simple manque de convergence statistique.

Il est également important de savoir prendre du recul sur les résultats numériques obtenus, et ne pas vouloir attendre des prédictions de performances à une précision trop fine d'une

4. Notons que les travaux de Boxho [26] réalisés à Cenaero confirment ce sentiment, en insistant sur les aspects spatio-temporels, que nous n'avons pas investigués.

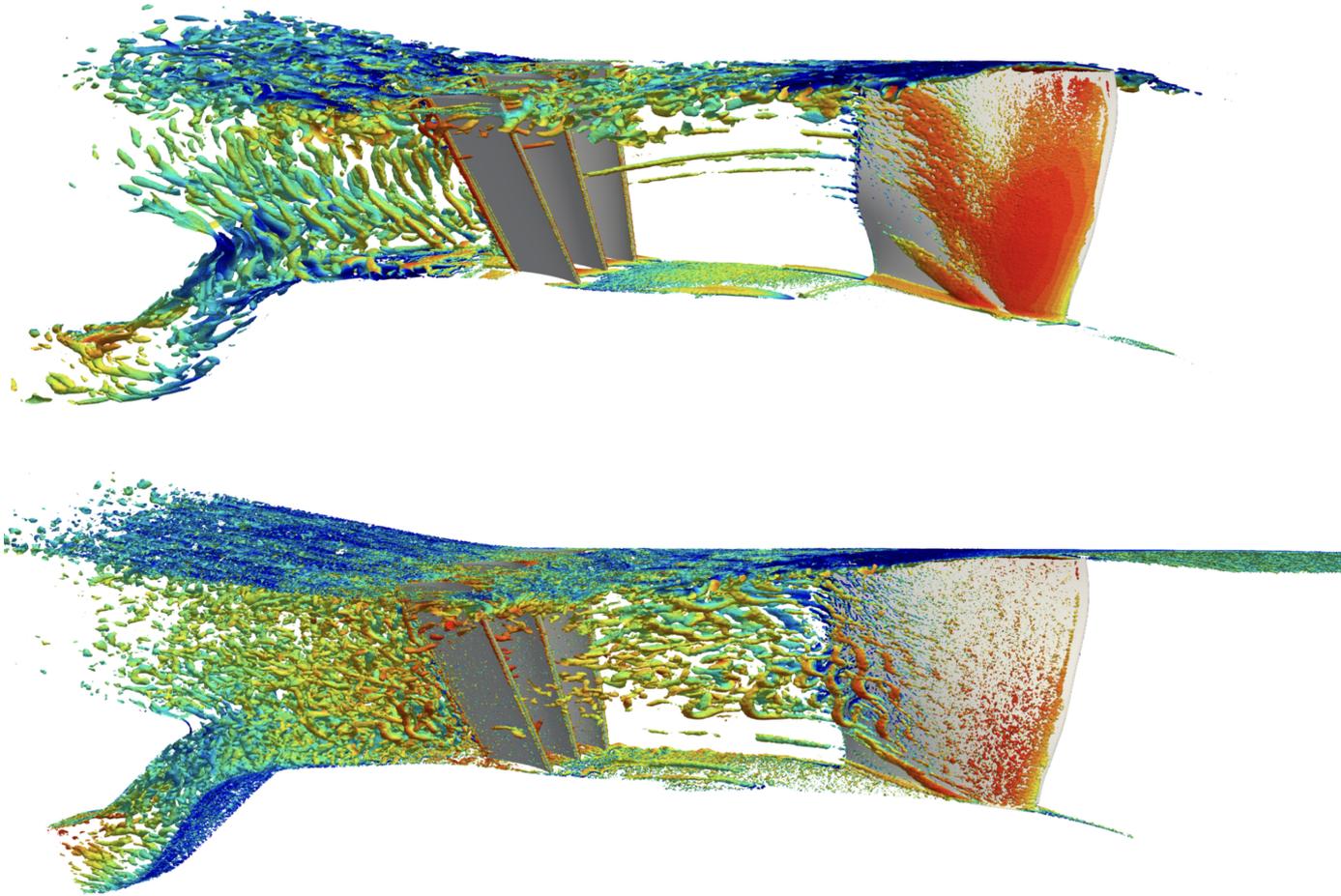


FIGURE 4.25 – Iso-surface de critère Q pour la soufflante du DGEN-380. Simulation isolée (en haut), et simulation couplée soufflante-compresseur-chambre (en bas). L’acoustique du compresseur remonte dans la soufflante, modifie ses couches limites et sa topologie.

0.1% variation in	Resulting variation in $\eta_{is} = \frac{\Pi_t^\gamma}{R_t^{\gamma-1}}$
γ	0.25 %
Π_t	0.8 %
R_t	2.3 %

TABLE 4.3 – **Effect of a 0.1% variation on parameters involed in η_{is} .**

simulation aux grandes échelles. Dans Odier et *al.* [169], j'avais estimé l'effet d'une variation de 0.1% du coefficient calorifique γ , du taux de compression Π_t , et du rapport des températures chaude et froide T_t sur l'efficacité isentropique η_{is} de la soufflante du DGEN-380. Les résultats, présentés dans le tableau 4.3, montrent la sensibilité importante de l'efficacité isentropique à ses paramètres. Etant donnée la faible variation paramétrique considérée (0.1%), il est difficile d'attendre des barres d'incertitudes plus faibles que celles présentées dans le tableau 4.3.

Il est évidemment crucial d'échanger avec les expérimentateurs lors d'une comparaison de résultats expérimentaux-numérique. Tout d'abord pour s'assurer que la géométrie calculée est la bonne, le point de fonctionnement est le bon, connaître l'opération de recalage réalisée pour la prise en compte des conditions ambiantes sur la mesure. Dans mes études sur le DGEN-380 ([169, 172, 173]), il n'a pas été possible d'obtenir à la fois le bon taux de compression, et le bon débit (ce qui s'explique avant tout par une mauvaise prédiction des pertes de charge, comme évoqué plus haut, section 4.4.1). Nous avons cherché à associer une incertitude sur la mesure expérimentale du débit, et l'histoire est intéressante... Un pavillon est présent en amont de la soufflante, pour uniformiser l'écoulement. Le débit est mesuré via des sondes de pression statique situées au carter. Cette pression statique est recalée, sur la base d'une simulation RANS (dite "de référence"), permettant de définir un coefficient de blocage de la couche limite se développant le long du pavillon. Il se trouve par ailleurs que la corrélation obtenue pour se coefficient de blocage possède un comportement très suspect ("étrange", dixit le constructeur) entre 10 et 11kg/s, qui est exactement la région du point de fonctionnement investiguée dans nos études... Il est ainsi difficile d'associer une incertitude à la mesure du débit, mais on peut dire avec certitude qu'elle n'est pas nulle...

Enfin, l'importance des hypothèses thermodynamiques qu'il peut exister dans les simulations numériques (et dans le postraitement des mesures expérimentales) ne doit pas être négligée, et ce, particulièrement à haute température, en présence de gradients de température et composition chimique. De même, il existe différents opérateurs de moyenne permettant la réalisation d'un profil 1D, qui est l'information principale utilisée par les industriels. A partir de 2016, nous avons passé un temps important à évaluer le, ou les opérateurs de moyenne pertinents pour postraiter nos simulations, ou pour la définition d'un profil 1D à imposer à l'entrée d'une simulation. Ces travaux sont toujours d'actualité, et détaillés ci-dessous.

4.5.3 Opérateurs de moyenne, et quantités conservées pour la LES en turbomachine

Les industriels définissent des opérateurs de moyenne "métiers", qui permettent la réalisation d'une moyenne spatiale (2D vers 1D, ou 0D), tout en assurant certaines propriétés de conservation (conservation ou non de l'entropie, de l'énergie totale, du débit, du moment cinétique...) ainsi que la loi d'état entre les quantités moyennées. Il est nécessaire de savoir comparer les gran-

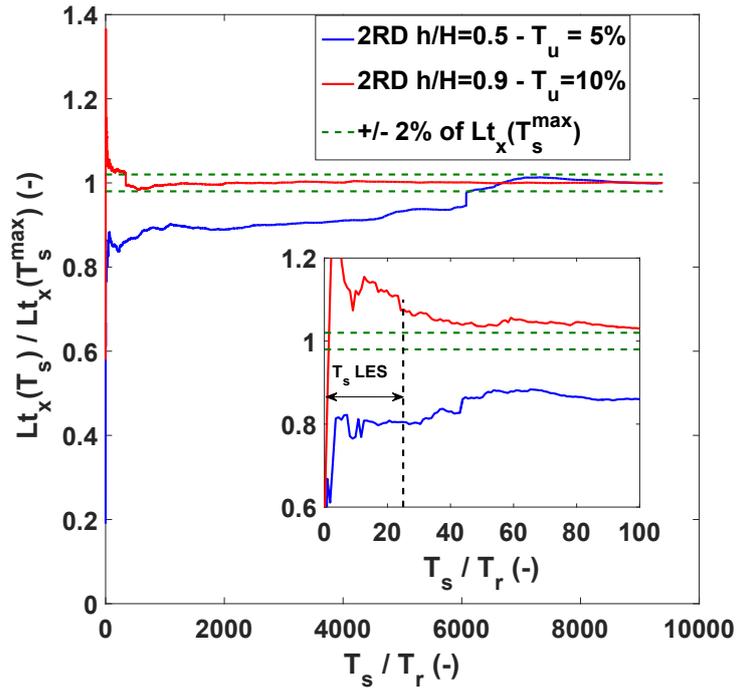


FIGURE 4.26 – Problématique de la convergence des statistiques. Voir aussi Martin Energies

deurs moyennes d'un champ 3D instationnaire au cycle thermodynamique 0D stationnaire de la machine. Un travail sur les grandeurs moyennes a été mené dans le cadre de la thèse de Maël Harnieh, dans lequel nous avons montré que les moyennes pondérées par le débit permettent la conservation des pertes (ou génération d'entropie), et sont ainsi intéressantes pour l'analyse des performances d'un étage de turbomachine. La pertinence de cet opérateur (ou de n'importe quel opérateur en fait), pour la mise en données d'une simulation turbine haute pression, sur la base du posttraitement d'une simulation de chambre de combustion est toujours d'actualité. La définition de l'opérateur de moyenne peut significativement affecter les résultats des profils moyens imposés à l'entrée du domaine turbine, et donc les performances et les prédictions aérothermiques (Notons par ailleurs que les opérateurs de moyenne considérés chez les industriels peuvent varier d'un bureau d'étude l'autre).

Sur la base d'un calcul couplé chambre-turbine (illustré Fig. 4.27), je me suis intéressé à l'effet de la définition de l'opérateur de moyenne pour la mise en données d'une simulation turbine isolée. Les moyennes considérées ici sont la moyenne surfacique (Eq. 4.24) et pondérée par le débit (Eq. 4.25), où S est la surface sur laquelle est réalisée la moyenne.

$$\langle \Phi(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{S} \int_{\Omega} \Phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (4.24)$$

$$\langle \Phi(\mathbf{x}, t) \rangle_{pond} = \frac{\langle \rho u \Phi(\mathbf{x}, t) \rangle}{\langle \rho u \rangle} \quad (4.25)$$

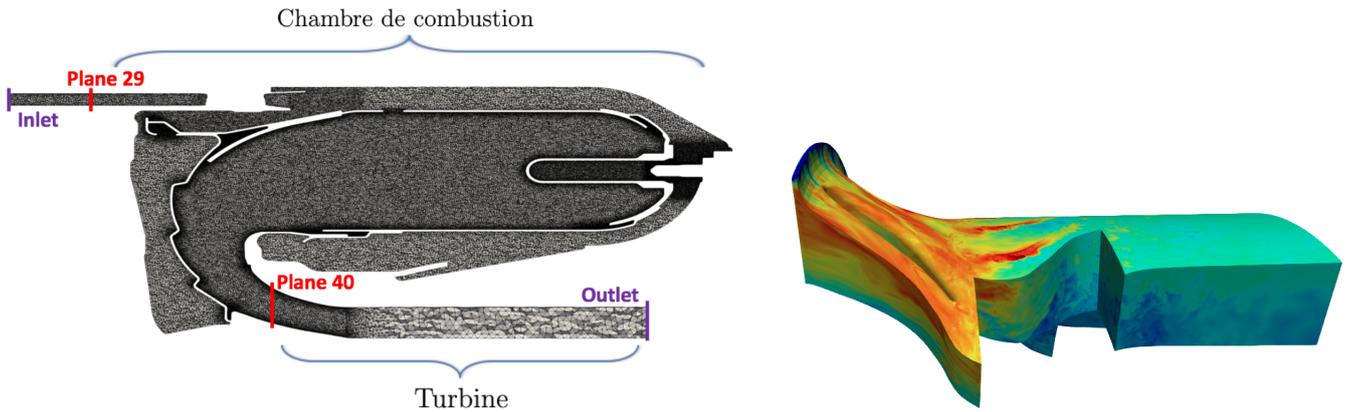


FIGURE 4.27 – Gauche : Configuration couplée chambre-turbine, adaptée de Perez Arroyo et *al.* [9]. Droite : configuration de turbine isolée, investiguée dans ce travail.

Ce travail en cours ⁵ interroge également la pertinence d'imposer la pression totale et la température totale moyennée par ces opérateurs plutôt que l'enthalpie totale, et le débit. L'évolution temporelle de l'enthalpie totale $\langle H_t \rangle$, moyennée spatialement sur le plan d'entrée Plan40 selon l'Eq. 4.24 est illustrée Fig. 4.28 (à gauche), pour le calcul couplé (en vert) et pour le calcul turbine isolée, selon les différents types de profils 1D imposés à l'entrée (imposition des couples (P_t, T_t) ou $(H_t, \rho u)$, moyenne pondérée ou non par le débit). A droite de la Figure 4.28 est illustrée l'évolution temporelle de l'erreur relative de la variation d'enthalpie entre l'amont et l'aval de l'étage turbine isolée, par rapport à celle évaluée dans le calcul couplé. Cette erreur relative s'écrit $\frac{(\Delta \langle H_t \rangle - \Delta \langle H_t \rangle_{CC-TuHP})}{\Delta \langle H_t \rangle_{CC-TuHP}} \times 100$ avec $\Delta \langle H_t \rangle$ la variation d'enthalpie totale (non pondérée par le débit) au travers de l'étage, et donc le travail reçu par la turbine. Cette Figure 4.28 illustre d'une part que selon le formalisme considéré pour extraire un profil moyen 1D en aval de la chambre de combustion, des niveaux d'enthalpie (moyenne) très différents peuvent être imposés à l'entrée de la turbine isolée (à gauche). Elle illustre également le fait que, quel que soit le formalisme considéré, s'intéresser à la variation de l'enthalpie totale $\langle H_t \rangle$ (non pondérée par le débit) au travers de l'étage n'est pas représentatif du travail de la turbine du calcul couplé, et mène à une erreur de l'ordre de 10%.

La même analyse est menée en ne s'intéressant non plus à l'évolution de $\langle H_t \rangle$ à travers l'étage, mais à son pendant pondéré par le débit $\frac{\langle \rho u H_t \rangle}{\langle \rho u \rangle}$, dans un cadre où les profils moyens 1D imposés à l'entrée de la turbine isolée ont été réalisés considérant une pondération par le débit. Les évolutions temporelles sont illustrées Fig. 4.29. Comme précédemment, des niveaux d'enthalpie totale (moyens) différents peuvent être obtenus selon l'opérateur de moyenne considéré pour la réalisation du profil 1D à imposer à l'entrée du calcul turbine isolée. L'opérateur de moyenne 4.25 permet de retrouver les niveaux du calcul couplé de référence (courbes cyan et noire). Enfin, la Figure 4.29 de droite illustre qu'en considérant la différence d'enthalpie totale pondérée par le débit, le travail de la turbine est bien retrouvé par rapport au calcul de référence. La mesure de la variation d'enthalpie $\langle H_t \rangle_{pond}$ entre l'entrée et la sortie du domaine turbine isolé permet cette fois d'être représentatif du travail de la turbine du calcul couplé. Ce travail illustre la conservation du 1er principe de la thermodynamique par la moyenne pondérée par le débit,

5. Non publié, soumission imminente.

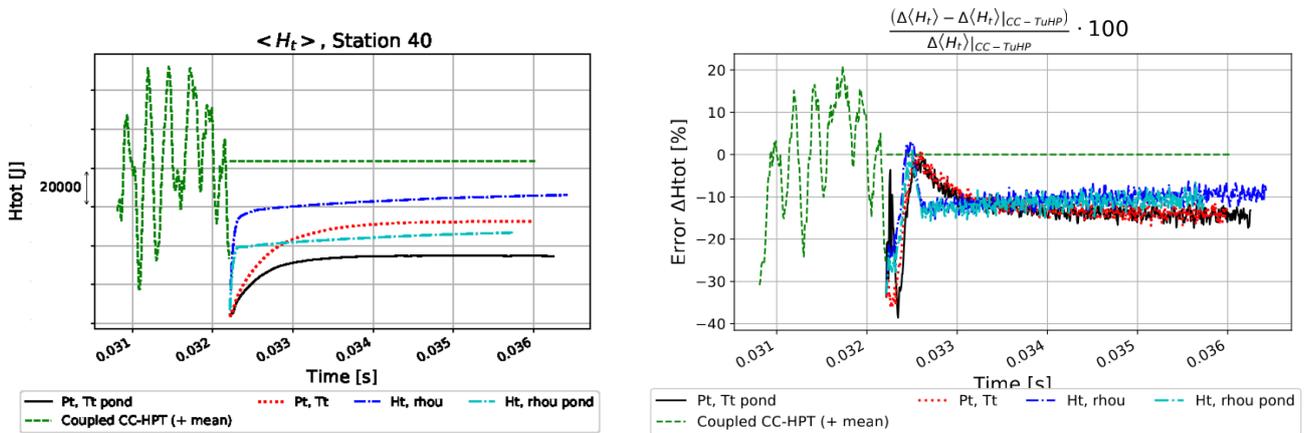


FIGURE 4.28 – Temporal evolution of $\langle H_t \rangle$ at station 40 (left), and variation across the entire stage (right).

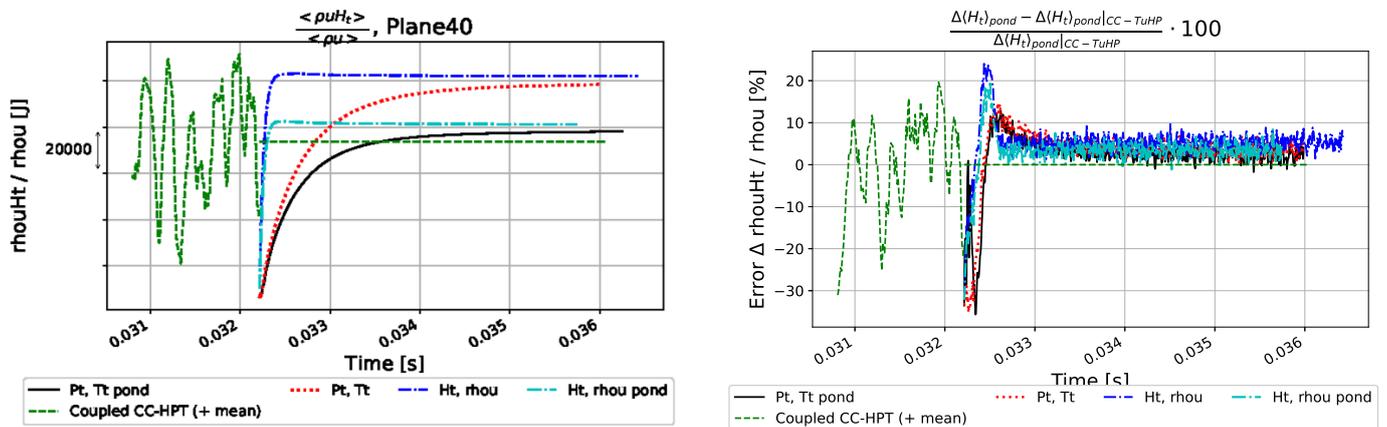


FIGURE 4.29 – Temporal evolution of $\langle H_t \rangle_{pond}$ at station 40 (left), and variation across the entire stage (right).

ainsi que la conservation du second principe (préalablement remis en avant par les travaux de Maël Harnieh).

Si l'étude des variations est importante pour l'évaluation des performances de l'étage, les valeurs absolues sont aussi importantes, car elles influent sur les températures de paroi. Et ce sont bien ces quantités absolues qui sont d'intérêt pour la prédiction aérothermique. La figure 4.30 illustre les différences de températures statiques mesurées selon le type de profil 1D imposé à l'entrée du domaine turbine isolé. Des différences significatives sont notables selon les différentes simulations, car les différents profils 1D imposés à l'entrée de la turbine n'imposent pas le même niveau d'enthalpie totale. La figure 4.30 illustre que, bien que les résultats ne soient pas parfaits, l'imposition d'un profil 1D d'enthalpie totale pondéré par le débit, et de débit, permet à la fois une bonne prédiction des performances de l'étage, et une température pariétale des aubages plutôt réaliste.

Blade 2

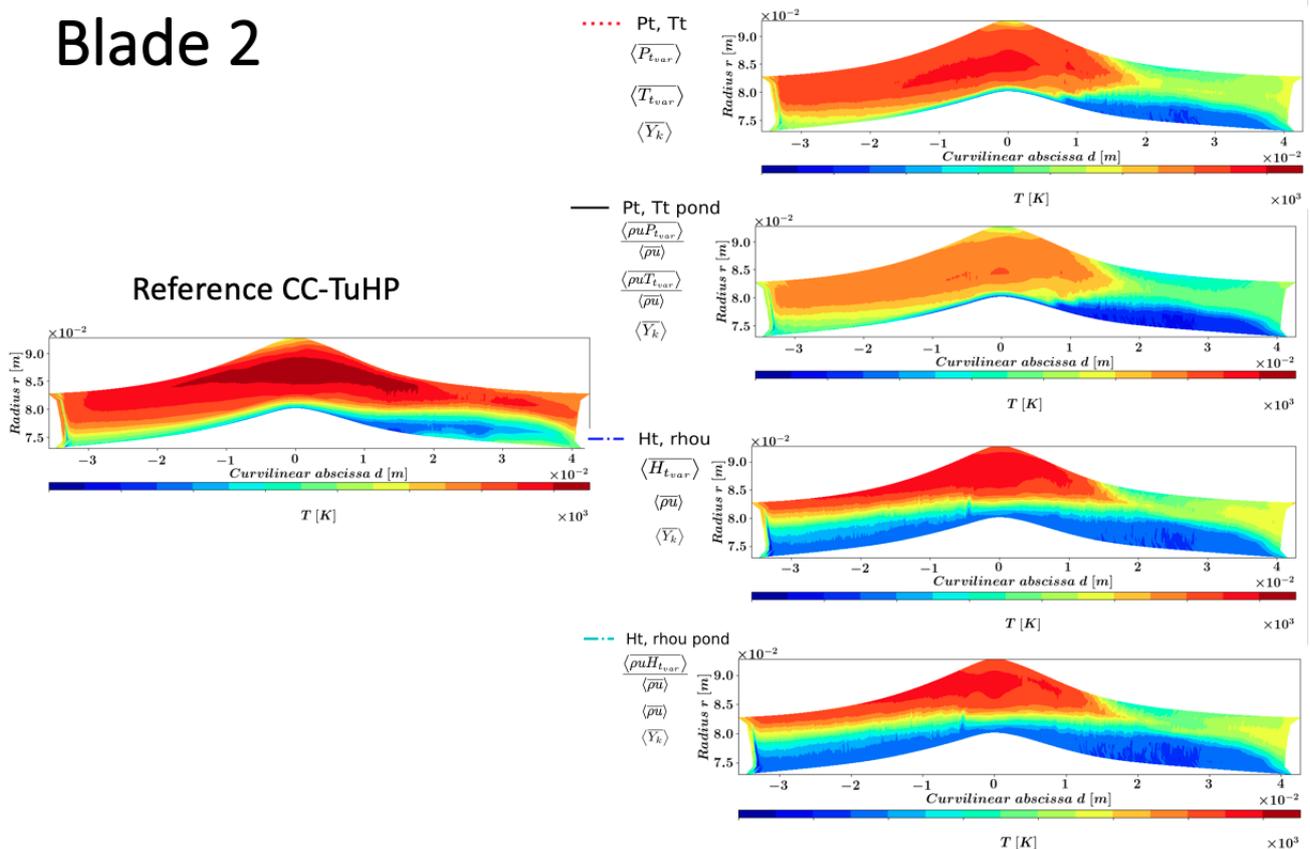


FIGURE 4.30 – Température de paroi sur la pale n°2, selon la condition d'entrée imposée.

Ces travaux sont aujourd'hui poursuivis, en s'intéressant notamment aux effets de l'injection de turbulence, détaillée plus haut (4.2.4), incluant une fluctuation de température. De plus, la prise en compte des effets instationnaires dans les opérateurs de moyenne pertinents du point de vue thermodynamique fait l'objet du post-doctorat de Ananth Sivaramakrishnan.

Chapitre 5

Méthodes numériques

Chapter 5, references

- [2] B. Martin, L. Cheng, M. Rudgyard, and **N. Odier**. “A new class of Taylor-Petrov-Galerkin schemes using polynomial reconstruction.” (Under review for *Journal of Computational Physics*.)
- [1] Benjamin Martin. “Méthodes numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles du couplage entre plusieurs composants d’une turbomachine.” Doctoral dissertation. Institut National Polytechnique de Toulouse, 2021.

5.1 Motivations

Contrairement à la vision proposée par Löhner [140], la prétention de mes travaux n'est pas d'atteindre des temps de retour similaires à ceux du RANS, pour un résultat post-traité dans la minute, et je suis convaincu que des méthodes d'ordre élevés sont nécessaires pour une prédiction fine d'une physique de plus en plus complexe. La prochaine décennie ne devrait en effet pas manquer de sujets nécessitant de la précision dans les modèles, mais aussi dans les méthodes. Les sujets liés au diphasique "multiphysique" ont à mon avis encore de "beaux" ¹ jours devant eux (modélisation de l'atomisation, allumage, extinction, modélisation des particules volatiles, des suies...), et nécessitent clairement de la précision. De la même façon, la modélisation des écoulements pariétaux est loin d'être un sujet clos, et pourrait s'enrichir de l'impact des phénomènes chimiques pariétaux. Là encore, un besoin de précision est définitivement requis.

Ce propos ne compte pas balayer le besoin de réduction des coûts des simulations aux grandes échelles, pour un transfert vers les industriels. Aussi, c'est par le spectre coût pour un niveau de précision donné que nous aborderons ce chapitre.

Ainsi, une partie de mes travaux a porté sur l'amélioration des méthodes numériques au sein du code de calcul AVBP. Ce travail s'effectue en collaboration étroite avec Michael Rudgyard. Ces travaux ont débuté en 2016. Luis-Miguel Segui-Troth et Julien Vanharen, alors doctorants, avaient entamé des discussions sur la problématique des "termes de bords" pour les schémas numériques d'AVBP. Sur les conseils de Guillaume Puigt, j'ai entamé l'implémentation d'une reconstruction de type "K-exact" [175] lors de l'année 2018, en tant que post-doctorant. Ce travail n'a pas réellement abouti, mettant en lumière des difficultés inhérentes à la méthode, en particulier la gestion des conditions limites, et un formalisme peu adapté aux méthodes de type élément finis.

Dans le cadre de la thèse de Benjamin Martin, nous avons tâché tout d'abord de nous inspirer des travaux de Bernard et *al.* [16] réalisés au sein du code de calcul YALES2. Là encore, ces travaux n'aboutiront pas, le formalisme étant peu adapté au formalisme "cell-vertex" d'AVBP. Des idées seront tout de même conservées sur la base de ces 2 investigations, pour aboutir à un formalisme "Petrov-Galerkin", ainsi que la méthode de type "defect-correction" présente chez Bernard et *al.*. Ces travaux sont menés via la thèse de Benjamin Martin et la thèse en cours d'Alexis Boudin, ainsi que par les travaux de post-doctorat de Lionel Cheng et Prasannabalaji Sundaram.

5.2 Rappels sur les schémas existants d'AVBP

Avant de présenter ces travaux sur l'amélioration et la robustisation des méthodes numériques dans AVBP, un bref rappel de celles-ci est exposé ici. Les schémas usuels d'AVBP sont le schéma de type Lax-Wendroff, et les schémas de type Two-step Taylor-Galerkin. Initialement introduit par R-H. Ni [162], puis adapté au formalisme cell-vertex par Crumpton et *al.* [52], le schéma Lax-Wendroff [131, 132] d'ordre 2 en temps et en espace combine les discrétisations temporelles et spatiales. Sa construction est décrite ci-après. L'avancement temporel du vecteur des variables conservatives U s'écrit tout d'abord :

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \right)^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (5.1)$$

1. Malheureusement pourrait-on dire...

Les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales grâce à l'équation de continuité :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{F} \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = -\nabla \cdot \left(\vec{A} \cdot \frac{\partial U}{\partial t} \right) = \nabla \cdot \left(\vec{A} \cdot \nabla \cdot \vec{F} \right) \quad (5.3)$$

où \vec{F} et \vec{A} sont respectivement le vecteur flux et la matrice jacobienne associée. La mise à jour temporelle du vecteur des variables conservatives par le schéma Lax-Wendroff s'écrit alors :

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t \left\{ \underbrace{\left(\nabla \cdot \vec{F} \right)^n}_L - \frac{1}{2} \Delta t \underbrace{\nabla \cdot \left[\vec{A} \cdot \left(\nabla \cdot \vec{F} \right)^n \right]}_{LL} \right\} \quad (5.4)$$

Les schémas de type Taylor-Galerkin sont eux des schémas de type éléments-finis, d'ordre élevé, initialement introduits par Donea [66]. Ces schémas une étape dans leur proposition initiale sont étendus à des schémas multi-étapes (prédicteur-correcteur) par Quartapelle et Selmin [202], menant aux schémas TTG3 et TTG4, moins sensibles aux oscillations noeuds-à-noeuds rencontrées avec la formulation originale pour les problèmes de convection ([66]). Colin et Rudgyard [51] revisitent ces schémas pour les écoulements instationnaires, compressibles sur maillages hybrides, dans un contexte de simulation aux grandes échelles. Ils proposent notamment le schéma TTG4A et TTGC(γ), ce dernier démontrant d'excellentes propriétés de dissipation et dispersion pour un choix judicieux du paramètre γ , sur des maillages réguliers. Ce schéma d'ordre 3 en temps et espace (sur maillage parfait) est depuis le schéma usuellement considéré pour les simulations aux grandes échelles avec AVBP. Dans l'approche historique, les fonctions de forme ϕ_i du formalisme élément-fini sont linéaires, et considérées égales aux fonctions test ψ_i . Les deux étapes prédiction-correction des schémas TTG4A et TTGC s'écrivent de façon concise :

$$\mathbf{M}_j(\delta \tilde{u}_{\tau_c}^n) = -\alpha \Delta t \mathbf{L}_i + \beta \Delta t^2 \mathbf{L} \mathbf{L}_i \quad (5.5)$$

$$\mathbf{M}_j(\delta \tilde{u}_{\tau_c}^{n+1}) = -\Delta t \left(\theta_1 \mathbf{L}_i + \theta_2 \tilde{\mathbf{L}}_i \right) + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \mathbf{L} \mathbf{L}_i + \epsilon_2 \mathbf{L} \tilde{\mathbf{L}}_i \right) \quad (5.6)$$

avec δ l'opérateur de décalage temporel ($\delta u^n = u^{n+1} - u^n$), α , β , θ_i , ϵ_i les coefficients associés au schéma considéré. Les opérateurs linéaires s'écrivent :

$$\mathbf{M}_j(u_{\tau_c}^n) = \int_{\Omega} u_{\tau_c}^n \psi_i dV = \sum_{\tau_c \in \{T_i\}} \int_{\tau_c} u_{\tau_c}^n(\mathbf{x}) \psi_i dV \quad (5.7)$$

$$\mathbf{L}_i(u_{\tau_c}^n) = \sum_{\tau_c \in \{T_i\}} \int_{\tau_c} (\mathbf{c} \cdot \nabla u_{\tau_c}^n(\mathbf{x})) \psi_i dV \quad (5.8)$$

$$\mathbf{L} \mathbf{L}_i(u_{\tau_c}^n) = - \sum_{\tau_c \in \{T_i\}} \int_{\tau_c} (\mathbf{c} \cdot \nabla u_{\tau_c}^n(\mathbf{x})) (\mathbf{c} \cdot \nabla \psi_i) dV \quad (5.9)$$

où $\{T_i\}$ est le support compact fermé des cellules τ_c concourantes au noeud i (sur lequel les fonctions tests ne sont pas nulles). Le vecteur u_{τ_c} à l'itération n est donné par une projection de type Galerkin :

$$u_{\tau_c}^n = \sum_{i \in \tau_c} u_i^n \phi_i(\mathbf{x}) \quad (5.10)$$

où ϕ sont les fonctions de forme considérées. Plus de détails sur ces schémas peuvent se trouver dans les thèses de Nicolas Lamarque [129], Luis-Miguel Segui-Troth [218] et Benjamin Martin [143].

5.3 Analyse numérique pour TurboAVBP et approche Local Time Stepping

Un travail a été conduit dans la thèse de Benjamin Martin sur l'analyse précise des stencils impliqués dans les schémas existants, et ce pour une bonne maîtrise de la région de recouvrement spatial entre le domaine rotor et le domaine stator d'une configuration turbomachine. L'avancement temporel explicite de nos schémas \mathbf{U}_{N+1} peut s'exprimer comme un produit matriciel² :

$$\mathbf{U}_{N+1} = \mathbf{K}_{\text{total}} \mathbf{U}_N \quad (5.11)$$

Pour un noeud j , la j^{ieme} colonne de K_{total} exprime alors la contribution de chaque voisin dans le calcul de U_j^{n+1} ([104]). L'évolution des valeurs de K_{total} le long d'une colonne est tracée pour les schémas **LW**, **TTG4A**, **TTGC** et **TTGC-J** (TTGC avec une méthode de Jacobi (2 étapes) pour approximer l'inversion de la matrice de masse). La Figure 5.1, tracée pour différents CFL ($\nu = 0.3$ à 0.9), illustre bien que l'ensemble des noeuds du maillage sont impliqués pour les schémas TTGC et TTG4A lorsque l'inversion de la matrice de masse est exacte, et montre des contributions non nulles jusqu'au sixième voisin avec 2 étapes de Jacobi.

Ces travaux permettent ainsi de bien appréhender le nombre de voisins à impliquer dans la région de recouvrement entre les domaines rotor et stator de nos simulations turbomachine (illustrée Fig. 5.2) pour conserver les propriétés de nos schémas.

La Figure 5.3 illustre bien l'effet du nombre de noeuds N présents dans la région de recouvrement sur la norme L_2 de l'erreur pour la convection d'une gaussienne, que ce soit par inversion exacte de la matrice de masse (en haut), ou par approximation de Jacobi (2 étapes, en bas).

A faible CFL, 6 voisins sont nécessaires pour conserver l'ordre de convergence du schéma TTGC. A partir de CFL=0.7 (correspondant à une valeur usuelle dans nos simulations), $N_{\text{overlapp}} = 4$ voisins suffit pour ne pas détériorer l'ordre du schéma. Une analyse plus fine est proposée dans la thèse de Benjamin, en particulier sur la plus grande sensibilité des résultats aux nombre de voisins lorsque la matrice de masse est approximée par un méthode de Jacobi. L'effet du nombre d'étapes de Jacobi n'a par ailleurs pas été investigué, mais serait un exercice intéressant.

5.4 Limitations des schémas actuels

Mes premiers travaux au CERFACS ont coïncidés avec diverses thèses s'intéressant de près à la prédiction aérothermique (en particulier les thèses de Pierre Aillaud et Luis-Miguel Segui-Troth), avec des maillages hybrides prismes-tétraèdres en proche paroi. Mes propres travaux sur le DGEN-380 ont considéré ce type de maillages pour une bonne prédiction de la couche

2. Notons que cette expression reste vraie pour les schémas de type élément-finis faisant intervenir une matrice de masse, dont l'inverse est alors contenu dans le terme $\mathbf{K}_{\text{total}}$.

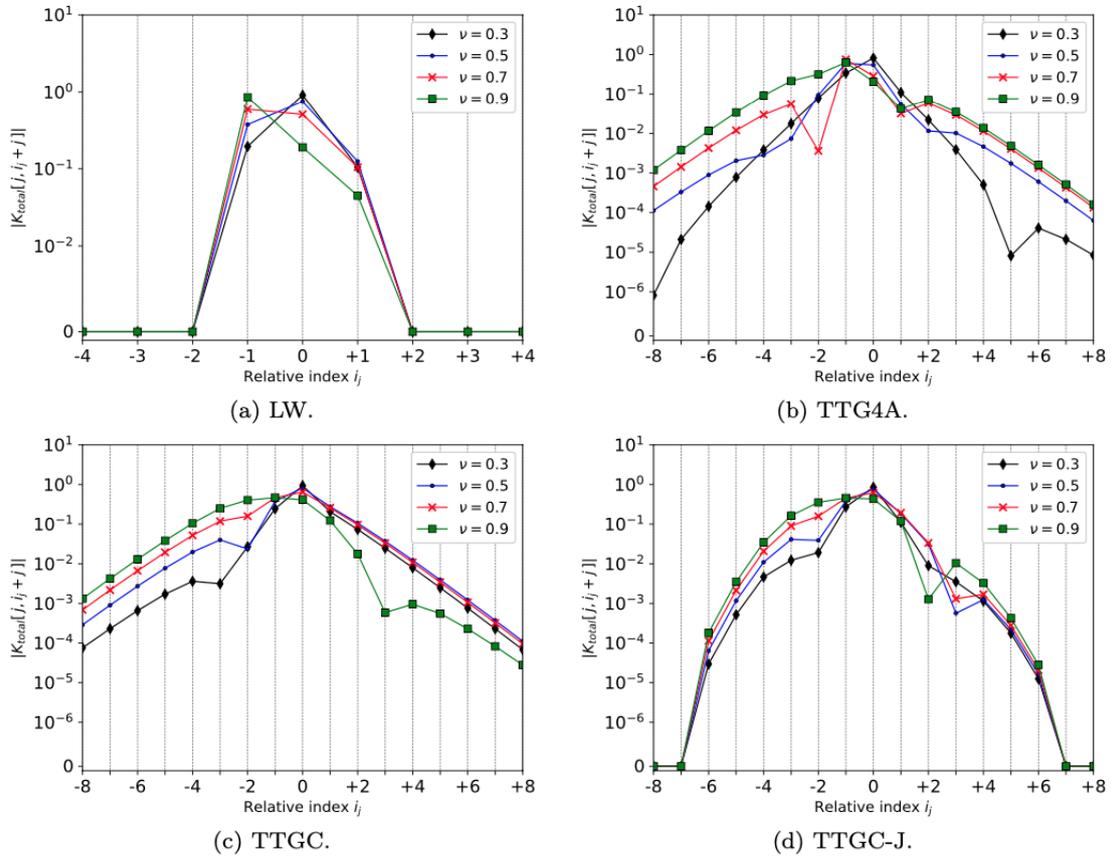


FIGURE 5.1 – Contribution de la matrice \mathbf{K}_{total} (échelle logarithmique).

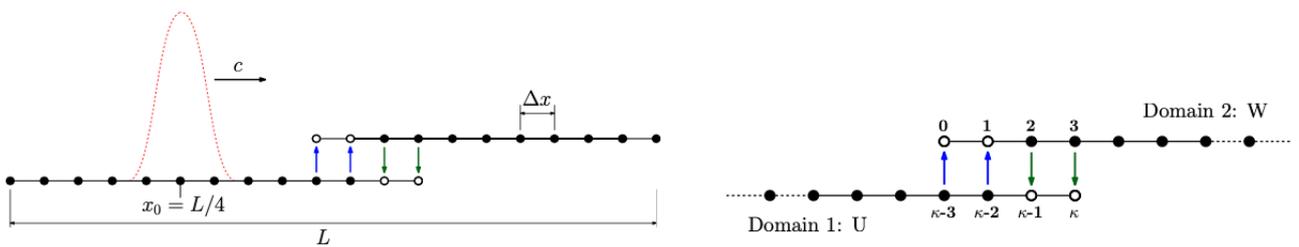


FIGURE 5.2 – Configuration 2 domaines.

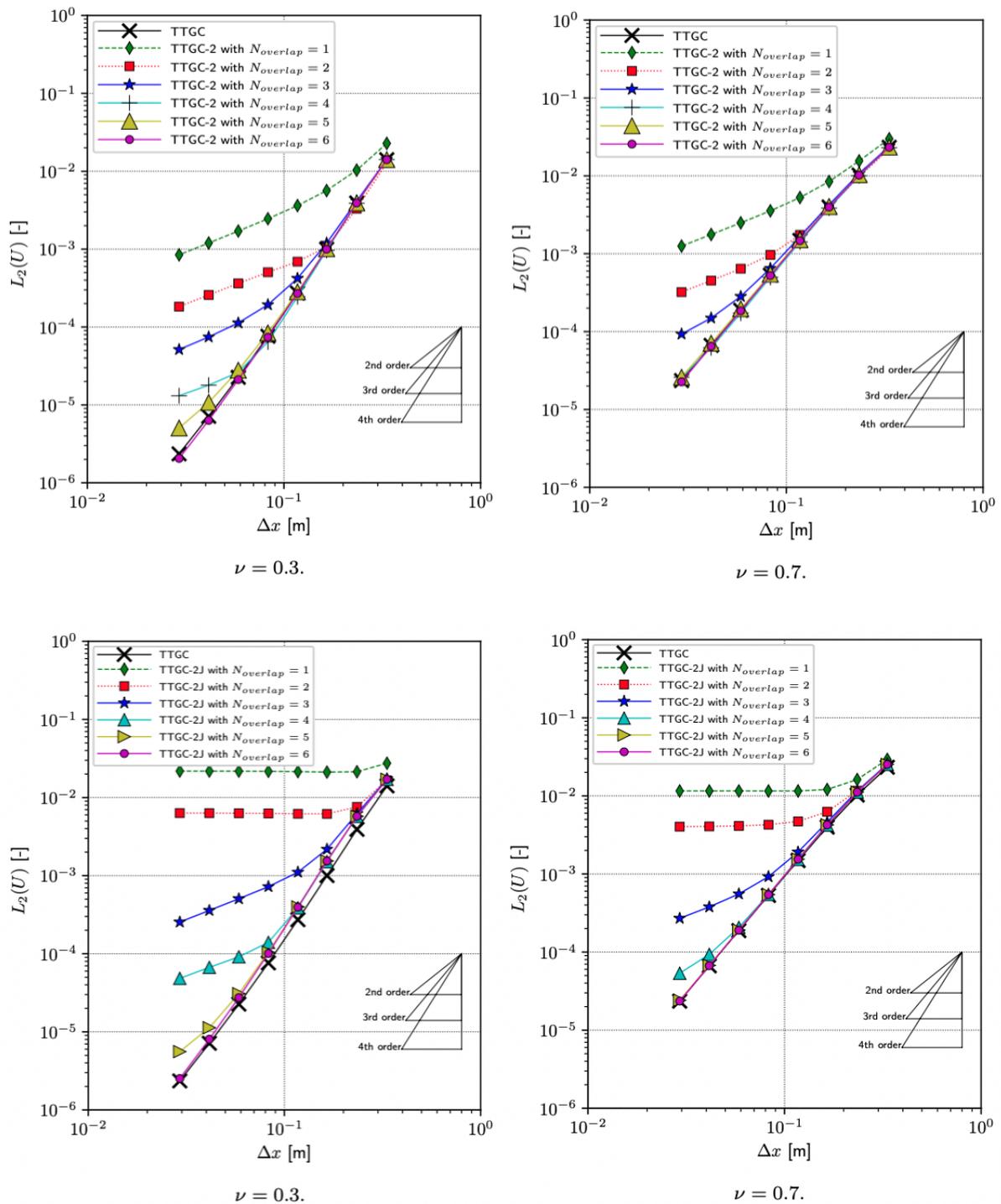


FIGURE 5.3 – Ordre de convergence spatiaux pour TTGC TAVBP (inversion exacte en haut, approximation de Jacobi en bas), et nombre de noeuds dans la région de recouvrement.

limite. Dans ce cadre, des questions se sont alors posées sur les erreurs numériques générées à la transition prismes-tétraèdres, ou sur le noeud de paroi, et de leur impact sur la physique. Nous avons identifié qu'une source d'erreur est liée au calcul du terme de second ordre (LL dans l'Eq. 5.4, ou Eq. 5.9) sur maillages déformés, hybrides, ou proche des parois. En effet, dans ces conditions, le centre de gravité de la cellule duale n'est pas confondu avec le noeud du maillage, comme l'illustre la Fig. 5.4. Or le centre de gravité de la cellule duale est le lieu du calcul effectif du terme de second ordre LL , tandis que le noeud est le lieu de stockage des variables.

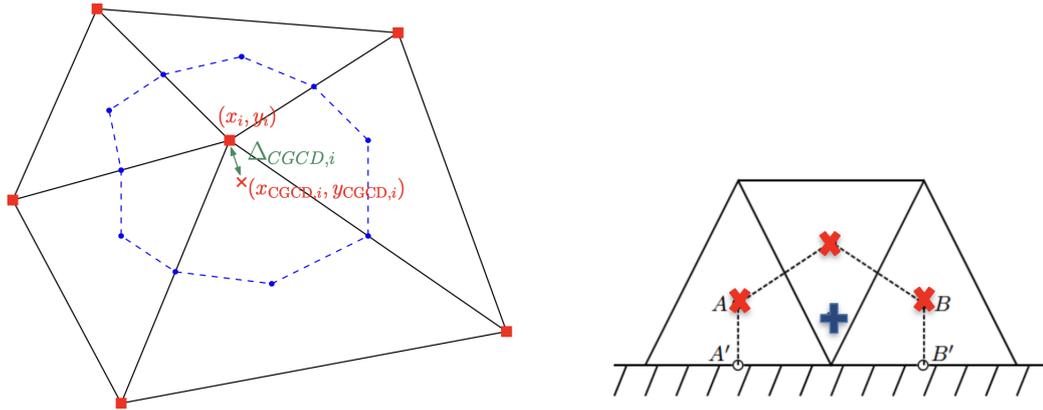


FIGURE 5.4 – Décalage du centre de gravité de la cellule duale (lieu du calcul du résidu), et du noeud du maillage, où sont stockés les variables.

La convection d'un tourbillon isentropique à l'aide des schémas Lax-Wendroff, TTG4A et TTGC sur maillages parfaits et légèrement déformés est illustrée Figure 5.5. Notons que le maillage le plus perturbé ($b_\Delta = 0.5$) correspond en réalité à ce que serait un "bon" maillage tétraédrique 3D, et que nos simulations de géométries complexes présentent des niveaux de distortion bien plus élevés. Cette figure illustre l'excellent comportement du schéma TTGC sur maillage parfait, mais les importantes erreurs de dispersion dès que le maillage n'est plus parfait. La dissipation du schéma TTG4A lui permet d'être plus robuste à la distortion du maillage, mais reste trop importante pour la convection de petites structures turbulentes.

Cette Figure 5.5 illustre le besoin d'améliorer le comportement des schémas numériques existants dans AVBP pour les maillages réels. Une analyse détaillée des erreurs de dissipation et de dispersion de ces schémas sur maillages 2D triangulaire peut être trouvée dans la thèse de Benjamin Martin.

5.5 Amélioration des schémas d'AVBP

De nombreuses pistes d'amélioration ont été investiguées dans cette thèse ([143]). Les travaux ont en particulier concernés l'effet de la viscosité artificielle (et particulièrement l'hyperviscosité d'ordre 4 permettant d'atténuer les oscillations noeuds à noeuds), le nombre d'itérations de la méthode de Jacobi permettant l'inversion de la matrice de masse, l'optimisation sous contrainte des paramètres des schémas TTGC et TTG4A pour minimiser dispersion et dissipation, la régularisation du maillage, l'investigation d'un schéma TTGC(γ) avec γ variable (Mais γ identique

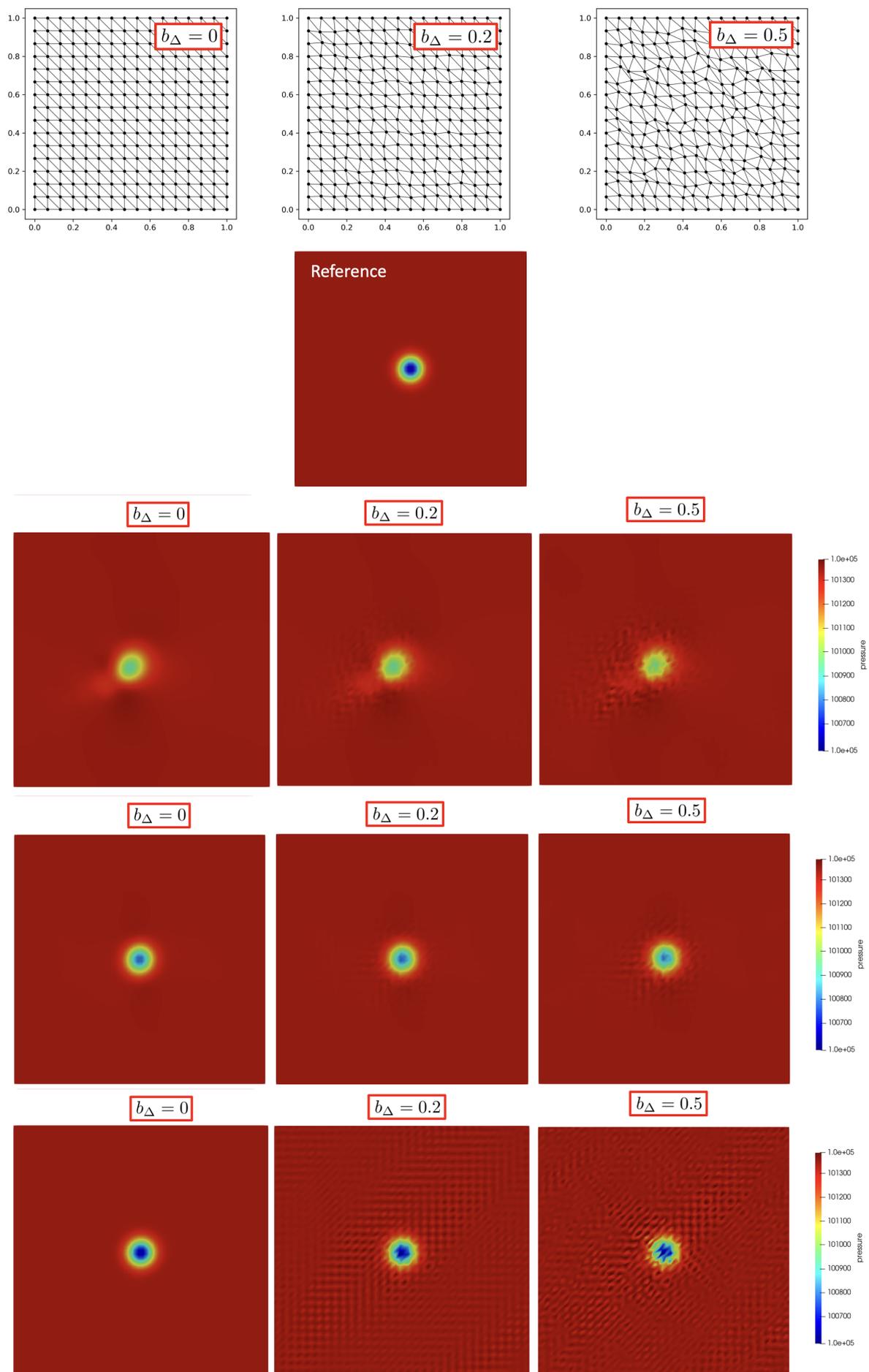


FIGURE 5.5 – Convection d'un vortex isentropique sur maillages déformés. LW (en haut), TTG4A (au centre), TTGC (en bas).

sur tout le domaine³.) Pour toutes ces investigations, certains apports sont notés, mais restent toutefois insuffisants, ou difficiles à mettre en place.

Aussi, le développement de nouveaux schémas numériques est considéré, dans le cadre des méthodes Petrov-Galerkin, pour lesquelles les fonctions de forme et les fonctions tests diffèrent. L'idée est de conserver des fonctions test ψ_i linéaires, mais des fonctions de forme ϕ_i quadratiques. Ces travaux sont réalisés avec pour premier objectif une robustesse aux maillages déformés, tout en limitant au maximum le surcoût associé. Différentes approches ont été investiguées par les travaux de Benjamin Martin, et du post-doctorat de Lionel Cheng pour la reconstruction quadratique au sein de la cellule [144] (Fig. 5.6). Ces approches nécessitent la reconstruction de grandeurs au milieu des arêtes, en plus des valeurs nodales. Ces informations sont reconstruites sur la base des gradients nodaux, ou de la hessienne le long des arêtes. Ces travaux [144], en cours d'évaluation, sont particulièrement robustes sur maillages déformés.

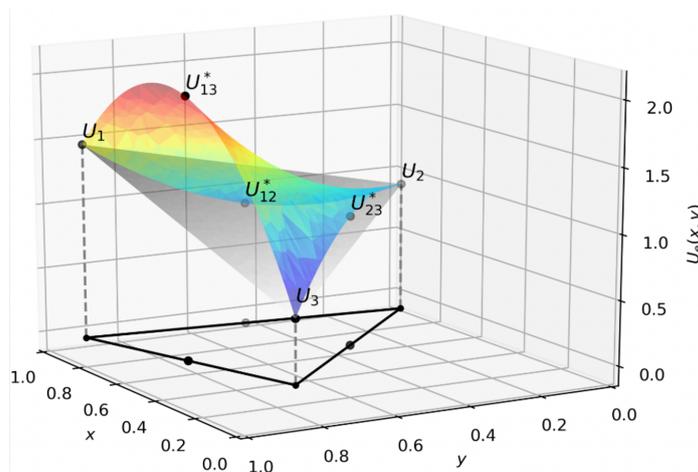


FIGURE 5.6 – Fonction de forme quadratique au sein d'un élément.

La thèse en cours d'Alexis Boudin s'attache à revisiter ces propositions pour optimiser au maximum le nombre d'opérations réalisées, et ainsi le coût de calcul associé. La méthode actuelle se passe de reconstruction explicite du polynôme quadratique dans l'élément, et le même nombre d'opérations que pour les schémas usuels est ainsi réalisé. Le gradient nodal est obtenu en corrigeant les contributions des gradients calculés aux centres des cellules adjacentes, par une matrice de correction calculée en pré-traitement, ne dépendant que du maillage. Cette opération de correction, apportant la précision, n'est pas coûteuse. Seul le schéma implicite (inversion de la matrice de masse) est associé à un coût irréductible. Cependant, deux seules étapes de Jacobi permettent de très bonnes performances. Ainsi, les résultats précision et coûts sont illustrés Figure 5.7. La figure de gauche illustre les excellents comportements des nouveaux schémas TTG4A-R2 sur maillages déformés ($b_\Delta = 0.5$). Notons que si l'ordre spatial du schéma est proche de 5, le niveau d'erreur a également significativement diminué par rapport à TTGC, d'une à deux décades.

La figure de droite illustre le produit du coût par la norme L2 de l'erreur réalisée. Elle permet ainsi de rendre de compte du coût associé pour une précision donnée. (Pour donner un élément

3. Notons que des travaux considérant un paramètre γ variable localement sur le maillage ont été investigués par mon collègue Pavanakumar Mohanamurthy et son doctorant Luciano Drozda [155]

de référence, le vortex "medium" 64×64 est le 3eme niveau de résolution (en partant de la droite donc)). Ainsi, TTG4A-R2 est un schéma dont le coût est semblable au coût de TTG4A sur maillage perturbé pour une résolution "moyenne". Il est moins coûteux de presque une décade que TTG4A lorsque la précision est recherchée, et significativement moins onéreux que TTGC sur maillage perturbé pour une précision visée. C'est donc un schéma précis, robuste, pour un coût abordable. L'extension en 3 dimensions a été réalisée.

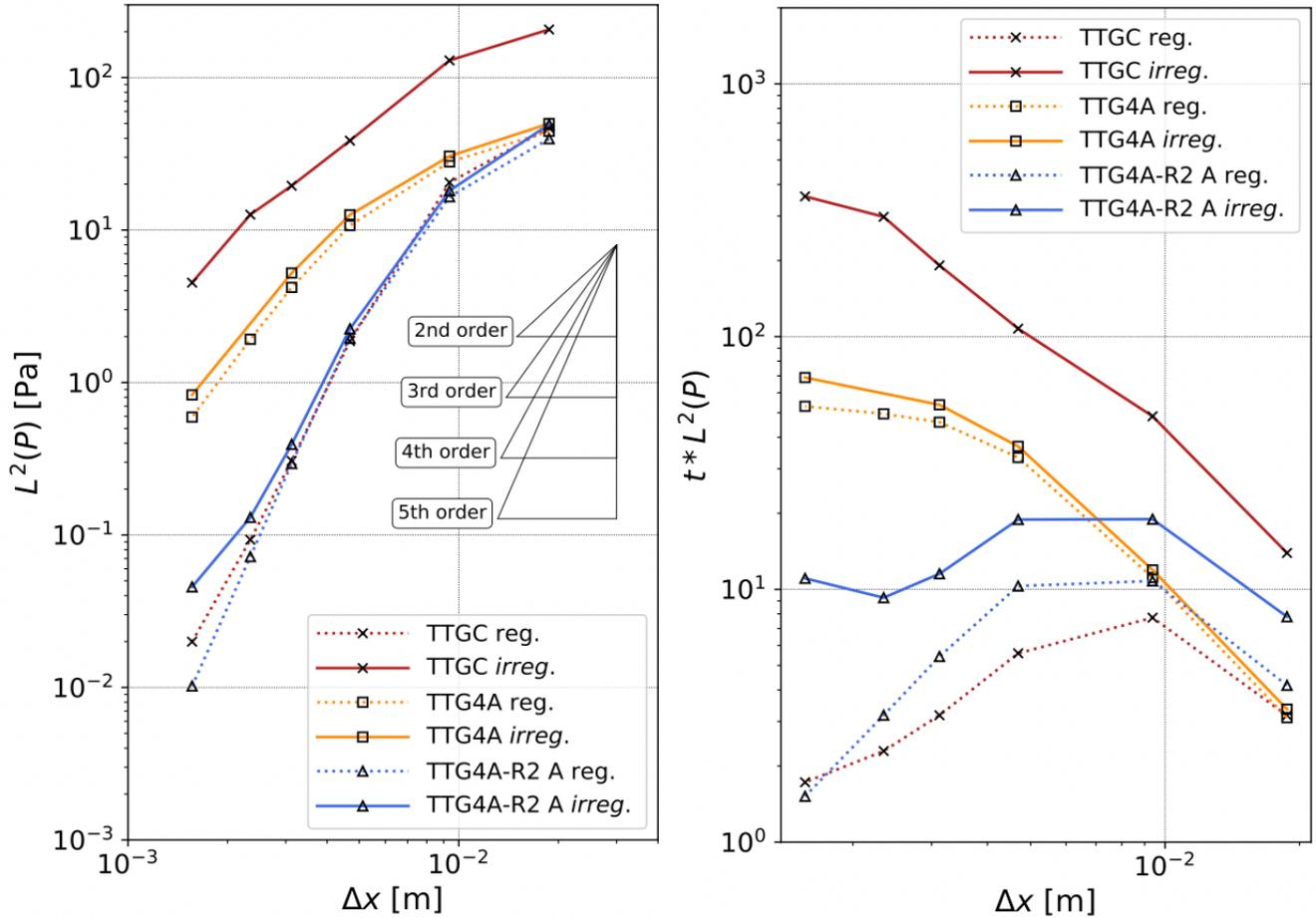


FIGURE 5.7 – Précision et coût pour la convection d'un tourbillon isentropique (2 étapes de Jacobi pour le schéma implicite). "reg" correspond à $\Delta = 0$, "irreg" à $\Delta = 0.5$.

D'autres pistes sont également en cours d'évaluation. Des schémas cubiques sont regardés dans le cadre du postdoctorat de Prasannabalaji Sundaram, ainsi que l'extension des schémas quadratiques aux éléments hybrides prismes-tétraèdres, qui ont initialement motivés ces travaux.

Enfin, la gestion des conditions limites est un sujet traité à part entière dans la thèse de Raphaël Costes. Une difficulté supplémentaire y est en effet associée, qui est le fait que seul un "demi" volume dual est effectivement présent dans le calcul. Le terme de second ordre Eq. 5.9 s'écrit en présence d'un bord :

$$\begin{aligned}
\mathbf{LL}_i(u_{\tau_c}^n) = & - \sum_{\tau_c \in \{T_i\}} \int_{\tau_c} (\mathbf{c} \cdot \nabla u_{\tau_c}(\mathbf{x})) (\mathbf{c} \cdot \nabla \psi_i) dV \\
& + \sum_{\partial\Omega_c \in \{E_i\}} \int_{\partial\Omega_c} \psi_i (\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}) (\mathbf{c} \cdot \nabla u_{\tau_c}^n) dS
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Il est nécessaire de "fermer" ce volume dual par la condition limite. Différents choix de fermetures existent aujourd'hui, purement numériques (ils n'impliquent pas la condition limite), sans être parfaitement satisfaisants. Les conditions pariétales, et la gestion des coins, sont particulièrement problématiques. Le formalisme éléments finis de nos schémas implique des normales nodales, ayant peu de sens physique dans les coins. Le travail en cours de Raphaël Costes s'attache à reformuler ce terme de bord en impliquant des flux, et normales aux faces. Ces travaux permettraient notamment un meilleur comportement des modèles de paroi en présence de coins dans la géométrie.

Chapitre 6

Perspectives générales

L'objectif général de ces travaux est de disposer d'outils permettant la prédiction des impacts climatiques des futures architectures des systèmes de production d'énergie ou de propulsion, depuis l'injection du carburant, la production d'énergie thermique et sa conversion en énergie mécanique, jusqu'aux émissions éventuelles dans l'atmosphère (Fig. 6.1). Cette prédiction pourra permettre d'aider à l'arbitrage de certains choix de conception, ou d'intégration au sein d'un écosystème industriel complexe. Rappelons tout de même qu'en aucun cas, les efforts d'ingénierie dédiés à ces systèmes de production énergétique ne peuvent adresser au premier ordre les défis auxquels nous faisons face, qui nécessitent avant tout une modification structurelle et immédiate de notre société. Les travaux de recherche décrits dans ce manuscrit sont malgré tout aussi nécessaires. A moyen terme, les objectifs de recherche décrits ici nécessitent l'intégration d'éléments socio-économiques aux travaux de modélisation physiques. Le CERFACS est un endroit idéal pour la réalisation de ce projet, et mes efforts actuels s'attachent à resserrer mes liens avec les équipes "GlobC" et "Algo" du CERFACS. Ces liens pourront permettre l'étude d'impact des politiques climatiques et des choix stratégiques des secteurs industriels difficiles à décarbonner, en reliant la prédiction des émissions, la modélisation mathématique d'un système dynamique complexe contraint (à l'instar de [227] par exemple), et leur intégration dans des modèles climatiques. D'un point de vue plus précis, diverses perspectives scientifiques vont être poursuivies par mes activités, détaillées dans les sections suivantes, ainsi que les pistes de financement associées.

6.1 Ecoulements diphasiques et physico-chimie hétérogène

Le modèle 4 équations, couplé à une équation d'état Noble-Abel Stiffened Gas est aujourd'hui la voie suivie pour la modélisation d'un carburant liquide. A ce jour, des résultats prometteurs ont pu être obtenus sur des injecteurs réels. Du chemin reste malgré tout à parcourir pour une meilleure modélisation de l'interface et du spray, ainsi qu'une meilleure représentation physique de la région de liquide diffus. Deux pistes sont à envisager parallèlement. La première est le contrôle numérique de la diffusion de l'interface sous l'effet du cisaillement. Pour ce faire, une antidiffusion numérique peut être introduite, tout en maîtrisant l'éventuelle tension de surface numérique supplémentaire alors apportée. Cette approche permet alors la prédiction de petites structures liquides, qui peuvent alors être transférées vers une description lagrangienne lorsqu'elles ne sont plus discrétisables sur le maillage. Notons que proche du point critique, ce contrôle de la diffusion numérique de l'interface devra tout de même permettre la diffusion physique attendue. La seconde piste à considérer est de laisser l'interface se diffuser, et d'associer

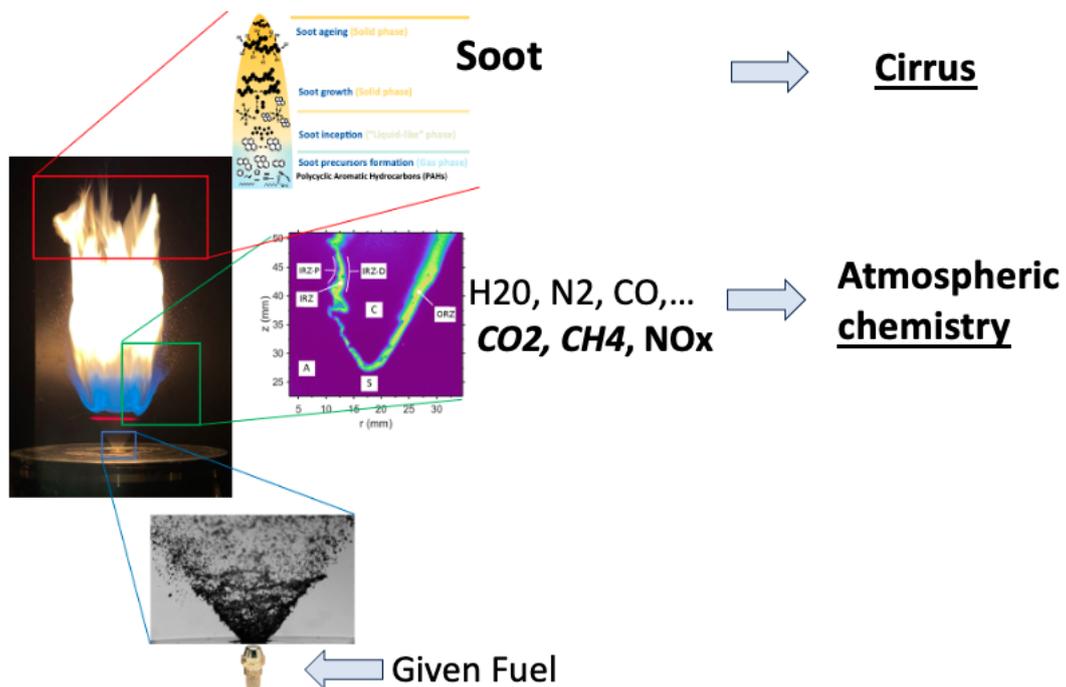


FIGURE 6.1 – Prédiction complète, depuis l'injection du fuel, jusqu'à la prédiction de polluants et suies.

aux régions de mélange liquide-gaz une modélisation caractérisant le spray de sous-maille.

Enfin, une unique fermeture thermodynamique unifiée doit permettre la modélisation de l'allumage diphasique en conditions froides, basse pression, la montée en pression / température, et le passage en conditions supercritiques. Tous ces éléments font l'objet d'une thèse qui débute en Octobre 2024, en collaboration avec l'ONERA.

Ces développements vont ainsi pouvoir permettre l'investigation de l'atomisation des nouveaux carburants, et / ou des nouveaux concepts d'injection. L'impact de la viscosité des divers carburants de synthèse, de la tension de surface, est évidemment le point d'attention des projets qui débutent. Une brique restante est le développement de méthodes thermodynamiques permettant la modélisation multi-liquides, pour l'étude de la compositions des carburants de synthèse. Ces travaux font l'objet d'un projet débutant fin 2024, en partenariat avec TOTAL-Energies. Evidemment, l'interaction du spray dans son environnement pressurisé, réactif, éventuellement concentré en CO₂ pour les besoins de la capture, va se poursuivre. Des travaux débutent également avec TOTAL-Energies dans le cadre de la combustion pour les moteurs marins.

Mes propres travaux n'ont aujourd'hui pas concernés la modélisation de la combustion turbulente et de la modélisation de la chimie, car ces sujets sont traités par mes collègues de l'équipe CFD, permettant la prédiction des émissions pour des systèmes réels ([116, 80, 79, 207, 223, 241, 40, 224, 191, 87, 88]).

Cependant, au-delà de la modélisation de l'interface liquide-gaz, mes travaux se tournent aujourd'hui vers la prédiction des émissions d'oxydes d'azote et d'oxydes de soufre en sortie de chambre de combustion selon les carburants considérés, ainsi que vers la prédiction des particules de suie, et leur évolution physico-chimique au sein de la turbine. Ces thèmes nécessitent une interaction forte avec mes collègues combustionnistes et chimistes, afin de marier ces compétences à la modélisation diphasique portée par mes travaux. Ces travaux débute aujourd'hui dans le cadre du projet MOSCITOO, en collaboration avec AIRBUS et SAFRAN, visant à une prédiction des traînées de condensation pour les nouveaux carburants, ainsi qu'à leur prise en compte de façon robuste dans les modèles de climat.

L'analyse de la physico-chimie des particules de suie dans un environnement réactif nécessite une meilleure compréhension des phénomènes à petite (voire très petite) échelle, pour leur modélisation dans un code de calcul LES. Ainsi, mes travaux sur les écoulements diphasiques vont en partie se tourner vers des approches de type DNS. Une collaboration avec le laboratoire IMFT et l'ISAE-Supaéro débute actuellement dans ce sens, pour une meilleur modélisation de l'interaction goutte-flamme et particule-flamme. Ces travaux sont réalisés avec mon collègue Omar Dounia, avec qui nous souhaitons progresser ensemble sur la modélisation de la physico-chimie hétérogène des particules anisotropes, chacun pour des applications différentes. Dans ce cadre, des simulations de dynamique moléculaire sont un outil de travail aujourd'hui considéré.

Enfin, je pense que les méthodes de type "Phase-field", peuvent avoir leur place pour la modélisation dans un environnement réactif d'une goutte ou d'une particule de suie. Si ces méthodes n'ont que peu été abordées par mes travaux pour la modélisation des processus d'atomisation (thèse de Thomas Lafarge), elles retiennent toutefois mon intérêt pour la modélisation de processus physico-chimiques hétérogènes. Notons que pour ce type d'investigations, les méthodes numériques d'ordre élevé évoquées plus haut sont requises.

6.2 Ecoulements en turbomachines

Mes travaux dédiés aux écoulements en turbomachine m'amènent à plusieurs grandes perspectives. La modélisation pariétale est un sujet que je vais continuer à investiguer. Je compte

pousser la philosophie générale étudiée aujourd'hui, c'est à dire tendre vers un modèle "régional", permettant ainsi de lisser la frontière entre les parties modélisées et résolues sur le maillage. Je souhaite aussi pousser l'approche consistant à prédire un profil moyen (par un modèle de paroi usuel), et modéliser une turbulence de sous-maille proche paroi (aujourd'hui apportée par un modèle de fluctuations stochastiques, alimentant une viscosité de sous-maille). Je pense qu'au-delà de la modélisation énergétique de cette turbulence de sous-maille, une modélisation structurelle de cette région pourrait apporter significativement. Ce sujet est d'ailleurs complètement connexe à la modélisation du spray de sous-maille, pour laquelle les aspects topologiques sont importants. Ces travaux sur la modélisation pariétale seront également utiles pour d'autres types de perspectives (couches limite atmosphériques). Les aspects thermiques n'ont à ce jour que peu été investigués par mes travaux, mais sont une perspective évidente, qui vont grandir dès fin 2024 pour le contexte des turbines haute pression, dans le cadre d'une thèse avec SAFRAN Aircraft Engine. A moyen terme, mes travaux de micro physico-chimie détaillés plus haut et mes travaux de modélisation pariétale devraient être amenés à se rejoindre, les problématiques de transfert thermique, cockage, interaction flamme-paroi et réactions catalytiques étant des enjeux grandissant pour les architectures à venir. Le contexte du moteur-fusée, bien que n'étant pas ma priorité en terme d'application, est toutefois un excellent moyen de faire progresser les modèles, étant donnée la complexité de la physique impliquée. Certains de mes travaux sont réalisés en collaboration avec les laboratoires EM2C et l'ISAE-Supaéro sur ce contexte. Bien que l'objectif principal de ces travaux ne soit pas la modélisation pariétale, c'est malgré tout l'un des sujet épineux. Le contexte du spatial est ainsi une très bonne opportunité pour progresser sur ce sujet.

La problématique des opérateurs de moyennes thermodynamiques est un sujet qui a pris un certain temps avant de m'intéresser, mais je suis désormais convaincu qu'il touche au coeur même de la physique, aux liens entre lois de conservation et principes thermodynamiques. L'opération de moyenne réduit l'espace de représentation du système étudié, induit une perte d'information. Etre en mesure de définir les grandes dimensions du système à conserver, celles que l'on peut négliger, pour un certain objectif, est un exercice très important pour une bonne connaissance de son système. La définition d'un rendement ou d'un cycle thermodynamique stationnaire pour un système fortement pulsé (chambre à détonation tournante par exemple) peut ainsi être un exercice peu trivial. Le besoin de prédiction aérothermique peut également induire des opérateurs de moyenne éventuellement différents de ceux propices du besoin de prédiction des performances mécaniques. Progresser sur le sujet des moyennes thermodynamiques est une bonne façon de progresser de façon générale sur la modélisation d'ordre réduit, qui est aussi un besoin critique pour un transfert vers les industriels. Ces travaux vont progresser dès 2024 grâce à un projet financé dans le cadre du CIRT (Consortium Industrie-Recherche en Turbomachines).

Enfin, mon intérêt se porte sur les turbomachines pour la production d'énergie terrestre, dont les nouveaux concepts nécessitent un besoin de recherche pour leur conception, tant du point de vue de la combustion que du point de vue du design de la turbine. Ces travaux sont ainsi actuellement portés par le projet européen HERMES, dédié à la conception d'une turbine terrestre à combustion supercritique de méthanol, ainsi que par le projet européen TRANSITION dédié au développement d'une turbine à gaz avec réinjection de gaz brûlés et concentration en CO₂, dans lesquels je suis impliqué.

6.3 Méthodes numériques

La problématique des méthodes numériques devrait rester un thème de mes activités futures. En particulier, les méthodes d'ordre élevé développées vont être étendues au schéma diffusif, dès

la thèse en cours d'Alexis Boudin. Elles seront en particulier un atout pour le traitement des termes de tension de surface, qui requièrent le calcul d'un terme de courbure, et dont l'erreur numérique induit des courants parasites. Elles seront également importantes pour la modélisation pariétale, la prise en compte de termes sources chimiques éventuellement raides au sein de la couche limite, et la modélisation de la physico-chimie d'une interface liquide gaz, ou solide-gaz pour le cas des particules de suie. Nous envisageons l'extension de nos travaux au schéma numérique Lax-Wendroff, ce qui offrirait aux industriels un gain significatif de précision pour un coût pratiquement équivalent.

Les travaux dédiés à la prise en compte des différents types d'éléments peuvent offrir une perspective très intéressante, qui est le développement de méthodes numériques permettant l'utilisation de maillages octrees, conformes aux parois, qui assureraient une grande performance en terme de coût de calcul. Cette piste sera le prochain objectif des différents des travaux actuellement en cours.

Même si mes travaux n'ont que peu abordé ce thème, les méthodes de type Lattice-Boltzmann présentent également un intérêt pour mes travaux, en particulier pour le thème des écoulements atmosphériques développé ci-dessous, et pour la problématique des méthodes d'apprentissage machine pour la physique (en commençant par les travaux engagés dans le cadre de l'ANR PHLUSIM qui commence, du projet européen INNO4SCALE, et de la collaboration naissante avec l'IRIT). Sans pour autant développer les modèles pour les méthodes LBM, je tâche aujourd'hui de bénéficier de la performance HPC de ces méthodes pour l'apprentissage de modèles. Ces méthodes numériques sont aussi une très bonne excuse pour une collaboration étroite avec l'équipe ALGO du CERFACS ainsi qu'avec l'université d'Erlangen, et également un bon moyen de faire progresser la performance des outils numériques du CERFACS (les codes de calcul, mais aussi les outils de couplages entre réseaux de neurones et codes CFD) sur les cartes GPU et les coeurs CPU.

L'avenir des méthodes numériques doit nécessairement considérer une réduction significative des coûts associés à une précision donnée. Les choix réalisés dans mes futures activités liées aux méthodes numériques devront également pouvoir s'adapter aux architectures des futures machines. L'adaptabilité des codes existants à de nouveaux paradigmes peut s'avérer un travail complexe, qui peut freiner le déploiement sur les nouvelles machines à l'heure où celles-ci sont mises en service. Il est ainsi aujourd'hui nécessaire de considérer des paradigmes de codage les plus versatiles possible.

6.4 Lien avec la plus grande échelle

Je souhaite lier plus étroitement les travaux de recherche liés aux systèmes de production d'énergie à leurs impacts. Il est nécessaire pour cela d'envisager des travaux liés à l'atmosphère. Également peu évoqués dans ce manuscrit, certains de mes travaux sont dédiés aux écoulements éoliens. Aujourd'hui limités à une éolienne isolée, ou quelques éoliennes en tandem, mes travaux futurs vont se tourner vers la méso-échelle. Nos travaux actuels sont dédiés à la modélisation d'ordre réduit des sillages dans un contexte offshore. Ils permettent donc l'évaluation de l'impact d'une, ou plusieurs fermes, sur les modifications locales des échanges entre océan et atmosphère. Ils permettent également le développement d'outils pour la prédiction d'optimisation de formes des fermes, de leur dispositions entre elles. Ce sujet a fait l'objet d'un montage de projet européen qui n'a pas été retenu, mais je compte bien trouver une façon de le financer, en collaboration avec mes collègues de l'équipe GlobC, et les différents associés du CERFACS. Ces travaux devront à terme être liés à la régulation de fréquence du réseau électrique. Notons qu'ils pourraient

également être liés à des choix de politique de régulation des marchés. Il est en effet possible de privilégier le contrôle de certaines fermes "amont", pour que le prix de vente de l'énergie des fermes "aval" soit tel que la production de l'ensemble "amont" plus "aval" soit maximisé (peut-être au détriment du pays "amont", mais pas au détriment de l'ensemble "Europe" par exemple). Ce point rejoint la volonté d'intégrer le système de production dans un environnement complexe évoqué au début de ce chapitre, et pourrait bénéficier des compétences de l'équipe ALGO en résolution de systèmes linéaires.

Comme évoqué plus haut, certains de mes travaux commençant actuellement sont dédiés à l'évolution physico-chimique des particules de suie (projet MOSCITOO). Cette connaissance est évidemment cruciale pour la prédiction des traînées de condensation du secteur aéronautique, dont l'effet sur le forçage radiatif est aussi important que l'effet CO₂ ([134]). Elle permet aussi d'alimenter une thématique à laquelle je souhaite contribuer, qui est l'étude de la physico-chimie des aérosols au sein de l'atmosphère. Ces aérosols jouent un rôle conséquent sur le forçage radiatif, mais induisent surtout de grandes barres d'incertitude dans les études d'impact des différents secteurs. La régulation des émissions d'oxydes de soufre du secteur maritime est à titre d'exemple probablement discutable du point de vue du climat (et non de la santé publique). Depuis le 1er Janvier 2020, ces émissions ne compensent plus les émissions CO₂ du secteur, contribuant probablement à une forte et soudaine augmentation du forçage radiatif de celui-ci ([240, 201, 62, 126]). La capacité de décrire un écoulement diphasique multi-échelle, dans un environnement chimique réactif, sera un bon atout pour ce besoin. Je serai ravi de construire un projet de recherche collaboratif entre l'équipe CFD, le CECI, Météo-France, et d'autres acteurs académiques pour progresser sur ce sujet. Ces perspectives m'amènent naturellement à devoir progresser en modélisation chimique. La prédiction des oxydes de soufre est d'importance tant pour l'activation hydrophyle des particules de suie (pour les traînées de condensation), que pour le forçage radiatif du secteur maritime. Mes travaux débutant en partenariat avec TOTAL-Energies pour la combustion de carburants pour la marine d'un côté, et SAFRAN et AIRBUS de l'autre pour les émissions du secteur aéronautique, sont un bon moyen pour commencer.

Pour compléter ces perspectives, je souhaite à moyen ou long terme pouvoir associer ces travaux sur le lien entre production d'énergie et impacts à des travaux plus multi-disciplinaires, pour alimenter des modélisations mathématiques de systèmes dynamiques, incluant en particulier des considérations socio-économiques ([166, 165, 235, 14]). J'échange aujourd'hui avec un chercheur du Centre de Théorie et de Modélisation de la Biodiversité (CTMB) spécialiste de modélisation de la dynamique des populations. L'Institute for Sustainable Aviation (ISA) sera un bon cadre pour financer des travaux dans cette direction.

Bibliographie

- [1] Shubham Agarwal, Laurent Gicquel, Florent Duchaine, Nicolas Odier, and Jérôme Dombard. Analysis of the unsteady flow field inside a fan-shaped cooling hole predicted by large-eddy simulation. In *Proceedings of ASME Turbo Expo 2020 : Turbomachinery Technical Conference and Exposition Turbine Technical Conference and Exposition*, pages 1–11, 2020.
- [2] Shubham Agarwal, Laurent Gicquel, Florent Duchaine, Nicolas Odier, and Jérôme Dombard. Effect of the in-hole vortical structures on the cylindrical-hole film-cooling effectiveness. In *Proceedings of ASME Turbo Expo 2020 : Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, pages 1–10, 2020.
- [3] Shubham Agarwal, Laurent Y.M. Gicquel, Florent Duchaine, Nicolas Odier, and Jerome Dombard. Analysis of the Unsteady Flow Field Inside a Fan-Shaped Cooling Hole Predicted by Large-Eddy Simulation. *Journal of Turbomachinery*, 143(March) :1–11, 2021.
- [4] Shubham Agarwal, Gicquel L.Y.M, Florent Duchaine, Nicolas Odier, Jérôme Dombard, Damien Bonneau, and Michel Slusarz. Autonomous large eddy simulations setup for cooling hole shape optimization. In *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, pages 1–11, Virtual, Online, 2021.
- [5] Shubham Agarwal, Nicolas Odier, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Damien Bonneau, and Michel Slusarz. Efficient Global Optimization of a laidback fan-shaped cooling hole using Large-Eddy Simulation. *Applied Thermal Engineering*, 236(May 2023), 2024.
- [6] D M Anderson, G B McFadden, and A.A. Wheeler. Diffuse-Interface Methods in fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30(6018) :139–165, 1998.
- [7] Leonid K. Antanovskii. A phase field model of capillarity. *Physics of Fluids*, 7(4) :747–753, 1995.
- [8] S. V. Apte, M. Gorokhovski, and P. Moin. LES of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 29(9) :1503–1522, 2003.
- [9] Carlos Perez Arroyo, Jerome Dombard, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Nicolas Odier, Gorka Exilard, Stephane Richard, Nicolas Buffaz, and Jacques Demolis. Large-eddy simulation of an integrated high-pressure compressor and combustion chamber of a typical turbine engine architecture. In *Proceedings of the ASME Turbo Expo*, volume 2C-2020, pages 1–10, 2020.
- [10] T. Arts, M. Lambert de Rouvroit, and A.W Rutherford. Aero-thermal investigation of a highly loaded transonic linear turbine vane cascade. Technical Report September, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1990.

- [11] C Bailly, X Gloerfelt, and C Bogey. Jet Exhaust Aerodynamics & Noise. Technical report, LMFA, Ecole Centrale de Lyon, UMR CNRS 5509, Ecully, France, 2002.
- [12] Michele Bardi, Raul Payri, Louis Marie Malbec, Gilles Bruneaux, Lyle M. Pickett, Julien Manin, Tim Bazyn, and Caroline Genzale. Engine combustion network : Comparison of spray development, vaporization, and combustion in different combustion vessels. *Atomization and Sprays*, 22(10) :807–842, 2012.
- [13] Peter W. Battaglia, Jessica B. Hamrick, Victor Bapst, Alvaro Sanchez-Gonzalez, Vinicius Zambaldi, Mateusz Malinowski, Andrea Tacchetti, David Raposo, Adam Santoro, Ryan Faulkner, Caglar Gulcehre, Francis Song, Andrew Ballard, Justin Gilmer, George Dahl, Ashish Vaswani, Kelsey Allen, Charles Nash, Victoria Langston, Chris Dyer, Nicolas Heess, Daan Wierstra, Pushmeet Kohli, Matt Botvinick, Oriol Vinyals, Yujia Li, and Razvan Pascanu. Relational inductive biases, deep learning, and graph networks. pages 1–40, 2018.
- [14] Brian Beckage, Katherine Lacasse, Jonathan M. Winter, Louis J. Gross, Nina Fefferman, Forrest M. Hoffman, Sara S. Metcalf, Travis Franck, Eric Carr, Asim Zia, and Ann Kinzig. The Earth has humans, so why don't our climate models? *Climatic Change*, 163(1) :181–188, 2020.
- [15] Fares Ben Rayana. *Contribution à l'étude des instabilités interfaciales liquide-gaz en atomisation assistée et tailles des gouttes*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2007.
- [16] Manuel Bernard, Ghislain Lartigue, Guillaume Balarac, Vincent Moureau, and Guillaume Puigt. A framework to perform high-order deconvolution for finite-volume method on simplicial meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 92(11) :1551–1583, 2020.
- [17] Umesh Bhayaraju and Christoph Hassa. Planar liquid sheet breakup of prefilming and nonprefilming atomizers at elevated pressures. *Atomization and Sprays*, 19(12) :1147–1169, 2009.
- [18] Aurélien Bienner, Xavier Gloerfelt, and Paola Cinnella. Leading-Edge Effects on Freestream Turbulence Induced Transition of an Organic Vapor. *Flow, Turbulence and Combustion*, (October), 2023.
- [19] T. Biesinger, C. Cornelius, C. Rube, G. Schmid, A. Braune, R. Campregher, P. G. Godin, and L. Zori. Unsteady CFD methods in a commercial solver for turbomachinery applications. In *Proceedings of ASME Turbo Expo 2010 : Power for Land, Sea and Air*, pages 1–12, Glasgow, UK, 2010.
- [20] R. Bizzari, D. Lahbib, A. Dauplain, F. Duchaine, L. Y.M. Gicquel, and F. Nicoud. A Thickened-Hole Model for Large Eddy Simulations over Multiperforated Liners. *Flow, Turbulence and Combustion*, 101(3) :705–717, 2018.
- [21] S. Blanchard, N. Odier, L. Gicquel, C. Cuenot, and F. Nicoud. Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation Stochastic forcing for sub-grid scale models in wall-modeled large-eddy simulation. *Phys. Fluids*, 33(July) :1–12, 2021.

- [22] P. Boivin, M. A. Cannac, and O. Le Métayer. A thermodynamic closure for the simulation of multiphase reactive flows. *International Journal of Thermal Sciences*, 137 :640–649, 2019.
- [23] P. Boivin, C. Jiménez, A. L. Sánchez, and F. A. Williams. An explicit reduced mechanism for H₂-air combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :517–523, 2011.
- [24] Sanjeeb T Bose and George Ilhwan Park. Wall-Modeled Large-Eddy Simulation for Complex Turbulent Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50(1) :535–561, 2018.
- [25] Elie Bou-Zeid, Charles Meneveau, and Marc B. Parlange. Large-eddy simulation of neutral atmospheric boundary layer flow over heterogeneous surfaces : Blending height and effective surface roughness. *Water Resources Research*, 40(2) :1–18, 2004.
- [26] M. Boxho, M. Rasquin, T. Toulorge, G. Dergham, G. Winckelmans, and K. Hillewaert. Analysis of Space-Time Correlations to Support the Development of Wall-Modeled LES. *Flow, Turbulence and Combustion*, 109(4) :1081–1109, 2022.
- [27] Cyril Bozonnet, Jean Philippe Matas, Guillaume Balarac, and Olivier Desjardins. Stability of an air-water mixing layer : Focus on the confinement effect. *Journal of Fluid Mechanics*, 933(February), 2022.
- [28] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
- [29] M. A. Brend, A. G. Barker, and J. F. Carrotte. Measurements of fuel thickness for prefilming atomisers at elevated pressure. *International Journal of Multiphase Flow*, 131, 2020.
- [30] Clifford A. Brown and Daniel L. Sutliff. DGEN Aeropropulsion Research Turbofan (DART) : Lossless Projection of Measured Engine Noise Spectra to a 1-Foot-Radius Arc. In *2018 AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, number June, pages 24–29, 2018.
- [31] W Cabot and P Moin. Approximate wall boundary conditions in the large-eddy simulation of high Reynolds number flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 63 :269–291, 2000.
- [32] Olivier Cabrit and Franck Nicoud. Direct simulations for wall modeling of multicomponent reacting compressible turbulent flows. *Physics of Fluids*, 21(5), 2009.
- [33] John W. Cahn and John E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *The Journal of Chemical Physics*, 28(2) :258–267, 1958.
- [34] Hervé Carentz. *Etude de la pulvérisation d'une nappe liquide mince*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2000.
- [35] Julien Carmona. *Modélisation des phénomènes diphasiques dans des injecteurs aéronautiques de type Airblast*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2021.
- [36] Julien Carmona, Nicolas Odier, Olivier Desjardins, Antony Misdariis, Benedicte Cuenot, and Alain Cayre. A comparative study of direct numerical simulation and experimental results on a prefilming airblast atomization configuration. *Atomization and Sprays*, 31(8) :9–32, 2021.

- [37] Julien Carmona, Nicholas C. W. Treleaven, Nicolas Odier, and Bénédicte Cuenot. Lagrangian Simulation Methodology for Large-Eddy Simulations of Prefilming Air-Blast Injectors. *Journal of Propulsion and Power*, pages 1–19, 2023.
- [38] J. S. Carullo, S. Nasir, R. D. Cress, W. F. Ng, K. A. Thole, L. J. Zhang, and H. K. Moon. The Effects of Freestream Turbulence, Turbulence Length Scale, and Exit Reynolds Number on Turbine Blade Heat Transfer in a Transonic Cascade. *Journal of Turbomachinery*, 133(1) :011030, 2011.
- [39] I. S. Carvalho, M.V. Heitor, and Santos D. Liquid film desintegration regimes and proposed correlations. *Int. J. Multiphase Flow*, 28 :773–789, 2002.
- [40] Quentin Cazères, Perrine Pepiot, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. A fully automatic procedure for the analytical reduction of chemical kinetics mechanisms for Computational Fluid Dynamics applications. *Fuel*, 303(December 2020), 2021.
- [41] S. H. Chan, Y. S. Wang, and C. C. Tan. The effect of mass transfer on Kelvin-Helmholtz instability at the gas-liquid interface of a sonic reacting and non-reacting gas jet submerged in a liquid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 37(7) :1123–1132, 1994.
- [42] P. Chassaing, R.A. Antonia, F. Anselmet, L. Joly, and S. Sarkar. *Variable Density Fluid Turbulence*. Springer Dordrecht, 2002.
- [43] G. Chaussonnet, S. Gepperth, S. Holz, R. Koch, and H. J. Bauer. Influence of the ambient pressure on the liquid accumulation and on the primary spray in prefilming airblast atomization. *International Journal of Multiphase Flow*, 125 :103229, 2020.
- [44] G. Chaussonnet, O. Vermorel, E. Riber, and B. Cuenot. A new phenomenological model to predict drop size distribution in Large-Eddy Simulations of airblast atomizers. *International Journal of Multiphase Flow*, 80 :29–42, 2016.
- [45] Jen Ping Chen and Jack Barter. Comparison of time-accurate calculations for the unsteady interaction in turbomachinery stage. *34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 1998.
- [46] Alexandre Chiapolino, Pierre Boivin, and Richard Saurel. A simple and fast phase transition relaxation solver for compressible multicomponent two-phase flows. *Computers and Fluids*, 150 :31–45, 2017.
- [47] Robert Chiodi and Olivier Desjardins. A Reformulation of the Conservative Level Set Reinitialization Equation for Accurate and Robust Simulation of Complex Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 343(April) :186–200, 2017.
- [48] Junggho Choi, Shuye Teng, Je-Chin Han, and Foluso Ladeinde. Effect of free-stream turbulence on turbine blade heat transfer and pressure coefficients in low Reynolds number flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(14-16) :3441–3452, 2004.
- [49] Ting Horng Chung, Mohammad Ajlan, Lloyd L. Lee, and Kenneth E Starling. Generalized Multiparameter Correlation for Nonpolar and Polar Fluid Transport Properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 27(4) :671–679, 1988.

- [50] Medhi Cizeron, L.Y.M. Gicquel, Florent Duchaine, Nicolas Odier, and Franck Nicoud. Implementation of a TBLE-based wall model with pressure gradient in a massively parallel LES solver. In *ASME Turbo Expo 2024 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–10, 2024.
- [51] Olivier Colin and Michael Rudgyard. Development of High-Order Taylor–Galerkin Schemes for LES. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :338–371, 2000.
- [52] P. I. Crumpton, J. A. Mackenzie, and K. W. Morton. Cell vertex algorithms for the compressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 109(1) :1–15, 1993.
- [53] J. Dabas. Développement d’une condition aux limites pour la simulation numérique d’écoulements en turbomachine. Working note, Ecole Normale Supérieure Paris-Saclay, Cerfacs Toulouse, 7 2019.
- [54] Guillaume Daviller, Maxence Brebion, Pradip Xavier, Gabriel Staffelbach, Jens Dominik Müller, and Thierry Poinso. A Mesh Adaptation Strategy to Predict Pressure Losses in LES of Swirled Flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 99(1) :93–118, 2017.
- [55] J. de Laborderie, F. Duchaine, L. Gicquel, O. Vermorel, G. Wang, and S. Moreau. Numerical analysis of a high-order unstructured overset grid method for compressible LES of turbomachinery. *Journal of Computational Physics*, 363 :371–398, 2018.
- [56] Jérôme De Laborderie, Florent Duchaine, and Laurent Gicquel. ANALYSIS OF A HIGH-PRESSURE MULTISTAGE AXIAL COMPRESSOR AT OFF-DESIGN CONDITIONS WITH COARSE LARGE EDDY SIMULATIONS. In *12th European Conference on Turbomachinery Fluid Dynamics and Thermodynamics, ETC 2017*, pages 1–13, Stockholm, Sweden, 2017.
- [57] Jerome de Laborderie, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, and Stephane Moreau. Wall-Modeled Large-Eddy Simulations of a Multistage High-Pressure Compressor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 104(2-3) :725–751, 2020.
- [58] Jerome de Laborderie, Florent Duchaine, Olivier Vermorel, and Laurent Y.M. Gicquel. APPLICATION OF AN OVERSET GRID METHOD TO THE LARGE EDDY SIMULATION OF A HIGH-SPEED MULTISTAGE AXIAL COMPRESSOR. In *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2016 : Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, Seoul, Korea, 2016.
- [59] Sébastien Deck, Nicolas Renard, Romain Laraufie, and Pierre Élie Weiss. Large-scale contribution to mean wall shear stress in high-Reynolds-number flat-plate boundary layers up to $Re\theta=13650$. *Journal of Fluid Mechanics*, 743 :202–248, 2014.
- [60] Antoine Delon, Alain Cartellier, and Jean-Philippe Matas. Flapping instability of a liquid jet. *Physical Review Fluids*, 00(0) :3900, 2018.
- [61] Olivier Desjardins, Guillaume Blanquart, Guillaume Balarac, and Heinz Pitsch. High order conservative finite difference scheme for variable density low Mach number turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 227(15) :7125–7159, 2008.

- [62] Michael S. Diamond. Detection of large-scale cloud microphysical changes within a major shipping corridor after implementation of the International Maritime Organization 2020 fuel sulfur regulations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 23(14) :8259–8269, 2023.
- [63] Jérôme Dombard, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Gabriel Staffelbach, Nicolas Buffaz, and Isabelle Trébinjac. Large Eddy Simulations in a Transonic Centrifugal Compressor. In *ASME Turbo Expo 2018 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–10, 2018.
- [64] Jérôme Dombard, Florent Duchaine, Laurent Y.M. Gicquel, Nicolas Odier, Kevin Leroy, Nicolas Buffaz, Sebastien Le-Guyarder, Jacques Démolis, Stéphane Richard, and Thomas Grosnickel. Evaluation of the capacity of RANS/URANS/LES in predicting the Performance of a High-Pressure Turbine : Effect of Load and off design condition. In *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2020*, pages 1–12, Virtual, Online, 2020.
- [65] Patricia Domingo-Alvarez, Pierre Bénard, Vincent Moureau, Ghislain Lartigue, and Frédéric Grisch. Impact of Spray Droplet Distribution on the Performances of a Kerosene Lean/Premixed Injector. *Flow, Turbulence and Combustion*, 104(2-3) :421–450, 2020.
- [66] Jean Donea. A Taylor–Galerkin method for convective transport problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20(1) :101–119, 1984.
- [67] Christophe Dumouchel. On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams. *Experiments in Fluids*, 45(3) :371–422, 2008.
- [68] Christophe Dumouchel, Nicolas Leboucher, and Denis Lisiecki. Cavitation and primary atomization in real injectors at low injection pressure condition. *Experiments in Fluids*, 54(6) :1–17, 2013.
- [69] C. Duprat, G. Balarac, O. Métais, P. M. Congedo, and O. Brugière. A wall-layer model for large-eddy simulations of turbulent flows with/out pressure gradient. *Physics of Fluids*, 23(1), 2011.
- [70] D. Dupuy, N. Odier, and C. Lapeyre. Data-driven wall modeling for turbulent separated flows. *Journal of Computational Physics*, 487 :112173, 2023.
- [71] D Dupuy, A Perrot, N Odier, L Y M Gicquel, and F Duchaine. Boundary-condition models of film-cooling holes for large-eddy simulation of turbine vanes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 166 :120763, 2021.
- [72] Dorian Dupuy, Laurent Gicquel, Nicolas Odier, Florent Duchaine, and Tony Arts. Analysis of the effect of intermittency in a high-pressure turbine blade Analysis of the effect of intermittency in a high-pressure turbine blade. *Physics of Fluids*, 095101(September) :1–19, 2020.
- [73] Dorian Dupuy, Nicolas Odier, and Corentin Lapeyre. Using graph neural networks for wall modelling in compressible anisothermal flows (*in revision*). *Data-Centric Engineering*, XXXX :XXXX, XXXX 2024.
- [74] Dorian Dupuy, Nicolas Odier, Corentin Lapeyre, and Dimitrios Papadogiannis. Modeling the wall shear stress in large-eddy simulation using graph neural networks. *Data-Centric Engineering*, 4 :e7, mar 2023.

- [75] J. I. Erdos, E. Alzner, and W. McNally. Numerical Solution of Periodic Transonic Flow through a Fan Stage. *AIAA Journal*, 15(11) :1559–1568, 1977.
- [76] G. M. Faeth, L. P. Hsiang, and P. K. Wu. Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of Multiphase Flow*, 21 :99–127, 1995.
- [77] Abbas Fakhari, Travis Mitchell, Christopher Leonardi, and Diogo Bolster. Improved locality of the phase-field lattice-Boltzmann model for immiscible fluids at high density ratios. *Physical Review E*, 96(5), 2017.
- [78] N Fdida, L Vingert, G Ordonneau, and S Petitot. Coupling high-speed imaging diagnostics to study a LOX / GH2 flame in a high-pressure rocket combustor. In *5th European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, pages 1–13, 2013.
- [79] Anne Felden, Lucas Esclapez, Eleonore Riber, Bénédicte Cuenot, and Hai Wang. Including real fuel chemistry in LES of turbulent spray combustion. *Combustion and Flame*, 193 :397–416, 2018.
- [80] Anne Felden, Eleonore Riber, and Benedicte Cuenot. Impact of direct integration of Analytically Reduced Chemistry in LES of a sooting swirled non-premixed combustor. *Combustion and Flame*, 191 :270–286, 2018.
- [81] V. G. Fernandez, P Berthoumie, and G Lavergne. Liquid sheet desintegration at high pressure : An experimental approach. *C.R Mecanique*, 337 :481–491, 2009.
- [82] M. Fiore, M. Daroukh, and M. Montagnac. Loss assessment of a counter rotating open rotor using URANS/LES with phase-lagged assumption. *Computers and Fluids*, page 105025, 2021.
- [83] Maxime Fiore and Romain Biolchini. Numerical simulation of a counter-rotative open rotor using phase-lagged conditions : Initial validation on a single rotor case. *Journal of Turbomachinery*, 142(12), 2020.
- [84] Antoine Fourmaux. Assesment of a low storage technique for multi-stage turbomachinery Navier-Stokes computations. In *ASME Winter Annual Meeting*, pages 2–10, Chicago, IL (USA), 1994.
- [85] Jochen Fröhlich, Christopher P. Mellen, Wolfgang Rodi, Lionel Temmerman, and Michael A. Leschziner. Highly resolved large-eddy simulation of separated flow in a channel with streamwise periodic constrictions. *Journal of Fluid Mechanics*, 526 :19–66, 2005.
- [86] D. Fuster, J.-P. Matas, S. Marty, S. Popinet, J. Hoepffner, A. Cartellier, and S. Zaleski. Instability regimes in the primary breakup region of planar coflowing sheets. *Journal of Fluid Mechanics*, 736 :150–176, 2013.
- [87] Lucien Gallen, Anne Felden, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. Lagrangian tracking of soot particles in les of gas turbines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4) :5429–5436, 2018.
- [88] Lucien Gallen, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. Investigation of soot formation in turbulent spray flame burning real fuel. *Combustion and Flame*, 258(12) :112621, 2023.

- [89] Martin Geier, Abbas Fakhari, and Taehun Lee. Conservative phase-field lattice Boltzmann model for interface tracking equation. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 91(6) :1–11, 2015.
- [90] A. S. Ghate, A. Towne, and S. K. Lele. Broadband reconstruction of inhomogeneous turbulence using spectral proper orthogonal decomposition and Gabor modes. *Journal of Fluid Mechanics*, pages 1–13, 2020.
- [91] Alexis Giauque, Dominik Schuster, and Christophe Corre. HIFI investigation of a real gas annular cascade. *Physics of Fluids*, 35(12) :1–31, 2023.
- [92] T. Gioud, T. Laroche, T. Schmitt, B. Cuenot, and N. Odier. An Eulerian-Lagrangian framework for spray prediction in a Large-Eddy Simulations context. (Under review for Computers and Fluids).
- [93] T. Gioud, N. Odier, B. Cuenot, T. Schmitt, D. Saucereau, and M. Martin-Benito. Injection modelling in LOX/GCH₄ rocket engines with a diffuse interface method. In *8th edition of the 3AF International Conference on Space Propulsion*, Estoril, Portugal, 2022.
- [94] Thibault Gioud. *Large Eddy Simulations for atomization in subcritical liquid rocket engines*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2024.
- [95] M. Gorokhovski. The stochastic Lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays. *Atomization and Sprays*, 11(5) :505–519, 2001.
- [96] M. A. Gorokhovski and V. L. Saveliev. Analyses of Kolmogorov’s model of breakup and its application into Lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization. *Physics of Fluids*, 15(1) :184–192, 2003.
- [97] Clovis Gout, Jérôme Dombard, Florent Duchaine, Laurent Y.M. Gicquel, and Nicolas Odier. Assessment of profile transformation for turbomachinery large eddy simulations - from academic to industrial applications. In *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2021, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, pages 1–13, Virtual, Online, 2021.
- [98] Nicolas Guézennec and Thierry Poinsot. Acoustically Nonreflecting and Reflecting Boundary Conditions for Vorticity Injection in Compressible Solvers. *AIAA Journal*, 47(7) :1709–1722, 2009.
- [99] D. R. Guildenbecher, C. López-Rivera, and P. E. Sojka. Secondary atomization. *Experiments in Fluids*, 46(3) :371–402, 2009.
- [100] Tongqing Guo, Di Zhou, and Zhiliang Lu. A double-passage shape correction method for predictions of unsteady flow and aeroelasticity in turbomachinery. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 9(4) :839–860, 2017.
- [101] Gregory Hannebique, Patricia Sierra, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. Large eddy simulation of reactive two-phase flow in an aeronautical multipoint burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, 90(2) :449–469, 2013.
- [102] M. Harnieh, M. Thomas, R. Bizzari, J. Dombard, F. Duchaine, and L. Gicquel. Assessment of a Coolant Injection Model on Cooled High-Pressure Vanes with Large-Eddy Simulation. *Flow, Turbulence and Combustion*, 104(2-3) :643–672, 2020.

- [103] J.E. Hartsel. Prediction of effects of mass-transfer cooling on the blade-row efficiency of turbine airfoils. In *AIAA 10th Aerospace sciences meeting*, pages 1–7, San Diego, California, 1972.
- [104] Charles Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows : The fundamentals of computational fluid dynamics*. Elsevier, 2007.
- [105] Joseph O Hirschfelder, Charles F. Curtiss, and R. Byron Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, Inc., 1954.
- [106] Moogeun Hong. *Atomisation et mélange dans les jets coaxiaux liquide-gaz*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2003.
- [107] J. H. Horlock and Leonardo Torbidoni. Calculations of cooled turbine efficiency. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 130(1) :1–5, 2008.
- [108] D. Y. Hsieh. Interfacial stability with mass and heat transfer. *Physics of Fluids*, 21(5) :745–748, 1978.
- [109] Yongyun Hwang. Near-wall turbulent fluctuations in the absence of wide outer motions. *Journal of Fluid Mechanics*, 723 :264–288, 2013.
- [110] Yongyun Hwang and Myoungkyu Lee. The mean logarithm emerges with self-similar energy balance. *Journal of Fluid Mechanics*, 903(October), 2020.
- [111] David Jacqmin. Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling. *Journal of Computational Physics*, 155(1) :96–127, 1999.
- [112] F. Jaegle, J. M. Senoner, M. García, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, and T. Poinso. Eulerian and Lagrangian spray simulations of an aeronautical multipoint injector. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2099–2107, 2011.
- [113] Felix Jaegle, Olivier Cabrit, Simon Mendez, and Thierry Poinso. Implementation methods of wall functions in cell-vertex numerical solvers. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85(2) :245–272, 2010.
- [114] Mohsen Jahanmiri. Boundary Layer Transitional Flow in Gas Turbines. Technical report, Dpt. Appl. Mech., Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 2011.
- [115] Didier Jamet, David Torres, and J. U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *Journal of Computational Physics*, 182(1) :262–276, 2002.
- [116] T. Jaravel, E. Riber, B. Cuenot, and G. Bulat. Large Eddy Simulation of an industrial gas turbine combustor using reduced chemistry with accurate pollutant prediction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(3) :3817–3825, 2017.
- [117] A. K. Jasuja. Airblast atomization of alternative liquid petroleum fuels under high pressure conditions. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 103(3) :514–518, 1981.
- [118] Lei Yong Jiang and Ian Campbell. Reynolds analogy in combustor modeling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(5-6) :1251–1263, 2008.

- [119] Lei Yong Jiang and Ian Campbell. Prandtl/Schmidt number effect on temperature distribution in a generic combustor. *International Journal of Thermal Sciences*, 48(2) :322–330, 2009.
- [120] Lei Yong Jiang and Ian Campbell. Turbulent scalar transfer modeling in reacting flows. In P.R. Lang and F.S. Lombargo, editors, *Atmospheric Turbulence, Meteorological Modeling and Aerodynamics*, chapter 5. Nova Science Publishers, 2009.
- [121] W. P. Jones, A. J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combustion and Flame*, 161(1) :222–239, 2014.
- [122] Korteweg D J. Sur la forme que prennent les équations du mouvements des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. *Archives Neerlandaises des Sciences exactes et Naturelles*, 11 :1–24, 1901.
- [123] C. Koupper, L. Gicquel, F. Duchaine, and G. Bonneau. Advanced Combustor Exit Plane Temperature Diagnostics Based on Large Eddy Simulations : Going Further than the Radial Temperature Distribution Factor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 95(1) :79–96, 2015.
- [124] Charlie Koupper, Gianluca Caciolli, Laurent Gicquel, Florent Duchaine, Guillaume Bonneau, Lorenzo Tarchi, and Bruno Facchini. Development of an Engine Representative Combustor Simulator Dedicated to Hot Streak Generation. *Journal of Turbomachinery*, 136(11) :111007, 2014.
- [125] Robert H Kraichnan. Diffusion by a Random Velocity Field. *Physics of Fluids*, 13(1) :22, 1970.
- [126] Yuki Kusakabe and Toshihiko Takemura. Formation of the North Atlantic Warming Hole by reducing anthropogenic sulphate aerosols. *Scientific Reports*, 13(1) :1–9, 2023.
- [127] T Lafarge, P Boivin, N Odier, and B Cuenot. Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows Improved color-gradient method for lattice Boltzmann modeling of two-phase flows. *Physics of Fluids*, 33(8) :1–21, 2021.
- [128] Thomas Lafarge. *Lattice Boltzmann method for multiphase flows*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2022.
- [129] N. Lamarque. Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère. *PhD Thesis, Université de Toulouse*, 2007.
- [130] C. Larricq-Fourcade. *Etude de la pulvérisation assistée en air d'une nappe liquide et influence d'un vent ionique sur les instabilités hydrodynamiques*. PhD thesis, ENSAE Toulouse, 2006.
- [131] Peter Lax and Burton Wendroff. Systems of conservation laws. Technical report, 1960.
- [132] Peter D. Lax and Burton Wendroff. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 17(3) :381–398, 1964.

- [133] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Élaboration Des Lois D'État D'Un Liquide Et De Sa Vapeur Pour Les Modèles D'Écoulements Diphasiques. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(3) :265–276, 2004.
- [134] D. S. Lee, D. W. Fahey, A. Skowron, M. R. Allen, U. Burkhardt, Q. Chen, S. J. Doherty, S. Freeman, P. M. Forster, J. Fuglestedt, A. Gettelman, R. R. De León, L. L. Lim, M. T. Lund, R. J. Millar, B. Owen, J. E. Penner, G. Pitari, M. J. Prather, R. Sausen, and L. J. Wilcox. The contribution of global aviation to anthropogenic climate forcing for 2000 to 2018. *Atmospheric Environment*, 244(July 2020), 2021.
- [135] Arthur H. Lefebvre. Airblast atomization. *Progress in Energy and Combustion Science*, 6(3) :233–261, 1980.
- [136] Arthur H. Lefebvre and Vincent G. McDonnell. *Atomization and Sprays, Second Edition*. CRC Press, 2017.
- [137] H. D. Li and L. He. Single-passage solution of three-dimensional unsteady flows in a transonic fan rotor. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A : Journal of Power and Energy*, 215(6) :653–662, 2001.
- [138] E. Lo Schiavo, D. Laera, E. Riber, L. Gicquel, and T. Poinsot. Effects of liquid fuel/wall interaction on thermoacoustic instabilities in swirling spray flames. *Combustion and Flame*, 219 :86–101, 2020.
- [139] Guido Lodato, Pascale Domingo, and Luc Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 227(10) :5105–5143, 2008.
- [140] Rainald Löhner. Towards overcoming the LES crisis. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 8562, 2019.
- [141] Kun Luo, Yongcheng Huang, Yaoting Li, and Chenglong Tang. A mixed primary atomization model with quantification of aerodynamic, turbulence and cavitation effects. *International Journal of Multiphase Flow*, 170(July 2023) :104650, 2024.
- [142] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498 :73–111, jan 2004.
- [143] Benjamin Martin. *Méthodes numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles du couplage entre plusieurs composants d'une turbomachine*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2021.
- [144] Benjamin Martin, Lionel Cheng, Michael Rudgyard, and Nicolas Odier. A new class of Taylor-Petrov-Galerkin schemes using polynomial reconstruction. *Submitted to Journal of Computational Physics*, XX(X) :X–X, 2024.
- [145] Benjamin Martin, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, and Nicolas Odier. Generation of Realistic Boundary Conditions at the Combustion Chamber / Turbine Interface Using Large-Eddy Simulation. *Energies*, 14(12) :1–23, 2021.

- [146] Benjamin Martin, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Nicolas Odier, and Jérôme Dombard. Accurate Inlet Boundary Conditions to Capture Combustion Chamber and Turbine Coupling With Large-Eddy Simulation. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 144(2) :1–12, 2022.
- [147] Benjamin Martin, Florent Duchaine, L.Y.M Gicquel, Nicolas Odier, Jérôme Dombard, Damien Bonneau, and Michel Slusarz. Wall-resolved Large-Eddy Simulation of the LS89 cascade using an explicit local time-stepping method. In *ASME Turbo Expo 2020 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, 2020.
- [148] Ivan Marusic and Jason P Monty. Attached Eddy Model of Wall-Turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 51(July 2018) :1–26, 2019.
- [149] A. R. Masri. Turbulent Combustion of Sprays : From Dilute to Dense. *Combustion Science and Technology*, 188(10) :1619–1639, 2016.
- [150] C. Matar, P. Cinnella, X. Gloerfelt, S. Sundermeier, L. Hake, and S. aus der Wiesche. Numerical Investigation of the Transonic Non-ideal Gas Flow Around a Circular Cylinder at High Reynolds Number. *ERCOFTAC Series*, 31(October) :164–169, 2024.
- [151] Jean Philippe Matas, Sylvain Marty, and Alain Cartellier. Experimental and analytical study of the shear instability of a gas-liquid mixing layer. *Physics of Fluids*, 23(9), 2011.
- [152] Jean Philippe Matas, Sylvain Marty, Mohamed Seydou Dem, and Alain Cartellier. Influence of Gas Turbulence on the Instability of an Air-Water Mixing Layer. *Physical Review Letters*, 115(7), aug 2015.
- [153] Derek Micallef, Dirk Witteck, Alexander Wiedermann, David Kluß, and Ronald Mailach. Three-dimensional viscous flutter analyses of a turbine cascade in subsonic and transonic flows. *Proceedings of the ASME Turbo Expo*, 7(PARTS A AND B) :1441–1451, 2012.
- [154] Vittorio Michelassi, Li-Wei Chen, Richard Pichler, and Richard D. Sandberg. Compressible Direct Numerical Simulation of Low-Pressure Turbines—Part II : Effect of Inflow Disturbances. *Journal of Turbomachinery*, 137(7) :071005, 2015.
- [155] K. Mohanamurthy, L. Drozda, L. Cheng, C. Lapeyre, G. Daviller, Y. Realpe, A. Adler, G. Staffelbach, and T. Poinso. Learning an Optimised Stable Taylor-Galerkin Convection Scheme Based on a Local Spectral Model for the Numerical Error Dynamics. 2023. submitted.
- [156] Mark V. Morkovin. Effects of compressibility on turbulent flows. 1962.
- [157] Gaëlle Mouret. *Adaptation of phase-lagged boundary conditions to Large-Eddy Simulations in turbomachinery configurations*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2016.
- [158] Soufiane Mrini. Exploration of the potential of self-supervised learning for numerical fluid dynamics substitution modeling. Working note, ISAE-Supaero, CERFACS, 10 2023.
- [159] A. R. Nayak and B. B. Chakraborty. Kelvin-Helmholtz stability with mass and heat transfer. *Physics of Fluids*, 27(8) :1937–1941, 1984.

- [160] Davy Nayigizente. *Unsteady simulations of liquid/gas interfaces in real gas flows using the second gradient theory*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2021.
- [161] Minh Nguyen, Jean François Boussuge, Pierre Sagaut, and Juan Carlos Larroya-Huguet. Large eddy simulation of a row of impinging jets with upstream crossflow using the lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 212, 2023.
- [162] R. H. Ni. A multiple grid scheme for solving the Euler equations. *AIAA Journal*, 20(11) :1565–1571, 1981.
- [163] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [164] Franck Nicoud, Hubert Baya Toda, Olivier Cabrit, Sanjeeb Bose, and Jungil Lee. Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 23(8), 2011.
- [165] Alexandros Nikas, Haris Doukas, and Andreas Papandreou. Understanding risks and uncertainties in energy and climate policy : Multidisciplinary methods and tools for a low carbon society. In *A Detailed Overview and Consistent Classification of Climate-Economy Models*, pages 1–54. 2019.
- [166] William Nordhaus. *Integrated economic and climate modeling*, volume 1. Elsevier, 2013.
- [167] Nicolas Odier, Guillaume Balarac, and Christophe Corre. Numerical analysis of the flapping mechanism for a two-phase coaxial jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 106 :164–178, 2018.
- [168] Nicolas Odier, Guillaume Balarac, Christophe Corre, and Vincent Moureau. Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream. *International Journal of Multiphase Flow*, 77 :196–208, dec 2015.
- [169] Nicolas Odier, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Guillaume Dufour, and Nicolás García Rosa. COMPARISON OF LES AND RANS PREDICTIONS WITH EXPERIMENTAL RESULTS OF THE FAN OF A TURBOFAN. In *12th European Turbomachinery Conference*, pages 1–14, Stockholm, Sweden, 2017.
- [170] Nicolas Odier, Thierry Poinsot, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, and Stéphane Moreau. Inlet and outlet characteristics boundary conditions for large eddy simulations of turbomachinery. In *ASME Turbo Expo 2019 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–11, Phoenix, AZ, USA, 2019.
- [171] Nicolas Odier, Marlène Sanjosé, Laurent Gicquel, Thierry Poinsot, Stéphane Moreau, and Florent Duchaine. A characteristic inlet boundary condition for compressible, turbulent, multispecies turbomachinery flows. *Computers & Fluids*, 178 :41–55, jan 2019.
- [172] Nicolas Odier, Adrien Thacker, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Gabriel Staffelbach, Nicolás García Rosa, Guillaume Dufour, and Jens-Dominik Mueller. Evaluation of Integral Turbulence Scale Through the Fan Stage of A Turbofan Using Hot Wire Anemometry and Large Eddy Simulation. In *ASME Turbo Expo 2018 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–13, Oslo, Norway, 2018.

- [173] Nicolas Odier, Adrien Thacker, Maël Harnieh, Gabriel Staffelbach, Laurent Gicquel, Florent Duchaine, Nicolás García Rosa, and Jens-Dominik Müller. A mesh adaptation strategy for complex wall-modeled turbomachinery LES. *Computers & Fluids*, 214 :104766, 2020.
- [174] Nora Okong’o and Josette Bellan. Consistent Boundary Conditions for Multicomponent Real Gas Mixtures Based on Characteristic Waves. *Journal of Computational Physics*, 176(2) :330–344, 2002.
- [175] Carl Ollivier-Gooch and Michael Van Altena. A High-Order-Accurate Unstructured Mesh Finite-Volume Scheme for the Advection–Diffusion Equation. *Journal of Computational Physics*, 181(2) :729–752, 2002.
- [176] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). *Climate Change 2021 – The Physical Science Basis : Working Group I Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, 2023.
- [177] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). *Climate Change 2022 - Mitigation of Climate Change : Working Group III Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, 2023.
- [178] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). *Climate Change 2022 – Impacts, Adaptation and Vulnerability : Working Group II Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, 2023.
- [179] P. J. O’Rourke and A. A. Amsden. A spray/wall interaction submodel for the KIVA-3 wall film model. *SAE Technical Papers*, (724), 2000.
- [180] Thomas Otto, Maurice Rossi, and Thomas Boeck. Viscous instability of a sheared liquid-gas interface : Dependence on fluid properties and basic velocity profile. *Physics of Fluids*, 25(3), 2013.
- [181] Dimitrios Papadogiannis, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Gaofeng Wang, and Stéphane Moreau. Effects of Subgrid Scale Modeling on the Deterministic and Stochastic Turbulent Energetic Distribution in Large-Eddy Simulations of a High-Pressure Turbine Stage. *Journal of Turbomachinery*, 138(9) :10, 2016.
- [182] Dimitrios Papadogiannis, Gaofeng Wang, Stéphane Moreau, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, and Franck Nicoud. Assessment of the Indirect Combustion Noise Generated in a Transonic High-Pressure Turbine Stage. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 138(4) :041503, 2015.
- [183] Damien Paulhiac, Bénédicte Cuenot, Eleonore Riber, Lucas Esclapez, and Stéphane Richard. Analysis of the spray flame structure in a lab-scale burner using Large Eddy Simulation and Discrete Particle Simulation. *Combustion and Flame*, 212 :25–38, 2020.
- [184] Benoît Péden, Julien Carmona, Pierre Boivin, Thomas Schmitt, Bénédicte Cuenot, and Nicolas Odier. Numerical assessment of Diffuse-Interface method for air-assisted liquid sheet simulation. *Computers and Fluids*, 266(May) :106022, 2023.

- [185] Milan Pelletier. *Diffuse interface models and adapted numerical schemes for the simulation of subcritical to supercritical flows*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2019.
- [186] Milan Pelletier, Thomas Schmitt, and Sébastien Ducruix. A multifluid Taylor-Galerkin methodology for the simulation of compressible multicomponent separate two-phase flows from subcritical to supercritical states. *Computers and Fluids*, 206, 2020.
- [187] Ding Yu Peng and Donald B. Robinson. A New Two-Constant Equation of State. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1) :59–64, 1976.
- [188] Carlos Pérez Arroyo, Jérôme Dombard, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Benjamin Martin, Nicolas Odier, and Gabriel Staffelbach. Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine : Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part I : Methodology and initialisation. *Journal of the Global Power and Propulsion Society*, (May) :1–16, 2021.
- [189] Carlos Pérez Arroyo, Jérôme Dombard, Florent Duchaine, Laurent Gicquel, Benjamin Martin, Nicolas Odier, and Gabriel Staffelbach. Towards the Large-Eddy Simulation of a full engine : Integration of a 360 azimuthal degrees fan, compressor and combustion chamber. Part II : Comparison against stand-alone simulations. *Journal of the Global Power and Propulsion Society*, (May) :1–16, 2021.
- [190] Guillaume Perigaud and Richard Saurel. A compressible flow model with capillary effects. *Journal of Computational Physics*, 209(1) :139–178, 2005.
- [191] Antoine Pestre, Thomas Lesaffre, Quentin Cazères, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. Euler–Lagrange numerical simulation of a kerosene droplet mist ignition in air using analytically reduced chemistry. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, 15(4) :207–217, 2023.
- [192] Tobias Pfaff, Meire Fortunato, Alvaro Sanchez-Gonzalez, and Peter W. Battaglia. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. pages 1–18, 2020.
- [193] M. Pilch and C. A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(6) :741–757, 1987.
- [194] Ugo Piomelli, Elias Balaras, Hugo Pasinato, Kyle D. Squires, and Philippe R. Spalart. The inner-outer layer interface in large-eddy simulations with wall-layer models. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24(4) :538–550, 2003.
- [195] Sergio Pirozzoli. On the size of the energy-containing eddies in the outer turbulent wall layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 702 :521–532, 2012.
- [196] Ludovic Plumain. Investigation des couplages paramétriques des modèles de paroi en simulation aux grandes échelles. Working note, INSA Rouen, Cerfacs Toulouse, 8 2020.
- [197] T. J. Poinso and S. K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1) :104–129, 1992.
- [198] S Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.

- [199] Kevin Prieur, Guillaume Vignat, Daniel Durox, Thierry Schuller, and Sébastien Candel. Flame and spray dynamics during the light-round process in an annular system equipped with multiple swirl spray injectors. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 141(6), 2019.
- [200] Carlos Pérez Arroyo, Jérôme Dombard, Florent Duchaine, L.Y.M Gicquel, and Nicolas Odier. Numerical investigation of the interaction between gas-turbine engine components with dynamic mode tracking. In *ASME Turbo Expo 2021 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–10, 2021.
- [201] Johannes Quaas, Hailing Jia, Chris Smith, Anna Lea Albright, Wenche Aas, Nicolas Belouin, Olivier Boucher, Marie Doutriaux-Boucher, Piers M. Forster, Daniel Grosvenor, Stuart Jenkins, Zbigniew Klimont, Norman G. Loeb, Xiaoyan Ma, Vaishali Naik, Fabien Paulot, Philip Stier, Martin Wild, Gunnar Myhre, and Michael Schulz. Robust evidence for reversal of the trend in aerosol effective climate forcing. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22(18) :12221–12239, 2022.
- [202] L. Quartapelle and V. Selmin. High-order Taylor-Galerkin methods for non-linear multi-dimensional problems. In *Finite Element in Fluids : New Trends and Applications*, pages 1374—1384. 1993.
- [203] M M Rai and N K Madavan. Multi-airfoil navier-stokes simulations of turbine rotor-stator interaction. *Journal of Turbomachinery*, 112(3) :377–384, 1990.
- [204] Ludovic Raynal. *Instabilité et entraînement à l'interface d'une couche de mélange liquide-gaz*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1997.
- [205] Julien Reveillon and Luc Vervisch. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005.
- [206] E. Riber, V. Moureau, M. García, T. Poinsot, and O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics*, 228(2) :539–564, 2009.
- [207] Eleonore Riber, Bénédicte Cuenot, and Thierry Poinsot. Introducing chemical kinetics into Large Eddy Simulation of turbulent reacting flows. In *Computer Aided Chemical Engineering*, volume 45, pages 899–936. 2019.
- [208] B. Rochette, E. Riber, and B. Cuenot. Effect of non-zero relative velocity on the flame speed of two-phase laminar flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(3) :3393–3400, 2018.
- [209] Daniel H. Rothman and Jeffrey M. Keller. Immiscible cellular-automaton fluids. *Journal of Statistical Physics*, 52(3-4) :1119–1127, 1988.
- [210] J. S. Rowlinson. Translation of J. D. van der Waals' "The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density". *Journal of Statistical Physics*, 20(2) :197–200, 1979.
- [211] Shimpei Saito, Alessandro De Rosis, Alessio Festuccia, Akiko Kaneko, Yutaka Abe, and Kazuya Koyama. Color-gradient lattice Boltzmann model with nonorthogonal central moments : Hydrodynamic melt-jet breakup simulations. *Physical Review E*, 98(1), 2018.

- [212] M. Sanjosé, J. M. Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinso. Fuel injection model for Euler-Euler and Euler-Lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(5) :514–529, 2011.
- [213] Richard Saurel, Pierre Boivin, and Olivier Le Métayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers and Fluids*, 128 :53–64, 2016.
- [214] Oliver T. Schmidt and Tim Colonius. Guide to spectral proper orthogonal decomposition. *AIAA Journal*, 58(3) :1023–1033, 2020.
- [215] Oliver T. Schmidt and Aaron Towne. An efficient streaming algorithm for spectral proper orthogonal decomposition. *Computer Physics Communications*, 237 :98–109, 2019.
- [216] Ashley D. Scillitoe, Paul G. Tucker, and Paolo Adami. Large Eddy Simulation of Boundary Layer Transition Mechanisms in a Gas-Turbine Compressor Cascade. *Journal of Turbomachinery*, 141(6) :061008, 2019.
- [217] Luis M Segui, L Y M Gicquel, F Duchaine, and J De Laborderie. Importance of boundary layer transition in a high-pressure turbine cascade using LES. In *ASME Turbo Expo 2018 : Turbomachinery Technical Conference & Exposition*, pages 1–10, Oslo, Norway, 2018.
- [218] Luis-Miguel Segui-Troth. *Multiphysics coupled simulations of gas turbines*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2017.
- [219] Vittorio Selmin. Third-order finite element schemes for the solution of hyperbolic problems. Research Report RR-0707, INRIA, 1987.
- [220] J. M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, and T. Poinso. Eulerian and Lagrangian Large-Eddy Simulations of an evaporating two-phase flow. *Comptes Rendus - Mécanique*, 337(6-7) :458–468, 2009.
- [221] Aldo Serafino, Benoit Obert, and Paola Cinnella. Multi-fidelity robust design optimization of an ORC turbine for high temperature waste heat recovery. *Energy*, 269(December 2022) :126538, 2023.
- [222] A. Serhani, V. Xing, D. Dupuy, C. Lapeyre, and G. Staffelbach. High-performance hybrid coupling of a CFD solver to deep neural networks. In *33rd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics*, 2022.
- [223] Varun Shastry, Quentin Cazerès, Bastien Rochette, Eleonore Riber, and Bénédicte Cuenot. Numerical study of multicomponent spray flame propagation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 000 :1–11, 2020.
- [224] Varun Shastry, Eleonore Riber, Laurent Gicquel, Bénédicte Cuenot, and Virginel Bodoc. Large Eddy Simulations of complex multicomponent swirling spray flames in a realistic gas turbine combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 39(2) :2693–2702, 2023.
- [225] Ratnesh K. Shukla, Carlos Pantano, and Jonathan B. Freund. An interface capturing method for the simulation of multi-phase compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 229(19) :7411–7439, 2010.

- [226] F. Shum-Kivan, J. Marrero Santiago, A. Verdier, E. Riber, B. Renou, G. Cabot, and B. Cuenot. Experimental and numerical analysis of a turbulent spray flame structure. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2) :2567–2575, 2017.
- [227] Carlos A. Sierra, Holger Metzler, Markus Müller, and Eurika Kaiser. Closed-loop and congestion control of the global carbon-climate system. *Climatic Change*, 165(1-2), 2021.
- [228] J. R. Simões-Moreira and J. E. Shepherd. Evaporation waves in superheated dodecane. *Journal of Fluid Mechanics*, 382 :63–86, 1999.
- [229] J. Smagorinsky. Monthly weather review. *Monthly weather review*, 91(3) :99–164, 1963.
- [230] A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random Flow Generation Technique for Large Eddy Simulations and Particle-Dynamics Modeling. *Journal of Fluids Engineering*, 123(2) :359, 2001.
- [231] Jinkwan Song, Charles Cary Cain, and Jong Guen Lee. Liquid Jets in Subsonic Air Crossflow at Elevated Pressure. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 137(4) :1–13, 2015.
- [232] D. I. Suslov, J. Hardi, B. Knapp, and M. Oschwald. Optical investigation of the Lox-jet disintegration processes at high pressure conditions in a Lox / H₂ single coaxial injector combustion chamber. *Space Propulsion 2016*, pages 1–9, 2016.
- [233] Aaron Towne, Oliver T. Schmidt, and Tim Colonius. Spectral proper orthogonal decomposition and its relationship to dynamic mode decomposition and resolvent analysis. *Journal of Fluid Mechanics*, 847 :821–867, 2018.
- [234] A. A. Townsend. *The structure of turbulent shear flow*. Cambridge University Press, second edition, 1976.
- [235] Evelina Trutnevyte, Léon F. Hirt, Nico Bauer, Aleh Cherp, Adam Hawkes, Oreane Y. Edelenbosch, Simona Pedde, and Detlef P. van Vuuren. Societal Transformations in Models for Energy and Climate Policy : The Ambitious Next Step. *One Earth*, 1(4) :423–433, 2019.
- [236] J. C. Tyacke and Paul G. Tucker. Future use of Large Eddy Simulation in aeroengines. *Journal of Turbomachinery*, 137(August) :GT2014–25434, 2015.
- [237] J.M. Tyler and T.G. Sofrin. Axial Flow Compressor Noise Studies. Technical report, 1962.
- [238] Guillaume Vignat, Preethi Rajendram Soundararajan, Daniel Durox, Aymeric Vié, Antoine Renaud, and Sébastien Candel. A Joint Experimental and Large Eddy Simulation Characterization of the Liquid Fuel Spray in a Swirl Injector. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 143(8), 2021.
- [239] Gaofeng Wang, Florent Duchaine, Dimitrios Papadogiannis, Ignacio Duran, Stéphane Moreau, and Laurent Y.M. Gicquel. An overset grid method for large eddy simulation of turbomachinery stages. *Journal of Computational Physics*, 274(10) :333–355, 2014.
- [240] Duncan Watson-Parris, Matthew W. Christensen, Angus Laurenson, Daniel Clewley, Edward Gryspeerdt, and Philip Stier. Shipping regulations lead to large reduction in cloud perturbations. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 119(41), 2022.

- [241] Jonathan Wirtz, Benedicte Cuenot, and Eleonore Riber. Numerical study of a polydisperse spray counterflow diffusion flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 000 :1–8, 2020.
- [242] Jan G. Wissink, Tamer A. Zaki, Wolfgang Rodi, and Paul A. Durbin. The effect of wake turbulence intensity on transition in a compressor cascade. *Flow, Turbulence and Combustion*, 93(4) :555–576, 2014.
- [243] M. Wöhrwag, C. Semperebon, A. Mazloomi Moqaddam, I. Karlin, and H. Kusumaatmaja. Ternary Free-Energy Entropic Lattice Boltzmann Model with a High Density Ratio. *Physical Review Letters*, 120(23) :0–6, 2018.
- [244] Xiang I.A. Yang, George Ilhwan Park, and Parviz Moin. Log-layer mismatch and modeling of the fluctuating wall stress in wall-modeled large-eddy simulations. *Physical Review Fluids*, 2(10) :1–13, 2017.
- [245] C. S. Yoo and H. G. Im. Characteristic boundary conditions for simulations of compressible reacting flows with multi-dimensional, viscous and reaction effects. *Combustion Theory and Modelling*, 11(2) :259–286, 2007.
- [246] C. S. Yoo, Y. Wang, A. Trouvé, and H. G. Im. Characteristic boundary conditions for direct simulations of turbulent counterflow flames. *Combustion Theory and Modelling*, 9(4) :617–646, 2005.
- [247] J. B. Young and John H. Horlock. Defining the efficiency of a cooled turbine. *Journal of Turbomachinery*, 128(4) :658–667, 2006.
- [248] Feichi Zhang, Thorsten Zirwes, Thomas Müller, Simon Wachter, Tobias Jakobs, Peter Habisreuther, Nikolaos Zarzalis, Dimosthenis Trimis, and Thomas Kolb. Effect of elevated pressure on air-assisted primary atomization of coaxial liquid jets : Basic research for entrained flow gasification. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 134(12) :110411, 2020.
- [249] Tao Zhang, Bo Dong, Xiaohong Chen, Zhonghua Qiu, Rui Jiang, and Weizhong Li. Spray characteristics of pressure-swirl nozzles at different nozzle diameters. *Applied Thermal Engineering*, 121 :984–991, 2017.
- [250] You Sheng Zhang, Wei Tao Bi, Fazle Hussain, and Zhen Su She. A generalized Reynolds analogy for compressible wall-bounded turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 739(1) :392–420, 2014.
- [251] Wenjie Zheng, Yue Yang, and Shiyi Chen. Image-based modeling of the skin-friction coefficient in compressible boundary-layer transition. *Journal of Fluid Mechanics*, 875 :1175–1203, 2019.
- [252] Jie Zhou, Ganqu Cui, Shengding Hu, Zhengyan Zhang, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Lifeng Wang, Changcheng Li, and Maosong Sun. Graph neural networks : A review of methods and applications. *AI Open*, 1(April) :57–81, 2020.