

Simulations aux Grandes Echelles : instabilités thermo-acoustiques, combustion diphasique et couplages multi-physiques

B. Cuenot^a, A. Dauplain^a, F. Duchaine^a, L. Gicquel^a, T. Poinso^t, E. Riber^a, G. Staffelbach^a, O. Vermorel^a

a. CERFACS, Combustion Team, 31057 Toulouse, France

b. IMFT & CERFACS, CNRS, 31400 Toulouse, France

Résumé :

La combustion turbulente, que ce soit dans des configurations de laboratoire ou dans des configurations réelles industrielles, met en oeuvre un nombre important de physiques fortement couplées : chimie, turbulence, multi-phasique, thermique, etc. Pour répondre aux demandes de plus en plus exigeantes des concepteurs, qui doivent proposer des solutions concurrentielles tout en respectant les contraintes environnementales de bruit et d'émission de polluants, la simulation numérique est devenue incontournable. Plus précisément, la simulation maintenant utilisée comme outil de conception, doit être fiable et précise. Dans le domaine de la combustion turbulente, à fort caractère instationnaire, la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) s'est récemment imposée. Cette technique s'est en effet avérée capable de prédire finement le comportement des brûleurs dans des environnements complexes, et permet aujourd'hui d'aborder des problématiques encore mal maîtrisées telles que les instabilités thermo-acoustiques ou la combustion diphasique. On donne ici quelques exemples de problèmes encore ouverts dans ce domaine.

Abstract :

Turbulent combustion, either in lab-configurations or real industrial ones, involves an important number of strongly coupled physics : chemistry, turbulence, multi-phase flow, heat transfer, etc. To answer the more and more challenging needs of engineers, who have to propose competitive solutions while respecting environmental constraints on noise and pollutant emission, numerical simulation has become a key factor. More precisely, simulation being now used as a design tool, must be reliable and accurate. In the domain of turbulent combustion, with strong unsteadiness, Large Eddy Simulation (LES) has recently become essential. This technique has proven to be able to predict with fine detail the behavior of burners in complex environments, and allows today to address problems that are not fully understood, such as thermo-acoustic instabilities or two-phase combustion. Some examples of such open problems are here given.

Mots clefs : Turbulence ; Combustion ; Simulation

1 Introduction

La grande majorité des systèmes industriels utilisant la combustion comme source d'énergie implique des écoulements turbulents réactifs. En augmentant significativement le mélange des réactifs, la turbulence accélère le processus de combustion et permet d'augmenter les performances du système. Cependant la turbulence est un régime d'écoulement difficile à maîtriser, et qui s'accompagne de phénomènes indésirables tels que instabilité de l'écoulement, voire de la flamme, extinction locale, bruit, etc. De plus les écoulements turbulents ont une structure très complexe et délicate à contrôler pour un mélange parfait des réactifs et des produits de combustion lors de leur refroidissement. Dans

ce contexte la simulation joue un rôle crucial, et permet aujourd'hui, grâce à la technologie de Simulation aux Grandes Echelles (SGE), de prédire finement la combustion turbulente dans des géométries complexes. Dans cette approche, les équations de transport et de conservation classiquement résolues pour les écoulements réactifs sont filtrées spatialement, de manière à ne résoudre explicitement que les grandes échelles. Cela implique d'introduire un modèle de sous-maille pour la turbulence, basé usuellement sur le concept de viscosité turbulente. Le plus connu est le modèle de Smagorinsky [1] mais de nombreuses autres approches de modélisation peuvent être trouvées dans la littérature, notamment le modèle dynamique de Germano [2]. De même il existe de nombreuses approches de modélisation pour la combustion turbulente. Diverses techniques de tabulation de la chimie de la combustion ont été utilisées avec succès, et ont l'avantage de prédire toutes les espèces chimiques voulues, notamment les polluants [3]. Cependant leur mise en oeuvre dans les géométries et écoulements complexes pose un certain nombre de problèmes non encore résolus : les transitoires d'allumage et d'extinction, les flammes non adiabatiques ou encore les flammes diphasiques sont difficiles à décrire par tabulation. Une alternative qui a fait ses preuves sur de nombreux exemples est le modèle de flamme épaissie, où la zone de réaction est artificiellement élargie pour être résolue sur la grille de maillage, sans pour autant modifier sa vitesse de propagation [4]. On peut ainsi reproduire la dynamique de flamme turbulente, ses régimes instationnaires et toutes les physiques associées [5].

1.1 Instabilités thermo-acoustiques

L'étude et la prédiction des instabilités thermo-acoustiques restent au coeur des attentes industrielles. Ce couplage entre la dynamique de la combustion et les modes propres acoustiques d'un moteur peut en effet aboutir à la destruction totale du système. Toute qualification d'un nouveau moteur, que ce soit pour la propulsion d'aéronef ou pour la génération de puissance, passe donc par l'étape fondamentale pour l'industriel de garantir que ce phénomène ne pourra pas se produire. Pouvoir le prédire de façon fiable et claire reste toutefois très compliqué pour plusieurs raisons :

- L'acoustique propre d'un système dépend non seulement de la forme du moteur mais surtout des conditions aux limites imposées. Or ces dernières sont difficilement accessibles sur une configuration industrielle ;
- Le moteur principal des instabilités thermo-acoustiques reste la combustion qui est à la fois la source et l'amplificateur d'un couplage fortement non-linéaire.

Ces difficultés sont facilement mises en évidence par linéarisation des équations de la mécanique des fluides réactifs sous les hypothèses d'un écoulement à Mach nul, une masse moléculaire et des capacités calorifiques uniques pour tout le mélange (et fonctions de la température uniquement pour les capacités calorifiques). Sous ces hypothèses, et en étudiant des perturbations harmoniques, l'équation des ondes suivante est obtenue :

$$\frac{\partial}{\partial x_\ell} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_\ell} \right) + \frac{\omega^2}{\gamma \bar{p}} \hat{p} = j \omega \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \hat{\Omega}(\mathbf{x}), \quad (1)$$

avec $\bar{\rho}$ et γ , la masse volumique et le rapport des capacités calorifiques du fluide dépendant de l'espace $\mathbf{x}$; l'inconnue $\hat{p}(\mathbf{x})$ correspond au module et à la phase de la pression acoustique sous son expression complexe (i.e. : $j^2 = -1$) pour une pulsation f et une fréquence angulaire ω .

Dans l'espace spectral, l'hypothèse de Mach nul aboutit à l'utilisation du modèle (N, τ) pour représenter la fluctuation du dégagement de chaleur. Ce modèle est discuté en détail dans [6] par exemple. Dans un formalisme plus général [7] le terme source issu de la combustion s'exprime par :

$$\hat{\Omega}(\mathbf{x}) = \hat{\mathcal{L}}_{\mathbf{u}} \left[\frac{\partial \hat{p}(\mathbf{x})}{\partial x_\ell} \right] + \hat{\mathcal{L}}_p [\hat{p}(\mathbf{x})], \quad (2)$$

où $\hat{\mathcal{L}}_p$ et $\hat{\mathcal{L}}_{\mathbf{u}}$ sont deux opérateurs linéaires appliqués à $\hat{p}$ et son gradient, respectivement.

Pour finir, les Eqs. 1 & 2 sont complétées de Conditions aux Limites (CL) définies sur la base de la normale sortante, $\mathbf{n}_{BC} = (n_{BC,1}, n_{BC,2}, n_{BC,3})$ au domaine de calcul, Ω , de frontière $\partial\Omega$. En acoustique

la notion d'impédance complexe réduite, $Z = \hat{p}/\bar{\rho}\bar{c} \hat{u}_k n_{BC,k}$ ($\bar{c}$ étant la vitesse du son), est utilisée et ré-écrite sous la condition de Mach nul sous forme linéaire :

$$\bar{c}Z \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_\ell} n_{BC,\ell} - j \omega \hat{p} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega_Z \quad (3)$$

où Z est défini sur la partie de $\partial\Omega$ où l'impédance réduite est appliquée (entrées et sorties).

Le système final correspond donc à un problème aux valeurs propres non-linéaire dont les solutions sont la forme, la fréquence et les taux de croissance/amortissement des modes d'instabilités thermo-acoustiques.

Si la vitesse du son $\bar{c}$ et la masse volumique du fluide $\bar{\rho}$ sont connus et fonctions de l'espace, l'Eq. 1 peut être résolue par application de la méthode des éléments finis de type Galerkin aboutissant à un problème aux valeurs propres discret de taille N (le nombre de noeuds discrétisant la géométrie) :

$$[A][P] + \omega[B(\omega)][P] + \omega^2[C][P] = [D(\omega)][P]. \quad (4)$$

Le problème discret repose sur le vecteur $[P]$ contenant les valeurs nodales du champ de pression acoustique associé au mode propre de fréquence complexe ω . $[A]$ et $[C]$ sont deux matrices carrées dépendant uniquement de la géométrie et du maillage, ainsi que des valeurs moyennes $\bar{c}$ et $\bar{\rho}$. La matrice $[B]$ contient les informations liées aux CL et dépend donc de ω puisque Z est généralement fonction de la fréquence. La matrice $[D]$ se compose de la partie instationnaire de la combustion, *i.e.* les fluctuations du dégagement de chaleur, qui est non-linéaire en ω .

La résolution du problème discret pose trois questions ou problèmes fondamentaux :

- 1 La détermination précise des CL du brûleur : même si une grande partie de ces écoulements apparaissent en géométrie fermée par des murs ($Z = 0$), les CL d'entrées et sorties doivent reproduire des effets d'un compresseur ou d'une turbine sur l'acoustique de la chambre de combustion.
- 2 La réponse de flamme : au coeur du problème, cette inconnue doit être modélisée, mesurée ou obtenue numériquement.
- 3 La résolution numérique de ce système non-linéaire de grande taille s'obtient par des méthodes le plus couramment itératives [7] et reste un problème fondamental d'algèbre linéaire à résoudre efficacement dans un contexte massivement parallèle.

Le premier point est encore aujourd'hui un thème de recherche reposant à la fois sur la simulation d'écoulement autour de pales (fixes ou en rotation) ou sur des représentations réduites typiques des écoulements de tuyères. Le second point a aussi longuement été étudié sur des brûleurs simples et aujourd'hui des solutions reposant sur des simulations SGE acoustiquement forcées axialement permettent l'accès aux FTF (Fig 1).

1.2 Combustion diphasique

Les combustibles liquides présentant un apport énergétique élevé par rapport à leur volume, ils sont toujours préférés aux combustibles gazeux dans les systèmes propulsifs, que ce soit en moteur automobile, moteur aéronautique ou moteur fusée (où les réactifs H₂ et O₂ sont portés à très haute pression et basse température pour être stockés sous forme liquide avec un minimum de volume). L'essence ou le kérosène sont ainsi pulvérisés dans la chambre de combustion, où se forme un spray de très fines gouttelettes qui, en s'évaporant, produisent de la vapeur de combustible qui va brûler en phase gazeuse avec l'air ambiant. Une des conséquences principales est que la flamme n'est pas alimentée par un flux continu et contrôlé de réactifs, mais par une distribution très hétérogène de poches de combustible résultant de l'évaporation des gouttes. On observe ainsi un front de flamme complexe, dit "partiellement prémélangé", où se côtoient des portions de flamme prémélangées et non-prémélangées. Cette distribution du combustible gazeux est fortement liée à la distribution des gouttes dans la chambre, dont la trajectoire dépend de leur nombre de Stokes, rapport d'un temps particulaire et d'un temps fluide $St = \tau_p/\tau_f$. Les gouttes ayant un grand St ont une forte inertie et sont peu sensibles à l'écoulement environnant : elles suivent une trajectoire "balistique" contrôlée par l'impulsion de départ. A l'inverse, les gouttes ayant un petit St se comportent comme de traceurs. Autour

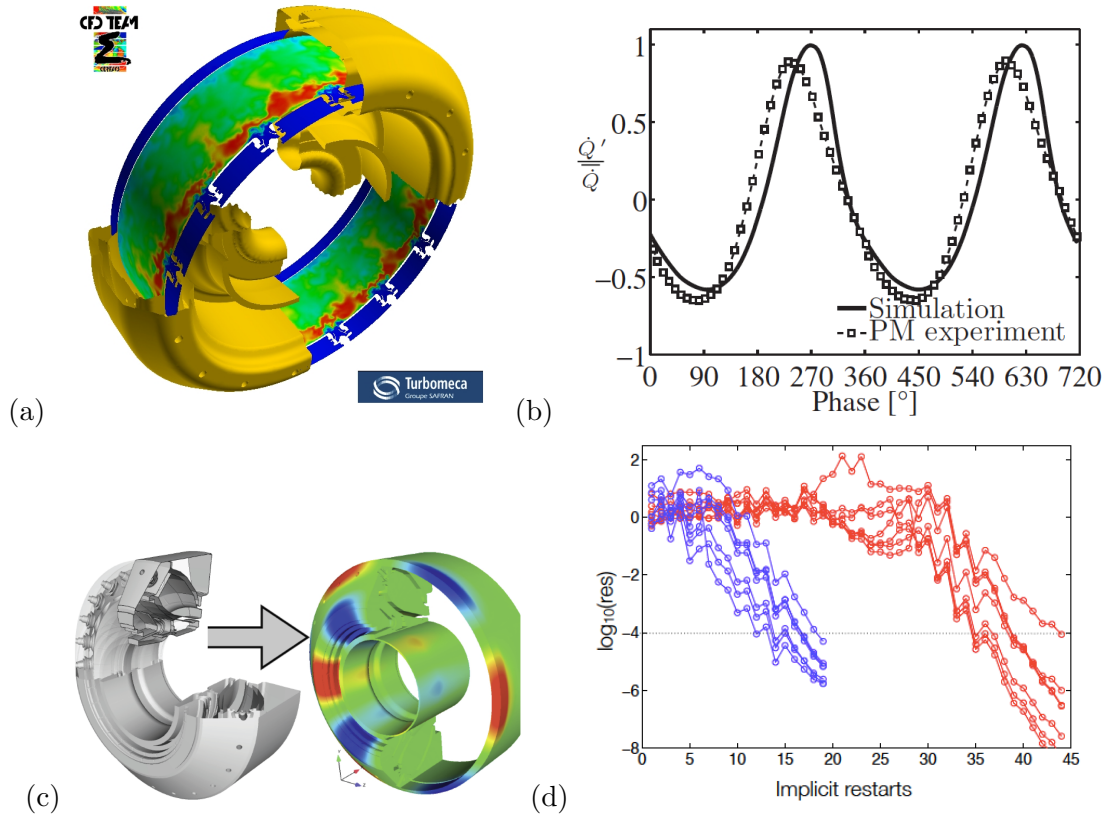


FIGURE 1 – Prédictions numériques d’instabilités thermo-acoustiques : (a) simulation d’une chambre annulaire d’hélicoptère en SGE et reproduisant l’instabilité, (b) validation LES / expérience de la FTF, (c) utilisation d’un solveur de Helmholtz sur un problème industriel (champs de pression acoustique pour un mode propre du système) et (d) convergence du solveur de Helmholtz avec (rouge) et sans (bleu) recyclage des résidus.

de $St = 1$, le phénomène de ségrégation apparaît : les gouttes vont se concentrer préférentiellement dans les zones de faible vorticité (Fig 2). Dans le cas des écoulements turbulents, la large gamme de temps fluides conduit à une large gamme de St et le phénomène de concentration préférentielle est toujours présent.

La description des écoulements particuliers peut se faire selon deux approches : dans l’approche Eulérienne, les gouttes sont décrites dans un formalisme continu, résultant de la moyenne statistique de l’ensemble des gouttes présentes à un endroit et à un instant donnés ; dans l’approche Lagrangienne, chaque goutte est suivie individuellement et a son propre système d’équations. L’avantage de l’approche Eulérienne est une mise en oeuvre plus simple dans un code de calcul CFD, et une convergence statistique garantie, à l’inverse de l’approche Lagrangienne qui nécessite un grand nombre de particules et des temps de simulation très longs pour la même convergence statistique. Cependant l’opération de moyenne statistique appliquée aux équations des gouttes dans l’approche Eulérienne fait apparaître des termes non fermés qu’il faut modéliser.

On considère une particule quelconque, dont la vitesse u_p , la température T_p , la masse m_p et la position x à l’instant t peuvent prendre les valeurs respectives c_p , ξ_p , μ_p et x_p dans l’espace des phases. On définit la fonction $\mathcal{P}_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x_p, t)$ de l’espace des phases qui décrit la probabilité pour que (u_p, T_p, m_p, x) prennent les valeurs (c_p, ξ_p, μ_p, x_p) :

$$\mathcal{P}_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x_p, t) = \delta(c_p - u_p(t))\delta(\xi_p - T_p(t))\delta(\mu_p - m_p(t))\delta(x_p - X(t)) \quad (5)$$

avec δ la fonction de Dirac. On définit la réalisation $\mathcal{H}_p$ du spray comme l’ensemble des fonctions $\mathcal{P}_p$ décrivant le mouvement des N_p particules qui constituent le spray. En prenant la moyenne d’ensemble

des réalisations $\mathcal{H}_p$ conditionnées par une réalisation de la phase porteuse $\mathcal{H}_f$, on définit la fonction de probabilité f_p (FDP) qui vérifie une équation du type Boltzmann.

L'utilisation d'une moyenne de phase pondérée par la masse est utilisée pour chaque variable ψ_l , par analogie avec la moyenne de Favre pour la phase gazeuse :

$$\check{\psi}_l = \langle \psi \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \psi(c_p, \xi_p, \mu_p) f_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x, t, \mathcal{H}_f) d c_p d \xi_p d \mu_p \quad (6)$$

En multipliant l'équation de Boltzmann écrite pour f_p par ψ_l et en intégrant sur l'espace des phases, on obtient l'équation d'évolution de ψ_l , appelée équation d'Enskog :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{\psi} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{\psi} = & - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u''_{l,i} \psi \rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial u_{p,i}}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,i}} \right\rangle_l + \\ & \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial T_p}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial m_p}{\partial t} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_l \end{aligned} \quad (7)$$

De ce fait, pour une particule n donnée, on peut écrire sa vitesse u_p^n comme étant la somme de la composante mésoscopique ou vitesse corrélée $\check{u}_l$ et d'une composante restante $u_p''^n$ propre à chaque particule n appelée vitesse décorrélée telle que $u_p = \check{u}_l + u_p''^n$ avec $\langle u_p''^n \rangle_l = 0$. La modélisation du mouvement décorrélé nécessite entre autres l'introduction du tenseur des vitesses décorrélées $\delta \check{R}_l$ et du tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta \check{S}_l$:

$$\delta \check{R}_{l,ij}(x_i, t | \mathcal{H}_f) = 2\delta \check{\theta}_l \quad \delta \check{S}_{l,ijk}(x, t | \mathcal{H}_f) = \langle u''_{p,i} u''_{p,j} u''_{p,k} \rangle_l \quad (8)$$

où $\delta \check{\theta}_l = \frac{1}{2} \langle u''_{p,i} u''_{p,i} \rangle_l$ est l'énergie décorrélée.

Un modèle de type Boussinesq pour $\delta \check{R}_{l,ij}$, associé à un modèle de diffusion pour $\delta \check{S}_{l,ijk}$ [8] ont donné des résultats corrects dans des simulations de THI chargée en particules [8], mais les travaux de [9] ont montré les difficultés du modèle à reproduire correctement la dynamique des particules dans les écoulements cisailés. Des travaux récents réalisés par [10] ont permis de proposer de nouveaux modèles en introduisant le tenseur d'anisotropie $b^*_{l,ij} = \delta \check{R}_{l,ij} / 2\delta \check{\theta}_l - 1/3\delta_{ij}$. En utilisant le concept de "weak-equilibrium" Masi [10] a proposé une équation implicite pour la modélisation du mouvement décorrélé :

$$\delta \check{R}_{l,ij} \left(- \frac{\delta \check{R}_{l,nm}}{2\delta \check{\theta}_l} \frac{\partial \check{u}_{l,n}}{\partial x_m} \right) = - \frac{1}{2} \delta \check{R}_{l,kj} \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_k} - \frac{1}{2} \delta \check{R}_{l,ik} \frac{\partial \check{u}_{l,j}}{\partial x_k} \quad (9)$$

Un exemple de comparaison entre les différents modèles proposés par [10] est donné en Fig. 2.

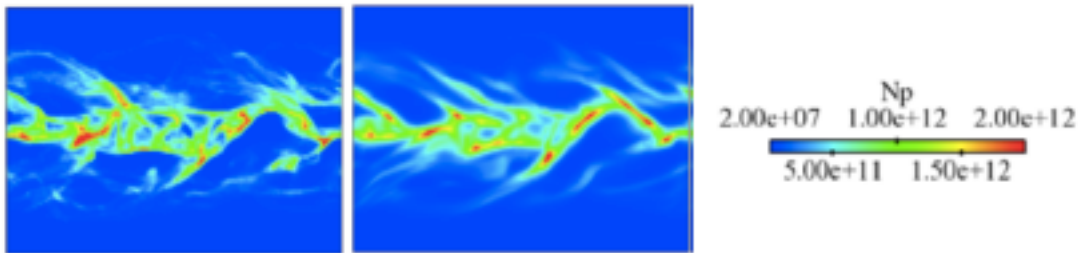


FIGURE 2 – Comparaison de la ségrégation dans une couche de particules placée dans une THI : champ de densité de particules. Gauche : résultat lagrangien ; Droite : résultat eulérien [10].

Ce genre de modèles permet d'obtenir des résultats similaires de flammes turbulentes diphasiques en formulation Eulérienne ou Lagrangienne. Un exemple est donné Fig. 3.

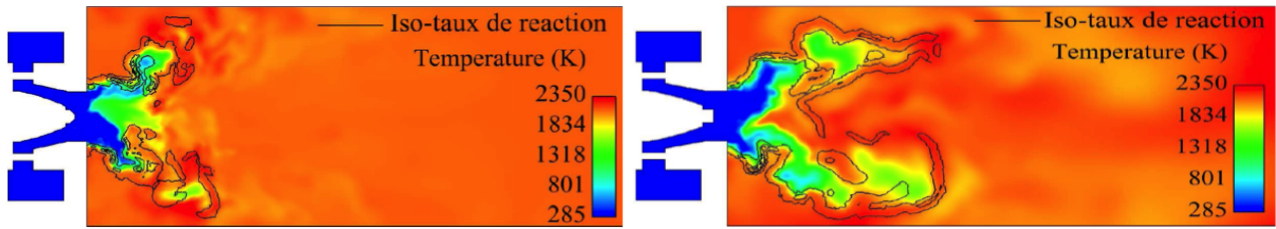


FIGURE 3 – Configuration MERCATO (ONERA) : champ de température. Gauche : résultat Lagrangien ; Droite : résultat Eulérien.

2 Conclusions

La SGE de la combustion turbulente est aujourd’hui une technique largement utilisée, qui a déjà obtenu d’excellents résultats même si des améliorations sont encore à faire. Une des voies de développement est le calcul multi-physiques et multi-échelles des écoulements industriels, impliquant le couplage des codes SGE à d’autres codes de calculs spécialisés pour la conduction solide, le rayonnement... Une difficulté majeure est la synchronisation du couplage dans un environnement de calculateur massivement parallèle, qui nécessite des stratégies avancées permettant la convergence du système couplé tout en garantissant la scalabilité (Fig. 4).

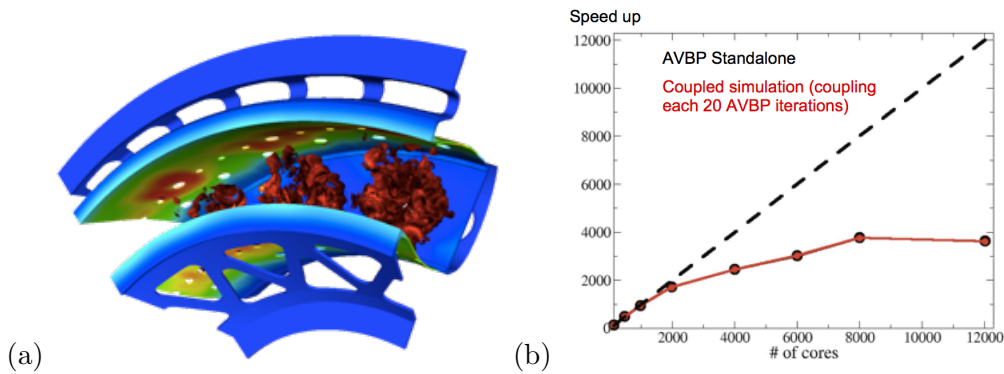


FIGURE 4 – Couplage SGE réactive couplée au calcul thermique solide pour une chambre de combustion aéronautique : (a) vue de la géométrie avec les trois flammes présentes devant chaque système d’injection, accompagnée du champ de température de paroi issu du code de thermique du solide et (b) courbe de scalabilité du problème couplé.

Références

- [1] J. Smagorinsky 1963 *Monthly Weather Review*, **91** 99–164.
- [2] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot 1991 *Physics of Fluids*, **3**(7) 1760–1765.
- [3] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier and N. Darabiha 2005 *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** 867–874.
- [4] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante and T. Poinso 2000 *Physics of Fluids*, **12**(7) 1843–1863.
- [5] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann and D. Veynante 2000 *Combustion and Flame*, **137**(4) 489–505.
- [6] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud and T. Poinso 2006 *AIAA Journal*, **44**(4) 741–750.
- [7] F. Nicoud, L. Benoit, C. Sensiau and T. Poinso 2007 *AIAA Journal*, **45** 426–441.
- [8] A. Kaufmann, M. Moreau, O. Simonin and J. Hélie 2008 *J. of Turbulence*, **227**(13) 6448–6472.
- [9] E. Riber, V. Moureau, M. García, T. Poinso and O. Simonin 2009 *Journal of Comp. Physics*, **228** 539–564.
- [10] E. Masi 2010 *PhD thesis*, INP Toulouse.