Approche MILES pour les écoulements compressibles, multiespèces et réactifs

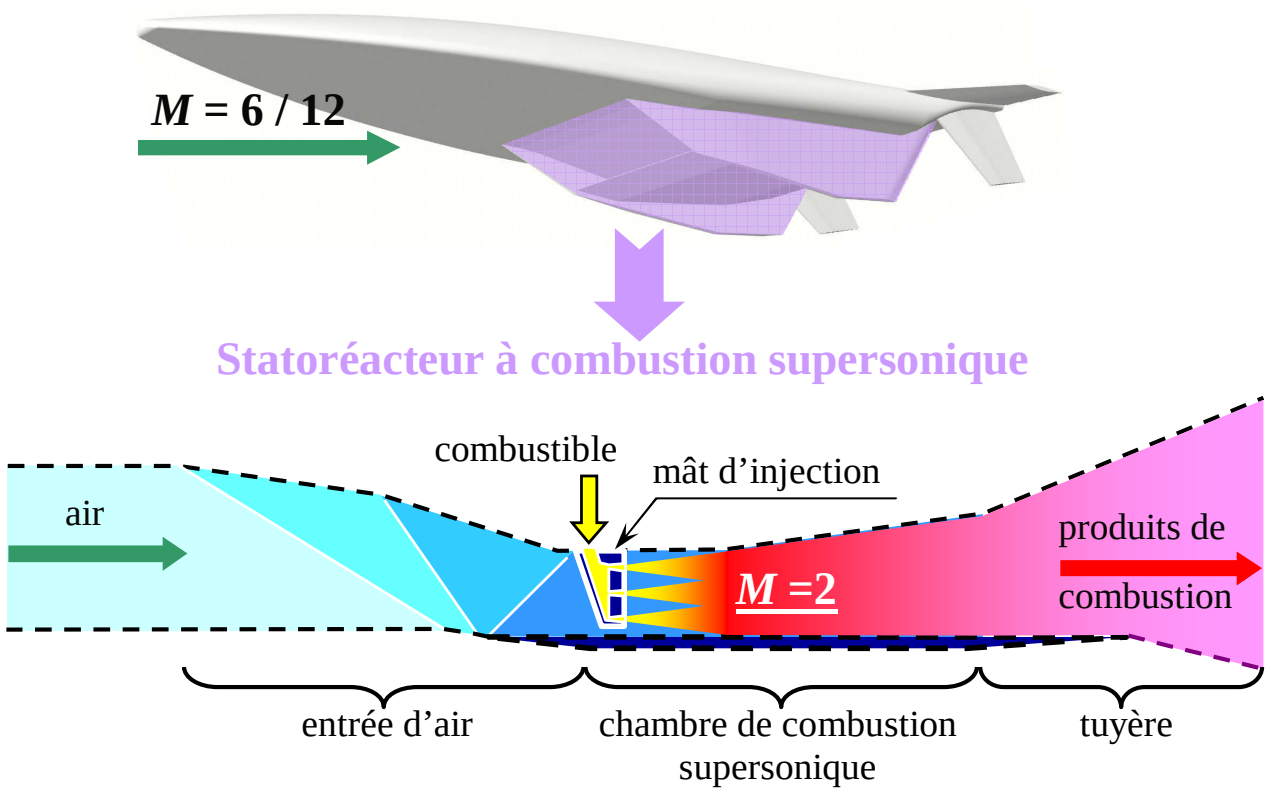
Ivan Fedioun (*Polytech'Orléans*)
Mehmet Karaca (*doctorant ICARE*)
Nicolas Lardjane (*CEA DAM*)

ICARE-CNRS
1c, avenue de la Recherche Scientifique
F-45071 Orléans cedex 2, France

12 ème journée CASCIMODOT, 1er juillet 2010, Tours
INRA - Centre de Tours - 37380 Nouzilly

Application

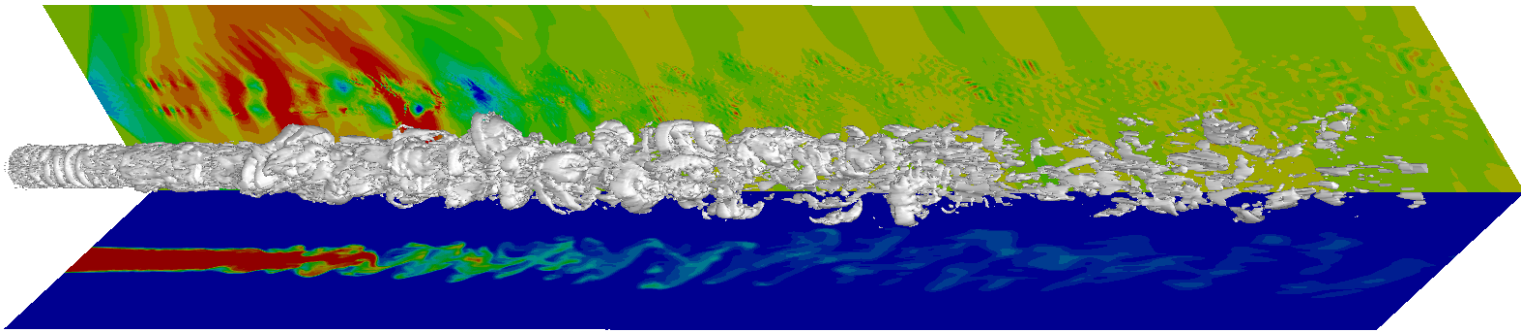
- Combustion supersonique air/H_2 dans la chambre du superstatoréacteur du véhicule LEA (ONERA-MBDA)



(image D. Davidenko, ICARE)

Problématique

- Simuler numériquement de façon **stable** et **prédictive** sur des maillages **acceptables** des écoulements
  - turbulents à grand nombre de Reynolds
  - compressibles choqués
  - réactifs



$\Rightarrow$ la guerre du "**diable**" et de "**l'eau bénite**"

Le diable et l'eau bénite...

- Le diable : non-linéarité des équations (hyperboliques) de la mécanique des fluides :
  - partant d'une condition initiale $\mathcal{C}^\infty$ ("smooth")
    - modes de Fourier de plus en plus élevés (turbulence)
    - solutions discontinues en temps fini (choc)

  $\Rightarrow$ la solution finit par ne plus "tenir" sur le maillage

Le diable et l'eau bénite...

- Le diable : non-linéarité des équations (hyperboliques) de la mécanique des fluides :
  - partant d'une condition initiale $\mathcal{C}^\infty$ ("smooth")
    - ▷ modes de Fourier de plus en plus élevés (turbulence)
    - ▷ solutions discontinues en temps fini (choc)

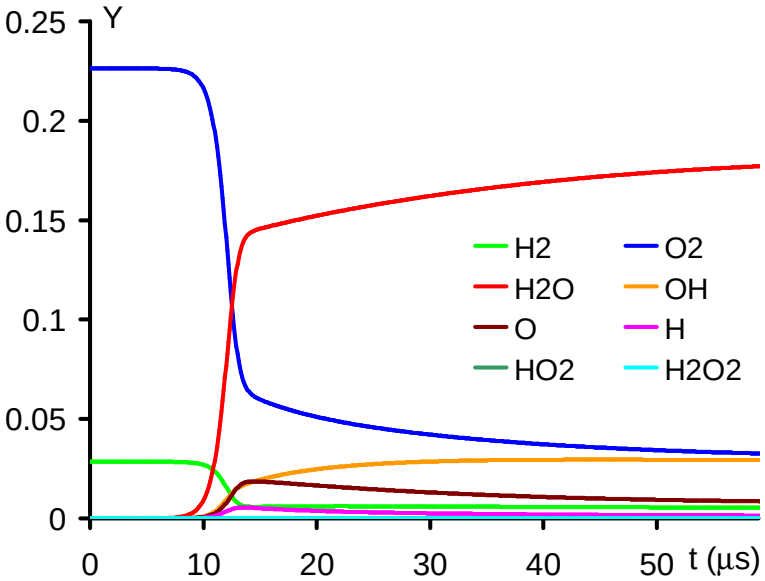
  $\Rightarrow$ la solution finit par ne plus "tenir" sur le maillage

- L'eau bénite : dissipation / diffusion / viscosité
  - ▷ viscosité moléculaire (DNS)
  - ▷ hyperviscosité turbulente (RANS ou LES)
  - ▷ dissipation numérique (MILES)

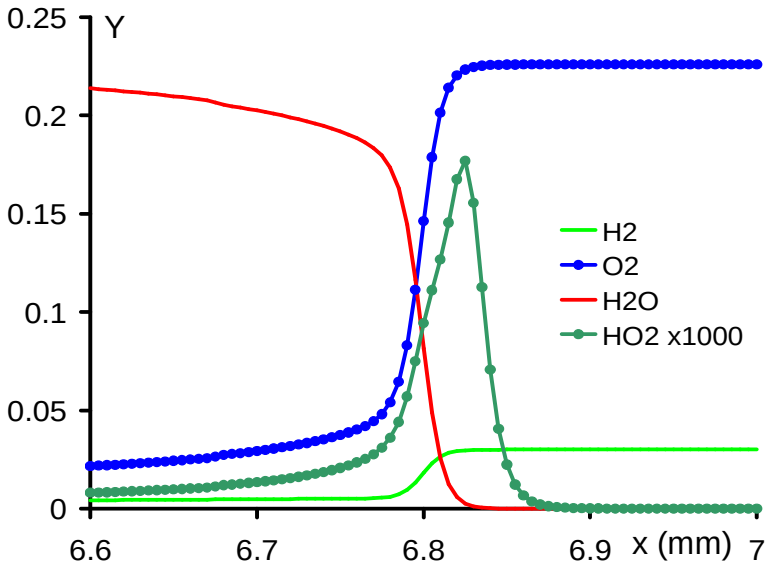
  $\Rightarrow$ dissipe les modes élevés, adoucit les gradients

Raideur de la chimie

- un autre diable : raideur des termes sources chimiques
  - fronts de flamme très minces et plissés
  - temps caractéristiques chimiques $\approx 1\ \mu s$



Autoinflammation d'un mélange H_2/O_2 stœchiométrique à 1500 K.



Structure d'un front de flamme laminaire en prémélange air/H_2 stœchiométrique.

Un peu de maths pour bien comprendre...

- Un exemple simple : l'équation de Burgers

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_{\text{le résultat}} + \underbrace{u\frac{\partial u}{\partial x}}_{\text{le diable}} = \underbrace{\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\text{l'eau benite}}$$

condition initiale : $u(x, t = 0) = u^0(x)$

Un peu de maths pour bien comprendre...

- Un exemple simple : l'équation de Burgers

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_{\text{le résultat}} + \underbrace{u\frac{\partial u}{\partial x}}_{\text{le diable}} = \underbrace{\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\text{l'eau benite}}$$

condition initiale : $u(x, t = 0) = u^0(x)$

- intégration temporelle :

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + ...$$

$$= u(x, t) + \Delta t \left(-u\frac{\partial u}{\partial x} + \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$$

Le diable : vision spectrale = génération de turbulence

- condition initiale = **1** mode k

$$u^0(x) = \hat{u}^0(k)e^{jkx} \quad ; \quad \frac{\partial u^0}{\partial x} = jk\hat{u}^0(k)e^{jkx} \quad ; \quad u^0\frac{\partial u^0}{\partial x} = jk\hat{u}^{0^2}(k)e^{j2kx}$$

Le diable : vision spectrale = génération de turbulence

- condition initiale = **1** mode k

$$u^0(x) = \hat{u}^0(k)e^{jkx} \quad ; \quad \frac{\partial u^0}{\partial x} = jk\hat{u}^0(k)e^{jkx} \quad ; \quad u^0\frac{\partial u^0}{\partial x} = jk\hat{u}^{0^2}(k)e^{j2kx}$$

- intégration temporelle :

$$u(x, t = \Delta t) = u^1(x) = u^0(x) + \Delta t \left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|^0 (x) + \ldots$$

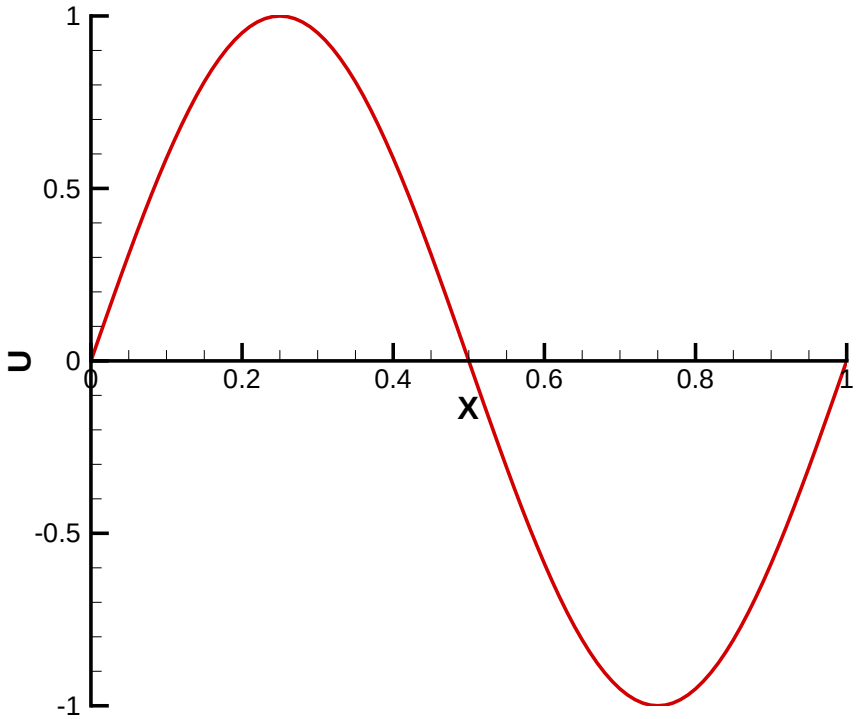
$$= \sum_{m=1}^{2} \hat{u}^1(k_m)e^{jk_m x} \quad : \mathbf{2} \text{ modes}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$u(x, t = n\Delta t) = u^n(x) = \sum_{m=1}^{2^n} \hat{u}^n(k_m)e^{jk_m x} \quad : \mathbf{2^n} \text{ modes}$$

Le diable : vision hyperbolique = onde de choc

- Intersection des caractéristiques :
  $\longrightarrow$ création d'un choc en temps fini



Discrétisation spatiale et *cutoff* numérique

- Maillage : $x_i = i\Delta x \quad ; \quad i = 0, ..., N_x \quad ; \quad \Delta x = \frac{L}{N_x}$
- Cutoff (fréquence de Nyquist) :

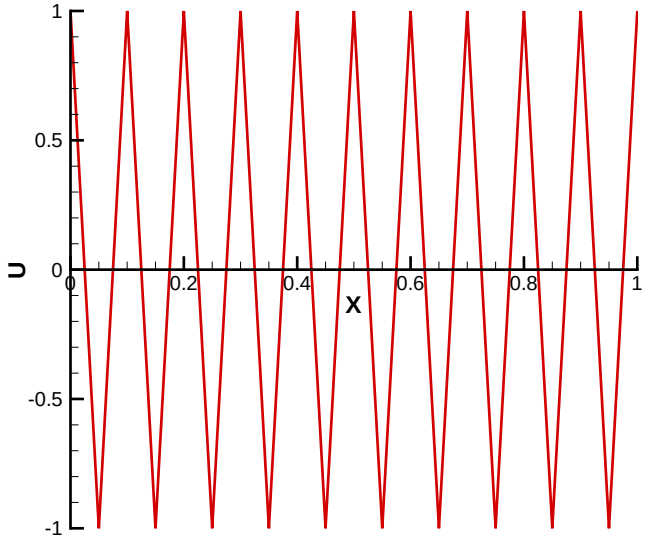
$$k_c = k_{N_x/2} = \frac{N_x}{2}\frac{2\pi}{L} = \frac{\pi}{\Delta_x}$$

exemple : N_x=20, mode 10 $\rightarrow$

au delà :

aliasing + backscatter
= calcul instable

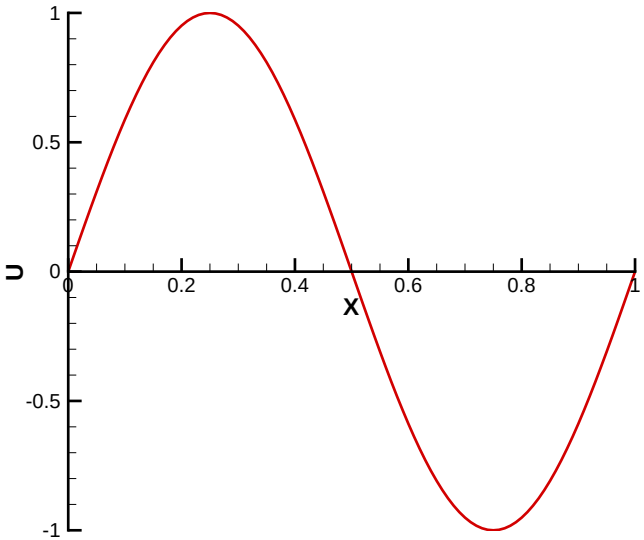
- **besoin d'eau bénite !**

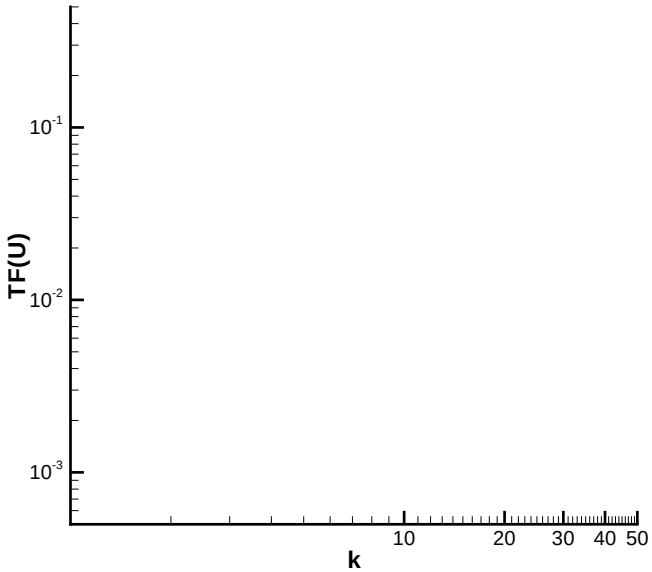


Le besoin d'eau bénite

- Burgers non-visqueux ($\nu = 0$) : pas d'eau bénite physique
- Discrétisation spatiale centrée : pas d'eau bénite numérique

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

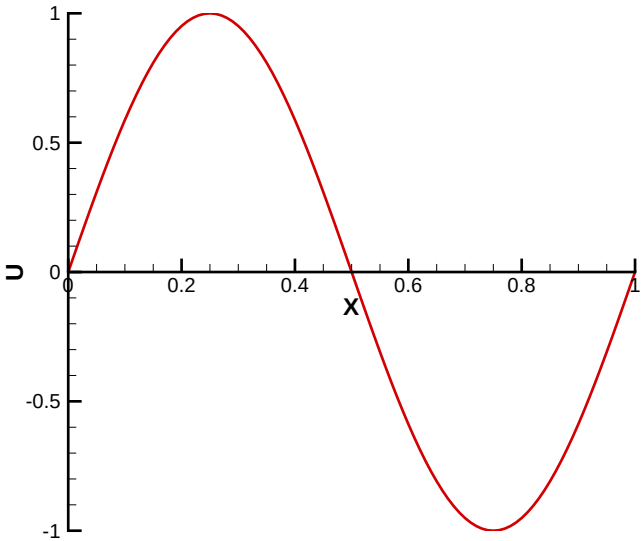


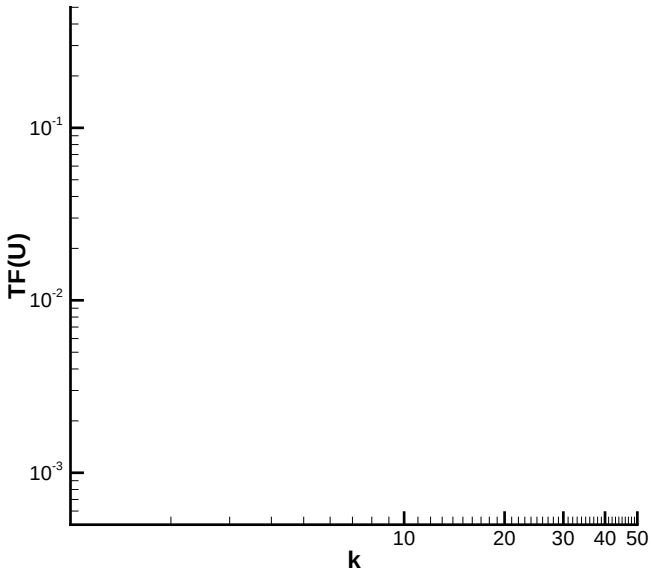


L=1, Nx=100, $\nu = 0$, $\Delta t = 0.001$, schéma centré ordre 2

L'eau bénite physique : viscosité moléculaire

- Burgers visqueux : $\nu = 0.001$
- Discrétisation spatiale centrée



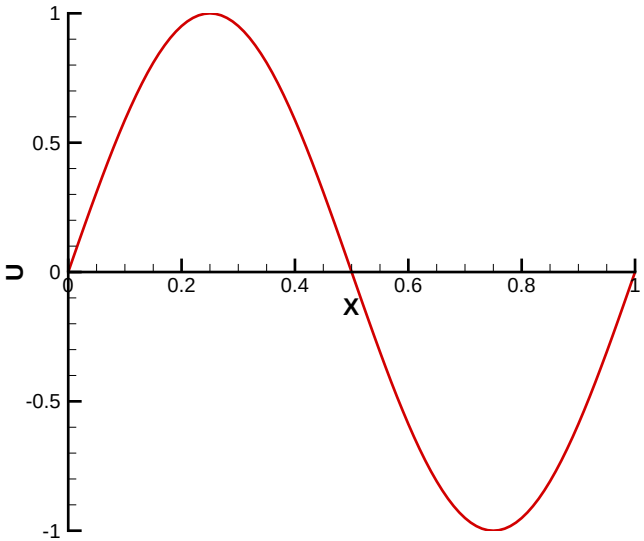


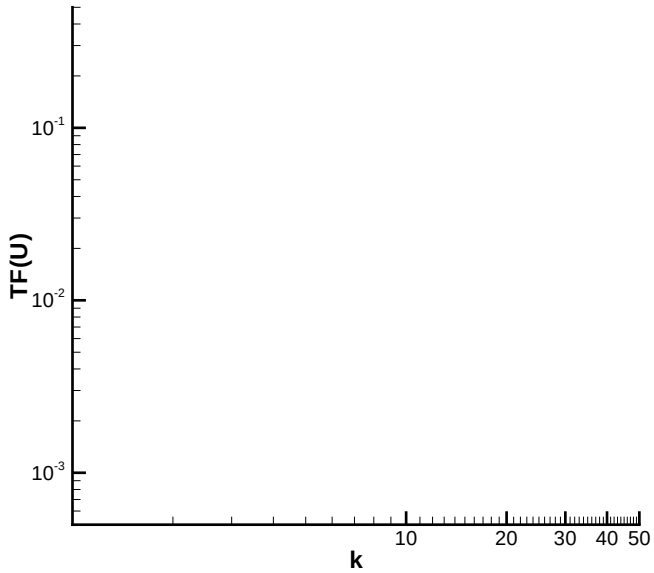
L=1, Nx=100, $\nu = 0.001$, $\Delta t = 0.001$, schéma centré ordre 2

$\longrightarrow$ **simulation "limite résolue"**

L'eau bénite physique : viscosité moléculaire

- Burgers visqueux : $\nu = 0.01$
- Discrétisation spatiale centrée





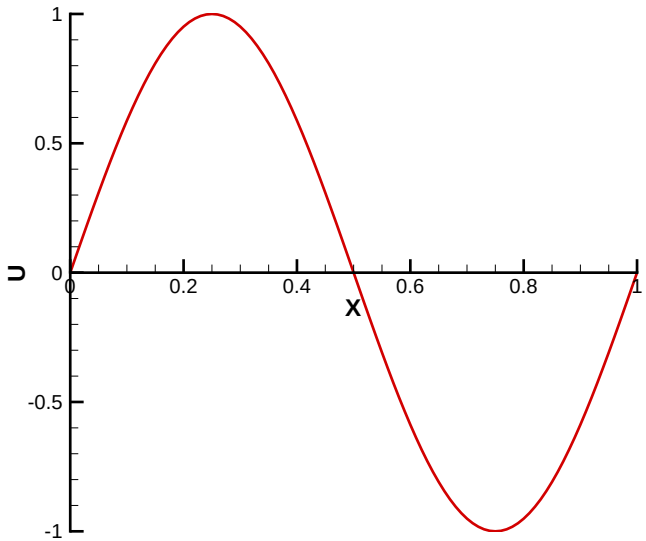
L=1, Nx=100, $\nu = 0.01$, $\Delta t = 0.001$, schéma centré ordre 2

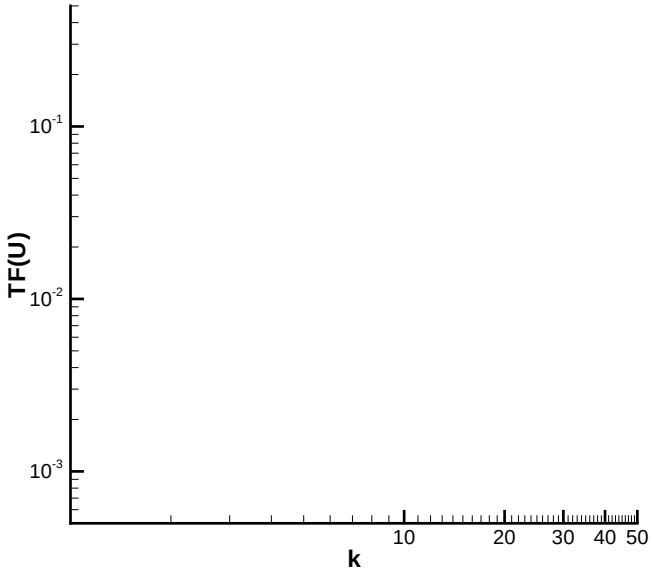
$\longrightarrow$ **simulation bien résolue**

L'eau bénite numérique : dissipation du schéma

- Burgers non-visqueux ($\nu = 0$)
- Discrétisation spatiale décentrée amont ou "upwind" :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$





L=1, Nx=100, $\nu = 0$, $\Delta t = 0.001$, schéma CIR "upwind" ordre 1

Nombre d'onde modifié (NOM) : schéma centré

$$u(x_i, t_n) \approx u_i^n = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{u}_m^n e^{jk_m x_i} \qquad \text{(TFD)}$$

Nombre d'onde modifié (NOM) : schéma centré

$$u(x_i, t_n) \approx u_i^n = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{u}_m^n e^{jk_m x_i} \qquad \text{(TFD)}$$

- Dérivation exacte, ou spectrale :

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i^n = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} j k_m \hat{u}_m^n e^{jk_m x_i} \quad \Rightarrow \quad \left.\widehat{\frac{\partial u}{\partial x}}\right|_m^n = j k_m \hat{u}_m^n$$

Nombre d'onde modifié (NOM) : schéma centré

$$u(x_i, t_n) \approx u_i^n = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{u}_m^n e^{jk_m x_i} \qquad \text{(TFD)}$$

- Dérivation exacte, ou spectrale :

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i^n = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} j k_m \hat{u}_m^n e^{jk_m x_i} \quad \Rightarrow \left.\widehat{\frac{\partial u}{\partial x}}\right|_m^n = j k_m \hat{u}_m^n$$

- Dérivation **centrée** ordre 2 :

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i^n \approx \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{u}_m^n \left(\frac{e^{jk_m\Delta x} - e^{-jk_m\Delta x}}{2\Delta x}\right) e^{jk_m x_i}$$

$\rightarrow$ NOM **réel** :

$$\boxed{k'_m(k_m\Delta x) = \frac{\sin(k_m\Delta x)}{\Delta x}}$$

Nombre d'onde modifié (NOM) : schéma "upwind"

- Dérivation **upwind** ordre 1 :

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_i^n \approx \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{u}_m^n \left(\frac{1 - e^{-jk_m\Delta x}}{\Delta x}\right) e^{jk_m x_i}$$

$\longrightarrow$ NOM **complexe** :

$$\boxed{k'_m(k_m\Delta x) = \frac{\sin(k_m\Delta x)}{\Delta x} - j\left(\frac{1-\cos(k_m\Delta x)}{\Delta x}\right)}$$

- Partie réelle : erreur dispersive
- Partie imaginaire : erreur dissipative $\longrightarrow$ viscosité numérique

Nombre d'onde modifié et viscosité numérique

- Equation de convection (diffusion) linéaire : pas de diable

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \left(\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)} \quad ; \quad u(x, t = 0) = \hat{u}^0(k) e^{jkx}$$

Nombre d'onde modifié et viscosité numérique

- Equation de convection (diffusion) linéaire : pas de diable

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \left(\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)} \quad ; \quad u(x, t=0) = \hat{u}^0(k) e^{jkx}$$

- Solution : $u(x,t) = \hat{u}^0(k) e^{j(kx-\omega t)}$ $\boxed{\omega(k) = kc - j\nu k^2}$ (relation de dispersion)

facteur d'amplification : $\boxed{g = \frac{u(x, t+\Delta t)}{u(x,t)} = e^{-j\omega \Delta t}}$

- $\Re\{\omega\}$: vitesse de phase : $V_\phi = \frac{\Re\{\omega\}}{k} = c = Cste \rightarrow$ onde non-dispersive
- $\Im\{\omega\}$: amplitude de l'onde : $|g| = e^{\Im\{\omega\}\Delta t}$

$\rightarrow$ si $\nu = 0$; $\Im\{\omega\} = 0$; $|g| = 1 \rightarrow$ onde non-dissipative

Nombre d'onde modifié et viscosité numérique

- Equation de convection (diffusion) linéaire : pas de diable

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \left(\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)} \quad ; \quad u(x, t=0) = \hat{u}^0(k) e^{jkx}$$

- Solution : $u(x,t) = \hat{u}^0(k) e^{j(kx - \omega t)}$ $\boxed{\omega(k) = kc - j\nu k^2}$ (relation de dispersion)

facteur d'amplification : $\boxed{g = \dfrac{u(x, t+\Delta t)}{u(x,t)} = e^{-j\omega \Delta t}}$

- $\Re\{\omega\}$: vitesse de phase : $V_\phi = \frac{\Re\{\omega\}}{k} = c = Cste \rightarrow$ onde non-dispersive
- $\Im\{\omega\}$: amplitude de l'onde : $|g| = e^{\Im\{\omega\}\Delta t}$

$\rightarrow$ si $\nu = 0$; $\Im\{\omega\} = 0$; $|g| = 1 \rightarrow$ onde non-dissipative

- Schéma de dérivation spatiale upwind : relation de dispersion numérique

$$\boxed{\omega = k'(k\Delta x)c = \underbrace{a(k\Delta x)c}_{\text{erreur dispersive}} + j \underbrace{b(k\Delta x)c}_{\text{erreur dissipative}}}$$

Une autre façon de voir les choses

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \left(\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)}$$

- Schéma upwind ordre 1 :

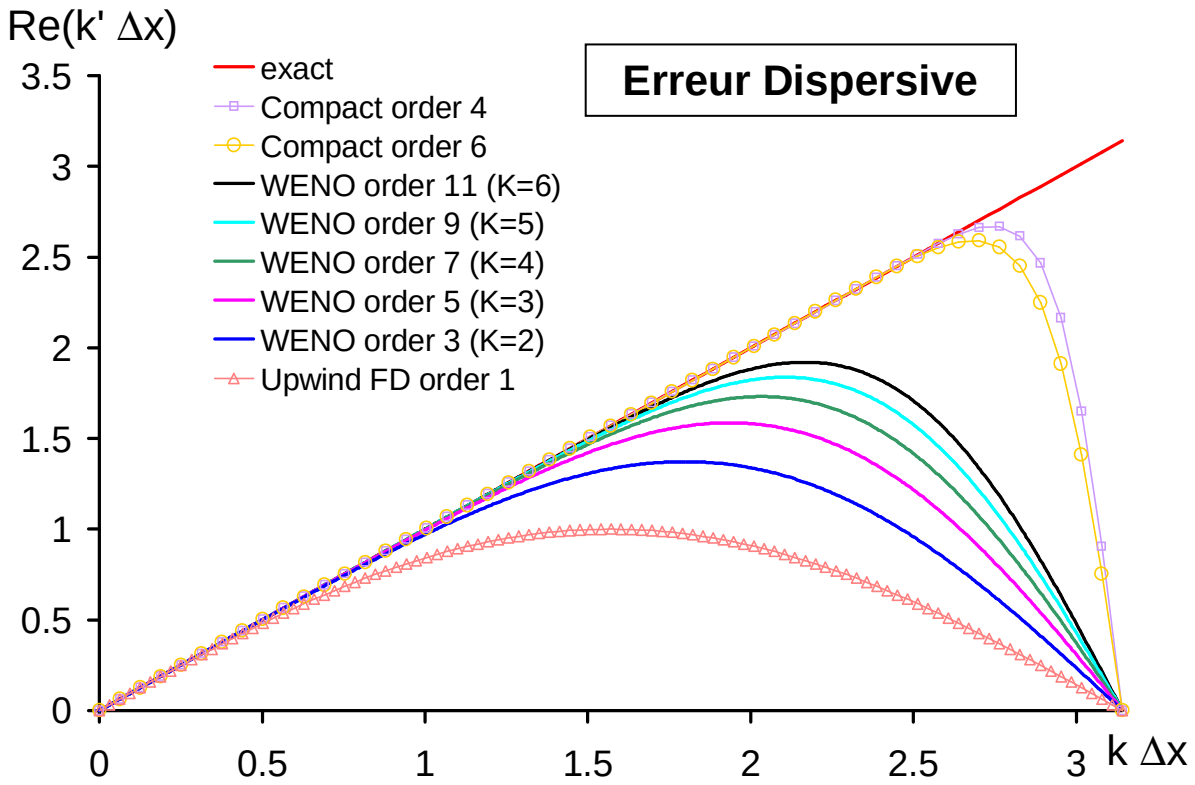
$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + c\left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}\right) = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + c\left(\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}\right) - c\left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2\Delta x}\right) = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + c\underbrace{\left(\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}\right)}_{\text{schéma centré ordre 2}} = \underbrace{\underbrace{\frac{c\Delta x}{2}}_{\text{viscosité numérique}} \quad \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right)}_{\text{dissipation numérique}}$$

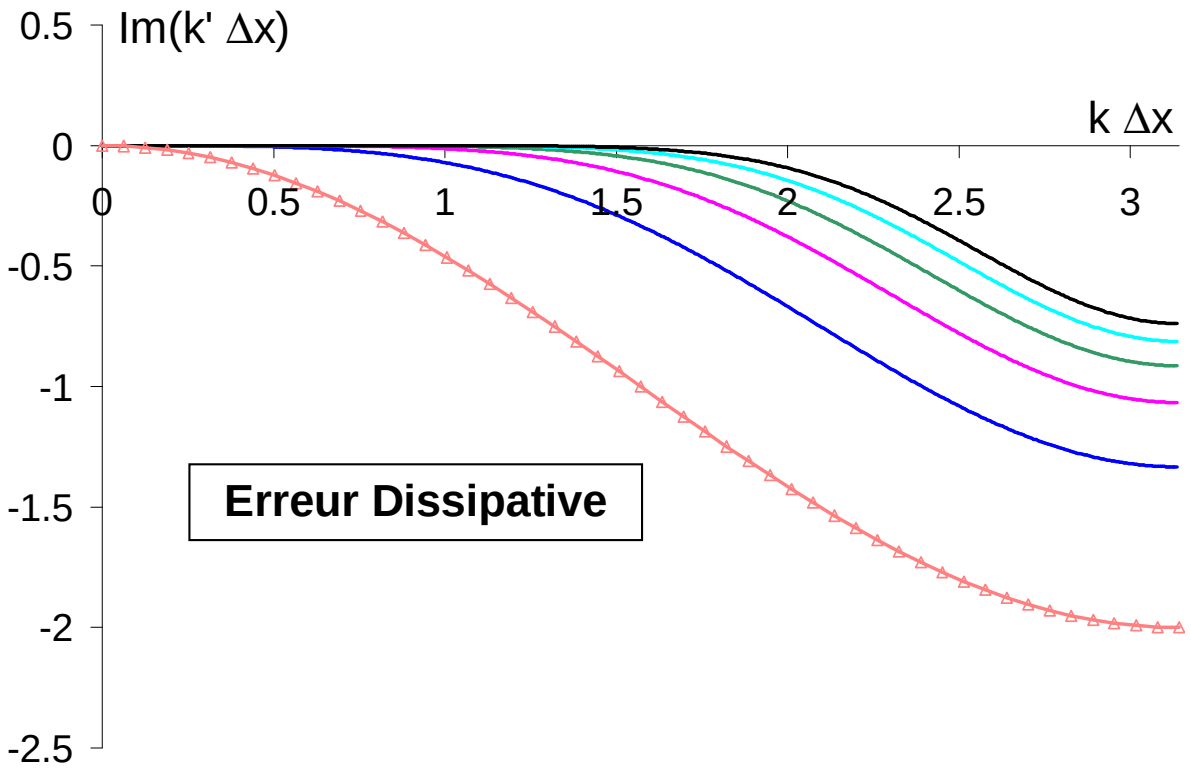
Nombre d'onde modifié de quelques schémas

- Partie réelle



Nombre d'onde modifié de quelques schémas

- Partie imaginaire



Les situations extrêmes sans modèle

- Simulation numérique directe d'écoulements turbulents : **DNS**
  - Equations de Navier-Stokes
  - Schémas centrés d'ordre élévé : faible erreur dispersive, pas d'erreur dissipative
  - Seule la viscosité moléculaire stabilise le calcul
  - Résolution de tous les tourbillons jusqu'aux plus petits
    $\longrightarrow$ coût de calcul prohibitif

Les situations extrêmes sans modèle

- Simulation numérique directe d'écoulements turbulents : **DNS**
  - Equations de Navier-Stokes
  - Schémas centrés d'ordre élévé : faible erreur dispersive, pas d'erreur dissipative
  - Seule la viscosité moléculaire stabilise le calcul
  - Résolution de tous les tourbillons jusqu'aux plus petits
    $\longrightarrow$ coût de calcul prohibitif
- Simulation numérique d'écoulements choqués : **CFD compressible**
  - Equations d'Euler : pas besoin de viscosité moléculaire
  - Schémas décentrés d'ordre 1 ou 2 : erreur dispersive et dissipative
  - La viscosité numérique stabilise le calcul
  - Capture des ondes de choc
    $\longrightarrow$ trop dissipatif pour simuler la turbulence

Modéliser et/ou simuler la turbulence ?

- **En principe ...**

- **RANS** : modéliser toute la turbulence, simuler l'écoulement moyen
  - ⟶ Schémas upwind d'ordre faible, modèles physiques complexes
  - ⟶ Calcul stationnaire, 2D ou axisymétrique possible
- **LES** : modéliser les petits tourbillons, simuler les gros
  - ⟶ Schémas centrés d'ordre élevé, calcul 3D instationnaire
  - ⟶ Modèles sous-maille dissipatifs assez simples
- **DNS** : ne rien modéliser du tout, simuler tous les tourbillons
  - ⟶ Schémas centrés d'ordre élevé, calcul 3D instationnaire
  - ⟶ Pas de modèle de turbulence, mais transport moléculaire précis
- **MILES** : ne rien modéliser du tout, simuler ce qu'on peut capturer
  - ⟶ Schémas upwind d'ordre élevé, pas de modèle
  - ⟶ MILES = DNS avec schémas dissipatifs à haut pouvoir de résolution

Modéliser et/ou simuler la turbulence ?

- **En pratique ...**
  - codes LES = extensions des anciens codes RANS
  - maillages irréguliers = erreur de commutation à l'ordre 2
  - schémas numériques toujours un peu dissipatifs
  - modèles sous-maille en écoulement multi-espèces et réactifs ?
  - interaction entre modèles sous-maille et erreurs numériques ?
- **qui fait quoi dans la stabilisation du calcul ?**

$\rightarrow$ **Expérience numérique**

Equations de Navier-Stokes : DNS / MILES

Conservation de la masse :
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho u_j)_{,j} = 0$$

Principe fondamental de la dynamique :
$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + (\rho u_i u_j + p\delta_{ij})_{,j} = \tau_{ij,j}$$

1^{er} principe de la thermodynamique :
$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + [(\rho E + p)\, u_j]_{,j} = (u_i \tau_{ij})_{,j} - \dot{q}_{j,j}$$

Conservation des espèces chimiques :
$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + (\rho u_j Y_\alpha)_{,j} = -J_{\alpha j,j} + \dot{\omega}_\alpha$$

Loi d'état des gaz parfaits :
$$p = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \rho_\alpha r_\alpha T = \rho \mathcal{R} T \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{Y_\alpha}{W_\alpha}$$

Equations de Navier-Stokes filtrées : LES

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \left(\overline{\rho}\widetilde{u_j}\right)_{,j} = 0$$

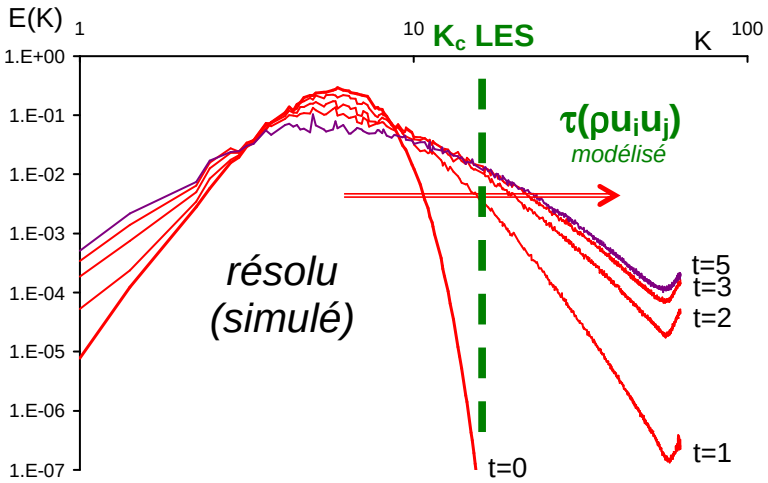
$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_i}}{\partial t} + \left(\overline{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j} + \overline{p}\delta_{ij}\right)_{,j} = \overline{\tau_{ij}}_{,j} - \underbrace{\tau(\rho u_i u_j)_{,j}}_{\text{terme sous-maille}}$$

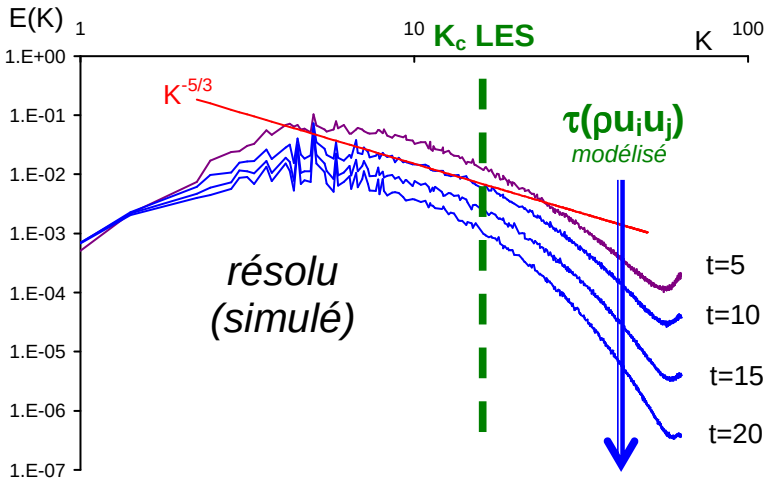
$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \left[\left(\overline{\rho}\widetilde{E} + \overline{p}\right)\widetilde{u_j}\right]_{,j} = \left(\overline{u_i\tau_{ij}}\right)_{,j} - \overline{q_j}_{,j} - \underbrace{\tau(\rho E u_j)_{,j}}_{\text{terme sous-maille}}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y_\alpha}}{\partial t} + \left(\overline{\rho}\widetilde{Y_\alpha}\widetilde{u_j}\right)_{,j} = -\overline{J_{\alpha j}}_{,j} - \underbrace{\tau(\rho Y_\alpha u_j)_{,j}}_{\text{terme sous-maille}}$$

Rôle de la modélisation sous-maille

- Modéliser l'influence des petits tourbillons absents du calcul sur les structures résolues
  - Les gros tourbillons portent l'énergie turbulente et la transfèrent aux plus petits qu'eux
  - Les tout petits tourbillons dissipent l'énergie qu'ils recoivent des plus gros qu'eux
  - Entre les deux : zone inertielle, cascade de Kolmogorov





Modèles sous-maille

- Fermeture newtonienne = hyperviscosité turbulente sous-maille

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu S_{ij} \quad ; \quad -p = \frac{1}{3}\sigma_{kk}$$

$$-\tau(\rho u_i u_j) = -\frac{1}{3}\tau(\rho u_k u_k)\delta_{ij} + \mu^t_{sgs}\widetilde{S_{ij}}$$

$$\boxed{\tau^D(\rho u_i u_j) = \tau(\rho u_i u_j) - \frac{2}{3}\overline{\rho}\widetilde{k_{sgs}}\delta_{ij} = -\mu^t_{sgs}\widetilde{S_{ij}}}$$

- Modèle de Smagorinsky (1963) :

$$\mu^t_{sgs}(\overrightarrow{x}, \Delta) = C_S^2\Delta^2\overline{\rho}\left(2\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}}\right)^{1/2}$$

- Modèle de la fonction de structure (Métais, Lesieur (1992)) :

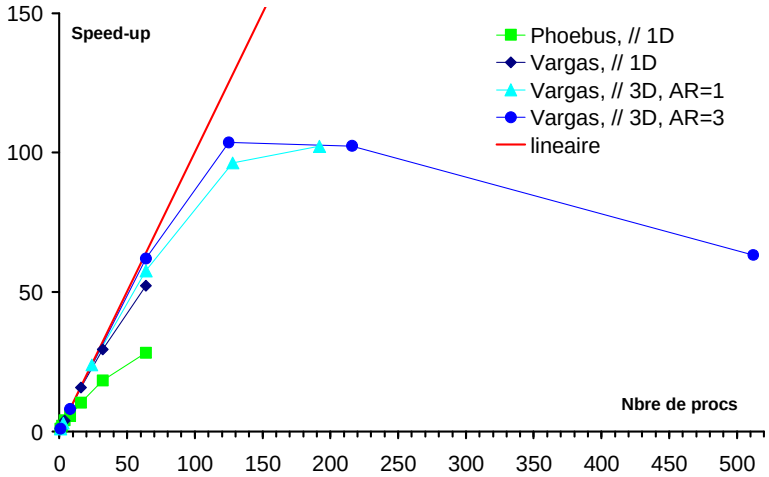
$$\mu^t_{sgs}(\overrightarrow{x}, \Delta) = C_{SF}\Delta\overline{\rho}\left[F_2(\overrightarrow{x}, \Delta)\right]^{1/2}$$

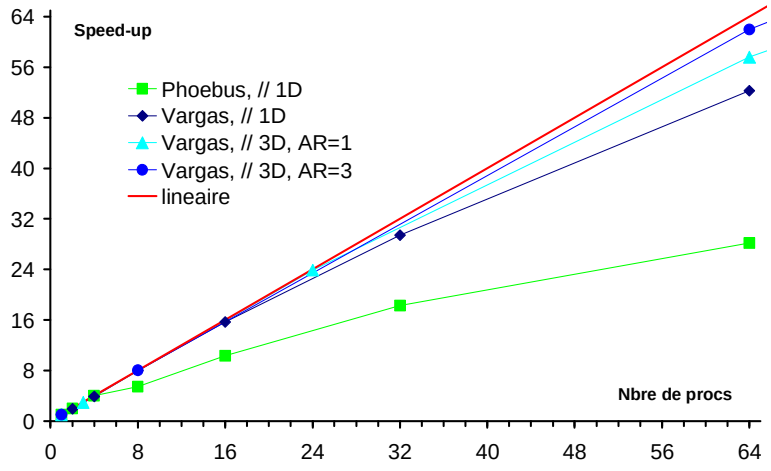
Le code WENO (Lardjane/Fedioun/Gougeon/Karaca)

- schéma WENO ordre 3 à 9 (calculs présentés : ordre 5)
- avancement temporel Runge-Kutta TVD ordre 1 à 4 (calculs présentés : ordre 3)
- pas de temps auto-adaptatif à CFL fixé
- domaine de calcul structuré, maillage orthogonal curviligne
- code parallélisé par décomposition de domaine dans les 3 directions
- calcul avec (Navier-Stokes) / sans (Euler) termes visqueux
- calcul avec (LES) / sans (MILES) modèle sous-maille
- thermodynamique : tables A. Burcat
- transport multicomposants : modèle théorie cinétique CHEMKIN "fitté" polynômial
- cinétique chimique détaillée (lois d'Arrhénius)

Performances parallèles du code

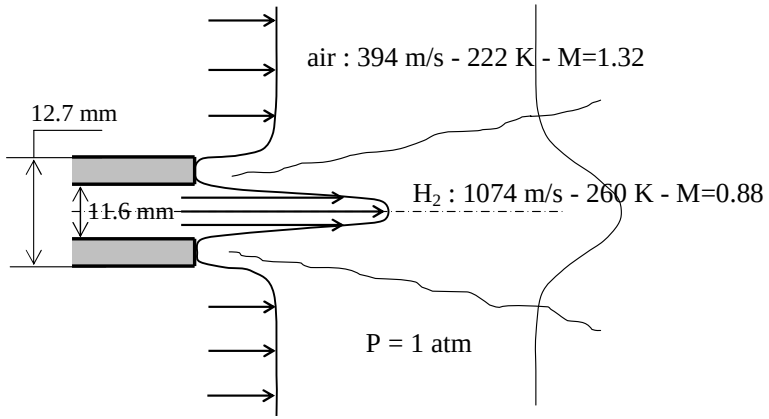
- Scalabilité, ou Speed-up : $S_N = \dfrac{T_{1\ \text{proc}}}{T_{\text{N procs}}}$
  - mesures sur un calcul réactif air/H_2 9 espèces, 37 réactions
  - comparaison IBM Power 6 (IDRIS) et Phoebus (CCSC) pour différentes stratégies de parallélisation





Ecoulement prototype : le jet air/H_2 supersonique de Eggers (1971)

	jet H_2	air (co-courant)
U (m/s)	1074	394
T_{stat}/T_{tot} (K)	260/300	222/300
P_{stat}/P_{tot} (kPa)	100/167	100/285
Mach	0.886	1.32
ρ (kg/m^3)	0.0933	1.563
μ (kg/m.s)	$0.878\ 10^{-5}$	$1.687\ 10^{-5}$
Re_u (1/m)	$11.6\ 10^6$	$36.6\ 10^6$
Re_{jet}	$1.34\ 10^5$	



- domaine de calcul : Lx × Ly × Lz = 700 × 70 × 70 mm^3
- 1 traversée à V=1074 m/s : 0.65 ×10^{-3} s

  → établissement de l'écoulement à partir de la CI

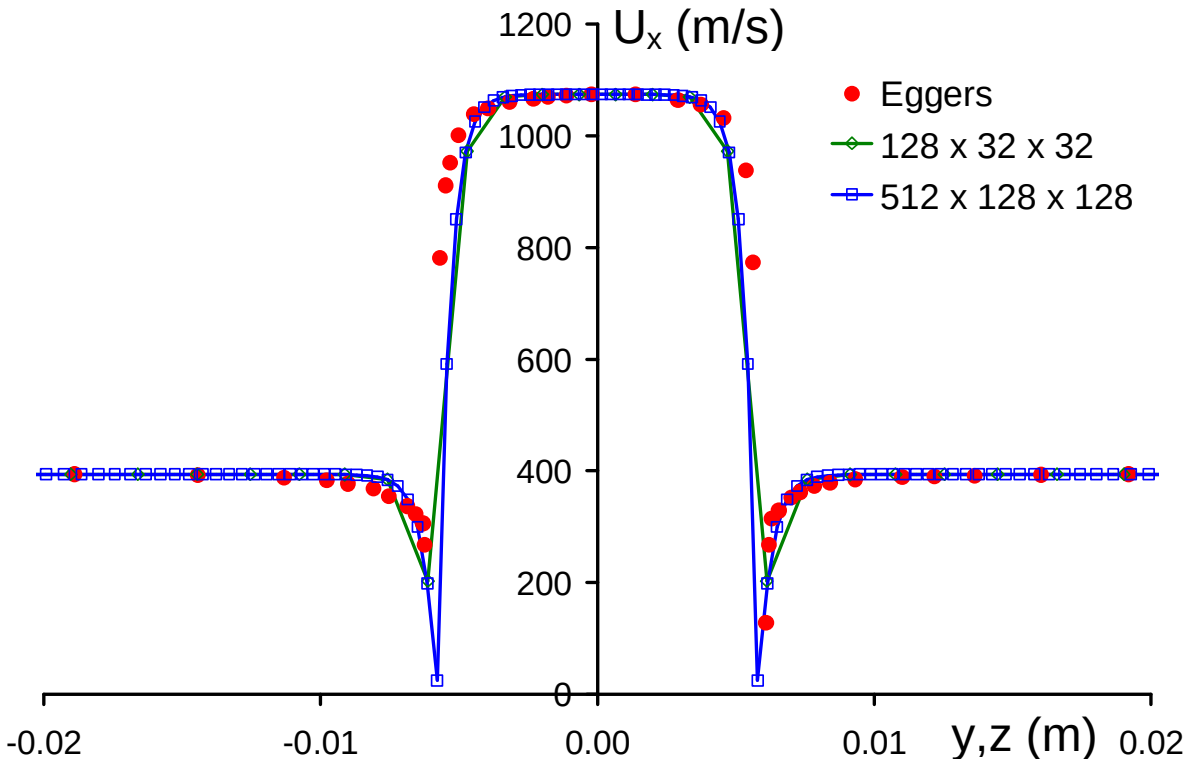
  → calcul de 4 traversées pour statistiques : 2.6 ms

  → **temps physique total simulé : 2 à 10 ms**

- Nbre de points ×2 par direction : coût de calcul ×16

Profils de vitesse d'injection

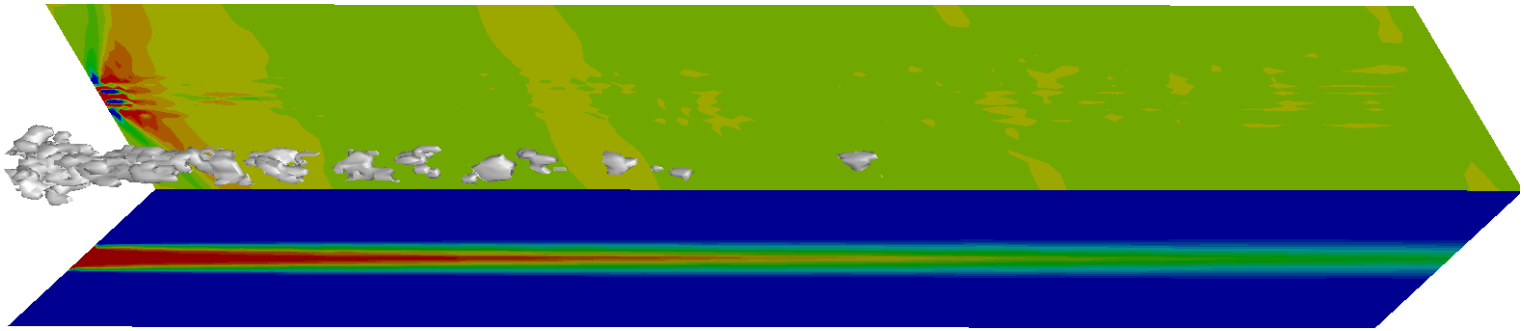
- vitesse transversale bruitée $\pm$ 10 m/s + confinement gaussien
- aucun autre ingrédient dans le calcul...



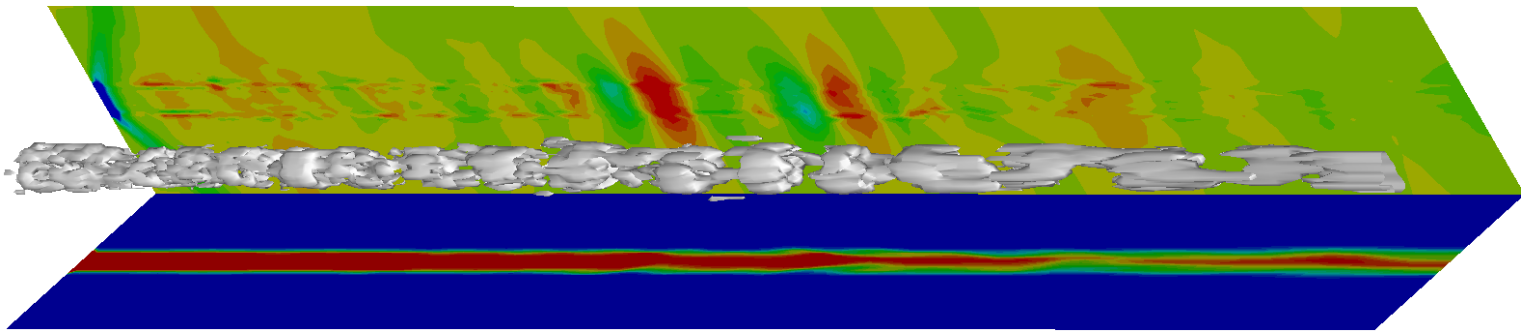
Structure de l'écoulement : effet de la résolution

- **$32 \times 32 \times 128$**

$T_{phys} = 4.6$ ms	# pas de temps	WALL TIME	# proc.	CPU TIME
LES :	10671	0.269	128	34.42
MILES :	10034	0.251	128	32.11



LES, Smagorinsky $C_S = 0.14$, Navier-Stokes

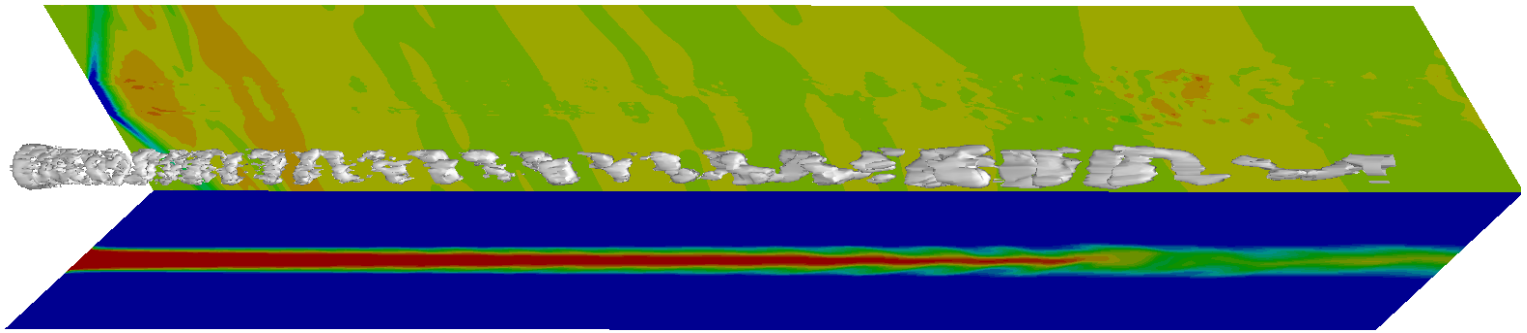


MILES, Navier-Stokes

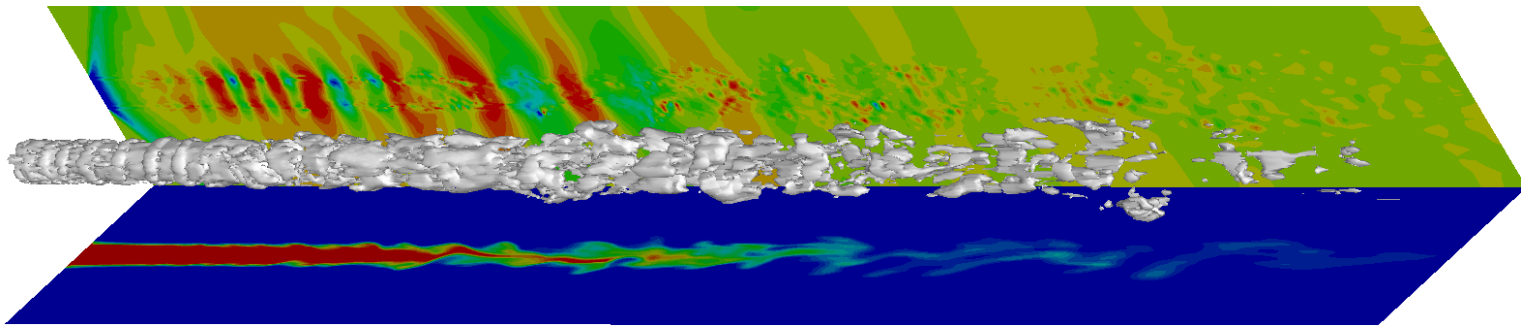
Structure de l'écoulement : effet de la résolution

- **64 × 64 × 256**

$T_{phys} = 4.6$ ms	# pas de temps	WALL TIME	# proc.	CPU TIME
LES :	20022	3.255	128	416.60
MILES :	21198	3.439	128	440.25



LES, Smagorinsky $C_S = 0.14$, Navier-Stokes

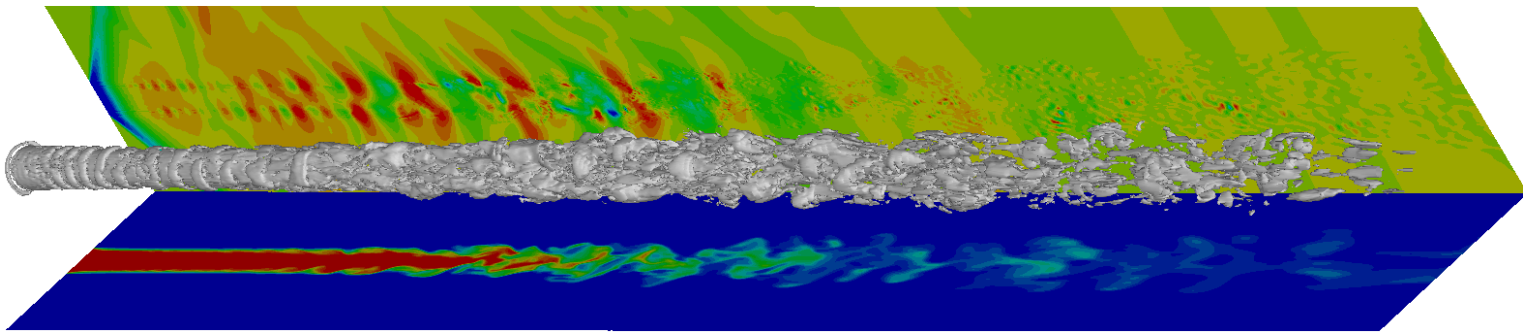


MILES, Navier-Stokes

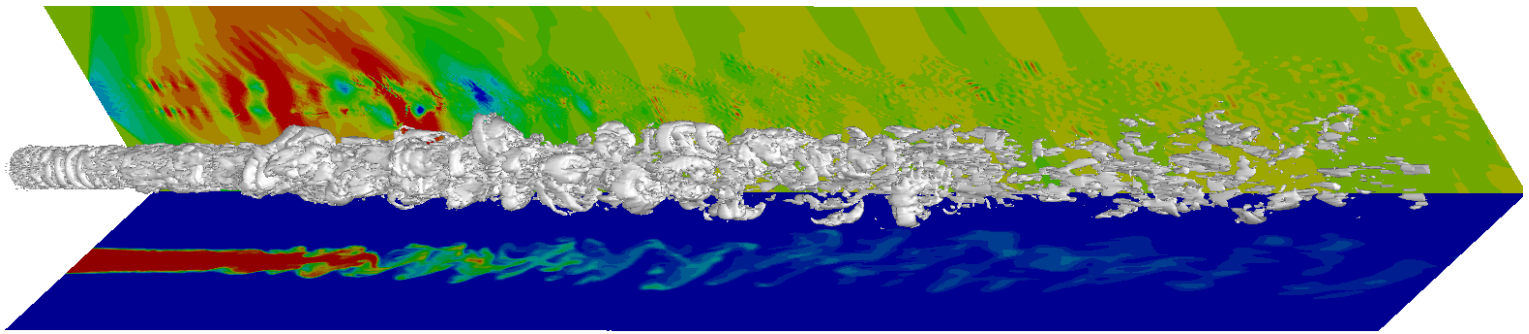
Structure de l'écoulement : effet de la résolution

- **$128 \times 128 \times 512$**

$T_{phys} = 7.0$ ms	# pas de temps	WALL TIME	# proc.	CPU TIME
LES :	43447	53.62	128	6863.00
MILES :	45862	56.32	128	7208.36



LES, Smagorinsky $C_S = 0.14$, Navier-Stokes

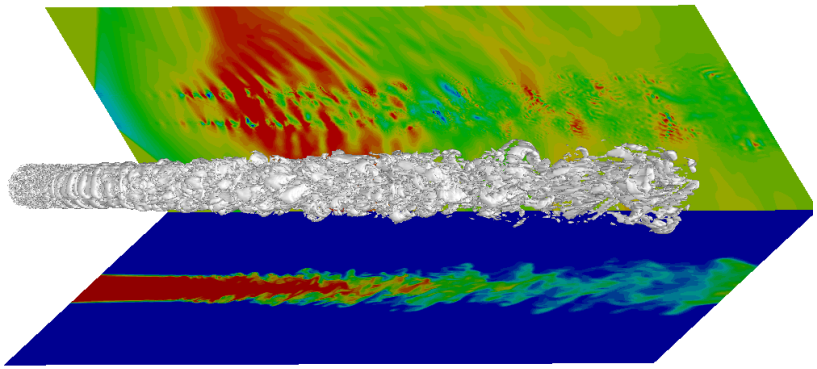


MILES, Navier-Stokes

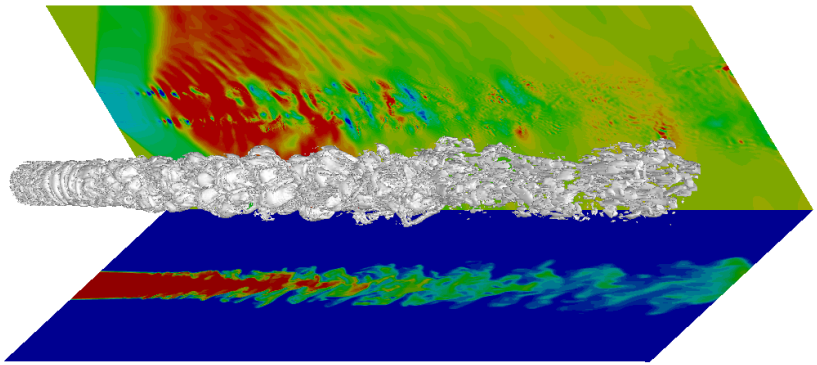
Structure de l'écoulement : effet de la résolution

- **256** $\times$ **256** $\times$ **512** (domaine réduit de moitié)

1.06/**1.78** ms	# pas de temps	WALL TIME	# proc.	CPU TIME
LES :	13585/**10035**	67.71/**25.18**	128/**256**	8866.77/**6445.72**
MILES :	14191/**10576**	70.49/**26.46**	128/**256**	9022.64/**6773.62**



LES, Smagorinsky $C_S = 0.14$, Navier-Stokes

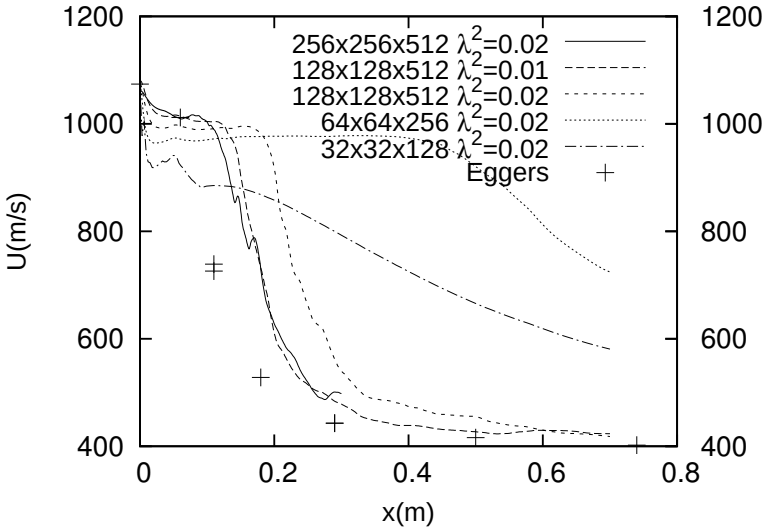


MILES, Navier-Stokes

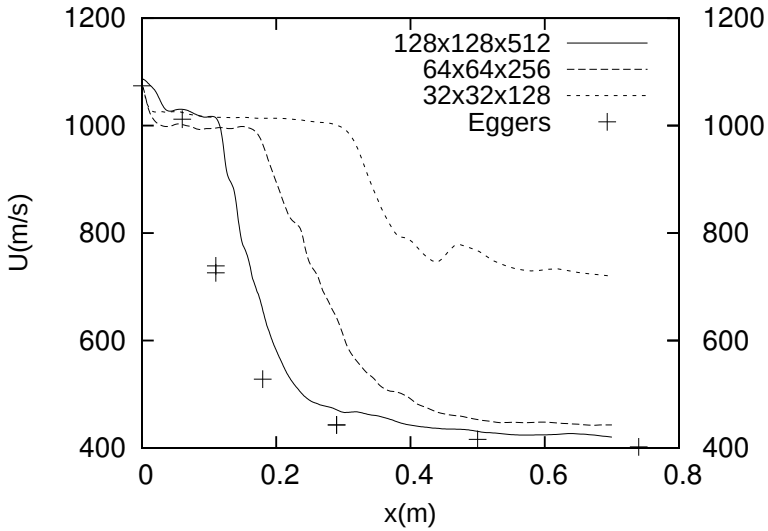
- le modèle sous-maille est-il encore actif ?
- la viscosité numérique dépasse-t-elle la viscosité moléculaire ?
- n'est-on pas en train de réaliser une DNS ?

$\rightarrow$ **calculs sans viscosité moléculaire (MILES/LES-Euler)**

Décroissance axiale de la vitesse axiale : LES



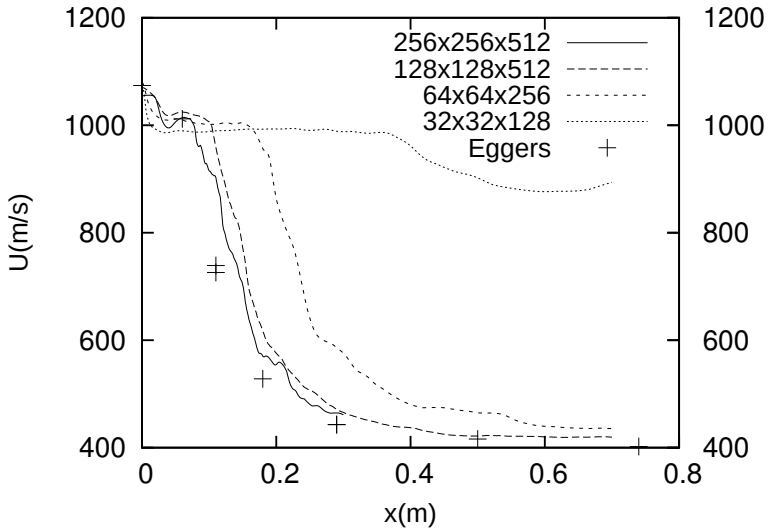
LES, Smagorinsky $C_S = 0.10$ et $C_S = 0.14$



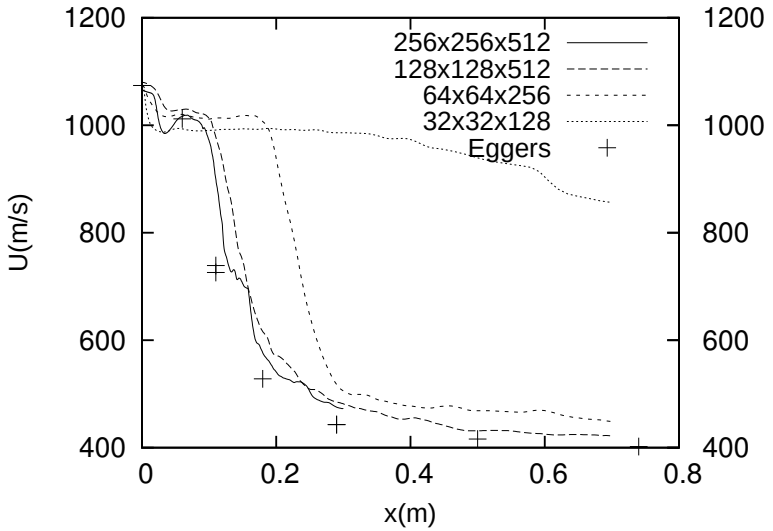
LES, Selective Structure Function

- LES Smagorinsky : modèle trop dissipatif dans la région d'injection (inhibe la transition) $\longrightarrow$ le jet reste laminaire
- LES Selective Structure Function : distingue la zone d'injection (modèle à zéro) $\longrightarrow$ bien meilleurs résultats

Décroissance axiale de la vitesse axiale : MILES



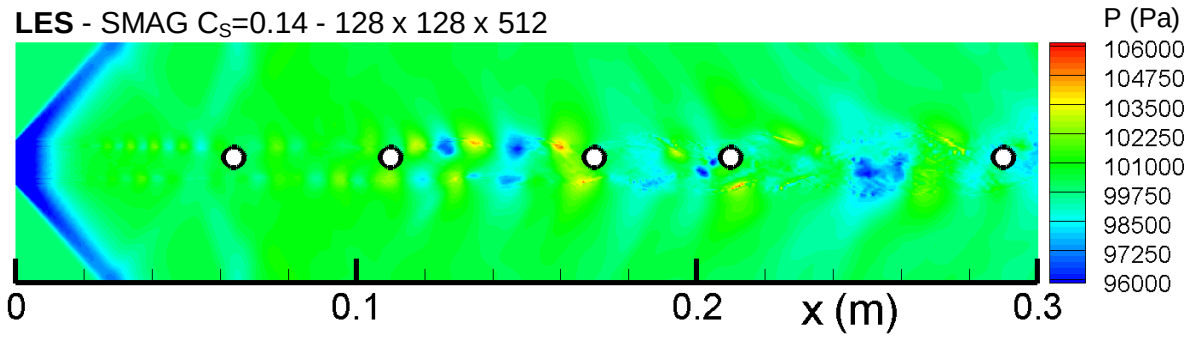
MILES, Navier-Stokes

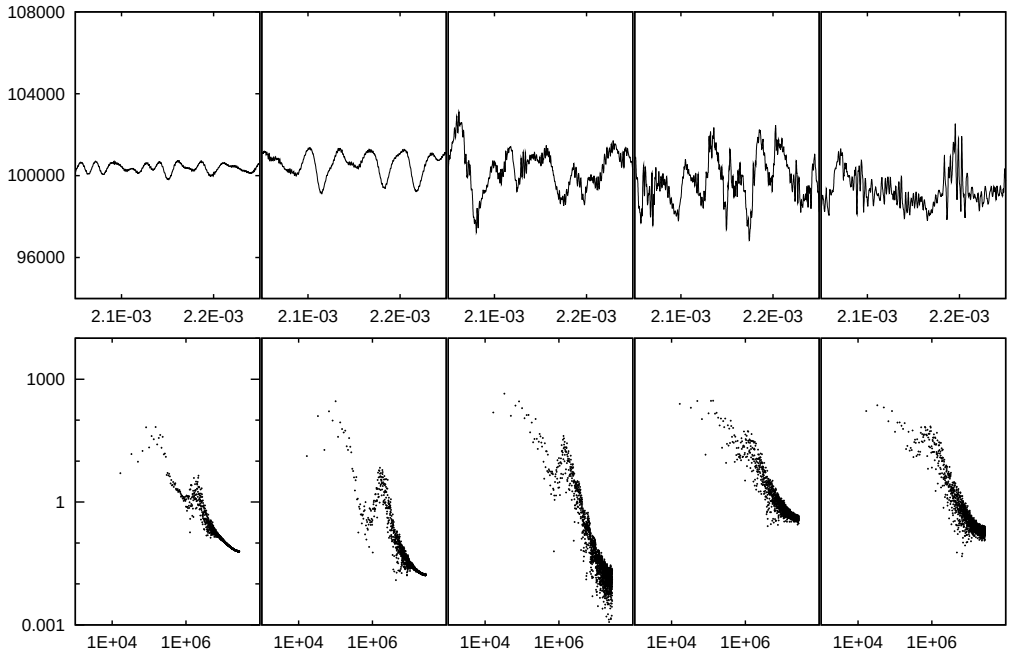


MILES, Euler

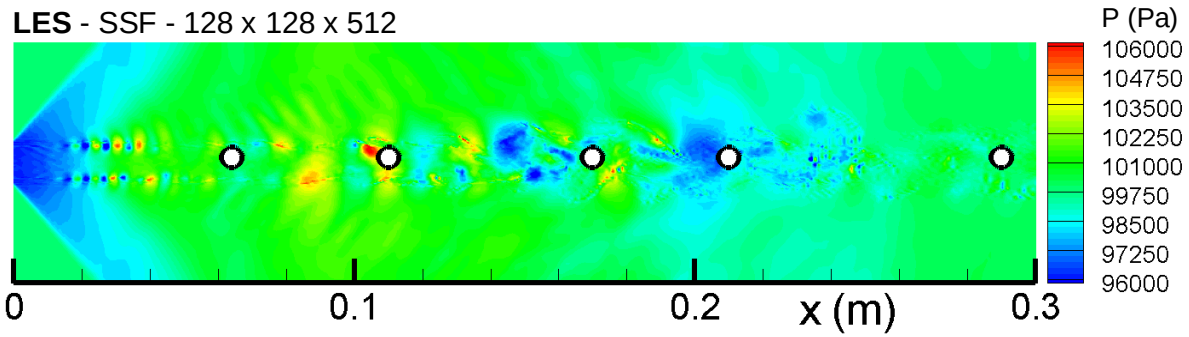
- MILES Navier-Stokes : convergence du calcul vers les résultats expé.
- MILES Euler : en principe pas de convergence en maillage mais... ??

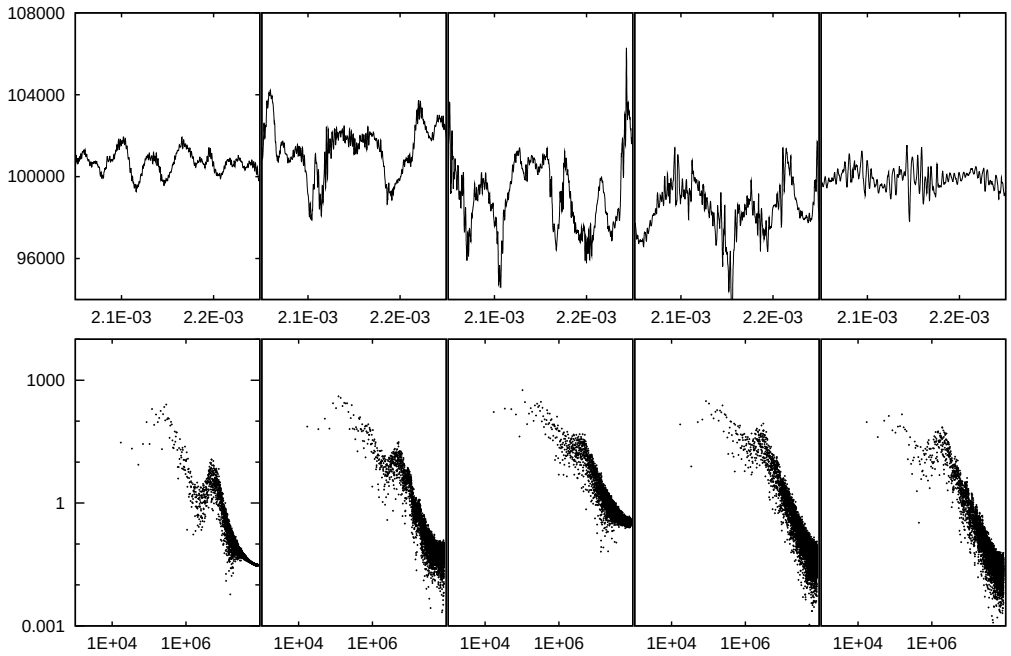
Analyse spectrale temporelle : pression



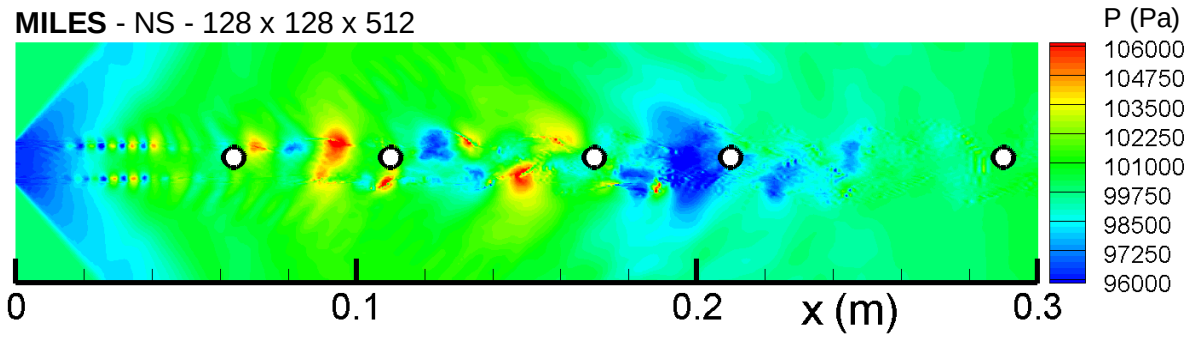


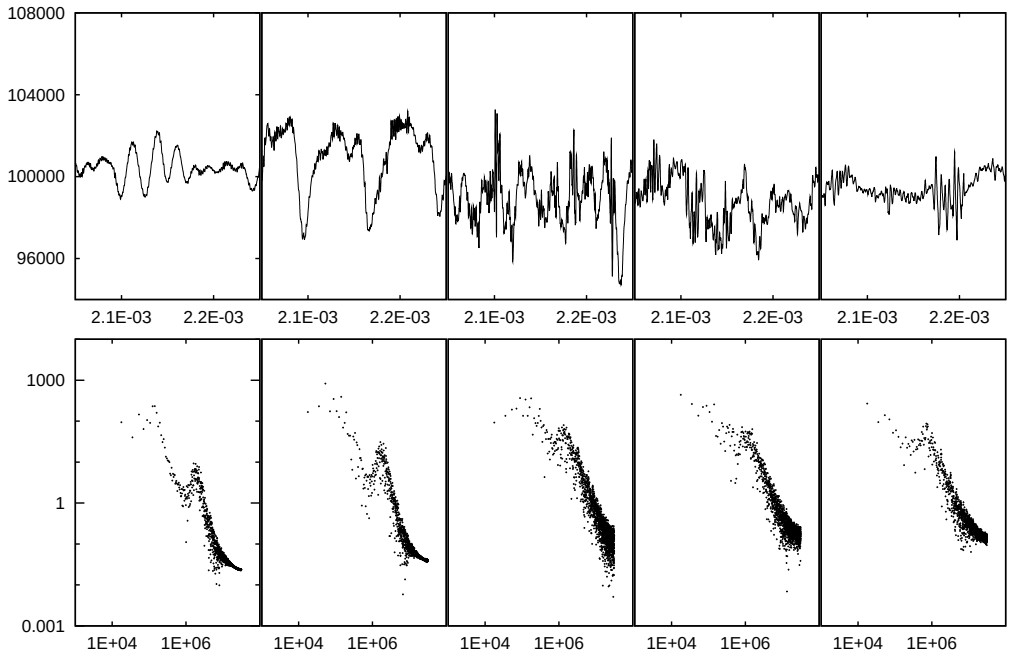
Analyse spectrale temporelle : pression



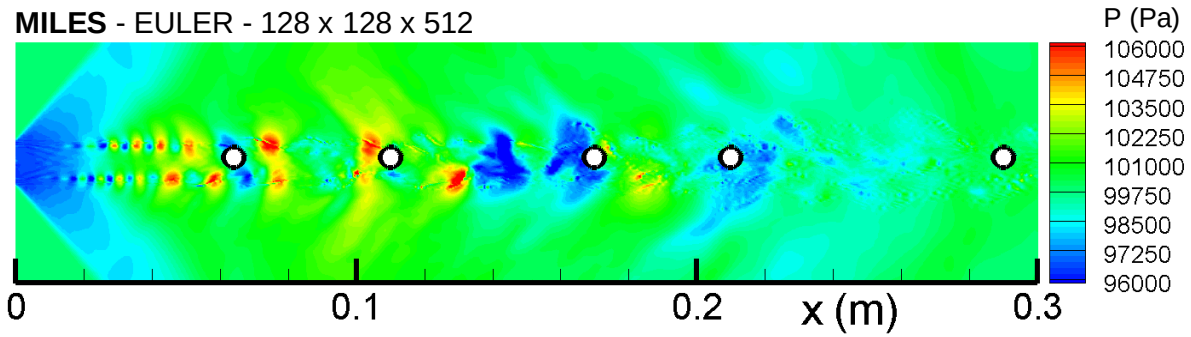


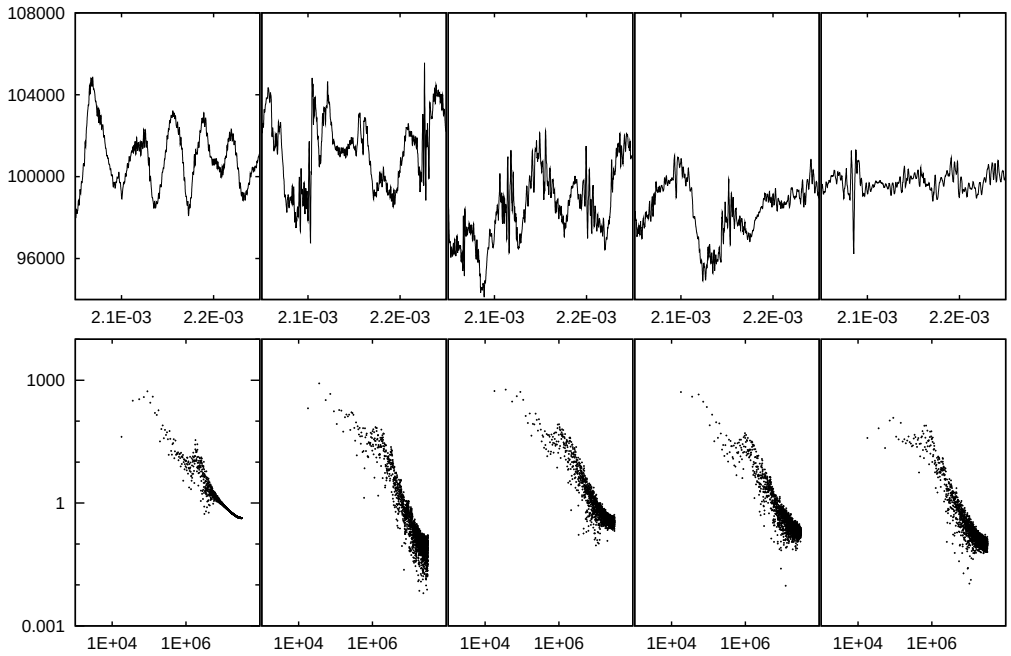
Analyse spectrale temporelle : pression



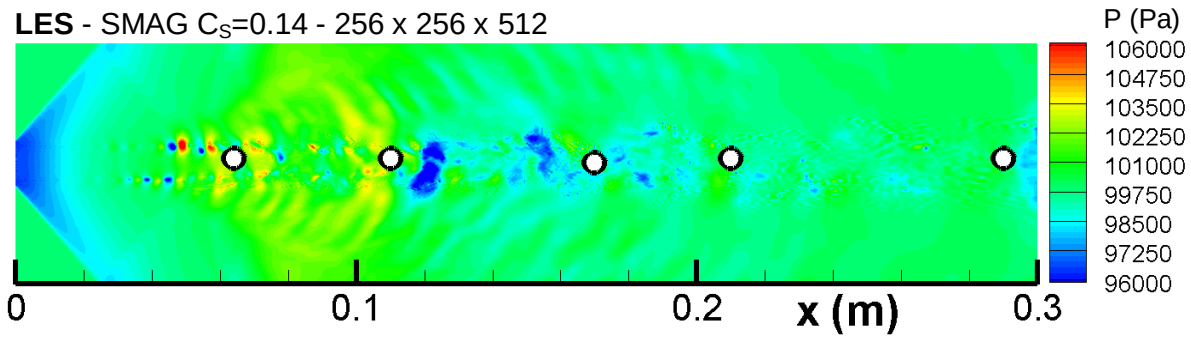


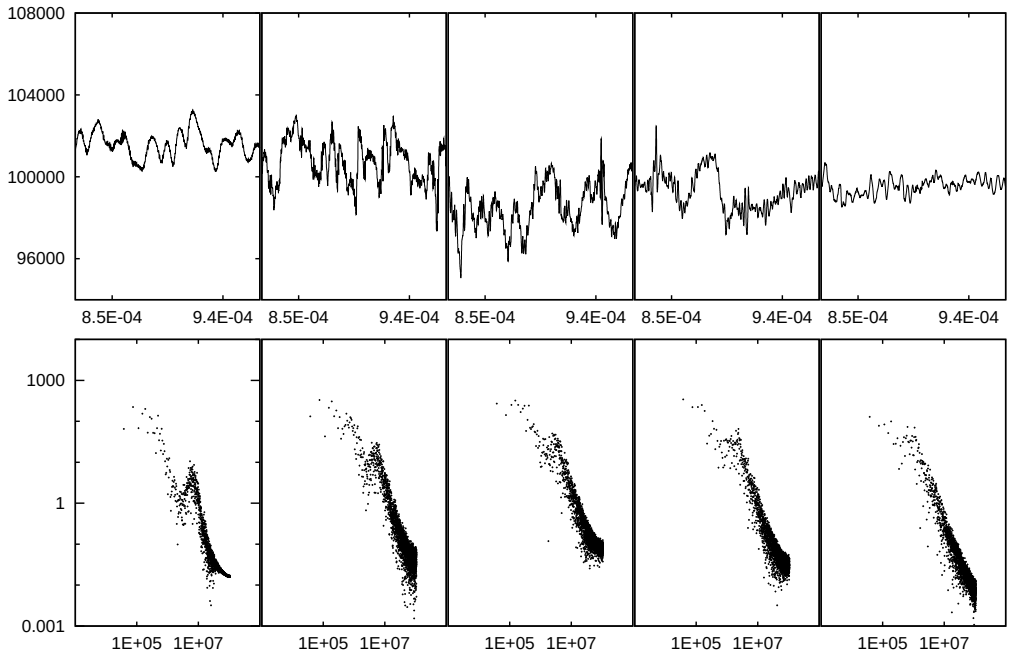
Analyse spectrale temporelle : pression



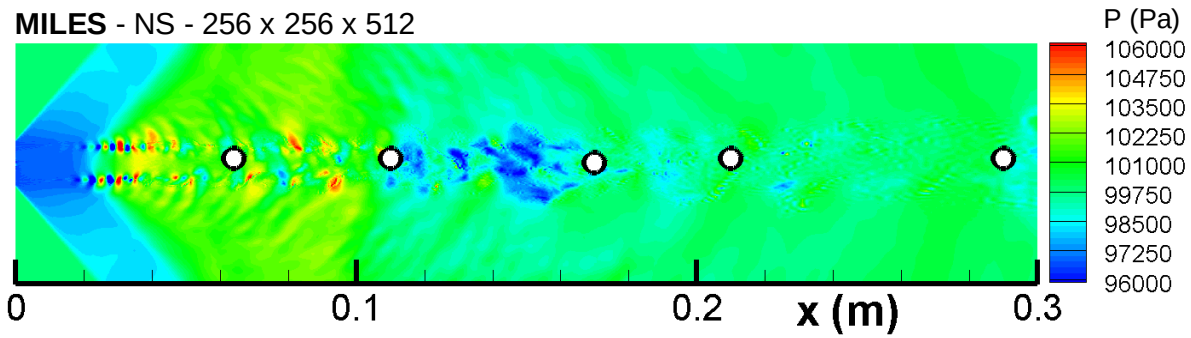


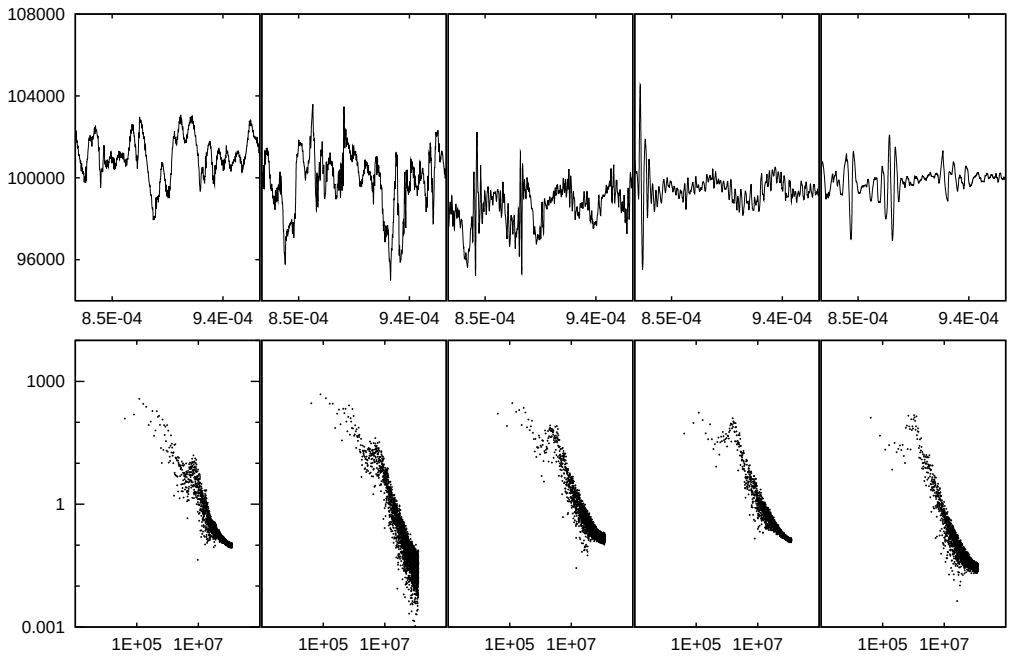
Analyse spectrale temporelle : pression



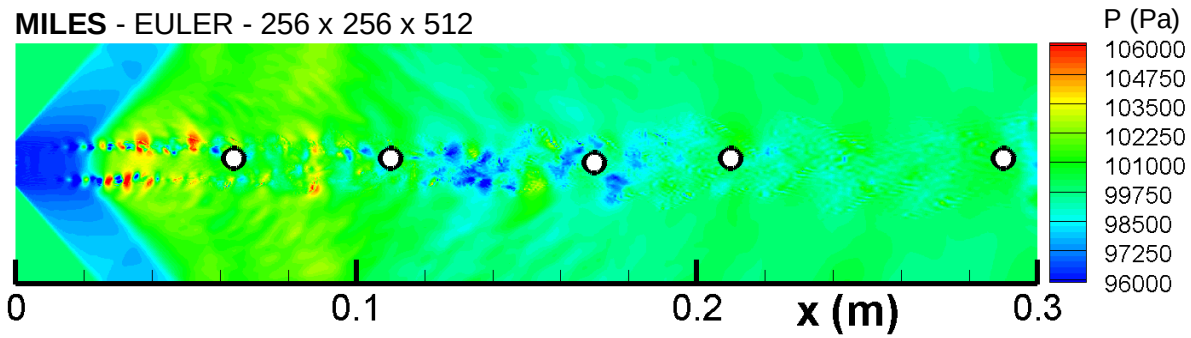


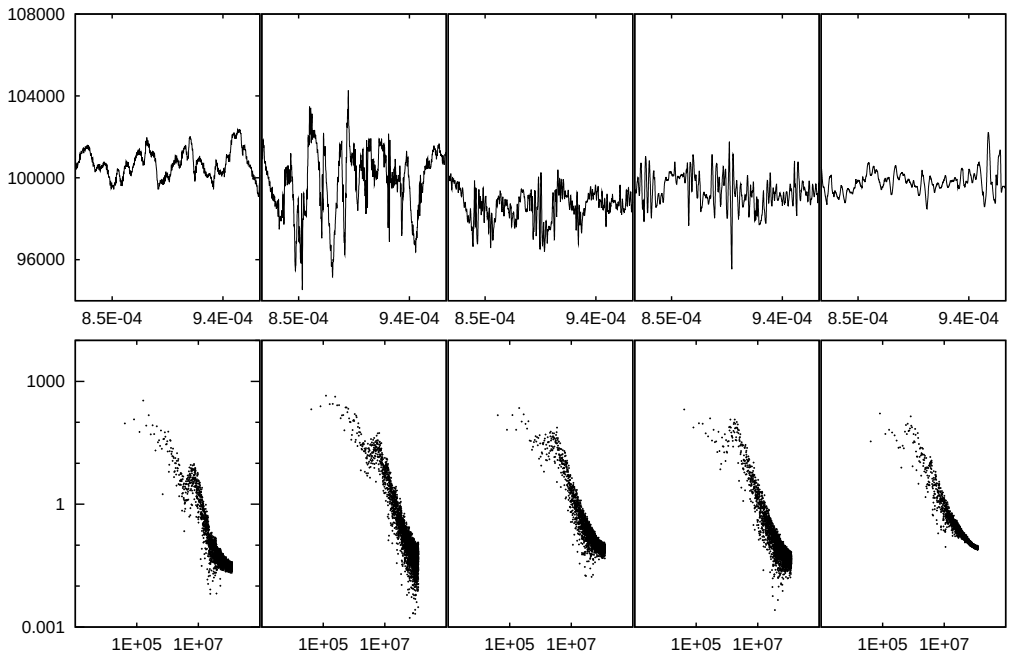
Analyse spectrale temporelle : pression



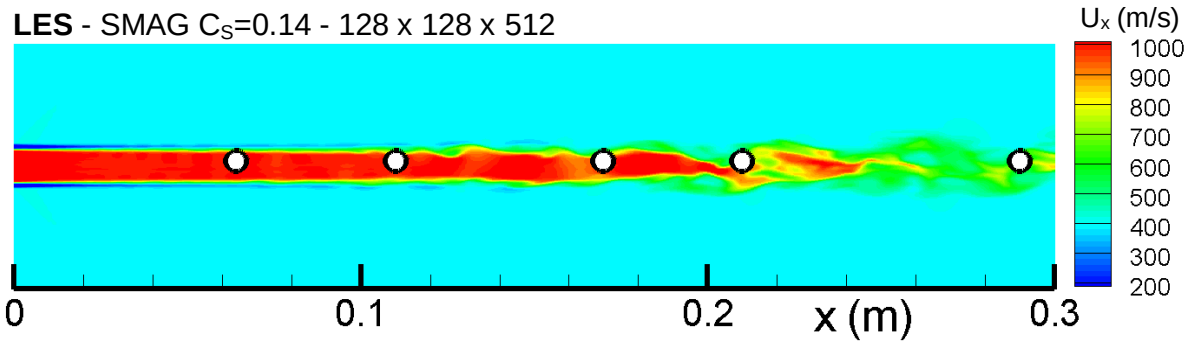


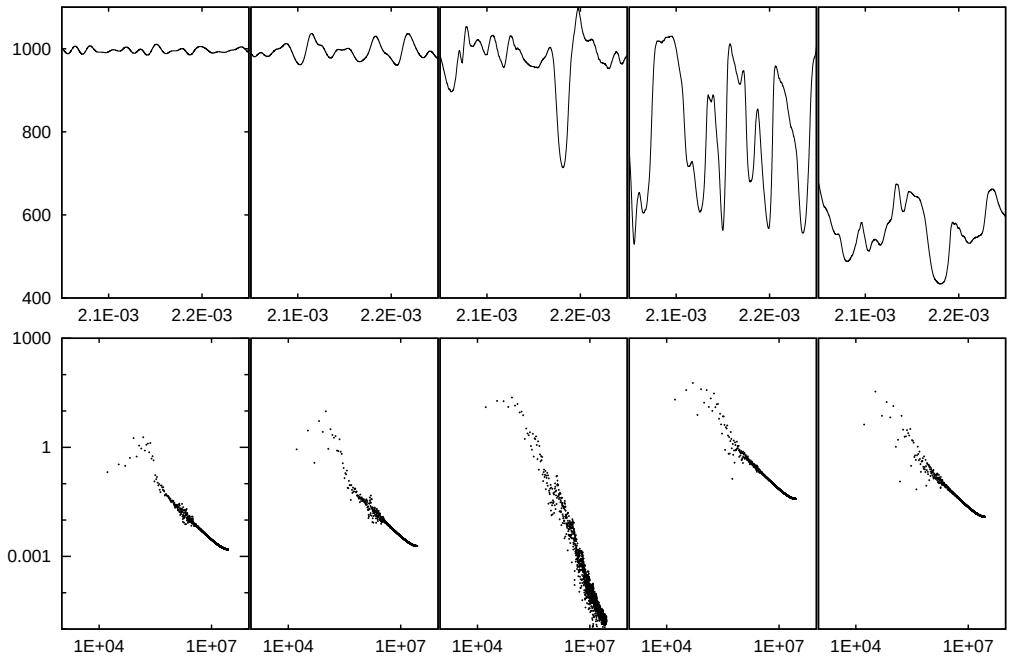
Analyse spectrale temporelle : pression



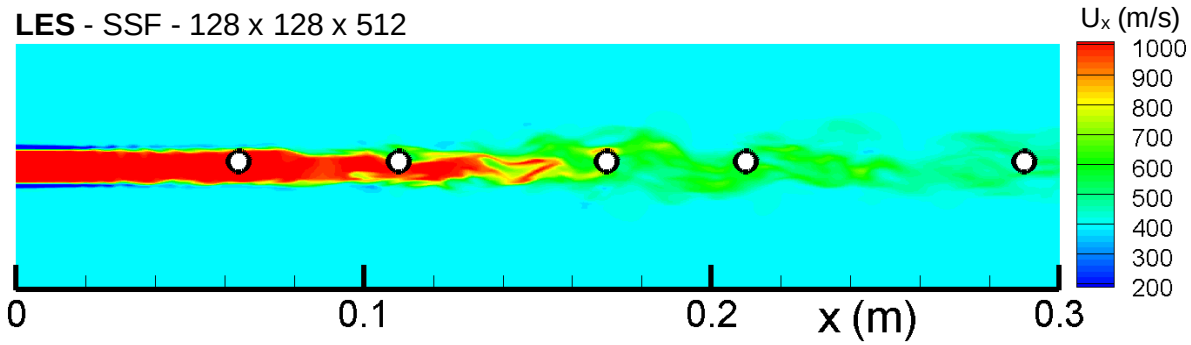


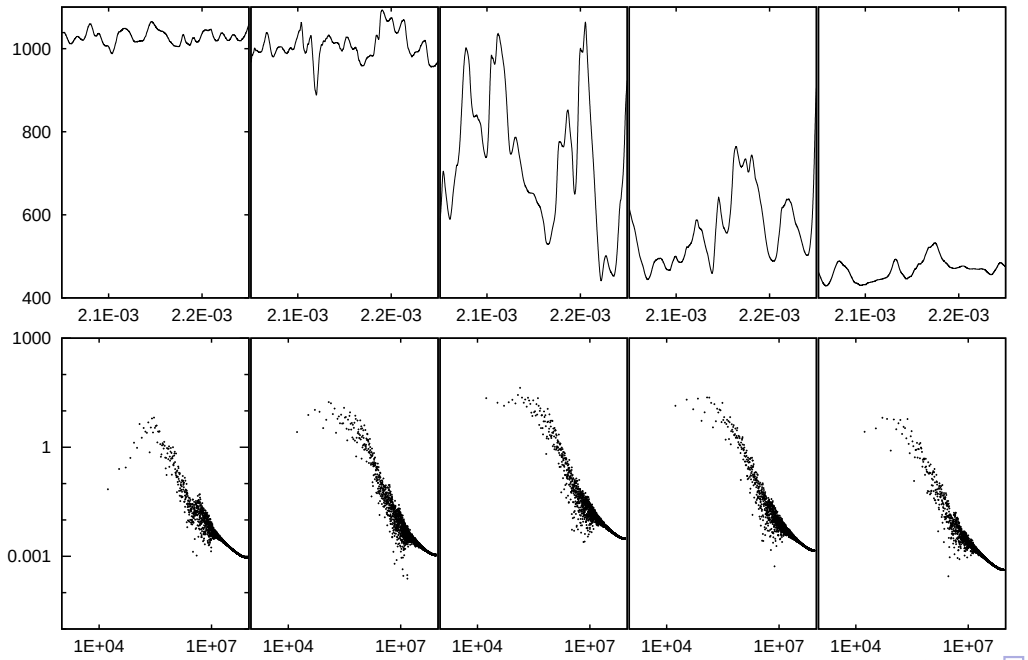
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



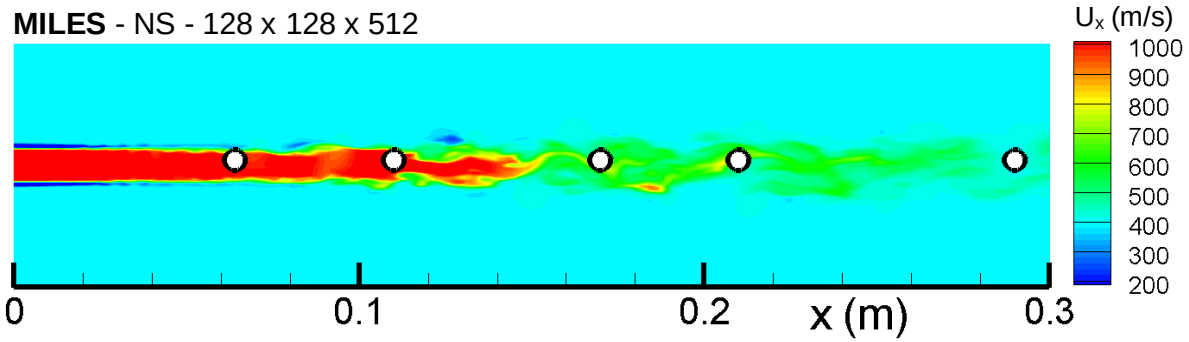


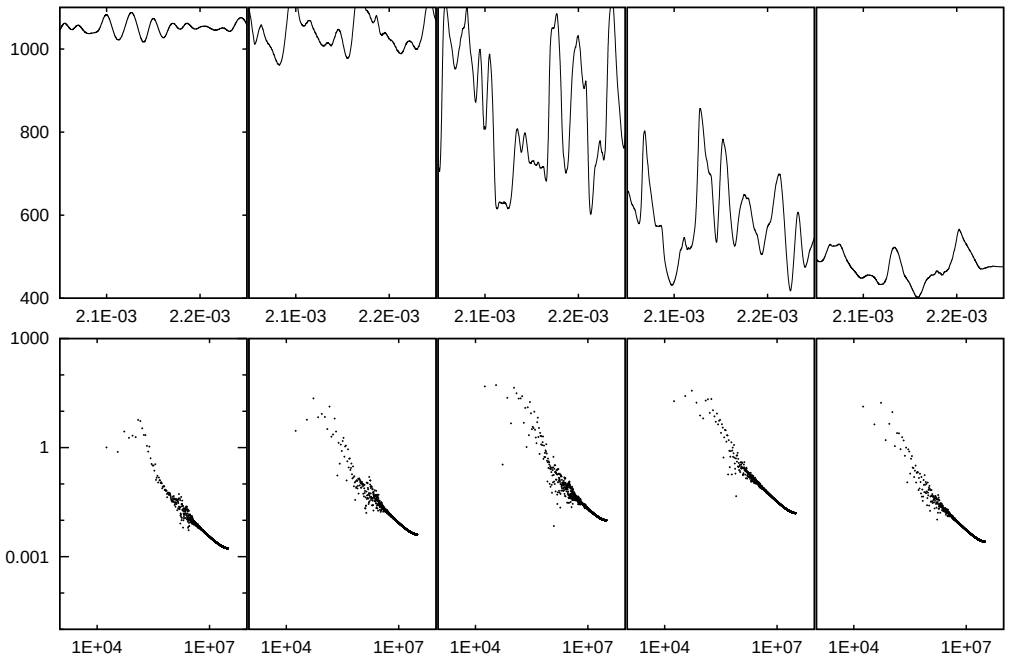
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



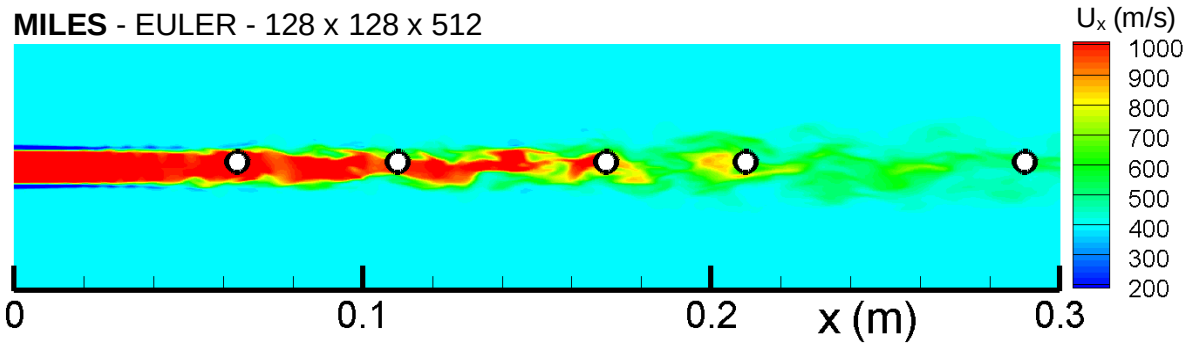


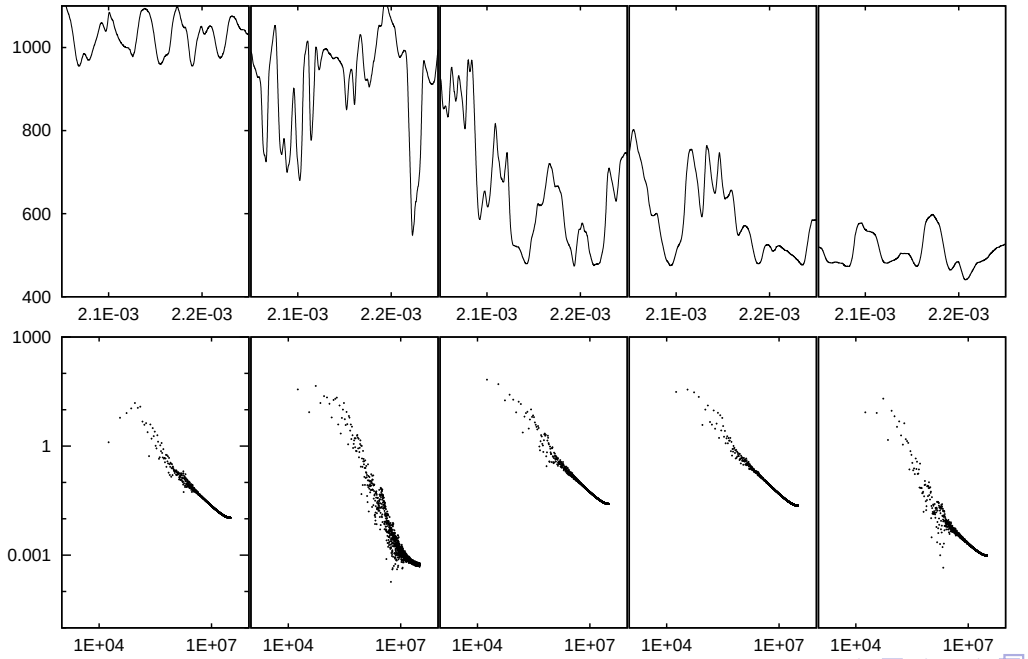
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



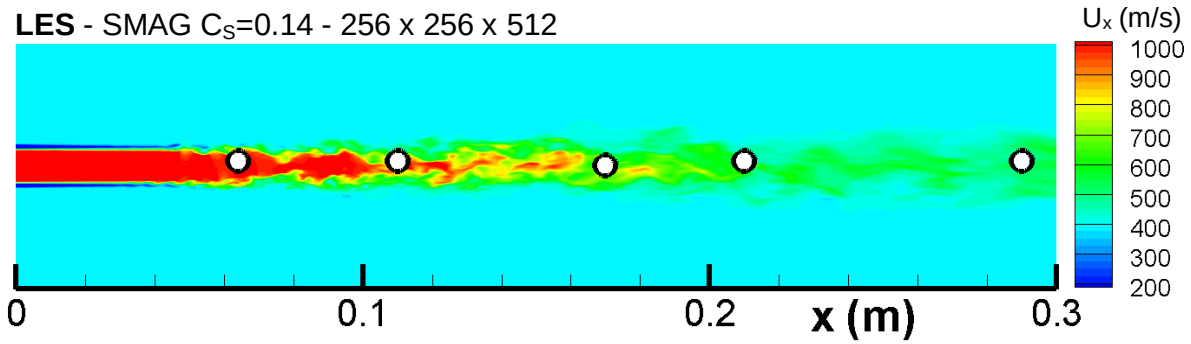


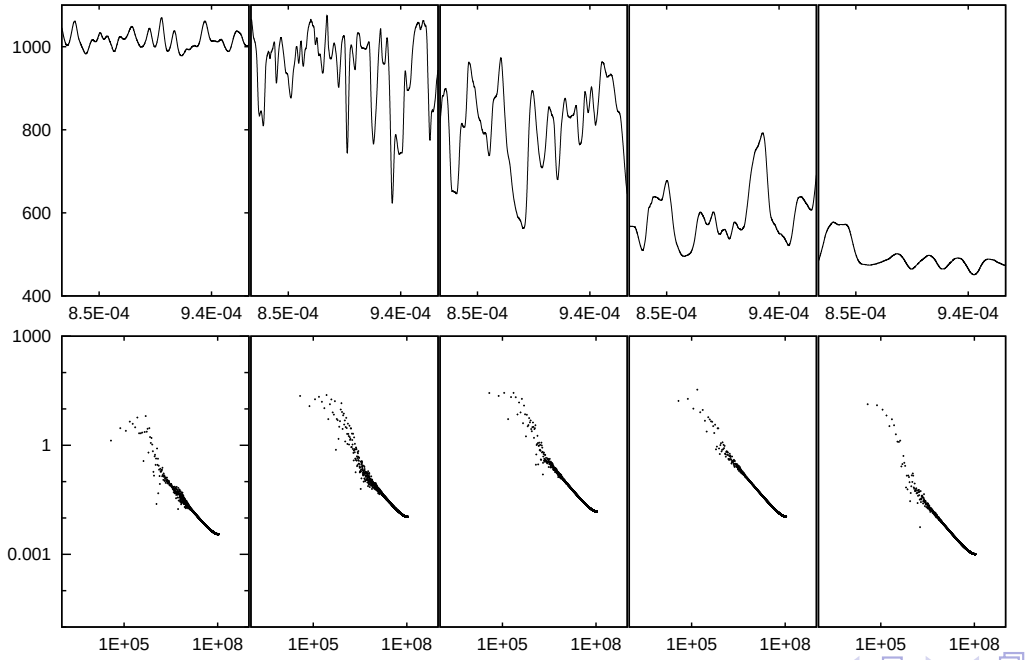
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



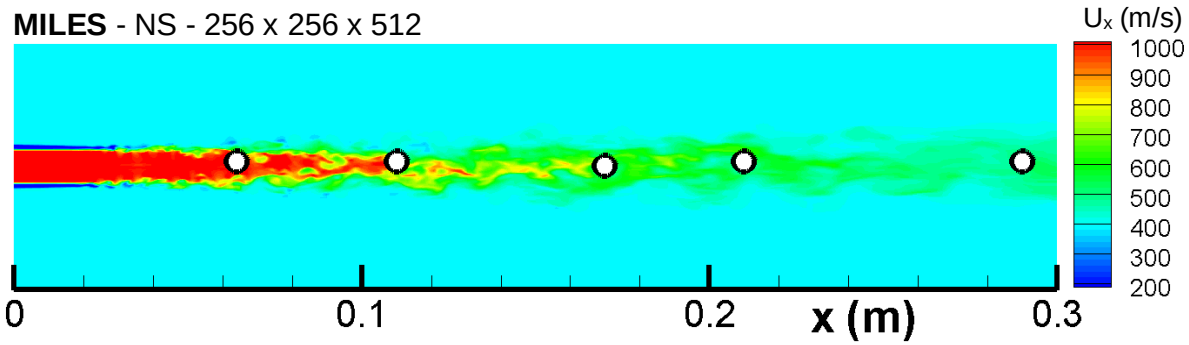


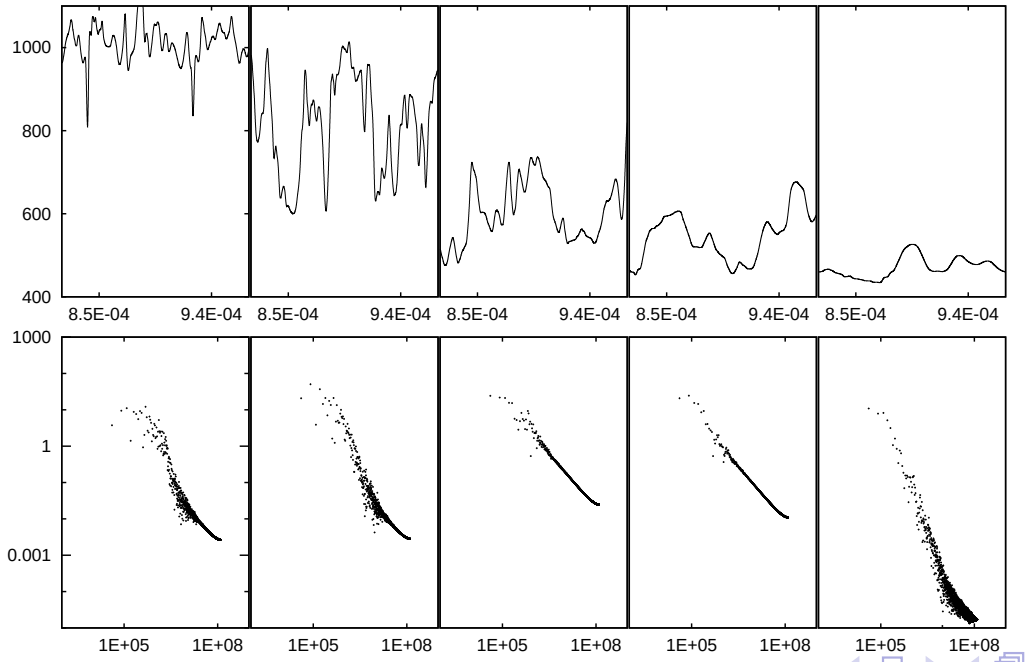
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



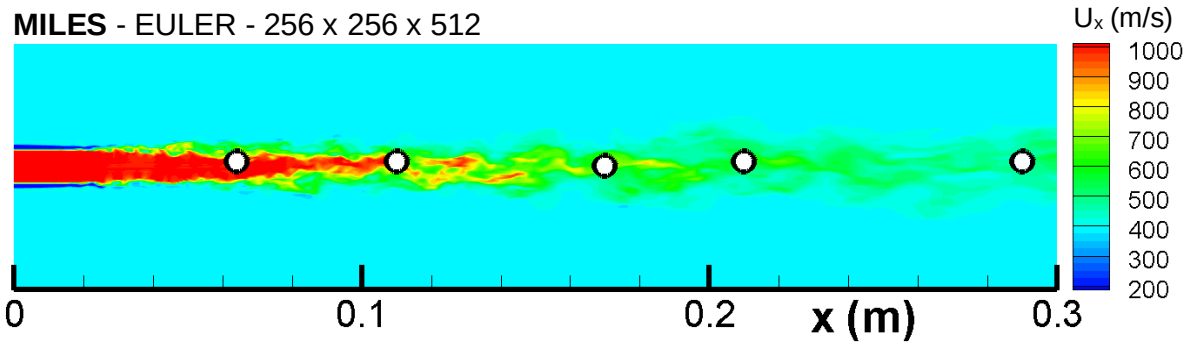


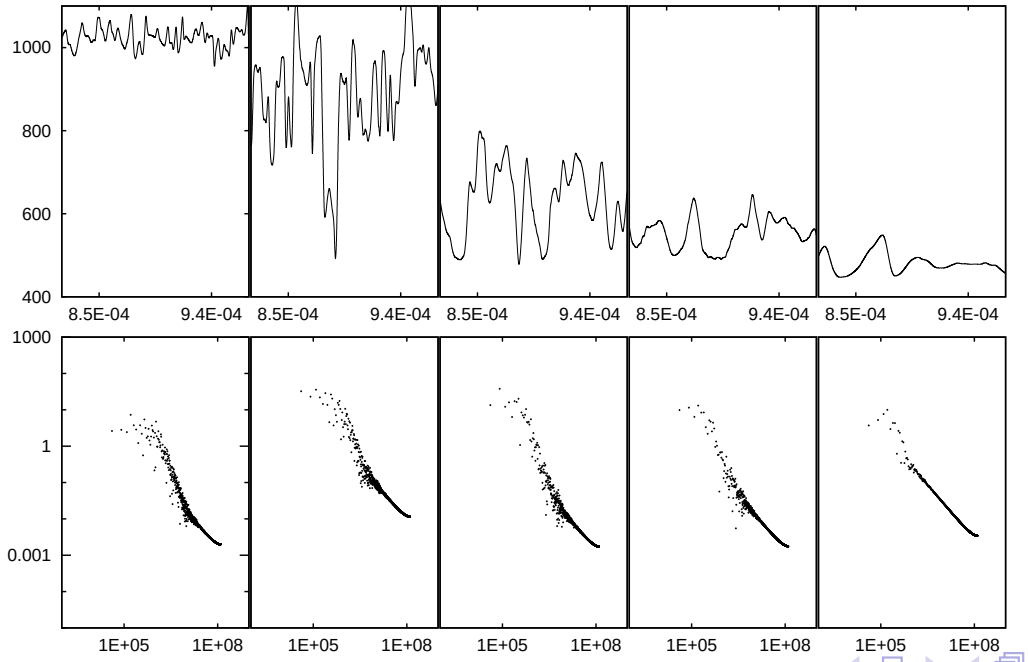
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



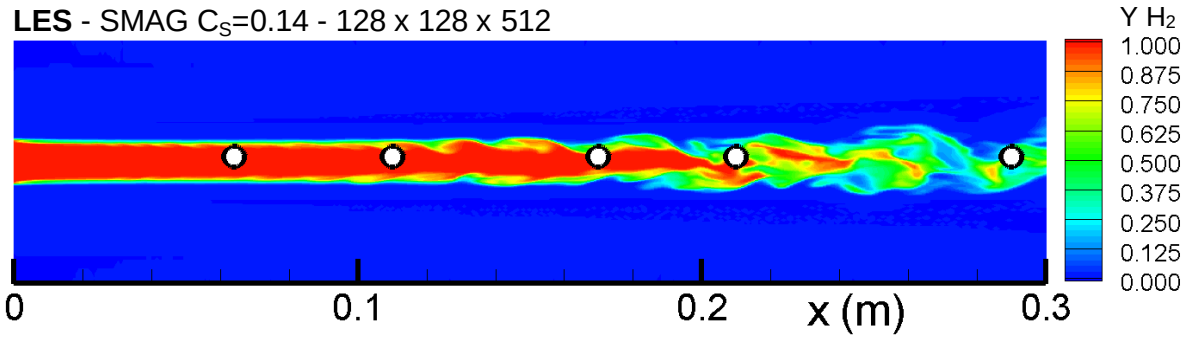


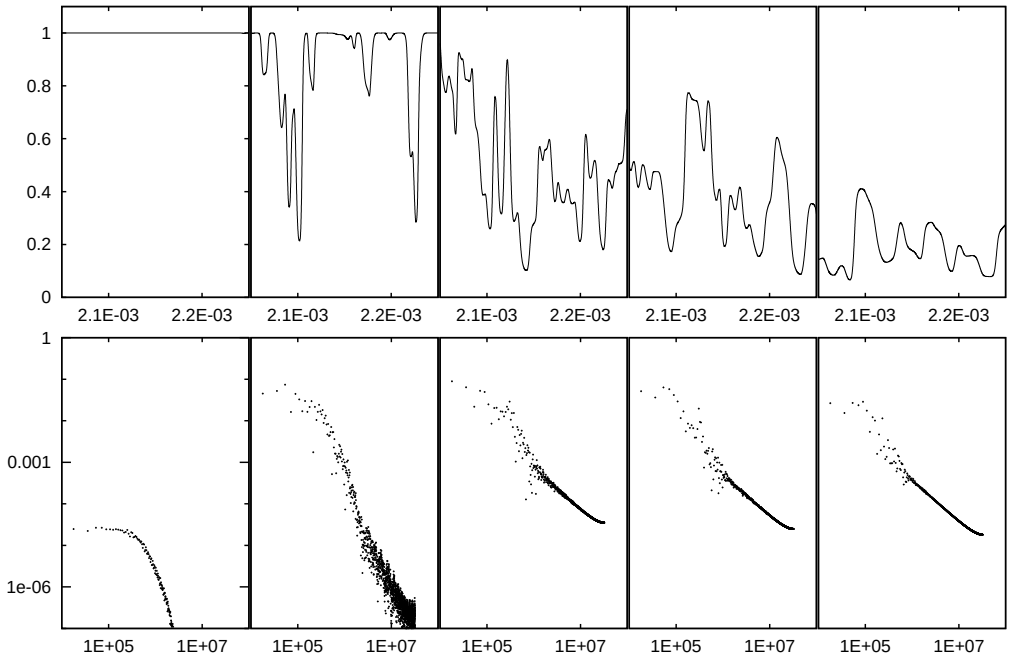
Analyse spectrale temporelle : vitesse axiale



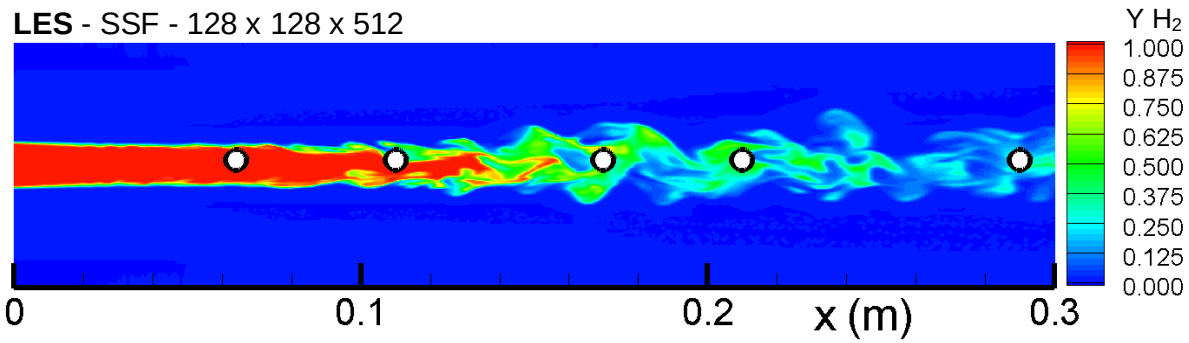


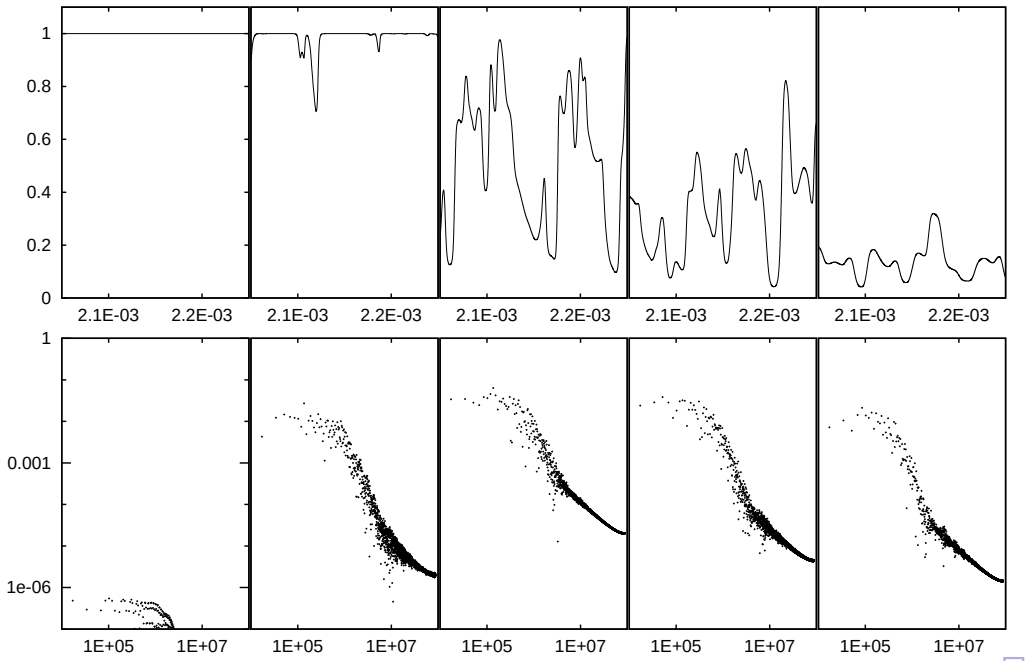
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2



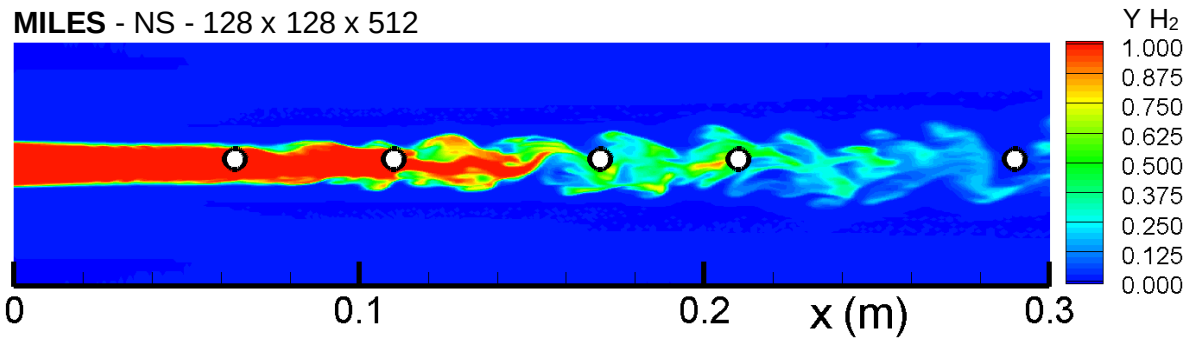


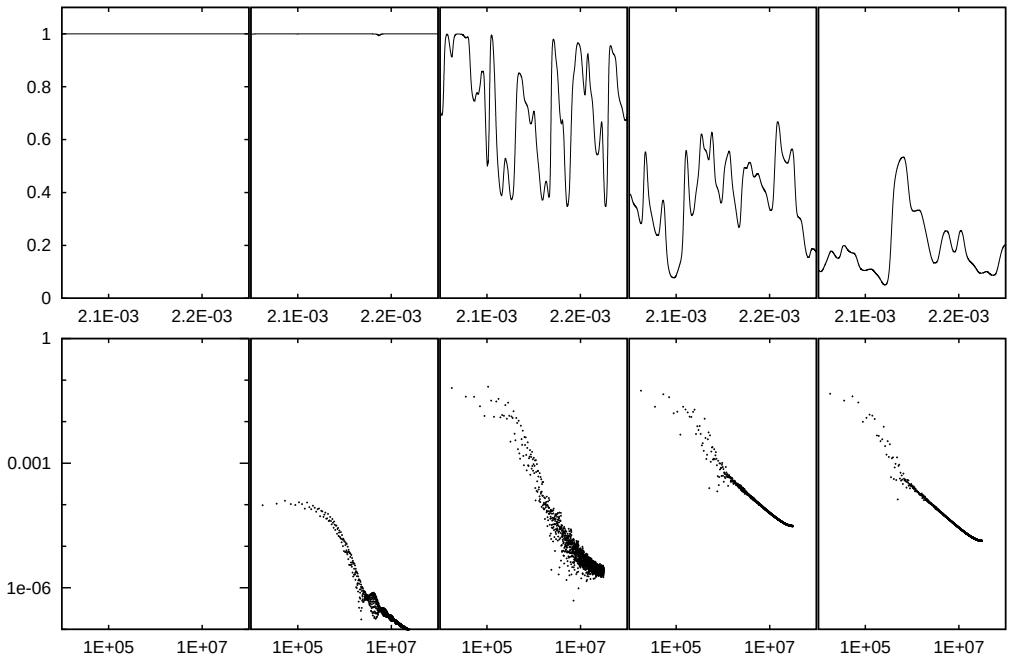
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2



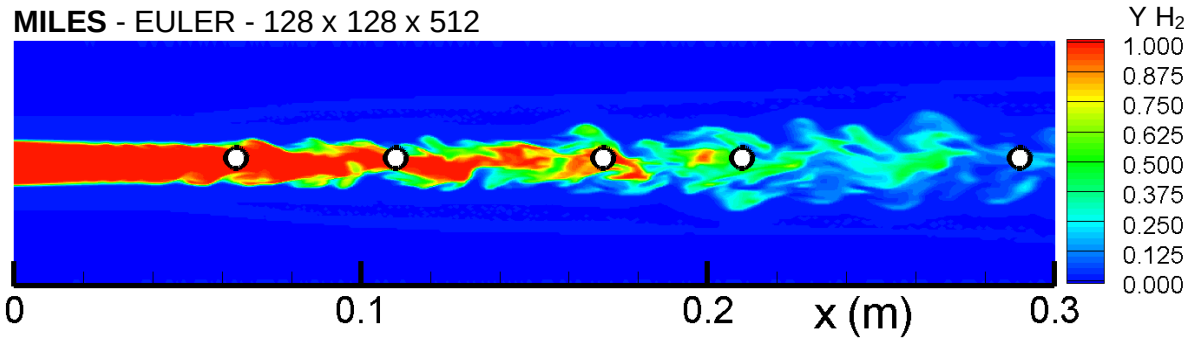


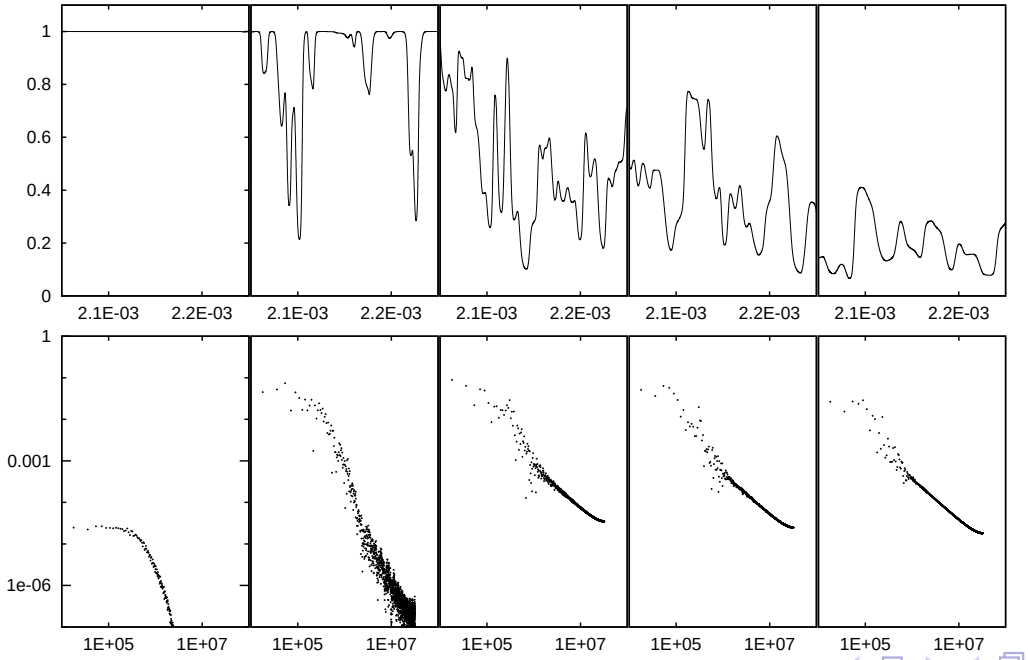
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2



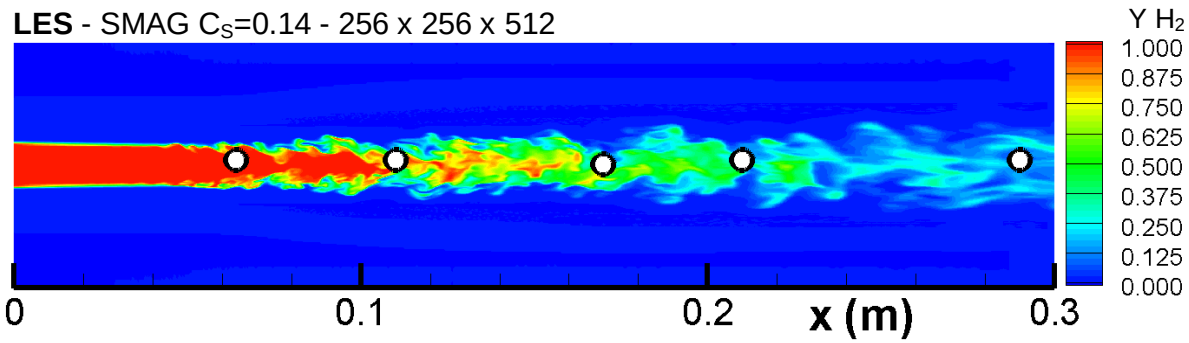


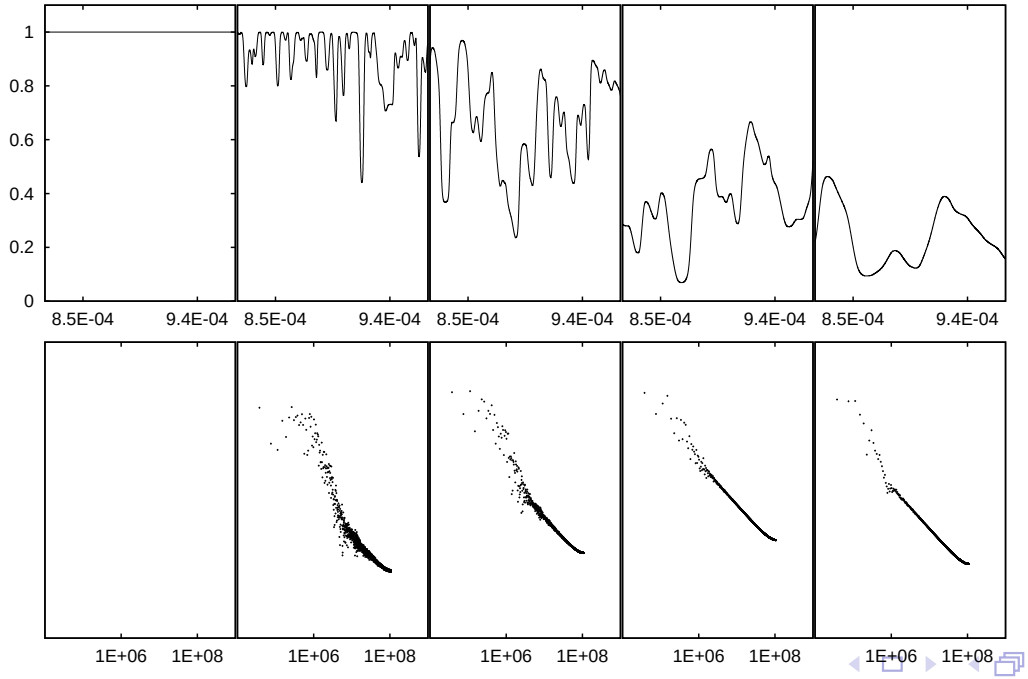
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2



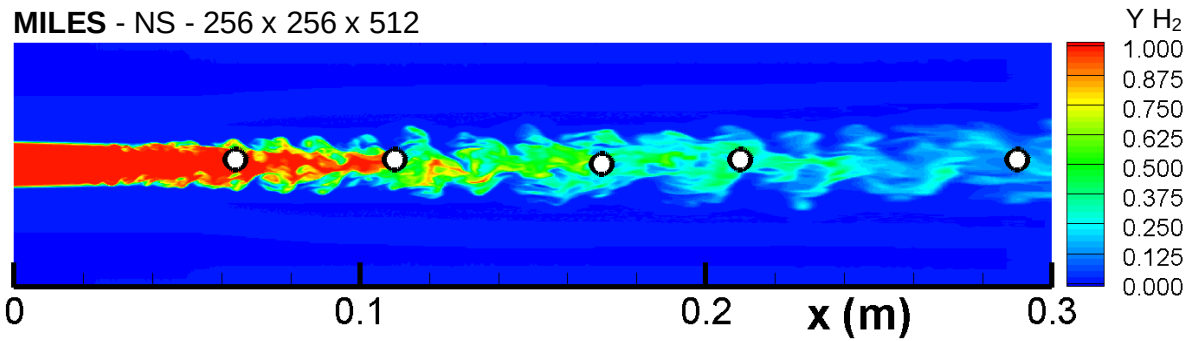


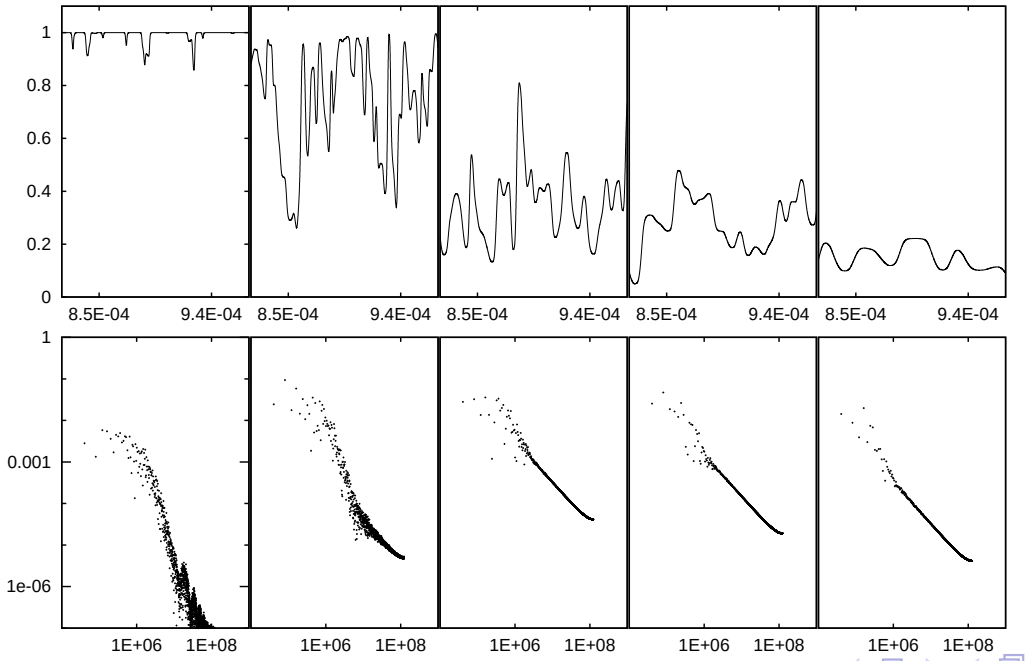
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2



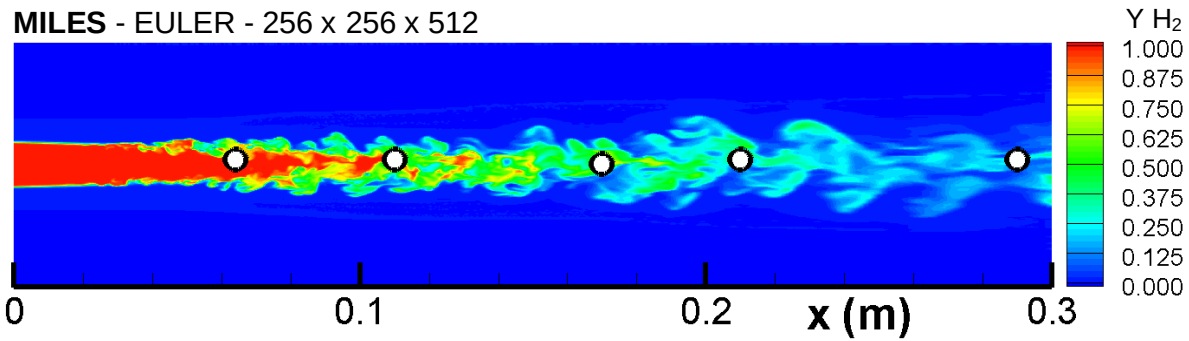


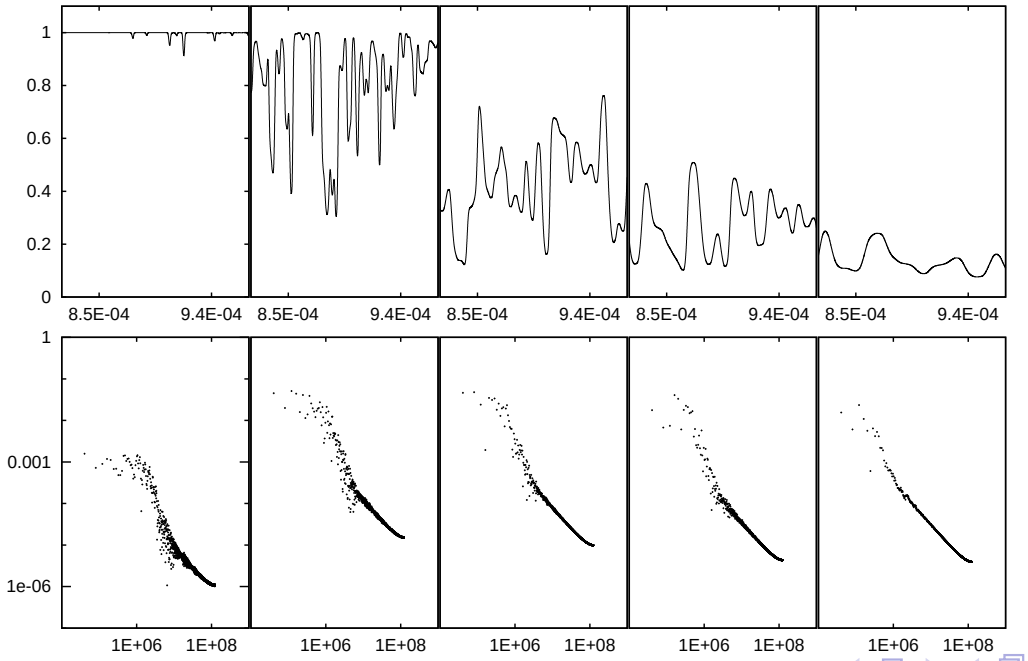
Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2





Analyse spectrale temporelle : mélange air/H_2





Conclusions et prespectives

- MILES/LES/DNS = “soufflerie” numérique

  → accès à TOUTES les grandeurs en TOUT point

  → nécessité de statistiques *a posteriori*

Conclusions et prespectives

- MILES/LES/DNS = “soufflerie” numérique

  → accès à TOUTES les grandeurs en TOUT point

  → nécessité de statistiques *a posteriori*

- Calculs 3D instationnaires très coûteux

Conclusions et prespectives

- MILES/LES/DNS = “soufflerie” numérique

  → accès à TOUTES les grandeurs en TOUT point

  → nécessité de statistiques *a posteriori*

- Calculs 3D instationnaires très coûteux
- LES : modèles simples trop dissipatifs en zone transitionnelle

  → besoin de “patcher” les modèles

Conclusions et prespectives

- MILES/LES/DNS = "soufflerie" numérique

  → accès à TOUTES les grandeurs en TOUT point

  → nécessité de statistiques *a posteriori*

- Calculs 3D instationnaires très coûteux
- LES : modèles simples trop dissipatifs en zone transitionnelle

  → besoin de "patcher" les modèles

- MILES : ok si coupure physique → MILES Navier-Stokes

Conclusions et prespectives

- MILES/LES/DNS = "soufflerie" numérique

  → accès à TOUTES les grandeurs en TOUT point

  → nécessité de statistiques *a posteriori*
- Calculs 3D instationnaires très coûteux
- LES : modèles simples trop dissipatifs en zone transitionnelle

  → besoin de "patcher" les modèles
- MILES : ok si coupure physique → MILES Navier-Stokes
- Passage aux cas réactifs : encore + coûteux

  → comportement du MILES sur fronts de flamme ?

Merci de votre attention... Questions ?

Termes visqueux, transport

- Contraintes visqueuses : fluide Stokes-newtonnien

$$\tau_{ij} = \mu S_{ij} = \mu \left(u_{i,j} + u_{j,i} - \frac{2}{3} u_{k,k} \delta_{ij} \right) \quad ; \quad \mu = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{X_\alpha \mu_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{N_{sp}} X_\beta \phi_{\alpha\beta}} \qquad \text{(Wilke)}$$

- Flux de chaleur : flux d'enthalpies partielles + loi de Fourier

$$\dot{q}_j = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} h_\alpha J_{\alpha j} - \lambda T_{,j} \quad ; \quad \lambda = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{X_\alpha \lambda_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{N_{sp}} X_\beta \phi_{\alpha\beta}}$$

- Flux de masse : loi de Fick + vitesse de correction

$$J_{\alpha j} = -\rho D_{\alpha m} \frac{W_\alpha}{W} X_{\alpha,j} \quad ; \quad V_j^c = \sum_{\beta=1}^{N_{sp}} D_{\beta m} \frac{W_\beta}{W} X_{\beta,j}$$

$$D_{\alpha m} = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha} \frac{X_\beta}{\mathcal{D}_{\alpha\beta}}} \qquad \text{(Hirschfelder-Curtiss)}$$

Termes sources chimiques

- Système de N_{reac} réactions réversibles (ou non)

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \nu'_{\alpha j} A_\alpha \rightleftarrows \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \nu''_{\alpha j} A_\alpha \qquad j = 1, ..., N_{reac}$$

- Vitesse de réaction : loi d'Arrhénius $\qquad K = AT^b \exp\left(-\frac{E_{act}}{\mathcal{R}T}\right)$
- Vitesse de réaction directe et inverse : constante d'équilibre

$$K_{ej} = \frac{K_{fj}}{K_{bj}} = \left(\frac{P_{atm}}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \nu''_{\alpha j} - \nu'_{\alpha j}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T}\right)$$

- Au final, production d'espèce α :

$$\dot{\omega_\alpha} = W_\alpha \sum_{j=1}^{N_{reac}} \left(\nu''_{\alpha j} - \nu'_{\alpha j}\right) \left[K_{fj} \prod_{\beta=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_\beta}{W_\beta}\right)^{\nu'_{\alpha j}} - K_{rj} \prod_{\beta=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_\beta}{W_\beta}\right)^{\nu''_{\alpha j}}\right]$$

Equations de Navier-Stokes filtrées : LES

- Filtrage : ne retenir que les fluctuations (échelles) spatiales supérieures à Δ

exemple filtre boite 1D : $\boxed{\overline{\phi}(x) = \frac{1}{\Delta}\int_{x-\Delta/2}^{x+\Delta/2} \phi(\xi) d\xi}$

$\phi = \overline{\phi} + \phi'$ mais attention ! $\overline{\overline{\phi}} \neq \overline{\phi}$ et $\overline{\phi'} \neq 0$

- Equation de conservation de la masse filtrée :

$$\overline{\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho u_j)_{,j}} = 0$$

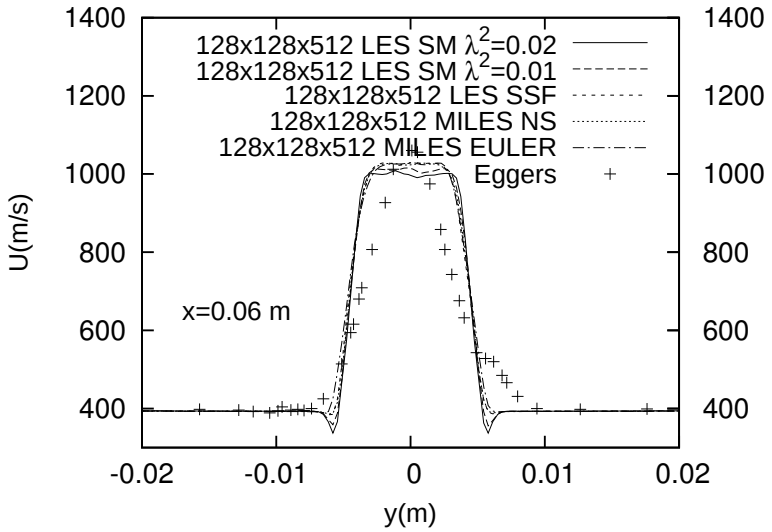
Filtre linéaire : $\overline{\frac{\partial \rho}{\partial t}} + \overline{(\rho u_j)_{,j}} = 0$

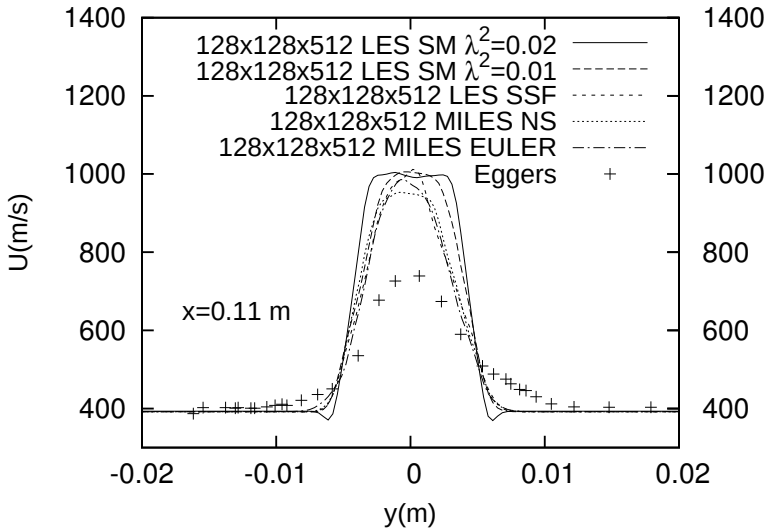
commute avec les dérivées : $\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \overline{(\rho u_j)}_{,j} = 0$

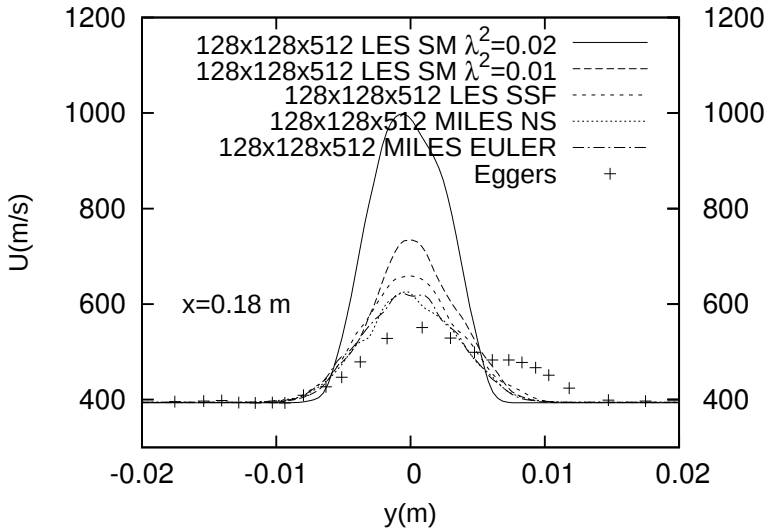
$\overline{\rho u_j} = \overline{\rho}\,\overline{u_j} + \overline{\rho} u_j' + \overline{\rho' \overline{u_j}} + \overline{\rho' u_j'} \neq \overline{\rho}\,\overline{u_j}$: incalculable

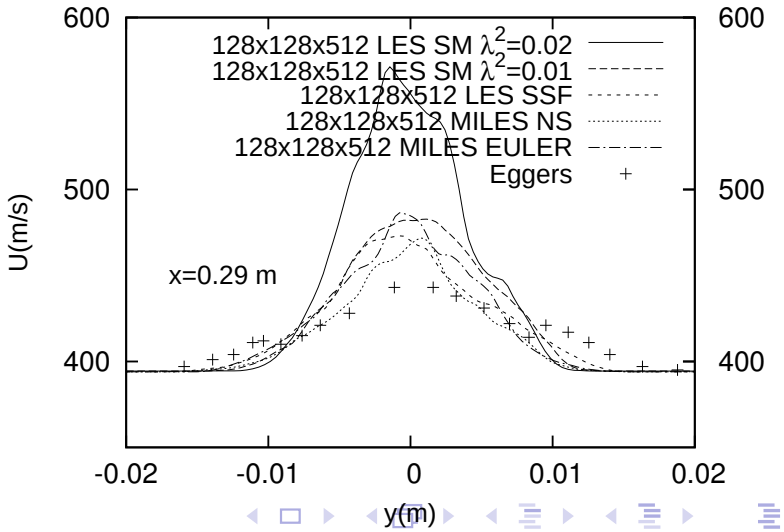
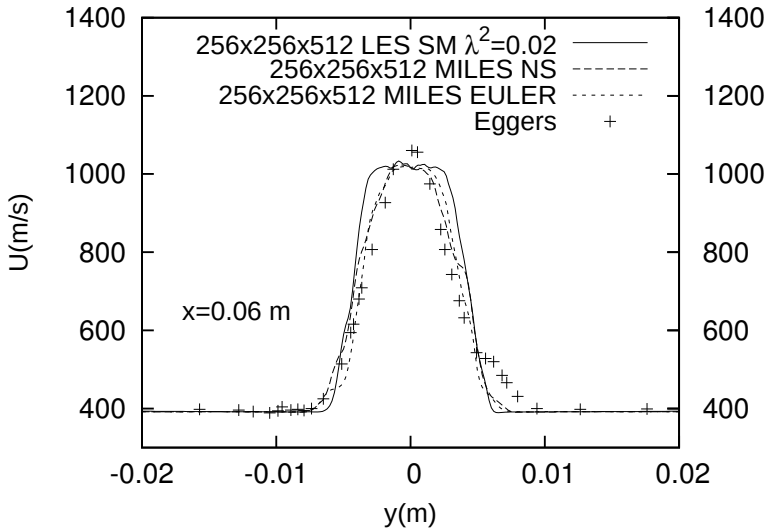
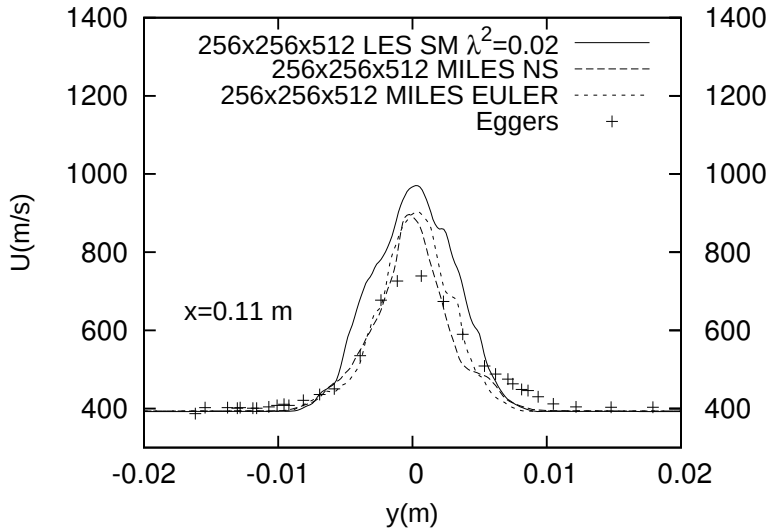
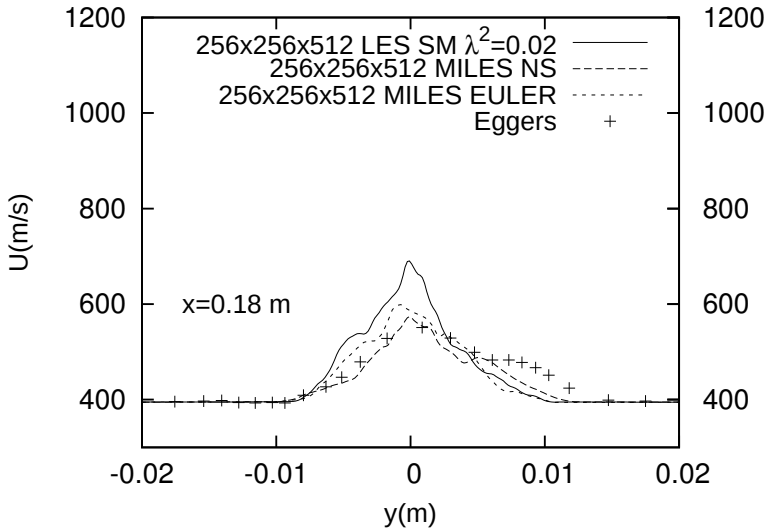
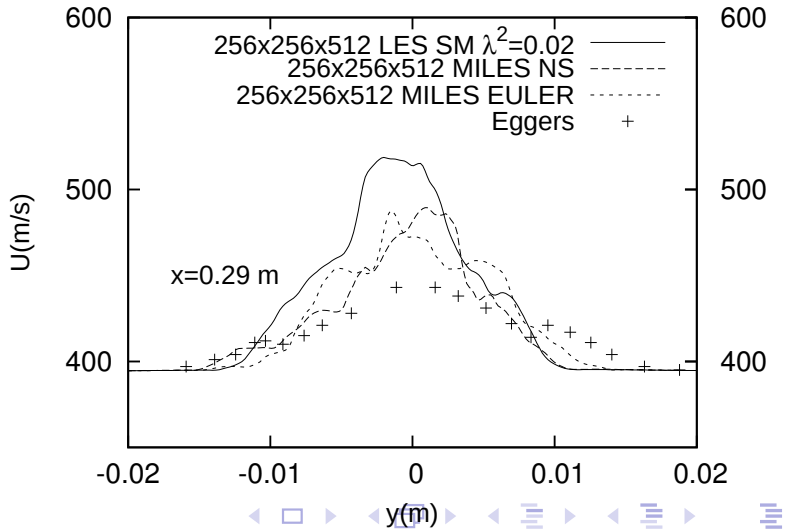
- Variable filtrée selon Favre : $\overline{\rho u_j} = \overline{\rho}\widetilde{u}_j \rightarrow \boxed{\overline{\rho\phi} = \overline{\rho}\widetilde{\phi}}$

Profils radiaux de vitesse axiale









Profils radiaux de vitesse axiale