

Université de Montréal

VALIDATION DES MODÈLES DE  
FLAMMELETTES INSTATIONNAIRES EN  
COMBUSTION TURBULENTE  
NON-PRÉMÉLANGÉE

par

Oleg Volkov

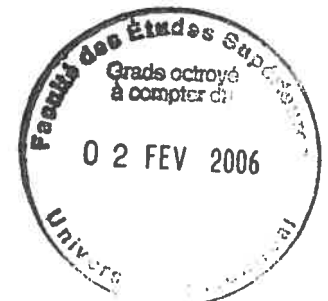
Département de mathématiques et de statistique  
Faculté des arts et des sciences

Thèse présentée à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de  
Philosophiæ Doctor (Ph.D.)  
en mathématiques

Orientation mathématiques appliquées

décembre 2005

© Oleg Volkov, 2005



QA

3

U54

2006

v.003

## AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

## NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal

Faculté des études supérieures

Cette thèse intitulée

VALIDATION DES MODÈLES DE  
FLAMMELETTES INSTATIONNAIRES EN  
COMBUSTION TURBULENTE  
NON-PRÉMÉLANGÉE

présentée par

Oleg Volkov

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes :

*Paul Arminjon*

---

(président-rapporteur)

*Anne Bourlioux*

---

(directeur de recherche)

*Robert Gwyn Owens*

---

(membre du jury)

*Rupert Klein*

---

(examineur externe)

*Michel Delfour*

---

(représentant du doyen de la FES)

Thèse acceptée le:

*le 19 décembre 2005*

---

## SOMMAIRE

---

Les flammelettes jouent un rôle important comme modèles de fermeture sous-maille dans les simulations aux grandes échelles des flammes turbulentes non-prémélangées. Elles sont basées sur la solution asymptotique unidimensionnelle stationnaire de la flamme. Cette thèse a pour objectif de valider l'utilisation de ce type de modèle en présence d'effets multidimensionnels et instationnaires, typiques des écoulements turbulents. Trois volets sont abordés : le volet théorique, le volet de modélisation pratique, et le volet numérique. Dans le volet théorique, on étudie la question du comportement de deux statistiques conditionnelles du scalaire passif, la dissipation et la diffusion, qui peuvent jouer un rôle fondamental dans le modèle de flammelette. Dans le volet de modélisation pratique, on effectue une validation systématique d'une classe de modèles de flammelettes généralisés pour les cas instationnaires. La validation procède via une méthode numérique spécialisée pour la classe d'écoulements considérés et par analyse asymptotique. Dans le volet numérique, on développe une méthode contenant un intégrateur lagrangien sans maillage, à pas de temps et d'espace adaptatifs dans le but de pouvoir généraliser à une plus grande classe d'écoulements l'étude de la modélisation par les flammelettes instationnaires.

Mots-clés : calcul numérique, combustion turbulente non-prémélangée, modèles de flammelettes instationnaires, problèmes d'advection-réaction-diffusion, formulation lagrangienne, méthode sans maillage, raffinement adaptatif dans le temps et dans l'espace.

## SUMMARY

---

Flamelets play an important role as subgrid closure models in large eddy simulations of turbulent nonpremixed flames. They are based on a one-dimensional steady asymptotic solution for the flame. The focus of the present thesis is to validate the use of this type of closure when unsteadiness and multi-dimensional effects are present, as to be expected for turbulent flows. Three aspects of the question are studied here: theoretical considerations, practical modelling issues, and numerics. On the theoretical level, we study the behavior of two key conditional statistics for the passive scalar: its conditional dissipation and diffusion. Those statistics can play an essential role in flamelet models. On the practical modelling level, we carry on a systematic validation of a hierarchy of flamelet models generalized to handle unsteady cases. The validation is performed based on an extensive numerical database that we generate for that purpose, and on asymptotic analysis. On the numerical side, we propose and implement a new grid-free space-time adaptive Lagrangian solver for problems of advection-reaction-diffusion, with the objective of generalizing the modelling validation study to a much wider class of flow fields.

Keywords: numerical simulation, non-premixed turbulent combustion, unsteady flamelet models, advection-reaction-diffusion problems, grid-free methods, Lagrangian methods, space-time adaptive mesh refinement.

# TABLE DES MATIÈRES

---

<b>Sommaire</b> .....	iii
<b>Summary</b> .....	iv
<b>Table des figures</b> .....	x
<b>Liste des tableaux</b> .....	xiv
<b>Liste des sigles</b> .....	xv
<b>Dédicace</b> .....	xvi
<b>Remerciements</b> .....	xvii
<b>Chapitre 1. Introduction: flammes non-prémélangées turbulentes</b>	<b>1</b>
1.1. Modèle idéalisé.....	2
1.1.1. Systèmes d'advection-réaction-diffusion.....	2
1.1.2. Combustion.....	4
1.1.3. Équations de Navier-Stokes.....	7
1.2. Simulation aux grandes échelles.....	9
1.2.1. Limitations de la simulation numérique directe.....	10
1.2.2. Capacités de simulation des grandes échelles (LES).....	12
1.2.3. Description statistique des caractéristiques turbulentes.....	15
1.3. Modèles de flammelettes.....	19
1.3.1. Comportement asymptotique.....	20
1.3.2. Hypothèse du modèle de flammelettes laminaires.....	22
1.3.2.1. Statistiques du scalaire passif.....	23

1.3.2.2.	Asymptotique des scalaires réactifs, cas stationnaire . . . . .	24
1.3.2.3.	Fermeture via des flammelettes laminaires . . . . .	27
1.3.3.	Limitations du modèle stationnaire . . . . .	31
1.3.3.1.	Effets instationnaires importants . . . . .	31
1.3.3.2.	Critères de validité du modèle stationnaire . . . . .	32
1.3.4.	Stratégies purement instationnaires . . . . .	34
1.3.4.1.	Extensions instationnaires du modèle de flammelettes . . . . .	34
1.3.4.2.	Flammelettes lagrangiennes . . . . .	37
1.4.	Résumé et organisation de la thèse . . . . .	38
1.4.1.	Synthèse . . . . .	39
<b>Chapitre 2. Statistiques conditionnelles d'un scalaire passif avec gradient moyen et intermittence . . . . .</b>		<b>41</b>
2.1.	Introduction . . . . .	44
2.2.	Idealized model . . . . .	46
2.2.1.	Basic set-up . . . . .	46
2.2.2.	Scalar PDF behavior . . . . .	48
2.3.	Explicit formulas to process the conditional statistics . . . . .	49
2.3.1.	Definitions . . . . .	49
2.3.2.	Basic formulas for the partial conditional statistics . . . . .	50
2.4.	Conditional statistics for the single mode case . . . . .	51
2.4.1.	Explicit formulas . . . . .	51
2.4.2.	Asymptotic formula in the large Pe self-similar regime . . . . .	52
2.4.3.	Numerical results . . . . .	53
2.5.	Conditional statistics - multi-mode case . . . . .	55
2.5.1.	Explicit formulas . . . . .	55
2.5.2.	Numerical results . . . . .	57



2.6. Sampling errors in the PDF tails.....	58
<b>References</b> .....	<b>63</b>
<b>Chapitre 3. Validation des modèles de flammelettes instationnaires pour un cas-test idéalisé avec intermittence.....</b>	<b>65</b>
3.1. Introduction.....	67
3.2. Idealized test-case.....	68
3.2.1. Basic set-up.....	68
3.2.2. Solving for the passive scalar.....	69
3.2.3. Solving for the reactive scalars.....	70
3.2.4. Turbulent dissipation.....	73
3.3. Unsteady flamelet models.....	74
3.3.1. Summary: steady laminar flamelet model.....	75
3.3.2. Model 1a): instantaneous dissipation.....	76
3.3.3. Model 1b): y-averaged instantaneous dissipation.....	76
3.3.4. Model 2: time-averaged dissipation.....	77
3.3.5. Model 3: FULFA.....	77
3.3.6. The effective turbulent dissipation.....	79
3.4. Performance of the models.....	81
3.5. Asymptotic analysis.....	87
3.5.1. One-dimensional FULFA: Existence, uniqueness, and periodicity	88
3.5.2. One-dimensional FULFA: Asymptotic properties.....	89
3.5.3. Multi-dimensional FULFA: Asymptotic properties.....	93
3.6. Conclusions.....	93
<b>References</b> .....	<b>95</b>

<b>Chapitre 4. Intégrateur sans maillage, adaptatif dans le temps et l'espace appliqué aux systèmes d'advection-réaction-diffusion .....</b>	<b>97</b>
4.1. Introduction .....	99
4.2. Spectral deferred correction, splitting errors and time-step adaptivity .....	100
4.2.1. Basic principle .....	100
4.2.2. Splitting .....	102
4.2.3. Adaptive time-step control .....	104
4.3. Advection-reaction-diffusion systems .....	105
4.3.1. MISDC implementation .....	107
4.4. Application: Non-premixed combustion .....	109
4.4.1. Objective: Validating subgrid flamelet models .....	110
4.5. Validation of the adaptive time integrator .....	111
4.5.1. Validation of the order of accuracy .....	111
4.5.1.1. SDC: Passive scalar .....	111
4.5.1.2. MISDC: Reactive part .....	112
4.5.2. Time adaptivity .....	114
4.5.2.1. Passive scalar .....	114
4.5.2.2. Reactive scalar .....	115
4.6. Validation and results for two-dimensional cases .....	116
4.6.1. Space adaptivity .....	117
4.6.2. Simple shear flow .....	118
4.6.3. Childress-Soward flow .....	119
4.6.3.1. Time adaptivity .....	121
4.7. Conclusion .....	127

References .....	131
Chapitre 5. Conclusions .....	133
Bibliographie .....	136

## TABLE DES FIGURES

---

1.1	Exemple d'un problème de diffusion-réaction .....	4
1.2	Niveau stœchiométrique et lignes de courant pour différents types d'écoulement; $Pe = 10\pi$ , $P = 1$ , $\beta = 1$ et $\omega = 2\pi$ .....	10
1.3	Niveau stœchiométrique et lignes de courant pour différentes valeurs de Péclet; $P = 1$ , $\beta = 1$ et $\omega = 2\pi$ .....	11
1.4	Exemple du domaine de calcul de la flamme turbulente .....	12
1.5	Exemple de $Z(\mathbf{x}, t)$ dans un point fixé de l'écoulement turbulent .....	16
1.6	Transition schématique entre la fonction de probabilité discrète et celle continue. ....	17
1.7	pdf( $Z$ ) comme une fonction du nombre de Péclet où $Z$ est présenté dans l'échelle logarithmique [2].....	25
1.8	Correspondance entre la flamme turbulente et la flamme laminaire dans un écoulement de jets opposés .....	28
2.1	Conditional dissipation, single mode case $K_J = 2\pi$ .....	54
2.2	Conditional dissipation corresponding to mode numbers $J$ with $Pe = 1000$ , $K_J = 2J\pi$ .....	55
2.3	Conditional dissipation corresponding to various correlation times $\tau_J$ , $Pe = 1000$ , $K_J = 2\pi$ .....	56
2.4	Conditional dissipation corresponding to various $\tau_J$ and number of modes in the energy spectrum, $Pe = 1000$ .....	58
2.5	Conditional diffusion corresponding to various $\tau_J$ , $Pe = 1000$ .....	59

2.6	Conditional diffusion corresponding to various numbers of modes $N$ in the energy spectrum, $Pe=1000$ .....	60
2.7	Conditional dissipation: solid line corresponds to $Pe=10000$ ; dashed – asymptotic solution .....	62
2.8	Asymptotic conditional dissipation (solid line) along with 95% confidence interval for its estimation based on data sampling (dashed lines).....	62
3.1	DNS results for the reaction rate in the $(Z, y)$ (top) and $(x, y)$ (bottom) coordinates; the dashed line corresponds to the stoichiometric level $Z = 0$ ; $Da = 10000$ .....	71
3.2	Same as Figure 3.1, $Da=500$ .....	72
3.3	Same as Figure 3.1, $Da=1$ .....	73
3.4	Turbulent dissipation: $\chi(y, t) = \bar{\chi}(t) + \tilde{\chi}(t) \sin(4\pi y + \omega(t))$ ; the upper figure corresponds to the amplitude $\tilde{\chi}(t)$ , whereas the lower one depicts the phase $\omega(t)$ . .....	74
3.5	Flamelet structure of the DNS; marks correspond to the DNS whereas the plain lines are their effective flamelet approximations. ....	79
3.6	Comparison of the DNS, effective flamelet, and mean flamelet .....	80
3.7	Comparison of space-averaged (1D) models, $Pe=100$ . ....	81
3.8	Comparison of spatially-local (2D) models, $Pe=100$ . ....	82
3.9	Comparison of space-averaged (1D) models for different $Pe$ numbers..	83
3.10	Comparison of spatially-local (2D) models for different $Pe$ numbers ..	84
3.11	Comparison of FULFA's $\chi$ : with/without diffusion and advection ....	87
3.12	Errors (3.5.3) for $Pe=100$ with the asymptotic slopes of $Da^{\pm 2/3}$ : solid line – $E_{inst}(Da)$ ; dashed line – $E_{mean}(Da)$ .....	90

3.13	Boundary separating the regime where the behavior of $\chi_{\text{fulfa}}$ is essentially unsteady (left) from the one where its behavior is essentially steady (right).....	91
3.14	Error gradients ( $E_{\text{inst}}$ on the left, $E_{\text{mean}}$ on the right), + – Mell’s criterion, $\square$ – diffusion time vs. slow sweep time, $\nabla$ – diffusion time vs. fast sweep time .....	92
3.15	Boundary (stars) separating the regime where the behavior of $\chi_{\text{fulfa}}$ is essentially $y$ -dependent (left) from the one where its behavior is essentially $y$ -averaged (right) together with previously described phenomena (circles).....	94
4.1	Computational domain .....	110
4.2	Order of corrected solution, MISDC(3): dashed – after one cycle of improvement; solid – two cycles of improvement.....	113
4.3	SDC passive scalar solution, adaptive time-step and error, tolerance $\tau = 1.0\text{e-}6$ , $\text{Pe} = 100$ .....	115
4.4	MISDC reactive scalar solution, adaptive time-step, and error with respect to the reference solution, tolerance $\tau = 1.0\text{e-}5$ .....	116
4.5	Comparison of direct simulation with the flamelet model: solid and dashed lines – the method presented in the current article, circles and squares – data obtained with finite differences discretization [3] .....	120
4.6	Results for the shear flow corresponding to the maximum of the scalar dissipation .....	121
4.7	Level $Z = 0$ and the flow lines on a half of the period corresponding to $V = 1$ .....	122
4.8	Level $Z = 0$ and the flow lines on a half of the period corresponding to $V = 25$ .....	123
4.9	Reaction rate on a half of the period corresponding to $V = 1$ .....	124

4.10	Reaction rate on a half of the period corresponding to $V = 25$ .....	125
4.11	Reaction rate and error with respect to the flamelet model: on the left $V = 1$ , on the right $V = 25$ .....	126
4.12	Adaptive time-step example of different horizontal speeds.....	128
4.13	Reaction rate and adaptive refinement.....	129

## LISTE DES TABLEAUX

---

4.1	Accuracy of the SDC(3) solution.....	112
4.2	Performance of the time-step adaptive strategy.....	114
4.3	Time adaptivity results.....	127



## LISTE DES SIGLES

---

<b>DNS</b>	Direct Numerical Simulation
<b>FTS</b>	Flamelet Time-Scale model
<b>FULFA</b>	Full-Unsteady Laminar Flamelet Assumption
<b>LES</b>	Large Eddy Simulation
<b>MISDC</b>	Multi-Implicit Spectral Deferred Correction
<b>PDF</b>	Probability Density Function
<b>RANS</b>	Reynolds Averaged Navier-Stokes
<b>SDC</b>	Spectral Deferred Correction
<b>SLFM</b>	Stationary Laminar Flamelet Model
<b>SULFA</b>	Semi-Unsteady Laminar Flamelet Assumption

à Karine

## REMERCIEMENTS

---

Cette thèse s'est déroulée au sein du Centre de Recherche en Calcul Appliqué et au Département de Mathématiques et de Statistique de l'Université de Montréal. Je tiens à exprimer ma reconnaissance à **Anne Bourlioux**, Directrice de Recherche, qui m'a permis de réaliser ce travail et qui m'a témoigné une grande confiance durant ces années.

Je tiens également à remercier de nombreuses personnes qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce travail, en particulier, **Rony Touma** et **Boualem Khouider**, avec lesquels j'ai eu l'opportunité de travailler au département.

Mes remerciements vont également au réseau MITACS (Mathématiques des Technologies de l'Information et des Systèmes Complexes) et à la Faculté des Études Supérieures pour leurs aides financières.

Mais avant tout, je voudrais remercier de tout mon cœur **Karine Le Bris** qui partage ma vie, ainsi que ma famille en Russie et en France pour leur patience et leur amour.

# Chapitre 1

---

## INTRODUCTION : FLAMMES NON-PRÉMÉLANGÉES TURBULENTES

Les premières tentatives de description analytique des équations de modélisation des flammes turbulentes remontent aux années 1940 quand on a proposé de coupler les équations des gaz avec celles décrivant la chimie de la réaction. A l'époque, il existait des modèles quantitatifs pour calculer le taux de réaction en fonction du volume et de la masse, mais qui ne tenaient pas compte des paramètres physiques et cinétiques du gaz. Au fil des ans, le développement des outils de calcul en mécanique des fluides appliquée ainsi que la généralisation de la théorie de turbulence ont rendu possible le calcul direct (*Direct Numerical Simulation* (DNS) en anglais) des réactions chimiques. Malgré le progrès constant des moyens informatiques, cette approche est restée très coûteuse et son efficacité est contestable lorsqu'il s'agit de résoudre un ensemble de phénomènes physiques et chimiques qui se développent à des échelles spatiales et temporelles de plus en plus fines. Plus récemment, des chercheurs ont concentré leur attention sur des modèles de fermeture et d'homogénéisation permettant d'estimer les propriétés thermomécaniques effectives à des échelles accessibles à un calcul numérique fiable. La thèse présentée ici contient des contributions en termes d'analyse théorique, physique et numérique pour les cas instationnaires et multidimensionnels d'une classe de modèles de fermeture de sous-maille de la combustion non-prémélangée turbulente.

Dans ce chapitre nous présentons la formulation mathématique idéalisée employée dans ce travail et faisons le lien avec les modèles réalistes. Nous expliquons les motivations de nos projets de recherche, et passons en revue la bibliographie reliée à ce domaine.

## 1.1. MODÈLE IDÉALISÉ

### 1.1.1. Systèmes d'advection-réaction-diffusion

On cherche à résoudre le problème décrit par le système d'équations de type advection-réaction-diffusion [1] :

$$\begin{cases} \partial_t Y_1 + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_1 - D \Delta Y_1 = -f(Y_1, Y_2) \\ \partial_t Y_2 + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_2 - D \Delta Y_2 = -f(Y_1, Y_2) \end{cases} \quad (1.1.1)$$

Les inconnues  $Y_1$  et  $Y_2$  représentent respectivement la densité de combustible et de comburant. On suppose que le champ de vitesse  $\mathbf{v}$  est connu.  $D$  est le coefficient de diffusion. La difficulté principale en terme d'analyse et de simulation numérique est la présence du terme de réaction  $f(Y_1, Y_2)$ . En effet, ce terme est typiquement non-linéaire. Dans la suite, on supposera que  $f(Y_1, Y_2) = k Y_1 Y_2$ . Ce taux de réaction décrit la transformation irréversible avec un mécanisme réactionnel réduit (combustible $_{Y_1}$  + comburant $_{Y_2}$   $\rightarrow$  produits). Les variables  $Y_1$  et  $Y_2$  sont appelées les *scalaires réactifs*. Plus loin dans cette section, on discutera plus en détail des liens entre cette formulation mathématique et la physique du problème.

La configuration (conditions initiales et aux bords) correspondant aux flammes non-prémélangées est maintenant décrite. Initialement, le comburant et le combustible sont séparés : le domaine  $\Omega$  où l'on cherche la solution est constitué de deux régions distinctes  $\Omega_- \cup \Omega_+ = \Omega$ , l'une riche en comburant et l'autre en combustible. Mathématiquement, les conditions initiales sont du type :

$$Y_1|_{t=0} = \begin{cases} = 0 & \text{dans } \Omega_- \\ > 0 & \text{dans } \Omega_+ \end{cases}, \quad Y_2|_{t=0} = \begin{cases} > 0 & \text{dans } \Omega_- \\ = 0 & \text{dans } \Omega_+ \end{cases}$$

On note que ces conditions initiales correspondent à deux états d'équilibre stables pour la réaction chimique (les points où  $f(Y_1, Y_2) = 0$ ). Éventuellement,  $Y_1$  et  $Y_2$  vont se mélanger à l'interface de leur région d'origine, ce mélange étant dû

à la diffusion, mais aussi à l'advection (c'est là un des problèmes centraux de la combustion turbulente). Si la réaction est rapide, la zone de réaction sera confinée au voisinage immédiat de l'interface. Dans ce régime, on imposera donc que les conditions aux limites soient telles que, loin de la frontière commune de  $\Omega_-$  et  $\Omega_+$ , la solution soit conforme avec ces états d'équilibre. Une façon pratique de formuler le problème, ses conditions limites et aussi de le résoudre numériquement, est d'introduire le scalaire passif  $Z$  défini comme  $Z = (Y_1 - Y_2)/2$ . Les conditions d'équilibre s'expriment alors simplement en terme de  $Z$  :

$$\begin{aligned} Y_1 = 0, \quad Y_2 = -2Z & \quad \text{pour } Z \rightarrow -\infty \\ Y_1 = 2Z, \quad Y_2 = 0 & \quad \text{pour } Z \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

L'équation d'évolution de  $Z$  est obtenue par soustraction des équations pour les scalaires réactifs, on constate donc que  $Z$  obéit à une équation beaucoup plus simple, de type advection-diffusion, dont le terme réactif non-linéaire a disparu :

$$\partial_t Z + \mathbf{v} \cdot \nabla Z = D \Delta Z. \quad (1.1.3)$$

Au lieu de résoudre le système des deux équations (1.1.1), on peut donc résoudre le système pour  $Z$  et un des deux scalaires réactifs, en utilisant la définition de  $Z$  pour exprimer l'autre scalaire. Par exemple, si on garde  $Y_1 \equiv Y$  et  $Z$  :

$$\begin{cases} \partial_t Y + \mathbf{v} \cdot \nabla Y = D \Delta Y - f(Y, Y - 2Z) \\ \partial_t Z + \mathbf{v} \cdot \nabla Z = D \Delta Z \end{cases} \quad (1.1.4)$$

En l'absence d'advection, une façon de configurer une flamme non-prémélangée établie est d'imposer que  $Z = x/L_g$ , où  $L_g$  est la taille caractéristique du domaine dans la direction  $x$ . Par la suite, on envisagera des perturbations par des champs de vitesse périodiques dans l'espace. Les conditions aux limites seront donc de prescrire que  $Z = x/L_g + Z_P(x, y, t)$  avec la perturbation  $Z_P(x, y, t)$  de moyenne nulle et avec la même périodicité que le champ de vitesse - voir détails plus loin dans cette section et dans les chapitres suivants.

Une illustration de la solution en l'absence d'advection est donnée dans la Figure 1.1. On observe que le terme de source est non nul seulement dans la zone qui sépare les deux ensembles d'équilibre, appelée la *zone de réaction*, son épaisseur est une fonction des paramètres  $D$  (diffusion) et  $k$  (réaction). Dans le

cas instationnaire ou/et dans l'espace à plusieurs dimensions, la frontière entre  $\Omega_-$  et  $\Omega_+$  sera une surface plissée beaucoup plus complexe. Cela modifiera de façon essentielle le taux effectif de combustion. Prédire cet effet est un grand défi en terme d'analyse et de modélisation.

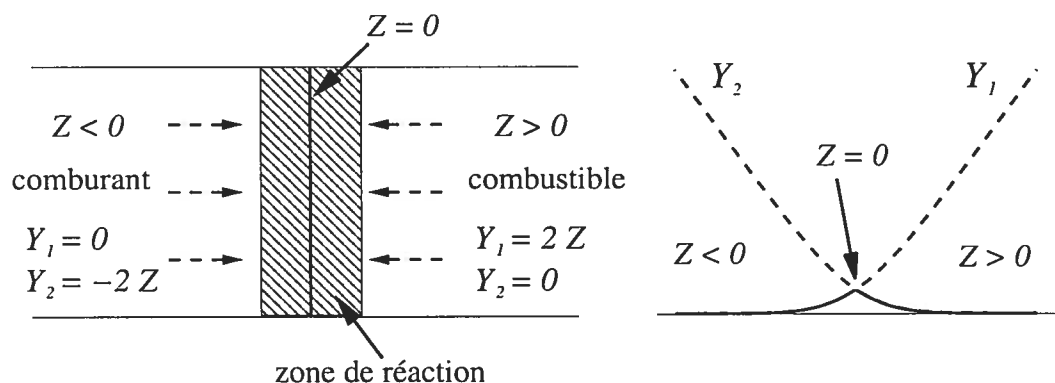


FIG. 1.1: Exemple d'un problème de diffusion-réaction

Notons que le même type de formulation s'applique également à d'autres problèmes physiques. Citons comme exemples, l'échange entre la vapeur et l'eau avec des équations décrivant des phénomènes atmosphériques ou le transport et les réactions entre différents éléments en biochimie.

### 1.1.2. Combustion

En termes généraux, la *combustion* est une réaction chimique exothermique engendrant une forte augmentation de volume ou de pression. Cette réaction ne peut avoir lieu qu'à la surface de contact entre les espèces et signifie essentiellement la rupture des liaisons entre les molécules du combustible, et la création de nouvelles molécules plus stables chimiquement. Le corps qui provoque et entretient la réaction du combustible s'appelle le *comburant*. Il est le plus souvent constitué par l'oxygène présent dans l'air ambiant. Dans cette transformation des molécules, l'échange des atomes ne peut être fait que dans les proportions fixées, dite proportions *stœchiométriques*. Si les proportions stœchiométriques ne sont pas respectées, la réaction s'arrête, soit en brûlant le combustible jusqu'à sa disparition complète, soit en éteignant la flamme par manque d'oxygène. Par

contre, l'apport diffusif constant des espèces peut maintenir le mélange au niveau stœchiométrique et le système évolue vers un équilibre dynamique. De ce point de vue, les réactions les plus favorisées sont les réactions entre les liquides miscibles ou entre les gaz. Le phénomène de diffusion a donc pour rôle d'engendrer les mélanges d'espèces, pendant que le transport turbulent agit de manière à augmenter la surface de contact entre eux. D'où l'importance de bien résoudre ces deux phénomènes dans la simulation numérique du problème.

Le problème-modèle que l'on définit dans la Section 1.1.1 correspond à un type précis de flammes, les flammes non-prémélangées (par opposition aux flammes prémélangées, voir par exemple [4]). Par définition, il s'agit des structures de flamme où le mélange des espèces initialement séparées s'effectue par advection (laminaire ou turbulente) et par diffusion et détermine la zone de réaction (la zone de mélange). Ces flammes sont aussi connues sous le nom de flammes de diffusion. Le combustible arrive d'un côté de la flamme, et le comburant de l'autre. Les produits de combustion sont diffusés de part et d'autre. Des exemples pratiques de flammes de diffusion sont le briquet à gaz ou à essence et les moteurs Diesel.

Les équations du type advection-réaction-diffusion (1.1.1) ont été introduites ici pour décrire les lois de conservation des espèces réactives [5] :

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla Y_i = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i(T, Y_1, Y_2, \dots) \quad (1.1.5)$$

où  $D_i$  sont les coefficients de diffusivité des diverses espèces. Le même type d'équation s'applique aussi au transfert de chaleur :

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\rho D \nabla T) - \frac{1}{c_{p_i}} \sum_{i=1}^n h_i \dot{\omega}_i(T, Y_1, Y_2, \dots) \quad (1.1.6)$$

où  $T$  représente la température. On donnera les détails sur la densité  $\rho$ , sur le champ de vitesse  $\mathbf{v}$  plus tard dans la Section 1.1.3. Regardons d'abord la définition du terme de source  $\dot{\omega}_i$  de ces équations, appelé le *taux de réaction*. Notons que cette définition fait l'objet de la cinétique chimique, l'étude de la vitesse des réactions chimiques. Connaître l'échelle de temps du phénomène est très important puisque certaines réactions sont complètes et très rapides voir violentes, comme les explosions. D'autres sont tellement lentes qu'elles durent plusieurs années, voir



plusieurs siècles, comme par exemple la rouille. Pour quantifier cette cinétique, on utilise comme variable dans l'équation (1.1.5) la fraction massique de l'espèce  $Y_i$ . Le taux de variation de cette quantité, c'est-à-dire la vitesse de réaction, dépend de la probabilité de rencontre (donc de présence) des réactants, et donc de leur concentration ; plus il faut de molécules d'une espèce pour la réaction, plus la concentration de cette espèce joue un rôle important. Par exemple, dans le cas non-prémélangé avec un mécanisme réduit (une seule équation stœchiométrique :  $\text{comburant} + \text{combustible} \rightarrow \text{produit}$ ), la cinétique chimique est caractérisée à l'aide de deux variables  $Y_1, Y_2$  et les termes de la source de réaction s'expriment comme  $\dot{\omega}_1 = \dot{\omega}_2 = -\rho k Y_1 Y_2$ .

Le terme de source de la réaction dépend aussi essentiellement de l'énergie cinétique des particules. Plus la température est élevée, plus les rencontres sont probables (agitation thermique) et plus l'énergie cinétique des particules permet de franchir la barrière d'activation. Le coefficient de réaction  $k$  est donc une fonction de la température. La dépendance de la vitesse de réaction par rapport à la température est régie par la loi d'Arrhénius  $k(T) = A e^{-E_A/T}$ , où  $E_A$  est l'énergie d'activation nécessaire pour amorcer la réaction. La variation de la température dans l'espace ou dans le temps s'avère cruciale pour décrire le phénomène d'auto-inflammation. Prenons par exemple le cas du moteur Diesel. On compresse l'air jusqu'à ce que la température atteigne  $600^\circ\text{C}$  et on injecte du gazole qui s'enflamme spontanément grâce à la chaleur dégagée lors de la compression. La combustion est suffisamment rapide pour que cette partie soit souvent considérée comme isobare. Selon la loi des gaz parfaits :  $pV = RT$ , une pression  $p$  constante signifie que la température  $T$  est proportionnelle au volume  $V$ , et donc varie au fur et au mesure que la réaction se propage avec le jet.

Dans les travaux présentés dans cette thèse, on met l'accent sur la simulation numérique des effets instationnaires et turbulents. Compte tenu du fait que l'équation (1.1.6) a la même forme parabolique non-homogène que celle de (1.1.5), on suppose que des méthodes développées pour résoudre numériquement les systèmes (1.1.5) peuvent être généralisées aux cas faisant intervenir la température

ainsi que de multiples espèces réactives. Les autres hypothèses sur les paramètres physiques dans (1.1.5) utilisées dans le reste de cette thèse sont les suivantes :

- (1) Les diffusivités  $D = D_i$  et les coefficients de réaction sont supposés constants et égaux pour tous les composants chimiques et pour la température.
- (2) La densité  $\rho$  est constante.
- (3) On considère la réaction à deux composants  $Y_1$  et  $Y_2$  :  $\dot{\omega}_{1,2} = -\rho k Y_1 Y_2$ .

De plus, on rend sans dimension les équations sur les scalaires passifs et réactifs. On désigne par  $\lambda$  l'échelle caractéristique de la vitesse dans le terme advectif et par  $P$  l'échelle de longueur de la période dans la direction  $y$  (Section 1.1.1). En se basant sur ces échelles, on obtient un système de trois équations sans dimension :

$$\begin{aligned} \partial_t Z + \text{Pe } \mathbf{v} \cdot \nabla Z - \Delta Z &= 0 \\ \partial_t Y_i + \text{Pe } \mathbf{v} \cdot \nabla Y_i - \Delta Y_i + \text{Da } Y_1 Y_2 &= 0. \end{aligned} \tag{1.1.7}$$

où le nombre de Péclet  $\text{Pe} = P\lambda/D$  représente le rapport entre les échelles de temps de la diffusion et de l'advection tandis que le nombre de Damköhler  $\text{Da} = kP^2/D$  caractérise le rapport entre les échelles de temps de la diffusion et de la réaction. Les problèmes étudiés dans cette thèse correspondent au régime où  $\text{Pe}$  est grand (effets de l'advection important comparé à la diffusion, c'est-à-dire régime turbulent) et où  $\text{Da}$  est grand (réaction rapide comparé à la diffusion, c'est-à-dire régime des flammes minces, ou flammelettes, voir ci-dessous).

### 1.1.3. Équations de Navier-Stokes

On considère que les fluides qui interviennent dans notre modèle physique sont des liquides miscibles newtoniens ou des gaz. Le point de départ de l'étude des fluides est le système des équations de Navier-Stokes et la turbulence. En effet, tous les systèmes d'équations primitives de mécanique des fluides sont des équations obtenues par passage à la limite (suivant les échelles prises en considération) ou bien par moyennisation (systèmes de fermeture turbulente) des équations de Navier-Stokes. Pour les écoulements avec une densité  $\rho$  non-constante, le système de Navier-Stokes est donné par (forme conservative) :

continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.1.8)$$

quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \tau + \rho g \quad (1.1.9)$$

La densité étant constante, les équations (1.1.8) et (1.1.9) décrivent le champ de vitesse incompressible  $\mathbf{v}$ . Ce système admet des solutions avec un caractère désordonné distingué par des fluctuations réparties selon un spectre fréquentiel étendu. Ce type d'écoulement s'appelle turbulent, son opposé étant un écoulement laminaire. La *combustion turbulente* est dans ce cas la combustion dans l'écoulement turbulent. L'apparition de la turbulence est observée pour les cas d'advection intense et de diffusion très faible (l'équivalent du nombre sans-dimension de Péclet grand dans le cas de l'équation (1.1.3)) et représente un aspect majeur dans le calcul du taux d'avancement de la réaction. Une des caractéristiques importantes d'un écoulement turbulent est qu'il est *fortement mélangeant* et très *dissipatif*. En effet, à cause de la déformation par la turbulence, l'interface entre le combustible et le comburant s'étire et augmente d'une façon significative la quantité de matière entrant en combustion.

Il semble donc impossible pour le moment d'utiliser directement les équations de Navier-Stokes pour simuler de tels écoulements en raison du trop grand nombre d'échelles et de structures du flot, sa très grande sensibilité aux données initiales et aux conditions au bord. En dépit des énormes progrès faits dans ce domaine et dans de plus en plus de situations, l'énorme complexité du phénomène physique de la turbulence est telle qu'il est difficile de valider rigoureusement en fin de compte la fiabilité d'une solution numérique directe des équations des gaz dans ce régime. Il existe un très grand nombre d'approches théoriques pour étudier la turbulence, mais pour simuler numériquement nos écoulements, on est obligé d'utiliser des modèles de fermeture pour la turbulence, comme la simulation des grandes échelles (*Large Eddy Simulation* (LES) en anglais) utilisée par exemple en aéronautique.

Le travail présenté ici se concentre surtout sur la modélisation des termes réactifs. La stratégie adoptée sera de court-circuiter complètement les équations (1.1.8), (1.1.9) et, à la place, de considérer un écoulement prédéfini mais dont le comportement a des caractéristiques importantes d'un écoulement turbulent (présence de structures fines en espace et en temps).

Les écoulements que l'on utilise dans ce travail sont incompressibles et de type

- cisaillement simple avec une composante verticale périodique dans le temps :

$$\mathbf{v} = \lambda \left( \sin \frac{2\pi y}{P}, \beta \cos(\omega t) \right) \quad (1.1.10)$$

- écoulements définis à partir de la fonction de courant de Childress-Soward :

$$\begin{aligned} F(x, y) &= \sin \frac{2\pi x}{P} \sin \frac{2\pi y}{P} + \delta \cos \frac{2\pi x}{P} \cos \frac{2\pi y}{P} \\ \mathbf{v} &= \frac{\lambda P}{2\pi} (-\partial_y F, \partial_x F), \quad \text{for } \delta = 0, .5 \text{ et } 1 \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

Les Figures 1.2 et 1.3 montrent les lignes de courant et le niveau stœchiométrique pour ces cas avec les différentes combinaisons de paramètres. On remarque que l'amplitude élevée proportionnelle au nombre de Péclet augmente de façon significative la surface de contact entre des espèces et accélère la cinétique de la réaction.

On verra dans la section suivante quelles sont les autres hypothèses que l'on doit faire pour rendre ce système plus accessible au calcul numérique.

## 1.2. SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES

Le contexte de la réaction chimique impose plus de difficultés quant à la simulation numérique des écoulements turbulents. En effet, à un grand nombre d'échelles turbulentes, on doit rajouter des échelles associées à la cinétique chimique des réactions. La prise en compte de toutes ces échelles et leur utilisation dans des calculs numériques directs sont encore un véritable défi.

On sait qu'en présence d'un transport turbulent la combustion non-prémélangée devient un processus avec une structure spatiale complexe où les effets instationnaires jouent un rôle important. De nombreux travaux ont démontré la nécessité de tenir compte de ceci pour pouvoir prédire correctement les aspects

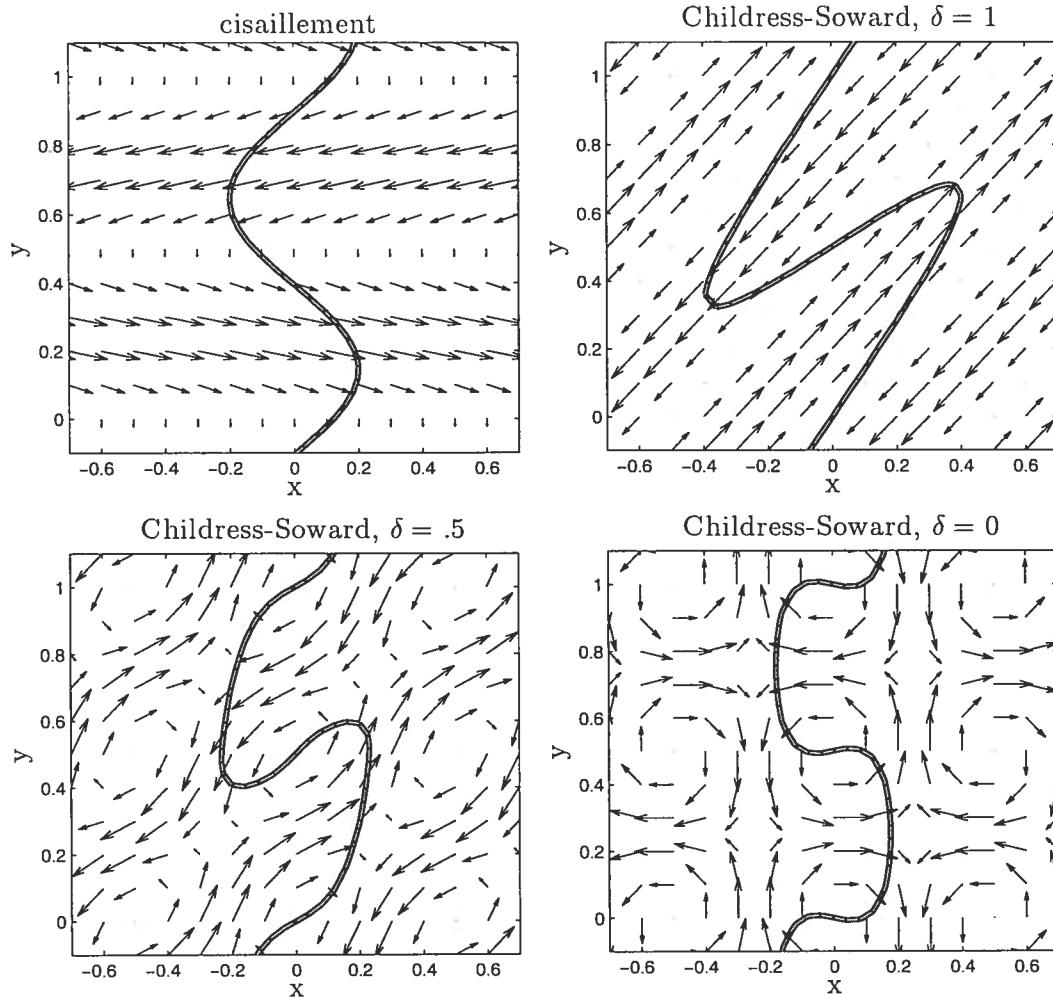


FIG. 1.2: Niveau stœchiométrique et lignes de courant pour différents types d'écoulement;  $Pe = 10\pi$ ,  $P = 1$ ,  $\beta = 1$  et  $\omega = 2\pi$

cinétiques chimiques du problème, comme par exemple l'auto-inflammation, l'extinction et le ré-inflammation.

### 1.2.1. Limitations de la simulation numérique directe

Aux fins pratiques de simulation numérique de la flamme, on s'intéresse à la cinétique finie de la réaction. Dans ce cas, le nombre de Damköhler est fini mais prend ses valeurs dans un large intervalle. La contrainte particulière des problèmes instationnaires dans ce cas réside dans le fait que la connaissance de la

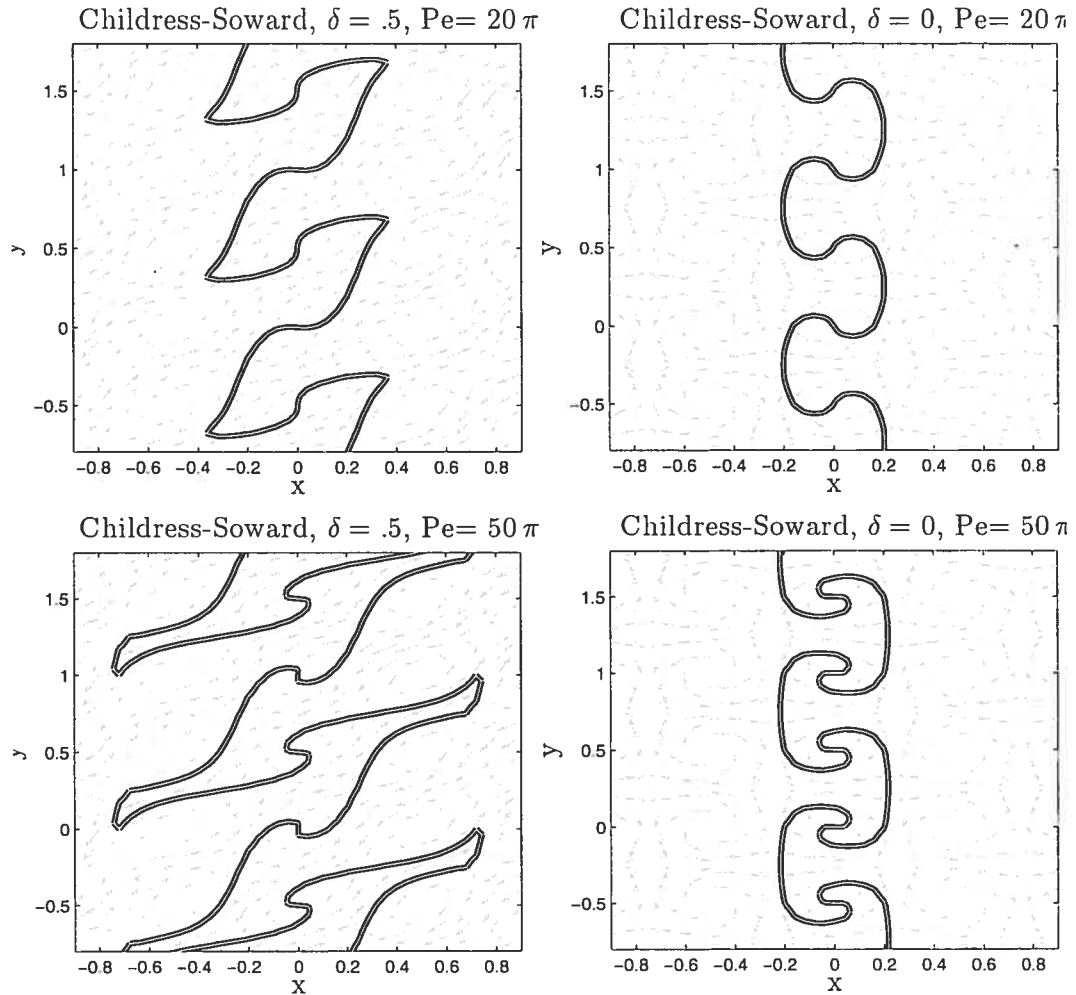


FIG. 1.3: Niveau stœchiométrique et lignes de courant pour différentes valeurs de Péclet ;  $P = 1$ ,  $\beta = 1$  et  $\omega = 2\pi$

taille des échelles caractéristiques est une information qu'on ne peut pas obtenir sans résoudre les équations de diffusion-réaction turbulente.

Dans cette situation, il n'est pas étonnant de constater que le calcul numérique direct du système complet (1.1.7), (1.1.8), (1.1.9) s'avère inaccessible. En effet, la discrétisation numérique basée sur la plus petite échelle physique du problème est, dans la pratique, hors de portée en raison des coûts. D'un autre côté, on ne s'intéresse pas dans le résultat final aux détails fins de la solution, mais plutôt à son comportement à grande échelle. Les deux défis auxquels on fait face sont alors reliés à :

– *l'échelle spatiale :*

trouver un algorithme pour calculer numériquement les scalaires réactifs quand l'épaisseur de la flamme et l'échelle turbulente sont plus petites que la taille caractéristique de la maille de discrétisation qu'on peut se permettre sur le plan de l'efficacité des calculs. La figure 1.4 montre un exemple de contraintes qui viennent avec ce caractère multi-échelle du problème. La grande échelle (les boîtes à gauche) définit les volumes d'intégration et la petite échelle tient compte des effets turbulents du problème. Les deux boîtes à droite dessinent la zone de diffusion turbulente (en haut) et la zone à l'épaisseur de la flamme (en bas) qui contient les termes de la réaction.

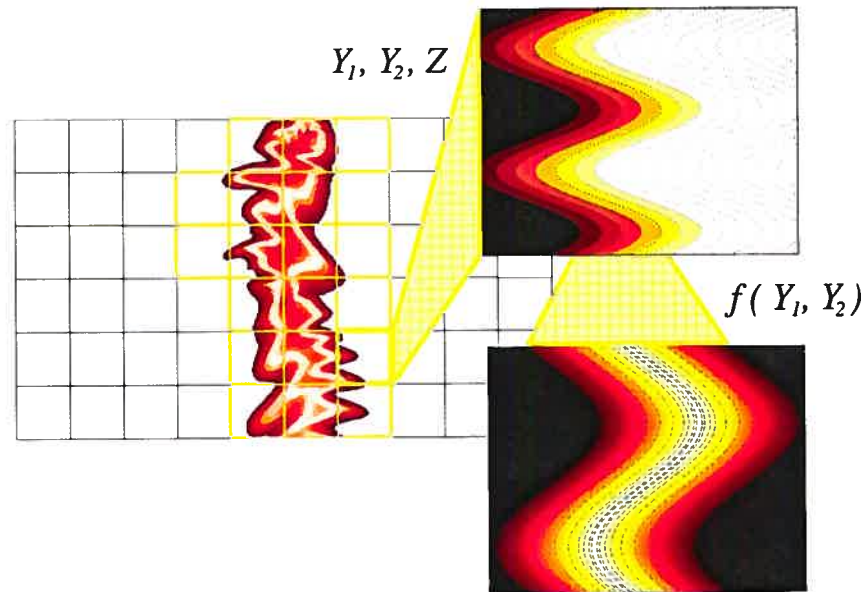


FIG. 1.4: Exemple du domaine de calcul de la flamme turbulente

– *l'échelle dans le temps :*

trouver un algorithme pour calculer numériquement les scalaires réactifs quand le temps caractéristique de réaction est très rapide, et en présence d'effets intermittents induits par le champ de vitesse.

### 1.2.2. Capacités de simulation des grandes échelles (LES)

La fermeture classique de simulation des grandes échelles consiste à appliquer aux équations (1.1.7), (1.1.8), (1.1.9) un "filtre passe-bas" de largeur spécifique

$\delta$ . Les fluctuations de petite taille sont alors modélisées de manière ad hoc et les fluctuations de grande longueur d'onde sont résolues numériquement. Présentons  $Y_i$  comme une somme de la valeur filtrée  $\overline{Y}_i$  et des fluctuations aux petite échelles  $Y'_i$ . Par exemple, dans le cas bidimensionnel, nous avons  $Y'_i = Y_i - \overline{Y}_i$  :

$$\overline{Y}_i(x, y, t) = \frac{1}{\delta^2} \int_{x-\delta/2}^{x+\delta/2} \int_{y-\delta/2}^{y+\delta/2} Y_i(\xi, \eta, t) d\xi d\eta. \quad (1.2.1)$$

Après avoir appliqué cette opération à une équation du système (1.1.1) on obtient :

$$\frac{\partial \overline{Y}_i}{\partial t} + \overline{\mathbf{v} \cdot \nabla Y_i} = D \Delta \overline{Y}_i - \overline{f(Y_1, Y_2)}. \quad (1.2.2)$$

Dans cette équation, on suppose que le coefficient  $D$  est constant et on simplifie la convection pure et la diffusion, compte tenu de leur linéarité. Par contre, les deux autres opérateurs (d'advection et de réaction) sont non-linéaires et l'application du filtre  $\delta$  à ces termes ne sera plus équivalente au calcul de ces opérateurs sur les valeurs filtrées. En effet, on vérifie chacun des termes :

– *advection* :

On applique ici la même procédure que l'on utilise d'habitude pour obtenir les équations de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* RANS en anglais). Par définition du filtre :  $\overline{\overline{Y}_i} = \overline{Y}_i$ ,  $\overline{Y'_i} = 0$  et donc :

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{v} \cdot \nabla Y_i} &= \overline{(\overline{\mathbf{v}} + \mathbf{v}') \cdot (\nabla \overline{Y}_i + \nabla Y'_i)} = \\ \overline{\overline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \overline{Y}_i + \overline{\mathbf{v}} \cdot \nabla Y'_i + \mathbf{v}' \cdot \nabla \overline{Y}_i + \mathbf{v}' \cdot \nabla Y'_i} &= \overline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \overline{Y}_i + \overline{\mathbf{v}' \cdot \nabla Y'_i}. \end{aligned}$$

Après ces manipulations l'équation (1.2.2) prend la forme équivalente :

$$\frac{\partial \overline{Y}_i}{\partial t} + \overline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \overline{Y}_i = D \Delta \overline{Y}_i - \overline{\mathbf{v}' \cdot \nabla Y'_i} - \overline{f(Y_1, Y_2)}. \quad (1.2.3)$$

où on a fait apparaître le terme  $\overline{\mathbf{v}' \cdot \nabla Y'_i}$ . L'interprétation de ce tenseur est le transport de quantité de masse par les fluctuations de vitesse. Le problème n'est pas résolu pour autant car ce terme met en jeu des corrélations doubles. On peut envisager d'étudier les corrélations doubles, mais ceci fait apparaître des corrélations triples, etc... jusqu'à une hiérarchie infinie d'équations. A la place, on propose dans RANS de faire une "fermeture" inverse, c'est-à-dire de relier les corrélations doubles aux moyennes des



simples. Dans ce cas, le modèle le plus étudié est fondé sur des idées de mécanique des fluides : on ferme l'équation (1.2.3) en faisant apparaître une *viscosité turbulente*  $D^*$  :

$$-\overline{\mathbf{v}' \cdot \nabla Y_i'} = D^* \Delta \overline{Y_i}.$$

Notons que cette forme est directement inspirée des équations constitutives de la mécanique des fluides : à une quantité dont on fait le bilan, on associe un flux proportionnel au gradient de cette quantité.

On peut également raffiner la description en tenant compte du transport de la viscosité turbulente : il s'agit du "modèle  $k-\epsilon$ " mis en place par Launder et Spalding en 1972. L'idée du modèle est que l'on peut construire une "viscosité turbulente" :

$$D^* = c_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$$

à partir de l'énergie cinétique des fluctuations  $k = \overline{(\mathbf{v}')^2}/2$  et une dissipation visqueuse  $\epsilon = \nu \overline{\nabla \mathbf{v}' \times \nabla \mathbf{v}'}$ , définies toutes les deux à partir des équations de Navier-Stokes.

– *réaction* :

Après avoir appliqué le filtre à l'opérateur non-linéaire associé à la réaction, on obtient :

$$\begin{aligned} \overline{f(Y_1, Y_2)} &= \overline{f(\overline{Y_1} + Y_1', \overline{Y_2} + Y_2')} = \\ &= \overline{f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) + \partial_{Y_1} f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) Y_1' + \partial_{Y_2} f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) Y_2' +} \\ &= \overline{\frac{\partial_{Y_1}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})}{2} (Y_1')^2 + \partial_{Y_1, Y_2}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) Y_1' Y_2' + \frac{\partial_{Y_2}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})}{2} (Y_2')^2 + \dots} = \\ &= \overline{f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) + \frac{\partial_{Y_1}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})}{2} \overline{(Y_1')^2} + \partial_{Y_1, Y_2}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) \overline{Y_1' Y_2'} +} \\ &= \overline{f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2}) + \frac{\partial_{Y_2}^2 f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})}{2} \overline{(Y_2')^2} + \dots} \end{aligned}$$

On remarque alors que dans le cas le plus général  $\overline{f(Y_1, Y_2)} \neq f(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})$ , en particulier pour notre problème  $\overline{f(Y_1, Y_2)} \equiv \overline{Y_1 Y_2} = \overline{Y_1} \overline{Y_2} + \overline{Y_1' Y_2'} \neq \overline{Y_1} \overline{Y_2}$  et on rencontre la même nécessité de modéliser des corrélations de  $Y_1'$  et  $Y_2'$ . Ce qui distingue ce cas de non-linéarité du cas précédent de l'advection c'est le

fait qu'il n'existe aucun modèle empirique qui établisse le lien entre  $\overline{Y_1' Y_2'}$  et les variables filtrées  $\overline{Y_1}$  et  $\overline{Y_2}$ . Il existe quand même une élégante fermeture de ce problème sans faire entrer en jeu des multiples corrélations de  $Y_1'$  et  $Y_2'$ . La base mathématique de cette approche fera l'objet des sections suivantes.

### 1.2.3. Description statistique des caractéristiques turbulentes

L'utilisation des méthodes statistiques dans la description des flots turbulents est justifiée par la grande sensibilité des équations de Navier-Stokes aux conditions initiales. En effet, des petites fluctuations dans les conditions initiales peuvent causer de grand changement de la solution générale du système. Autrement dit, on ne peut pas définir précisément ces conditions et en même temps obtenir l'unicité de la solution. Ce qui nous amène à une solution à caractère probabiliste. Ceci concerne surtout la turbulence aux petites échelles avec des grands nombres de Reynolds.

Il est évident que la description statistique d'un écoulement ne permet pas d'avoir une image détaillée du flot turbulent. Malgré cet inconvénient, la connaissance de ces caractéristiques reste néanmoins un outil clé pour prédire le comportement des mécanismes dont le fonctionnement et la productivité dépendent de la turbulence. La théorie statistique devient alors une méthode essentielle pour la description des écoulements réels. Dans notre cas, on utilise la description générale suivante. L'image qualitative d'une quantité arbitraire instantanée  $Z(\mathbf{x}, t)$ , obtenue à partir d'un capteur ponctuel, est une fonction du temps avec des fluctuations de différentes échelles et amplitudes, voir Figure 1.5.

On divise le graphique de  $Z(\mathbf{x}, t)$  en  $n$  intervalles uniformes de la taille  $\delta Z$ . Dans chacune de ces tranches, on définit une valeur au centre  $Z_k$ . On obtient alors pour chaque intervalle :

$$Z_k - \frac{1}{2} \delta Z \leq Z(\mathbf{x}, t) \leq Z_k + \frac{1}{2} \delta Z; \quad k = 1, 2, \dots, n$$

Pour des petites valeurs  $\delta Z$ , on suppose que la quantité  $Z(\mathbf{x}, t)$  est constante à l'intérieure de la tranche et on note  $\Delta t$ , l'intervalle sur lequel cette condition est satisfaite. La durée totale durant laquelle  $Z(\mathbf{x}, t)$  se trouve dans l'intervalle  $\delta Z$

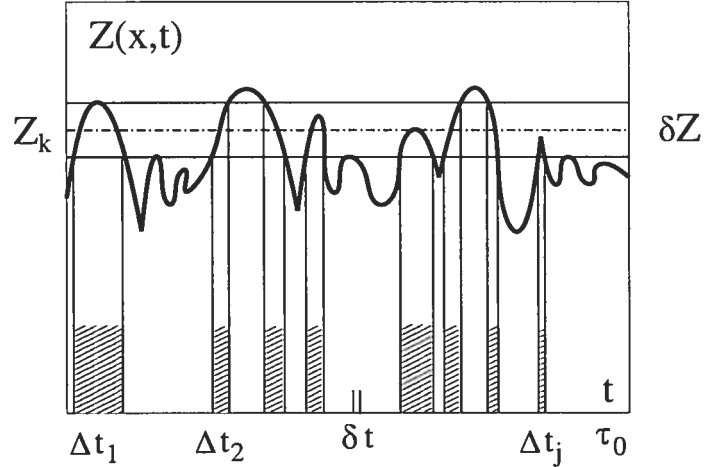


FIG. 1.5: Exemple de  $Z(\mathbf{x}, t)$  dans un point fixé de l'écoulement turbulent

avec une valeur  $Z_k$  est alors :

$$\Delta t_k = \sum_{j=1, \dots} \Delta t_j$$

Ici  $j$  signifie le nombre d'intervalles  $\Delta t$  où  $Z(\mathbf{x}, t)$  est égale à  $Z_k$ .

$$\sum_{k=1}^n \Delta t_k = \tau_0$$

où  $\tau_0$  est la durée totale de l'expérience. On suppose encore que, pour la tranche infiniment petite de  $\delta Z$ , il existe un intervalle  $\delta t$  tel que  $\Delta t_k / \delta t$  soit un nombre entier, et que, sur cet intervalle,  $Z(\mathbf{x}, t) \simeq Z_k$  juste une seule fois. On peut alors associer  $Z(\mathbf{x}, t)$  avec une série de valeurs  $Z_k = Z_1, Z_2, \dots, Z_n$  apparaissant dans chaque intervalle  $\Delta t_k$  un nombre entier de fois :  $N_k = N_1, N_2, \dots, N_n$ . Compte tenu que  $N_k = \Delta t_k / \delta t$ , le nombre total des réalisations est :

$$N = \sum_{k=1}^n N_k = \tau_0 / \delta t$$

et la probabilité que  $Z(\mathbf{x}, t)$  se trouve dans l'intervalle  $\delta Z$  avec la valeur au centre  $Z_k$  est :

$$\mathcal{P}(Z_k) = N_k / N. \quad (1.2.4)$$

La moyenne probabiliste de la quantité  $Z(\mathbf{x}, t)$  dans un point fixé durant l'expérience  $\tau_0$  est  $\langle Z \rangle = (Z_1 N_1 + Z_2 N_2 + \dots + Z_n N_n)/N$  où

$$\langle Z \rangle = \sum_{k=1}^n Z_k \mathcal{P}(Z_k) \quad (1.2.5)$$

La précision de cette estimation s'accroît avec la croissance de  $\tau_0$  et la décroissance de  $\delta Z$ .

Jusqu'ici on ne considère que les caractéristiques statistiques discrètes. Dans des systèmes réels de la dynamique des milieux continus la probabilité est une fonction continue de la variation  $dZ$ , où  $dZ \gg \delta Z$ . À la place de la quantité discrète  $\mathcal{P}(Z_k)$ , il faudra utiliser une fonction continue  $\mathcal{P}(Z)$ . En effet, on suppose que  $\mathcal{P}(Z)$  est une fonction linéaire par rapport à  $dZ$  avec comme coefficient la fonction de distribution de la probabilité (*Probability Density Function* PDF en anglais) que l'on note  $\text{pdf}(Z)$ . On considère maintenant les intervalles  $dZ$  et  $dt$  à

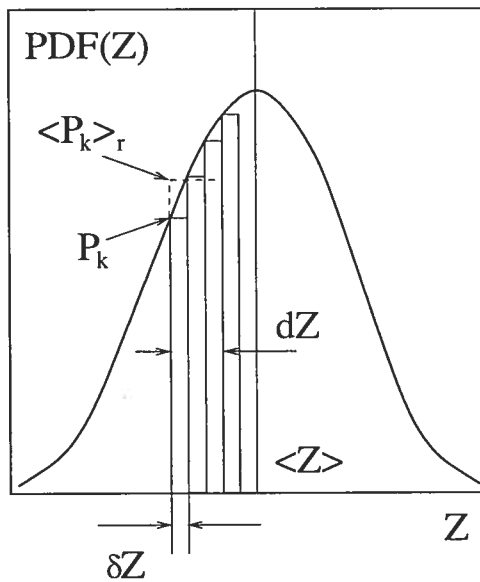


FIG. 1.6: Transition schématique entre la fonction de probabilité discrète et celle continue.

la place de  $\delta Z$  et  $\delta t$ . On obtient alors selon la définition (1.2.4) :

$$\mathcal{P}(Z) = \text{pdf}(Z) dZ = \lim_{\tau_0 \rightarrow \infty} \frac{\sum_j dt_j}{\tau_0} = \lim_{\tau_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_t} dt = \tau_t / \tau_0$$

où  $\tau_t$  est le temps durant lequel une certaine valeur de  $Z$  se trouve dans l'intervalle  $dZ$ . Après intégration sur toutes les valeurs possibles de  $Z(\mathbf{x}, t)$ , on obtient la condition de normalisation de pdf( $Z$ ) :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{pdf}(Z) dZ = \lim_{\tau_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} dt = 1$$

Figure 1.6 explique en détail la transition entre la valeur discrète  $\mathcal{P}(Z_k)$  et la fonction continue  $\mathcal{P}(Z)$ . En effet, supposons que la valeur  $dZ$  est  $r$  fois plus grande que  $\delta Z$ . Alors,

$$\sum_{k=1}^r \mathcal{P}_k \delta Z = \langle \mathcal{P}_k \rangle_r dZ$$

où  $\mathcal{P}_k \equiv \mathcal{P}(Z_k)$  et  $\langle \mathcal{P}_k \rangle_r = (\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_2 + \dots + \mathcal{P}_r)/r$  est une valeur moyenne sur  $dZ$ . On note  $\langle \mathcal{P}_k \rangle_r = \mathcal{P}(Z_i)$ , où  $Z_i$  est une valeur moyenne sur l'intervalle  $dZ$ . On fait tendre maintenant  $dZ \rightarrow 0$  et on obtient une fonction lisse  $\mathcal{P}(Z)$  définie pour toutes valeurs  $Z \in (-\infty, \infty)$ . L'expression (1.2.5) alors prend la forme :

$$\langle Z(\mathbf{x}, t) \rangle = \sum_i \mathcal{P}(Z_i) Z_i$$

ou la forme intégrale :

$$\langle Z(\mathbf{x}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Z(\mathbf{x}, t) \text{pdf}(Z) dZ \quad (1.2.6)$$

Avec un  $\tau_0$  approprié et dans le cadre de l'écoulement turbulent statistiquement stationnaire, la moyenne (1.2.6) est exactement équivalente à la moyenne de Reynolds :

$$\langle Z \rangle = \lim_{\tau_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} Z(\mathbf{x}, t) dt$$

Par contre cette formulation (1.2.6) s'avère plus commode pour décrire des écoulements turbulents intermittents quand il faut tenir compte durant le calcul de la moyenne de l'existence des régions à propriétés non-linéaires différentes.

L'intérêt de cette approche est en particulier de permettre d'obtenir les différentes caractéristiques statistiques de  $Z$  à partir de :

$$\langle f(Z) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(Z) \text{pdf}(Z) dZ. \quad (1.2.7)$$

On voit alors que la description statistique des caractéristiques turbulentes fondée sur la notion de PDF peut servir de la fermeture du problème exposé plus haut si l'on connaît la forme de ces PDF. La première approche est souvent celle où cette fonction est définie a priori à partir de l'analyse qualitative de la turbulence. Dans ce cas elle est souvent représentée comme la distribution de Gauss dépendant des caractéristiques moyennes de flot.

Une approche plus rigoureuse consiste à définir l'équation pour résoudre la PDF. Ceci est justifié par le fait que la forme gaussienne n'est valide que pour le cas d'écoulements quasi-homogènes (non-intermittents) turbulents. Dans l'autre cas les équations sur les PDF sont du type paraboliques et contiennent des termes qui eux aussi ont besoin d'une fermeture. La solution de telles équations est difficile, surtout dans le régime avec intermittence. Pour résoudre ces équations, on a souvent recours aux modèles simplifiés qui néanmoins sont capables de produire des résultats adéquats. Ceci signifie que l'emploi de la PDF dans la modélisation de la turbulence intermittente donne une image plus réelle que les modèles empiriques faisant intervenir les variables moyennées sans aucune condition.

Une application directe de cette méthode statistique aux systèmes d'équations (1.1.7) sur les scalaires passifs  $Z$  et réactifs  $Y_1, Y_2$  est la fermeture à la base du modèle de flammelettes.

### 1.3. MODÈLES DE FLAMMELETTES

On peut supposer en premier lieu que, pour une échelle de diffusion donnée, l'échelle de réaction (l'épaisseur de la flamme) est toujours plus petite que la plus petite échelle de turbulence. En d'autres mots, la surface de contact entre les espèces, et donc la réaction, suit instantanément tous les mouvements dans un fluide turbulent. Dans ce cas, on peut définir une structure de flamme élémentaire de référence centrée autour de chaque point du niveau stœchiométrique.

Cette structure porte le nom de *flammelette* laminaire. Localement les caractéristiques moyennes de la flamme turbulente peuvent alors s'exprimer en terme de ces flammelettes. L'utilisation de la méthode statistique pour des paramètres conditionnels de ces structures ne se justifie que si la durée de vie ou l'épaisseur des flammelettes invoquées est inférieure aux échelles de la turbulence. Cette condition est très délicate dans les flammes non-prémélangées où l'épaisseur de flammelette n'est compatible avec les échelles turbulentes que dans des régions et régimes particuliers. En effet, la structure de la flammelette peut être fortement influencée par le taux d'étirement dû à la contrainte de cisaillement qui épaissit et atténue la structure parfois même jusqu'à l'extinction.

Parmi les modèles développés récemment, les plus utilisés sont les flammelettes laminaires basées sur l'analyse du scalaire passif. Des expériences numériques ont montré que, dans le cas stationnaire turbulent, ces modèles de flammelette sont en accord parfait avec des résultats de l'analyse asymptotique rigoureuse. Ceci permet d'espérer que la même approche pourrait être adoptée pour les problèmes d'écoulements instationnaires turbulents.

### 1.3.1. Comportement asymptotique

Dans cette section, on présente des résultats fondamentaux [6] concernant les équations d'advection-réaction-diffusion en général. On définit le champ de vitesse comme une somme d'une contribution moyenne  $\bar{\mathbf{v}}$  et d'une contribution turbulente  $\mathbf{v}'$ . On considère de nouveau l'équation (1.1.1), où on introduit les échelles physiques  $\varepsilon^\alpha$  pour l'échelle turbulente (advection),  $\varepsilon^{-\beta}$  pour le temps caractéristique de la diffusion et  $\varepsilon^{-\gamma}$  pour le temps caractéristique de la réaction ( $\varepsilon \ll 1$ ). On obtient pour  $i = 1, 2$  :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + [\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}'(\mathbf{x}/\varepsilon^\alpha, t/\varepsilon^\alpha)] \cdot \nabla Y_i = \varepsilon^\beta D \Delta Y_i - \varepsilon^\gamma k Y_1 Y_2 \quad (1.3.1)$$

On remarque que les trois phénomènes concurrents (advection, diffusion, réaction) peuvent donner naissance à différents scénarios de comportement dépendamment des grandeurs relatives des échelles. Le défi mathématique de ce problème consiste à définir la forme limite de cette équation ainsi que le comportement effectif de sa solution quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ . L'analyse de ces formes limites fait l'objet de nombreuses

études de la théorie de l'homogénéisation. On reproduit ici seulement les deux cas asymptotiques [6] qui serviront plus tard dans le modèle de flammelette.

Supposons comme dans la Section 1.1.1 que  $\Omega_-$  et  $\Omega_+$  sont deux ensembles disjoints  $\Omega_- \cup \Omega_+ = \mathbb{R}^N$  associés respectivement au comburant et au combustible. On considère le système (1.1.4) avec les conditions initiales  $(Z_0, Y_0)$  :

$$Z_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} -Y_2(\mathbf{x}, 0)/2 & \text{dans } \Omega_- \times \{0\} \\ Y_1(\mathbf{x}, 0)/2 & \text{dans } \Omega_+ \times \{0\} \end{cases}$$

et

$$Y_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_- \times \{0\} \\ Y_1(\mathbf{x}, 0) & \text{dans } \Omega_+ \times \{0\} \end{cases}$$

**1<sup>er</sup> cas asymptotique :** La première limite correspond à  $\gamma = 1$  (réaction lente, avec coefficient  $\varepsilon k$ ) et à  $\beta = 1$  (diffusion lente, avec coefficient  $\varepsilon D$ ). On suppose que  $\alpha = 1$  pour la contribution turbulente de la vitesse dans (1.3.1) et que la contribution moyenne est très faible :  $\bar{\mathbf{v}} = \varepsilon \bar{\mathbf{v}}^*(\mathbf{x}, t/\varepsilon)$ . Puisque la diffusion et la réaction toutes les deux sont lentes, il est donc approprié de considérer aussi une échelle du temps plus lente  $t^* = \varepsilon t$ . On substitue ces nouvelles variables dans (1.3.1) et on abandonne l'étoile afin de simplifier la notation :

$$\begin{cases} \partial_t Z^\varepsilon + (\bar{\mathbf{v}} + \varepsilon^{-1} \mathbf{v}'(\mathbf{x}/\varepsilon, t/\varepsilon^2)) \cdot \nabla Z^\varepsilon = D \Delta Z^\varepsilon \\ \partial_t Y^\varepsilon + (\bar{\mathbf{v}} + \varepsilon^{-1} \mathbf{v}'(\mathbf{x}/\varepsilon, t/\varepsilon^2)) \cdot \nabla Y^\varepsilon = D \Delta Y^\varepsilon - k Y^\varepsilon (Y^\varepsilon - 2 Z^\varepsilon) \end{cases} \quad (1.3.2)$$

Physiquement, il s'agit d'une flamme épaisse, capable d'absorber un large spectre des tourbillons de turbulence.

**Théorème 1.3.1.** *Soient  $(Z_0, Y_0)$  les données initiales du problème (1.3.2), sa solution  $(Z^\varepsilon, Y^\varepsilon)$  converge uniformément dans  $\mathbb{R}^N \times (0, T)$ , quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ , vers une limite locale  $(Z, Y)$ , qui est une solution du système :*

$$\begin{cases} \partial_t Z + \bar{\mathbf{v}}(x, t) \cdot \nabla Z = D \Delta Z + \nabla \cdot (D^* \nabla Z) \\ \partial_t Y + \bar{\mathbf{v}}(x, t) \cdot \nabla Y = D \Delta Y + \nabla \cdot (D^* \nabla Y) - k Y (Y - 2 Z) \end{cases}$$

avec les mêmes données initiales  $(Z_0, Y_0)$ . Le tenseur de diffusivité effective  $D^*$  est calculé via un problème cellule de la théorie de l'homogénéisation de la diffusion turbulente. (voir [6] pour la démonstration complète)



On remarque que la réaction lente signifie l'absence de la nécessité de fermeture pour le terme non-linéaire associé à la réaction. Alors la connaissance du modèle de la fermeture pour le tenseur de diffusivité  $D^*$  est suffisante pour effectuer le calcul numérique et obtenir une solution effective moyenne même quand la taille des mailles de calcul est supérieure à la plus grande échelle physique.

**2<sup>ème</sup> cas asymptotique** La deuxième limite correspond à  $\gamma = -1$  (réaction rapide, coefficient  $\varepsilon^{-1} k$ ),  $\beta = 1$  (diffusion lente, coefficient  $\varepsilon D$ ) et  $0 < \alpha \leq 1$ .

$$\begin{cases} \partial_t Z^\varepsilon + (\bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}'(\mathbf{x}/\varepsilon^\alpha, t/\varepsilon^\alpha)) \cdot \nabla Z^\varepsilon = \varepsilon D \Delta Z^\varepsilon \\ \partial_t Y^\varepsilon + (\bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}'(\mathbf{x}/\varepsilon^\alpha, t/\varepsilon^\alpha)) \cdot \nabla Y^\varepsilon = \varepsilon D \Delta Y^\varepsilon - \varepsilon^{-1} k Y^\varepsilon (Y^\varepsilon - 2Z^\varepsilon) \end{cases} \quad (1.3.3)$$

Le nombre de Damköhler est très grand car donné par  $(\varepsilon^{-1} k)/(\varepsilon D) = k/(\varepsilon^2 D)$ . Physiquement, il s'agit d'une flamme d'une épaisseur infiniment petite. Les composants chimiques réagissent aussitôt qu'ils entrent en contact les uns avec les autres.

**Théorème 1.3.2.** *Soit  $(Z^\varepsilon, Y^\varepsilon)$  la solution du système de diffusion-réaction (1.3.3) avec les données initiales lisses. Si cette solution contient deux états distincts d'équilibre stables, et si, en plus,  $\mathbf{v}'$  est incompressible, alors  $Z^\varepsilon \rightarrow Z$  et  $Y^\varepsilon \rightarrow Z + |Z|$  uniformément dans  $\mathbb{R}^N \times (0, \infty)$ , quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ .  $Z$  satisfait l'équation d'advection sur une grande échelle  $Z_t + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla Z = 0$ , avec les données initiales  $Z|_{t=0} = Z_0$ . (voir [6] pour la démonstration complète)*

En particulier, la vitesse à une petite échelle n'affecte pas la réaction et le niveau stœchiométrique évolue avec la vitesse à une grande échelle. On remarque aussi que le scalaire réactif de limite ne dépend que du scalaire passif  $Z$  et il a la forme  $Y_1 = |Z| + Z$  (l'état d'équilibre opposé est dans ce cas  $Y_2 = |Z| - Z$ ). Les théorèmes précédents expliquent le comportement de la solution du système d'advection-réaction-diffusion seulement pour des échelles de réaction infiniment petite et infiniment grande.

### 1.3.2. Hypothèse du modèle de flammelles laminaires

Selon le Théorème 1.3.2 la solution sur les scalaires réactifs  $Y_1$  et  $Y_2$  à la limite du nombre de Damköhler infiniment grand tend vers une fonction qui ne dépend que du scalaire passif  $Z$ . Le modèle de flammelle laminaire a donc pour but

d'obtenir l'extension de ces résultats pour les cas avec des nombres de Damköhler grands mais finis. Comme il a déjà été mentionné au début de la Section 1.3, l'approche des flammelettes laminaires est fondée sur les hypothèses suivantes concernant le rapport entre l'échelle de réaction et les échelles turbulentes.

- (1) On suppose que l'on possède une solution suffisamment précise pour le scalaire passif ainsi que pour ses caractéristiques statistiques afin que l'approche statistique fondée sur la PDF pour  $Z$  (voir (1.2.7)) soit accessible.
- (2) On suppose que l'épaisseur de la flamme (ou l'échelle de réaction) est plus petite que toutes échelles turbulentes qui interviennent dans la description du scalaire passif.
- (3) On obtient les valeurs du scalaire réactif  $Y$  correspondant à des échelles plus grosses que celle de la réaction à partir de l'approche statistique (1.2.7) comme une moyenne dans l'espace  $Z$  :

$$\langle Y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Y(Z, \dots) \text{pdf}(Z, \dots) dZ \quad (1.3.4)$$

On suppose que, ainsi obtenue, la statistique moyenne  $\langle Y \rangle$  est équivalente à la valeur filtrée (1.2.1) avec une largeur de filtre  $\delta$  correspondant aux grandes échelles du scalaire passif.

La validation de ces hypothèses fait l'objet de plusieurs travaux dont le résumé est donné dans la partie qui suit.

#### 1.3.2.1. *Statistiques du scalaire passif*

Concernant la première hypothèse, d'importants résultats ont été présentés dans l'article de Bourlioux et Majda [2]. Cet article contient l'analyse asymptotique des différents scénarios de comportement de la solution de l'équation sur le scalaire passif (1.1.3) pour le champ d'écoulement de cisaillement introduit ci-haut dans Section 1.1.3. L'analyse effectuée dans [2] a montré que même pour des champs d'écoulement avec une géométrie si simple, la réponse du scalaire passif contient des régimes fort intermittents, ce qui affecte de façon fondamentale la forme de la fonction de la densité de probabilité utilisée dans (1.2.7). Par définition, l'intermittence est une alternance des zones ayant des propriétés de

comportement significativement différentes. L'existence de ce phénomène a été pour la première fois souligné dans les travaux de Townsend [7]. L'auteur a découvert expérimentalement l'existence d'une alternance non-régulière des zones d'écoulement à des valeurs différentes des gradients de la vitesse (la dissipation d'énergie) et de la concentration de masses (la dissipation scalaire). Dans l'article [2] les auteurs montrent que, pour des nombres de Péclet supérieurs à une certaine limite, la solution manifeste des larges fluctuations entre l'état stationnaire et instationnaires avec des grandes amplitudes. Ce comportement est caractéristique de la turbulence à une petite échelle. L'intermittence se traduit par une expansion brusque au niveau de la forme de la PDF (voir Figure 1.7) due au changement de la structure du champ d'écoulement. L'article [2] démontre également l'existence des régimes intermédiaires associés au temps caractéristique du champ de cisaillement  $\tau_p = 2\pi/\omega$ .

Ces résultats ont souligné la nécessité d'une plus ample considération du scalaire passif et du taux de dissipation scalaire qui a une influence considérable sur le comportement des scalaires réactifs. Il existe d'autres statistiques conditionnelles du scalaire passif qui s'avèrent importantes quant à la fermeture de problème de flammelette turbulentes instationnaires. L'étude de ces statistiques est menée en détail dans le Chapitre 2 de cette thèse.

### 1.3.2.2. *Asymptotique des scalaires réactifs, cas stationnaire*

La deuxième hypothèse est fondée sur l'analyse asymptotique des scalaires réactifs pour des nombres de Damköhler grands, mais finis. L'article [1] présente cette analyse pour une solution stationnaire du système des équations (1.1.1) avec les champs d'écoulement incompressibles définis explicitement à partir de la fonction de courant de Childress-Soward, voir Section 1.1.3. Pour validation, les auteurs de [1] considèrent un problème (1.3.9) dans un domaine rectangulaire à deux dimensions  $-L_g/2 < x < L_g/2$  et  $0 \leq y \leq P$  où la taille  $L_g$  est en générale plus grande que  $P$ , voir Figure 1.1. Le scalaire passif est défini comme une somme d'un gradient  $x/L_g$  et des fluctuations périodiques en  $x$  et  $y$ . Les conditions aux limites pour les scalaires réactifs sont périodiques dans la direction  $y$  et du type

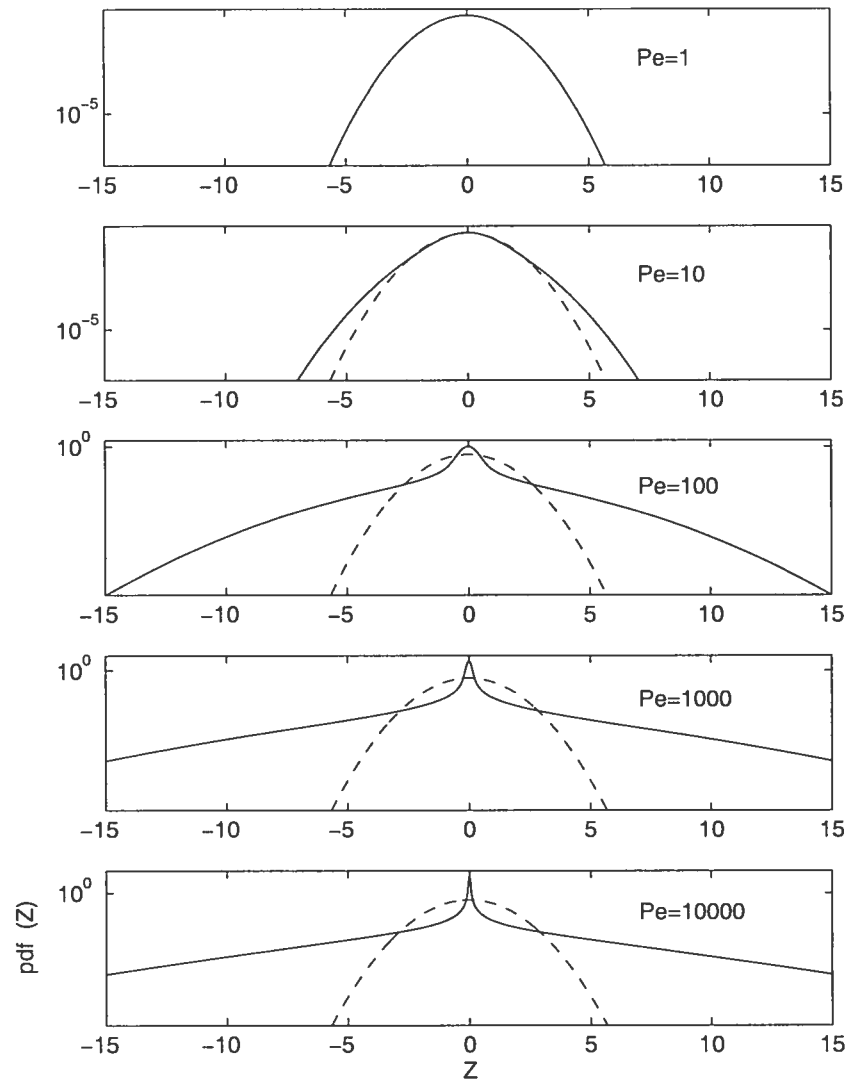


FIG. 1.7:  $\text{pdf}(Z)$  comme une fonction du nombre de Péclet où  $Z$  est présenté dans l'échelle logarithmique [2]

“équilibre” dans la direction  $x$ , voir Section 1.1.1. La forme exacte de ces conditions est obtenue dans le théorème asymptotique 1.3.2 :

$$\begin{cases} Y_1|_{x=\pm L_g/2} = |Z| + Z \\ Y_2|_{x=\pm L_g/2} = |Z| - Z. \end{cases}$$

Pour une description plus détaillée de cette formulation, on se référera au Chapitre 3 de cette thèse où elle est employée pour étudier les flammelettes instationnaires.

Les nombres sans dimension, de Péclet et de Damköhler, jouent un rôle crucial dans le choix de stratégie de flammelette. En effet, le travail classique de Williams [8] montre que la zone de réaction située autour du niveau stœchiométrique  $Z = 0$  (voir Figure 1.1) a une épaisseur proportionnelle à  $Da^{-1/3}$ . Les trois types de formulations de flammelettes stationnaires sont alors décrites selon la structure de la flamme :

(1) *modèle en équilibre, limite pour  $Da \rightarrow \infty$  :*

La zone de la flamme est assez mince, ce qui permet de considérer les scalaires réactifs de la théorie asymptotique :

$$\begin{aligned} Y_{1,\text{eq}}(Z(x, y)) &= |Z(x, y)| + Z(x, y), \\ Y_{2,\text{eq}}(Z(x, y)) &= |Z(x, y)| - Z(x, y) \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

Selon le théorème 1.3.2, l'erreur de modélisation de cette approximation est de l'ordre de  $Da^{-1/3}$ .

(2) *flammelettes stationnaires :*

Cette approche correspond au deuxième terme du développement asymptotique en  $Da^{-1/3}$  de perturbation des scalaires réactifs  $Y_i$ . Dans le système (1.1.7), on suppose que  $Y_i$  sont des fonction de  $Z$  seulement et on obtient alors :

$$\begin{aligned} \partial_t Z + Pe \mathbf{v} \cdot \nabla Z - \Delta Z &= 0 \\ \partial_Z Y_i \partial_t Z + Pe \mathbf{v} \cdot \partial_Z Y_i \nabla Z - \partial_Z Y_i \Delta Z - |\nabla Z|^2 \partial_{Z,Z} Y_i + Da Y_1 Y_2 &= 0. \end{aligned}$$

où la seconde équation peut être simplifiée en tenant compte de la première pour donner l'équation décrivant la flammelette stationnaire  $Y_i(Z)$  :

$$\chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = Da Y_1 Y_2 \quad (1.3.6)$$

La quantité  $\chi = \chi(x, y) \equiv |\nabla Z|^2$ , appelée la *dissipation scalaire*, est un paramètre de contrôle des flammes ayant un caractère suffisamment générique pour présenter, sous la même enveloppe, l'ensemble des sous-modèles utilisés en combustion turbulente. La modélisation de la dissipation scalaire est un point crucial de la formulation de flammelette. On définit maintenant la valeur locale du nombre de Damköhler comme étant  $Da_G(x, y) = Da/\chi(x, y)$ . On normalise ensuite  $Y_i$  et  $Z$

selon  $Z_{fl} = Z Da_G^{1/3}$ ,  $Y_i^{fl} = Y_i Da_G^{1/3}$  de telle sorte qu'on obtient :

$$\frac{\partial^2 Y_i^{fl}}{\partial Z_{fl}^2} = Y_1^{fl} Y_2^{fl}, \quad (1.3.7)$$

Puisque l'équation ne contient aucun paramètre physique, sa solution peut être précalculée une fois pour toute et la solution non-normalisée obtenue directement par les formules ci-dessus pour toute valeur de  $Da_G$ . La valeur locale de Damköhler est déduite à partir de la dissipation scalaire  $\chi(x, y)$  calculée localement en chaque point.

(3) *flammelettes stationnaires avec une dissipation moyenne :*

Cette stratégie est utilisée dans le cas où il devient impossible d'obtenir une solution détaillée pour le scalaire passif  $Z$ . Elle consiste à remplacer la dissipation locale par la dissipation moyenne sur un volume d'intégration. Les auteurs [1] montrent que cette valeur est reliée directement à la diffusivité turbulente moyenne  $\kappa_T$  sur cette boîte :

$$\langle \chi \rangle = 1/L_g^2 + \kappa_T/L_g^2$$

Le calcul de [1] confirme que les approches (1) et (2) convergent asymptotiquement avec le taux de convergence linéaire et quadratique respectivement par rapport au paramètre  $Da^{-1/3}$ . Cette convergence reste insensible aux changements du taux de perturbation du champ d'écoulement bien que la somme des erreurs dépende toujours du nombre de Péclet. L'avantage de la troisième approche est dans le caractère de sa dissipation qui est reliée directement avec la diffusivité turbulente moyenne sur une période. Par rapport à l'approche locale, ce modèle a des meilleures performances pour de petits nombres de Damköhler. Par contre, quand  $Da$  est grand, il reste dans les limites du modèle de l'équilibre avec le même taux de convergence.

### 1.3.2.3. *Fermeture via des flammelettes laminaires*

Le groupe de travaux de Peters, Coelho [5, 9] se concentre sur l'aspect de la fermeture du problème turbulent afin de le relier au cas laminaire. Dans le plan général, les auteurs cherchent à construire un système fermé des équations en se

fondant sur une formulation asymptotique du problème de l'écoulement de jets opposés.

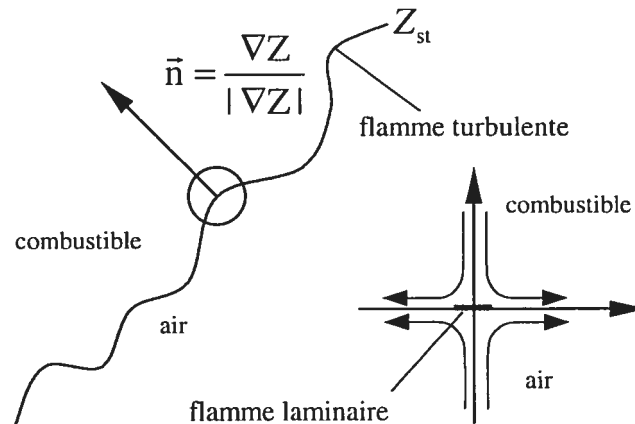


FIG. 1.8: Correspondance entre la flamme turbulente et la flamme laminaire dans un écoulement de jets opposés

La flamme laminaire dans l'écoulement de jets opposés sert de modèle de flammelette à cause de sa ressemblance avec la couche de mélange instationnaire. Ces flammelettes laminaires sont unidimensionnelles et possèdent une structure interne bien définie. Le dégagement de chaleur se passe en général dans une couche fine de la flammelette et influence le champ d'écoulement. La déformation turbulente de la flamme laminaire peut modifier considérablement toute la structure laminaire et même provoquer l'extinction de la flamme pour les grandes valeurs de l'intensité d'écoulement.

La figure schématique 1.8 donne un aperçu du concept en montrant le contour instantané sur le niveau stœchiométrique utilisé pour définir la flamme turbulente. On effectue le changement des coordonnées de manière que, dans le nouveau système, une des composantes (par exemple  $x_1$ ) soit à un moment donné orthogonale à la surface du mélange stœchiométrique. Dans ce nouveau système de coordonnées, la structure turbulente de la flamme est similaire à la structure laminaire d'écoulement de jets opposés. Une fois que le centre de ce système est placé sur la surface même, on effectue la transformation de Crocco [10] où  $x_1$  est remplacée par le taux de mélange  $Z$  et où les autres coordonnées restent intactes :

$t, x_1, x_2, x_3 \rightarrow \tau, Z, x_2, x_3$ . La condition, pour qu'une telle transformation soit valide, est l'unicité de la représentation  $x_1$  en fonction de  $Z$ . Ceci est vrai pour les flammes laminaires et ne l'est pas en général pour les écoulements turbulents. On se sert alors de la deuxième hypothèse selon laquelle la zone de réaction doit rester mince par rapport aux petites échelles de turbulence et se restreint à une bande autour du niveau stœchiométrique. Une fois que la transformation est accomplie, l'approximation asymptotique est appliquée dans la zone de réaction, ce qui consiste à négliger les termes qui contiennent les dérivées dans la direction normale à la iso-surface de  $Z$ . On obtient d'abord une équation de flammelettes instationnaires :

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\rho}{Le_i} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i \quad (1.3.8)$$

Dans cette équation la dissipation scalaire locale est définie comme  $\chi = 2D|\nabla Z|^2$ . En supposant que les changements locaux dans la structure de mélange sont rapides, voire instantanés, l'auteur [5] introduit le modèle quasi-stationnaire (*Stationary Laminar Flamelet Model* (SLFM) en anglais). Les équations du système (1.1.1) dans ce modèle prennent la forme similaire à l'équation (1.3.6) sur les flammelette laminaires :

$$\frac{\rho}{Le_i} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i = 0, \quad (1.3.9)$$

qui résulte en une solution  $Y_i = Y_i(Z, \chi)$  (une librairie des profils de flammelettes). Le taux de dissipation scalaire  $\chi$  qui apparaît dans l'équation (1.3.9) est souvent normalisé par les facteurs de Lewis  $Le_i$  pour tenir compte des différences qui existent entre des diffusivités des composants chimiques. En pratique dans le code commercial, cette librairie sert à obtenir les valeurs moyennes des taux de mélange des différentes composants chimiques ainsi que l'intensité thermique des réactions [5]. Dans SLFM  $\chi$  est souvent définie via ces valeurs au niveau stœchiométrique  $\chi_{st}$ , c'est-à-dire que la librairie des flammelettes au complet est obtenue comme une solution du problème laminaire de l'écoulement de jets opposés approximée dans l'intervalle des valeurs  $\chi_{st}$ . Pour ce type d'écoulement, on trouve la solution exacte :

$$\chi(Z) = \frac{a}{\pi} \exp \left[ -2 \left[ \operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right] = \chi_{st} f(Z)/f(Z_{st}), \quad (1.3.10)$$



où  $a$  est un gradient de la vitesse. Les valeurs moyennes de  $Y_i$  dans la flamme turbulente sont calculées selon (1.3.4) à partir de :

$$\langle Y_i \rangle = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i(Z, \chi) \text{pdf}(Z, \chi) d\chi dZ \quad (1.3.11)$$

où  $\text{pdf}(Z, \chi)$  est souvent exprimée comme une  $\beta$ -distribution pour  $Z$  et une distribution logarithmique pour  $\chi$ .

Comme alternative, [5] propose le modèle de fermeture des équations sur  $Z$  et  $\chi$  basé sur un système d'équations de turbulence  $k - \epsilon$ . Dans ce modèle, les termes des équations de transport sont évalués à l'aide de la moyenne de Favre. Cette moyenne pondérée par la masse est reliée à la moyenne statistique classique de Reynolds (1.2.1) par la relation suivante :  $\tilde{Z} = \overline{\rho Z} / \bar{\rho}$ . L'auteur obtient la solution dans les variables  $\tilde{Z}$  et  $\widetilde{Z''^2}$  avec la dissipation scalaire moyenne définie comme étant :

$$\tilde{\chi} = C_x \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \widetilde{Z''^2}.$$

En résumé, les auteurs considèrent trois approximations consécutives pour la fermeture de problèmes de flammes stationnaires turbulentes :

- (1) le scalaire passif est résolu via le modèle à écoulement de jets opposés (en générale laminaire) ou pris directement dans l'expérience ;
- (2) l'hypothèse de flammelette néglige tous les termes qui ne sont pas normaux à la surface stœchiométrique ;
- (3) la dissipation turbulente est calculée comme une valeur moyenne sur le niveau stœchiométrique.

Ces restrictions créent des inconvénients en ce qui concerne les modèles chimiques et physiques, mais malgré cela l'approche SLFM reste peu coûteuse et elle montre une bonne performance pour des problèmes stationnaires. Dans la partie qui suit, on discutera sur les points faibles de cette approche quant à des cas instationnaires et on verra des améliorations et des extensions proposées par différents auteurs pour contrer ceci.

### 1.3.3. Limitations du modèle stationnaire

#### 1.3.3.1. *Effets instationnaires importants.*

Les résultats expérimentaux [11] ont montré qu'il existe certaines différences dans la structure de la zone de réaction entre les flammes turbulentes réactives et les flammelettes stationnaires. Par exemple pour les flammes proches de la limite d'extinction, les auteurs ont signalé des concentrations de CO plus élevées que celles attendues dans les prédictions du SLFM. Les mêmes résultats ont été observés pour les fractions massiques de OH et H<sub>2</sub>. Ils attribuent cette différence à plusieurs mécanismes contribuant à l'augmentation du taux massique des produits intermédiaires de la combustion mais qui pourtant ne sont pas pris en compte dans SLFM. Les auteurs mentionnent selon l'importance :

- (1) effets temporels : les variations brusques de la dissipation scalaire ;
- (2) effets spatiaux : la courbure élevée du niveau stœchiométrique, l'interaction entre les flammelettes, la composante transversale de la diffusion tangente à la flamme ;
- (3) effets physiques : la diffusion différentielle.

Pour le premier point, les auteurs [11] notent en plus qu'il s'agit du comportement intermittent et que les oscillations lisses périodiques dans le temps ne causent pas d'augmentation des fractions massiques des espèces au-delà des prédictions du SLFM.

Le premier aspect est souligné aussi dans le travail [10] pour son importance dans les études de l'extinction de la flamme. Les auteurs suggèrent que la réponse de flammelette devrait tenir compte de la relation entre le spectre des fréquences du champ dynamique et l'échelle caractéristique du temps chimique. Pour les grandes amplitudes des fluctuations du champ d'écoulement, la flammelette s'éteint si ces amplitudes dépassent la valeur de limite d'extinction. Pour les petites fréquences, l'extinction totale a lieu seulement si les amplitudes sont intenses et conservées pendant une certaine période du temps. L'extinction intermittente apparaît seulement après l'augmentation de la fréquence. Il est noté

aussi que, sous ce régime instationnaire, le taux de réaction à partir de l'expérience est toujours plus petit que le taux calculé via le modèle stationnaire. Dans l'article de Coelho et Peters [9], une analyse de différents modes de flammelettes instationnaires est donnée. Les auteurs montrent que la réponse de flammelette stationnaire au changement de taux de dissipation scalaire doit être ralentie. Notamment, il est établi que les modèles des flammelettes laminaires stationnaires ne sont pas capables de prédire correctement l'émission de  $\text{NO}_x$ . Dans ce cas les auteurs présentent l'argument suivant. Si l'on identifie la flammelette avec une particule de fluide dans le domaine, on remarque qu'elle subit des déformations considérables qui s'expriment en termes de taux de dissipation scalaire. C'est ainsi que l'histoire transitoire de ce scalaire nécessite l'utilisation du modèle de flammelette instationnaire.

### 1.3.3.2. Critères de validité du modèle stationnaire

Dans d'autres travaux, Cuenot et Poinso [12] ont utilisé les résultats de calcul direct unidimensionnel des interactions flamme – champ d'écoulement instationnaire pour construire des diagrammes de phase qui ont mis en évidence les domaines dans lesquels SLFM n'est plus valide. Peters dans ses travaux [5] souligne l'importance du développement d'un critère universel et propose d'utiliser le critère de l'article [13] basé sur la notion du temps de la diffusion :

$$t_\chi = \frac{(\Delta Z)^2}{\chi_{st}} \quad (1.3.12)$$

Par définition, cette quantité correspond au temps nécessaire pour effectuer le transfert (l'échange) de la masse et de l'énergie sur une distance  $\Delta Z$  équivalente à l'épaisseur de la flamme.  $\chi_{st}$  désigne dans (1.3.12) la dissipation scalaire au niveau stœchiométrique. Dans le cas où ce temps est court par rapport soit au temps lagrangien :

$$t = \int_{x_0}^x \frac{1}{u(x|Z = Z_{st})} dx \quad (1.3.13)$$

dans le cas stationnaire, soit au temps réel dans le cas instationnaire, la flammelette est capable de suivre les changements rapides de la dissipation scalaire et le SLFM est considéré adéquat. Un critère pratique fondé sur les mêmes idées

a été proposé par Mell et al. [14]. Les auteurs comparent les magnitudes des termes instationnaires, que l'on néglige dans le développement du SLFM, avec la magnitude du terme de réaction. En supposant que le SLFM est valide, la vérification suivante de consistance (on vérifie que la dérivée par rapport au temps soit négligeable) peut être effectuée sur les valeurs au niveau stœchiométrique :

$$\left| \frac{\partial Y_i(Z_{st}, \tau)}{\partial \tau} \right| / \text{Da} Y_1(Z_{st}, \tau) Y_2(Z_{st}, \tau) \ll 1 \quad (1.3.14)$$

En pratique, on adopte l'approche quasi-stationnaire et on substitue dans (1.3.14) la solution asymptotique des grands nombres de Damköhler, introduite dans la section (1.3.2.2), de façon à obtenir le critère final sous la forme suivante :

$$\text{Da}_G^{-2/3} \left| \frac{\partial \chi_{st}}{\partial \tau} \right| \left( \frac{1}{\chi_{st}} \right)^2 \ll 1.$$

Ce critère montre qu'une épaisseur petite de la flamme  $\text{Da}_G^{-1/3} = (\chi_{st}/\text{Da})^{1/3} \ll 1$  ne donne pas à elle seule une garantie nécessaire pour que l'approche quasi-stationnaire soit juste. La validité de cette approximation dépend surtout de la variation de la quantité  $\chi_{st}$ . Le facteur  $|\dot{\chi}_{st}|/\chi_{st}^2$  est une mesure sans dimension du taux de variation. Pour une dissipation à une forme donnée, on peut toujours trouver le nombre de Damköhler qui définit le seuil de la validité du SLFM. L'inconvénient est lié ici au fait que, dans la situation inverse, c'est-à-dire quand le nombre de Damköhler est fixé et  $\chi_{st}$  varie dans le temps, ce critère n'indique pas clairement pour quelle valeur de  $\chi_{st}$  le SLFM cesse d'être juste. Notons aussi que ce dernier critère est relié à celui de [13] par le simple fait que la quantité  $\chi_{st}/|\dot{\chi}_{st}|$  peut être considérée comme le temps lagrangien et  $\text{Da}_G^{-1/3} \simeq \Delta Z$  comme une épaisseur de la flamme. Dans ce cas :

$$\text{Da}_S^{-2/3} \left| \frac{\partial \chi_{st}}{\partial \tau} \right| \left( \frac{1}{\chi_{st}} \right)^2 \ll 1 \quad \simeq \quad \frac{(\Delta Z)^2}{\chi_{st}} \ll \frac{\chi_{st}}{|\dot{\chi}_{st}|}$$

signifie que le temps caractéristique de la diffusion (1.3.12) doit être plus petit que le temps lagrangien lié à la dissipation scalaire.

En résumé, tous les résultats expérimentaux et théoriques indiquent que la modélisation des flammelettes instationnaires est de haute importance pour des régimes turbulents, où on s'attend à des effets intermittents.

### 1.3.4. Stratégies purement instationnaires.

#### 1.3.4.1. Extensions instationnaires du modèle de flammelettes

Deux extensions du SLFM au cas instationnaires relativement simples au niveau de développement et du coût calcul ont été présentées respectivement dans les travaux de Rao and Rutland [15] et de Cuenot, Egolfopoulos et Poinso [16]. La première, (*Flamelet Time-Scale FTS model* en anglais), a tout simplement introduit un ajustement du temps pour le SLFM déjà implémenté dans le code commercial KIVA-3. Les auteurs considèrent les équations sur les espèces  $Y_i$  comme un analogue instationnaire de (1.3.9) :

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2 \text{Le}_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - \dot{\omega}_i = 0. \quad (1.3.15)$$

Pour tenir compte des effets instationnaires apparaissant durant le régime pendant lequel la flamme est relativement épaisse par rapport à l'échelle de turbulence (le nombre de Damköhler petit), les auteurs introduisent une échelle de temps modifiée. Ainsi l'équation précédente devient :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \beta_i, \quad \beta_i = \frac{\chi}{2 \text{Le}_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho}$$

où la partie droite est écrite comme un développement de Taylor de premier ordre en fonction du temps par rapport à la solution de flammelettes :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \beta_i^* + \sum_{j=1}^n \frac{\partial \beta_i^*}{\partial Y_j} (Y_j - Y_j^*) \quad (1.3.16)$$

où  $n$  est le nombre des espèces et  $*$  indique la flammelette stationnaire. En conséquence, le premier terme de (1.3.16) s'annule et la matrice jacobienne  $\partial \beta_i^* / \partial Y_j$ , évaluée à partir du modèle de flammelettes stationnaires, correspond aux rapports réciproques des échelles du temps des différentes espèces  $Y_j$ . En pratique, les auteurs utilisent pour tous les cas le même temps  $\tau_{\text{chem}}$  correspondant à un mécanisme réduit de la réaction (l'échelle de l'oxygène  $(\partial \beta_{\text{O}_2}^* / \partial Y_{\text{O}_2})^{-1}$  dans la partie riche en oxygène et l'échelle du combustible  $(\partial \beta_{\text{F}}^* / \partial Y_{\text{F}})^{-1}$  dans la partie riche en fuel). La cinétique chimique des réactions est alors approximée avec l'équation :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = - \frac{Y_i - Y_i^*}{\tau_{\text{chem}}}$$

Une alternative proposée et validée dans le cadre d'un simple problème unidimensionnel est une approximation basée sur des flammelettes complètement instationnaires (*Full Unsteady Laminar Flamelet Assumption* FULFA en anglais) [16]. Dans leur travail les auteurs qualifient les régimes instationnaires selon la fréquence et l'amplitude du champ dynamique unidimensionnel :

$$\rho v(x, \Lambda) = -\rho_f \Lambda \zeta(x), \quad \zeta(x) = \int_{x_f}^x (\rho/\rho_f) dx + x_f \quad (1.3.17)$$

Les auteurs construisent des bibliothèques de solutions en fonction de l'intensité du champ d'écoulement  $\Lambda$  qui serviront à valider systématiquement leur modèle de flammelettes instationnaires pour les amplitudes qui subissent des variations brusques et des chocs (*step-functions* en anglais) ainsi que des oscillations de hautes fréquences dans le temps. Aux fins de modélisation, les auteurs proposent d'utiliser les bibliothèques stationnaires en remplaçant le taux de la dissipation turbulente instationnaire par une constante équivalente. Ce type d'approche mène à trois modèles, suivant les régimes :

- (1) Le régime quasi-stationnaire, dans lequel l'intensité  $\Lambda$  varie assez lentement avec le temps, de telle façon qu'on peut considérer les mécanismes de diffusion et de réaction comme étant quasi-stationnaires (ils répondent d'une façon instantanée à la variation du champ d'écoulement). Dans ce cas, on néglige les termes instationnaires dans le calcul du scalaire passif et on utilise la bibliothèque de flammelettes stationnaires. Supposons, en effet, que la bibliothèque de flammelettes stationnaires est définie à l'aide des fonctions de la coordonnée spatiale  $x$  et du taux de la diffusivité turbulente  $\Lambda$ . On trouve alors le scalaire passif  $Z$  comme une solution du problème stationnaire :

$$-\rho_f \Lambda(t) \zeta \frac{\partial z}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial z}{\partial x} \right) = 0 \quad Z = z(x, \Lambda(t))$$

et chacun des scalaires réactifs  $Y$  comme une solution du problème :

$$-\frac{2 \Lambda(t)}{\pi \exp(2 \alpha^2)} \frac{\partial^2 \phi_Y}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_Y \quad Y = \phi_Y(Z, \Lambda(t))$$

- (2) Le régime semi-instationnaire (*Semi-Unsteady Laminar Flamelet Assumption* SULFA en anglais) où la diffusion n'est plus considérée comme stationnaire et nécessite du temps pour s'adapter à la variation du champ d'écoulement. L'équation sur scalaire passif instationnaire :

$$\rho \frac{\partial z_{\text{sulfa}}}{\partial t} + \rho v(x, \Lambda(t)) \frac{\partial z_{\text{sulfa}}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial z_{\text{sulfa}}}{\partial x} \right) = 0$$

produit une solution  $Z = z_{\text{sulfa}}(x, \Lambda(t))$  qui dépend du temps tandis que la chimie n'est pas encore assez rapide et la zone de réaction s'adapte d'une façon quasi-instantanée au transport convectif-diffusif. L'idée consiste donc à trouver une intensité équivalente  $\Lambda_{\text{sulfa}}(t)$  qui ramène  $z_{\text{sulfa}}(x, \Lambda(t))$  à la forme  $z(x, \Lambda_{\text{sulfa}}(t))$ . Les scalaires réactifs dans ce cas sont définis à partir de  $\phi_Y(Z, \Lambda_{\text{sulfa}}(t))$ .

- (3) Le régime instationnaire complet (*Full-Unsteady Laminar Flamelet Assumption* FULFA en anglais). Dans ce cas, ni la réaction ni la diffusion ne peuvent être considérées comme stationnaires. Les auteurs ont montré que cet obstacle peut être contourné si l'on définit un second taux équivalent  $\Lambda_{\text{fulfa}}(t)$ . Le scalaire passif est alors défini comme dans la SULFA à partir de  $Z = z(x, \Lambda_{\text{sulfa}}(t))$  et on cherche  $\Lambda_{\text{fulfa}}(t)$  tel que  $Y = \phi_Y(Z, \Lambda_{\text{fulfa}}(t))$  et  $Y = \phi_{Y,\text{fulfa}}(Z, \Lambda_{\text{sulfa}}(t))$  soient satisfaites ensemble où  $\phi_{Y,\text{fulfa}}$  est la solution de l'équation suivante pour les flammelles instationnaires :

$$\rho \frac{\partial \phi_{Y,\text{fulfa}}}{\partial t} - \frac{2 \Lambda_{\text{sulfa}}(t)}{\pi \exp(2 \alpha^2)} \frac{\partial^2 \phi_{Y,\text{fulfa}}}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_Y.$$

Comme il est mentionné dans la section 1.3.3.1, dans des exemples des écoulements avec des variations brusques et intermittentes, les effets instationnaires les plus négligés par SLFM sont le déphasage et les amplitudes surestimées. Les auteurs confirment ceci en montrant que l'hypothèse quasi-stationnaire est seulement valable pour les champs d'écoulement à de basses fréquences et petites amplitudes. D'après les résultats de calcul pour les champs de hautes fréquences [16], le modèle semi-instationnaire a souvent tendance à surestimer l'amplitude de  $\Lambda_{\text{sulfa}}$ . La nécessité d'utiliser le modèle instationnaire complet est alors dictée par le critère de l'extinction de la flamme formulé en terme du taux caractéristique de l'extinction  $\Lambda_q \approx 2500s^{-1}$  et du temps caractéristique de la chimie d'une flamme

stable  $\tau_{ch} \approx 1.6 \times 10^{-2}$  s. Dans le cadre de la SULFA, cela peut résulter en des épisodes d'extinction-allumage tout-à-fait artificiels. Par contre le critère de l'extinction basé sur FULFA permet de contrôler de telles erreurs même dans les cas de champs de hautes fréquences. En résumé, ce modèle offre les avantages suivants :

- il est développé et validé spécifiquement pour les problèmes instationnaires avec des variations intenses de la dissipation turbulente ;
- il fournit des critères d'extinction aussi précis que dans le calcul direct.

Son point faible principal est qu'il est essentiellement unidimensionnel.

#### 1.3.4.2. *Flammelettes lagrangiennes*

Pour le cas du champ d'écoulement parabolique dans un tuyau, il a été proposé dans [17, 18] un modèle de flammelettes lagrangiennes qui consiste à incorporer l'échelle du temps lagrangien (1.3.13) dans la formulation instationnaire (1.3.8) de l'équation de flammelette. Si l'on revient à l'équation (1.3.8) le temps  $\tau$  qui intervient dans la formulation est le temps défini dans un nouveau système de coordonnées, ce qui signifie que la dérivée  $\partial/\partial\tau$  doit être évaluée pour une valeur moyenne de la fraction du mélange. Tout le modèle se réécrit alors dans des coordonnées de type lagrangien dans lesquelles tout le système se déplace avec une vitesse imposée par un point de surface stœchiométrique. Pour retourner à la forme eulérienne de l'équation, on utilise le développement par rapport à la variable  $\tau$  associée au temps eulérien :

$$\frac{\partial}{\partial\tau} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x_Z}{\partial t} \cdot \nabla, \quad (1.3.18)$$

où  $\partial x_Z/\partial t$  est une vitesse d'un point de l'iso-surface de  $Z$  définie comme étant :

$$\frac{\partial x_Z}{\partial t} = v - \frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla Z)}{|\nabla Z|^2} \nabla Z, \quad (1.3.19)$$

Le cas d'écoulements plus généraux est souvent traité à l'aide du concept des particules eulériennes [9]. Dans ce modèle, les particules de fluide, qui représentent les flammelettes, sont introduites dans l'écoulement turbulent et guidées par les équations de transport instationnaires. La probabilité de trouver la particule dans



un endroit précis permet de reconstituer la fraction massique des composants chimiques par la procédure de l'intégration sur l'ensemble des particules de fluide.

L'inconvénient assez évident de ce modèle est dans le fait que ce temps rapide est utilisé globalement sur l'ensemble du domaine et que le taux dans (1.3.13) est souvent filtré sur une grande échelle spatiale. Il a cependant été démontré (par exemple dans [19]) que le taux de dissipation scalaire filtré sur une petite échelle contient de grandes fluctuations qui peuvent avoir un impact important sur les structures de grandes échelles. Un exemple pratique d'une telle influence est étudiée dans [19]. Il est montré que ces fluctuations amènent à l'extinction locale de la flamme, bien que le taux de dissipation moyenne soit au-dessous de la limite d'extinction. Dans l'approche de Peters [5], le comportement aux petites échelles est réécrit en termes de la fraction de mélange qui couvre l'intervalle dans le voisinage de la surface de la flamme. La deuxième coordonnée est introduite pour décrire des variations sur de grandes échelles et remplace la coordonnée spatiale.

#### 1.4. RÉSUMÉ ET ORGANISATION DE LA THÈSE

La présentation dans ce Chapitre avait pour objectif de résumer les travaux portant sur le modèle de flammelette et en particulier sa forme instationnaire. On a vu dans cette partie la formulation mathématique basée sur les équations d'advection-réaction-diffusion, les études asymptotiques de ces équations, les hypothèses du modèle de flammelettes stationnaires, de simples extensions de ce modèle au cas instationnaires et finalement la description de cas test. Les effets instationnaires importants qui influencent de façon significative la réponse du modèle dans la simulation numérique des flammes turbulentes sont souvent associés au caractère intermittent du champ d'écoulement multidimensionnel.

Les approches développées pour les cas stationnaires multidimensionnels [2] et les cas instationnaires unidimensionnels [16] ont démontré l'existence de régimes asymptotiques correspondant à différentes échelles liées à la turbulence et à la cinétique chimique du problème. Pour les cas stationnaires turbulents en

particulier, les auteurs ont identifié les régimes de validité du modèle de flammelettes laminaires en fonction des nombres sans dimension  $Pe-Da$ . Ce contexte peut nous aider à formuler une série d'approximations dont le point de départ sont ces régimes basés sur la solution stationnaire. D'autre part, les approches instationnaires de [16] peuvent être généralisées aux cas de l'écoulement avec des champs turbulents intermittents et avec un caractère spatial complexe.

Dans cette thèse, on s'intéresse aux extensions multidimensionnelles et instationnaires du modèle de flammelettes. La procédure de validation que l'on développe à cet effet est robuste et, bien que fondée sur les résultats du calcul direct, a des coûts modestes en calcul numérique. Elle permet de :

- (1) valider clairement et sans ambiguïté l'extension multidimensionnelle de FULFA ;
- (2) identifier le critère de l'applicabilité des différents modèles de flammelettes dans l'espace des paramètres sans dimension  $Pe-Da$ .

#### 1.4.1. Synthèse

La présente thèse est organisée de façon suivante. On discutera d'abord des caractéristiques moyennes du scalaire passif, de la diffusion et de la dissipation conditionnelles qui serviront pour décrire la zone du mélange advectif-diffusif pour des écoulements à caractère intermittent. Ces études théoriques s'avèrent importantes pour le modèle de flammelettes car elles permettent de compléter la fermeture fondée sur l'approche de la PDF du scalaire passif et de ses statistiques conditionnelles. Les résultats sont présentés dans le Chapitre 2 sous la forme d'un article intitulé "Elementary models with intermittency for passive scalars with a mean gradient - conditional statistics".

La partie suivante contient une étude de la performance du modèle de flammelette dans le cadre des écoulements instationnaires, turbulents avec une stratégie de validation basée sur sa comparaison avec les résultats de calculs directs et avec l'analyse asymptotique. Cette validation est réalisée pour un ensemble très grand des valeurs de paramètres non-dimensionnels physiques et vise particulièrement

des écoulements intermittents caractéristiques de la turbulence. Ce travail est décrit dans le Chapitre 3 sous la forme d'un article intitulé "An idealized model to validate unsteady flamelet approaches".

La solution des équations d'advection-réaction-diffusion qui apparaissent dans la simulation des flammes de diffusion exige le développement d'outils d'intégration adaptative à la fois dans le temps et dans l'espace pour des problèmes à plusieurs dimensions spatiales. La stratégie que l'on propose dans le Chapitre 4 intitulé "A grid-free space-time adaptive method for advection-reaction-diffusion problems" est basée sur le couplage de deux méthodes dont la combinaison des forces permet d'envisager une généralisation des simulations du Chapitre 3 à une plus grande classe de flots advectifs.

## DÉCLARATION DES COAUTEURS D'UN ARTICLE

### Identification l'étudiant et du programme:

Oleg Volkov

Ph.D. en Mathématiques Appliquées

### Description de l'article:

Auteurs :

Oleg Volkov

Anne Bourlioux

Andrew J. Majda

Titre :

Conditional statistics for a passive scalar with a mean gradient and intermittency

Journal :

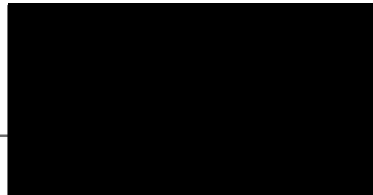
Physics of Fluids

### Déclaration de tous les coauteurs autres que l'étudiant:

À titre de coauteur de l'article identifié ci-dessus, je suis d'accord pour que Oleg Volkov inclue cet article dans sa thèse de doctorat qui a pour titre "Validation des modèles de flammelettes instationnaires en combustion turbulente non-prémélangée"

Anne Bourlioux

Coauteur



3/7/2005

Date

Andrew J. Majda

Coauteur

Signature

Date

## Chapitre 2

---

# STATISTIQUES CONDITIONNELLES D'UN SCALAIRE PASSIF AVEC GRADIENT MOYEN ET INTERMITTENCE

### RÉSUMÉ

Ce chapitre présente une étude de la dissipation et de la diffusion conditionnelles d'un scalaire passif avec un gradient moyen. Ces résultats sont obtenus pour un champ d'advection du type cisaillement avec amplitude aléatoire et une composante transversale périodique dans le temps. L'intermittence est observée au-dessus d'une certaine valeur du nombre de Péclet ( $Pe$ ) et se manifeste par la forme non-gaussienne de la fonction de la densité de probabilité (PDF). Conséquemment, le profil de la dissipation conditionnelle subit une transition d'une forme quadratique, observée pour les petits  $Pe$  (cas des PDF de type gaussien), jusqu'à une forme plus complexe pour les grands  $Pe$ . La diffusion conditionnelle elle-aussi subit le changement du comportement : initialement linéaire elle devient non-linéaire pour les grands  $Pe$ , du moins pour les cas où plusieurs modes spatiaux sont considérés. L'analyse présentée dans cet article apporte un éclairage nouveau sur des phénomènes déjà observés lors d'expériences physiques ou numériques avec des modèles en général plus complexes. Dans ce travail, les statistiques sont obtenues par calcul direct de quadratures, de sorte que les résultats ne sont aucunement affectés par les erreurs d'échantillonnage, en particulier pour

les cas des PDF non-gaussiennes. Cette technique permet d'étudier systématiquement les modèles de fermeture fondés sur les approximations polynomiales des statistiques conditionnelles, ainsi que d'identifier les erreurs typiques liées au sous-échantillonnage pour les grands écarts par rapport à la moyenne.

## Conditional statistics for a passive scalar with a mean gradient and intermittency

### Abstract

The conditional dissipation and diffusion for a passive scalar with an imposed mean gradient are studied here. The results are obtained for an elementary model consisting of a random shear flow with a simple time-periodic transverse sweep. As the Péclet number is increased, scalar intermittency is observed: the scalar probability density function departs strongly from a Gaussian law. As a result, the conditional dissipation undergoes a transition from a quadratic behavior for the near-Gaussian probability distribution case at low Péclet number to a more complex shape at large Péclet. The conditional diffusion also undergoes a transition, this time from a linear to a nonlinear dependence with sufficient intermittency, for cases with significant multiple spatial modes effects. The present analysis sheds some light on similar behaviors observed recently in numerical simulations of more complex models. The statistics in the present study are obtained by exact processing of one-dimensional quadrature results so that all sampling errors are eliminated, including in the tails of the distribution. This allows for a quantification of typical sampling errors when the conditional statistics are processed numerically.

## 2.1. INTRODUCTION

Intermittency is a key feature of turbulent flows and correctly taking it into account in turbulence models is of critical importance, albeit quite challenging. This is true not only for velocity fluctuations, but also for scalar variables such as the temperature, as demonstrated by the classical Chicago experiments [2, 7, 6, 10] on Rayleigh-Benard convection, where non-Gaussian probability density functions (PDFs) were reported for the temperature fluctuations. Understanding the fundamental mechanisms that can potentially lead to such behavior is a question of great theoretical interest and has motivated a number of studies with a passive scalar advected by flows of various complexity [9, 12, 4, 16, 5, 11, 14, 8].

A recurring issue addressed in several of those studies is to analyze and predict the behavior of the conditional statistics of the passive scalar fluctuations, in particular the conditional dissipation and the conditional diffusion. This is relevant both on the theoretical level as well as in the context of developing practical turbulence models for various applications. For example, on the theoretical level, an exact formula relating the shape of the PDF with the conditional dissipation and diffusion has been derived [15, 3]. Understanding theoretically the behavior of those conditional statistics would therefore be one venue to approach the study of the scalar PDF, in particular its tails, for the non-trivial non-Gaussian case [9, 3, 8]. For instance, it has been suggested that, under some conditions, the conditional diffusion and dissipation could be adequately fitted by polynomials (linear and quadratic respectively, at least in the simplest cases) [4], as a result of which one could formulate a closure strategy for the scalar PDF in terms of a very limited number of parameters as well as predict the general behavior of the PDF's tails. In the practical modeling context, flamelet models in turbulent combustion are one example where closure for the PDF and conditional statistics can play an important role. In such models (see for example [13] for an introduction), the asymptotic behavior of a thin flame is capitalized upon to short-cut the very challenging issue of the direct turbulent closure for the non-linear reactive term in the scalar equation. Instead, one expresses the reactive scalar in terms of an appropriate passive scalar and its derivatives, so that one



obtains the large scale behavior for the reactive scalar by averaging where the weight is given by the joint PDF of the passive scalar fluctuations and its conditional statistics such as the dissipation. Because of the nonlinear nature of such application, it is critical to capture adequately intermittency and tail behavior as nonlinearity can magnify tremendously their impact on the global behavior of the solution.

Unfortunately, studying the conditional statistics by processing discrete databases, either experimental or numerical ones, can be an extremely challenging task as very limited data are statistically available in the tails of the PDF. Typical results are very noisy and make it quite challenging to extract definite trends for theoretical and modelling purposes.

In this paper, an idealized model [1] that leads to passive scalar intermittency is revisited, with the objective of analyzing the behavior of the passive scalar conditional statistics. The model is surprisingly simple: the ingredients for intermittency are the presence of a large scale gradient imposed on the scalar and a very simple advection flow with a steady or unsteady Gaussian random shear flow in one direction and a time-dependant, uniform in space, transverse sweep. Despite the simplicity of the model, PDF intermittency is observed; a summary of the key results of the PDF analysis is found in Section 2.2. The solution for the passive scalar is obtained via Duhamel's formula. Practically, it involves solving numerically an ordinary differential equation and processing exactly that numerical solution. Explicit processing formulas for the conditional statistics are developed in Section 2.3. The case of a single, steady mode is first analyzed in Section 2.4, where exact, numerical, and asymptotic results are presented. For that case, the conditional diffusion is trivially linear, as expected in the non-intermittent, Gaussian case. However, the conditional dissipation differs strongly from its Gaussian PDF case counterpart: the link with intermittency is identified explicitly. In Section 2.5, the more practically relevant case of a multi-mode, eventually unsteady, Gaussian random shear is studied. In that case, both the conditional dissipation and the conditional diffusion depart from what is observed in the cases of low Péclet (Gaussian PDF); in particular, the nonlinearity of the

conditional diffusion is explained. Many of the observations in the idealized model studied here resemble qualitatively those in much more complex models [4, 11], but the conclusions, in particular, in the tails, are somewhat different. In Section 2.6, a study of sampling errors in the tails is performed, which can to some extent explain those differences in interpretation.

## 2.2. IDEALIZED MODEL

### 2.2.1. Basic set-up

In this section, we explain the set-up for the idealized model and summarize the key results from [1] regarding the scalar fluctuations PDF. The basic set-up consists of the advection and diffusion of a passive scalar according to the following equation, in nondimensional form:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \text{Pe } \mathbf{v} \cdot \nabla Z = \Delta Z \quad (2.2.1)$$

The model uses the special incompressible two-dimensional velocity field consisting of a time-dependent shear flow with a transverse cross sweep, i.e.

$$\mathbf{v} = (v(y, t), w(t)) \quad (2.2.2)$$

where  $v(y, t)$  is deterministic or random and  $w(t) = \beta \sin(\omega t)$  is a periodic function of time of period  $\tau_P = 2\pi/\omega$ . We seek the statistically stationary solution of Equation (2.2.1), (2.2.2) where a mean gradient is imposed along the  $x$ -axis, i.e.

$$Z = \frac{x}{L_g} + Z'(x, y, t) \quad (2.2.3)$$

The average of  $Z'$  is assumed to be zero. We assume also that  $v(y, t)$  has the following expansion in spatial modes with wave numbers  $K_J \neq 0$

$$\begin{aligned} v(y, t) &= \sum_J \widehat{v}_J e^{iK_J y} \\ \overline{\widehat{v}_J(t)} &= \widehat{v}_{-J}(t) \quad \text{reality condition} \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

where at this point, the amplitudes  $\widehat{v}_J(t)$  are considered to be statistically stationary complex Gaussian random fields in time in the most general case [17]. Seek

the statistically stationary solution  $Z'(y, t)$  through the related expansion:

$$Z'(y, t) = \frac{\text{Pe}}{L_g} \sum_J \widehat{Z}'_J e^{iK_J y} \quad \text{with} \quad \overline{\widehat{Z}'_J(t)} = \widehat{Z}'_{-J} \quad (2.2.5)$$

where, by substitution in Equation (2.2.1),  $\widehat{Z}'_J$  satisfies the following linear inhomogeneous ODE's:

$$\frac{d\widehat{Z}'_J}{dt} + (K_J^2 + i K_J \text{Pe} w(t)) \widehat{Z}'_J = -\widehat{v}_J. \quad (2.2.6)$$

The solution for  $\widehat{Z}'_J$  can be obtained via Duhamel's formula to yield the following explicit formula for the stationary solution to (2.2.1), (2.2.6) :

$$Z'(y, t) = \frac{\text{Pe}}{L_g} \sum_J \widehat{Z}'_J(t) e^{iK_J y} \quad (2.2.7)$$

with

$$\widehat{Z}'_J(t) = - \int_{-\infty}^t S_{K_J}(t, t') \widehat{v}_J(t') dt'$$

where  $S_{K_J}$  is the explicit solution operator:

$$S_{K_J}(t, t') = e^{-K_J^2(t-t')} \exp \left( -i K_J \text{Pe} \int_{t'}^t w(s) ds \right). \quad (2.2.8)$$

For a more general case for the velocity field, we will now assume that the random Fourier amplitudes in  $\widehat{v}_J(t)$  have the form [17]

$$\begin{aligned} \widehat{v}_J(t) &= \frac{1}{2}(\eta_J(t) - i \xi_J(t)) & J > 0 \\ \widehat{v}_{-J}(t) &= \frac{1}{2}(\eta_J(t) + i \xi_J(t)) \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

where  $\eta_J(t)$  and  $\xi_J(t)$  are real Gaussian random fields which are independent from each other and also independent for  $J \neq J'$  with covariance  $R_J(|t|)$  given by

$$\langle \eta_J(t + t_0) \eta_J(t_0) \rangle_v = \langle \xi_J(t + t_0) \xi_J(t_0) \rangle_v = R_J(|t|) \quad (2.2.10)$$

We assume that the correlation time  $\tau_J$  is of the form:

$$R_J(|t|) = E_J e^{-\frac{|t|}{\tau_J}} \quad (2.2.11)$$

with  $R_J(|t|)$  the covariance introduced in (2.2.10) and  $E_J$  the shear energy at mode  $K_J$ . In that case, Duhamel's formula (2.2.7) generalizes to

$$\sigma_J^2(t) = \frac{\text{Pe}^2}{L_g^2} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t S_{K-J}(t, t') S_{K_J}(t, \bar{t}) R_J(|t' - \bar{t}|) dt' d\bar{t} \quad (2.2.12)$$

where  $\sigma_J^2(t) = \langle |Z'_J(t)|^2 \rangle_v$ .

### 2.2.2. Scalar PDF behavior

Based on the solution formulas (2.2.7), one can now obtain an explicit processing procedure to extract the scalar fluctuations PDF. First, one introduces the partial PDF,  $p_{Z'(t)}$ , which is the PDF at a fixed time, but taking into account the distribution for the velocity field. As a result of the analysis above, it is clear that the PDF is also a Gaussian distribution, independent of  $y$  and given explicitly by the formula

$$p_{Z'(t)}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \exp\left(\frac{-\lambda^2}{2\sigma^2(t)}\right) = \frac{1}{\sigma(t)} G\left(\frac{\lambda}{\sigma(t)}\right) \quad (2.2.13)$$

where  $\sigma^2(t) = \langle |Z'(t)|^2 \rangle_v$

with  $G(\lambda) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\lambda^2/2)$  the normalized Gaussian. The partial scalar variance  $\sigma^2(t)$  is an explicit periodic function of time which is readily calculated through the formulas in (2.2.7) and (2.2.12). Once the partial PDF is known, the full PDF is simply obtained by averaging over time:

$$p_{Z'} = \frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} p_{Z'(t)} dt$$

One should remark that, even though the partial PDF is Gaussian in the present model, this is not necessarily the case for the full PDF; indeed, it was shown in [1], that as  $\text{Pe}$  is increased, one observes a transition from a nearly Gaussian PDF (if  $\sigma^2(t)$  varies very little within the period) to a distribution with significant fat tails (at large  $\text{Pe}$ , with intermittent bursts of activity in the solution for  $\sigma^2(t)$ ).

## 2.3. EXPLICIT FORMULAS TO PROCESS THE CONDITIONAL STATISTICS

### 2.3.1. Definitions

From now on, for simplicity, we drop the prime and write  $Z$  instead of  $Z'$ . According to the theory just summarized, the solution for the scalar fluctuation is given at any time by:

$$Z(y, t) = \sum_{J=1}^N A_J(t) \sin K_J y + B_J(t) \cos K_J y$$

where  $A_J$ ,  $B_J$  are Gaussian, with mean zero, and variance  $\sigma_J^2(t)$  obtained as explained in the previous section.

As a consequence, the partial PDF of  $Z(y, t)$  is also Gaussian, independent of  $y$ , with mean zero, and variance  $\sigma_J^2(t)$ . With that notation, the derivative of  $Z$  with respect to  $y$  is given by:

$$Z_y(y, t) = \sum_{J=1}^N K_J (A_J(t) \cos K_J y - B_J(t) \sin K_J y)$$

with the direct consequence that the partial PDF of  $Z_y(y, t)$  at a given fixed time  $t$  is also Gaussian, with mean zero, independent of  $y$ , and with variance  $K_J^2 \sigma_J^2(t)$ .

The second derivative of  $Z$  with respect to  $y$  is given by:

$$Z_{yy}(y, t) = - \sum_{J=1}^N K_J^2 (A_J(t) \sin K_J y + B_J(t) \cos K_J y)$$

with the consequence that the partial PDF of  $Z_{yy}$  is also Gaussian, with mean zero, independent of  $y$ , and with variance  $K_J^4 \sigma_J^2(t)$ .

The conditional dissipation  $G(Z)$  and the conditional diffusion  $D(Z)$  are defined as:

- conditional dissipation  $G(Z) = \langle Z_y^2 | Z \rangle_{t,v}$
- conditional diffusion  $D(Z) = \langle Z_{yy} | Z \rangle_{t,v}$

The conditional average here is with respect to both the velocity fluctuations and the time. As in the case of the processing for the PDF of the passive scalar fluctuations, it is much more convenient to first compute the partial conditional dissipation and diffusion, defined as:

- partial (fixed time) conditional dissipation  $G(Z, t) = \langle Z_y^2 | Z \rangle_v$
- partial (fixed time) conditional diffusion  $D(Z, t) = \langle Z_{yy} | Z \rangle_v$

i.e. after averaging solely over the velocity statistics, but not over time. Then the global conditional dissipation  $G(Z)$  and diffusion  $D(Z)$  are obtained very easily according to the appropriate time-weighted average:

$$G(Z) = \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} G(Z, t) \text{pdf}(Z(t)) dt}{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} \text{pdf}(Z(t)) dt} = \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} G(Z, t) \text{pdf}(Z(t)) dt}{\text{pdf}(Z)} \quad (2.3.1)$$

$$D(Z) = \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} D(Z, t) \text{pdf}(Z(t)) dt}{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} \text{pdf}(Z(t)) dt} = \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} D(Z, t) \text{pdf}(Z(t)) dt}{\text{pdf}(Z)} \quad (2.3.2)$$

Note that the weight  $\text{pdf}(Z(t))$  needed in those conditional averaging will play an important role. For instance, we will see that  $G(Z, t)$ , the conditional dissipation at a fixed time, is independent of  $Z$ , but not  $G(Z)$ , as a consequence of the weighted time average. Similarly, this weighted time average can cause the conditional diffusion to depart from linearity, at least in the multi-mode case.

### 2.3.2. Basic formulas for the partial conditional statistics

We consider two general linear combinations  $X_1$  and  $X_2$  of Gaussian distributions  $Y$ , where  $X_1 = a_1' Y$  and  $X_2 = a_2' Y$ . The formulas for the statistics of  $X_1$  conditioned on  $X_2$  are given next. Let  $Y = [Y_1, Y_2, \dots, Y_n]' = N(0, \Sigma)$  be an  $n$  by 1 vector with Gaussian distribution, with mean zero and variance matrix  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2)$ .

The two linear combinations  $X_1$  and  $X_2$  have the respective weight distributions:  $a_1 = [a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}]'$ ,  $a_2 = [a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}]'$  such that  $X = [X_1, X_2] = A' Y$  with  $A = [a_1, a_2]$  a matrix of size  $n \times 2$ .

A first elementary statistical result is that the distribution  $L(X)$  is normal, with mean zero and variance  $A' \Sigma A$ :

$$L(X) = N(0, A' \Sigma A)$$

The explicit expression for the distribution of  $X_1$ , conditional on  $X_2$  is given by:

$$L(X_1|X_2) = N\left(\frac{a'_1 \Sigma a'_2}{a'_2 \Sigma a'_2} X_2, \sigma_{11,2}^2\right)$$

where

$$\sigma_{11,2}^2 = a'_1 \Sigma a'_1 - \frac{(a'_1 \Sigma a'_2)^2}{a'_2 \Sigma a_2} \quad (2.3.3)$$

This result will be useful to compute the conditional diffusion. One also knows the following distribution:

$$L(X_1^2|X_2) = \sigma_{11,2}^2 \chi_{11}^2\left(\frac{a'_1 \Sigma a'_2}{a'_2 \Sigma a_2} X_2\right) \quad (2.3.4)$$

In particular, if  $a'_1 \Sigma a'_2 = 0$ , then the last distribution is the centered  $\chi^2$  and  $X_1$  and  $X_2$  are independent. We will now apply these general formulas as well as those in (2.3.1) and (2.3.2) to obtain explicit formula for the conditional dissipation and conditional diffusion for the model here.

## 2.4. CONDITIONAL STATISTICS FOR THE SINGLE MODE CASE

### 2.4.1. Explicit formulas

We first apply the preceding formulas to the case of a single mode. In that case,

$$Z = A_J \sin K_J y + B_J \cos K_J y$$

$$Z_y = K_J (A_J \cos K_J y - B_J \sin K_J y)$$

$$Z_{yy} = -K_J^2 (A_J \sin K_J y + B_J \cos K_J y) = -K_J^2 Z$$

By simple inspection, it is clear that the conditional diffusion is trivial:  $D(Z, t) = D(Z) = -K_J^2 Z$ . It is always linear, unlike what will happen in the multi-mode case, as discussed in the next section.

To obtain the partial conditional dissipation, we use the formula in (2.3.4) with  $a_1 = [K_J \cos K_J y, -K_J \sin K_J y]'$ ,  $a_2 = [\sin K_J y, \cos K_J y]$ , and  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_J^2(t), \sigma_J^2(t))$ . Plugging into the formula, one finds that the partial conditional dissipation is independent of  $Z$ :

$$L(Z_y^2(t)|Z, t) = K_J^2 \sigma_J^2(t) \chi_1^2(0)$$

$$G(Z, t) = \langle L(Z_y^2(t)|Z, t) \rangle_{y'} = K_J^2 \sigma_J^2(t) \langle \chi_1^2(0) \rangle = K_J^2 \sigma_J^2(t)$$

so that

$$G(Z) = K_J^2 \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} \sigma_J^2(t) \text{pdf}(Z; 0, \sigma_J(t)) dt}{\text{pdf}(Z)} \quad (2.4.1)$$

One remarks that, because of the weighted averaging, the conditional dissipation is now a function of  $Z$ , even though the partial conditional dissipation at the fixed time  $t$  was only a function of time, not of  $Z$ . Also, direct inspection of the formula gives an upperbound for the conditional dissipation:

$$G(Z) \leq K_J^2 \max_t(\sigma_J^2(t)).$$

#### 2.4.2. Asymptotic formula in the large Pe self-similar regime

We consider here the case of a stationary single mode Gaussian shear flow. At large Pe, stationary phase asymptotics gives the following expression for  $\sigma_J^2(t)$  [1]:

$$\sigma_J^2(t) = \sigma_{J,\max}^2 e^{-2K_J^2 t} \quad \text{with} \quad \sigma_{J,\max}^2 = \frac{\text{Pe} \tau_P}{K_J L_g^2 \beta} \quad (2.4.2)$$

for  $0 \leq t \leq \tau_P/2$  (periodic continuation for other  $t$ ), and  $K$  a positive constant. The small  $Z$  behavior (inner core around  $Z = 0$ ) is obtained by substituting this expression for  $\sigma_J^2(t)$  in (2.4.1) and expanding for small  $Z$ :

$$G(Z) = \sigma_{J,\min} \sigma_{J,\max} + (1/\sigma_{J,\min}^2 - 1/\sigma_{J,\max}^2)^2 Z^2 + \dots$$

This formula emphasizes the role played by intermittency, which corresponds to cases where the ratio of  $\sigma_{J,\max}^2$  and  $\sigma_{J,\min}^2$  is large. At low Pe, this ratio is very small and the conditional dissipation is nearly constant. As the ratio increases, the quadratic term becomes more important, with the curvature at the origin decreasing as the ratio of the extreme  $\sigma^2$  increases. This could explain the type of behavior observed in [5, 11] for example. This asymptotic prediction will be confirmed next by the numerical results.

For large  $Z$  values, one can show that the asymptotic upperbound is actually achieved, so that :

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} G(Z) = K_J^2 \sigma_{J,\max}^2$$



### 2.4.3. Numerical results

The numerical results are obtained by exact processing of  $\sigma_J^2(t)$  according to (2.4.1), with  $K_J = 2\pi$ . The time evolution of  $\sigma_J^2(t)$  could be obtained via Duhamel's formula (2.2.7); for practical purposes, it is however simpler to directly integrate numerically the ordinary differential equations to compute the Fourier modes amplitudes of the solution. The numerical integration is performed with Matlab ode15s, an adaptive high order integrator that can handle stiff problems. This numerical strategy exploits the special structure of the solution to reduce the numerical complexity by several orders of magnitude compared to the direct numerical simulation of the unsteady two-space dimension PDE for the passive scalar. In particular, the time-integration of the Fourier modes amplitudes can be made arbitrarily accurate at reasonable cost. Moreover, because of the explicit processing for the conditional statistics, there is no sampling error, which usually complicates efforts to understand the behavior of the conditional statistics in the tail of the PDF, where events are too rare to generate sufficient sampled data for a reliable computation of the conditional statistics.

The results confirm the theoretical predictions: quadratic inner core around  $Z = 0$  and saturation at a limit value for large  $Z$ . Figure 2.1 shows the evolution of the conditional dissipation for a stationary Gaussian shear, at  $Pe = 1000$ , when the mode frequency  $K_J$  is changed according to  $K_J = 2J\pi$ . According to [1], increasing  $K_J$  will eventually lead to a more Gaussian scalar PDF. According to the analysis above, this means that as  $K_J$  increases, the conditional dissipation should display less variation between its largest and smallest values (respectively for  $Z$  large and near zero). At the same time, the inner quadratic core should become more visible. This is confirmed by the numerical results.

Figure 2.2 shows the behavior of the conditional dissipation for an unsteady single mode Gaussian shear. It has been shown in [1] that decreasing the correlation time  $\tau_J$  leads to a more Gaussian scalar PDF (in the limit of zero correlation time, the resulting PDF is exactly Gaussian). According to the analysis above, this means that as  $\tau_J \rightarrow 0$ , the conditional dissipation should display less variation between its largest and smallest values (respectively for  $Z$  large and near zero).

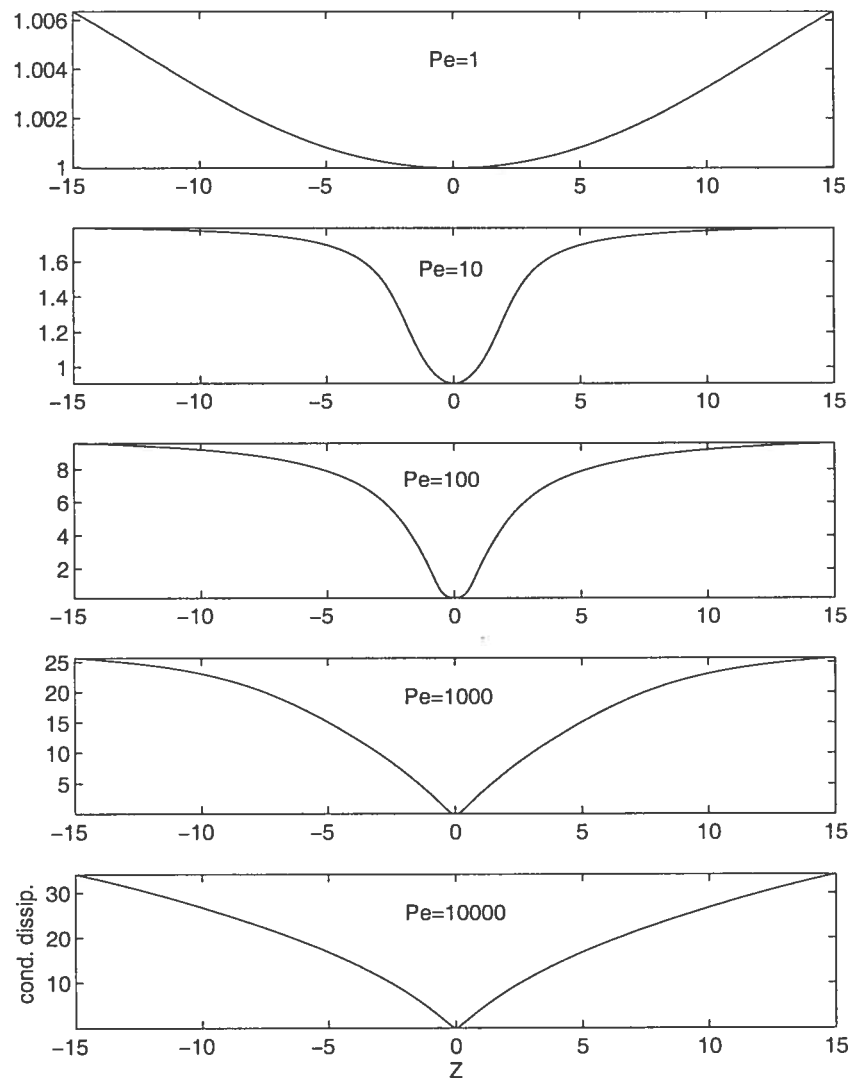


Fig. 2.1: Conditional dissipation, single mode case  $K_J = 2\pi$

At the same time, the inner quadratic core should become more visible. This is precisely what is observed in the numerical results, where  $K_J = 2\pi$  and  $\tau_J$  is progressively decreased ( $1/\tau_J$  increased).

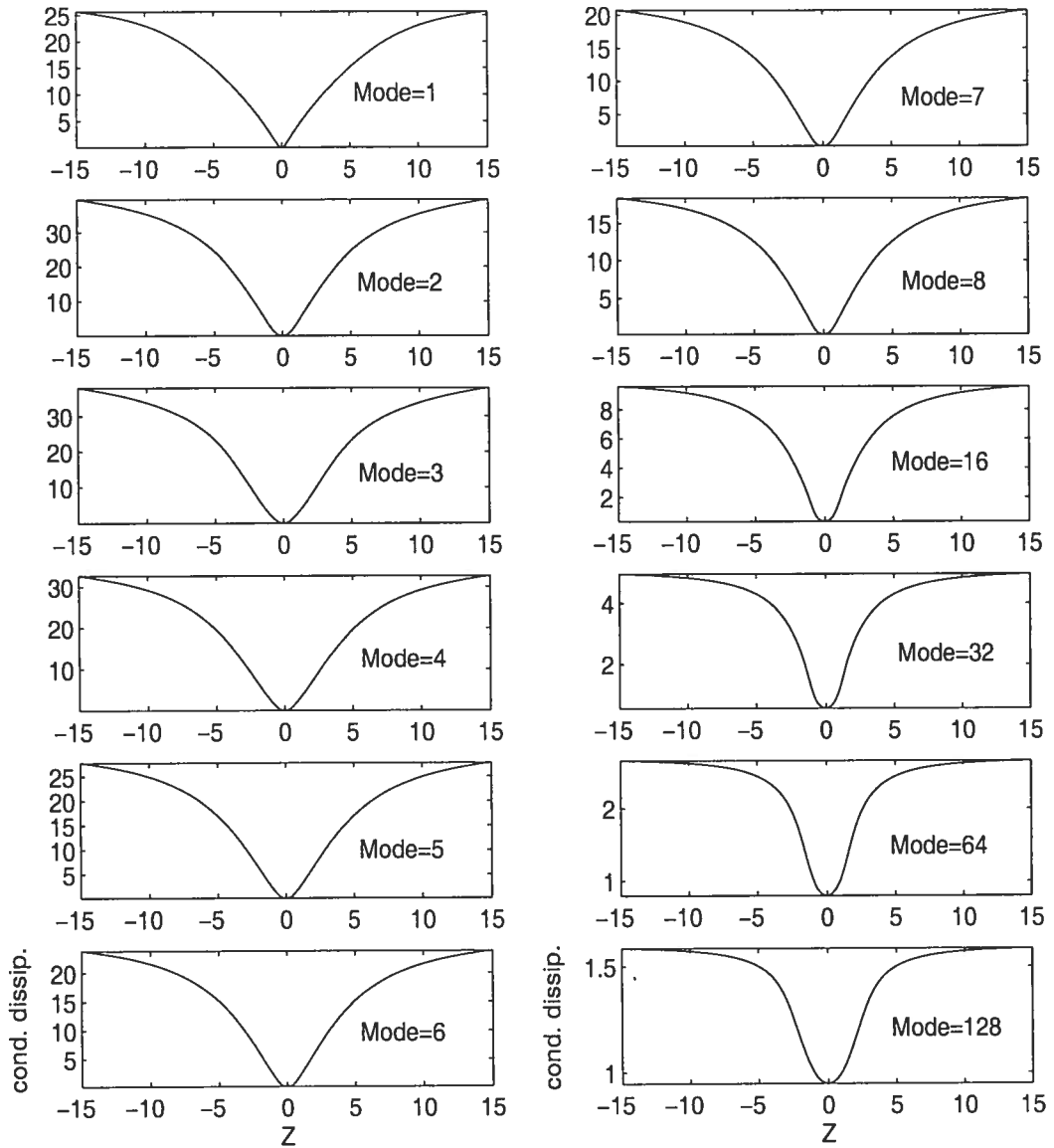


Fig. 2.2: Conditional dissipation corresponding to mode numbers  $J$  with  $Pe = 1000$ ,  $K_J = 2J\pi$

## 2.5. CONDITIONAL STATISTICS - MULTI-MODE CASE

### 2.5.1. Explicit formulas

Similarly to the single mode case, the partial conditional dissipation at a fixed time  $t$  is given by:

$$G(Z, t) = \sum_J K_J^2 \sigma_J^2(t)$$

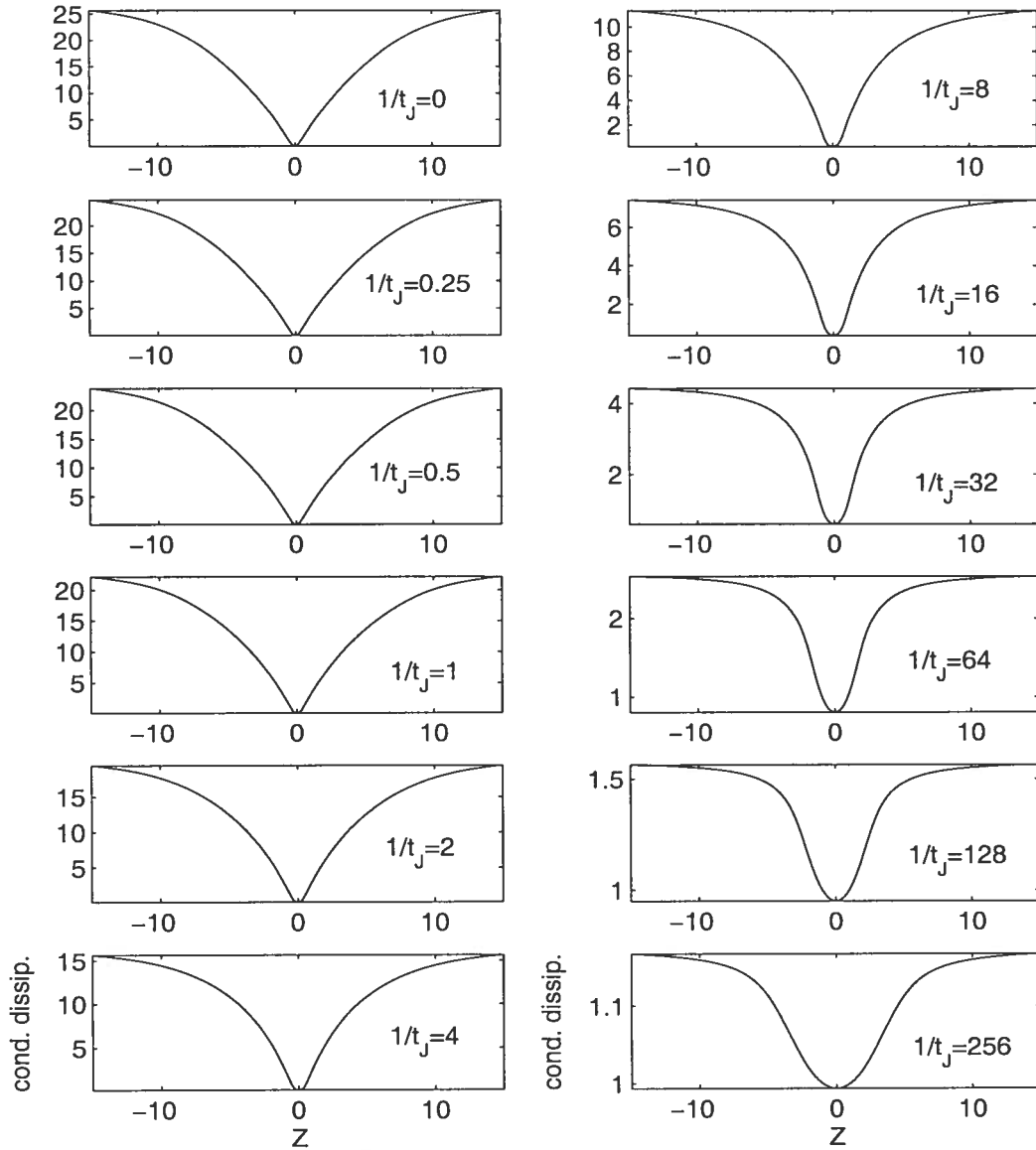


Fig. 2.3: Conditional dissipation corresponding to various correlation times  $\tau_J$ ,  $Pe=1000$ ,  $K_J = 2\pi$

and the conditional dissipation is obtained by properly averaging with respect to time according to (2.3.1):

$$G(Z) = \sum_J \frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} K_J^2 \sigma_J^2(t) \text{pdf}(Z; 0, \sum \sigma_J(t)) dt}{\text{pdf}(Z)} \quad (2.5.1)$$

Just as in the single mode case, at a fixed time  $t$ , the partial conditional dissipation is independent of  $Z$ , but this is not the case for the full conditional dissipation. Processing now the formulas for the conditional diffusion, the first remark is that the partial diffusion distribution can be obtained using the formula in Equation (2.3.3), with the following result at time  $t$ :

$$L(Z_{yy}|Z) = N \left( -\frac{\sum K_J^2 \sigma_J^2(t)}{\sum \sigma_J^2(t)} Z, \sum K_J^4 \sigma_J^2(t) - \frac{(\sum K_J^2 \sigma_J^2(t))^2}{\sum \sigma_J^2(t)} \right).$$

If there is only one mode, the variance is zero and one recovers the single mode formula. The partial conditional diffusion at time  $t$  is the mean of this distribution:

$$D(Z, t) = -\frac{\sum K_J^2 \sigma_J^2(t)}{\sum \sigma_J^2(t)} Z$$

As in the one mode case, the partial conditional diffusion is a linear function of  $Z$ , however, unlike the single mode case, the proportionality constant is now time-dependent, so that time averaging results in a nonlinear expression:

$$D(Z) = -\frac{\frac{1}{\tau_P} \int_0^{\tau_P} \frac{\sum K_J^2 \sigma_J^2(t)}{\sum \sigma_J^2(t)} \text{pdf}(Z(t)) dt}{\text{pdf}(Z)} Z \quad (2.5.2)$$

Unlike the single mode case, this is clearly a nonlinear expression, as the relative weight of the different modes in the integrand depends on  $Z$  and on time.

### 2.5.2. Numerical results

The numerical simulations for the random spatio-temporal multimode shear are performed by assuming an energy spectrum of the form:

$$E_J \propto K_J^{-\alpha} \quad (2.5.3)$$

for modes  $K_J = 2\pi\{1, 2, \dots, N\}$ . The simulations results presented here correspond to  $\alpha = 1$  (Batchelor spectrum), but other choices are possible, for example,  $\alpha = 5/3$  (Kolmogorov spectrum). The correlation time of each mode is also expressed by a power law, with large values of  $K_J$  corresponding to shorter correlation times:

$$\tau_J = \tau_C K_J^{-1} \quad (2.5.4)$$

with  $\tau_C > 0$  the correlation time constant.

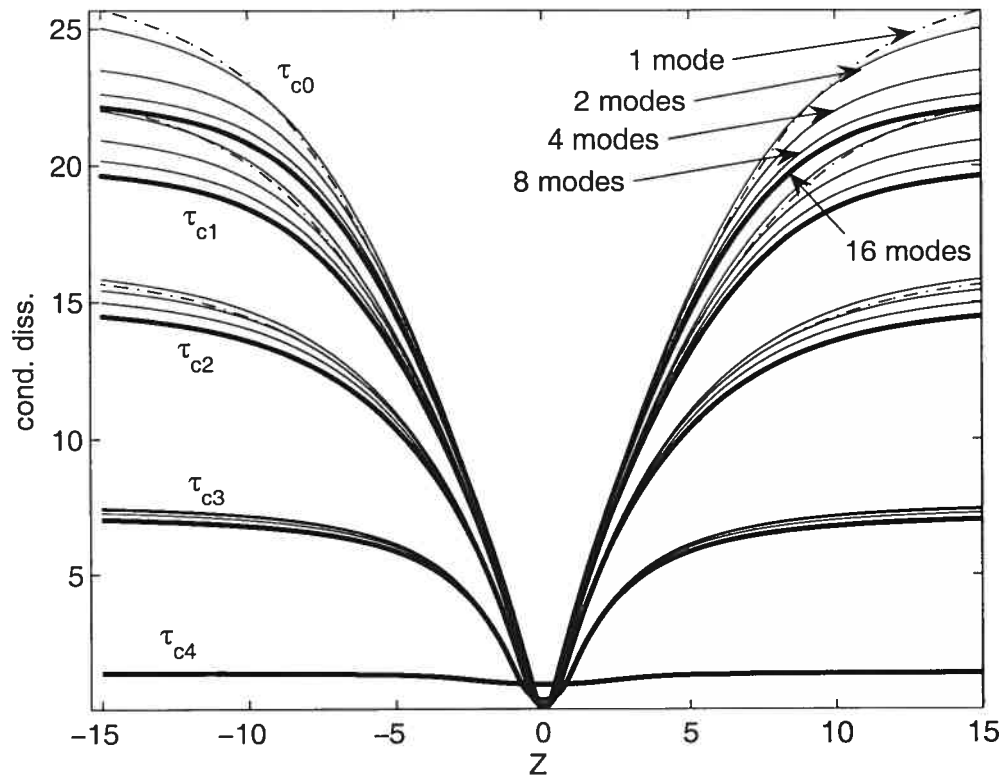


Fig. 2.4: Conditional dissipation corresponding to various  $\tau_J$  and number of modes in the energy spectrum,  $Pe=1000$

The figures 2.4, 2.5, 2.6 use different numbers of modes ( $N = 1, 2, 4, 8, 16$ ) in combination with different correlation time constants ( $1/\tau_{C0} = 0$ ,  $1/\tau_{C1} = 2\pi$ ,  $1/\tau_{C2} = 8\pi$ ,  $1/\tau_{C3} = 32\pi$ ,  $1/\tau_{C4} = 1000$ ). The conditional dissipation resembles qualitatively the corresponding curve for the single mode case. The conditional diffusion is now clearly nonlinear.

## 2.6. SAMPLING ERRORS IN THE PDF TAILS

In this section, we use the asymptotic limit of the conditional dissipation to study the potential impact of sampling errors in the tails of the PDF. As indicated in Equation (2.4.1), the entire conditional distribution of the dissipation is known. The focus so far has been on its mean, the conditional dissipation. The variance however plays a key role in quantifying the sampling error via the central limit

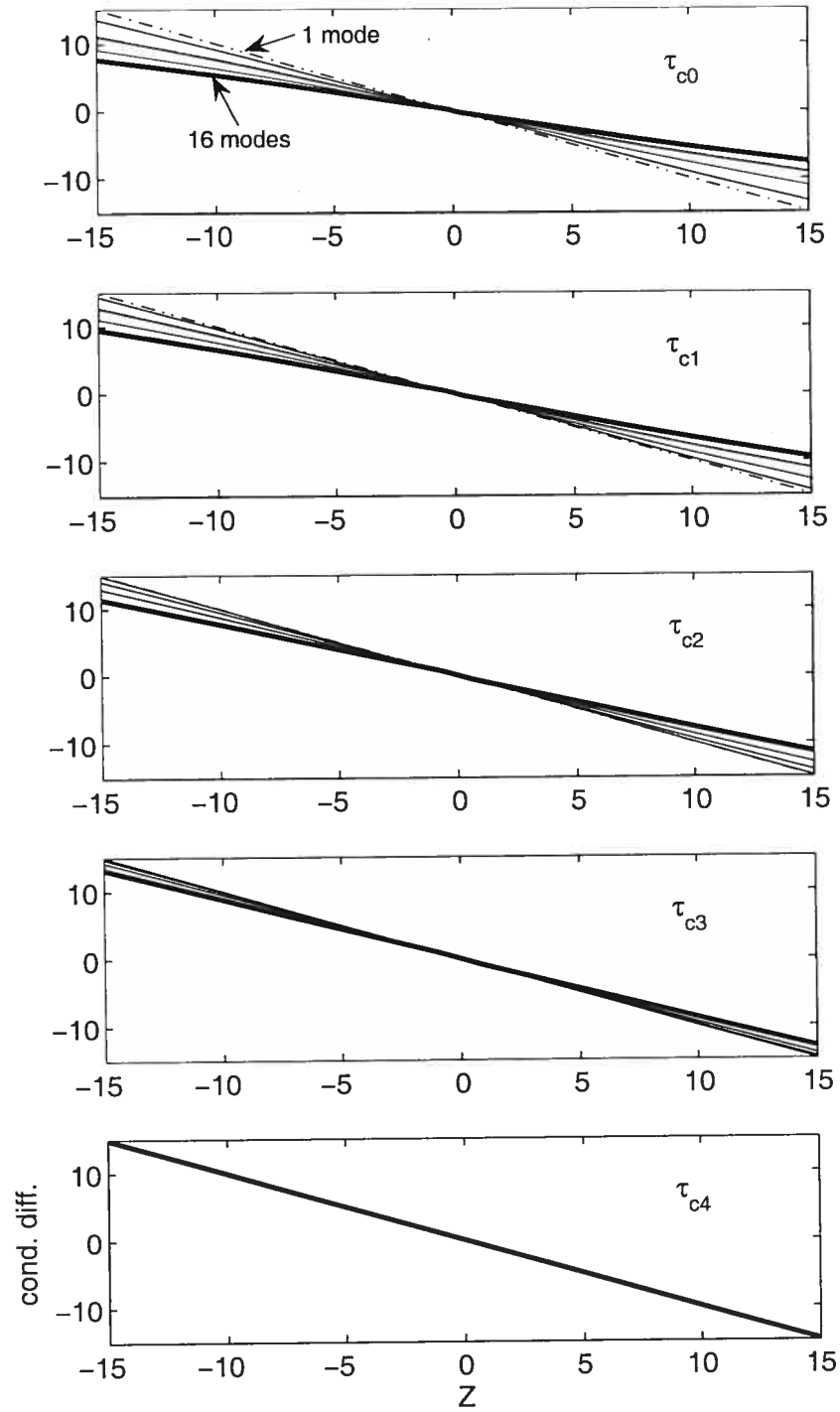


Fig. 2.5: Conditional diffusion corresponding to various  $\tau_J$ ,  $Pe=1000$

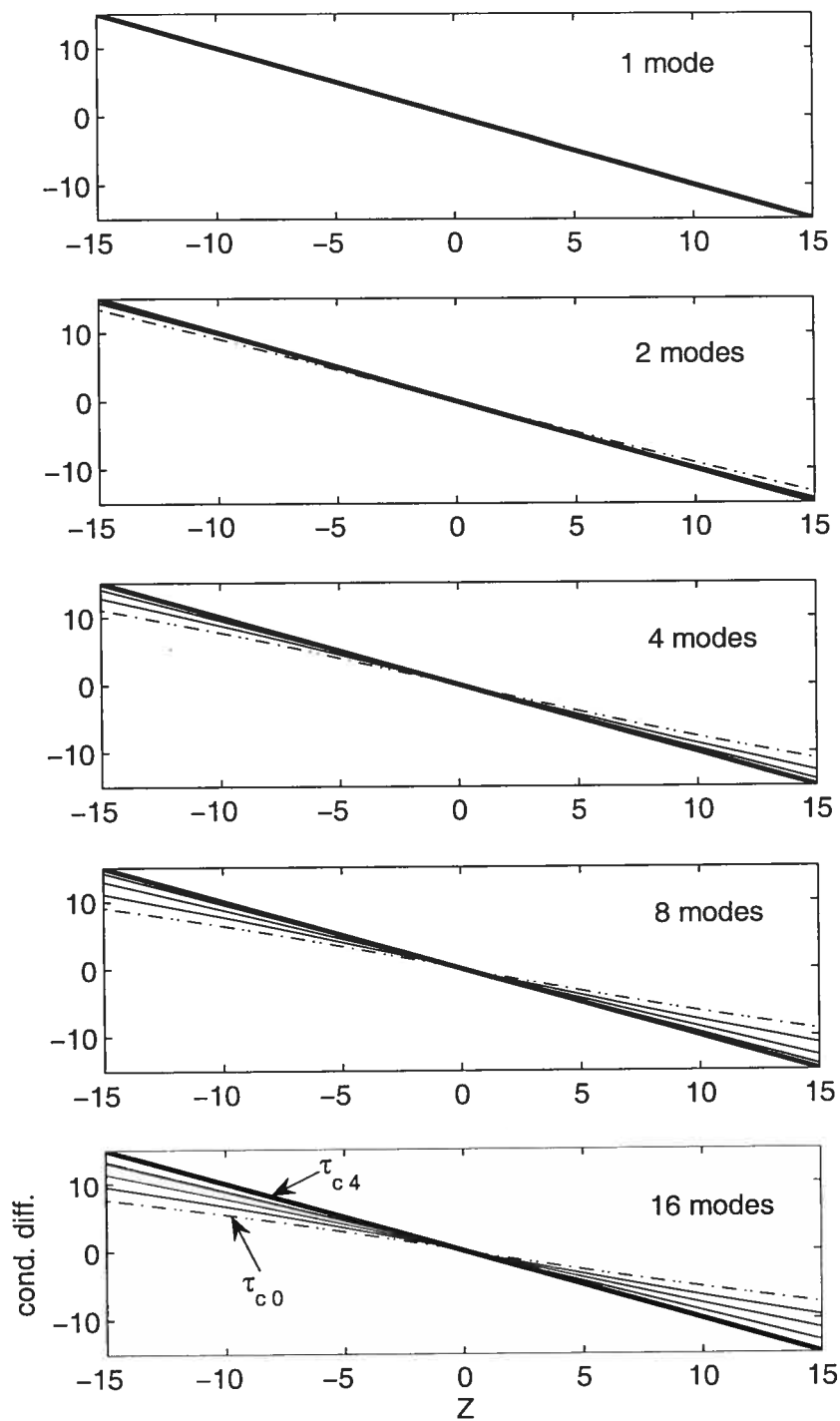


Fig. 2.6: Conditional diffusion corresponding to various numbers of modes  $N$  in the energy spectrum,  $Pe = 1000$



theorem. We mimic here the process to extract conditional statistics from a discrete database with  $N$  points.

(1) In the practical procedure, the data points are gathered in  $n$  bins.

We assume here that the bins have identical width  $\Delta Z$  and cover the range  $-8\sigma \leq Z \leq 8\sigma$ , with  $\sigma$  the standard deviation. We mimic the binning process by estimating the number of points  $N_i$  in the bin  $[Z_i - \Delta Z/2, Z_i + \Delta Z/2]$  as  $N_i \sim N \int_{Z_i - \Delta Z/2}^{Z_i + \Delta Z/2} \text{pdf}(Z) dZ$ .

(2) Using the central limit theorem, the standard error of the mean based on a sample of  $N_i$  datapoints with standard deviation  $\sigma_i$  is  $\sigma_i/\sqrt{N_i}$ .

In Figures 2.7 and 2.8, we show the plot of the conditional dissipation corresponding to the asymptotic solution along with the 95% confidence interval of  $\pm 1.96\sigma_i/\sqrt{N_i}$ . For this computation, we assumed that  $N = 10^6$  datapoints were available, and that  $\Delta Z = 0.1$  so that 160 bins were used. The growth of the confidence interval in the tails is noticeable. It is due to the combination of two effects: the number of datapoints  $N_i$  for bins in the tails of the PDF becomes smaller, because the PDF decreases; also, the standard deviation of the conditional distribution of the dissipation grows as  $Z$  grows. This explains the magnitude of the statistical noise observed frequently when processing conditional statistics, see for example Fig.10 in [9], Fig.2 in [4] or Fig.5 in [14]. In particular, noise can be such that the tapering of the conditional dissipation to its asymptotic limit for large  $Z$  in some of those examples could go unnoticed.

One major advantage of the analysis presented in this paper is that sampling errors played no role; instead, explicit processing guarantees uniform accuracy in the processed statistics for an unlimited range of values for the passive scalar.

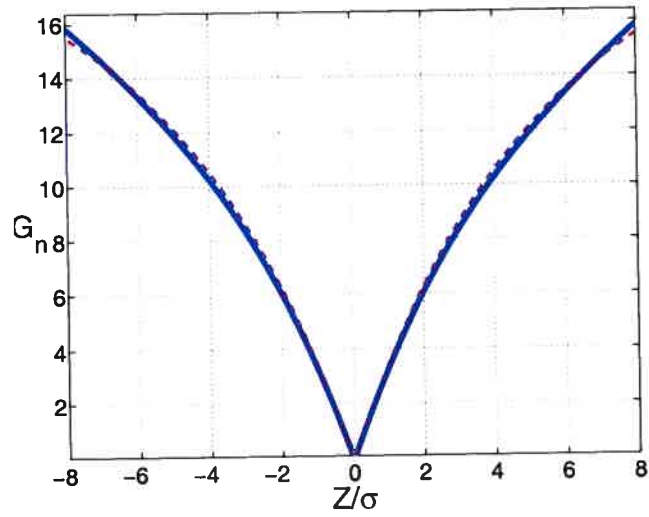


Fig. 2.7: Conditional dissipation: solid line corresponds to  $Pe=10000$ ; dashed – asymptotic solution

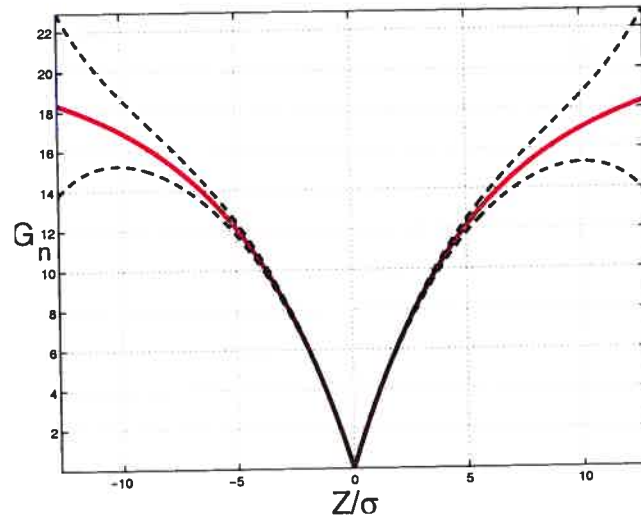


Fig. 2.8: Asymptotic conditional dissipation (solid line) along with 95% confidence interval for its estimation based on data sampling (dashed lines).

## REFERENCES

---

- [1] A. Bourlioux and A. Majda. Elementary models with probability distribution function intermittency for passive scalars with a mean gradient. *Phys. Fluids*, 14(2):881–897, 2002.
- [2] B. Castaing, F. Heslot, L. Kadanoff, A. Libchaber, S. Thomae, X. Wu, S. Zaleski, and G. Zanetti. Scaling of hard thermal turbulence in Rayleigh-Bénard convection. *J. Fluid Mech.*, 204(1–30), 1989.
- [3] E.S.C. Ching. General formula for stationary or statistically homogeneous probability density functions. *Phys. Rev.*, 53(6):5899–5903, 1996.
- [4] E.S.C. Ching and Y.K. Tsang. Passive scalar conditional statistics in a model of random advection. *Phys. Fluids*, 9(5):1353–1361, 1997.
- [5] E.S.C. Ching and Y. Tu. Passive scalar fluctuations with and without a mean gradient: A numerical study. *Phys. Rev. E*, 49(2):1278–1282, 1994.
- [6] J.P. Gollub, J. Clarke, M. Gharib, B. Lane, and O.N. Mesquita. Fluctuations and transport in a stirred fluid with a mean gradient. *Phys. Rev. Lett.*, 67(25):3507–3510, 1991.
- [7] F. Heslot, B. Castaing, and A. Libchaber. Transition to turbulence in helium gas. *Phys. Rev. A*, 36:5870–5873, 1987.
- [8] Y. Hu and R.T. Pierrehumbert. The advection-diffusion problem for stratospheric flow. Part I: Concentration Probability Distribution Function. *J. Atm. Sci.*, 58:1493–1510, 2001.
- [9] Jayesh and Z. Warhaft. Probability distribution, conditional dissipation, and transport of passive temperature fluctuations in grid-generated turbulence. *Phys. Fluids A*, 4(10):2292–2307, 1992.
- [10] B.R. Lane, O.N. Mesquita, S.R. Meyers, and J.P. Gollub. Probability distributions and thermal transport in a turbulent grid flow. *Phys. Fluids A*, 5(9):2255–2263, 1993.

- [11] K. Ngan and R.T. Pierrehumbert. Spatially correlated and inhomogeneous random advection. *Phys. Fluids*, 12(4):822–834, 2000.
- [12] M.R. Overholt and S.B. Pope. Direct numerical simulation of a passive scalar with imposed mean gradient in isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, 8(11):3128–3148, 1996.
- [13] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [14] R.T. Pierrehumbert. Lattice models of advection-diffusion. *Chaos*, 10(1):61–74, 2000.
- [15] S.B. Pope and E.S.C. Ching. Stationary probability density functions: An exact result. *Phys. Fluids A*, 5(7):1529–1531, 1993.
- [16] A. Pumir, B. Shraiman, and E.D. Siggia. Exponential tails and random advection. *Phys. Rev. Lett.*, 66(23):2984–2987, 1991.
- [17] A.M. Yaglom. *Correlation theory of stationary and related random functions. Volume I: Basic results*. Springer-Verlag, Berlin, 1987.

## DÉCLARATION DES COAUTEURS D'UN ARTICLE

### Identification l'étudiant et du programme:

Oleg Volkov

Ph.D. en Mathématiques Appliquées

### Description de l'article:

Auteurs :

Oleg Volkov

Anne Bourlioux

Titre :

Validation of unsteady flamelet models for an idealized test-case with intermittency

Journal :

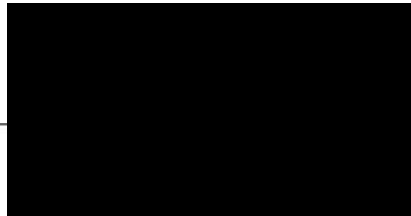
Combustion Theory and Modelling

### Déclaration de tous les coauteurs autres que l'étudiant:

À titre de coauteur de l'article identifié ci-dessus, je suis d'accord pour que Oleg Volkov inclue cet article dans sa thèse de doctorat qui a pour titre "Validation des modèles de flammelettes instationnaires en combustion turbulente non-prémélangée"

Anne Bourlioux

Coauteur



3/7/2005

Date

## Chapitre 3

---

# VALIDATION DES MODÈLES DE FLAMMELETTES INSTATIONNAIRES POUR UN CAS-TEST IDÉALISÉ AVEC INTERMITTENCE

### RÉSUMÉ

Un ensemble de modèles de flammelettes est validé en utilisant un écoulement instationnaire de type cisaillement perpendiculaire à la flamme avec une composante transversale périodique en temps. Ce type d'écoulement génère une réponse intermittente dans le temps, ce qui constitue un défi pour les modèles de flammelettes stationnaires. Une méthode numérique spécialement conçue est utilisée pour générer une base de données détaillée en ce qui concerne la structure de la flamme, pour comparaison avec les prédictions des modèles étudiés. Malgré le caractère complexe de la solution dans l'espace et dans le temps, on observe que la flamme possède une structure similaire à la flammelette jusqu'à un certain ordre de précision du modèle, mais paramétrisé de façon non-triviale par une dissipation locale instationnaire effective. Une comparaison détaillée de la capacité des modèles de flammelettes standards à prédire cette dissipation effective est présentée en terme des nombres de Péclet et de Damköhler. Les régimes de validité sont identifiés pour les différents modèles sur la base des résultats numériques et de l'analyse asymptotique.

## Validation of unsteady flamelet models for an idealized test-case with intermittency

**Abstract** A hierarchy of unsteady flamelet models is validated using a multi-dimensional unsteady flow consisting of a shear perpendicular to the flame and a time-modulated transverse sweep. This class of flows leads to strong intermittency in time, which constitutes a challenging problem for flamelet models. A dedicated direct numerical simulation strategy is designed to obtain reliable detailed data for the flame structure, for comparison with the models predictions. Despite the complex unsteady, multi-dimensional nature of the solution, the flame structure is shown to follow, to very high accuracy, the basic flamelet structure, but with a highly non-trivial local time-dependent dissipation, referred to as the effective dissipation. A detailed comparison of the capability of the different models to predict this effective dissipation is presented in terms of the Péclet and Damköhler numbers. Regimes of validity for various models are identified, on the basis of the numerical data and of asymptotic results.

### 3.1. INTRODUCTION

Turbulence and unsteadiness can have a major impact on the dynamic of a non-premixed flames; to correctly model that effect is of great importance [5, 6, 4]. As explained in [9], some basic issues are as follows. The classical approaches to turbulent closure are not very well suited for the reactive Navier-Stokes equations because of the difficulties associated with the nonlinear reaction terms. On the other hand, the different phenomena (advection, diffusion, reaction) can have very disparate temporal and spatial scales. Meshing the entire domain with the smallest scale to accurately describe all scales is not very efficient because of the high cost of such simulation. Adaptive meshing could help to some extent. Sound multi-scale models remain the best option. The asymptotic limit of very fast reaction is one regime where one could hope to design such a model. The basic idea is to study the reaction zone in the appropriate coordinate system, based on the appropriate conserved scalar whose zero-level is a good indicator of the location of the flame. In the asymptotic limit, the flame structure is basically one-dimensional in the direction transverse to the passive scalar zero-level, and corresponds to a steady profile. The basic assumptions behind the model are therefore one-dimensionality and steadiness, neither of which are verified at large but finite reaction rate and high turbulence intensity. Several strategies have been proposed to somehow correct for the unsteadiness [11, 12] while retaining the relative simplicity of the one-dimensional steady flamelet approach. Our purpose in this paper is to investigate the performance of one class of such strategies, introduced in [4], for more general and challenging testing conditions. The idealized set-up used in the present study is sufficiently simple that a number of theoretical results are available and that extensive numerical simulations can be performed for a wide range of physical parameters at a reasonable computational cost. Despite this simplicity, the solutions display temporal intermittency in time and are multi-dimensional so that they constitute a more demanding test case for the models than the previously considered solutions, which were one-dimensional spatially with a smoothly modulated time dependence. Moreover, the solutions



studied here have the interesting feature that, despite the distorted spatial configuration of the flame front, the reactive scalars fit a locally one-dimensional flamelet structure perfectly. Because the general form of the structure is known, the present configuration allows us to focus on the question of predicting the value of the dissipation, which is the key parameter in the fit to a flamelet.

## 3.2. IDEALIZED TEST-CASE

### 3.2.1. Basic set-up

The basic set-up was introduced in [2]. It consists of the following system of advection-diffusion-reaction equations for the two reactive scalars  $Y_1$  and  $Y_2$  (in non-dimensional form):

$$\begin{aligned}\frac{\partial Y_1}{\partial t} + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Y_1 &= \Delta Y_1 - \text{Da} Y_1 Y_2 \\ \frac{\partial Y_2}{\partial t} + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Y_2 &= \Delta Y_2 - \text{Da} Y_1 Y_2\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

Here,  $\mathbf{v} = (\sin 2\pi y, \cos \omega t)$ , a simple horizontal shear with a time-modulated transverse component. While the earlier work focussed on steady state solutions, the current work is concerned with the time periodic solution for the two scalars. The Péclet number is a measure of the intensity of advection compared to diffusion (large Pe corresponds to high turbulence intensity), while the Damköhler number Da compares the strength of reaction compared to diffusion (large Da corresponds to fast chemistry and thin flames). The reactive scalars  $Y_1$  and  $Y_2$  represent respectively the fuel and oxidizer mass fractions and the source term corresponds to a one-step irreversible reaction  $Y_1 + Y_2 \rightarrow Y_p$  (with  $Y_p$  the mass fraction of the product) at the finite reaction rate  $\dot{\omega} = k Y_1 Y_2$ . It is convenient to substitute to one of the two reactive equations the simpler advection-diffusion equation for the passive scalar  $Z = (Y_1 - Y_2)/2$ :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Z = \Delta Z\tag{3.2.2}$$

The system is solved for  $Y_i(x, y), Z(x, y)$  in a rectangular domain with  $-L_g/2 \leq x \leq L_g/2$  and  $0 \leq y \leq 1$ , with  $L_g = 10$ . The passive scalar  $Z(x, y)$  is assumed to be the sum of a mean value  $Z_G = x/L_g$ , corresponding to a mean

gradient in  $x$  with slope  $1/L_g$ , and of a bi-periodic perturbation  $Z_P$  of mean zero and period  $P = 1$ :

$$Z(x, y, t) = x/L_g + Z_P(x, y, t) \quad (3.2.3)$$

This is achieved by imposing the following boundary conditions:

$$\begin{aligned} Z(x, y = 0) &= Z(x, y = 1) && \text{for } -L_g/2 \leq x \leq L_g/2 \\ Z(-L_g/2, y) &= Z(L_g/2, y) - 1 && \text{for } 0 \leq y \leq 1 \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

The reactive scalars  $Y_1$  and  $Y_2$  are also periodic in  $y$  and satisfy the following equilibrium boundary conditions in  $x$  at  $x_A = -L_g/2$  and  $x_A = L_g/2$ :

$$Y_i(x_A, y, t) = Y_{i,\text{eq}}(x_A, y, t) \quad (3.2.5)$$

where the equilibrium values  $Y_{i,\text{eq}}$  are given by:

$$\begin{aligned} Y_{1,\text{eq}}(x, y, t) &= |Z(x, y, t)| + Z(x, y, t) \\ Y_{2,\text{eq}}(x, y, t) &= |Z(x, y, t)| - Z(x, y, t). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

### 3.2.2. Solving for the passive scalar

As far as the passive scalar is concerned, a complete description of the solution can be found in [3], where the basic set-up described above was used to study PDF intermittency. Despite the simplicity of the set-up, a very rich temporal behavior of the solution for the passive scalar is observed. The solution is obtained by assuming that the passive scalar fluctuation  $Z_P(y, t)$  is of the form  $A(t) \sin 2\pi y + B(t) \cos 2\pi y$ , with  $A(t), B(t)$  two time-periodic functions, solutions of the following set of ODEs:

$$\begin{aligned} A_t &= -4\pi^2 A + 2\pi \text{Pe} \cos(\omega t) B - \frac{\text{Pe}}{L_g} \\ B_t &= -2\pi \text{Pe} \beta \cos(\omega t) A - 4\pi^2 B \end{aligned}$$

This system is solved numerically, using Matlab `ode15s`, a time-adaptive stiff ODE integrator. The amount of work involved in obtaining this solution is at least 2 orders of magnitude less than what is typically required for solving an advection-diffusion equation.

### 3.2.3. Solving for the reactive scalars

Because we are interested in the large Da limit, one can expect the reaction zone to follow closely the zero-isocontour for  $Z$ . Here  $Z$  consists of a linear combination of two simple Fourier modes, whose amplitude as a function of time can be pre-computed very efficiently. Because  $Z$  here is a graph in terms of  $y$  at all times, one can perform a coordinate transformation, substituting  $Z$  for  $x$  and doing so, effectively remapping the computational domain to a fixed band in the  $(Z, y)$  coordinate system. This is very similar to the coordinate transformation at the core of the formulation of flamelet models. In the new coordinate system, the reactive scalar equations become:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \text{Pe} \beta \cos(\omega t) \frac{\partial Y_i}{\partial y} - a \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - 2b \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y \partial Z} - c \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} = -\text{Da} Y_1 Y_2 \quad (3.2.7)$$

where

$$a(y, t) \equiv |\nabla Z|^2 = (L_g^{-1})^2 + \left( \frac{\partial Z_P}{\partial y} \right)^2; \quad b(y, t) \equiv \frac{\partial Z_P}{\partial y}; \quad c \equiv 1; \quad (3.2.8)$$

Examples of the reactive scalar solution for different Da at Pe= 100 can be seen in Figure 3.1. Plots of the solution are shown, both in the physical space coordinates and in the remapped coordinates.

Unlike the case of the passive scalar, there is no shortcut to solving numerically the full evolution PDE for the reactive scalar. We use a finite difference approximation for that purpose. A rectangular grid in the  $(Z, y)$  coordinate systems is used with grid size  $h_z, h_y$ . The partial derivatives  $\partial^2 Y / \partial Z^2$  and  $\partial^2 Y / \partial y^2$  are replaced by the standard second order differences, whereas the mixed partial derivative  $\partial^2 Y / \partial y \partial Z$  is replaced so that the coefficients of the whole scheme are non-negative [8]. Finally one obtains the following difference scheme:

if  $b_r > 0$ :

$$\begin{aligned} & -2 [a_r + c_r - b_r] Y_{ij} + [a_r - b_r] (Y_{i+1,j} + Y_{i-1,j}) + \\ & [c_r - b_r] (Y_{i,j+1} + Y_{i,j-1}) + b_r (Y_{i+1,j+1} + Y_{i-1,j-1}) \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

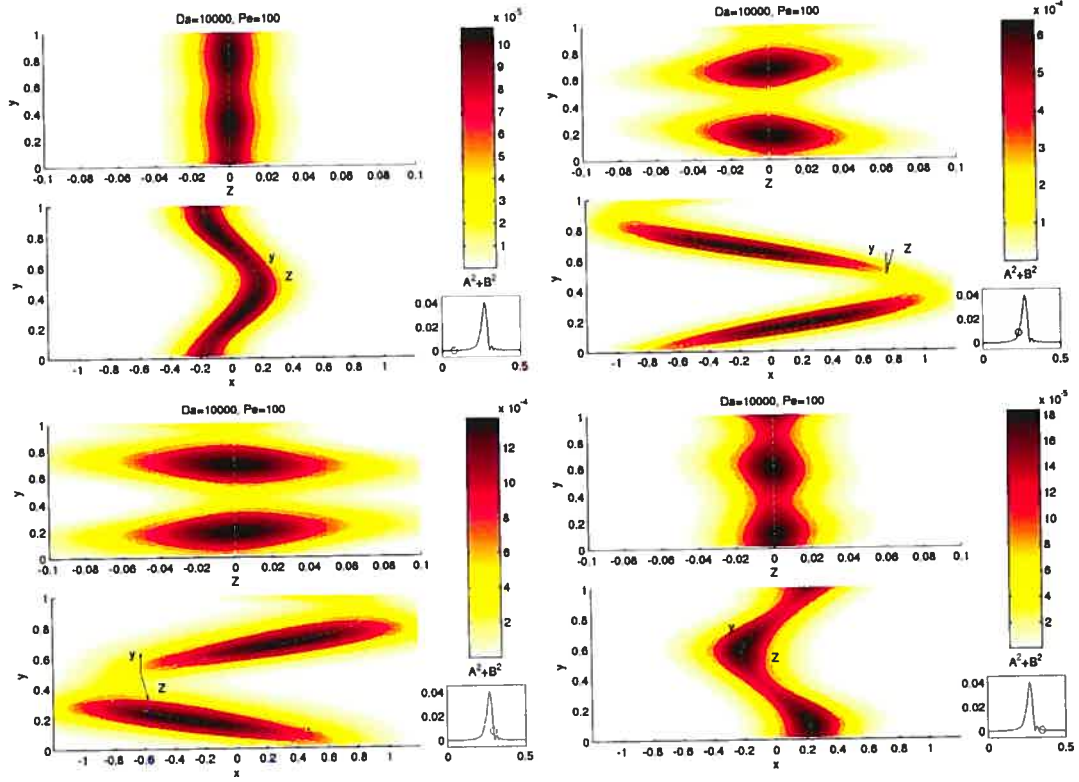


Fig. 3.1: DNS results for the reaction rate in the  $(Z, y)$  (top) and  $(x, y)$  (bottom) coordinates; the dashed line corresponds to the stoichiometric level  $Z = 0$ ;  $Da = 10000$

if  $b_r < 0$ :

$$\begin{aligned}
 & -2 [a_r + c_r + b_r] Y_{ij} + [a_r + b_r] (Y_{i+1,j} + Y_{i-1,j}) + \\
 & [c_r + b_r] (Y_{i,j+1} + Y_{i,j-1}) - b_r (Y_{i-1,j+1} + Y_{i+1,j-1})
 \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

where  $a_r = a h_t / h_z^2$ ,  $b_r = b h_t / (h_z h_y)$  and  $c_r = c h_t / h_y^2$ .

The vertical advection term  $Pe \beta \cos(\omega t) \partial Y_i / \partial y$ , with  $Pe$  a positive constant which can be large, is approximated by the central difference  $L_n (Y_{i,j+1}^n - Y_{i,j-1}^n)$  where  $L_n = h_t / (2h_y) Pe \beta \cos(\omega t_n)$ . Taken alone, this scheme is known to be unstable, but in the case of advection-diffusion equation considered here, the stability of the whole solution is governed by a CFL condition coming from the second order derivatives and the central difference is conditionally stable, see the

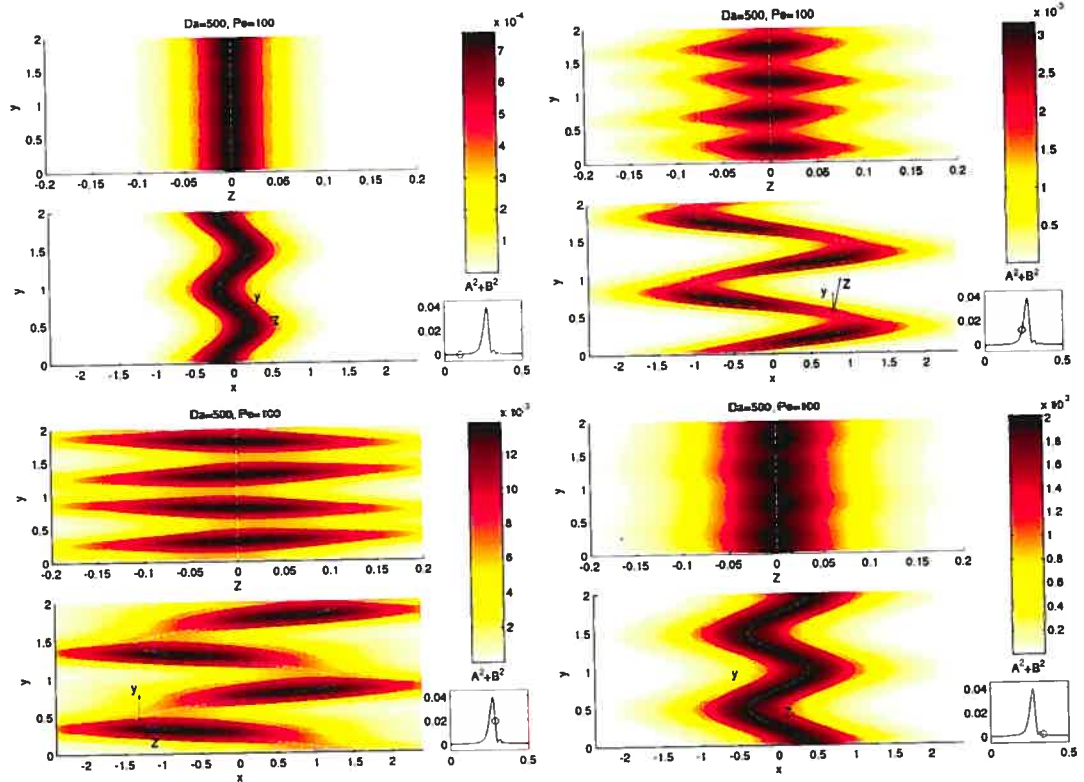


Fig. 3.2: Same as Figure 3.1,  $Da = 500$

conditions below. The procedure to select the appropriate time-step and mesh size is as follows:

- (1) After fixing the Péclet number, we calculate the number of points in  $y$  direction so that the central difference condition is satisfied.

$$|L_n| < c_r \Rightarrow \frac{Pe\beta |\cos(\omega t_n)| h_t}{2h_y} < \frac{c h_t}{h_y^2} \Rightarrow h_y < \frac{2 \min(c)}{Pe\beta}$$

- (2) We determine the number of points in the  $z$  direction so that the mixed difference has positive coefficients.

$$|b_r| < \min(a_r, c_r) \Rightarrow \frac{|b|}{h_z h_y} < \min\left(\frac{c}{h_y^2}, \frac{a}{h_z^2}\right) \Rightarrow \frac{\max|b| h_y}{\min(c)} < h_z < \frac{\min(a) h_y}{\max|b|}$$

- (3) We find the time step  $h_t$  which globally satisfies the CFL stability condition.

$$a_r + c_r < \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{a h_t}{h_z^2} + \frac{c h_t}{h_y^2} < \frac{1}{2} \Rightarrow h_t < \frac{h_z^2 h_y^2}{2(\max(a) h_y^2 + \max(c) h_z^2)}$$

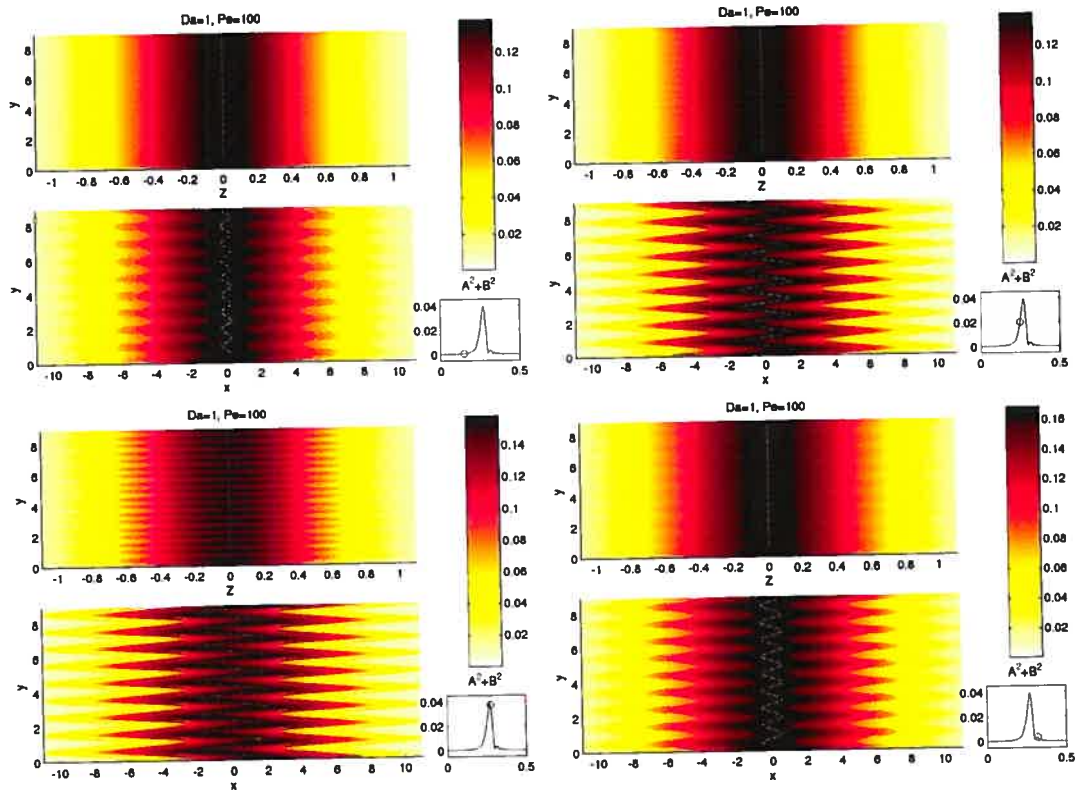


Fig. 3.3: Same as Figure 3.1,  $Da=1$

- (4) Time is discretized using an explicit Runge-Kutta integrator combining an order 2 and an order 3 scheme, so that the local discretization error can be extrapolated and the time-step dynamically adapted accordingly.

### 3.2.4. Turbulent dissipation

Although the flow introduced in the first section has a simple deterministic character, it still gives an insight into what happens in more realistic turbulent case. A feature of this type of model is the fact that the PDF of the passive scalar undergoes a transition from a Gaussian to a broader form [2]. Figure 3.4 shows one period of space-average value  $\langle \chi \rangle_y$  of the instantaneous turbulent dissipation  $\chi(t, y) = |\nabla Z|^2$  when the Péclet number changes from 5 to 100. One observes the transition from a smooth sine time dependence to a much more complex behavior

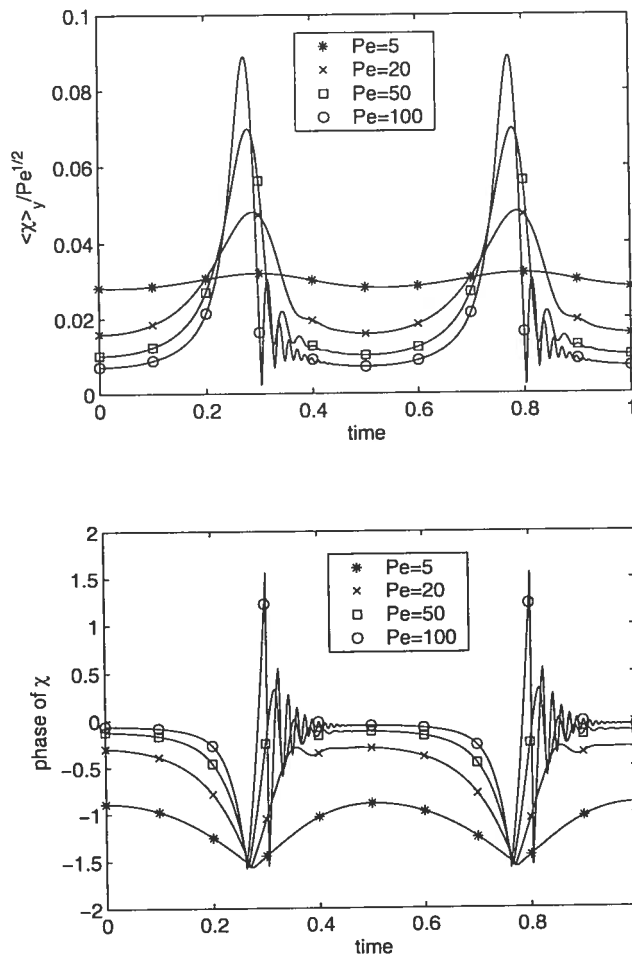


Fig. 3.4: Turbulent dissipation:  $\chi(y, t) = \bar{\chi}(t) + \tilde{\chi}(t) \sin(4\pi y + \omega(t))$ ; the upper figure corresponds to the amplitude  $\tilde{\chi}(t)$ , whereas the lower one depicts the phase  $\omega(t)$ .

as the Péclet number increases. The burst of activities occur whenever the transverse sweep goes through zero; at those times, the shear has a very large impact on the solution and deformations are significant.

### 3.3. UNSTEADY FLAMELET MODELS

The objective of the current study is to examine various strategies for closure of the turbulent reactive scalar system. We will show that despite the unsteadiness of the flow and its two-dimensional structure, it is still adequate to resort to steady

laminar flamelets as models for the reaction zone. The simple space averaging of Equation (3.2.1) to provide turbulent closure at large scales leads to an unclosed reaction term for which no classical models are expected to apply. An alternative is to rely on the flamelet assumption, where the averaging in space for the reactive variable is performed via its expression in terms of the probability density of the passive scalar and, depending on the model, of some of its statistics, more typically, its dissipation:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} Y_i(t, x, y) dx dy = \int_{\mathbf{x}} \int_{Z} Y_i(t, Z, \chi) \text{pdf}(Z, \chi) dZ d\chi$$

How to derive the relationship  $Y_i(t, Z, \chi)$  is reviewed next. Full closure also requires some working expression for the PDF of the passive scalar, see for instance [2] for details on that topic for the particular set-up used here.

### 3.3.1. Summary: steady laminar flamelet model

According to the steady laminar flamelet model, reactive scalars  $Y_i$  are uniquely defined by the passive scalar  $Z$ , whose solution is provided for all points in space and time. In other words, advective-diffusive phenomena is completely decoupled from what happens at the chemical scale. This can be done only if these two scales are completely separated one from another. Thus the previously introduced system on reactive scalars (3.2.7) takes the form

$$\chi(x, y) \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \text{Da} Y_1 Y_2 \quad (3.3.1)$$

We suppose as above that the passive scalar  $Z$  is a curvilinear coordinate associated with distorted flame front and its statistical characteristics are presumed to be constant for a given point in physical space. Starting from this assumption we can reduce the system (3.3.1) to a normalized form by applying the appropriate rescaling on the reactive and passive scalars.

$$\begin{aligned} Y^{\text{n}} &= \bar{Y}^{\text{n}}(\bar{Z}) \left[ \frac{\chi(t, y)}{\text{Da}} \right]^{1/3}; \quad Z = \bar{Z} \left[ \frac{\chi(t, y)}{\text{Da}} \right]^{1/3} \\ &\Rightarrow \frac{\partial^2 \bar{Y}_i^{\text{n}}}{\partial \bar{Z}^2} = \bar{Y}_1^{\text{n}} \bar{Y}_2^{\text{n}}, \quad i = 1, 2 \end{aligned} \quad (3.3.2)$$



The final equations are parameter-free so an efficient procedure is to solve them once for all to constitute a so-called **flamelet library** from which reactive scalars  $Y_i^{\text{fl}}(Z, \chi, \text{Da})$  can be interpolated using the proper inverse rescaling. Flamelet models differ by what specific value for the dissipation  $\chi$  is used for the rescaling at any point in space.

In the limit when the Damköhler number is infinite or, at least, large enough, the chemical reaction is infinitely fast and the reactants react as soon as they have mixed through diffusion. In that case, equilibrium is always satisfied and the reactive scalars are simply given by  $Y_1 = Z + |Z|$  and  $Y_2 = -Z + |Z|$ . Using the normalizing coefficient  $[\chi/\text{Da}]^{1/3}$  as a small parameter, the equilibrium solution can be shown to correspond to the leading order term of an asymptotic expansion of the solution in terms of the small parameter. The flamelet solution above in (3.3.2) can be shown to be the next leading order term. The equilibrium solution is frequently used in our numerical simulation as a convenient initial value.

The flamelet model presented above is essentially a one-dimensional, steady solution for the reactive scalar. How to adapt this convenient strategy for the case where the flow is intrinsically unsteady and multi-dimensional is discussed next.

### 3.3.2. Model 1a): instantaneous dissipation

If the reaction rate is very fast, one can expect that at any given time, the reactive scalar still satisfies the flamelet equation, if one uses as turbulent dissipation its local, instantaneous value, computed as follows:

$$\chi(t, y) = |\nabla Z|^2 = \frac{1}{L_g^2} + 4\pi^2 (A(t) \cos(2\pi y) - B(t) \sin(2\pi y))^2 \quad (3.3.3)$$

### 3.3.3. Model 1b): y-averaged instantaneous dissipation

In general, the detailed spatial distribution of the turbulent dissipation is not easily obtained at small scales, more realistically, only its spatially averaged value

would be available. The behavior of the performance of the model as the Damköhler number is varied should exhibit the same trend as the two-dimensional, local one, with one exception connected to the order of convergence for high Damköhler numbers. For instance, the analysis for the steady case [2] shows that for  $Da \gg 1$ , the local flamelet model is of higher order than the averaged one.

#### 3.3.4. Model 2: time-averaged dissipation

One serious disadvantage of the instantaneous models is related to the fact that they do not take into account the time history of flame evolution which is important for the moderate Damköhler regimes. One simple approach would be to substitute to the instantaneous value for the dissipation its time-averaged value. Being inversely proportional to the Damköhler number, flame thickness places a limit on the size of advective scale. Indeed, considering it in the time scale terminology, to ensure the validity of the flamelet model, the advective time scale should always be greater than the reactive time scale. This condition is fulfilled, in a certain sense, in a time-averaged dissipation model since the advection time scale is kept constant all along the time period, so it contains to some extent partial information on the flame evolution. Hence one should expect an asymptotic convergence of mean flamelet to the direct solution as the Damköhler number decreases. Given the specific set-up here, it is trivial to verify that the time-averaged value of the dissipation is independent of  $y$ , so that the mean (in time) local (in space) dissipation model is identical to the mean (in time) averaged (in space) dissipation model.

#### 3.3.5. Model 3: FULFA

Either Model 1 or Model 2 are expected to be adequate only in their respective asymptotic range of high or low  $Da$ . The next step is to provide a model for the turbulent dissipation, to be used in the flamelet model, that takes into account the history of the evolution of the flame. Such a model has been introduced in [4] as the Full Unsteady Laminar Flamelet Approximation (FULFA), described there for the case of a one-dimensional flow.

The basic principle is to assume that the reactive scalars  $Y_i$  are still a solution of the steady flamelet equation, but with an unknown turbulent dissipation  $\chi_{\text{fulfa}}$ , so that:

$$Y^{\text{fl}} = \bar{Y}^{\text{fl}}(\bar{Z}) \left( \frac{\chi_{\text{fulfa}}}{\text{Da}} \right)^{1/3} \quad Z = \bar{Z} \left( \frac{\chi_{\text{fulfa}}}{\text{Da}} \right)^{1/3} \quad (3.3.4)$$

As for the steady or instantaneous case, a simple implementation would neglect the spatial variation of the dissipation, instead replacing it by its space-averaged value. This would lead to the following evolution equation for the reactive scalars:

$$\frac{\partial Y_i^{\text{fl}}}{\partial t} - \langle \chi_{\text{inst}}(t, y) \rangle_y \frac{\partial^2 Y_i^{\text{fl}}}{\partial Z^2} = -\text{Da} Y_1^{\text{fl}} Y_2^{\text{fl}} \quad (3.3.5)$$

with the instantaneous turbulent dissipation  $\chi_{\text{inst}}$  defined as in Model 1. Substituting in (3.3.5) the FULFA expression (3.3.4), and evaluating it at the stoichiometric level  $Z = 0$  results in the following expression for  $\chi_{\text{fulfa}}$  :

$$\frac{\partial \chi_{\text{fulfa}}}{\partial t} = 3 \bar{Y}_{\text{st}}^{\text{fl}} \left( \langle \chi_{\text{inst}}(t, y) \rangle_y - \chi_{\text{fulfa}} \right) (\text{Da}^2 |\chi_{\text{fulfa}}|)^{1/3} \quad (3.3.6)$$

where  $\bar{Y}_{\text{st}}^{\text{fl}}$  is flamelet solution taken on the stoichiometric level.

The full two-dimensional version is obtained by substituting the expression above in the PDE for the reactive scalar, instead of its  $y$ -averaged version, and evaluating at the stoichiometric level  $Z = 0$ :

$$\frac{\partial \chi_{\text{fulfa}}}{\partial t} + \text{Pe} \beta \cos(\omega t) \frac{\partial \chi_{\text{fulfa}}}{\partial y} - \frac{\partial^2 \chi_{\text{fulfa}}}{\partial y^2} = 3 \bar{Y}_{\text{st}}^{\text{fl}} (\chi_{\text{inst}}(t, y) - \chi_{\text{fulfa}}) (\text{Da}^2 |\chi_{\text{fulfa}}|)^{1/3} \quad (3.3.7)$$

where all terms are evaluated at the stoichiometric level  $Z = 0$ .

Practically, the FULFA equation (3.3.6) or equation (3.3.7) is solved directly using an explicit adaptive Runge-Kutta-Fehlberg solver of order 4/5. As initial condition, one uses the time-averaged turbulent dissipation; as time progresses, the solution converges to the periodic orbit.

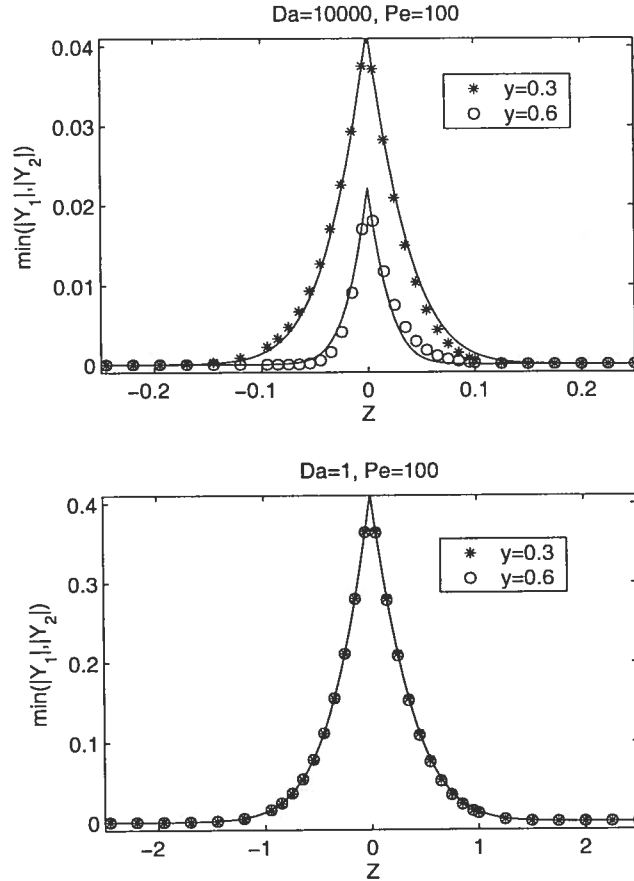


Fig. 3.5: Flamelet structure of the DNS; marks correspond to the DNS whereas the plain lines are their effective flamelet approximations.

### 3.3.6. The effective turbulent dissipation

An analysis of the detailed numerical solution of the reactant profiles at fixed  $Y$  as a function of  $Z$  reveals the close match, after the appropriate renormalization, with the flamelet library solution, at all Damköhler numbers considered in this article. The scatter-plot 3.5 illustrates this finding, it shows the results of the direct simulations together with the flamelet profiles at the points where the dissipation reaches its maximum. By matching the direct numerical solution with the normalized flamelet solution one can extract the **effective** turbulent dissipation  $\chi_{\text{eff}}$  that guarantees the best fit with the flamelet profile. In practice, we estimate this effective dissipation by focussing on the fit at the stoichiometric

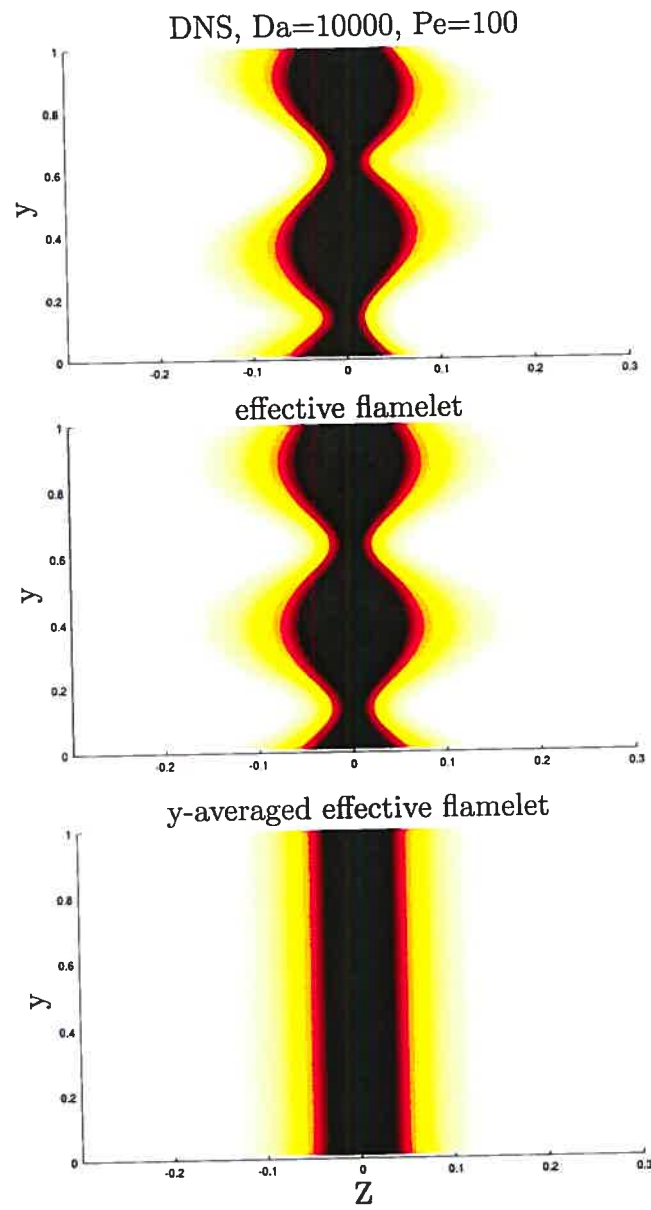


Fig. 3.6: Comparison of the DNS, effective flamelet, and mean flamelet

values of the reactive scalars and normalized flamelets according to:

$$\chi_{\text{eft}}(t, y) = \text{Da} \left( \frac{Y_{\text{st}}}{\bar{Y}_{\text{fl}}} \right)^3$$

The agreement is excellent, see Figure 3.6. In the case of the one-dimensional model, we use the same approach, with space-averaged values for the reactive scalars.

The flamelet solution based on this effective dissipation serves as a reference to what can be expected from a flamelet model.

### 3.4. PERFORMANCE OF THE MODELS

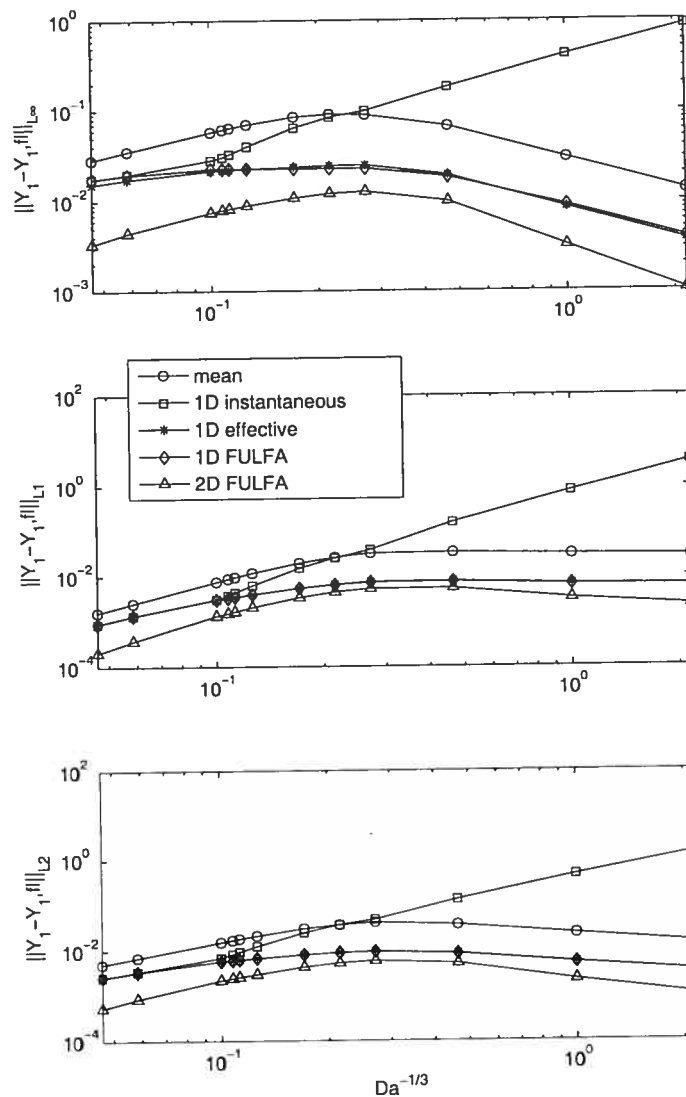


Fig. 3.7: Comparison of space-averaged (1D) models,  $Pe=100$ .

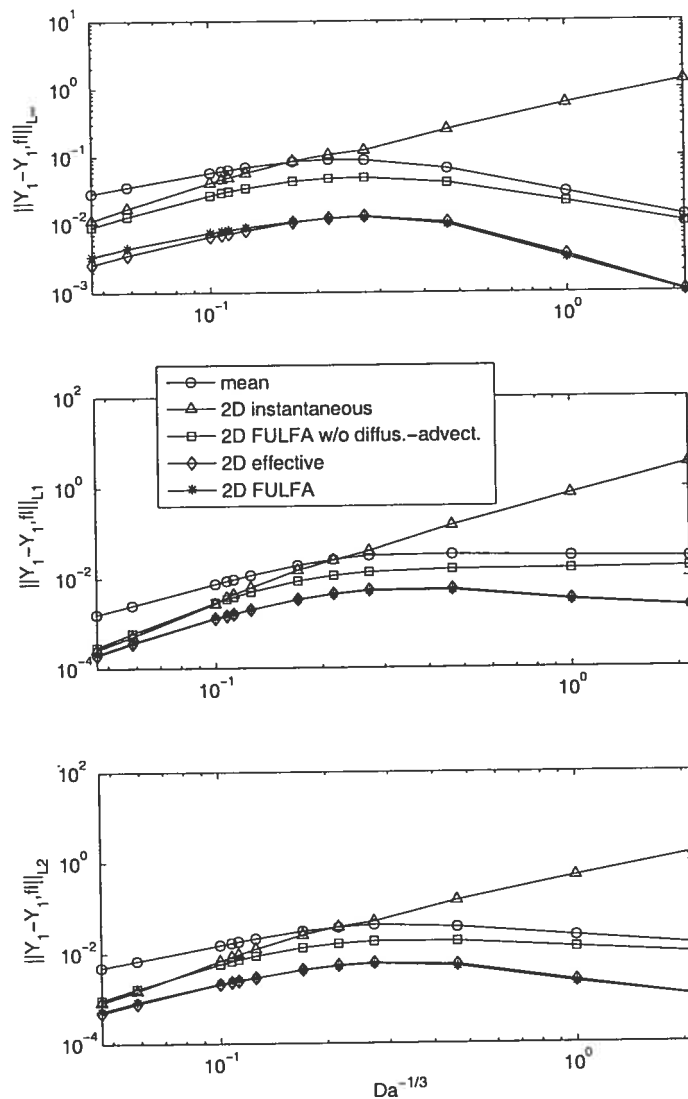


Fig. 3.8: Comparison of spatially-local (2D) models,  $Pe=100$ .

In this section, we perform a systematic analysis of flamelet model errors for a wide range of Péclet and Damköhler numbers. The analysis consists in comparing the direct simulation predictions and of the various flamelet models for the reactive scalars. The error is calculated with the spatial  $L_\infty$ ,  $L_1$  and  $L_2$  norms and its time evolution is recorded for one period after periodicity of the solution has been achieved. The reference direct computation is performed with a mesh of  $200 \times 100$  points for the  $(Z, y)$  coordinates. The analysis is done for Damköhler numbers

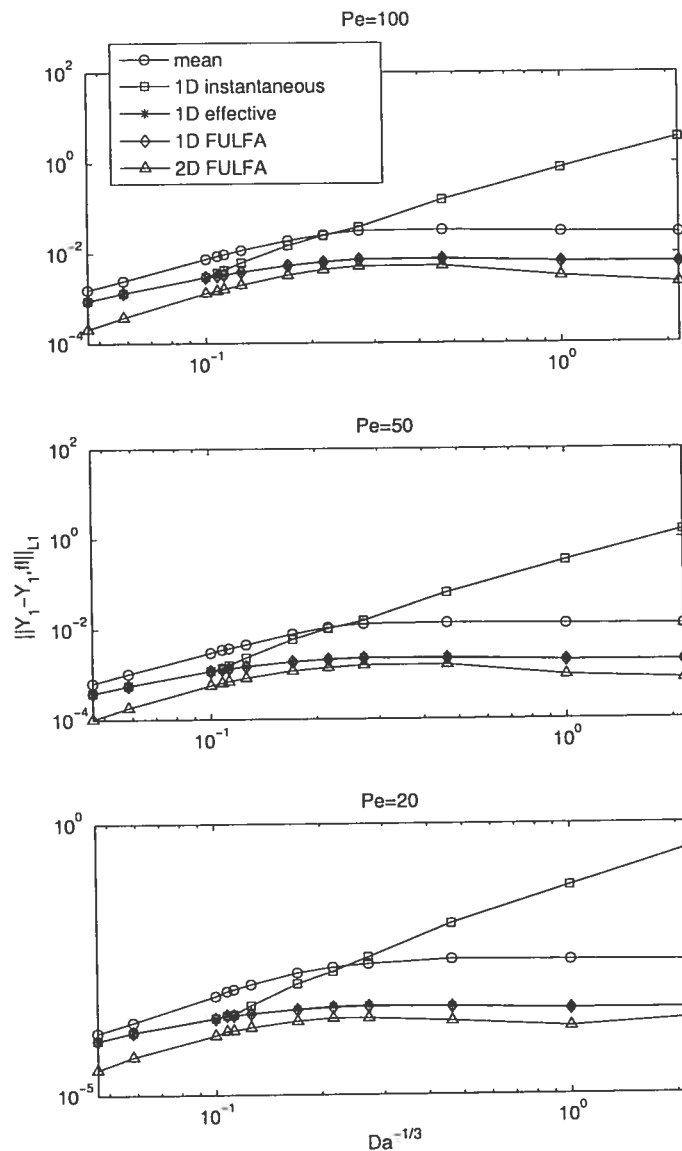


Fig. 3.9: Comparison of space-averaged (1D) models for different Pe numbers

varying between 0.1 and 10000, so that the transition between different flamelet models regimes can be observed. With the computational remapping in the  $(Z, y)$  coordinates, the numerical solution for the reactive scalar is very efficient. There are two regimes which are more challenging. For very low Damköhler numbers, the time to establish a periodic solution is rather slow, so an appropriate initial condition is necessary in order to attain the periodic result in a reasonable time.



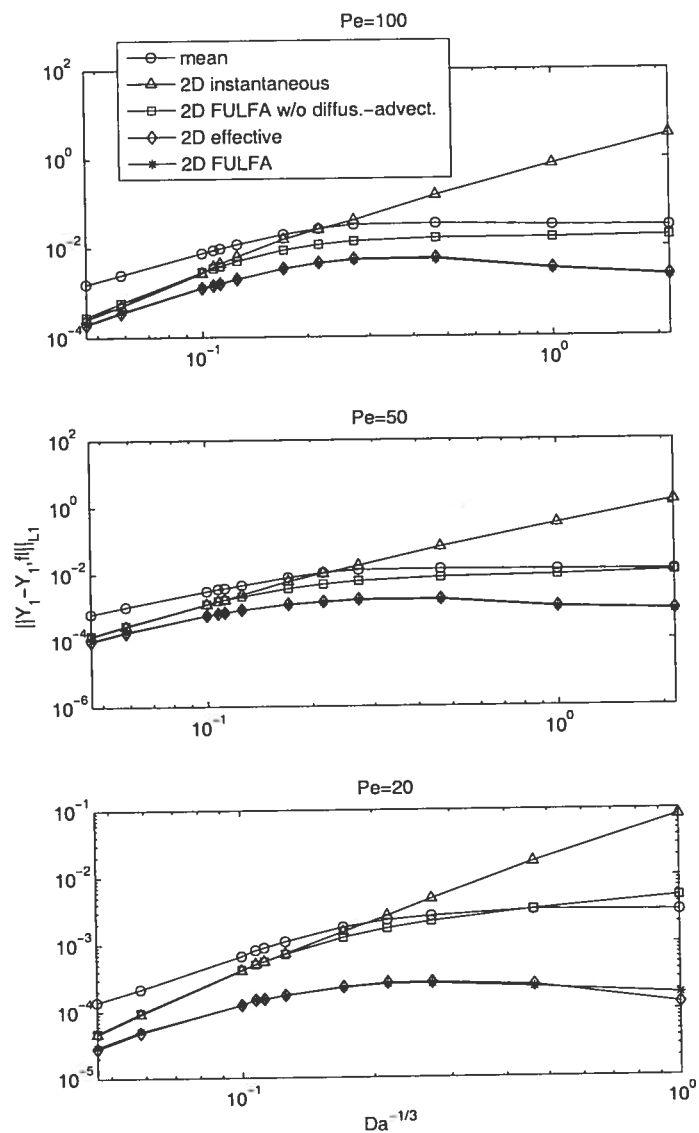


Fig. 3.10: Comparison of spatially-local (2D) models for different Pe numbers

In the case of high Damköhler numbers, the problem lies in the domain size. Since the reactive zone changes in inverse proportion to the cubic root of  $Da$ , a very fine mesh is needed. Lowering the size of the mesh however results in a similarly reduced time-step. Still, compared to full scale turbulent direct numerical simulations for the reactive Navier-Stokes equations, the computations here are very quick and exhaustive and systematic parametric studies are feasible. In the

present work, the simulations were performed with Péclet numbers equal to 5, 20, 50 and 100, sufficient to lead to an interesting temporal behavior.

The figures presented here show the behavior of the maximum error  $\|Y_1 - Y_1^n\|$  in one time-period, as a function of  $Da$ , for  $Pe = 100$  in Figure 3.7 and Figure 3.8, and for different  $Pe$  numbers in Figure 3.9 and Figure 3.10.

Figures 3.7 and 3.9 show the errors corresponding to the one-dimensional model, except for the bottom curve, presented there for reference, which is a fully multi-dimensional model. The key results are:

- The one-dimensional FULFA model error coincides with the 1D effective dissipation error for all values of  $Da$ . Recall that the effective dissipation is just a way of processing the direct numerical simulation results, assuming that the flame has everywhere a flamelet structure. Therefore, that the 2 curves coincide is a remarkable result: the one-dimensional FULFA model is the best model assuming a flamelet structure. Errors range between  $10^{-3}$  and  $10^{-4}$  for all  $Da$  numbers.
- The one-dimensional mean dissipation model and the one-dimensional instantaneous dissipation model both have errors which are larger, in some regimes significantly so, than the FULFA model.
- As expected, the one-dimensional mean dissipation model performs better than the instantaneous dissipation version for small  $Da$ . In that regime, the reaction is too slow to follow the rapid changes in the dissipation, responding instead to a time-period average value for it. As the  $Da$  increases (moving left in the figure), the error associated with that model increases, as the reaction rate increases. Eventually, the error decreases again at very high  $Da$  numbers, the flame thickness becomes very thin and the errors are concentrated in a zone which becomes a smaller fraction of space, where departure from trivial equilibrium becomes increasingly smaller in amplitude. The convergence rate of the error in that regime is  $Da^{-1/3}$  as expected [2].

- As expected also, the one-dimensional instantaneous dissipation model performs best at high  $Da$  numbers, and very poorly at small  $Da$ . The performance at large  $Da$  actually coincides with the one-dimensional FULFA model. Because of the space-averaging to obtain the one-dimensional model, the rate of convergence at large  $Da$  number is only of  $Da^{-1/3}$ , as it was the case for steady problems.

Figures 3.8 and 3.10 confirm for the spatially local models the trends observed with the space-averaged models. We next list the key findings for that class of models:

- The full multi-dimensional FULFA curve coincides with the effective dissipation curve. This means that the full multi-dimensional FULFA is the best possible flamelet model for the test-cases considered here.
- The FULFA model without advection and diffusion leads to larger errors. Asymptotically, that model behaves like the instantaneous dissipation model and the multi-dimensional FULFA model for large  $Da$  numbers and with the mean dissipation model at low  $Da$  numbers.
- The instantaneous dissipation model and the mean dissipation model behave roughly as for their one dimensional counterparts. The most noticeable difference is that the instantaneous dissipation model converges for large  $Da$  numbers with a rate of  $Da^{-2/3}$ , again this generalizes to unsteady cases the analysis for steady cases [2].

Figure 3.11 focusses on comparing the FULFA and the incomplete FULFA models. The incomplete model ignores the spatial derivatives in (3.3.7), i.e. particular flamelets corresponding to a fixed  $y$  are neither affected by diffusion nor transported by advection. It is a convenient model but the figure shows that because of the lack of advection the phase of the turbulent dissipation is wrongly captured when violent changes of instantaneous dissipation occur. For the same reason, without taking into account diffusion, the dissipation obtained with this model shown in Figure 3.8 has higher amplitudes than the complete one.

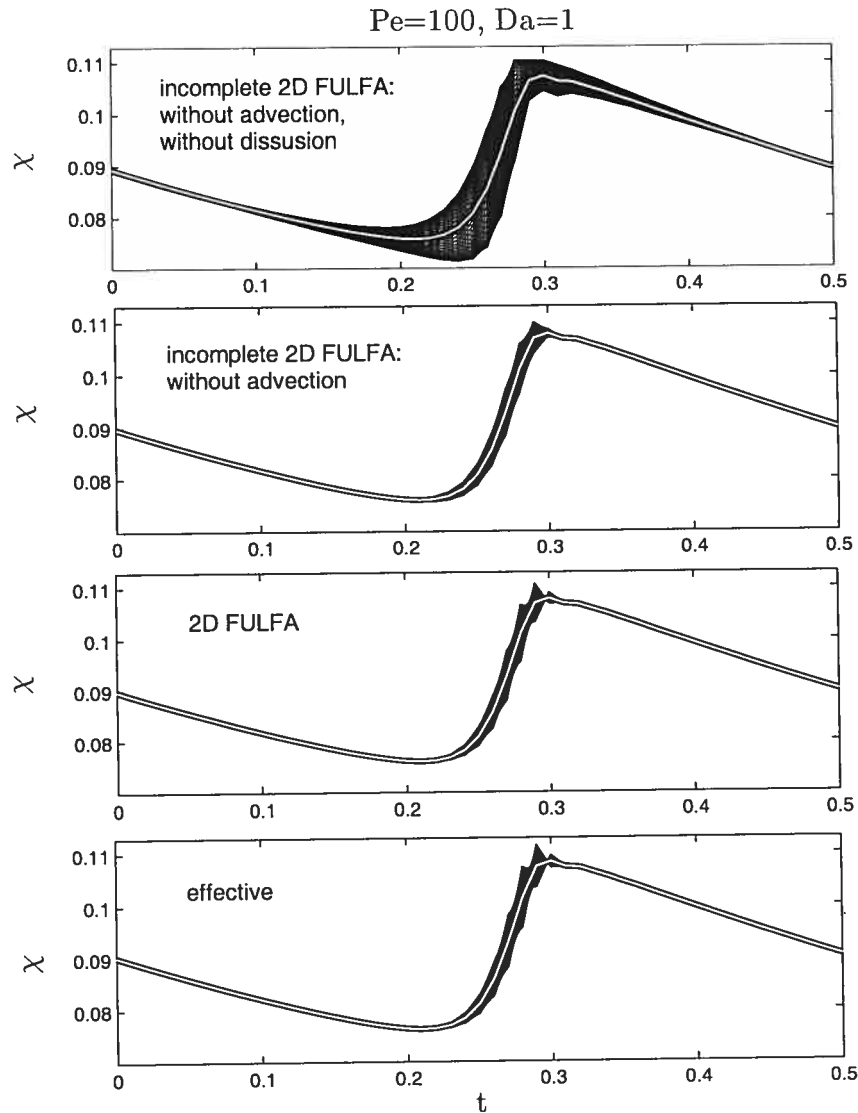


Fig. 3.11: Comparison of FULFA's  $\chi$ : with/without diffusion and advection

### 3.5. ASYMPTOTIC ANALYSIS

We have remarked from the previous figures the existence of a transition between two regimes where the curves corresponding to the mean dissipation model and the instantaneous dissipation model intersect. Another interesting transition corresponds to the junction where the spatially-local instantaneous flamelet becomes more relevant than the one-dimensional one. In this section, we perform an asymptotic analysis of the nature of the boundaries between those various regimes in terms of the Da, Pe numbers.

### 3.5.1. One-dimensional FULFA: Existence, uniqueness, and periodicity

We consider here the  $y$ -averaged FULFA scalar dissipation equation (3.3.6) in the form

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\chi_{\text{fulfa}}(t)}{\text{Da}} \right)^{2/3} = 2 \bar{Y}_{\text{fl}} \text{Da} \left( \frac{\chi_{\text{inst}}(t)}{\text{Da}} - \frac{\chi_{\text{fulfa}}(t)}{\text{Da}} \right) \quad (3.5.1)$$

where  $(\chi/\text{Da})^{1/3}$  is flamelet library scale number, linearly proportional to the flame thickness. Assume that  $\chi_{\text{inst}}(t)$  is a periodic non-trivial function with the period  $T$  and it is globally bounded for all  $t \in [t_0, t_0 + T]$ . We start with some preliminary results that will be useful in analyzing the asymptotic behavior of the FULFA model for the scalar dissipation:

- the solution of (3.5.1) is globally bounded, so that if  $m < \chi_{\text{fulfa}}(t_0) < M$  then  $m < \chi_{\text{fulfa}}(t) < M, \forall t \in [t_0, \infty]$  where  $m$  and  $M$  are used to denote respectively the infimum and the supremum of  $\chi_{\text{inst}}(t)$  on the interval  $[t_0, t_0 + T]$
- there exists an initial condition  $m < \chi_{\text{fulfa}}(t_0) < M$  such that (3.5.1) has a unique periodic solution

These results stem directly from the analysis given in [1], where for convenience we rewrite Equation (3.5.1) as follows:

$$x'(t) + g(x(t)) = f(t), \quad t \in [0, \infty) \quad (3.5.2)$$

$$\text{where } x(t) = \left( \frac{\chi_{\text{fulfa}}(t)}{\text{Da}} \right)^{2/3}, \quad g(x) = 2 \bar{Y}_{\text{fl}} \text{Da} x^{3/2}, \quad f(t) = 2 \bar{Y}_{\text{fl}} \chi_{\text{inst}}(t)$$

$g(x)$  is strictly increasing, continuous and satisfies Lipschitz condition for  $x > 0$ .

**THEOREM [1]** *Assume that  $g$  is increasing Lipschitz continuous, and  $f$  is  $T$ -periodic and continuous. Then equation (3.5.2) has a periodic solution if and only if  $\langle f \rangle := \frac{1}{T} \int_0^T f(t) dt \in \text{Range}(g)$  (there is  $x_0 \in \mathbb{R}$  such that  $\langle f \rangle = g(x_0)$ ). Moreover in this case we have the estimate*

$$\|x\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq |x_0| + \int_0^T |f(t) - \langle f \rangle| dt, \quad \forall x_0 \in g^{-1}(\langle f \rangle),$$

and the solution is unique if and only if

$$\text{diam}(g^{-1}\langle f \rangle) \leq \text{diam}(\text{Range} \int_0^T \{f(t) - \langle f \rangle\} dt)$$

PROPOSITION [1] *Assume that  $g$  is strictly increasing and  $f$  is periodic. Then there is at most one periodic solution for (3.5.2).*

### 3.5.2. One-dimensional FULFA: Asymptotic properties

- 1) If  $\chi_{\text{fulfa}}(t)$  is a periodic solution of (3.5.1), then  $\langle \chi_{\text{fulfa}}(t) \rangle = \langle \chi_{\text{inst}}(t) \rangle$ .  
Indeed, by integrating (3.5.1) over a period  $[t_0, t_0 + T]$ , the left hand side vanishes and the right hand side gives the expected statement.
- 2) In the limit,  $\text{Da} \rightarrow \infty$ ,  $\chi_{\text{fulfa}}(t) \rightarrow \chi_{\text{inst}}(t)$ . This follows trivially from (3.3.6).
- 3) Let  $\chi_{\text{fulfa}}(t)$  be a periodic solution of (3.5.1). In the limit,  $\text{Da} \rightarrow 0$ ,  $\chi_{\text{fulfa}}(t) \rightarrow \langle \chi_{\text{inst}}(t) \rangle$ . Indeed, if  $\text{Da} \rightarrow 0$  so does  $\partial_t \chi_{\text{fulfa}}(t)$ , and as a consequence  $\chi_{\text{fulfa}}(t)$  tends to its time-average value. By the property 1), this constant is equal to the time-average of the instantaneous scalar dissipation.

Suppose that all conditions are fulfilled so that the asymptotics defined as above exist. Define the errors with respect to the instantaneous and time-average scalar dissipations as functions of Damköhler and Péclet numbers:

$$\begin{aligned} E_{\text{inst}}(\text{Da}, \text{Pe}) &= \int_0^T |\chi_{\text{fulfa}}(t) - \chi_{\text{inst}}(t)| dt, \\ E_{\text{mean}}(\text{Da}, \text{Pe}) &= \int_0^T |\chi_{\text{fulfa}}(t) - \langle \chi_{\text{inst}}(t) \rangle| dt \end{aligned} \tag{3.5.3}$$

Then they have the following properties:

- They are monotone, continuous decreasing and increasing functions of  $\text{Da}$ ;  
 $\lim_{\text{Da} \rightarrow 0} E_{\text{inst}}(\text{Da}, \text{Pe}) = \lim_{\text{Da} \rightarrow \infty} E_{\text{mean}}(\text{Da}, \text{Pe})$ . The two functions are shown in Figure 3.12, along with the asymptotic slopes of  $\text{Da}^{\pm 2/3}$ , respectively.
- There exists a transition value  $\widetilde{\text{Da}}(\text{Pe})$  defining two distinct regimes such that  $E_{\text{inst}}(\widetilde{\text{Da}}, \text{Pe}) = E_{\text{mean}}(\widetilde{\text{Da}}, \text{Pe})$ . This point separates to the left, the

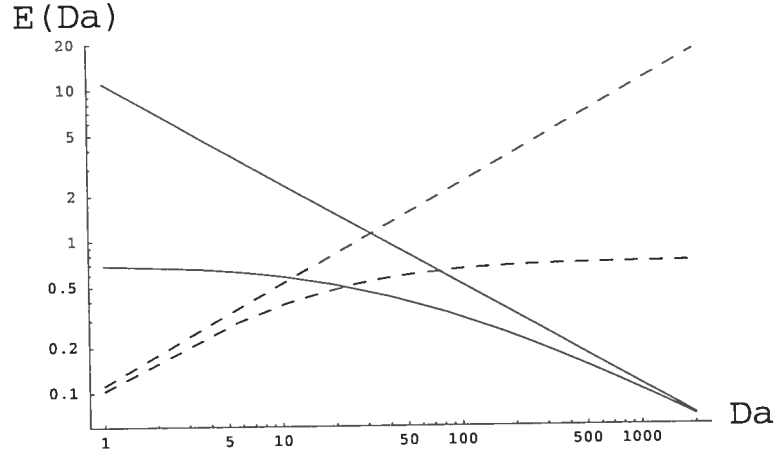


Fig. 3.12: Errors (3.5.3) for  $Pe = 100$  with the asymptotic slopes of  $Da^{\pm 2/3}$ : solid line –  $E_{inst}(Da)$ ; dashed line –  $E_{mean}(Da)$

regime where the behavior is essentially unsteady from the one to the right where it is essentially steady.

Figure 3.13 displays the boundary between the two regimes. For small  $Pe$  ( $< 5000$ ), it is obtained by processing the direct numerical simulation. For large  $Pe$  the direct numerical simulations become very costly and we have chosen to work with an asymptotic solution. It is known that for  $Pe \gg 1$  asymptotics, the stationary phase approximation leads to the following formula for the instantaneous dissipation amplitude [2]:

$$\chi_{inst}(t) = \frac{Pe \tau_p}{2 \pi L_g^2} \exp(-8 \pi^2 t) \quad \text{for } t \in [0, \tau_p/2]. \quad (3.5.4)$$

Using this formula, it is trivial to compute the corresponding partial FULFA solution (by numerically integrating the ODE (3.5.1)). Using it as reference, the errors corresponding to the one-dimensional mean dissipation and instantaneous dissipation can be estimated for very large  $Pe$ . One remarks that this asymptotic behavior for large  $Pe$  follows the  $Pe^{-1/2}$  dependence. This is quite understandable physically:  $Pe^{-1/2}$  is the inverse of the slowest time-scale associated with the advection, as observed around the burst of intermittency (see [3]). The observed boundary matches the condition that the chemical time-scale is of the same order as the slowest advection time-scale. For larger  $Da$ , the chemical time-scale is

shorter than the slowest advection time-scale and the response is fundamentally unsteady; for smaller  $Da$ , the chemical time-scale is longer than any advection time-scale so that assuming a steady response corresponding to the averaged condition is a reasonable approximation.

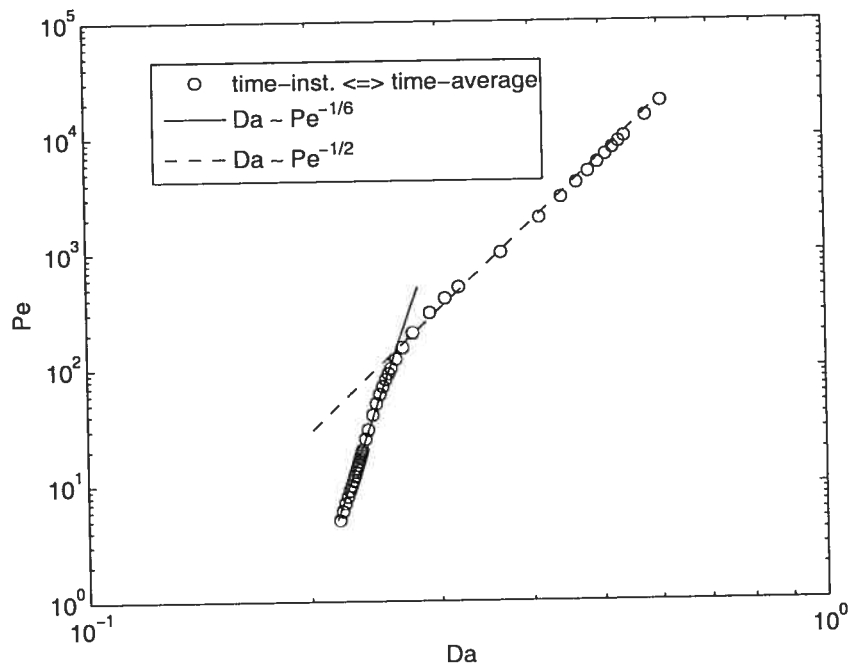


Fig. 3.13: Boundary separating the regime where the behavior of  $\chi_{\text{fulfa}}$  is essentially unsteady (left) from the one where its behavior is essentially steady (right)

Once the boundary is identified, let us investigate how the errors  $E_{\text{inst}}$  and  $E_{\text{mean}}$  behave inside these regions. The first one will help us to establish a criterion for the validity of the steady state assumption. The second one will be useful to identify the region where space-averaging is a sufficient subgrid closure for the non-linear reaction rate. Figure 3.14 shows the contours of the errors ( $E_{\text{inst}}$  on the left,  $E_{\text{mean}}$  on the right) together with the curves derived from the Steady Laminar Flamelet Model validity criterion of Mell et al. [7] and the criterion suggested by Pitsch et al. [10] based on the comparison of diffusion time with characteristic time-scales of the shear flow [3].

The Mell's criterion is used here in its quasi-steady form

$$Da_s^{-2/3} \frac{|\dot{\chi}_{\text{inst}}|}{\chi_{\text{inst}}^2} \ll 1 \sim \frac{Da_s^{-2/3}}{\chi_{\text{inst}}} \ll \frac{\chi_{\text{inst}}}{|\dot{\chi}_{\text{inst}}|}$$



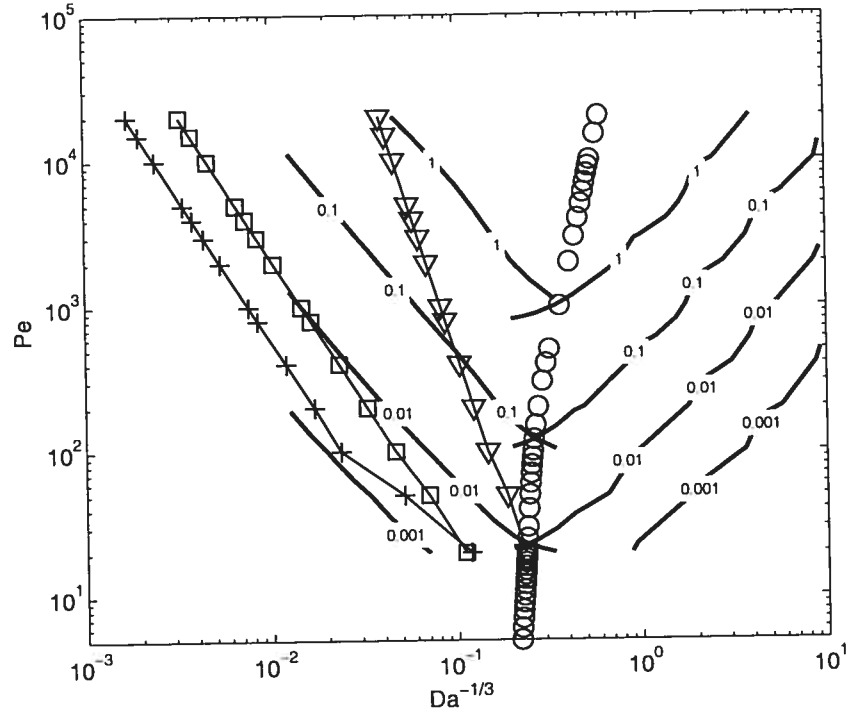


Fig. 3.14: Error gradients ( $E_{inst}$  on the left,  $E_{mean}$  on the right), + – Mell's criterion,  $\square$  – diffusion time vs. slow sweep time,  $\nabla$  – diffusion time vs. fast sweep time

where  $Da_s = Da/\chi_{inst}$  is a local Damköhler number (group). The equivalent right-hand side statement shows its connection to the criterion suggested in [10] and discussed in detail in [9]. According to [9],  $Da_s^{-2/3}/\chi_{inst}$  denotes the diffusion time that should be compared to some other characteristic time of the problem. In such case  $\chi_{inst}/|\dot{\chi}_{inst}|$  is a good candidate for describing the Lagrangian time (cross-marked line on the Figure 3.14). One can also define two characteristic time-scales related to the shear flow [3]: the fast sweep time  $\sim Pe^{-1}$  (triangle-marked curve) and the slow sweep time  $\sim Pe^{-1/2}$  (square-marked curve). Here are some remarks regarding these curves:

- (1) The curves show that the commonly used criteria are close to  $E_{inst} < 0.01$ .
- (2) The slow sweep time is more relevant since the regime that we consider here is mostly self-similar intermittent (the slow-sweep time less than 1, see [3]).

### 3.5.3. Multi-dimensional FULFA: Asymptotic properties

Similarly, one can investigate the phase boundaries in the Pe-Da phase space that corresponds to the point where the instantaneous dissipation model suddenly becomes much larger than the FULFA model. The  $y$ -dependent FULFA model obeys the equation (3.3.7), where the instantaneous dissipation is replaced in the present analysis by the stationary phase asymptotic formula. The regime transition boundary is identified by comparing the following differences:

$$E_1 = \int_0^1 \int_0^T |\chi_{\text{inst}}(t, y) - \chi_{\text{fulfa}}^{(3.3.7)}(t, y)| dt dy,$$

$$E_2 = \int_0^1 \int_0^T |\chi_{\text{fulfa}}^{(3.3.6)}(t) - \chi_{\text{fulfa}}^{(3.3.7)}(t, y)| dt dy.$$

The observed boundary (see Figure 3.15) mimics the results obtained in Section 3.4. For larger Da, flame thickness decreases with increasing Da and the spatially-local dissipation  $\chi_{\text{inst}}(t, y)$  tends to both the  $y$ -dependent FULFA and the effective one from the direct solution, see Figure 3.10. For medium Da (see the region between two boundaries in Figure 3.15), the behavior of  $\chi_{\text{fulfa}}$  is essentially  $y$ -averaged and this Da interval coincides with one where the spatially-local effective dissipation (by similarity with FULFA) follows closely the  $y$ -averaged solution, see Figure 3.9. Notice that, unlike the results of Section 3.4, these asymptotic results can be used for an unlimited range of values of Pe.

## 3.6. CONCLUSIONS

A validation procedure for unsteady flamelet models has been developed, based on the direct numerical computation of two-dimensional reactive flow. The complex interaction between diffusion, advection, and reaction is documented for a large range of Damköhler and Péclet numbers. The multi-dimensional analogue of the FULFA model is presented and is shown to be optimal by comparison with the flamelets calculated from direct simulations for large Péclet numbers. Precise boundaries for various limit regimes are established in the Da-Pe phase space, based on both extensive numerical data as well as asymptotic extrapolation at

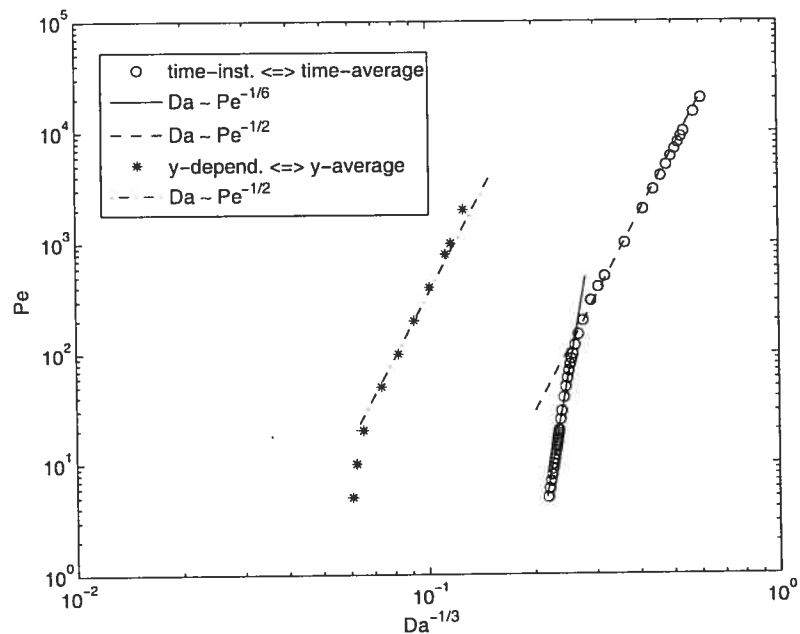


Fig. 3.15: Boundary (stars) separating the regime where the behavior of  $\chi_{\text{fulfa}}$  is essentially  $y$ -dependent (left) from the one where its behavior is essentially  $y$ -averaged (right) together with previously described phenomena (circles)

large  $Pe$ . As a result, criteria of validity for various limiting approximations are formulated, with an interpretation in terms of time-scales representative of the key physical mechanisms.

## REFERENCES

---

- [1] M. Bostan. Periodic solutions for evolution equations. *Electronic Journal of Differential Equations*, 3, 2002.
- [2] A. Bourlioux and A. Majda. An elementary model for the validation of flamelet approximation in non-premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 4(2):189–210, 2000.
- [3] A. Bourlioux and A. Majda. Elementary models with probability distribution function intermittency for passive scalars with a mean gradient. *Phys. Fluids*, 14(2):881–897, 2002.
- [4] B. Cuenot, F.N. Egolfopoulos, and T. Poinsot. An unsteady laminar flamelet model for non-premixed combustion. *Combust. Theory Modelling*, 4:77–97, 2000.
- [5] F.N. Egolfopoulos. Structure and extinction of unsteady, counterflowing, strained, non-premixed flames. *Int. J. Energy Res.*, 24:989–1010, 2000.
- [6] A.R. Kerstein. Turbulence in combustion processes: modeling challenges. In *Proceedings of the Combustion Institute*, number 29 in Proceedings, pages 1763–1773, 2002.
- [7] W.E. Mell, V. Nilsen, G. Kosaly, and J.J. Riley. Investigation of closure models for nonpremixed turbulent reacting flows. *Phys. Fluids*, 6:1331–1358, 1994.
- [8] A.R. Mitchell and D.F. Griffiths. *The finite difference method in partial differential equations*. Wiley & Sons, London, 1980.
- [9] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [10] H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, 1998.
- [11] H. Pitsch, Y.P. Wan, and N. Peters. Numerical investigation of soot formation and oxidation under diesel engine conditions. Technical Report 952357, SAE, 1995.

- [12] S. Rao and C.J. Rutland. A flamelet time scale model for non-premixed combustion including chemical kinetic effects. *Combust. Flame*, 133:189–191, 2003.

## DÉCLARATION DES COAUTEURS D'UN ARTICLE

### Identification l'étudiant et du programme:

Oleg Volkov

Ph.D. en Mathématiques Appliquées

### Description de l'article:

Auteurs :

Oleg Volkov

Anne Bourlioux

Titre :

A grid-free time-space adaptive method for advection-reaction-diffusion problems

Journal :

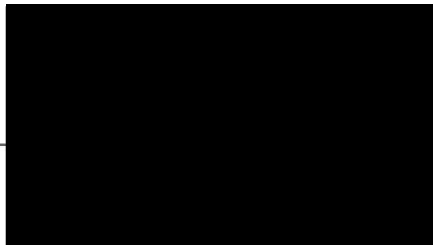
Journal of Computational Physics

### Déclaration de tous les coauteurs autres que l'étudiant:

À titre de coauteur de l'article identifié ci-dessus, je suis d'accord pour que Oleg Volkov inclue cet article dans sa thèse de doctorat qui a pour titre "Validation des modèles de flammelettes instationnaires en combustion turbulente non-prémélangée"

Anne Bourlioux

Coauteur



3/7/2005

Date

## Chapitre 4

---

# INTÉGRATEUR SANS MAILLAGE, ADAPTATIF DANS LE TEMPS ET L'ESPACE APPLIQUÉ AUX SYSTÈMES D'ADVECTION-RÉACTION-DIFFUSION

### RÉSUMÉ

On présente dans ce chapitre une nouvelle méthode numérique à pas de temps et d'espace adaptatifs pour résoudre les systèmes d'équations aux dérivées partielles de type d'advection-réaction-diffusion. Cette approche est fondée sur une méthode à pas fractionnaires dans laquelle l'ordre élevé est obtenu grâce à une stratégie de type MISDC (*Multi-Implicit Spectral Deferred Correction*). La formulation lagrangienne est employée pour résoudre l'advection, tandis qu'une méthode multipôles rapide est utilisée pour résoudre la diffusion et pour redistribuer sans erreur d'interpolation les traceurs lagrangiens transportés par le flot. Des cas-tests de performance en termes d'adaptivité et de précision sont rapportés, issus du contexte physique de la combustion turbulente non-prémélangée.

## A grid-free space-time adaptive method for advection-reaction-diffusion problems

**Abstract** A new numerical grid-free space-time adaptive method for solving an advective-diffusive-reactive partial differential equation is presented here. It is based on an operator splitting approach, where high-order accuracy is achieved using the Multi-Implicit Spectral Deferred Correction strategy. Advection is handled with a Lagrangian approach, while a Fast Multipole method is used for both the diffusion operator and for the remapping that follows the Lagrangian transport. A systematic validation is carried out for the performance of the method in terms of adaptivity and accuracy, with test-cases motivated by problems in nonpremixed turbulent flames.



## 4.1. INTRODUCTION

We present here a high-order accurate method for the numerical solution of an advection-reaction-diffusion partial differential equation. The method is a deterministic particle (grid-free) method, and it is adaptive in space and time. It is based on a splitting strategy, where each operator is discretized using an unconditionally stable, first order accurate scheme. Spectral deferred correction (SDC) is used to achieve high-order in time by performing cycles of corrections that improve both the intrinsic order of each operator as well as the splitting error. Advection is handled via a Lagrangian formulation followed by a remapping onto a fixed set of nodes. Diffusion is discretized using the backward Euler scheme in time. This transforms the heat equation into a Helmholtz equation, which is solved with a fast multipole (FMM) solver. A novel strategy is proposed that utilizes the FMM solver to avoid the usual interpolation error in the remapping step that follows the Lagrangian transport of the particles. The reaction step is also discretized using the unconditionally stable backward Euler formula.

The motivating application is the computation of idealized models for turbulent nonpremixed flames with a focus on time intermittency and unsteady effects. Adaptivity is needed in space to focus the computational resources on the reaction zone. Time-accuracy is important because of intermittency; time-stepping with the proposed scheme is entirely controlled by accuracy, as it is unconditionally stable.

Spectral deferred correction schemes were introduced in [7]. Their use in the context of operator splitting was proposed in [3] with further developments in [9]. The combination of this strategy with the FMM solver for Helmholtz equation has many advantages, as it combines the flexibility and accuracy of the FMM solver in space and the simplicity and high order time accuracy of the split SDC strategy. In the next section, we summarize the SDC strategy and its generalization to split schemes and to time adaptivity. In Section 3, the application to advection-reaction-diffusion problems is outlined. All test-cases for the validation of the method are based on the application to turbulent non-premixed flames - some background on this application is given in Section 4, preceding the systematic

validation of the method in Section 5 (for the preliminary one-dimensional case) and Section 6 (for the more physically relevant two-dimensional case).

## 4.2. SPECTRAL DEFERRED CORRECTION, SPLITTING ERRORS AND TIME-STEP ADAPTIVITY

### 4.2.1. Basic principle

Consider the initial value problem in the standard form:

$$\dot{Z}(t) = F(t, Z(t)), \quad t \in (0, T) \quad (4.2.1)$$

with initial data  $Z(0) = Z^0$ . Let  $0 = t_0 < t_1 < t_2, \dots < t_{N-1} < t_N = T$ , for  $n = 0, 1, 2, \dots$ , be the discretization of the time interval  $[0, T]$ . Integrating Equation (4.2.1) on the interval  $[t_n, t]$  leads to the equivalent integral form of the equation

$$Z(t) = Z^n + \int_{t_n}^t F(\tau, Z(\tau)) d\tau \quad (4.2.2)$$

where  $Z^n$  represents the solution at time  $t^n$ . Suppose that we have already found an approximate solution  $Z^{[0]}(t)$ . Define the correction  $\delta(t) = Z(t) - Z^{[0]}(t)$ . Equation (4.2.2) can be rewritten in terms of  $\delta(t)$ :

$$Z^{[0]}(t) + \delta(t) = Z^n + \int_{t_n}^t F(\tau, Z^{[0]}(\tau) + \delta(\tau)) d\tau \quad (4.2.3)$$

Define the residual function corresponding to the approximation  $Z^{[0]}(t)$  as:

$$E(t, Z^{[0]}[t_n, t]) = Z^n + \int_{t_n}^t F(\tau, Z^{[0]}(\tau)) d\tau - Z^{[0]}(t) \quad (4.2.4)$$

With the notation

$$I(t, Z^{[0]}[t_n, t]) = \int_{t_n}^t F(\tau, Z^{[0]}(\tau)) d\tau \quad (4.2.5)$$

the residual can also be expressed as  $E(t, Z^{[0]}[t_n, t]) = Z^n + I(t, Z^{[0]}[t_n, t]) - Z^{[0]}(t)$ . Substituting the expression for the residual in (4.2.3) leads to the following form

of the equation for the correction:

$$\delta(t) = \int_{t_n}^t [F(\tau, Z^{[0]}(\tau) + \delta(\tau)) - F(\tau, Z^{[0]}(\tau))] d\tau + E(t, Z^{[0]}[t_n, t]) \quad (4.2.6)$$

The spectral deferred correction strategy is a numerical implementation of the ideas above. Its objective is to improve the accuracy of a provisional solution. In the numerical version, the provisional solution of Equation (4.2.2) is obtained using the implicit Euler (backward Euler) method.

$$Z^{n+1, [0]} = Z^n + \Delta t_n F^{n+1}(Z^{n+1, [0]}), \quad \Delta t_n = t_{n+1} - t_n \quad (4.2.7)$$

This scheme is unconditionally stable but only first order in time. An improved solution is computed by solving the correction equation in (4.2.6). Again, the implicit Euler method is used:

$$\delta^{n+1} = \Delta t_n [F^{n+1}(Z^{n+1, [0]} + \delta^{n+1}) - F^{n+1}(Z^{n+1, [0]})] + E^{n+1}(Z^{[0]}) \quad (4.2.8)$$

where  $E^{n+1}(Z^{[0]})$  is a numerical approximation to  $E(t_{n+1}, Z^{[0]}[t_n, t_{n+1}])$ , see below. We can also rewrite (4.2.8) directly in terms of the corrected solution  $Z^{n+1, [1]} = Z^{n+1, [0]} + \delta^{n+1}$ :

$$Z^{n+1, [1]} = Z^n + \Delta t_n F^{n+1}(Z^{n+1, [1]}) + E^{n+1}(Z^{[0]}) \quad (4.2.9)$$

or in the equivalent form:

$$Z^{n+1, [1]} = Z^n + \Delta t_n [F^{n+1}(Z^{n+1, [1]}) - F^{n+1}(Z^{n+1, [0]})] + I^{n+1}(Z^{[0]}) \quad (4.2.10)$$

where  $I^{n+1}(Z^{[0]})$  is a numerical approximation, as needed in estimating  $E^{n+1}(Z^{[0]})$ . This improved solution has second order accuracy. One observes that the correction cycle is identical to the original problem, except for the corrected data  $Z^{n, [0]} + E^{n+1}(Z^{[0]})$ .

The  $k$ th order SDC algorithm based on the above ideas is now described, including the procedure to compute the residual  $E^{n+1}(Z^{[0]})$  (see [7] for details).

- (1) given the solution  $Z^n$  at time  $t_n$ , use the backward Euler formula to compute successively the  $k$  provisional solutions  $Z^{n+1, [0]}, Z^{n+2, [0]}, \dots, Z^{n+k, [0]}$ ;

- (2) let  $P_F(t)$  be the polynomial of order  $k - 1$  that interpolates  $F(t, Z^{[0]}(t))$  at the data points  $(t_{n+j}, Z^{n+j,[0]})$ , with  $j = 1, \dots, k$ . Use this polynomial to estimate the integrals  $I^{n+j}$  needed in the correction cycle:

$$I^{n+j} = \int_{t_{n+j-1}}^{t_{n+j}} P_F(\tau) d\tau$$

for  $j = 1, \dots, k$ ;

- (3) compute the corrected solution using the expression in (4.2.10) (or in (4.2.9)).

$$Z^{n+1,[1]} = Z^n + \Delta t_n [F^{n+1}(Z^{n+1,[1]}) - F^{n+k}(Z^{n+1,[0]})] + I^{n+1}(Z^{[0]})$$

$$Z^{n+2,[1]} = Z^{n+1,[1]} + \Delta t_{n+1} [F^{n+2}(Z^{n+2,[1]}) - F^{n+k}(Z^{n+2,[0]})] + I^{n+2}(Z^{[0]})$$

...

$$Z^{n+k,[1]} = Z^{n+k-1,[1]} + \Delta t_{n+k-1} [F^{n+k}(Z^{n+k,[1]}) - F^{n+k}(Z^{n+k,[0]})] + I^{n+k}(Z^{[0]})$$

- (4) repeat steps 2 and 3 for a total of  $k - 1$  correction cycles for the times  $t_{n+j}$ ,  $j = 1, \dots, k$ , where at cycle  $l$ ,  $Z^{n+j,[l-1]}$  is now the provisional solution, used to compute the improved solution  $Z^{n+j,[l]}$  (steps 2 and 3 above were written for the case  $l = 1$ ).

After  $l$  correction cycles, the solutions  $Z^{n+j,[l]}$ ,  $j = 1, \dots, k$  are of order  $l + 1$ , see [7] for a detailed analysis.

#### 4.2.2. Splitting

Consider now a problem where  $F$  consists of the sum of two operators  $F = F_1 + F_2$ . It is often convenient to numerically integrate each operator separately. The basic operator splitting approach consists in replacing the integral form:

$$Z(t) = Z^n + \int_{t_n}^t [F_1(\tau, Z(\tau)) + F_2(\tau, Z(\tau))] d\tau \quad (4.2.11)$$

by the sequence

$$\begin{aligned} Z_1(t) &= Z^n + \int_{t_n}^t F_1(\tau, Z_1(\tau)) d\tau \\ Z(t) &= Z^n + \int_{t_n}^t [F_1(\tau, Z_1(\tau)) + F_2(\tau, Z(\tau))] d\tau = Z_1(t) + \int_{t_n}^t F_2(\tau, Z(\tau)) d\tau \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

As before, the numerical implementation of those integral formulas will be based on the backward Euler formula.

$$\begin{aligned} Z_1^{n+1,[0]} &= Z^n + \Delta t_n F_1^{n+1}(Z_1^{n+1,[0]}) \\ Z^{n+1,[0]} &= Z^n + \Delta t_n \left[ F_1^{n+1}(Z_1^{n+1,[0]}) + F_2^{n+1}(Z^{n+1,[0]}) \right] \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

Whatever the numerical scheme used to discretize (4.2.12), the numerical solution  $Z^{n+1,[0]}$  will have two sources of errors: the basic discretization error due to the numerical approximation of the integrals, for example with the Euler scheme as above, and the splitting error due to the fact that one uses  $F_1(t, Z_1(t))$  instead of  $F_1(t, Z(t))$  in the second step of (4.2.12). Typically, unless the operators associated with  $F_1$  and  $F_2$  commute, this error is of order one in time, regardless of the integration errors [11]. The multi-implicit spectral deferred correction method (MISDC), [3] achieves high-order accuracy by simultaneously reducing splitting and integration errors during the deferred correction iterations. By analogy with (4.2.6) the error  $\delta(t)$  can be computed as follows:

$$\begin{aligned} \delta_1(t) &= \int_{t_n}^t [F_1(\tau, Z^{[0]}(\tau) + \delta_1(\tau)) - F_1(\tau, Z^{[0]}(\tau))] d\tau + E(t, Z^{[0]}[t_n, t]) \\ \delta(t) &= \delta_1(t) + \int_{t_n}^t [F_2(\tau, Z^{[0]}(\tau) + \delta(\tau)) - F_2(\tau, Z^{[0]}(\tau))] d\tau \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

where  $E(t, Z^{[0]}(t))$  is defined for the non-split case. Numerically, the procedure is a straightforward generalization of the non-split case. Again, the implicit Euler scheme is used:

$$\begin{aligned} \delta_1^{n+1} &= \Delta t_n [F_1^{n+1}(Z^{n+1,[0]} + \delta_1^{n+1}) - F_1^{n+1}(Z^{n+1,[0]})] + E^{n+1}(Z^{[0]}) \\ \delta^{n+1} &= \delta_1^{n+1} + \Delta t_n [F_2^{n+1}(Z^{n+1,[0]} + \delta^{n+1}) - F_2^{n+1}(Z^{n+1,[0]})] \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

or in terms of the corrected solution  $Z_1^{n+1,[1]} = Z^{n+1,[0]} + \delta_1^{n+1}$  and  $Z^{n+1,[1]} = Z^{n+1,[0]} + \delta^{n+1}$

$$\begin{aligned} Z_1^{n+1,[1]} &= Z^n + \Delta t_n [F_1^{n+1}(Z_1^{n+1,[1]}) - F_1^{n+1}(Z^{n+1,[0]})] + I^{[n+1]}(Z^{[0]}) \\ Z^{n+1,[1]} &= Z_1^{n+1,[1]} + \Delta t_n [F_2^{n+1}(Z^{n+1,[1]}) - F_2^{n+1}(Z^{n+1,[0]})] \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

As in the non-split case,  $E^{[n+1]}(Z^{[0]})$  is obtained using a polynomial interpolation of  $F(t, Z^{[0]}(t))$ . Here,  $F$  is the sum of two operators and is computed as  $F(t, Z^{[0]}(t)) = F_1(t, Z^{[0]}(t)) + F_2(t, Z^{[0]}(t))$ . An important remark is that the

operator  $F_1$  must be applied to  $Z^{[0]}(t)$  and not to the partial solution  $Z_1^{[0]}(t)$ , even though it would be tempting to use  $F_1(Z_1^{[0]})$  as it is readily available from solving the first equation in (4.2.16). However, doing so would neglect a leading order contribution to the splitting error.

### 4.2.3. Adaptive time-step control

Because the spectral deferred correction proceeds with the computation of a series of errors and corrections, it is a very natural framework within which to implement time adaptivity, in which one adjusts the time-step to enforce some tolerance on the errors. We propose the following strategy for time-step adjustment. Within one SDC cycle of  $k - 1$  correction sub-cycles at a set of  $k$  time-steps, a fixed time-step is used. A convenient error estimator is the norm of the correction from the last SDC sub-cycling:

$$\varepsilon(Z^{n+k}) = \|Z^{n+k, [k-1]} - Z^{n+k, [k-2]}\|$$

Because the error is obtained as the difference between  $Z^{n+k, [k-2]}$ , a  $(k - 1)^{\text{th}}$  order solution, and  $Z^{n+k, [k-1]}$ , a  $k^{\text{th}}$  order solution, it is basically an estimate of the error of the order  $(k - 1)^{\text{th}}$  method, this will influence the strategy for time-step adjustment that follows. Based on the magnitude of the error estimator, one selects one of the following four options:

- (1)  $\varepsilon(Z^{n+k})$  too large: the current cycle of SDC iterations should be repeated with a reduced time-step:

$$\text{if } 4\tau < \varepsilon(Z^{n+k}), \quad \Delta t_{\text{new}} = \Delta t_{\text{old}} \left( \tau / \varepsilon(Z^{n+k}) \right)^{\frac{1}{k-1}}$$

where  $\tau = \max(\tau_{\text{abs}}, \tau_{\text{rel}} \|Z^{n+k, [l+1]}\|)$  is the prescribed tolerance;

- (2)  $\varepsilon(Z^{n+k})$  moderately large: we continue on to the next cycle of SDC iterations with the time-step reduced according to

$$\text{if } \tau < \varepsilon(Z^{n+k}) < 4\tau, \quad \Delta t_{\text{new}} = \Delta t_{\text{old}} \left( \tau / \varepsilon(Z^{n+k}) \right)^{\frac{1}{k-1}};$$

- (3)  $\varepsilon(Z^{n+k})$  is small : we continue with a time-step increased according to

$$\text{if } \Theta\tau > \varepsilon(Z^{n+k}), \quad \Delta t_{\text{new}} = \Delta t_{\text{old}} \min \left( \theta_{\text{max}}, \left( \tau / \varepsilon(Z^{n+k}) \right)^{\frac{1}{k-1}} \right)$$

where  $\Theta < 1$  is the minimum error adjustment cut-off, and  $\theta_{\max} = 3$  is a prescribed maximum time-step ratio introduced to avoid large fluctuations in the time-step.

(4) otherwise, continue on to the next cycle with the current time-step.

### 4.3. ADVECTION-REACTION-DIFFUSION SYSTEMS

We describe now the application of the adaptive MISDC strategy to the solution of an advection-reaction-diffusion equation:

$$\partial_t Y(t, \mathbf{x}) + \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla Y(t, \mathbf{x}) = \Delta Y(t, \mathbf{x}) + F_R(Y(t, \mathbf{x})) \quad (4.3.1)$$

A MISDC strategy for this type of problem was described in [3], where advection was treated explicitly, and reaction and diffusion implicitly. Spatial discretization was done using finite differences on a regular grid. The algorithm presented here is significantly different. It is designed so that one can easily implement spatial and temporal adaptivity. The key idea is to go to a particle based approach, using a Lagrangian formulation to handle the advection, and a Fast Multipole Method to handle diffusion. This transforms the partial differential equation into a system of ordinary differential equations, so that the MISDC time integration strategy described in the previous section can be applied in a straightforward fashion. Here are more details on two of the key ingredients of the proposed strategy:

- **Lagrangian transport** In this formulation, the solution of (4.3.1) is given at a set of indexed particles ( $i$ ), with  $\mathbf{X}_{(i)}$  the position and  $Y_{(i)}(t)$  the value of  $Y(t, \mathbf{X}_{(i)})$ . The particles are transported with the flow so that their positions  $\mathbf{x}_{(i)}(t)$  can be found by integrating the system of ODEs  $\dot{\mathbf{x}}_{(i)} = \mathbf{v}(t, \mathbf{x}_{(i)})$ ,  $\mathbf{x}_{(i)}(0) = \mathbf{X}_{(i)}$ . In the new Lagrangian coordinate system, Equation (4.3.1) becomes:

$$D_t Y_{(i)}(t) = \Delta Y_{(i)}(t) + F_R(Y_{(i)}(t)) \quad (4.3.2)$$

where  $D_t$  denotes the Lagrangian derivative in time. The computational advantage of this formulation is clear, the advective step disappears from splitting and is reduced to solving a system of ODEs for  $\mathbf{x}_{(i)}(t)$ , which

is a fairly straightforward numerical task. Unlike most explicit advection discrete operators, there is no CFL-type stability restriction on the time-step, it is only limited by accuracy. Nevertheless, there is a drawback in transporting the particles with the flow, since they might aggregate in parts of the domain of little interest, so that accuracy could deteriorate in other areas. To remedy this, we will remap the solution onto a prescribed set of particle positions (either the original one  $\mathbf{X}_{(i)}$  or a spatially adapted one). Typically, such remapping implies some form of interpolation for the solution, which has been shown to potentially result in excessive numerical diffusion [1].

As an alternative, we propose here to exploit the flexibility of the FMM solver to perform the remapping, see below.

- **Diffusion and remapping via FMM** Applying the backward Euler method to the heat equation:

$$\partial_t Y = D \Delta Y$$

leads to the following equation:

$$\Delta Y_{(i)}^{n+1} - \lambda^2 Y_{(i)}^{n+1} = f \quad (4.3.3)$$

where  $\lambda^2 = 1/(D \Delta t)$  and  $f = -\lambda^2 Y^n$ . This is an inhomogeneous Helmholtz equation. Details on how to use the fast multipole method to solve it can be found in [6]. In the absence of physical boundaries, the solution is given analytically by the integral

$$Y^{n+1}(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\Omega} f(y) K_0(\lambda \|x - y\|) dy \quad (4.3.4)$$

where  $K_0$  is the kernel of the Helmholtz operator. Given a discrete set of input points  $y \in \Omega$  for which the right hand side  $f(y)$  is available, the FMM solver utilizes a very efficient strategy to estimate the integral in (4.3.4) at a prescribed set of output points  $x \in \Omega$ . Notice that  $x$  and  $y$  do not have to coincide. We will exploit this feature to remap the



Lagrangian nodes onto a fixed (or adapted) set of nodes. Our numerical implementation is build around the publicly available FMM Toolbox (2D) [8] for MATLAB<sup>®</sup>.

#### 4.3.1. MISDC implementation

We will now describe how to combine those ideas with the MISDC strategy to solve an advection-reaction-diffusion equation. Given at time  $t^n$  the positions  $\mathbf{X}_i$  and corresponding solution values  $Y_i^n$ , we used the notation  $\tilde{Y}_{(i)}(t)$  to denote the solution (or approximate solution) in the Lagrangian framework for the particle  $(i)$  with coordinates  $\mathbf{x}_{(i)}(t)$  at time  $t$ . The algorithm is as follows:

- **Step 1:** use a high accuracy ODE solver to integrate the particle positions at times  $t_{n+j}$ ,  $j = 1, 2, \dots, k$ . This step is entirely decoupled from the rest of the computations in this cycle. An appropriate time-step should be used to guarantee sufficient accuracy. This is a fairly straightforward computation: standard ODE solvers should work.
- **Step 2:** obtain a provisional first order solution using a basic split scheme for Equation (4.3.2).

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} = Y_{(i)}^n + \Delta t F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[0]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} + \Delta t F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[0]}) \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} = \tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[0]} + \Delta t F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[0]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} + \Delta t F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[0]}) \end{array} \right\}$$

...

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} = \tilde{Y}_{(i)}^{n+k-1,[0]} + \Delta t F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[0]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]} + \Delta t F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[0]}) \end{array} \right\}$$

where  $F_D$  denotes the diffusion operator and  $F_R$  denotes the reaction operator. Typically, the reactive operator  $F_R$  is nonlinear and the solution of the reaction step requires a few Newton iterations for convergence. The diffusion operator is solved using the FMM solver as explained before. For each  $t_{n+j}$ , save the values of  $F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+j,[0]})$  (obtained as the difference  $(\tilde{Y}_{(i)}^{n+j,[0]} - \tilde{Y}_{(i)}^{R,[0]})/\Delta t$ ) from the diffusion step) and  $F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+j,[0]})$  (this is need to be computed after the diffusion step is completed).

- **Step 3:** perform the  $l = 1, \dots, k - 1$  correction cycles. Use the saved discrete values for the two operators to compute the residuals via a polynomial interpolation as before.

$$\begin{cases} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} = Y_{(i)}^n + \Delta t \left[ F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]}) - F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l-1]}) \right] + I^{n+1}(\tilde{Y}^{[l-1]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} + \Delta t \left[ F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l]}) - F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l-1]}) \right] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} = \tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l]} + \Delta t \left[ F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]}) - F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[l-1]}) \right] + I^{n+2}(\tilde{Y}^{[l-1]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[l]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} + \Delta t \left[ F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[l]}) - F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+2,[l-1]}) \right] \end{cases}$$

...

$$\begin{cases} \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} = \tilde{Y}_{(i)}^{n+k-1,[l]} + \Delta t \left[ F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]}) - F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l-1]}) \right] + I^{n+k}(\tilde{Y}^{[l-1]}) \\ \tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l]} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[l]} + \Delta t \left[ F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l]}) - F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l-1]}) \right] \end{cases}$$

Again, after each iteration  $[l]$ , we compute  $F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l]})$ ,  $\dots$ ,  $F_R(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l]})$  and we save  $F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+1,[l]})$ ,  $\dots$ ,  $F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[l]})$  to be used for the computation of the residuals for the next sub-cycle.

- **Step 4:** At the very last step (i.e., at time  $t^{n+k}$ ) of the last correction cycle  $l = k - 1$ , do not perform the last diffusion step as above, instead, remap the solution at the diffusion sub-step onto the coordinates  $\mathbf{X}_{(i)}$  according to:

$$Y_{(i)}^{n+k} = \tilde{Y}_{(i)}^{R,[k-1]} + \Delta t (F_D(Y_{(i)}^{n+k}) - F_D(\tilde{Y}_{(i)}^{n+k,[k-2]}))$$

After this iteration, one has obtained a  $k$ th order time-accurate value for  $Y_{(i)}^{n+k}$ . With this strategy, the remapping of the solution fully exploits the FMM solver capability, resulting in no extra cost nor the extra numerical interpolation errors which typically plague semi-Lagrangian methods.

**Remark:** for ease of implementation, it is imperative here to start the cycle with the reactive step and finish it with the diffusive step:

- (1) To perform the MISDC algorithm, one needs to evaluate each of the operators for the complete solution at the end of each time step. Given a solution, it is trivial to evaluate the reactive operator, but it is not the case for the diffusive operator via the FMM solver: it can only be estimated

as the difference in the solution before and after the solver is applied. Therefore, diffusion must be the last step.

- (2) Remapping is performed via the FMM solver for the diffusion operator, as described above. It is much easier to manage if it is performed at the very end of a cycle, rather than in the middle of the process, where it could interfere with the correction sub-cycling.

#### 4.4. APPLICATION: NON-PREMIXED COMBUSTION

One important application of advection-reaction-diffusion equations is the modelling of idealized combustion problems. This Section contains a short introduction to set the stage for the validation test-cases used in the rest of the paper. The objective is to understand the dynamics of an idealized model for a non-premixed flame, governed by a simple single-step kinetics model and distorted by an incompressible flow. The initial geometrical set-up consists of two disjoint sets occupied by the fuel  $Y_1$  and the oxidizer  $Y_2$ . Their evolution is described by the following system of equations, in non-dimensional form:

$$\begin{cases} \partial_t Y_1 + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Y_1 = \Delta Y_1 - \text{Da} Y_1 Y_2 \\ \partial_t Y_2 + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Y_2 = \Delta Y_2 - \text{Da} Y_1 Y_2 \end{cases} \quad \text{in } \Omega \times (0, \infty) \quad (4.4.1)$$

The Péclet number  $\text{Pe}$  measures the ratio of the time scales of diffusion to advection - we are interested in the large  $\text{Pe}$  regime ("turbulent", advection dominant). The Damköhler number  $\text{Da}$  measures the ratio of the diffusive and reactive time-scales. We are interested in regimes of intermediate to large  $\text{Da}$  (thin flame regime, slow diffusion, fast reaction). Those equations could be derived from the reactive Navier-Stokes equations following a number of simplifying assumptions, including the main ones:

- *advection*: the flow  $\mathbf{v}$  is prescribed a priori. It is periodic over a periodic box of size  $P$  and has zero-mean. It is incompressible and contains spatial features reminiscent of a turbulent flow. In particular, there is no feedback from the flame on the flow and all compressibility effects are neglected.
- *diffusion*: both fuel and oxidizer have the same diffusion coefficients;

- *reaction*: the reaction is described by a very simple single-step irreversible reaction.

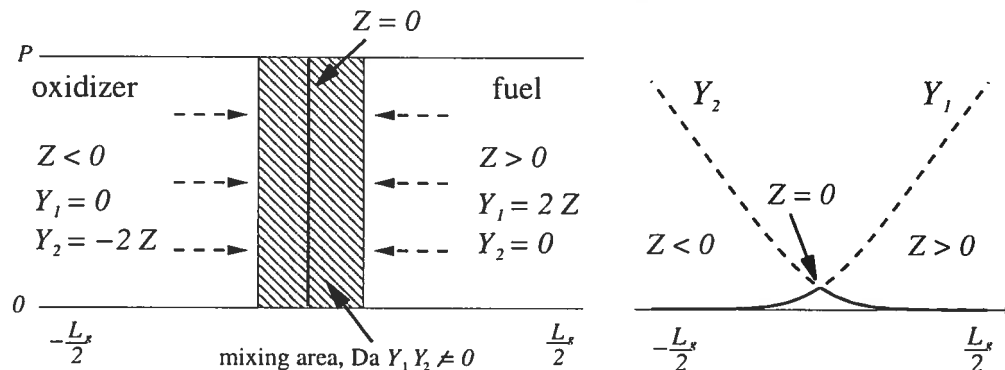


Fig. 4.1: Computational domain

We will be looking for a numerical solution of the problem (4.4.1) in a two-dimensional domain  $\Omega = (-L_g/2 \leq x \leq L_g/2) \times (0 \leq y \leq P)$  see Figure 4.1. Notice that the difference  $Z = (Y_1 - Y_2)/2$  is the solution of a much simpler advection-diffusion equation.

$$\partial_t Z + \text{Pe} \mathbf{v} \cdot \nabla Z = \Delta Z \quad \text{in } \Omega \times (0, \infty) \quad (4.4.2)$$

One can always substitute this simpler equation for one of the two reactive equations in Equations (4.4.1). The following boundary conditions are imposed:

- the passive scalar is assumed to be the sum of a mean gradient, with characteristic length  $L_g$  and of a periodic perturbation  $Z_P(x, y, t)$ . This leads to an established flame structure, see [4];
- far from the main reaction zone (around the level  $Z = 0$ ), equilibrium conditions are achieved for the reactive scalars, with pure oxidizer on one side ( $Z < 0 : Y_1 = 0, Y_2 = -2Z$ ) and pure fuel on the other side ( $Z > 0 : Y_1 = 2Z, Y_2 = 0$ ).

#### 4.4.1. Objective: Validating subgrid flamelet models

When there is no advection, the structure of the flame is well understood. In the presence of a velocity field, the flame structure is distorted. If the perturbations are at very small scales, it is very costly numerically to attempt to resolve

all the fine details of the flame structure and its perturbation by the small scale features of the flow. In turbulent modelling, one replaces this detailed computation by a model. A classical approach is the class of flamelet models, where one assumes that the flame structure still resembles locally the one-dimensional structure of the undisturbed flame, see for example [10] for details. For the present set-up, this translates to a simple algebraic relationship that relates the reactive scalar to the passive scalar  $Y_i = Y_i(Z, \chi)$  with  $\chi = |\nabla Z|^2$  the passive scalar dissipation. One approach to validate such models is to compute the detailed solution for the reactive scalars of the complete advection-reaction-diffusion Equation (4.4.1), and to compare that solution with that obtained simply by approximating the reactive scalars according to the model, knowing the detailed solution for the passive scalar. The method presented here was developed to compute the detailed solution needed for that type of validation. Examples are presented next.

#### 4.5. VALIDATION OF THE ADAPTIVE TIME INTEGRATOR

This Section describes the application of the MISDC method to one-dimensional spatial problems to focus on the time accuracy issue. The first test-case corresponds to a velocity field of the form  $[u = \sin(2\pi y), v = \beta \cos(\omega t)]$ . In such a case the solution of (4.4.1)–(4.4.2) is periodic in  $y$  (period  $P = 1$ ) and will also converge to a time-periodic solution.

##### 4.5.1. Validation of the order of accuracy

###### 4.5.1.1. SDC: Passive scalar

For the flow considered here, one has that  $Z(t, x, y) = x/L_g + Z_p(t, y)$  where

$$Z_p(t, y) = A(t) \sin(2\pi y) + B(t) \cos(2\pi y), \quad (4.5.1)$$

so that (4.4.2) reduces to a system of ODEs for the unknown amplitudes  $A(t)$  and  $B(t)$ :

$$\begin{aligned} \dot{A} + K^2 A - \text{Pe} \cos(\omega t) K B + \text{Pe}/L_g &= 0 \\ \dot{B} + K^2 B + \text{Pe} \cos(\omega t) K A &= 0 \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

The system (4.5.2) is integrated in time with the third order SDC method from Section 4.2.1, using the following quadrature formulas:

$$\begin{aligned}
 I^{n+1}(Z) &= \Delta t (23 F(Z^{n+1}) - 16 F(Z^{n+2}) + 5 F(Z^{n+3})) / 12 \\
 I^{n+2}(Z) &= \Delta t (5 F(Z^{n+1}) + 8 F(Z^{n+2}) - F(Z^{n+3})) / 12 \\
 I^{n+3}(Z) &= \Delta t (-F(Z^{n+1}) + 8 F(Z^{n+2}) + 5 F(Z^{n+3})) / 12
 \end{aligned}
 \tag{4.5.3}$$

Table 4.1 shows the  $L_1$  norm of the errors of the SDC(3) solution by comparison with a reference solution of (4.5.2) as a function of  $\Delta t$  for the case  $Pe = 100$ ,  $L_g = 10$ ,  $K = 2\pi = \omega$ . (The reference solution was obtained with the MATLAB<sup>®</sup> solver ODE45, where an error tolerance of  $\tau = 1e-11$  was imposed.) The results are presented for the dissipation perturbation  $\chi_P = (A^2 + B^2)^{\frac{1}{2}}$ , which is a quantity that plays an important role in flamelet models. The results are in excellent agreement with the predicted third order accuracy.

$\Delta t$	8.0e-4	4.0e-4	2.0e-4	1.0e-4	5.0e-5	2.5e-5
error on $(A^2 + B^2)^{\frac{1}{2}}$	5.054e-5	7.4347e-6	9.7076e-7	1.236e-7	1.5576e-8	1.9547e-9
order	2.7651	2.9371	2.9734	2.9883	2.9943	

Tab. 4.1: Accuracy of the SDC(3) solution

#### 4.5.1.2. MISDC: Reactive part

With the flow field selected as above, the solution  $Y_i$  for the reactive scalar equations (4.4.1) is unsteady and two-dimensional. In the preliminary test here, we solve instead a model equation inspired by the unsteady flamelet approach. Assume that the spatial structure of the flame is basically one-dimensional in terms of the "flame coordinate"  $Z$  and that the transverse derivatives can be ignored. Substituting the approximation  $Y_i(t, x, y) = Y_i(Z(x, y, t), t)$  in Equation (4.4.1) and taking into account the fact that  $Z$  obeys the passive scalar advection-diffusion equation (4.4.2), one obtains the following equation:

$$\partial_t Y_i(t, Z, y) - \chi(t, y) \partial_{Z,Z} Y_i(t, Z, y) = -Da Y_1 Y_2, \quad i = 1, 2 \tag{4.5.4}$$

where  $\chi(t, y) = |\nabla Z|^2$  is the scalar dissipation. Here,  $y$  only plays the role of a parameter. We solve for a representative case by solving numerically Equation (4.5.4) where the representative value for  $\chi$  is taken as its  $y$ -averaged value.

The equation for  $Y_i(t, Z)$  is solved with the time integrator corresponding to the MISDC strategy of order 3 - the two split operators are the diffusion term (with the time-dependent coefficient) and the reactive term, with the value of  $\chi(t)$  precomputed based on the solution for  $A(t)$  and  $B(t)$  pre-computed as described before. The diffusion operator is discretized with a centered fourth-order finite difference scheme with a uniform mesh  $\Delta Z = 1.0e-3$ . This results in a pentadiagonal linear system which is solved directly. For the simple chemical reaction rate considered here, an exact solution is available for the reactive step.

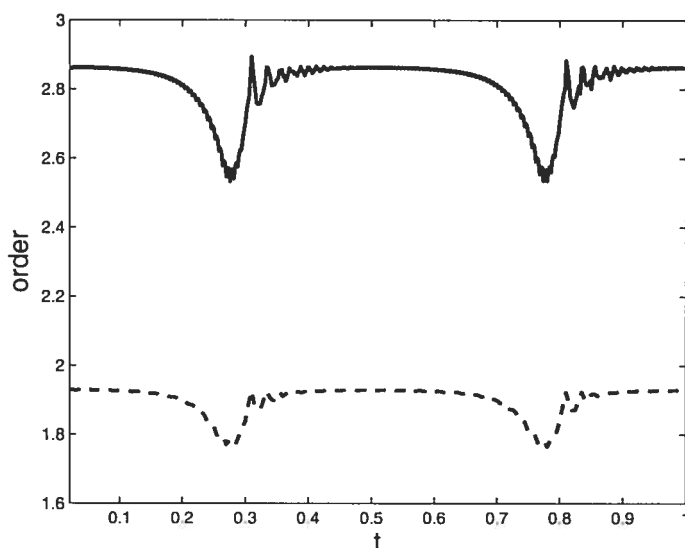


Fig. 4.2: Order of corrected solution, MISDC(3): dashed - after one cycle of improvement; solid - two cycles of improvement

The results below are obtained for  $\Delta t = 1.0e-4$ , and physical parameters  $Pe = 100$ ,  $Da = 1.0e+4$ , and  $L_g = 10$ . The solid and the dash-dotted lines in Figure 4.2 show the order of the corrected solution after, respectively, one and two cycles of improvement. The order is computed according to the usual formula  $\log_2 \left( \langle Y_{\Delta t} - Y_{\Delta t/2} \rangle_y / \langle Y_{\Delta t/2} - Y_{\Delta t/4} \rangle_y \right)$ . With one cycle of improvement,

the observed order is close to 2, and with two cycles, it is close to 3, as expected from the theory.

#### 4.5.2. Time adaptivity

The performance of the time-step adaptive strategy presented in Section 4.2.3 will now be analyzed both for the passive and the reactive scalar cases discussed above:

##### 4.5.2.1. *Passive scalar*

We repeat the passive scalar experiment from Section 4.5.1.1. In all the experiments presented here the tolerance for the absolute and relative errors are taken to be equal,  $\tau_{\text{abs}} = \tau_{\text{rel}} = \tau$ . We report the cost of the computations in terms of the number of evaluations of the operator  $F$  for given tolerance  $\tau$ . The performance is excellent - the  $L_\infty$  norm for the global error decreases along with the tolerance. Remark: this global error is of the same order, but larger than the tolerance. This is due, of course, to the fact that the tolerance and error estimators only control the local errors. The increase of the corresponding number of operations is very slow: reducing the error by a factor 8 only requires doubling the number of operations, see Table 4.2.

$\tau$	1e-6	5e-7	3.3e-7	2.5e-7	1.25e-7
nb. of evaluations	8254	10700	12444	13758	17508
max error	4.8065e-6	2.4468e-6	1.6261e-6	1.2348e-6	6.2000e-7

Tab. 4.2: Performance of the time-step adaptive strategy

Figure 4.3 shows how the SDC adaptive strategy responds adequately to the time-scales variation in the solution.



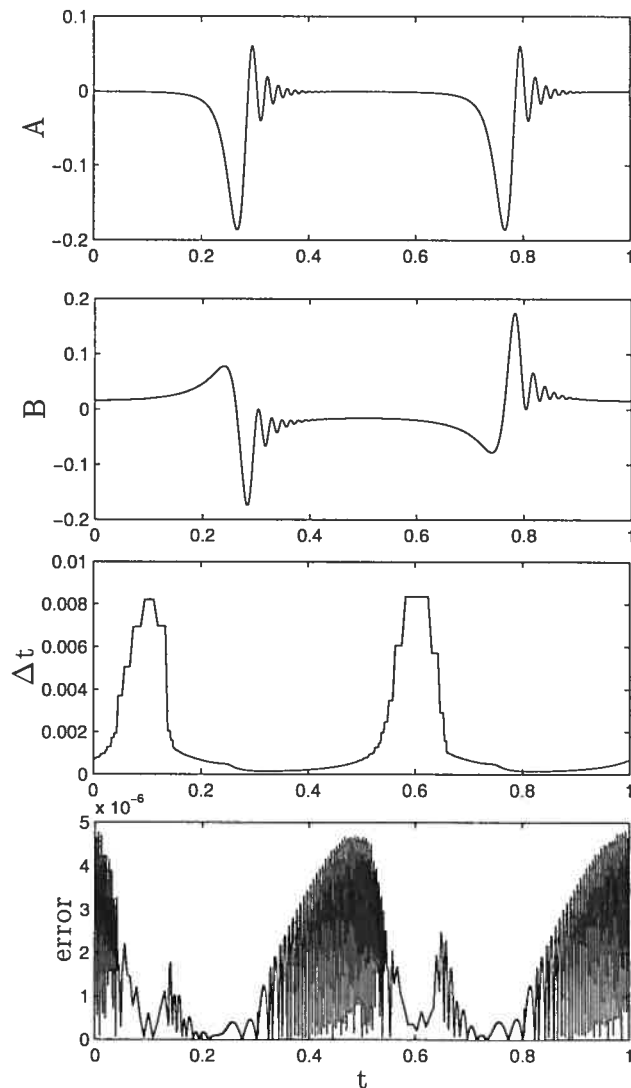


Fig. 4.3: SDC passive scalar solution, adaptive time-step and error, tolerance  $\tau = 1.0e-6$ ,  $Pe = 100$

#### 4.5.2.2. Reactive scalar

In the case of the reactive scalar, we compare the adaptive time-step solution ( $\tau = 1.0e-5$ ) with the one computed with a constant time-step (the smallest time-step from the whole computational interval). Figure 4.4 shows the variation of the adaptive time-step for this case and the error with respect to the reference solution. As for the case of the passive scalar, the adaptive strategy performs very

well in the capturing the intermittent effects. Errors are well within the given tolerance. The adapted time-step results in significant computational savings.

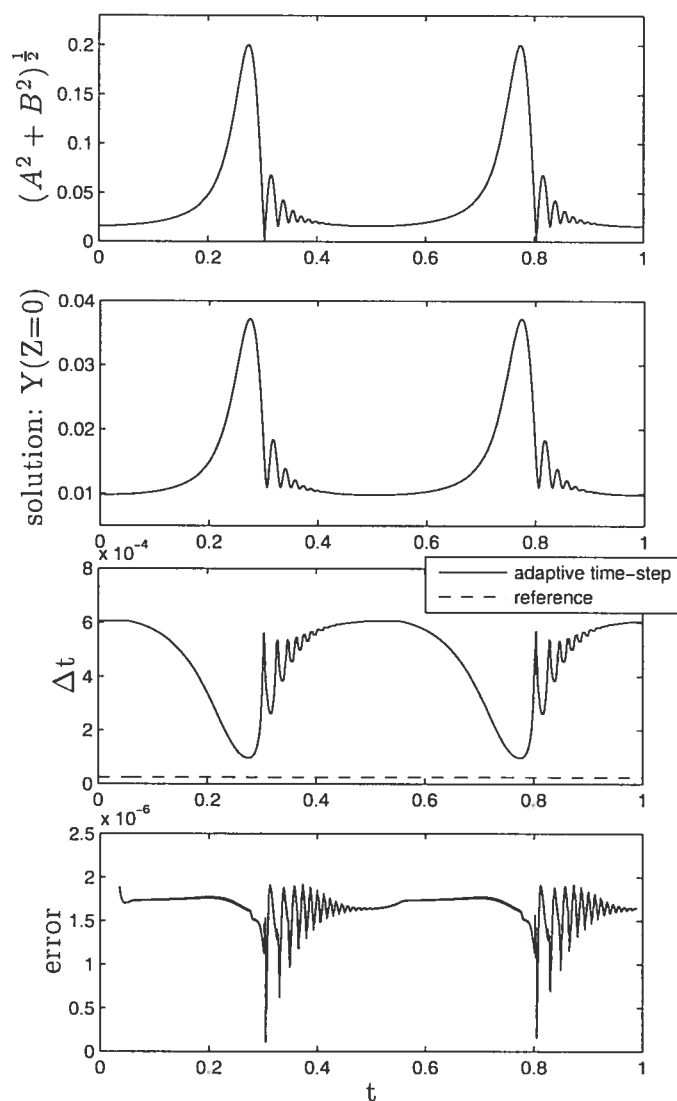


Fig. 4.4: MISDC reactive scalar solution, adaptive time-step, and error with respect to the reference solution, tolerance  $\tau = 1.0e-5$

#### 4.6. VALIDATION AND RESULTS FOR TWO-DIMENSIONAL CASES

We now implement and validate the method for the full unsteady two-dimensional case. Examples of distorted flame fronts are shown in Figures 4.7 and 4.8. They show contours of the passive scalar, with the thicker contour corresponding to

the zero-level. It is expected at high Da numbers that the flame reaction zone will be concentrated around that level, where a fine mesh will be needed. The ability to adapt the resolution in space as well as in time is therefore critical for an accurate and efficient simulation. The spatial adaptive strategy used in the present computations is described next.

#### 4.6.1. Space adaptivity

At the end of every MISDC cycle, the output of the FMM diffusion solver can be requested at any node location inside the domain of computation. This feature was used to perform a remapping of the Lagrangian nodes without excessive interpolation errors but it can also be used to construct an efficient mesh refinement procedure without the usual solution interpolation. For the present study, we use a fairly simple refinement procedure in space: there are two possible levels of refinement - a coarse background level for the entire domain, and a fine level concentrated in the areas where the reaction rate is above a threshold (in what follows, one percent of the observed maximum rate).

##### Initializing:

- (1) define an uniform coarse grid;
- (2) refine the flame area:
  - identify the coarse grid points  $\Omega$  where the refinement criterion is satisfied;
  - add subgrid points (In the current implementation, the fine scale refinement points are distributed randomly with a prescribed density. This seems to lead to a better performance of the FMM method compared to the equally spaced points case.);
- (3) initialize the scalars at the coarse grid and the subgrid points.

##### Time marching:

- (1) based on the reaction rate, tag coarse grids where dense refinement is needed and generate the corresponding set of output nodes;

- (2) perform a cycle of MISDC using the current set of nodes, including Lagrangian transport, reaction and diffusion;
- (3) at the very last diffusion step within the cycle, remap the solution onto the prescribed new set of output nodes.

Figure 4.13 (left column) shows some examples of adapted node distributions as the  $Da$  number is varied (regular distribution at the coarse level, random one at the fine level). The adaptive refinement is seen to zoom on the flame zone very well.

#### 4.6.2. Simple shear flow

We revisit the simple shear case from Section 4.5. The passive scalar has a very simple structure - it is a graph as a function of  $y$ . This can be exploited to compute the detailed solution of the reactive Equation (4.4.1) very efficiently [5]. Substituting the coordinate  $Z$  for the coordinate  $x$ , one can remap the zero-level of  $Z$  and surrounding flame reaction zone which is distorted in physical space into respectively a straight line and rectangular area in the  $Z - y$  flamelet coordinates. Using this strategy, detailed solutions for  $Y_i$  were computed in [5] for a wide range of values of the parameters and a detailed comparison was performed with various implementations of the flamelet models for unsteady cases. For validation purpose, we repeat this comparison where now the detailed computation is obtained in the physical coordinates  $(x, y)$  with the time-space adaptive MISDC(3) and we compare the results with the previously obtained curve for the modelling error between the detailed solution and the flamelet solution.

Figures 4.5 and 4.6 show the comparison of the errors between the direct computation based on the method from this article and the instantaneous flamelet model together with the equivalent errors from the article [5]. The errors are computed in  $L_\infty$  and  $L_1$  spatial norms as function of the time. Since the solution is bi-periodic we present our results over only a half period from the time when solution is converged completely to a periodic one. The agreement is excellent, demonstrating the capability for the new code to match the results obtained from

a specially designed code for a special case. This was done for validation only, the objective was of course to apply the new code to cases for which the special coordinate change was not practical. This is illustrated in the next section.

### 4.6.3. Childress-Soward flow

As an example for a more general flow field, we consider now the two-dimensional incompressible flow corresponding to the Childress-Soward stream function:

$$F(x, y) = \cos(2\pi(x - Vt)) \cos(2\pi y) + \delta \sin(2\pi(x - Vt)) \sin(2\pi y).$$

This flow has a rich space structure varying from an oblique shear when  $\delta = 1$  to a set of vortices when  $\delta = 0$ ; we select the intermediate case  $\delta = 0.5$  in order to incorporate both features. As before, we impose that the passive scalar be the sum of a mean gradient  $x/L_g$  and a space-periodic zero-mean perturbation. The problem is unsteady when  $V$  is non-zero. However, as far as the passive scalar is concerned, it is possible to pre-compute the time-dependent solution very efficiently as follows. One can verify that the time-periodic solution for the perturbation is of the form  $Z_p(\tilde{x}, y)$  where  $\tilde{x} = x - Vt$ . Substituting in the unsteady equation (4.4.2) one gets the following steady form of the equation in terms of  $\tilde{x}$  and  $y$ :

$$\text{Pe} u(\tilde{x}, y) L_g^{-1} + \text{Pe} (u(\tilde{x}, y) + V) \partial_{\tilde{x}} Z_p + \text{Pe} v(\tilde{x}, y) \partial_y Z_p = \Delta Z_p \quad (4.6.1)$$

The solution to this problem is precomputed using a standard finite difference discretization of (4.6.1) on a regular grid with a centered second order in space 5-point stencil for diffusion and centered schemes for both  $x$  and  $y$  components of the gradient ( $\partial_{\tilde{x}} Z_p, \partial_y Z_p$ ). The resulting linear system is solved with MATLAB<sup>®</sup> Generalized Minimum Residual method. Figures 4.7 and 4.8 show the evolution of the zero-level of  $Z$  as a function of time together with the flow lines for the cases of  $\text{Pe} = 10\pi$ ,  $\text{Da} = 300$  and  $V = 1, 10, 25$ . Given the passive scalar solution, the MISDC(3) strategy is now used to compute the solution for the reactive scalar  $Y_1$  (a self-contained equation for  $Y_1$  is obtained from Equation 1 using the identity  $Y_2 = 2Z - Y_1$ ). We impose equilibrium boundary conditions in the  $x$ -direction and periodicity in the  $y$ -direction. The initial data correspond to the equilibrium

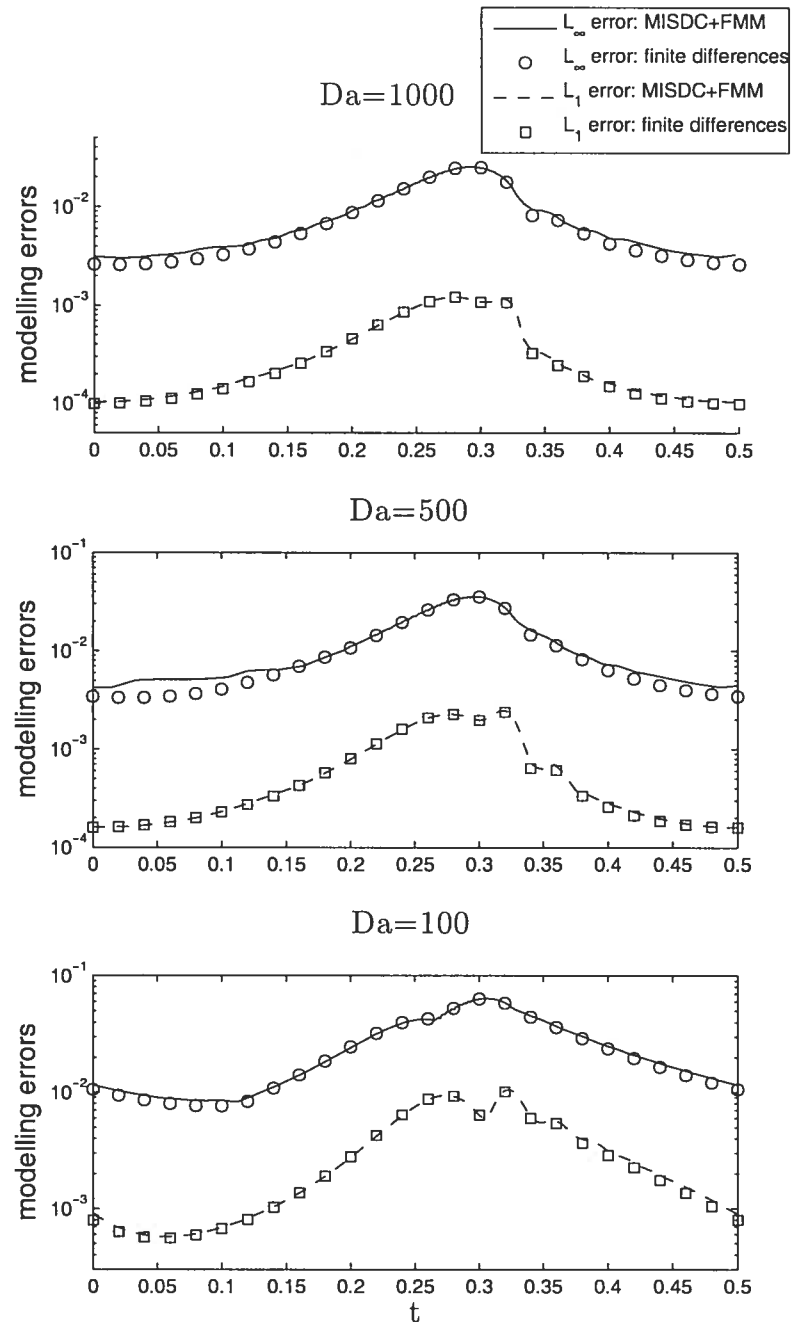


Fig. 4.5: Comparison of direct simulation with the flamelet model: solid and dashed lines – the method presented in the current article, circles and squares – data obtained with finite differences discretization [5]

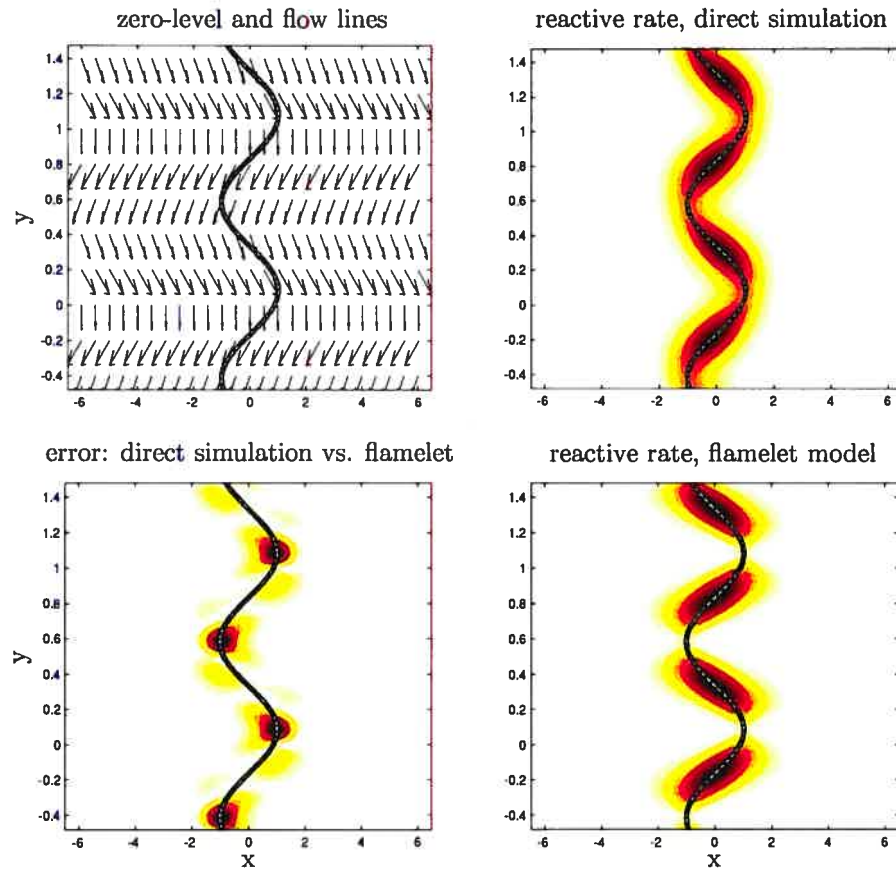


Fig. 4.6: Results for the shear flow corresponding to the maximum of the scalar dissipation

solution everywhere  $Y_1 = Z + |Z|$ . The computation is performed until the periodic solution for  $Y_1$  is achieved. Figures 4.9-4.11 show snapshots of the reaction rate and spatial distribution of the errors with respect to the flamelet model.

#### 4.6.3.1. *Time adaptivity*

Numerical experiments are performed with tolerances  $\tau_{\text{abs}} = \tau_{\text{rel}} = 1.0\text{e-}4$  and  $5.0\text{e-}5$ . Figure 4.12 shows the variation of the adaptive time-step during one period and the errors based on  $L_1$  and  $L_\infty$  spatial norms between the direct solution obtained by the method presented in this article and the flamelet approximation [2]. One remarks that the magnitudes of the modelling errors are

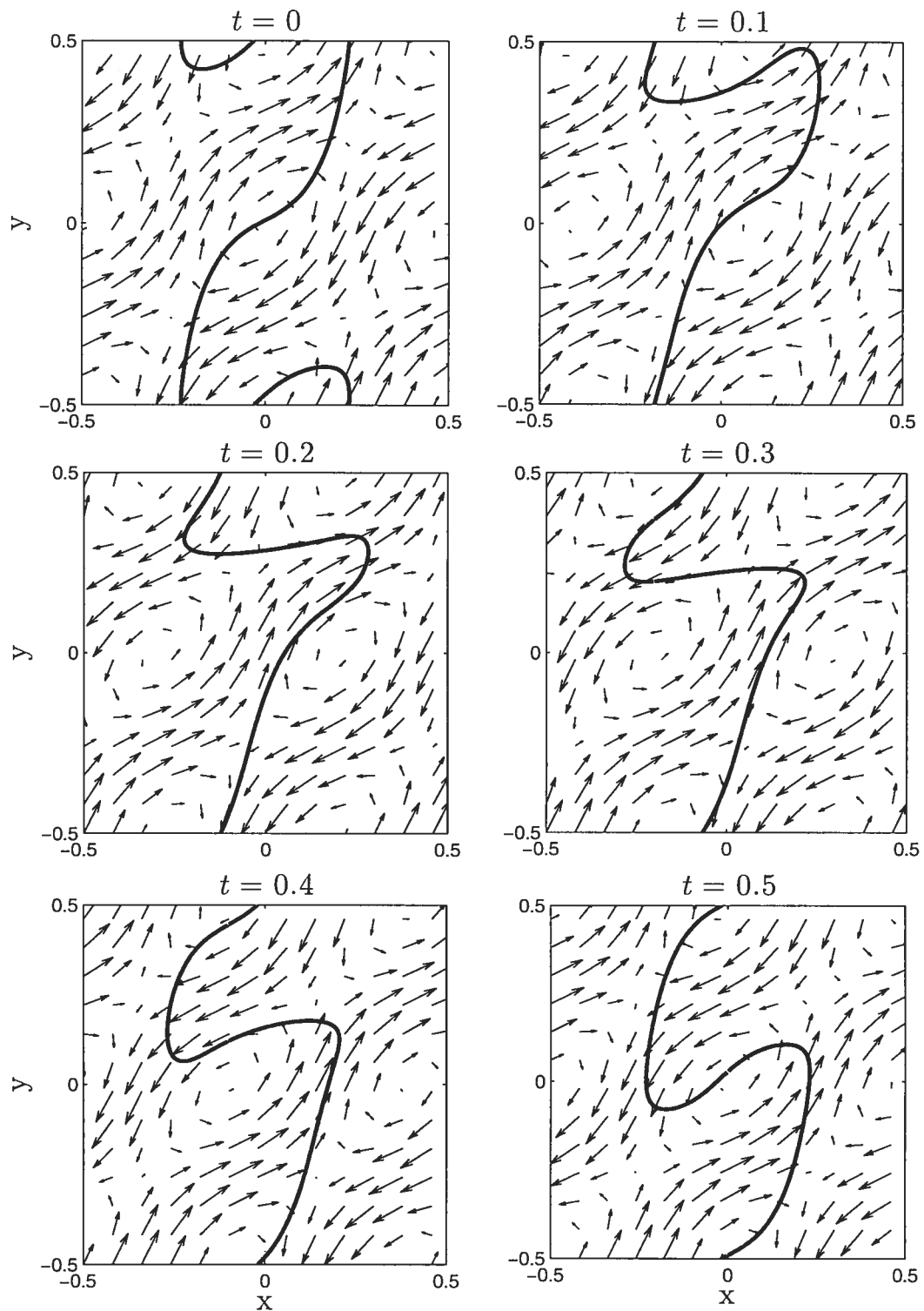


Fig. 4.7: Level  $Z = 0$  and the flow lines on a half of the period corresponding to  $V = 1$



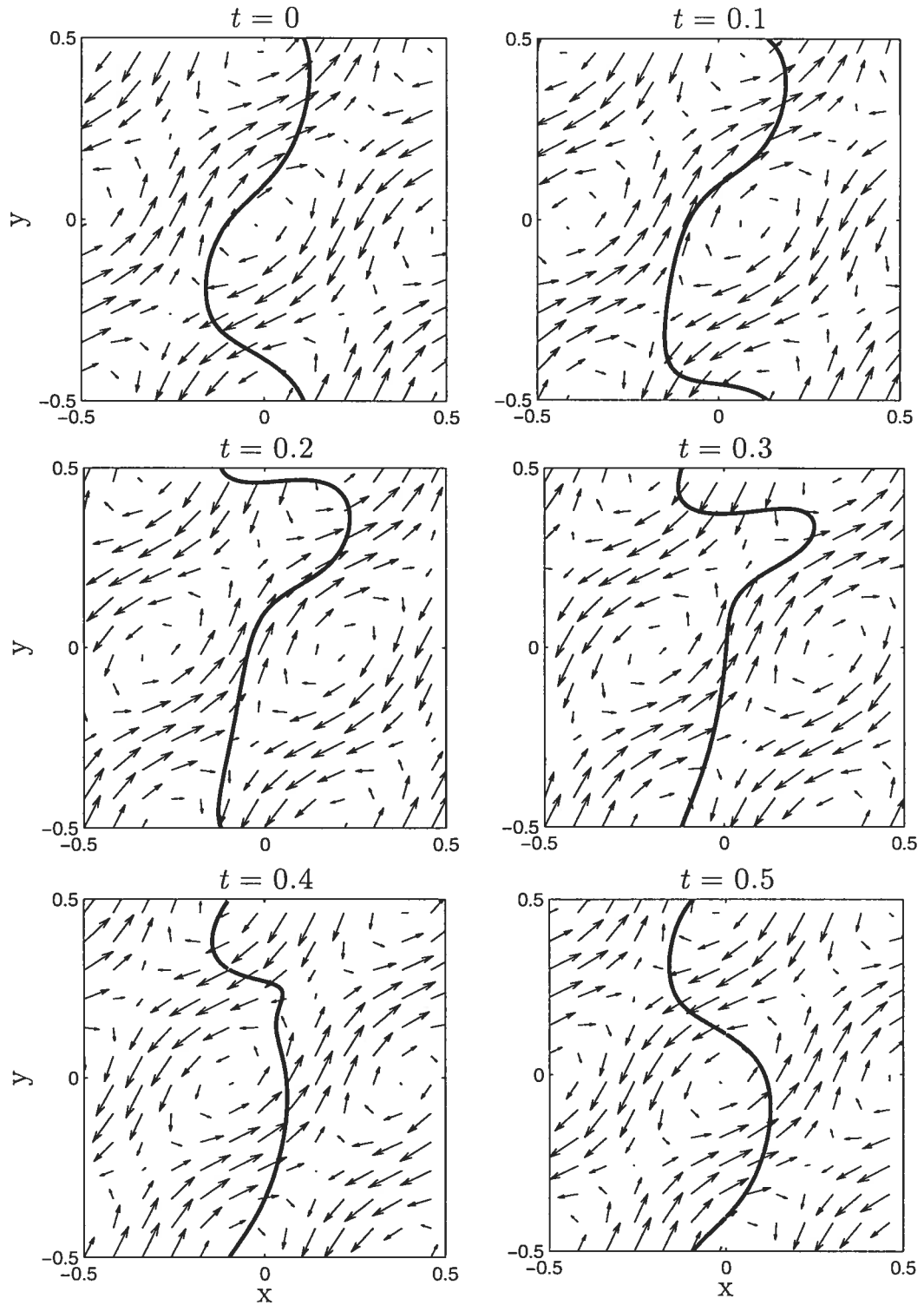


Fig. 4.8: Level  $Z = 0$  and the flow lines on a half of the period corresponding to  $V = 25$

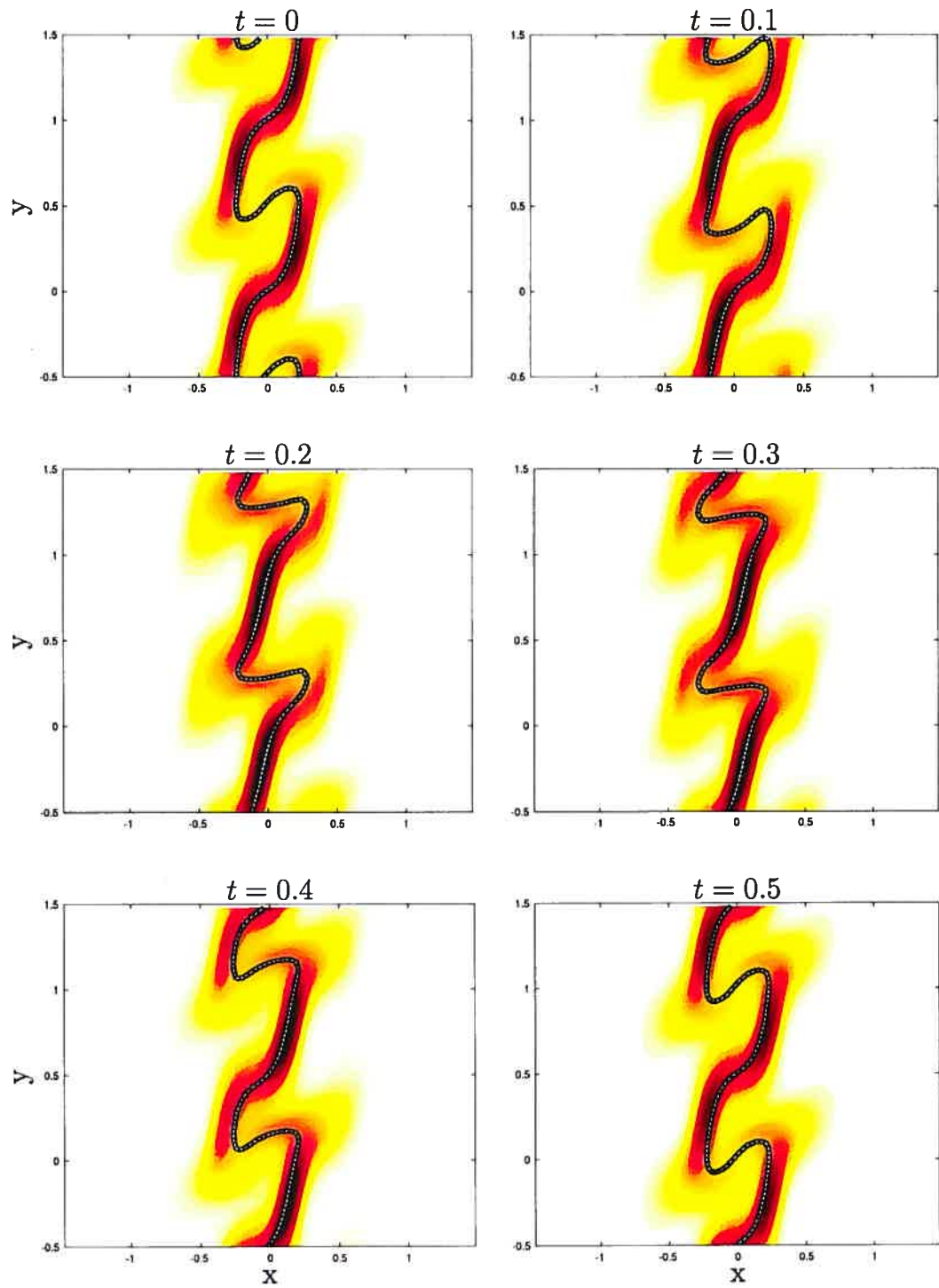


Fig. 4.9: Reaction rate on a half of the period corresponding to  $V = 1$

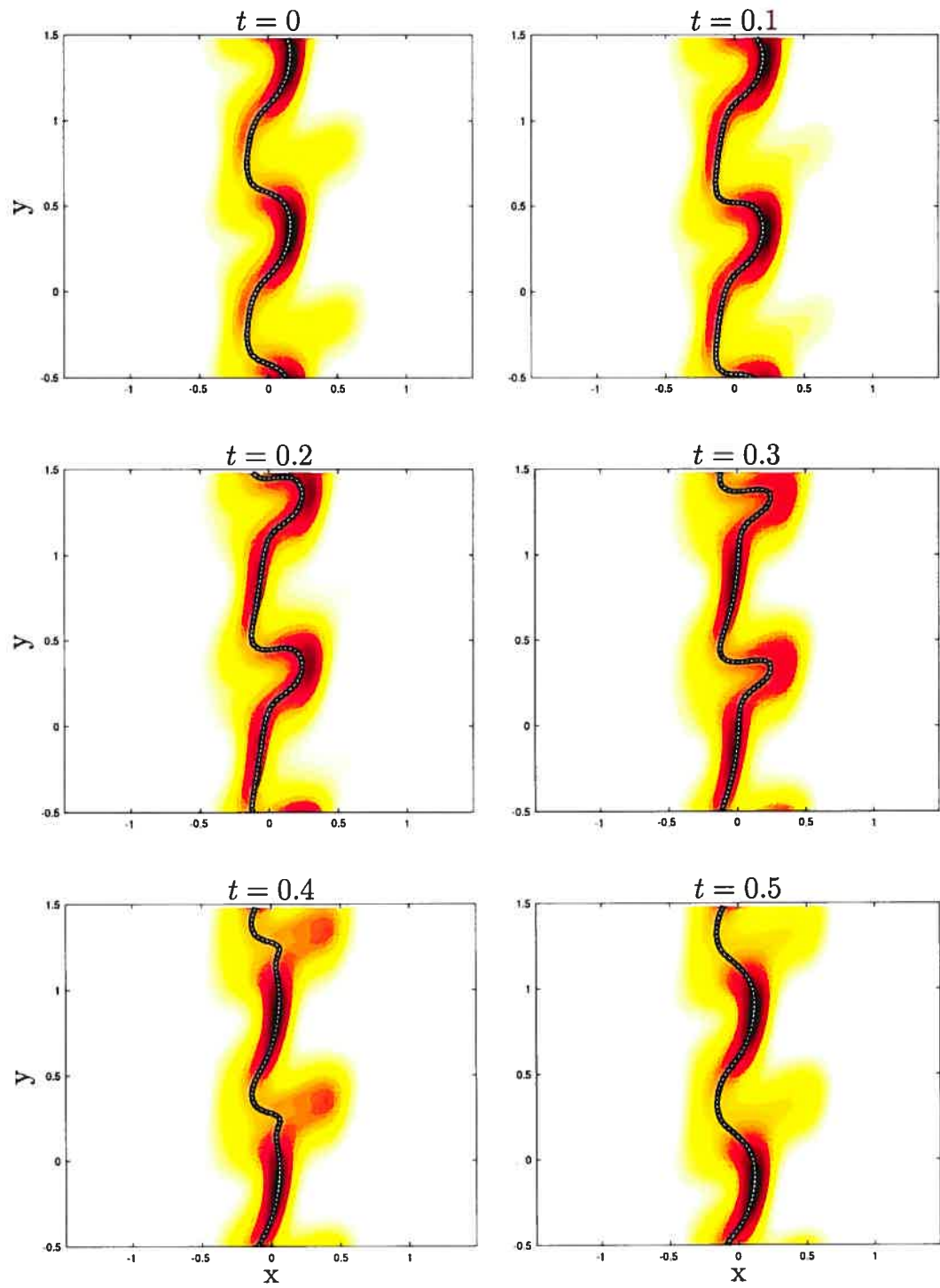


Fig. 4.10: Reaction rate on a half of the period corresponding to  $V = 25$

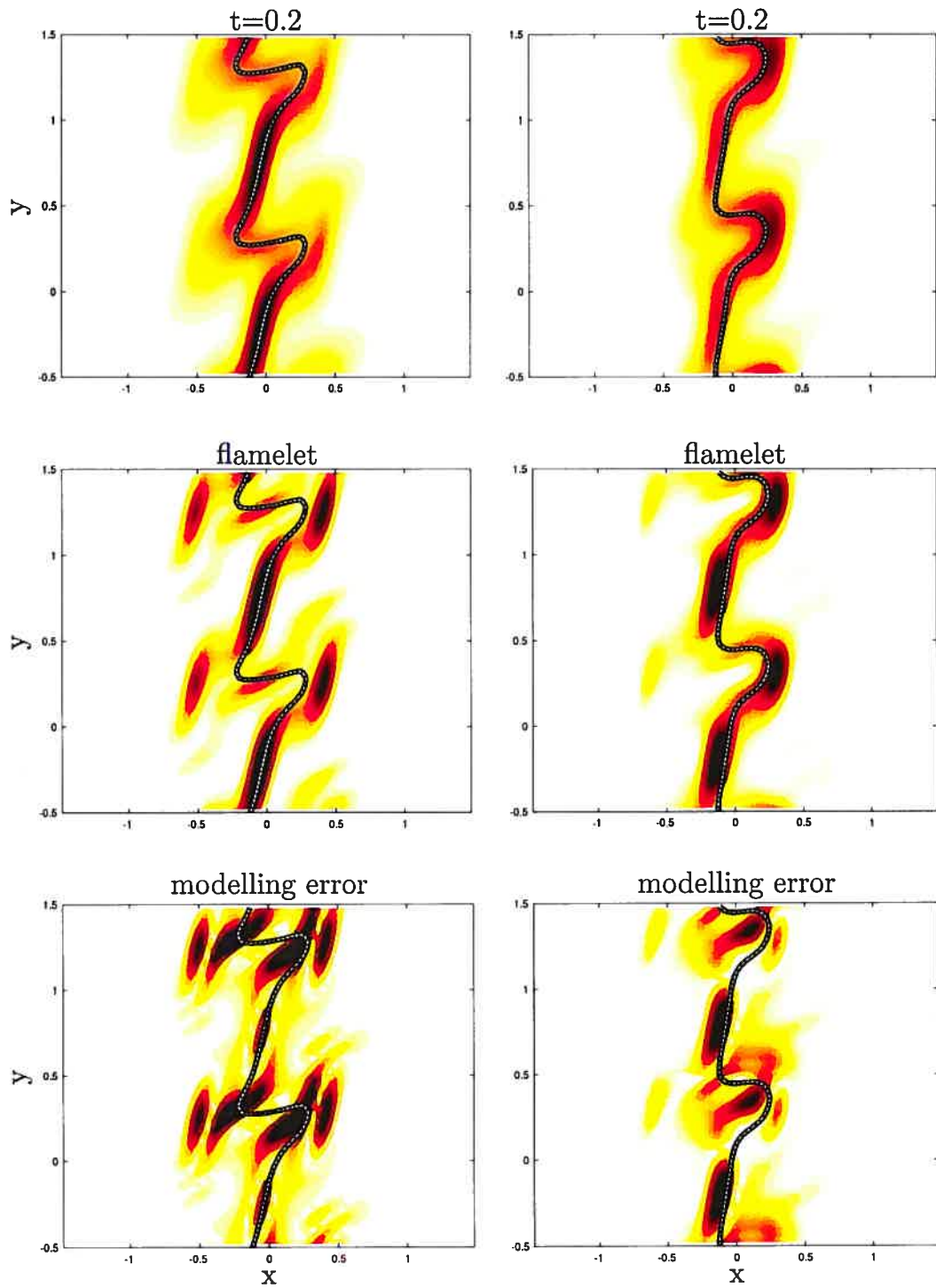


Fig. 4.11: Reaction rate and error with respect to the flamelet model: on the left  $V = 1$ , on the right  $V = 25$

similar for both  $\tau = 1.0e-4$  and  $5.0e-5$ . Indeed, the time-average values on one period of those errors are presented in Table 4.3 and confirm the fact that the differences between the detailed simulation results and the flamelet models are the result of the modelling approximation in the flamelet model rather than from numerical errors in the detailed solution.

As seen in Table 4.3 the ratio of the averaged time-step over one period for tolerances  $\tau = 1.0e-4$  and  $5.0e-5$  is of the order of  $\sqrt{2}$  as expected for the second order solver used for the error estimates. Another set of examples is presented

	V=1	V=10	V=25
space average scalar dissipation			
$\chi$	3.8129	3.1568	2.1398
$\tau$	time average $L_1$ error : direct vs. flamelet		
1.0e-4	6.6801e-3	5.7158e-3	4.4620e-3
5.0e-5	6.6772e-3	5.7178e-3	4.4527e-3
$\tau$	time-step $\Delta t$ average on one period		
1.0e-4	8.9233e-4	9.8697e-4	1.2403e-3
5.0e-5	6.6864e-4	7.2939e-4	9.2209e-4
ratio	1.3438	1.3519	1.345

Tab. 4.3: Time adaptivity results

in Figure 4.13, we present simulations performed with  $Da = 300, 2000, 4000$  for a fixed value of  $V = 1$ . As  $Da$  is increased, the flame becomes thinner, and the agreement with the flamelet model prediction (on the right) visibly improves, as expected from the asymptotic theory.

#### 4.7. CONCLUSION

A grid-free time and space adaptive method has been introduced to solve numerically advection-reaction-diffusion problems. It combines Lagrangian advection followed by a remapping step, a fast multi-pole solver for the diffusion

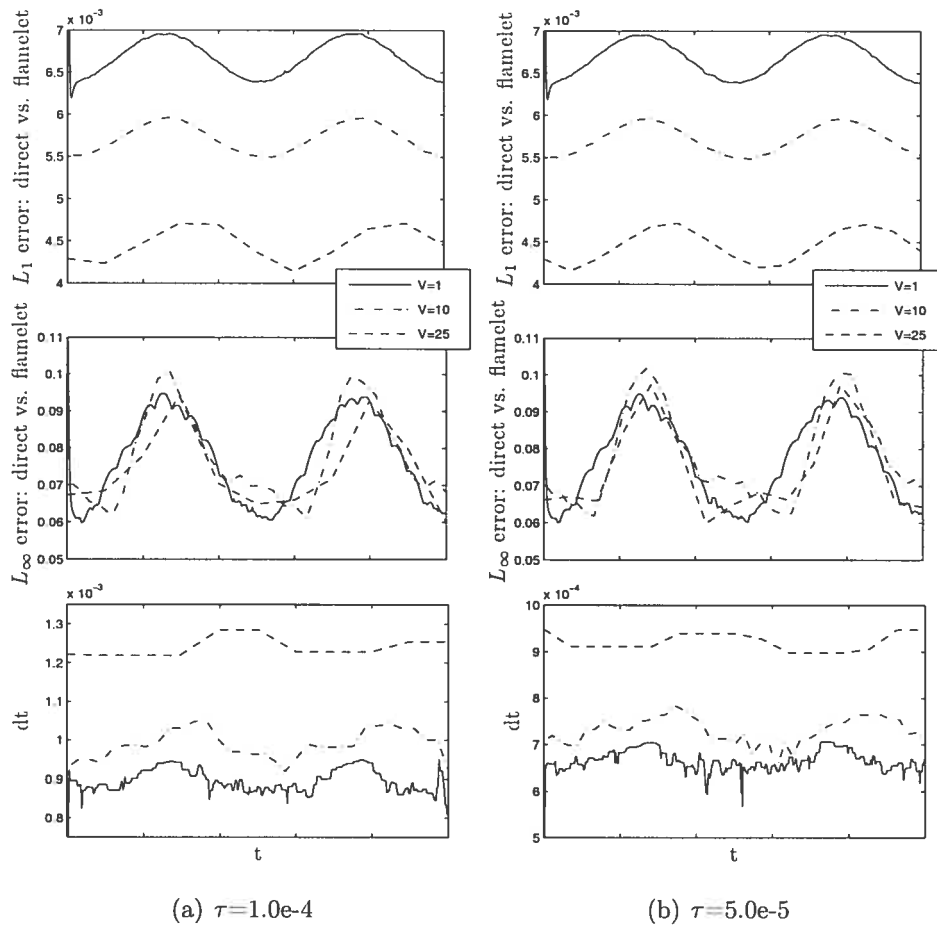


Fig. 4.12: Adaptive time-step example of different horizontal speeds

operator, and the spectral deferred correction approach to design high order in time methods in the presence of splitting. Systematic test-cases were presented that confirm the following capabilities of the scheme:

- *time-accuracy control in unsteady problems*: in many adaptive schemes for problems involving advection, the time-step is selected indirectly, to satisfy the CFL condition for a given mesh size. Here, the Lagrangian solver for advection has no stability limit. The successive corrections to the solution computed as part of the SDC strategy are shown to be a useful estimator for the time-step refinement diagnostic.

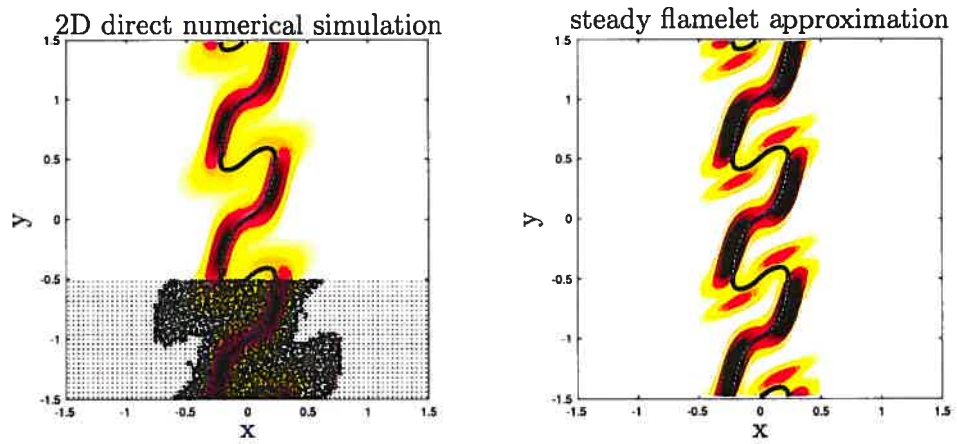
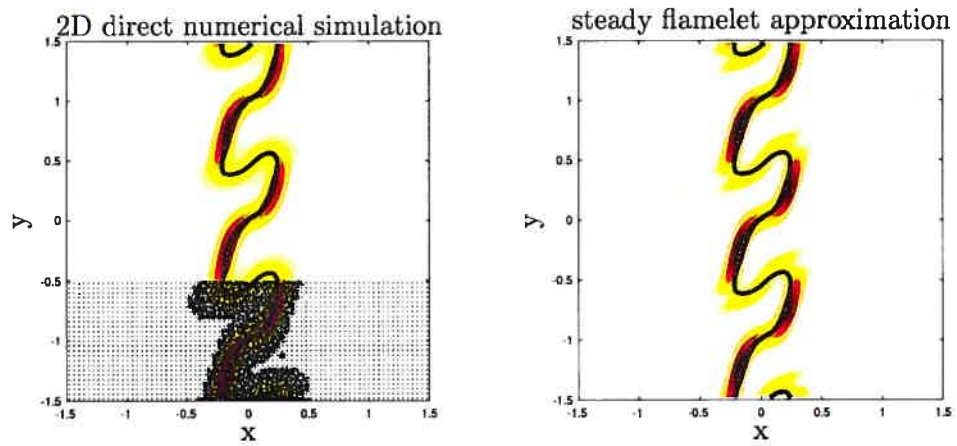
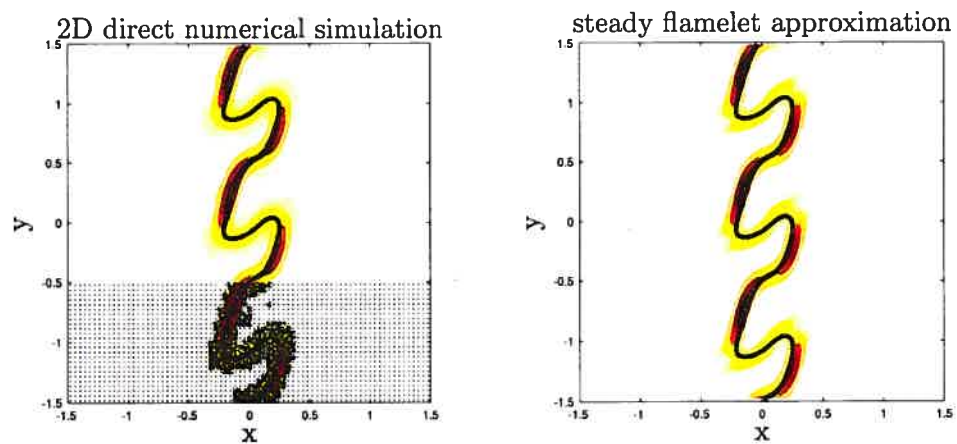
(a)  $Da=300$ (b)  $Da=2000$ (c)  $Da=4000$ 

Fig. 4.13: Reaction rate and adaptive refinement

- *ease of implementation in complex, multi-dimensional geometries*: as a grid-free method, it is particularly convenient for problems involving a complex geometry. Extension to higher dimensions is straightforward, provided the appropriate FMM solver is used.
- *multiphysics capability via splitting*: the test-cases presented here confirm the capability of SDC methods to achieve arbitrarily high orders of accuracy, even in the presence of splitting errors. Because the building blocks for the SDC approach are simply first order time integrators for each of the operators, the SDC method is fairly easy to implement, including cases of "black-box" integrators, as is the case, for instance, for complex chemistry models in combustion.

The current implementation of the method uses the FMM package [8], that runs on MATLAB<sup>®</sup>. It is very reliable and easy to implement but not particularly fast - with a set of 28900 nodes, the typical time for one time-step computation is 285 seconds, most of it stemming from the FMM solver. There are several routes that could lead to significant improvement in efficiency, including

- exploiting the quad-tree structure for the adaptive mesh to speed-up the fast multipole computation;
- parallelizing the code. For the type of particle code presented here, this is straightforward.

The good performance in terms of adaptivity and accuracy has been systematically validated using test cases from idealized turbulent nonpremixed flames. The objective was to design a method so that one could generalize the validation of flamelet models to a wider class of flow fields. Examples are given to confirm the potential of the new method for that purpose.



## REFERENCES

---

- [1] P. Bartello and S.J. Thomas. The cost-effectiveness of semi-lagrangian advection. *Mon. Wea. Rev.*, 1996.
- [2] A. Bourlioux. *Numerical turbulent combustion: an asymptotic view via an idealized test-case*, volume 75 of *Mathematics, Physics and Chemistry*, pages 81–102. in *Modern Methods in Scientific Computing and Applications*, Bourlioux, Gander, Sabidussi, eds, Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [3] A. Bourlioux, A.T. Layton, and M.L. Minion. High-order multi-implicit spectral deferred correction methods for problems of reactive flow. *J. of Comput. Phys.*, 189:651–675, 2003.
- [4] A. Bourlioux and A. Majda. An elementary model for the validation of flamelet approximation in non-premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 4(2):189–210, 2000.
- [5] A. Bourlioux and O. Volkov. Validation of unsteady flamelet models for an idealized test-case with intermittency. Preprint, submitted to *Combustion, Theory and Modeling*, 2005.
- [6] Hongwei Cheng, Jingfang Huang, and T.J. Leiterman. An adaptive fast solver for the modified Helmholtz equation in two dimensions. Preprint, submitted to *Journal of Computational Physics*, 2003.
- [7] A. Dutt, L. Greengard, and V. Rokhlin. Spectral deferred correction methods for ordinary differential equations. *Bit Numerical Mathematics*, 40(2):241–266, 2000.
- [8] Madmax Optics Inc. User’s manual FMM Toolbox (2D) for MATLAB<sup>®</sup> version 1.1. Web address: <http://www.madmaxoptics.com>, 2002.
- [9] A.T. Layton and M.L. Minion. Conservative multi-implicit spectral deferred correction methods for reacting gas dynamics. *J. of Comput. Phys.*, 194(2):697–715, 2004.
- [10] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.

- [11] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5(3):506-517, 1968.

## Chapitre 5

---

### CONCLUSIONS

Le travail de cette thèse a été concentré sur les trois aspects, théorique, modélisation pratique et numérique de la solution de systèmes d'advection-réaction-diffusion dans le contexte de l'application aux flammes turbulentes non-prémélangées

L'analyse théorique présentée dans le Chapitre 2 permet de mieux comprendre le comportement des statistiques conditionnelles du scalaire passif dans des régimes intermittents. La dissipation et la diffusion conditionnelles jouent un rôle important pour l'extension du modèle de flammelettes stationnaires à des cas instationnaires turbulents. Les techniques habituelles, numériques ou expérimentales, pour évaluer ces caractéristiques conditionnelles peuvent induire des erreurs d'échantillonnage significatives pour de grandes valeurs de fluctuation du scalaire passif par rapport à la moyenne. À cause de ceci, on ne peut plus observer l'influence de l'intermittence sur le comportement des statistiques pour les valeurs où cette influence est très importante. Grâce aux cas-tests et aux techniques proposées dans le Chapitre 2, il est possible d'effectuer les études systématiques via des formules explicites, ce qui élimine complètement les erreurs d'échantillonnage.

Dans le cas d'un mode stationnaire de cisaillement, on a établi que l'intermittence n'a aucune influence sur la diffusion conditionnelle, elle reste linéaire comme dans le cas de la PDF gaussienne. D'un autre côté, la dissipation conditionnelle prend une forme plus complexe que celle du cas de la PDF gaussienne. L'analyse de valeurs critiques établit un lien direct de ce comportement avec l'intermittence. Dans le cas plus pratique du cisaillement instationnaire à plusieurs modes dont

les amplitudes sont des variables aléatoires gaussiennes, les deux caractéristiques altèrent leurs comportements quand le nombre de Péclet devient suffisamment grand pour que la PDF du scalaire passif se trouve au régime intermittent. On présente dans le Chapitre 2 une explication de ce changement ainsi qu'une explication de la nature des erreurs mises en évidence dans les travaux précédents qui apparaissent pour des valeurs du scalaire passif loin de la moyenne.

On procède ensuite dans le Chapitre 3 à la résolution du système d'advection-réaction-diffusion pour les scalaires réactifs. Dans cet exposé, on a développé une procédure de validation de modèles de flammelettes instationnaires fondée sur le calcul direct de flammes dans l'écoulement instationnaire bidimensionnel. Les interactions complexes entre l'advection, la diffusion et la réaction sont observées et classées sur de larges intervalles de valeurs de  $Da$  et  $Pe$ . On présente aussi un analogue multidimensionnel du modèle de flammelettes instationnaires de type FULFA et son comportement asymptotique pour de grands nombres de Damköhler. La validation montre que ce nouveau modèle est optimal sur un large intervalle de nombres de Péclet. Compte tenu des résultats obtenus numériquement ainsi que des extrapolations asymptotiques correspondant aux grands nombre de Péclet, on établit les zones de validité de différents régimes de flammelette. On donne également une interprétation physique de la position de ces zones en termes des échelles caractéristiques de temps du problème.

Le calcul numérique direct employé dans le Chapitre 3 pour valider le modèle de flammelettes instationnaires exploite la géométrie très particulière de la solution définie à partir de l'écoulement du type cisaillement. Le but est donc d'appliquer cette procédure de validation à des cas d'écoulement plus générales où l'approche du Chapitre 3 n'est plus accessible. Dans le Chapitre 4 on a présenté un nouveau intégrateur fondé sur une méthode sans maillage, adaptative dans le temps et avec un raffinement local adaptatif appliqué spécifiquement à un problème d'advection-réaction-diffusion dans le contexte de l'application à la combustion non-prémélangée. Cette approche réunit l'approche semi-lagrangienne pour l'advection, la méthode multipôles rapides pour la diffusion et une méthode à pas fractionnaires de type MISDC qui sert à implémenter une intégration dans

le temps d'ordre élevé et à réduire les erreurs de fractionnement. Les tests systématiques effectués dans ce travail ont mis en évidence le grand potentiel de l'approche en terme du contrôle de la précision pour les problèmes instationnaires, via l'adaptivité temporelle; la possibilité d'effectuer des calculs dans des géométries complexes pour des problèmes multidimensionnels; la flexibilité de la méthode fractionnaire pour les applications multi-physiques. En particulier, une série de cas-tests pour des écoulements instationnaires non-triviaux est effectuée pour démontrer la bonne performance de la nouvelle méthode.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [1] A. Bourlioux and A. Majda. An elementary model for the validation of flamelet approximation in non-premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 4(2) :189–210, 2000.
- [2] A. Bourlioux and A. Majda. Elementary models with probability distribution function intermittency for passive scalars with a mean gradient. *Phys. Fluids*, 14(2) :881–897, 2002.
- [3] A. Bourlioux and O. Volkov. Validation of unsteady flamelet models for an idealized test-case with intermittency. Preprint, submitted to Combustion, Theory and Modeling, 2005.
- [4] B. Khouider. *Asymptotic modeling for large eddy simulation of premixed flames*. PhD thesis, University of Montreal, 2002.
- [5] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [6] A. Majda and P. Souganidis. The effect of turbulence on mixing in prototype reaction-diffusion systems. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 53 :1284–1304, 2000.
- [7] A.A. Townsend. *The structure of turbulent shear flow*. Cambridge University Press, 1956.
- [8] F. Williams. Theory of combustion in laminar flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, pages 171–188, 1971.
- [9] P.J. Coelho and N. Peters. Unsteady modelling of a piloted methane/air jet flame based on the eulerian particle flamelet model. *Combust. Flame*, 124 :444–465, 2001.
- [10] A.F. Ghoniem, M.C. Soteriou, O.M. Knio, and Cetegen B.M. Effect of steady and periodic strain on unsteady flamelet combustion. In The Combustion Institute, editor, *Proceedings of the 24th Symposium (International) on Combustion*, pages 223–230, 1992.

- [11] R.S. Barlow and J.-Y. Chen. On transient flamelets and their relationship to turbulent methane-air jet flames. In The Combustion Institute, editor, *Proceedings of the 24th Symposium (International) on Combustion*, pages 231–237, 1993.
- [12] B. Cuenot and T. Poinsot. Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable Lewis number and finite rate chemistry. *Combust. Flame*, 104(1–2) :111–137, 1996.
- [13] H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, 1998.
- [14] W.E. Mell, V. Nilsen, G. Kosaly, and J.J. Riley. Investigation of closure models for nonpremixed turbulent reacting flows. *Phys. Fluids*, 6 :1331–1358, 1994.
- [15] S. Rao and C.J. Rutland. A flamelet time scale model for non-premixed combustion including chemical kinetic effects. *Combust. Flame*, 133 :189–191, 2003.
- [16] B. Cuenot, F.N. Egolfopoulos, and T. Poinsot. An unsteady laminar flamelet model for non-premixed combustion. *Combust. Theory Modelling*, 4 :77–97, 2000.
- [17] H. Pitsch. Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames. *Combust. Flame*, 123(3) :358–374, 2000.
- [18] H. Pitsch and Steiner H. Scalar mixing and dissipation rate in large-eddy simulations of non-premixed turbulent combustion. *Proc. Comb. Inst.*, 28 :41–49, 2000.
- [19] H. Pitsch and N. Peters. A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust. Flame*, 114(1–2) :26–40, 1998.

