



HAL
open science

Contribution au développement des outils de simulation numérique de la combustion supersonique

Dmitry Davidenko

► **To cite this version:**

Dmitry Davidenko. Contribution au développement des outils de simulation numérique de la combustion supersonique. Energie électrique. Université d'Orléans, 2005. Français. NNT: . tel-00012170

HAL Id: tel-00012170

<https://theses.hal.science/tel-00012170>

Submitted on 21 Apr 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITE D'ORLEANS

THÈSE
PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ D'ORLÉANS
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

Discipline : MÉCANIQUE ET ÉNERGÉTIQUE

PAR

DAVIDENKO DMITRY

**CONTRIBUTION AU DÉVELOPPEMENT DES OUTILS DE SIMULATION
NUMÉRIQUE DE LA COMBUSTION SUPERSONIQUE**

Soutenue le 19 décembre 2005

MEMBRES DU JURY :

- **M. Iskender GÖKALP** Directeur de thèse / Directeur du Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs du CNRS, Orléans
- **M. Stéphane CORDIER** Directeur de thèse / Professeur à l'Université d'Orléans
- **M. Boujema IZRAR** Président, représentant de l'EDST / Professeur à l'Université d'Orléans
- **M. Michel CHAMPION** Rapporteur / Directeur du Laboratoire de Combustion et de Détonique du CNRS, Poitiers
- **M. Alexander KONNOV** Rapporteur / Professeur à Vrije Universiteit Brussel, Belgique
- **M. Dominique SCHERRER** Examineur / Adjoint au directeur au Département de l'Énergétique Fondamentale et Appliquée de l'ONERA

Remerciements

Je remercie tout d'abord mes directeurs de thèse monsieur Iskender Gökalp, directeur de recherche au CNRS, et monsieur Stéphane Cordier, professeur à l'Université d'Orléans, pour l'encadrement de mon travail, pour leur soutien et leur sympathie. Je tiens à remercier monsieur Gökalp, en tant que directeur du LCSR, et monsieur Michèle Cathonnet, l'ancien directeur du LCSR, pour leur aide et leur accueil au sein du laboratoire.

Que les membres du jury de thèse, messieurs Michèle Champion, directeur de recherche au CNRS, Alexander Konnov, professeur à Vrije Universiteit Brussel, Dominique Scherrer, adjoint au directeur à l'ONERA, Boujema Izrar, professeur à l'Université d'Orléans, trouvent ici l'expression de ma gratitude distinguée pour leurs commentaires, leurs remarques pertinentes ainsi que pour leur appréciation des résultats de mes études.

J'exprime mes remerciements les plus profonds à monsieur François Falempin, chef du département Propulsion et Pyrotechnie de MBDA France, pour tous ses efforts qui ont permis d'assurer la mise en place et le co-financement de mon travail de thèse ainsi que la poursuite de mes études au LCSR. Je remercie vivement monsieur Emmanuel Dufour, ingénieur chez MBDA France, pour sa disponibilité pour suivre mon travail et m'apporter son aide tout au long de la thèse. J'exprime ma reconnaissance très sincère à messieurs Marc Bouchez, Jean-Pierre Minard et Émeric Daniau, ingénieurs chez MBDA France, pour l'intérêt porté à mes études et pour leurs amitiés.

Je remercie bien cordialement monsieur Philippe Magre, chef de l'unité Expérimentation fondamentale à l'ONERA, pour ses conseils précieux et de m'avoir apporté son soutien ainsi que du partage de ses compétences scientifiques. J'exprime ma profonde reconnaissance à messieurs Laurent Serre, Dominique Scherrer, Daniel Gaffié et Vladimir Sabel'nikov, chefs et spécialistes à l'ONERA, pour leur assistance organisationnelle et scientifique, très précieuse, qui m'a aidé à l'orientation de mes études vers des problèmes d'actualité. Je remercie monsieur François Vuillot, adjoint au directeur à l'ONERA, et monsieur Gilles Chaineray pour leur assistance qui m'a permis de mettre en place et d'exploiter le code MSD.

J'exprime ma gratitude sincère à monsieur Ivan Fedioun, maître de conférence à l'École Polytechnique de l'Université d'Orléans, pour ses compétences scientifiques, sa perspicacité et son amitié qui me restent très précieuses.

Que monsieur Joël Pagé trouve ici ma profonde reconnaissance pour sa disponibilité pour partager ses connaissances scientifiques ainsi que linguistiques que je trouve très enrichissantes. Je tiens à le remercier pour l'énorme effort qu'il a fait pour vérifier et corriger le texte de ce mémoire.

Je remercie les membres de l'équipe Combustion turbulente au LCSR, messieurs Christian Chauveau et Brahim Sarh ainsi que madame Pascale Gillon pour leur soutien et leurs encouragements. J'exprime mes remerciements aux chercheurs et enseignants-chercheurs au LCSR messieurs Philippe Dagaut, Christian Vovelle et Laurent Catoire ainsi que mademoiselles Gabrielle Dupré et Sandra Javoy, madame Nabiha Chaumeix pour avoir partagé leurs compétences scientifiques et pour leur sympathie. Je remercie cordialement mes collègues et mes amis Nadia Boutkovskaya, Yuri Bedjanian, Evgeny Shafirovich et Alexander Kukuy pour leur aide et leurs amitiés sincères.

Que l'équipe administrative et technique du LCSR trouve ici mes remerciements et mes reconnaissances. Je remercie cordialement madame Murielle Chevrier pour son soutien, sa bonne humeur et sa sympathie. J'exprime ma reconnaissance à mesdames Claude Fougère,

Remerciements

Renée Herbin, Nadège Oriol et Jeannine Clinard ainsi qu'à leur ancienne collègue Denise de Plinval pour leur aide très efficace. Je remercie également messieurs Michèle Roblain, Jacques Sabatier et Fabrice Peyroux pour leur disponibilité et leur assistance.

Merci aux anciens et actuels thésards Nicolas Lardjane, Emmanuel Bodèle, David Pavé, Thierry Lachaux, Cécile Pichard, Nabil Belaradh, Fabien Halter, Bruno Imbert, Pablo Escot, Fouzi Tabet, Marc Ferrier, Mayuresh Sahasrabudhe, Caroline Marchal, Ludivine Gougeon, Cecile Cohé, Antoine Osmont pour leur ambiance très dynamique et sympathique.

J'exprime ma reconnaissance sincère à l'équipe Combustion supersonique au MAI, dont je suis élève, pour m'avoir formé et soutenu ainsi que pour être restée en contact avec moi pendant des années.

Je termine par remercier chaleureusement ma famille qui m'a beaucoup soutenu et qui reste toujours à mes côtés.

À mes enfants Olga et Alexey.

À la mémoire de Zoya.

Table des matières

Nomenclature.....	10
Introduction générale.....	17
Chapitre 1.	
Présentation du code MSD	21
1.1. Bases théoriques et modèles	21
1.1.1. Hypothèses de base.....	21
1.1.2. Équations de Navier-Stokes moyennées selon Reynolds	21
1.1.3. Modèle thermodynamique.....	23
1.1.4. Modèle du transport moléculaire	25
1.1.5. Modèle chimique	26
1.1.6. Modèle de turbulence	28
1.2. Méthodes numériques	32
1.2.1. Notions de base.....	32
1.2.2. Discrétisation spatiale.....	33
1.2.2.1. Flux convectifs	33
1.2.2.2. Flux visqueux	35
1.2.2.3. Approche bidimensionnelle.....	36
1.2.3. Intégration temporelle.....	38
1.2.4. Conditions aux limites	40
1.2.5. Traitement de la couche limite pariétale.....	42
Chapitre 2.	
Amélioration du modèle de turbulence du code MSD	45
2.1. Synthèse bibliographique.....	45
2.1.1. Anomalie jet rond/jet plan en incompressible	45
2.1.2. Effets de compressibilité.....	46
2.1.3. Modifications du modèle $k-\varepsilon$	47
2.1.4. Applications du modèle $k-\varepsilon$ avec les corrections.....	48
2.1.5. Paramètres du transport turbulent.....	49
2.1.6. Définition du nombre de Mach convectif.....	49
2.1.7. Conclusion	50
2.2. Correction de Pope limitée	52
2.2.1. Développement.....	52

2.2.2. Validation	55
2.2.2.1. Conditions expérimentales	55
2.2.2.2. Conditions de simulation.....	56
2.2.2.3. Résultats de simulation.....	58
2.3. Validation de la correction de Sarkar	61
2.3.1. Présentation générale des cas test	61
2.3.2. Conditions expérimentales.....	62
2.3.3. Conditions de simulation	63
2.3.4. Résultats de simulation	66
2.4. Validation du modèle $k-\varepsilon$ avec les corrections de Pope et de Sarkar	70
2.4.1. Jet supersonique d'air dans l'atmosphère au repos.....	70
2.4.1.1. Présentation générale du cas test	70
2.4.1.2. Conditions expérimentales	71
2.4.1.3. Conditions de simulation.....	71
2.4.1.4. Résultats de simulation.....	73
2.4.2. Jets compressibles co-axiaux hydrogène-air dans l'atmosphère au repos.....	76
2.4.2.1. Présentation générale des cas test.....	76
2.4.2.2. Conditions expérimentales	76
2.4.2.3. Conditions de simulation.....	77
2.4.2.4. Résultats de simulation.....	80
2.4.3. Jets supersoniques co-axiaux de mélange hélium-oxygène et d'air dans l'atmosphère au repos	86
2.4.3.1. Présentation générale de cas test	86
2.4.3.2. Conditions expérimentales	87
2.4.3.3. Conditions de simulation.....	88
2.4.3.4. Résultats de simulation.....	90
2.5. Paramètres du transport turbulent	94
2.5.1. Présentation des données DNS	94
2.5.2. Méthode du post-traitement des données DNS	96
2.5.3. Résultats du post-traitement des données DNS	98
2.6. Conclusions.....	103
 Chapitre 3.	
Modèles chimiques pour la combustion supersonique de l'hydrogène et du mélange méthane-hydrogène dans de l'air.....	
105	105
3.1. Objectifs principaux et conditions générales	105
3.2. Synthèse bibliographique.....	107

3.2.1. Mécanismes cinétiques chimiques d'oxydation de l'hydrogène	107
3.2.2. Mécanismes cinétiques chimiques d'oxydation du méthane.....	109
3.2.2.1. Mécanismes détaillés.....	109
3.2.2.2. Mécanismes squelettiques	111
3.2.2.3. Mécanismes réduits et globaux	112
3.2.3. Expériences sur l'autoinflammation	114
3.2.3.1. Autoinflammation de l'hydrogène	115
3.2.3.2. Autoinflammation du méthane.....	116
3.2.3.3. Autoinflammation du combustible méthane-hydrogène	118
3.2.4. Méthodes de réduction de modèles chimiques	119
3.2.5. Effets de la viciation	121
3.2.6. Réactions dépendantes de la pression.....	122
3.2.7. Conclusions.....	123
3.3. Développement d'une corrélation pour le délai d'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène avec de l'air	124
3.3.1. Corrélation pour le délai d'autoinflammation de l'hydrogène	124
3.3.2. Corrélation pour le délai d'autoinflammation du méthane.....	129
3.3.3. Corrélation pour le délai d'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène ...	130
3.4. Analyse de performances de mécanismes cinétiques chimiques.....	133
3.4.1. Méthode d'analyse.....	133
3.4.2. Simulations d'autoinflammation de CH ₄ -H ₂ dans de l'air pur avec les mécanismes détaillés	134
3.4.3. Simulations d'autoinflammation de CH ₄ -H ₂ dans de l'air pur avec les mécanismes squelettiques.....	136
3.4.4. Simulations d'autoinflammation de CH ₄ -H ₂ dans de l'air pur avec les mécanismes globaux et semi-globaux	138
3.4.5. Conclusions concernant les simulations d'autoinflammation de CH ₄ -H ₂	139
3.4.6. Simulations d'autoinflammation de H ₂ dans de l'air pur	140
3.4.7. Simulations d'autoinflammation de H ₂ dans de l'air vicié par H ₂ O.....	141
3.4.8. Simulations d'autoinflammation de H ₂ dans de l'air vicié par NO	142
3.4.9. Conclusions concernant les simulations d'autoinflammation de H ₂	144
3.5. Obtention de mécanismes réduits pour l'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène et de l'hydrogène.....	146
3.5.1. Méthode de réduction	146
3.5.2. Réduction du mécanisme LCSR.....	149
3.5.2.1. Conditions de réduction	149
3.5.2.2. Minimisation du nombre d'espèces réactives	149

3.5.2.3. Modification du mécanisme à 21 espèces et à 123 réactions.....	153
3.5.2.4. Minimisation du nombre de réactions.....	155
3.5.2.5. Application de l'approche EQS.....	160
3.5.2.6. Validation des mécanismes réduits	162
3.5.3. Réduction du mécanisme GRI-Mech v.3.0.....	166
3.5.3.1. Minimisation du nombre d'espèces réactives	166
3.5.3.2. Minimisation du nombre de réactions.....	169
3.5.3.3. Application de l'approche EQS.....	173
3.5.3.4. Version modifiée du mécanisme réduit.....	175
3.5.3.5. Validation des mécanismes réduits	176
3.5.4. Réduction de mécanismes d'oxydation de l'hydrogène dans de l'air vicié.....	181
3.5.4.1. Conditions de réduction	181
3.5.4.2. Version réduite du mécanisme de Mueller.....	182
3.5.4.3. Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0.....	182
3.6. Validation de mécanismes réduits avec un modèle du réacteur à diffusion.....	183
3.6.1. Modèle du réacteur à diffusion et conditions de simulation.....	183
3.6.2. Autoinflammation de l'hydrogène prédite par le mécanisme de Mueller	185
3.6.3. Autoinflammation de l'hydrogène prédite par le mécanisme GRI-Mech v.3.0	187
3.6.4. Autoinflammation de CH ₄ -H ₂ prédite par le mécanisme GRI-Mech v.3.0.....	189
3.6.5. Autoinflammation de CH ₄ -H ₂ prédite par le mécanisme LCSR réduit.....	191
3.7. Conclusions.....	192
 Chapitre 4.	
Simulation de combustion supersonique dans une chambre de combustion expérimentale	
195	
4.1. Synthèse bibliographique.....	195
4.1.1. Études expérimentales de la combustion supersonique.....	195
4.1.2. Simulations numériques de la combustion supersonique	198
4.2. Présentation de l'expérience LAERTE.....	201
4.2.1. Banc d'essai LAERTE à l'ONERA.....	201
4.2.2. Géométrie de la soufflerie supersonique et de la chambre de combustion.....	201
4.2.3. Conditions expérimentales.....	203
4.2.3.1. Conditions dans l'écoulement d'air vicié.....	203
4.2.3.2. Conditions d'injection	203
4.2.3.3. Conditions pariétales thermiques	204
4.2.4. Données expérimentales disponibles.....	204

4.3. Étude numérique de la combustion supersonique de l'hydrogène	205
4.3.1. Méthodologie et conditions générales de l'étude	205
4.3.1.1. Modèles numériques	205
4.3.1.2. Conditions thermiques pariétales	207
4.3.1.3. Conditions d'entrée de l'air vicié	208
4.3.1.4. Conditions d'injection	210
4.3.1.5. Configuration axisymétrique de la chambre	211
4.3.2. Effet des conditions aux limites sur la solution	213
4.3.3. Effet du maillage et son adaptation	219
4.3.4. Effet du modèle de turbulence	224
4.3.5. Effet du modèle chimique	228
4.3.6. Effet de la viciation par préchauffage d'air	232
4.3.7. Effets tridimensionnels et validation des résultats de simulation	235
4.3.7.1. Domaines de calcul	235
4.3.7.2. Simulation de la tuyère	238
4.3.7.3. Simulation de la chambre de combustion	240
4.3.8. Conclusions	250
4.4. Étude numérique de la combustion supersonique du mélange méthane-hydrogène	252
4.4.1. Conditions de simulation	252
4.4.2. Résultats de simulation	252
4.4.3. Conclusions	254
4.5. Conclusions sur la simulation de la chambre LAERTE	257
Conclusions générales et perspectives	259
Références bibliographiques	261
Annexe A. Mécanismes simplifiés pour l'autoinflammation de H2 dans de l'air pur	277
Annexe B. Version réduite du mécanisme LCSR pour l'autoinflammation de CH4-H2 dans de l'air pur	279
Annexe C. Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0 pour l'autoinflammation de CH4-H2 dans de l'air pur	289
Annexe D. Version réduite du mécanisme de Mueller pour l'autoinflammation de H2 dans de l'air vicié	298
Annexe E. Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0 pour l'autoinflammation de H2 dans de l'air vicié	300

Nomenclature

A	– aire, facteur pré-exponentiel (loi d'Arrhenius)
A_x, A_y, A_z	– aires normales aux directions des axes cartésiennes
A_ϕ	– facteur pré-exponentiel (corrélation du délai d'autoinflammation)
a	– vitesse du son, paramètre de l'approximation de SRI
B	– paramètre d'approximation (loi de Sutherland)
b	– puissance de la température (loi d'Arrhenius), paramètre de l'approximation de SRI
$b_{0.8}$	– épaisseur dynamique de la couche de mélange
C	– concentration molaire
CFL	– nombre de Courant-Friedrichs-Lewy
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$	– coefficients de fermeture du modèle de turbulence $k-\varepsilon$
$C_{\varepsilon 3}$	– coefficient de fermeture de la correction de Pope
$C_{\varepsilon 2 \text{Pope}}$	– coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé (correction de Pope)
$\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}$	– coefficient $C_{\varepsilon 2 \text{Pope}}$ limité (correction de Pope)
C_μ	– coefficient de fermeture pour la viscosité turbulente
c	– coefficient, paramètre de l'approximation de SRI
c_m	– coefficient de polynôme de c_p
c_p	– chaleur spécifique massique à pression constante
c_v	– chaleur spécifique massique à volume constant
D	– coefficient de diffusion, diamètre
D_j	– diamètre interne d'injecteur
D_{je}	– diamètre externe d'injecteur
D_e	– diamètre externe d'un co-courant
d	– paramètre de l'approximation de SRI
E	– énergie d'activation (loi d'Arrhenius)
e	– énergie interne spécifique massique
\bar{e}	– vecteur de direction
F	– fonction de passage entre les limites de pression zéro et de pression infinie
\mathbf{F}	– vecteur des flux convectifs
f_{st}	– rapport stœchiométrique massique du combustible et de l'air
G	– débit massique intégral

h	– enthalpie spécifique massique
J	– flux massique de diffusion
K	– constante de vitesse de réaction chimique
K_C	– constante d'équilibre chimique
K_U	– taux de décroissance de vitesse sur l'axe d'un jet
K'	– critère de l'état quasi-stationnaire basé sur la fraction molaire d'une espèce
K''	– critère de l'état quasi-stationnaire basé sur la fraction massique d'une espèce
k	– énergie cinétique turbulente
k_{eff}	– efficacité catalytique du 3 ^e corps
L	– longueur, opérateur mathématique
Le	– nombre de Lewis
l	– échelle turbulente intégrale de longueur
M	– espèce catalytique, ou 3 ^e corps
M	– masse molaire, nombre de Mach
M_c	– nombre de Mach convectif
N	– nombre
N_i, N_j, N_k	– nombre de cellules selon les directions du maillage numérique
N_r	– nombre de réactions chimiques
N_s	– nombre d'espèces chimiques
N_ϕ	– nombre de points expérimentaux groupés selon la richesse
n	– numéro du pas de temps
\vec{n}	– vecteur normal unitaire
P	– pression
P_{Pitot}	– pression Pitot
P_r	– pression réduite pour la constante de vitesse d'une réaction dépendante de la pression
Pr	– nombre de Prandtl
q	– flux de chaleur, notion générique pour une quantité primitive
\mathbf{q}	– vecteur des quantités primitives
q'	– différence spatiale d'une quantité
q''	– différence spatiale de q'
Q'	– valeur adimensionnée de q'
Q''	– valeur adimensionnée de q''
R	– constant de gaz
R_u	– constante universelle des gaz parfaits

Re	– nombre de Reynolds
r	– rayon, coefficient de corrélation, rapport des quantités évaluées dans deux cellules
r'	– rapport des différences de quantités évaluées dans deux paires de cellules
S	– surface, score total des erreurs de réduction
Sc	– nombre de Schmidt
s	– entropie spécifique massique
s_1, \dots, s_7	– scores correspondant aux erreurs de réduction
s_{ij}	– tenseur des taux de déformation
T	– température
T_0	– paramètre d'approximation (loi de Sutherland)
T^*, T^{**}, T^{***}	– paramètres de l'approximation de Troe
t	– temps
t^d	– temps décalé
t_{ij}	– tenseur des contraintes visqueuses laminaires
t_{inf}	– délai d'autoinflammation
Δt	– pas de temps
U	– vitesse moyenne
U_c	– vitesse convective
\mathbf{U}	– vecteur des quantités conservatives moyennes
u	– composante de vitesse selon x
\vec{u}	– vecteur vitesse
$u_1, u_2, u_3,$	– notions tensorielles pour les composantes de vitesse
u_τ	– vitesse de frottement
V	– volume
v	– composante de vitesse selon y
W	– terme source de production massique
\mathbf{W}	– vecteur des termes sources moyens
w	– composante de vitesse selon z
X	– fraction molaire
x	– coordonnée cartésienne
x_0	– position axiale de l'origine fictive d'un jet
$x_1, x_2, x_3,$	– notions tensorielles pour les coordonnées cartésiennes
\mathbf{x}	– vecteur des coordonnées cartésiennes
Y	– fraction massique

y	– coordonnée cartésienne
$y_{0.5}$	– demi-rayon dynamique du jet
y^+	– distance adimensionnée par rapport à une paroi
z	– coordonnée cartésienne

Lettres grecques :

α	– notion générique pour une direction de maillage, coefficient stœchiométrique de réaction directe, puissance de la concentration du combustible (corrélacion du délai d’autoinflammation), paramètre de l’approximation de Troe
$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_{1-3}$	– coefficients de fermeture de la correction de Sarkar
β	– coefficient stœchiométrique de réaction inverse, puissance de la concentration de l’oxygène (corrélacion du délai d’autoinflammation)
γ	– ratio des chaleurs spécifiques, somme des puissances α et β (corrélacion du délai d’autoinflammation)
Δ	– différence absolue
$\Delta_i, \Delta_j, \Delta_k$	– pas du maillage numérique selon ses directions
δ	– différence relative, coefficient de déformation de maillage
$\delta_{0.5}$	– taux d’épanouissement du jet
$\delta_{0.8}$	– taux d’épaississement de la couche de mélange
δ_{ij}	– symbole de Kronecker
ε	– taux de dissipation de l’énergie cinétique turbulente, seuil
ε_d	– taux de dissipation compressible de l’énergie cinétique turbulente
ζ	– notion générique pour une coordonnée cartésienne, fraction molaire de l’hydrogène dans le combustible
η	– fraction massique de l’hydrogène dans le combustible
η_c	– rendement de consommation de combustible
η_{comb}	– rendement de combustion à partir de η_c
η_{mix}	– rendement de mélange
η_p	– rendement de formation de produits de combustion
η_{prod}	– rendement de combustion à partir de η_p
θ	– paramètre du schéma d’intégration temporelle, température d’activation globale (paramètre de corrélacion), variable d’intégration
κ	– constante de Kármán
λ	– conductivité thermique
μ	– viscosité dynamique
ξ	– paramètre du schéma d’intégration temporelle

ρ	– masse volumique
σ	– facteur de poids
σ_k	– coefficient de transport de l'énergie cinétique turbulente
σ_ε	– coefficient de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
τ	– contrainte visqueuse
τ_{ij}	– tenseur des contraintes de Reynolds
τ_T	– taux de turbulence
τ_ϕ	– approximation du délai d'autoinflammation
Φ	– vecteur des flux visqueux
ϕ	– richesse d'un mélange combustible-oxydant
φ	– fréquence
χ	– invariant du taux d'étirement du vortex (correction de Pope)
χ_{lim}	– paramètre limiteur (correction de Pope)
Ψ_r	– fréquence d'apparition de la réaction r dans un ensemble de mécanismes cinétiques
Ψ_s	– fréquence d'apparition de l'espèce s dans un ensemble de mécanismes cinétiques
ψ	– limiteur de pente
ω	– taux spécifique de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, taux de réaction chimique
ω_{ij}	– tenseur de rotation

Indices :

0	– conditions de vol, limite de pression zéro
1	– conditions dans l'écoulement rapide d'une couche de mélange
2	– conditions dans l'écoulement lent d'une couche de mélange
-0.8, 0, 0.8	– la limite inférieure, le milieu et la limite supérieure d'une couche de mélange entre deux contre-courants
a	– conditions sur l'axe, maillage adapté
b	– réaction inverse
c	– combustible restitué pour un mélange réactif
cc	– paroi du corps central de la chambre LAERTE
e	– conditions dans un co-courant
eq	– conditions d'équilibre chimique
f	– réaction directe
inf	– conditions d'inflammation

ini	– conditions initiales
i, j, k	– indices tensoriels, directions du maillage numérique
j	– conditions d’injection
Max	– maximum global, limite supérieure imposée
m	– conditions du mélange de deux gaz à 50 % en masse
max	– maximum
Min	– limite inférieure imposée
min	– minimum
mix	– mélange
moy	– moyenne
n	– numéro du pas de temps, numéro de point, projection sur une normale
o	– origine d’un axe
opt	– optimum
p	– produit de combustion
r	– conditions de récupération sur une paroi
r	– numéro de réaction chimique
s	– numéro d’espèce chimique
T	– conditions turbulentes
t	– conditions d’arrêt ou conditions totales
t	– projection sur une tangente
w	– conditions pariétales
x, y, z	– projections d’un vecteur sur les axes cartésiennes
α	– notion générique pour l’indice du maillage numérique
∞	– limite de pression infinie
\cap	– intersection
\cup	– union

Exposants :

+	– formation chimique, conditions décentrés à gauche d’une interface
–	– consommation chimique, conditions décentrés à droite d’une interface
ref	– valeur de référence
*	– valeur plafond

Signes diacritiques :

—	– moyenne de Reynolds
---	-----------------------

- ~ – moyenne de Favre
- ' – fluctuation par rapport à la moyenne de Reynolds
- " – fluctuation par rapport à la moyenne de Favre
- ° – conditions standard

Autres symboles :

- \Rightarrow – réaction irréversible
- \Leftrightarrow – réaction réversible
- $|\dots|$ – norme, valeur absolue

Introduction générale

Depuis plus de quarante années, la combustion supersonique est étudiée dans le but de créer des *superstatoréacteurs* (statoréacteurs à combustion supersonique) [Billig (1993), Curran (2001)]. Ce type de moteur aérobique permet d'effectuer un vol à des vitesses hypersoniques avec un nombre de Mach supérieur à 5-6.

La figure 1 présente un aspect possible d'un véhicule hypersonique générique et schématise le fonctionnement du superstatoréacteur. Une configuration « classique » consiste à placer le moteur sous le corps du véhicule afin d'utiliser les surfaces de ses avant- et arrière-corps pour capter de l'air et pour accélérer les produits de combustion générés par la chambre de combustion. Avant d'entrer dans la chambre, l'écoulement d'air traverse un système de chocs obliques dans l'entrée d'air qui sert à le comprimer par l'effet dynamique de décélération. Dans la chambre de combustion, le combustible est injecté dans l'écoulement d'air supersonique. Les conditions sont telles que le mélange s'enflamme spontanément et la combustion se réalise toujours dans l'écoulement supersonique. On parle donc de la « combustion supersonique ». Le temps de séjour du mélange réactif dans la chambre est limité à une milliseconde ou à quelques dixièmes de milliseconde.

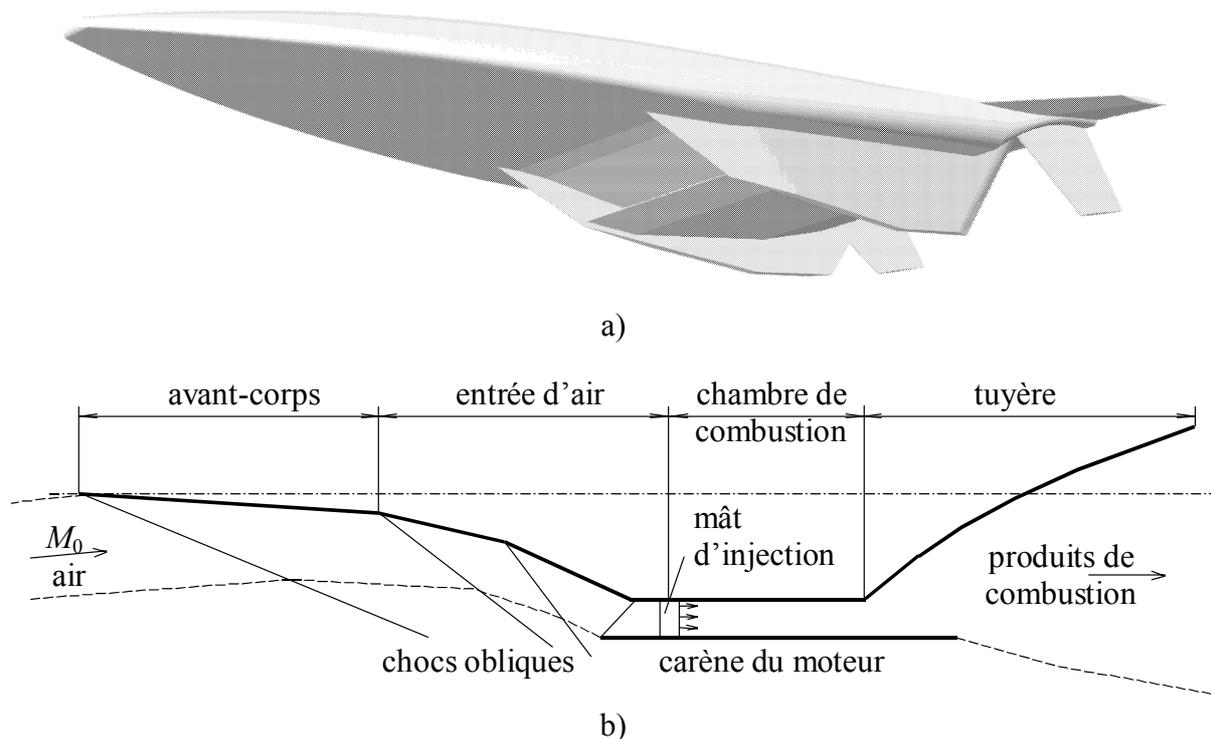


Figure 1. Aspect d'un véhicule hypersonique (a) et schéma de fonctionnement du superstatoréacteur (b)

Le vol hypersonique présente un intérêt pratique pour des applications militaires (missiles, avions de reconnaissance) et civiles (éléments de lanceurs spatiaux futurs). De nombreux concepts de véhicules hypersoniques sont actuellement étudiés dans le monde. En 2004 aux États-Unis, la NASA a essayé les deux premiers démonstrateurs hypersoniques en vol autonome aux nombres de Mach $M_0 = 7$ et de 10 [Marshall (2005)]. Le Japon, l'Australie, la Russie et la Chine développent leurs propres projets et participent aux différents projets de

collaboration internationale, notamment avec la France [Bouchez et al. (2001), Falempin et al. (2005)]. La France est un des pays qui mènent les activités les plus importantes dans le domaine de la propulsion hypersonique.

En France, plusieurs projets hypersonique ont été menés pendant les deux dernières dizaines d'années. Le programme PREPHA (Programme de REcherche sur la Propulsion Hypersonique Avancée) a été initié au début des années 90 par les ministères de la défense et de la recherche ayant pour objectif de déterminer des spécifications générales pour un lanceur spatial [Falempin et al. (1998)]. Dans le cadre de ce programme, la chambre de combustion supersonique CHAMOIS a été créée selon un concept de moteur [Bouchez et al. (1998)] et testée par Aérospatiale Matra Missiles (l'ancien nom de MBDA France) en simulant les conditions de vol à $M_0 = 6$. Le programme PREPHA a permis de mettre en place des moyens d'essais importants [Serre (2005)] ainsi que de développer des outils numériques.

Le programme JAPHAR (Joint Airbreathing Propulsion for Hypersonic Application Research) a été mené par l'ONERA et l'institut allemand DLR en 1997-2001 [Novelli et Koschel (2001)]. Ce programme avait pour objectif le développement d'une nouvelle configuration de « statomixte » (moteur fonctionnant en mode de combustion subsonique puis supersonique) pour un véhicule expérimental destiné à la plage de nombre de Mach $M_0 = 4-8$. Un modèle de la chambre de combustion du concept JAPHAR a été testé par l'ONERA. En outre, plusieurs simulations numériques de ce moteur ont été réalisées.

MBDA France et l'Institut d'aviation de Moscou (MAI) ont participé à un projet lancé en 1993 pour développer un concept de statomixte à géométrie variable. Ce moteur a été considéré comme prototype pour les conditions de vol à $M_0 = 3-12$ [Bouchez et al. (2001)]. Afin de valider les solutions technologiques proposées pour le prototype, un modèle de moteur à échelle réduite appelé PIAF a été testé sur le banc d'essais du MAI dans les conditions $M_0 = 4-7$ [Bouchez et al. (2003)].

Le programme PROMETHEE (PROgramme sur les Missions Et les Technologies Hypersoniques EmergentEs) [Serre et Falempin (2003)], démarré en 1999, représente un effort commun de l'ONERA et de MBDA France pour la création d'un statomixte à géométrie variable capable de fonctionner dans les conditions $M_0 = 2-8$. Un modèle de ce moteur alimenté en hydrocarbure endothermique a été fabriqué, en respectant l'échelle réelle de longueur, et testé à l'ONERA.

Le dernier projet commun de MBDA France et de l'ONERA qui se met en route est le programme LEA [Falempin et Serre (2005)]. Il envisage des essais en vol autonome à $M_0 = 4-8$ d'un démonstrateur hypersonique propulsé par un superstatoréacteur. Les objectifs de ce projet consistent à établir un bilan aéropulsif du système véhicule-moteur et à valider les outils de conception et d'essais au sol.

La chambre de combustion supersonique est l'élément critique du superstatoréacteur car, premièrement, son processus interne doit être stable et efficace dans toutes les conditions de vol et, deuxièmement, elle est le composant qui subit les charges thermiques et mécaniques les plus importantes. Un grand nombre d'essais ont déjà été effectués afin de déterminer sa performance intégrale et d'étudier l'état de l'écoulement réactif. Les résultats des essais au sol ont révélé les problèmes principaux suivants :

- il n'est pas toujours possible de respecter l'échelle réelle ;
- il est presque impossible de simuler les conditions réelles à l'entrée en terme de champs dynamique, thermique et de composition ;
- les conditions pariétales sont différentes de celles rencontrées dans la chambre réelle ;
- les connaissances issues de l'expérience ne sont pas assez complètes, de plus elles ne sont pas universelles.

En même temps, les modèles mathématiques et les méthodes numériques ont été considérablement développés pour la simulation des écoulements réactifs turbulents. Les

codes numériques de qualité scientifique et industrielle sont utilisés couramment dans la conception et dans l'exploitation d'essais. Les modèles numériques ne souffrent pas de la plupart des problèmes relatifs à l'expérience. En revanche, on trouve les autres difficultés particulières à la simulation de chambres de combustion :

- la résolution spatiale est souvent limitée dans des configurations tridimensionnelles complexes respectant une échelle réelle ;
- la modélisation de la turbulence, de la cinétique chimique et de leur interaction n'est pas encore mise au point ;
- l'application de la cinétique chimique d'hydrocarbures est compliquée à cause d'une grande talle de modèles de combustion associés ;
- la validation et la mise au point des modèles numériques sont souvent difficiles en raison du manque de cas test documentés.

Malgré tous ces problèmes, les approches expérimentale et numériques sont de plus en plus étroitement liées. Pour les études fondamentales de la combustion supersonique, l'ONERA a mis en place le banc d'essais LAERTE (LABoratoire des Écoulements Réactifs et de leurs Techniques d'Essais) [Collin et al. (1997)]. Munie de moyens de mesures avancés, cette installation a permis d'obtenir des résultats détaillés destinés à la validation des outils de simulation numérique de la combustion supersonique [Magre et Bouchardy (2000)].

L'ONERA développe des codes de calcul pour des applications aérospatiales. Parmi ces codes, le code MSD a été largement exploité par l'ONERA et par MBDA France dans le cadre de leurs programmes sur la propulsion hypersonique [Dufour et Bouchez (2001), Novelli et Koschel (2001)]. Ce code traite des problèmes mono- et diphasiques multidimensionnels. Il intègre un solveur RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) pour la phase gazeuse et des solveurs eulérien et lagrangien pour la phase dispersée. Le code MSD met en œuvre les méthodes multidomaines et multigrilles pour un maillage structuré. Plusieurs méthodes numériques d'intégration temporelle et de discrétisation spatiale sont disponibles dans le code, aussi bien que des modèles de turbulence et de combustion turbulente. Les modèles de combustion turbulente de MSD ont été validés sur les données issues de l'expérience LAERTE [Gaffié et al. (2001)].

La plupart de modèles développés pour le code MSD ont été transmis dans un nouveau code nommé CEDRE qui prend la place de MSD. Le code CEDRE créé également par l'ONERA est un logiciel intégrant plusieurs types de solveurs destinés à simuler de différents phénomènes aérothermochimiques de manière couplée. Ce code utilise le maillage non structuré. À l'aide de ce code, une étude numérique de combustion supersonique dans la chambre LAERTE a été présentée par Quintilla et al. (2005).

Cette thèse porte sur l'amélioration et le développement de modèles pour la simulation numériques de combustion turbulente dans le but de prédire le fonctionnement de chambres de combustion supersonique. Il s'agit des modèles de turbulence et de cinétique chimique de combustion de l'hydrogène et du méthane. Ces modèles sont destinés au code MSD. Dans un avenir proche, on envisage leur implantation dans le code CEDRE afin de les rendre accessibles aux utilisateurs de ce code. En outre, nous avons abordé la problématique de validation des modèles sur des résultats expérimentaux. Dans cette optique, nous avons développé plusieurs aspects méthodologiques.

Le travail de thèse a été effectué au sein du Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs (LCSR) du CNRS à Orléans. La thèse a été financée par MBDA France et par la Région Centre. Sa mise en place a été soutenue par le laboratoire MAPMO de l'Université d'Orléans et par la fédération de recherche EPEE du CNRS et de l'Université d'Orléans. L'ONERA a contribué à ce projet par la mise à notre disposition du code MSD ainsi que des résultats sur l'expérience LAERTE.

Le code MSD a été exploité sur plusieurs plates-formes informatiques. La plupart des simulations ont été effectuées grâce aux moyens de calcul de la fédération EPEE. Trois projets de recherche relatifs à la thèse ont été soutenus par l'IDRIS ce qui nous a permis d'accéder à ses ressources de calculs scientifiques.

Durant la période de thèse, ses résultats ont été publiés et présentés dans le cadre de congrès internationaux [Davidenko et al. (2002), Davidenko et al. (2003), Davidenko et al. (2004), Davidenko et al. (2005a,b,c)]. Une première version du modèle cinétique de combustion du méthane, développée au cours de la thèse, a été implantée dans les éditions officielles des codes MSD et CEDRE.

Le présent mémoire est constitué de quatre chapitres. Le chapitre 1 décrit les bases théoriques et numériques du code MSD. Le chapitre 2 est consacré à l'amélioration du modèle de turbulence $k-\varepsilon$ dans le but de l'adapter à la simulation des jets ronds compressibles. Le chapitre 3 présente une nouvelle méthode de réduction de mécanismes cinétiques ainsi que plusieurs modèles cinétiques réduits d'oxydation du méthane et de l'hydrogène donnés par cette méthode. Le chapitre 4 détaille la mise en œuvre des modèles développés et leur validation sur les résultats de l'expérience LAERTE.

Chapitre 1

Présentation du code MSD

Le code de calcul MSD développé par l'ONERA a servi de support numérique à la présente étude. Ce chapitre décrit les bases théoriques du code qui ont un impact direct sur le sujet de la thèse. Les informations sur le code MSD données par la suite ont été extraites de la thèse de Julien (1997), de la notice d'utilisation du code [Chainey et al. (2003)] et des fichiers sources mis à notre disposition par l'ONERA. Les fichiers sources correspondent à la version 3.1 du code.

1.1. Bases théoriques et modèles

1.1.1. Hypothèses de base

Dans la présente étude, nous ne considérons que des écoulements monophasiques gazeux. Les conditions sont telles que le gaz peut être vu comme un milieu continu. En d'autres termes, le libre parcours moyen est toujours inférieur à l'échelle la plus petite résolue numériquement.

Le gaz peut être constitué de plusieurs espèces chimiques réactives. Ces espèces sont supposées neutres en terme de charge électrique. Chaque atome ou molécule est toujours en état d'équilibre thermodynamique : l'état énergétique interne d'une particule s'adapte instantanément à l'état macroscopique du fluide, ce qui permet de caractériser l'énergie interne par une température identique pour toutes les espèces. Les taux de réactions chimiques sont finis et la composition chimique du gaz est généralement considérée hors équilibre.

L'écoulement peut être subsonique ou supersonique. Cela impose la nécessité de traiter le gaz comme un fluide compressible dont la densité dépend de la pression.

L'écoulement est assez rapide pour qu'on puisse négliger les effets de la gravité sur la quantité de mouvement et sur l'énergie interne. Il est toujours considéré dans un repère fixe ce qui implique l'absence de forces d'inertie.

Le gaz est visqueux. La déformation d'un élément de volume entraîne des contraintes internes.

L'écoulement est fortement turbulent. Cela signifie que le transport moléculaire de masse, de quantité de mouvement et d'énergie est peu important comparé au transport turbulent. En outre, les échelles turbulentes spatiale et temporelle sont supposées petites par rapport aux échelles respectives globales.

1.1.2. Équations de Navier-Stokes moyennées selon Reynolds

À un instant t et à un point déterminé par les trois coordonnées spatiales (x, y, z) , ou respectivement $(x_i, i = 1, 2, 3)$, un écoulement turbulent est caractérisé par des valeurs instantanées des quantités suivantes : la pression P , la température T , les trois composantes spatiales de vitesse (u, v, w) , ou $(u_i, i = 1, 2, 3)$, et les fractions massiques des espèces chimiques $(Y_s, s = 1, \dots, N_s)$. À partir de ces quantités, des modèles appropriés permettent de déduire d'autres quantités nécessaires telles que la masse volumique ρ , l'énergie interne e et l'enthalpie h , ainsi que les propriétés du transport moléculaire.

En considérant la turbulence sous forme de perturbations chaotiques à haute fréquence par rapport à un état relativement stable, nous pouvons présenter une valeur instantanée comme la somme de ses composantes moyenne et fluctuante. Pour la pression et pour la masse volumique, nous utilisons la décomposition classique de Reynolds qui s'écrit :

$$P = \bar{P} + P', \quad \rho = \bar{\rho} + \rho' \quad (1.1)$$

Il est plus pratique d'appliquer la décomposition de Favre (1965) aux autres quantités. À titre d'exemple, la vitesse u décomposée selon Favre est :

$$u = \tilde{u} + u'' \quad (1.2)$$

avec

$$\tilde{u} = \overline{\rho u} / \bar{\rho} \quad (1.3)$$

Le mouvement d'un fluide visqueux peut être décrit par les équations de Navier-Stokes complétées par une équation de continuité et par une équation de bilan de l'énergie. Ces équations pour les quantités instantanées sont présentées dans la littérature, voir par exemple Candel (1990). L'obtention des équations moyennées est bien connue, elle est particulièrement détaillée dans le livre de Wilcox (1998). Nous présentons ici leur forme finale :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{t}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}] \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} (\tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i) + \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j (\tilde{h} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i) + \tilde{u}_j \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''}] = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} [-\bar{q}_j - q_{Tj} + \bar{t}_{ij} u_i'' - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} + \tilde{u}_i (\bar{t}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''})] \end{aligned} \quad (1.6)$$

Quant au bilan de masse des espèces chimiques, il est exprimé en terme de fractions massiques :

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_s)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_s)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{J}_{sj} + \overline{\rho u_j'' Y_s''}] + \bar{W}_s \quad (1.7)$$

Il suffit de formuler les équations (1.7) pour $N_s - 1$ espèces et, pour l'espèce restante, utiliser la condition :

$$\sum_{s=1}^{N_s} \tilde{Y}_s = 1 \quad (1.8)$$

Dans les équations (1.5)-(1.7), les termes dus au transport moléculaire sont les suivants : \bar{t}_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, \bar{q}_j est le flux de chaleur, \bar{J}_{sj} est le flux massique de l'espèce s . Le terme \bar{W}_s exprime le taux net de production chimique de l'espèce s . Dans l'équation (1.6), le terme q_{Tj} représente le flux de chaleur dû au transport turbulent :

$$q_{Tj} = \overline{\rho u_j'' h''} + \sum_s h_s (\tilde{T}) \overline{\rho u_j'' Y_s''} \quad (1.9)$$

Afin de fermer le système d'équations (1.4)-(1.7), il faut adopter plusieurs modèles. Les sections suivantes décrivent comment ces modèles sont mis en œuvre dans le code MSD.

1.1.3. Modèle thermodynamique

Le modèle thermodynamique est basé sur la loi d'état des gaz parfaits :

$$P = \rho T \frac{R_u}{M} = \rho T R \quad (1.10)$$

M est la masse molaire du gaz ; R_u est la constante universelle des gaz parfaits et $R = R_u / M$ est la constante du gaz étudié.

Pour les espèces pures, le code MSD utilise les données thermodynamiques suivantes en tant que données de base : la masse molaire M_s , l'enthalpie standard h_s° , l'entropie standard s_s° et la chaleur spécifique à pression constante $c_{P_s}(T)$. La fonction $c_{P_s}(T)$ est définie sous forme d'un polynôme de degré 7 :

$$c_{P_s}(T) = M_s^{-1} \sum_{m=0}^7 c_{m_s} (T/1000)^m \quad (1.11)$$

L'enthalpie h_s° et l'entropie s_s° correspondent aux conditions standard : $T^\circ = 298.15$ K et $P^\circ = 101325$ Pa. La valeur de h_s° inclut la chaleur de formation de l'espèce chimique. L'enthalpie et l'entropie sont calculées en fonction de T par les formules suivantes :

$$h_s(T) = h_s^\circ + \int_{T^\circ}^T c_{P_s}(\theta) d\theta \quad (1.12)$$

$$s_s(T, P) = s_s^\circ + \int_{T^\circ}^T \frac{c_{P_s}(\theta)}{\theta} d\theta - R_s \ln \frac{P}{P^\circ} \quad (1.13)$$

Les propriétés thermodynamiques d'un mélange multi-espèces sont déterminées à partir des propriétés de ses composants et de leurs fractions massiques. La masse molaire moyenne s'exprime de la façon suivante :

$$M = \left(\sum_s Y_s / M_s \right)^{-1} \quad (1.14)$$

La composition du mélange peut également être définie par les fractions molaires X_s ou par les concentrations C_s . Les relations entre Y_s , X_s et C_s sont les suivantes :

$$X_s = M Y_s / M_s \quad (1.15)$$

$$C_s = \rho Y_s / M_s \quad (1.16)$$

La concentration totale du mélange est :

$$C = \sum_s C_s = \rho / M \quad (1.17)$$

Les autres propriétés du mélange sont calculées comme il suit :

$$R = R_u / M = \sum_s R_s Y_s \quad (1.18)$$

$$c_P = \sum_s c_{P_s} Y_s \quad (1.19)$$

$$h = \sum_s h_s Y_s \quad (1.20)$$

$$s = \sum_s s_s Y_s - \sum_s R_s Y_s \ln X_s \quad (1.21)$$

Les relations suivantes sont vérifiées pour les espèces pures et pour leur mélange :

$$c_V = c_P - R \quad (1.22)$$

$$\gamma = c_P / c_V \quad (1.23)$$

$$e = h - P/\rho = h - T R \quad (1.24)$$

Les fractions massiques des espèces sont considérées comme des variables indépendantes car les taux de réactions chimiques sont finis. On fixe la composition du mélange réactif pour vérifier les relations différentielles suivantes :

$$c_P = \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_{P, Y_s} \quad (1.25)$$

$$c_V = \left. \frac{\partial e}{\partial T} \right|_{\rho, Y_s} \quad (1.26)$$

$$a^2 = \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_{s, Y_s} = \gamma T R \quad (1.27)$$

a est la vitesse du son.

Quand il s'agit de l'état moyen d'un écoulement turbulent, les relations thermodynamiques exactes sont plus complexes. La loi d'état des gaz parfaits devient :

$$\bar{P} = \overline{\rho(\tilde{T} + T'')} \sum_s R_s (\tilde{Y}_s + Y_s'') = \bar{\rho} \tilde{T} \sum_s R_s \tilde{Y}_s + \sum_s R_s \overline{\rho T'' Y_s''} \quad (1.28)$$

Les expressions pour l'enthalpie moyenne et pour l'énergie interne moyenne s'écrivent :

$$\bar{\rho} \tilde{h} = \overline{\rho(\tilde{h}_s + h_s'')(\tilde{Y}_s + Y_s'')} = \sum_s \left[\bar{\rho} h_s(\tilde{T}) \tilde{Y}_s + c_{P_s}(\tilde{T}) \overline{\rho T'' Y_s''} \right] \quad (1.29)$$

$$\bar{\rho} \tilde{e} = \bar{\rho} \tilde{h} - \bar{P} = \sum_s \left[\bar{\rho} h_s(\tilde{T}) \tilde{Y}_s - \bar{\rho} \tilde{T} R_s \tilde{Y}_s + (c_{P_s}(\tilde{T}) - R_s) \overline{\rho T'' Y_s''} \right] \quad (1.30)$$

On peut négliger les corrélations entre T'' et Y_s'' si la masse molaire du mélange est constante [Libby et Williams (1994)]. La pratique généralement acceptée est de les négliger quelle que soit la variation de la masse molaire. Les relations entre les quantités moyennes ont alors la même forme que pour les quantités instantanées.

La détermination des conditions d'arrêt est un point important. L'enthalpie d'arrêt, ou l'enthalpie totale, d'un écoulement turbulent est définie par :

$$\bar{\rho} \tilde{h}_t = \overline{\rho \left[\tilde{h} + h'' + \frac{1}{2} (\tilde{u}_i \tilde{u}_i + u_i'' u_i'') \right]} = \bar{\rho} \left(\tilde{h} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \right) + \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''} \quad (1.31)$$

Le dernier terme correspond à l'énergie cinétique de la turbulence.

Pour l'enthalpie totale ainsi définie, il existe une température considérée comme la température d'arrêt, ou la température totale \tilde{T}_t , qui vérifie l'égalité suivante :

$$\tilde{h}_t = \sum_s h_s(\tilde{T}_t) \tilde{Y}_s \quad (1.32)$$

En adoptant cette définition de \tilde{T}_t , nous devons admettre que le processus d'arrêt se réalise instantanément (la composition chimique est figée) et que l'énergie cinétique turbulente est complètement dissipée et convertie en chaleur.

Afin d'obtenir la pression d'arrêt, ou la pression totale \tilde{P}_t , on suppose également que le processus d'arrêt est isentropique :

$$s(\tilde{T}_t, \tilde{P}_t, \tilde{Y}_s) = s(\tilde{T}, \tilde{P}, \tilde{Y}_s) \quad (1.33)$$

Compte tenu de (1.13) et de (1.21), \tilde{P}_t est déterminée par la formule :

$$\tilde{P}_t = \tilde{P} \exp \left[\tilde{R}^{-1} \sum_s Y_s \int_{\tilde{T}}^{\tilde{T}_t} \frac{c_{p_s}(\theta)}{\theta} d\theta \right] \quad (1.34)$$

Lorsque l'on utilise un thermocouple ou un tube de Pitot pour des mesures dans un écoulement turbulent, la stagnation devant la sonde n'est pas parfaite si sa taille est comparable à l'échelle turbulente de longueur. Quand il s'agit des résultats expérimentaux sur la température totale ou sur la pression Pitot, nous supposons que les conditions de mesures sont telles que l'énergie cinétique turbulente ne se dissipe pas. Par conséquent, la contribution de la turbulence ne doit pas être prise en compte dans la formule (1.31) pour comparer les résultats de calcul aux données expérimentales.

1.1.4. Modèle du transport moléculaire

Le code MSD met en œuvre un modèle très simplifié pour déterminer les propriétés du transport moléculaire tels que la viscosité μ , la conductivité thermique λ et les coefficients de diffusion D_s . Dans la présente étude, cette approche est jugée acceptable parce que l'effet du transport moléculaire est supposé faible.

La viscosité moléculaire d'une espèce pure est calculée par la loi de Sutherland :

$$\mu_s(T) = \mu_{0s} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + B_s}{T + B_s} = \left[\mu_{0s} \frac{T_0 + B_s}{T_0^{3/2}} \right] \frac{T^{3/2}}{T + B_s} \quad (1.35)$$

μ_{0s} , T_0 et B_s sont les paramètres d'approximation. En effet, le code n'utilise que deux paramètres : le facteur entre les crochets et le terme B_s .

La viscosité du mélange est donnée par la relation :

$$\mu = \left(\sum_s Y_s / \mu_s \right)^{-1} \quad (1.36)$$

La conductivité thermique du mélange est obtenue par la loi d'Eucken en fonction des propriétés du mélange :

$$\lambda = \mu \left(c_p + \frac{5}{4} R \right) \quad (1.37)$$

Les coefficients de diffusion moléculaire des espèces sont supposés égaux. Ils sont calculés pour un nombre de Lewis égal à l'unité :

$$Le_s = \frac{\lambda}{\rho c_p D_s} = 1 \Rightarrow D_s = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (1.38)$$

Pour un écoulement turbulent, les propriétés moyennes du transport moléculaire sont approchées de la façon suivante : $\tilde{\mu} = \mu(\tilde{T}, \tilde{Y}_s)$, $\tilde{\lambda} = \lambda(\tilde{T}, \tilde{Y}_s)$, $\tilde{D}_s = D_s(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}_s)$.

Le tenseur des contraintes visqueuses \tilde{t}_{ij} , dans les équations de la quantité de mouvement (1.5), a pour forme :

$$\tilde{t}_{ij} = \tilde{\mu} \left(2\bar{s}_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (1.39)$$

δ_{ij} est le symbole de Kronecker. \bar{s}_{ij} est le tenseur des taux de déformation :

$$\bar{s}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.40)$$

L'expression de \tilde{t}_{ij} repose sur l'hypothèse que le gaz est un fluide newtonien et que sa viscosité en volume est négligeable.

Le flux de chaleur \bar{q}_j , dans l'équation de bilan de l'énergie (1.6) inclut les termes de conduction thermique (la loi de Fourier) et de diffusion de masse :

$$\bar{q}_j = -\tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_s h_s(\tilde{T}) \bar{J}_{s,j} \quad (1.41)$$

Les flux de masse des espèces $\bar{J}_{s,j}$ sont déterminés par la loi de Fick en négligeant les effets de barodiffusion et de thermodiffusion (effet de Soret) :

$$\bar{J}_{s,j} = -\bar{\rho} \tilde{D}_s \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j} \quad (1.42)$$

1.1.5. Modèle chimique

Le modèle chimique sert à déterminer les termes sources dans les équations de transport des espèces chimiques. Le code MSD intègre plusieurs modèles de combustion mais seul le modèle de cinétique chimique « détaillée » est utilisé dans la présente étude pour les raisons suivantes :

- Dans un superstatoréacteur, le processus chimique est étalé en espace à cause d'une grande vitesse de l'écoulement. La composition chimique est donc loin de l'équilibre. Le modèle doit être capable de simuler un processus chimique dont l'écart à l'équilibre est arbitraire.
- Le fonctionnement d'une chambre de combustion supersonique est souvent organisé de sorte que le mélange combustible s'enflamme spontanément. Par conséquent, le modèle chimique doit prédire correctement le délai d'autoinflammation.
- Le processus chimique d'oxydation est complexe. Il se réalise dans des conditions largement variables. La taille du système réactif, en termes de nombres d'espèces et de réactions, dépend de la nature du combustible et de l'oxydant. Elle est particulièrement

grande s'il s'agit d'un hydrocarbure et/ou de l'air vicié issu d'un réchauffeur. Le modèle doit reproduire d'une manière adéquate le comportement de ce système réactif complexe.

Ce modèle est basé sur un mécanisme réactionnel dans lequel les réactions sont représentées par des étapes élémentaires dont la forme générale est :



où A_s est la formule de l'espèce s , α_s et β_s sont les coefficients stœchiométriques de l'espèce s en tant qu'un réactif et qu'un produit. Les coefficients α_s et β_s sont tels que le nombre d'atomes de chaque sorte se conserve. Le symbole « \Leftrightarrow » signifie que la réaction est réversible, autrement dit elle va simultanément dans les deux sens : direct (de gauche à droite) et inverse (de droite à gauche). Une réaction irréversible est marquée par le symbole « \Rightarrow ».

Les taux de réaction dans les sens direct et inverse sont donnés par les formules suivantes :

$$\omega_f = K_f \prod_s C_s^{\alpha'_s} \quad (1.44)$$

$$\omega_b = K_b \prod_s C_s^{\beta'_s} \quad (1.45)$$

K_f et K_b sont les constantes de vitesse. Les puissances α'_s et β'_s peuvent être différentes des coefficients stœchiométriques dans le cas général. Dans la présente étude, nous considérons que $\alpha'_s = \alpha_s$ et $\beta'_s = \beta_s$.

Il existe aussi des réactions qui se passent en présence d'un corps catalytique, ou d'un 3^e corps, désigné par le symbole M. Pour ce type de réaction, la formule générale est :



Les taux direct et inverse ont pour expression :

$$\omega_f = K_f C_M \prod_s C_s^{\alpha'_s} \quad (1.47)$$

$$\omega_b = K_b C_M \prod_s C_s^{\beta'_s} \quad (1.48)$$

C_M est la concentration molaire du 3^e corps. Chaque espèce peut jouer le rôle de 3^e corps. L'expression générale de C_M est donc la suivante :

$$C_M = \sum_s k_{\text{eff}_s} C_s \quad (1.49)$$

Les facteurs k_{eff_s} représentent les efficacités catalytiques des espèces. Dans le code MSD, il est supposé que $k_{\text{eff}_s} = 1$ pour un mécanisme générique. Pour la présente étude, nous avons modifié quelques routines de MSD afin d'utiliser des mécanismes dans lesquels $k_{\text{eff}_s} \neq 1$.

La constante de vitesse, K_f ou K_b , est approchée par la loi d'Arrhenius :

$$K = AT^b \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) \quad (1.50)$$

A , b et E sont les paramètres d'approximation dont les valeurs sont spécifiques à chaque réaction. Le rapport K_f/K_b est théoriquement défini comme la constante d'équilibre K_C qui est complètement déterminée par la formule de la réaction et par les propriétés thermodynamiques des espèces y participant [Gardiner (1984)]. Dans le code MSD, on a

néanmoins préféré approcher K_f et K_b indépendamment par (1.50) afin d'optimiser la performance du code. Dans la plupart des mécanismes actuels, on trouve des réactions dont les constantes de vitesse dépendent de la pression. Les réactions de ce type sont considérées dans le chapitre 3.

Le taux net de production de l'espèce s dans l'ensemble des réactions est :

$$W_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (\beta_{s,r} - \alpha_{s,r}) (\omega_{f,r} - \omega_{b,r}) \quad (1.51)$$

r est le numéro de réaction et N_r est le nombre de réactions dans le mécanisme.

Pour un écoulement turbulent, l'expression exacte du terme source moyen \overline{W}_s , tenant compte des fluctuations de température et de concentrations, devient très complexe [Libby et Williams (1980)]. Elle contient de nombreuses corrélations entre T'' et Y_s'' qui nécessitent la modélisation. Trois approches sont actuellement disponibles avec le code MSD :

- 1) **Approche quasi-laminaire** lorsque les termes sources moyens sont calculés directement à partir des quantités moyennes $\bar{\rho}$, \tilde{T} et \tilde{Y}_s comme si les fluctuations turbulentes étaient négligeables. Cette approche est la plus simple mais elle peut produire des erreurs car premièrement la dépendance $K(T)$ est fortement non linéaire donc $\overline{K(T)} \neq K(\tilde{T})$, deuxièmement le mélange turbulent est toujours accompagné d'une intermittence macroscopique donc les concentrations moyennes ne caractérisent pas l'état du mélange au niveau moléculaire et troisièmement les fluctuations de T'' et Y_s'' ne sont pas indépendantes mais plutôt corrélées.
- 2) **Prise en compte de la fluctuation de T** quand les taux des réactions sont calculés en utilisant $\bar{\rho}$, $\overline{K(T)}$ et \tilde{Y}_s . La constante de vitesse moyenne est approchée par un développement en série tronqué :

$$\overline{K(T)} \approx K(\tilde{T}) \left[1 + c \frac{\overline{\rho T'' T''}}{\bar{\rho} \tilde{T}^2} \right] \quad (1.52)$$

La fermeture de la variance de T est effectuée par un modèle algébrique. Cette approche n'a pas d'avantage important par rapport à celle précédente.

- 3) **Modélisation du transport de la fonction de densité de probabilité** selon la méthode PEUL [Borghini (1988)] par un couplage de la solution Navier-Stokes pour le champ moyen et de la solution lagrangienne pour un ensemble de particules stochastiques. Chaque particule est caractérisée par ces propriétés uniques en terme de température et de composition qui évoluent en temps. Les particules jouent le rôle de réacteurs chimiques qui interagissent *via* l'échange de masse et d'énergie avec le milieu moyen. À un instant donné, les termes sources chimiques sont évalués à partir de l'ensemble des particules qui se trouvent dans un volume élémentaire de calcul. Pour que le calcul soit statistiquement représentatif, le nombre de particules doit être très grand. Cette approche est la plus correcte mais difficile à réaliser avec un mécanisme cinétique complexe.

1.1.6. Modèle de turbulence

Le modèle de turbulence sert à déterminer les termes du transport turbulent dans les équations (1.5)-(1.7) et (1.9) représentés par les corrélations des composantes fluctuantes.

Voici les hypothèses de fermeture :

- 1) On introduit l'énergie cinétique turbulente k :

$$\frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''} = \bar{\rho} k \quad (1.53)$$

- 2) Pour le tenseur des contraintes turbulentes (tenseur de Reynolds), on utilise l'approche newtonienne par analogie avec les contraintes laminaires. Cette approche implique la viscosité turbulente μ_T (hypothèse de Boussinesq) :

$$\tau_{ij} \equiv -\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_T \left(2\bar{s}_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (1.54)$$

Comme conséquence, nous sommes amenés à admettre que les contraintes turbulentes s'adaptent instantanément à l'état moyen de l'écoulement.

- 3) Le transport de l'énergie des fluctuations par diffusion (laminaire et turbulente) est relié au gradient de k :

$$\overline{t_{ij} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} = \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (1.55)$$

σ_k est le coefficient de transport turbulent analogue au nombre de Prandtl.

- 4) Les termes de transport turbulent de chaleur $\overline{\rho u_j'' h''}$ et de masse des espèces $\overline{\rho u_j'' Y_s''}$ sont supposés proportionnels aux gradients des scalaires moyens respectifs. Les coefficients de transport sont définis suivant l'analogie de Reynolds pour le transfert de chaleur et l'analogie de Taylor pour le transfert de masse :

$$\overline{\rho u_j'' h''} = -\frac{\mu_T}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} = -\frac{\mu_T c_p (\tilde{T}, \tilde{Y}_s)}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (1.56)$$

$$\overline{\rho u_j'' Y_s''} = -\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j} \quad (1.57)$$

Pr_T et Sc_T sont respectivement les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents.

- 5) L'approximation de la viscosité turbulente μ_T est donnée par l'analyse dimensionnelle :

$$\mu_T = C_\mu \bar{\rho} k^2 / \varepsilon \quad (1.58)$$

C_μ est un coefficient empirique. ε est le taux de dissipation de k .

Le code MSD propose à l'utilisateur plusieurs modèles de turbulence. Dans la présente étude, nous considérons uniquement le modèle k - ε qui est le mieux adapté à la simulation de jets et de couches de mélange. Ce modèle repose sur deux équations différentielles de bilan de k et de ε .

L'équation complète de bilan de k [Wilcox (1998)] a pour forme :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - t_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ij} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} - \overline{P' u_j''} \right] - \overline{u_j''} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \overline{P' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} \quad (1.59)$$

Les hypothèses de fermeture associées à l'équation de k sont :

- 1) Le terme de dissipation est approché comme il suit :

$$t_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} = \bar{\rho} \varepsilon \quad (1.60)$$

2) Pour les trois derniers termes contenant les composantes de P , il n'y a pas d'approche généralement acceptée. Ces termes sont souvent négligés.

Le modèle k - ε classique formulé par Launder et Sharma (1974) introduit l'équation de bilan de ε par analogie à celle de k . Pour un écoulement compressible, ses équations ont pour forme :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (1.62)$$

Les coefficients de fermeture standard sont les suivants : $C_\mu = 0.09$, $\sigma_k = 1$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$.

Pr_T et Sc_T sont également des paramètres du modèle de turbulence. Le code MSD fixe la valeur de Sc_T égale à l'unité indépendamment de Pr_T . Dans la présente étude, nous considérons l'effet de Sc_T sur le mélange turbulent. Certaines modifications ont été effectuées dans MSD afin de faire varier la valeur de Sc_T .

Même si le modèle k - ε est formulé en respectant la forme compressible pour les équations de bilan, il ne tient pas compte de l'effet de compressibilité sur la turbulence. Les corrections de compressibilité introduites dans le cadre de cette thèse sont présentées dans le chapitre 2.

Dans MSD, le modèle k - ε décrit ci-dessus a une formulation équivalente mais l'équation pour ε est remplacée par l'équation de bilan de l'échelle turbulente de longueur l . Cette échelle est exprimée en fonction de k et de ε :

$$l = C_\mu^{3/4} k^{3/2} / \varepsilon \quad (1.63)$$

On en déduit la relation différentielle suivante :

$$d\varepsilon = \frac{\varepsilon}{l} \left(\frac{3}{2} \frac{l}{k} dk - dl \right) \quad (1.64)$$

En introduisant cette dernière relation dans l'équation (1.62), on obtient une équation contenant les dérivées de k et de l . On la multiplie par $-l/\varepsilon$ et ensuite on y additionne l'équation de bilan de k multipliée par $\frac{3}{2}l/k$ afin d'en extraire l'équation pour l :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}l)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j l)}{\partial x_j} &= \frac{l}{k} \left[\left(\frac{3}{2} - C_{\varepsilon 1} \right) \tau_{ij} \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \left(\frac{3}{2} - C_{\varepsilon 2} \right) \bar{\rho}\varepsilon \right] \\ &+ \frac{3}{2} \frac{l}{k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} - \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial l}{\partial x_j} \right] \\ &- \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \left[\frac{3}{4} \frac{l}{k^2} \left(\frac{\partial k}{\partial x_j} \right)^2 - \frac{3}{k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial l}{\partial x_j} + \frac{2}{l} \left(\frac{\partial l}{\partial x_j} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (1.65)$$

En utilisant les désignations x, y, z pour les coordonnées et u, v, w pour les composantes de vitesse, l'expression complète du terme de production de k est :

$$\begin{aligned} \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \mu_T \left\{ \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial y} \right)^2 \right. \\ \left. + 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right)^2 \right] - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (1.66)$$

Dans le code MSD, le dernier membre de cette expression est négligé donc le terme de production a une forme tronquée. En outre, ce terme est limité par la condition :

$$0 \leq \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \leq 5 \bar{\rho} \varepsilon \quad (1.67)$$

Nous avons vérifié que l'effet de la troncature du terme de production est faible pour les conditions considérées dans le cadre de la présente étude. En effet, la limitation du terme de production (1.67) neutralise pratiquement l'action du membre annulé.

Afin de caractériser l'intensité des fluctuations turbulentes de vitesse, nous utiliserons par la suite la notion de taux de turbulence qui est défini de la façon suivante :

$$\tau_T = \sqrt{\frac{2k}{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}} \quad (1.68)$$

Cette définition du taux de turbulence, adoptée dans le code MSD, diffère de l'expression classique [Wilcox (1998)] par un facteur de $\sqrt{3}$.

1.2. Méthodes numériques

1.2.1. Notions de base

Dans les chapitres suivants, nous présentons des résultats de simulation avec le code MSD. Le code met à la disposition de l'utilisateur une large gamme de méthodes numériques. Cette section présente brièvement les méthodes numériques et les options choisies pour nos simulations.

Nous introduisons d'abord les notions de base. Les équations différentielles résolues par le code sont discrétisées en temps et en espace. Il en résulte les notions de pas de temps Δt et de maillage.

Le maillage divise le domaine de calcul en cellules de forme quadrilatérale sur une surface ou hexaédrique en volume. Le code MSD utilise un maillage structuré dont chaque cellule est identifiée à l'aide de trois indices i, j et k : $i \in [1, N_i], j \in [1, N_j], k \in [1, N_k]$. N_i, N_j et N_k sont les trois dimensions du maillage. Le code MSD offre la possibilité d'exploiter les approches bidimensionnelles (2D) plane et axisymétrique avec $N_k = 1$ ou bien unidimensionnelle (1D) avec $N_j = N_k = 1$. Dans la présente étude, le maillage est toujours considéré fixe sans mouvement ni déformation.

Il est parfois difficile d'adapter un maillage structuré à une configuration complexe. Afin de surmonter ce problème, le code met en œuvre une méthode multidomaines qui permet de décomposer une géométrie complexe en domaines relativement simples et ensuite de raccorder la solution sur les frontières communes qui s'appellent « frontières multidomaines ».

La décomposition multidomaines est également nécessaire si l'on veut faire un calcul parallèle. Dans ce cas, le traitement parallèle est organisé de telle façon qu'on associe un ou plusieurs domaines à chaque processus parallèle. Les domaines sont traités indépendamment sur un pas de temps. Ensuite, les conditions aux limites sont réactualisées par des transferts de données entre les processus parallèles.

La figure 1.1 schématise une cellule dans deux plans associés aux trois directions du maillage et montre comment les indices sont affectés à ses interfaces. La cellule est caractérisée par son volume V et par les coordonnées de son centre géométrique. Les caractéristiques géométriques d'une interface sont son aire A et son vecteur unitaire normal $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$. La figure 1.1 montre l'orientation des vecteurs normaux aux interfaces.

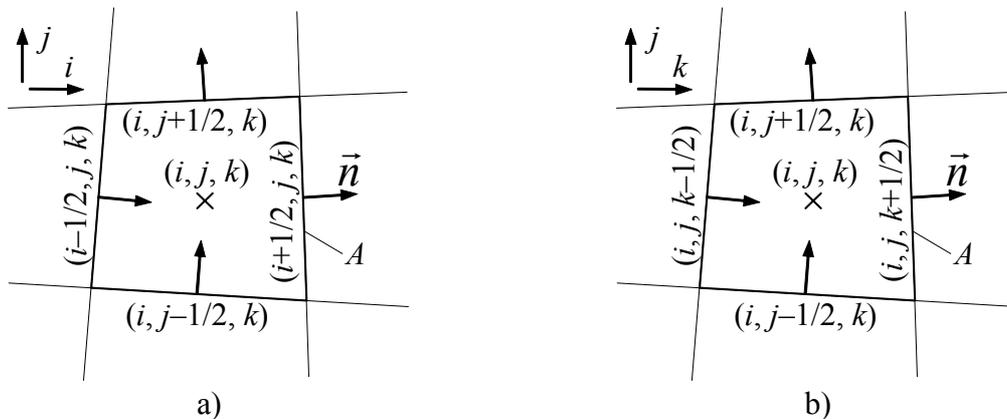


Figure 1.1. Schéma d'une cellule dans des plans k constant (a) et i constant (b).

La discrétisation de la solution numérique s'effectue selon la méthode des volumes finis qui repose sur la forme intégrale des équations de bilan (1.4)-(1.7) établie pour une cellule :

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{u} dV + \iint_S (\mathbf{f} - \boldsymbol{\varphi}) dS = \iiint_V \mathbf{w} dV \quad (1.69)$$

S est la surface intégrale de la cellule. \mathbf{u} est le vecteur des variables conservatives. \mathbf{f} et $\boldsymbol{\varphi}$ sont respectivement les vecteurs des flux convectifs et visqueux selon la normale extérieure à dS . \mathbf{w} est le vecteur des termes sources.

À partir du théorème de la moyenne, le système d'équation (1.69) est transformé en système semi-discrèt suivant :

$$V \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \sum_{\alpha=i,j,k} \left[A_{\alpha+1/2} \left(\mathbf{F}_{\alpha+1/2} - \boldsymbol{\Phi}_{\alpha+1/2} \right) - A_{\alpha-1/2} \left(\mathbf{F}_{\alpha-1/2} - \boldsymbol{\Phi}_{\alpha-1/2} \right) \right] = V \mathbf{W} \quad (1.70)$$

\mathbf{U} est le vecteur qui définit les conditions moyennes affectées au centre de la cellule. \mathbf{W} est le vecteur des termes sources déterminés à partir de \mathbf{U} . L'indice α représente les trois directions du maillage. \mathbf{F} et $\boldsymbol{\Phi}$ sont les vecteurs des flux moyens suivant les normales aux interfaces. Les flux moyens sont affectés aux centres des interfaces. Les sections suivantes décrivent les schémas numériques qui servent à déterminer les flux \mathbf{F} et $\boldsymbol{\Phi}$ et à résoudre le système (1.70).

1.2.2. Discrétisation spatiale

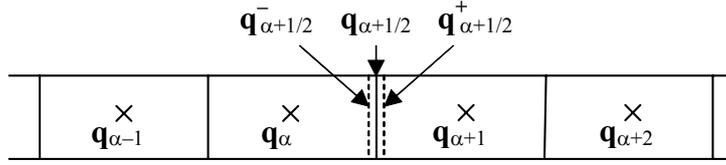
1.2.2.1. Flux convectifs

La méthode de discrétisation spatiale s'applique indépendamment à chaque direction du maillage. Il suffit donc de la présenter en considérant une seule direction désignée par α . À titre d'exemple, prenons l'interface $\alpha+1/2$ entre deux cellules dont les points centraux sont α et $\alpha+1$. Le vecteur des flux convectifs le long de la normale $\vec{n}_{\alpha+1/2}$ est défini comme :

$$\mathbf{F}_{\alpha+1/2} = \mathbf{F}(\mathbf{q}_{\alpha+1/2}) = \bar{\rho} u_n \begin{bmatrix} 1 \\ \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \\ \tilde{h}_t \\ \tilde{Y}_s \\ k \\ l \end{bmatrix} + \bar{P} \begin{bmatrix} 0 \\ n_x \\ n_y \\ n_z \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{q} = \begin{bmatrix} \bar{P} \\ \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \\ \tilde{T} \\ \tilde{Y}_s \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (1.71)$$

u_n est la projection du vecteur vitesse $\vec{u}_{\alpha+1/2} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})_{\alpha+1/2}$ sur $\vec{n}_{\alpha+1/2}$.

Pour déterminer le vecteur des quantités primitives $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}$ affecté à l'interface, on calcule d'abord deux vecteurs des quantités décentrées $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^-$ et $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^+$. La figure 1.2 schématise comment on associe les trois vecteurs à l'interface $\alpha+1/2$.

Figure 1.2. Affectation des vecteurs \mathbf{q} .

Les quantités décentrées sont approchées par un schéma numérique d'ordre 2 appartenant à la famille MUSCL (*Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws*) [Van Leer (1979)]. Chaque composante des vecteurs $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^-$ et $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^+$ est déterminée indépendamment à partir des quantités aux centres des cellules de $\alpha-1$ à $\alpha+2$ par les formules suivantes :

$$q_{\alpha+1/2}^- = q_{\alpha} + \psi^- q'_{\alpha-1/2} + (1 - \psi^-) q'_{\alpha+1/2} \quad (1.72)$$

$$q_{\alpha+1/2}^+ = q_{\alpha+1} - \psi^+ q'_{\alpha+3/2} - (1 - \psi^+) q'_{\alpha+1/2} \quad (1.73)$$

avec

$$q'_{\alpha-1/2} = q_{\alpha} - q_{\alpha-1}, \quad q'_{\alpha+1/2} = q_{\alpha+1} - q_{\alpha}, \quad q'_{\alpha+3/2} = q_{\alpha+2} - q_{\alpha+1} \quad (1.74)$$

q est une composante du vecteur \mathbf{q} . ψ^- et ψ^+ sont les limiteurs de pente qui sont définis comme il suit :

$$\psi^- = |q'_{\alpha+1/2}| / \left(|q'_{\alpha+1/2}| + |q'_{\alpha-1/2}| \right), \quad \psi^+ = |q'_{\alpha+1/2}| / \left(|q'_{\alpha+1/2}| + |q'_{\alpha+3/2}| \right) \quad (1.75)$$

Ce type de limiteur, proposé par Van Leer, donne au schéma les propriétés TVD (*Total Variation Diminishing*) [Harten (1984)]. Il adapte la dissipation numérique à la variation des pentes q' ce qui garantit un comportement stable et monotone de la solution aux alentours des discontinuités.

Le vecteur des quantités primitives $\mathbf{q}_{\alpha+1/2}$ est déterminé par la méthode ODQI (opérateur différence sur les quantités primitives) :

$$\mathbf{q}_{\alpha+1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^- + \mathbf{q}_{\alpha+1/2}^+) + f(\mathbf{q}_{\alpha+1/2}^-, \mathbf{q}_{\alpha+1/2}^+) \quad (1.76)$$

L'opérateur f agit selon les différences des quantités décentrées et les signes des valeurs propres de la matrice jacobienne $(\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{U})_{\alpha+1/2}$. Les trois valeurs propres distinctes sont :

$$u_{n\alpha+1/2}, \quad u_{n\alpha+1/2} - a_{\alpha+1/2}, \quad u_{n\alpha+1/2} + a_{\alpha+1/2} \quad (1.77)$$

La première valeur propre correspond à la vitesse de convection et les deux autres aux vitesses de propagation des ondes acoustiques.

La vitesse $u_{n\alpha+1/2}$ est calculée suivant la méthode « moyenne de Roe » :

$$u_{n\alpha+1/2} = \bar{n}_{\alpha+1/2} \cdot \left(\bar{u}_{\alpha+1/2}^- \sqrt{\rho_{\alpha+1/2}^-} + \bar{u}_{\alpha+1/2}^+ \sqrt{\rho_{\alpha+1/2}^+} \right) / \left(\sqrt{\rho_{\alpha+1/2}^-} + \sqrt{\rho_{\alpha+1/2}^+} \right) \quad (1.78)$$

La vitesse du son moyenne est déterminée de façon approchée :

$$a_{\alpha+1/2} = \sqrt{\left| P_{\alpha+1/2}^+ - P_{\alpha+1/2}^- \right| / \left| \rho_{\alpha+1/2}^+ - \rho_{\alpha+1/2}^- \right|} \quad (1.79)$$

$a_{\alpha+1/2}$ est ensuite limitée pour qu'elle soit bornée entre les deux états décentrés :

$$\min(a_{\alpha+1/2}^-, a_{\alpha+1/2}^+) \leq a_{\alpha+1/2} \leq \max(a_{\alpha+1/2}^-, a_{\alpha+1/2}^+) \quad (1.80)$$

La méthode ODQI induit, par l'opérateur f , des dissipations numériques proportionnelles aux valeurs propres. En transsonique, les vitesses des ondes acoustiques deviennent proches de 0 ce qui entraîne des effets indésirables tels que des chocs de détente. Pour que la solution ait un comportement physique, des corrections entropiques, sous forme de termes dissipatifs, sont rajoutées aux flux numériques. Les termes correcteurs tendent vers 0 en subsonique et en supersonique.

1.2.2.2. Flux visqueux

Les flux visqueux sont formés par les termes de transport laminaires et turbulents dans le système d'équations (1.5)-(1.7). Le vecteur des flux visqueux sur l'interface $\alpha+1/2$ est déterminé par un schéma centré d'ordre 2 :

$$\Phi_{\alpha+1/2} = \sum_{\zeta=x,y,z} n_{\zeta} \frac{1}{2} (\Phi_{\zeta\alpha} + \Phi_{\zeta\alpha+1}) \quad (1.81)$$

avec

$$\Phi_{\zeta} = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{t}_{x\zeta} + \tau_{x\zeta} \\ \bar{t}_{y\zeta} + \tau_{y\zeta} \\ \bar{t}_{z\zeta} + \tau_{z\zeta} \\ -\bar{q}_{\zeta} - q_{T\zeta} + \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial \zeta} + \tilde{u}(\bar{t}_{x\zeta} + \tau_{x\zeta}) + \tilde{v}(\bar{t}_{y\zeta} + \tau_{y\zeta}) + \tilde{w}(\bar{t}_{z\zeta} + \tau_{z\zeta}) \\ \left(\bar{\rho} D_s + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial \zeta} \\ \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial \zeta} \\ \frac{3}{2} \frac{l}{k} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} - \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial k}{\partial \zeta} + \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial l}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \quad (1.82)$$

ζ représente successivement les trois coordonnées cartésiennes.

Les flux visqueux contiennent les dérivées des composantes de vitesse (\tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{w}) et des scalaires (\tilde{T} , \tilde{Y}_s , k , l) ainsi que les propriétés de transport. Toutes ces quantités sont déterminées aux centres des cellules. Le gradient d'une quantité scalaire vérifie la formule d'Ostrogradski :

$$\iiint_V \overrightarrow{\text{grad}}(q) dV = \iint_S \vec{n} q dS \quad (1.83)$$

On en déduit l'approximation suivante :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(q) = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=i,j,k} \left(A_{\alpha+1/2} \vec{n}_{\alpha+1/2} q_{\alpha+1/2} - A_{\alpha-1/2} \vec{n}_{\alpha-1/2} q_{\alpha-1/2} \right) \quad (1.84)$$

Les quantités $q_{\alpha\pm 1/2}$ dans la formule (1.84) ne sont pas celles utilisées pour calculer les flux convectifs. Elles sont en effet obtenues comme moyennes arithmétiques des quantités au centre des cellules voisines :

$$q_{\alpha+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(q_{\alpha} + q_{\alpha+1}) \quad (1.85)$$

Remarque : Le code MSD propose une option qui permet de calculer les quantités et les flux sur les interfaces en tenant compte de la variation de la taille des cellules. Avec cette option, les schémas relatifs aux flux convectifs et visqueux utilisent des poids géométriques au lieu du coefficient 1/2. Dans la présente étude, nous limitons la différence des tailles des cellules voisines à 10-20 %. Ainsi, la prise en compte de la variation de taille n'a pas d'effet sur la solution.

Dans les zones où les flux visqueux sont comparables aux flux convectifs, telles que la couche limite, l'application des schémas centrés produit parfois des solutions oscillantes et peut même entraîner une instabilité numérique. Cet inconvénient est éliminé grâce à une méthode de lissage qui rajoute un terme dissipatif proportionnel aux flux visqueux :

$$\mathbf{F}_{\alpha+\frac{1}{2}}^* = C_F A_{\alpha+\frac{1}{2}} \frac{\mu_{\text{eff}\alpha} + \mu_{\text{eff}\alpha+1}}{V_{\alpha} + V_{\alpha+1}} \left(\frac{\mathbf{U}_{\alpha+\frac{1}{2}}^-}{\rho_{\alpha+\frac{1}{2}}^-} - \frac{\mathbf{U}_{\alpha+\frac{1}{2}}^+}{\rho_{\alpha+\frac{1}{2}}^+} \right) \quad (1.86)$$

avec

$$\mu_{\text{eff}} = \tilde{\mu} + \mu_T \quad (1.87)$$

$C_F = 0.05$ est le facteur de lissage dont la valeur a été établie à partir des essais numériques.

1.2.2.3. Approche bidimensionnelle

La plupart des simulations présentées dans les chapitres suivants ont été effectuées en exploitant l'approche bidimensionnelle plane (2D) ou axisymétrique (2DA). Cette approche offre comme avantage un gain important de ressources humaines et informatiques pour préparer une simulation, pour obtenir les résultats de calcul et pour les traiter puis analyser.

Le passage de l'approche 3D à celle 2D est trivial :

- seul le plan (i, j) est considéré ;
- l'envergure du domaine de calcul suivant la direction normale à ce plan est égale à l'unité ;
- toutes les conditions sont homogènes le long de l'envergure donc tous les flux suivant cette direction sont nuls.

Pour l'approche 2DA, on considère également un seul plan méridien (i, j) . En revanche, on suppose une symétrie de révolution autour d'un axe (conditions homogènes suivant la direction tangentielle). L'axe appartient au plan méridien dont l'orientation spatiale peut être choisie arbitrairement. L'axe est défini par les coordonnées de son origine $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ et par le vecteur unitaire d'orientation $\vec{e} = (e_x, e_y, e_z)$.

La figure 1.3 schématise une cellule et l'axe de symétrie dans le plan méridien. \mathbf{x}_{ij} est le vecteur des coordonnées du centre de la cellule ij . A_{ij} est l'aire de la cellule dans le plan méridien. $\mathbf{x}_{(i+1/2)j}$ et $L_{(i+1/2)j}$ sont respectivement le point central et la longueur de l'interface $(i+1/2)j$. r_{ij} et $r_{(i+1/2)j}$ sont les rayons des points \mathbf{x}_{ij} et $\mathbf{x}_{(i+1/2)j}$.

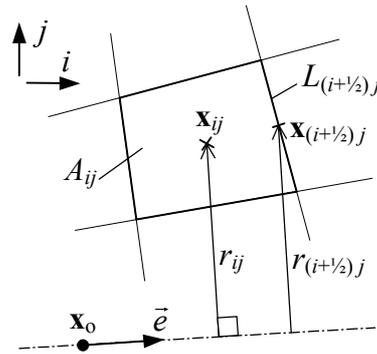


Figure 1.3. Schéma d'une cellule et de l'axe de symétrie dans le plan méridien.

Afin de mettre en œuvre l'approche 2DA selon la méthode des volumes finis, les éléments géométriques du maillage associés aux aires des interfaces et aux volumes des cellules sont calculés comme pour le cas 2D puis multipliés par $2\pi r$, où le rayon r correspond au point central de l'élément considéré par rapport à l'axe de symétrie. Le volume de la cellule V_{ij} et l'aire d'une de ses interfaces $A_{(i+1/2)j}$ peuvent être approchés par les formules suivantes :

$$V_{ij} = 2\pi r_{ij} A_{ij} \quad (1.88)$$

$$A_{(i+1/2)j} = 2\pi r_{(i+1/2)j} L_{(i+1/2)j} \quad (1.89)$$

Par rapport à l'approximation 2D, les formulations pour les gradients des composantes du vecteur vitesse $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}) = (u_x, u_y, u_z)$ et pour l'intégrale des flux de quantité de mouvement \mathbf{M} sur la surface de la cellule ont des termes spécifiques à la configuration axisymétrique. Pour les gradients de (u_x, u_y, u_z) , la formule (1.84) se transforme en approximation suivante :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(u_\zeta)_{ij} = \frac{1}{V_{ij}} \sum_{\alpha=i,j} \left(A_{\alpha+1/2} \bar{n}_{\alpha+1/2} u_{\zeta_{\alpha+1/2}} - A_{\alpha-1/2} \bar{n}_{\alpha-1/2} u_{\zeta_{\alpha-1/2}} \right) + \frac{\bar{n}_{ij}}{r_{ij}} (\bar{e} \times \bar{u}_{ij})_\zeta \quad (1.90)$$

ζ représente les projections des vecteurs sur les trois axes cartésiens. \bar{n}_{ij} est le vecteur unitaire normal au plan méridien.

Le terme additionnel de l'intégrale de quantité de mouvement est :

$$\mathbf{M}_{2DA} = 2\pi A_{ij} \left[\bar{\rho} u_n \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \end{pmatrix} + \bar{P} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} (\bar{t}_{xx} + \tau_{xx})n_x + (\bar{t}_{xy} + \tau_{xy})n_y + (\bar{t}_{xz} + \tau_{xz})n_z \\ (\bar{t}_{yx} + \tau_{yx})n_x + (\bar{t}_{yy} + \tau_{yy})n_y + (\bar{t}_{yz} + \tau_{yz})n_z \\ (\bar{t}_{zx} + \tau_{zx})n_x + (\bar{t}_{zy} + \tau_{zy})n_y + (\bar{t}_{zz} + \tau_{zz})n_z \end{pmatrix} \right]_{ij} \times \bar{e} \quad (1.91)$$

u_{nij} est la projection du vecteur vitesse \bar{u}_{ij} sur \bar{n}_{ij} . \mathbf{M}_{2DA} inclut la contribution de la rotation de l'écoulement autour de l'axe.

Dans la présente étude, le plan méridien est toujours défini par les axes cartésiens x et y . L'axe de symétrie coïncide avec l'axe x : $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$ et $\bar{e} = (1, 0, 0)$. Par conséquent, la coordonnée y correspond au rayon r dans le plan méridien. La rotation de l'écoulement n'est pas prise en compte ($u_{nij} = 0$).

1.2.3. Intégration temporelle

Un schéma à deux paramètres est utilisé pour l'intégration temporelle du système d'équations (1.70) :

$$\left(\frac{\Delta \mathbf{U}}{\Delta t}\right)_{n+1} = \frac{\theta}{1+\xi} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}\right)_{n+1} + \frac{1-\theta}{1+\xi} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}\right)_n + \frac{\xi}{1+\xi} \left(\frac{\Delta \mathbf{U}}{\Delta t}\right)_n \quad (1.92)$$

n est le numéro du pas de temps. θ et ξ sont les paramètres du schéma d'intégration.

Deux variantes du schéma sont les plus couramment utilisées :

- 1) schéma d'Euler implicite d'ordre 1 ($\theta = 1$, $\xi = 0$) est le plus robuste si l'on ne s'intéresse qu'à l'état final d'une solution stationnaire
- 2) schéma semi-implicite d'ordre 2 ($\theta = 1$, $\xi = 0.5$) s'applique au cas où on simule un processus instationnaire en suivant précisément son évolution temporelle

Si nous présentons le système d'équations (1.70) sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\mathbf{G} \quad (1.93)$$

le schéma d'intégration peut être reformulé :

$$\left[\mathbf{I} + \frac{\theta}{1+\xi} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \Delta t_{n+1} \right] \left(\frac{\Delta \mathbf{U}}{\Delta t}\right)_{n+1} = \frac{1}{1+\xi} \left[\xi \left(\frac{\Delta \mathbf{U}}{\Delta t}\right)_n - \mathbf{G}_n \right] \quad (1.94)$$

avec

$$\mathbf{G}_{n+1} - \mathbf{G}_n = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \Delta \mathbf{U}_{n+1} \quad (1.95)$$

$$\Delta \mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n \quad (1.96)$$

La résolution directe du système linéarisé (1.94) n'est pas pratique parce que la matrice à gauche est très grande (elle est constituée de blocs carrés, dont la taille est égale au nombre d'équations, et le nombre de blocs dans chacune des deux dimensions est égal au nombre total de cellules) et très creuse. Afin de résoudre le système en question, le code MSD utilise une méthode approchée de type implicite à directions alternées (ADI) [Beam et Warming (1978)]. Selon la méthode ADI, l'opérateur de gauche du système est factorisé suivant les trois directions du maillage. Nous avons alors autant de systèmes d'équations que le nombre de rangs de cellules dans toutes les directions. L'algorithme se décompose en trois étapes successives correspondant aux trois directions du maillage. Les matrices à inverser ont une structure tridiagonale par blocs grâce à une simplification de l'opérateur factorisé.

Chaque pas d'intégration implicite se réalise approximativement par une seule itération. Le système (1.94) est résolu avec la matrice jacobienne $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{U}$ déterminée à l'instant n . En outre, $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{U}$ ne contient pas le jacobien des termes de production chimique car leur contribution implicite est découplée. Les termes chimiques sont projetés vers l'état $n + 1$ par l'opération suivante :

$$\bar{W}_{sn+1} = \bar{W}_{sn} + \left(\frac{\partial \bar{W}_s}{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_s)} \right)_n \Delta (\bar{\rho} \tilde{Y}_s) \quad (1.97)$$

$\Delta(\bar{\rho}\tilde{Y}_s)$ sont obtenus en résolvant le système d'équations 0D formulé pour une cellule :

$$\left[\mathbf{I} - \left(\frac{\partial \bar{W}_s}{\partial (\bar{\rho}\tilde{Y}_s)} \right)_n \Delta t_{n+1} \right] \Delta(\bar{\rho}\tilde{Y}_s) = \Delta t_{n+1} \left[\xi \left(\frac{\Delta(\bar{\rho}\tilde{Y}_s)}{\Delta t} \right)_n - G_{s_n} \right] \quad (1.98)$$

Les termes sources $\bar{W}_{s_{n+1}}$ sont ensuite rajoutés à la partie explicite \mathbf{G}_n du système (1.94).

Le pas de l'intégration temporelle Δt est déterminé selon la nature du problème traité. Pour une solution non stationnaire, le pas de temps est défini globalement sur l'ensemble des domaines traités. Bien que le schéma semi-implicite soit suffisamment stable, l'intégration est précise si le critère de Courant-Friedrichs-Lewy est respecté dans toutes les cellules :

$$CFL \equiv \Delta t \varphi^{\text{acou}} < 1 \quad (1.99)$$

φ^{acou} est la fréquence acoustique définie par :

$$\varphi^{\text{acou}} = (|\bar{u}| + a) \left(\frac{1}{\Delta x} + \frac{1}{\Delta y} + \frac{1}{\Delta z} \right) \quad (1.100)$$

Δx , Δy et Δz sont les tailles respectives d'une cellule suivant les axes de coordonnées.

Le pas d'intégration peut être également limité par les fréquences liées aux :

– phénomènes visqueux :

$$\varphi^{\text{visc}} = \frac{\mu_{\text{eff}}}{\bar{\rho}} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \quad (1.101)$$

– processus chimiques :

$$\varphi^{\text{chim}} = \bar{\rho}^{-1} \max(|\bar{W}_s| / |\tilde{Y}_s|) \quad (1.102)$$

– fluctuations turbulentes :

$$\varphi^{\text{turb}} = C_{\mu}^{3/4} \sqrt{k} / l \quad (1.103)$$

Par exemple, nos tests numériques ont montré qu'une intégration d'ordre 2 est suffisamment précise si les variations relatives des fractions massiques des espèces ne dépassent pas 50 % sur un pas de temps. Par conséquent, nous pouvons estimer la limitation suivante :

$$\Delta t \leq \bar{\rho} \min(0.5 \tilde{Y}_s / |\bar{W}_s|) \quad (1.104)$$

Le code MSD évalue les valeurs minimale et maximale du nombre CFL pour chaque domaine. C'est à l'utilisateur de contrôler la qualité du pas de temps global par rapport aux critères mentionnés ci-dessus.

S'il s'agit d'un problème stationnaire, nous utilisons toujours un pas local adaptatif afin d'accélérer la convergence vers l'état final. Le terme « local » signifie que le pas de temps est déterminé indépendamment pour chaque cellule. Le terme « adaptatif » implique que le pas de temps est limité afin de préserver la stabilité du calcul.

Le pas de temps local est proportionnel au nombre CFL :

$$\Delta t_{ijk} = CFL / \varphi_{ijk}^{\text{acou}} \quad (1.105)$$

Seule la fréquence acoustique est prise en compte actuellement. Le nombre CFL est imposé constant pour un domaine. Les valeurs de CFL adoptées dans la présente étude varient entre 5 et 10.

La limitation adaptative est basée sur une estimation explicite des variations temporelles de $\bar{\rho}$, \bar{P} , \tilde{T} et \tilde{Y}_s . Le pas de temps adaptatif est obtenu comme :

$$\Delta t_{\text{adapt}} = \Delta t \min \left(1, \frac{0.1q}{\Delta t} \left| \frac{\partial q}{\partial t} \right|^{-1} \right) \quad (1.106)$$

q représente chacune des quantités testées. Les dérivées sont évaluées sur l'étape explicite de l'intégration temporelle. Cette limitation s'active durant la phase de transition quand les quantités varient rapidement.

1.2.4. Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont définies suivant la nature des frontières que nous considérons dans la présente étude. Parmi les types de frontières disponibles, nous utilisons les suivants :

- entrée débit ;
- entrée pression ;
- sortie pression ;
- paroi ;
- plan de symétrie ;
- axe de symétrie ;
- raccordement exact.

Afin d'imposer les conditions aux limites, le code crée des cellules fictives qui se trouvent sur les frontières à l'extérieur d'un domaine de calcul. Chaque domaine est traité indépendamment des autres. Ce sont les conditions dans les cellules fictives sur les frontières multidomaines qui sont actualisées régulièrement selon la méthode multidomaines. L'utilisateur du code MSD peut spécifier une fréquence d'actualisation. Dans notre étude, les conditions sur les frontières multidomaines sont actualisées à chaque pas de temps.

Les conditions imposées sur les frontières extérieures sont toujours stationnaires. Une condition particulière peut être définie par une valeur constante ou sous forme d'une distribution.

L'utilisateur a le choix entre l'approximation d'ordre 1 et 2 sur les frontières. Dans la présente étude, nous nous contentons de l'approximation d'ordre 1 aux frontières d'entrée et de sortie. Cette option garantit une bonne stabilité de la solution. Pour les autres types de frontières, nous utilisons l'approximation d'ordre 2.

Entrée débit

Pour la frontière de ce type, on suppose qu'il y a un débit massique entrant dans le domaine. Les conditions suivantes doivent être spécifiées :

- débit massique par unité de surface normale au vecteur vitesse $\bar{\rho}|\vec{u}|$;
- trois composantes de la direction du vecteur vitesse $\vec{u}/|\vec{u}|$; par défaut, il est considéré normal à la frontière ;
- température totale \tilde{T}_t ;
- composition du mélange gazeux \tilde{Y}_s ;
- taux de turbulence τ_T ;
- échelle de turbulence l .

Si la projection du vecteur vitesse sur la normale u_n est subsonique, l'extrapolation de la pression statique à partir des cellules internes permet de compléter les conditions en amont. Sinon il faut aussi définir le nombre de Mach qui vaut 1 par défaut.

Il est possible d'appliquer le débit et la direction, soit aux cellules fictives, soit directement à la frontière. Nous préférons la première possibilité s'il nous faut imposer des conditions obtenues à partir d'une solution de l'écoulement en amont. La deuxième possibilité assure une parfaite conservation du débit imposé, elle est préférable si les conditions en amont sont uniformes.

Entrée pression

Ce type de frontière est similaire à l'entrée débit mais c'est la pression totale qui est fixée en amont au lieu du débit. Les autres conditions imposées sont les mêmes que pour l'entrée débit. Si l'écoulement est subsonique à cette entrée, la projection de la vitesse sur le vecteur de direction est extrapolée depuis l'intérieur du domaine. Si l'écoulement est supersonique, il faut également spécifier le nombre de Mach en amont.

Sortie pression

Sur une frontière de sortie, la plupart des conditions sont automatiquement déterminées en les extrapolant depuis l'intérieur du domaine. Si l'écoulement est subsonique en sortie, les ondes acoustiques peuvent remonter. Cela nécessite que la pression statique soit fixée comme condition à la sortie. Si l'écoulement est supersonique, aucune condition fixe n'est requise.

Le code gère de façon identique les frontières d'entrée et de sortie avec une pression imposée. Cela permet de déclarer une frontière comme entrée même si l'écoulement sort par une certaine partie d'elle.

Paroi

Sur la paroi, on impose les conditions d'adhérence : la vitesse relative de l'écoulement vaut 0. Par conséquent, les flux convectifs sont égaux à 0 sauf le flux normal de la quantité de mouvement. Ce dernier est défini par la condition de réflexion de la caractéristique acoustique normale à la paroi.

Les conditions thermiques peuvent être spécifiées en terme de température ou de flux de chaleur suivant la normale. La paroi est supposée adiabatique (flux de chaleur égal à 0) par défaut.

La paroi est considérée chimiquement inerte donc les fractions massiques des espèces n'ont pas de gradient selon la normale.

L'énergie cinétique et l'échelle turbulentes sont mises à 0 sur la paroi.

Plan de symétrie et axe de symétrie

Les conditions de glissement sont imposées sur le plan de symétrie. Seule la composante normale de la vitesse change de signe sur cette frontière. Pour les autres quantités, les gradients normaux sont égaux à 0.

L'axe de symétrie est analogue au plan de symétrie. Ce type de frontière est utile pour une configuration axisymétrique.

Raccordement exact

C'est le seul type de frontière multidomaines que nous utilisons dans la présente étude. Le raccordement exact se distingue par une conformité parfaite des points de maillage des deux domaines adjacents. Le transfert des conditions d'un domaine à l'autre est trivial

puisque les cellules limites d'un domaine correspondent aux cellules fictives de son voisin. Le raccordement exact garantit que, si l'on découpe un domaine en deux le long d'une surface de maillage, les solutions mono- et multidomaines sont identiques.

1.2.5. Traitement de la couche limite pariétale

Lorsque le modèle de turbulence k - ε est appliqué, le respect des conditions pariétales n'est pas suffisant pour modéliser correctement la couche limite. Le modèle de turbulence doit inclure des sous-modèles permettant d'adapter son comportement au voisinage de la paroi.

Une des caractéristiques importantes de la couche limite est la contrainte de cisaillement pariétale τ_w représentant le frottement. On peut introduire la notion de vitesse de frottement par la relation suivante :

$$u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_w} \quad (1.107)$$

ρ_w est la masse volumique correspondante aux conditions pariétales. Pour mesurer la distance de la paroi, il est convenable d'utiliser une coordonnée adimensionnée dont la définition est :

$$y^+ = y_n \rho_w u_\tau / \tilde{\mu} \quad (1.108)$$

Ici, y_n est la distance de la paroi mesurée suivant la normale. L'intervalle $y^+ < 10$ correspond à la sous-couche laminaire. La sous-couche logarithmique, où la turbulence est pleinement développée (la production en équilibre avec la dissipation), est localisée à $y^+ > 100$. L'espace entre ces deux sous-couches représente la zone de transition.

Le modèle k - ε standard n'est applicable qu'à la turbulence pleinement développée. La simulation de la couche limite dans la zone $y^+ < 100$ nécessite un modèle à « bas nombre de Reynolds ». Un tel modèle intégré dans le code MSD implique que :

- la croissance de l près de la paroi est linéaire :

$$l = \kappa y_n \quad (1.109)$$

$\kappa \approx 0.41$ est la constante de Kármán ;

- l'équation de bilan de k a une dissipation supplémentaire ;

$$\bar{\rho} \varepsilon_v = 2\kappa^2 \tilde{\mu} k / l^2 \quad (1.110)$$

- les formules pour ε et μ_T contiennent des corrections :

$$\varepsilon = f_\varepsilon C_\mu^{3/4} k^{3/2} / l \quad (1.111)$$

$$\mu_T = f_v C_\mu^{1/4} \bar{\rho} k^{1/2} l \quad (1.112)$$

f_ε et f_v sont les fonctions correctrices dépendantes du nombre de Reynolds $Re_l = \bar{\rho} l \sqrt{k} / \tilde{\mu}$:

$$f_{\varepsilon|v} = \tanh(C_\mu^{1/4} Re_l / R_{\varepsilon|v}) \quad (1.113)$$

$R_\varepsilon = 8$ et $R_v = 10.6$ sont les paramètres du modèle déterminés empiriquement à partir des résultats sur des couches pariétales simples (écoulement de Couette, canal et plaque plane). f_ε et f_v s'activent lorsque $y^+ < 60$.

Pour appliquer directement le modèle à bas Reynolds, il est nécessaire que le maillage soit fortement resserré près de la paroi : l'épaisseur de la maille adjacente Δ correspond à

$y^+ < 1$ et le nombre de mailles à travers la zone $y^+ < 60$ vaut vingt environ. Si ces limitations sont observées, les conditions considérées dans le cadre de la présente étude impliquent que l'épaisseur Δ est de l'ordre de 1-10 μm . Cela pose deux problèmes :

- 1) Les ressources informatiques requises sont très importantes en terme de taille de mémoire et de temps de calcul en raison d'un maillage grand et d'un pas de temps petit (nombre *CFL* limité).
- 2) Il est difficile de maîtriser l'adaptation du maillage d'une manière optimale car il peut y avoir des variations simultanées des conditions pariétales et des conditions dans l'écoulement le long de la paroi.

Pour déterminer la contrainte de cisaillement τ_w et le flux de chaleur q_w pariétaux, le code MSD met en œuvre une méthode semi-empirique permettant de surmonter le problème d'adaptation de maillage dans la couche limite. En terme de Δ et de conditions dans la cellule adjacente, on définit trois grandeurs adimensionnées :

- nombre de Reynolds

$$Re_\Delta = \bar{\rho} u_t \Delta / \tilde{\mu} \quad (1.114)$$

- contrainte de cisaillement pariétale adimensionnée

$$\alpha_w = \frac{\tau_w \Delta}{2 \tilde{\mu} u_t} \quad (1.115)$$

- flux de chaleur pariétal adimensionné

$$\beta_w = \frac{q_w \Delta}{2 \tilde{\lambda} (T_r - T_w)} = \frac{q_w Pr \Delta}{2 \tilde{\mu} c_p (\tilde{T}) (T_r - T_w)} \quad (1.116)$$

u_t est la projection du vecteur vitesse sur la paroi. $(T_r - T_w)$ est la différence de la température de récupération et de la température de la paroi. La méthode semi-empirique est basée sur des corrélations établies pour un écoulement de Couette, soit sous forme $\alpha_w = \alpha_{w1}(Re_\Delta)$ en considérant un équilibre entre la production et la dissipation turbulentes, soit sous forme $\alpha_w = \alpha_{w2}(\mu/\mu_T)$ en supposant que la turbulence est produite au voisinage immédiat de la paroi ($k \sim u_\tau^2$) puis diffusée. Pour rendre le modèle de paroi plus flexible, on utilise $\alpha_w = \max(\alpha_{w1}, \alpha_{w2})$. Pour le flux de chaleur adimensionné, une autre corrélation est obtenue sous forme $\beta_w(\alpha_w, Re_\Delta, Pr/Pr_T)$.

Dans la pratique courante d'exploitation du code MSD, $y^+(\Delta)$ est de l'ordre de 100. Dans les cas présentés par la suite, le maillage est tel que $1 < y^+(\Delta) < 100$ globalement et $5 < y^+(\Delta) < 50$ dans la plupart des cas. Nous avons préalablement vérifié que le modèle à bas Reynolds donne des résultats stables même si la densité du maillage varie largement dans la couche limite. En outre, nous n'avons pas d'informations précises sur l'état de la couche limite et non plus sur les conditions pariétales (si la paroi est sensiblement non-adiabatique) pour les cas test expérimentaux. Dans ces conditions, l'erreur produite par l'approximation numérique ne doit pas dépasser l'erreur due aux hypothèses concernant les conditions aux limites.

Chapitre 2.

Amélioration du modèle de turbulence du code MSD

Le jet rond compressible peut être considéré comme un élément de base de l'écoulement dans une chambre de combustion supersonique. Cet élément est particulièrement important pour la présente étude car le cas principal considéré est une chambre expérimentale dans laquelle un combustible gazeux est injecté par une tuyère supersonique placée le long de l'axe de la chambre.

Le rendement de combustion dans une chambre est toujours limité par deux facteurs :

- 1) le taux de mélange du combustible et de l'oxydant
- 2) le taux d'oxydation du combustible mélangé

Le premier facteur dépend principalement du transport turbulent car il est beaucoup plus intense que le transport moléculaire. Cela nécessite de simuler le jet correctement afin de pouvoir prédire la performance de la chambre de combustion.

Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ a été choisi parmi les modèles disponibles dans le code MSD pour sa robustesse et ses bonnes capacités à modéliser les écoulements cisailés libres. Par ailleurs, ce modèle est largement exploité donc il y existe de nombreux travaux consacrés à la validation, à l'amélioration et à l'application du modèle $k-\varepsilon$. La présentation générale du modèle $k-\varepsilon$ implanté dans le code MSD est donnée dans la section 1.1.6.

Malgré l'expérience existante, la modélisation du jet rond compressible reste un problème qui n'a pas de solution définitive. C'est pour cela que le présent effort ne porte pas uniquement sur l'implantation des solutions proposées dans la littérature.

2.1. Synthèse bibliographique

2.1.1. Anomalie jet rond/jet plan en incompressible

Un des défauts importants du modèle $k-\varepsilon$ standard est son incapacité à prédire correctement le taux d'épanouissement du jet rond. Ce défaut est aussi connu sous le nom « anomalie jet rond/jet plan » [Pope (1978), Wilcox (1998)]. Pope (1978) a proposé une correction basée sur son concept de l'interaction entre les mouvements tourbillonnaires et le champ moyen de l'écoulement :

- Un taux d'étirement positif tend à allonger les grands tourbillons et par conséquent à réduire l'échelle turbulente intégrale. Un taux d'étirement négatif produit l'effet inverse.
- Les grandes structures tourbillonnaires sont censées être étirées simultanément avec la vorticit  moyenne de l'écoulement. La quantit  d' tirement de la vorticit  moyenne peut caract riser aussi l' tirement des grands tourbillons.

Afin de prendre en compte l' tirement des tourbillons, Pope a introduit un terme source additionnel dans la partie droite de l' quation de bilan de ε (1.62) :

$$C_{\varepsilon 3} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \chi \quad (2.1)$$

χ est l'invariant adimensionnel mesurant le taux d' tirement du vortex :

$$\chi = (k/\varepsilon)^3 \bar{\omega}_{ij} \bar{\omega}_{jk} \bar{\omega}_{ki} \quad (2.2)$$

$\overline{\omega}_{ij}$ est le tenseur moyen de rotation :

$$\overline{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.3)$$

Le coefficient $C_{\varepsilon 3} = 0.79$ a été ajusté empiriquement dans le but d'obtenir le taux d'épanouissement conforme aux données expérimentales sur un jet rond autosemblable étudié par Rodi (1972).

Pope a également déduit une expression simplifiée pour χ qui est valide seulement dans le cas de jet axisymétrique à densité constante :

$$\chi = \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\varepsilon} \right)^3 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right)^2 \frac{\tilde{v}}{y} \quad (2.4)$$

La coordonnée x est orientée le long de l'axe du jet et la coordonnée y correspond au rayon.

2.1.2. Effets de compressibilité

Un autre défaut du modèle k - ε standard est souvent rencontré lorsque ce modèle est appliqué aux écoulements compressibles comme la couche de mélange ou le jet. Le modèle n'arrive pas à prédire la réduction du taux de mélange, observée expérimentalement, avec la croissance du nombre de Mach convectif. Ce défaut peut être éliminé grâce à une correction tenant compte des effets de compressibilité. Parmi les corrections existantes, les plus citées sont celles proposées par Sarkar [Sarkar et Lakshmanan (1991), Sarkar (1992)], par Zeman (1990) et par Wilcox (1998). Dans la présente étude, nous nous intéressons aux deux corrections de Sarkar.

Selon les travaux de Sarkar et de Zeman, le terme dissipatif dans l'équation de bilan de k (1.59) est décomposé en partie incompressible $-\overline{\rho}\varepsilon$ et en partie compressible, ou dilatationnelle, $-\overline{\rho}\varepsilon_d$. Un modèle algébrique a été proposé pour le taux de dissipation compressible :

$$\varepsilon_d = \varepsilon \alpha_1 M_T^2 \quad (2.5)$$

M_T est le nombre de Mach turbulent défini par la formule suivante :

$$M_T = \sqrt{2k}/a \quad (2.6)$$

Par une analyse de données DNS (*Direct Numerical Simulation*) d'une turbulence isotrope, Sarkar a obtenu le coefficient $\alpha_1 = 1$ [Sarkar et Lakshmanan (1991)]. Avec ce coefficient, le modèle (2.5) est devenu classique. Plus tard, Sarkar (1992) a suggéré une autre correction basée sur une analyse de données DNS d'un cisaillement homogène. Ce modèle inclut la dissipation compressible (2.5) avec $\alpha_1 = 0.5$ et un modèle algébrique pour la dilatation de pression :

$$\overline{P' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} = -\tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \alpha_2 M_T + \overline{\rho} \varepsilon \alpha_3 M_T^2 \quad (2.7)$$

avec $\alpha_2 = 0.15$ et $\alpha_3 = 0.2$

Ce dernier terme apparaît dans l'équation de bilan de k (1.59).

Les termes de compressibilité peuvent être groupés avec les termes de production et de dissipation de k . Cela nous donne finalement le modèle de compressibilité à deux paramètres :

$$\tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon - \bar{\rho} \varepsilon_d + \overline{P' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} = \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} (1 - \alpha_2 M_T) - \bar{\rho} \varepsilon (1 + \alpha_{1-3} M_T^2) \quad (2.8)$$

avec $\alpha_{1-3} = \alpha_1 - \alpha_3$

Afin d'obtenir le premier modèle de Sarkar, il suffit de prendre $\alpha_{1-3} = 1$ et $\alpha_2 = 0$.

Le taux de dissipation incompressible ε figure toujours dans l'équation de bilan (1.62) et dans la formule de la viscosité turbulente μ_T (1.58).

Dash et al. (1992) ont proposé une approximation pour ε_d suite à une optimisation des résultats de simulation de couches de mélange compressibles. En utilisant le modèle k - ε , ils ont accordé les résultats expérimentaux et numériques sur le taux d'épaississement. Leur modèle, purement empirique, a pour expression :

$$\varepsilon_d = \varepsilon (\hat{M}_T^2 + 60 \hat{M}_T^4) \quad (2.9)$$

avec $\hat{M}_T = \max[0, M_T - 0.1]$

La correction de Dash repose sur l'idée suggérée par Zeman (1990) selon laquelle la dissipation compressible est due aux chocs produits par les mouvements turbulents. La turbulence doit être suffisamment intense pour que les chocs apparaissent, cela implique le seuil figurant dans l'expression pour \hat{M}_T . Par rapport au modèle de Sarkar, la correction (2.9) s'active plus tard avec la croissance de M_T mais son évolution est beaucoup plus raide donc elle est très forte à des valeurs élevées de M_T . Une autre particularité de la correction de Dash consiste à utiliser la somme $\varepsilon + \varepsilon_d$ au lieu de ε dans la formule de μ_T (1.58).

2.1.3. Modifications du modèle k - ε

Afin d'améliorer le comportement du modèle, certains auteurs suggèrent de réviser les coefficients du modèle k - ε en argumentant que la description des grandes échelles tourbillonnaires ne peut pas être universelle pour tous les types d'écoulements. À titre d'exemple, nous présentons ici quelques variantes de modifications.

Morgans et al. (1999) ont augmenté le coefficient $C_{\varepsilon 1}$ de 1.44 à 1.6. Cette modification a été trouvée équivalente aux corrections de Morse (1977) et de McGuirk et Rodi (1979) dans le cas de jet rond autosemblable. Le modèle modifié a été utilisé pour la simulation d'un jet rond dans un co-courant.

Turpin et Troyes (2000) ont proposé de modifier trois coefficients du modèle notamment : $C_{\varepsilon 1} = 1.5$ (0.06) ; $C_{\varepsilon 2} = 1.82$ (-0.1) ; $\sigma_\varepsilon = 1.7$ (0.4) (les chiffres entre parenthèses indiquent les écarts par rapport aux valeurs standard). Ce choix a été motivé d'une part par la nécessité de préserver la relation entre la constante de Kármán, $\kappa \approx 0.41$, et les coefficients du modèle :

$$\kappa^2 = \sigma_\varepsilon \sqrt{C_\mu} (C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 1}) \quad (2.10)$$

et d'autre part par l'intention d'optimiser l'accord avec les données de Masri¹ sur un jet rond non réactif. Le modèle modifié a été ensuite appliqué aux simulations du jet supersonique d'air étudié par Eggers (1966) et du jet réactif de Masri¹.

Thies et Tam (1996) ont complètement modifié les coefficients du modèle en essayant d'optimiser les résultats de simulation sur une variété de jets ronds, elliptiques et rectangulaires. Les coefficients optimisés sont les suivants : $C_{\varepsilon 1} = 1.4$ (-0.04), $C_{\varepsilon 2} = 2.02$

¹ <http://www.mech.eng.usyd.edu.au/research/energy/resources.html>

(0.1), $C_\mu = 0.0874$ (-0.0026), $\sigma_k = 0.324$ (-0.676), $\sigma_\varepsilon = 0.377$ (-0.923). Thies et Tam ont en outre intégré les corrections de Pope (2.1) et de Sarkar (2.5) dans le modèle de turbulence avec les coefficients modifiés suivants : $C_{\varepsilon_3} = 0.822$ (0.032), $\alpha_1 = 0.518$ (-0.482). Ce modèle révisé a été utilisé plus tard par Tam et Ganesan (2004) spécifiquement pour la simulation de jets chauds.

Bien qu'une simple modification des coefficients du modèle soit séduisante par sa facilité de mise en œuvre, cette approche n'a pas été largement acceptée. Le modèle de turbulence modifié devient spécialisé et donc *a priori* n'est plus valable pour d'autres types d'écoulements. L'application de corrections qui s'adaptent aux conditions locales nous paraît plus pertinente.

2.1.4. Applications du modèle k - ε avec les corrections

Plusieurs travaux ont justifié l'utilité des corrections tenant compte des effets d'étirement des tourbillons et de compressibilité. Dash et al. (1992), Thies et Tam (1996) ont trouvé que les deux corrections étaient indispensables pour obtenir un bon accord avec les données expérimentales sur les jets. Pourtant, la mise en œuvre des corrections a suscité plusieurs difficultés.

L'application directe de la correction de Pope n'est pas aisée car elle provoque des instabilités numériques. Ces instabilités sont dues à la sensibilité de χ (2.2) aux gradients de vitesse. Le terme non limité de correction peut dépasser les termes principaux de l'équation de bilan de ε (1.62) dans des zones où la vitesse varie rapidement (couche limite, onde de choc, coin d'une paroi). Cette difficulté est rarement mentionnée dans la littérature, par exemple Dash et al. (1992), Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994) remarquent simplement qu'ils ont eu des instabilités sur les ondes de choc. Nous pouvons imaginer plusieurs explications du fait que les simulations ont pu s'effectuer avec le terme correcteur non limité :

- Résolution des équations parabolisées de Navier-Stokes [Dash et al. (1992), Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994), Thies et Tam (1996)], où l'on néglige les termes visqueux contenant les dérivées longitudinales. Cela permet de mettre en œuvre une procédure d'intégration à pas spatial qui est éventuellement plus stable.
- Utilisation de la formulation simplifiée pour χ (2.4) [Dash et al. (1992), Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994)] dont l'usage n'est pas justifié pour un écoulement compressible mais qui est moins sensible aux variations de la vitesse.
- Approximation analytique du profil de vitesse à l'entrée du domaine de calcul [Thies et Tam (1996)], procédure qui peut atténuer le problème de stabilité du calcul.

Nous considérons ces trois approches comme très restreintes si nous cherchons à appliquer la correction de Pope à des cas plus généralisés. Pour un usage courant, le modèle de turbulence doit absolument être robuste. À notre connaissance, aucune limitation stabilisatrice n'a été proposée auparavant pour la correction de Pope.

Dash et al. (1992) ont eu des difficultés en appliquant leur modèle de compressibilité (2.9) à la simulation de jets compressibles car une forte contribution du terme ε_d a diminué excessivement le taux de décroissance de la vitesse sur l'axe. Afin de contourner ce problème, ils ont élaboré une approche dite « zonale » en postulant que la compressibilité agissait uniquement dans la couche cisailée autour du cœur potentiel et que plus loin, le jet n'était plus influencé par la compressibilité. Cette approche zonale consiste à rajouter un facteur au terme ε_d qui diminue progressivement jusqu'à s'annuler le long du cœur potentiel. À notre avis, l'approche zonale est peu pratique si nous considérons un cas plus complexe qu'un jet isolé.

Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994) ont aussi conclu que l'utilisation simultanée des corrections de Pope et de Sarkar (1992) a produit un taux de mélange trop lent notamment dans la simulation du jet d'Eggers (1966). Par contre, ils ont renoncé à utiliser la correction de Pope en affirmant que seule la correction de Sarkar était suffisante. Ils ont montré que la correction de Sarkar améliorait nettement la qualité de la simulation de jets sous- et surdétendus. Pour les mêmes jets, Pao et Abdol-Hamid (1996) ont confirmé que l'autre variante de la correction de Sarkar [Sarkar et Lakshmanan (1991)] a donné des résultats satisfaisants.

2.1.5. Paramètres du transport turbulent

Le nombre de Prandtl turbulent Pr_T et le nombre de Schmidt turbulent Sc_T sont des paramètres « libres » du modèle de turbulence. Cela signifie qu'ils n'ont pas de valeur généralement approuvée. Le choix concernant Pr_T et Sc_T n'est pas certain *a priori*, il dépend souvent du problème considéré. Cependant, leur rôle est important pour le transfert de l'énergie et des espèces chimiques.

Le spectre des valeurs recommandées de Pr_T est large. Par exemple, Wilcox (1998) a constaté que pour la couche limite, la valeur appropriée de Pr_T était proche de 0.9, tandis que pour une couche cisailée libre, il valait mieux prendre Pr_T au niveau de 0.5. Dash et al. (1995) ont suggéré une valeur de Pr_T égale à 0.7 adaptée aux jets chauds. Pour les jets chauds, Thies et Tam (1996) ont pourtant trouvé les meilleurs résultats avec $Pr_T = 0.422$.

Concernant la valeur de Sc_T , les recommandations sont encore moins claires. La raison est simple : il est difficile d'accorder la simulation avec l'expérience, ce qui empêche de sélectionner une valeur appropriée de Sc_T . Cutler et White (2001) ont présenté des résultats d'expérience et de calcul sur un jet d'hélium dans un jet coaxial d'air, les deux jets étant supersoniques. Dans leurs simulations, ils ont testé trois valeurs de Sc_T : 0.75, 0.9 et 1. La préférence a été donnée à 0.75. Rodriguez et Cutler (2003) ont publié des résultats de simulation d'une chambre de combustion supersonique alimentée en hydrogène par une tuyère supersonique. Deux valeurs de Sc_T , 0.5 et 1 ont été essayées dans le but d'étudier l'effet de ce paramètre sur la solution. La valeur de 1 semblait mieux adaptée à ce cas. Pour la modélisation de jets supersoniques réactifs injectés dans un co-courant libre d'air chaud, Mödus et al. (2003) ont pris $Sc_T = 0.7$ sans expliquer leur choix.

Le ratio Sc_T/Pr_T , ou le nombre de Lewis turbulent Le_T , caractérise la similitude du transport turbulent de l'enthalpie et des espèces chimiques. Le_T est souvent pris égal à 1 en supposant que les deux phénomènes sont fortement couplés (voir par exemple l'article de Cutler et White (2001)). Cette argumentation générale n'a pas été solidement prouvée.

Chidambaram et al. (2001) ont élaboré un modèle de transport de la variance d'une quantité scalaire telle que la température ou la fraction massique d'une espèce. Ce modèle consiste en deux équations de bilan de la variance et de son taux de dissipation sous forme analogue au modèle $k-\varepsilon$. Le modèle permet d'évaluer la valeur locale de Pr_T ou de Sc_T selon le scalaire considéré. Grâce aux simulations d'un jet d'air chaud et d'un jet isotherme d'hélium dans l'air, Chidambaram et al. ont trouvé des valeurs similaires pour les deux paramètres de transport qui étaient proches de 0.75 près de l'axe et supérieures à 1.5 sur les bords du jet.

2.1.6. Définition du nombre de Mach convectif

Le nombre de Mach convectif M_c caractérise la compressibilité d'une couche cisailée. Il est relié à la vitesse moyenne U_c des structures tourbillonnaires qui se développent dans la

zone de cisaillement. Considérons une couche de mélange à pression constante entre deux courants parallèles semi-infinis. En utilisant les indices « 1 » et « 2 » afin de désigner respectivement les conditions dans les courants rapide et lent, nous pouvons définir le nombre de Mach convectif sur chaque côté de la couche cisailée [Dutton (1997)] :

$$M_{c1} = (U_1 - U_c)/a_1, \quad M_{c2} = (U_c - U_2)/a_2 \quad (2.11)$$

U_1 et U_2 sont les vitesses des courants à l'infini.

La vitesse convective U_c peut être évaluée par les relations isentropiques en équilibrant les pressions totales des deux courants dans le repère convectif [Dutton (1997)]. Si le rapport des chaleurs spécifiques du fluide ne varie pas ($\gamma_1 = \gamma_2$), M_{c1} et M_{c2} s'égalisent ce qui donne la relation suivante :

$$M_c = (U_1 - U_2)/(a_1 + a_2) \quad (2.12)$$

Bogdanoff (1983) a proposé une définition plus générale de M_c :

$$M_c = M_1 \frac{1 - U_2/U_1}{(1 + \sqrt{\rho_1/\rho_2}) \sqrt[4]{\gamma_2/\gamma_1}} \quad (2.13)$$

Jackson et Grosch (1990), Kozusko et al. (1996) ont étudié analytiquement la stabilité de la couche de mélange compressible dans les conditions générales : propriétés thermodynamiques, viscosité et température variables. Ils sont pourtant arrivés à la définition équivalente à (2.12) :

$$M_c = M_1 \frac{1 - U_2/U_1}{1 + \sqrt{\rho_1/\rho_2} \sqrt{\gamma_2/\gamma_1}} = \frac{U_1 - U_2}{a_1 + a_2} \quad (2.14)$$

Pour notre part, nous avons effectué des estimations de M_{c1} , M_{c2} (2.11), en utilisant les relations isentropiques, et de M_c (2.12) pour plusieurs cas différents. D'après nos estimations, $M_c \approx (M_{c1} + M_{c2})/2$. Dans la suite, nous utiliserons la définition (2.12) à titre indicatif afin d'évaluer le niveau de compressibilité pour chaque cas étudié. Pour un jet, M_c est déterminé à partir des conditions d'émission. Nous considérons ces estimations comme approchées parce que Papamoschou (1991) a prouvé expérimentalement que l'hypothèse isentropique n'était pas valable si $M_c > 0.5$.

2.1.7. Conclusion

La présente analyse montre que, malgré l'intérêt porté au cas du jet rond compressible et malgré l'expérience acquise grâce à de nombreux travaux, il n'y a pas d'approche reconnue qui puisse garantir une simulation correcte de ce type d'écoulement. Les difficultés de création d'une méthode unifiée, reposant sur les équations moyennées de Navier-Stokes et un modèle de turbulence à deux équations, ont été mises en évidence par Dash et Kenzakowski (1996).

Les résultats et les recommandations présentés dans les publications ne sont pas tout à fait cohérents. Les contradictions sont vraisemblablement dues aux facteurs suivants : modifications du modèle de turbulence, différentes corrections, divers codes de calcul, différents choix des conditions aux limites. Cependant, un bon accord entre l'expérience et la simulation a été obtenu dans certains cas.

L'amélioration du modèle $k-\varepsilon$ du code MSD doit s'effectuer selon les quatre étapes suivantes :

- 1) Étudier l'effet de la correction de Pope sur la solution du jet rond et élaborer une limitation stabilisatrice.
- 2) Implanter les corrections de Pope et de Sarkar dans le code et les valider séparément sur des cas tests représentatifs comme un jet rond incompressible et une couche de mélange plane compressible.
- 3) Valider l'ensemble des corrections par la simulation de jets ronds compressibles.
- 4) Essayer d'établir des valeurs appropriées de Pr_T et de Sc_T à partir de résultats de simulation.

2.2. Correction de Pope limitée

2.2.1. Développement

L'action de la correction de Pope devient claire si nous regroupons le terme dissipatif de l'équation de bilan de ε (1.62) et le terme correcteur (2.1) :

$$-\bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} (C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 3} \chi) = -\bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} C_{\varepsilon 2 \text{Pope}}(\chi) \quad (2.15)$$

Elle corrige en effet le coefficient $C_{\varepsilon 2}$ en fonction de χ . L'intensité de la dissipation de ε augmente si $\chi < 0$. Quant aux valeurs positives de χ , le terme de dissipation peut se transformer en terme additionnel de production si $\chi > C_{\varepsilon 2}/C_{\varepsilon 3} \approx 2.43$ et donc perdre son sens physique. Cette réflexion simple prouve la nécessité de limiter la correction. Par la suite, le coefficient $C_{\varepsilon 2 \text{Pope}}(\chi)$ est mentionné « le coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé ».

Une correction limitée, tenant compte de l'éirement des tourbillons, existe déjà dans le modèle $k-\omega$ de Wilcox (1998). Si nous présentons ce modèle sous la forme $k-\varepsilon$, le terme de dissipation de ε prend la forme suivante :

$$-\bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \left(C'_{\varepsilon 2} - C'_{\varepsilon 3} \frac{|\chi|}{0.1 + 8|\chi|} \right) \quad (2.16)$$

avec $C'_{\varepsilon 2} = 1.8$ et $C'_{\varepsilon 3} = 0.8$

Nous pouvons constater deux particularités de cette correction :

- 1) Elle diminue toujours l'intensité de la dissipation quel que soit le signe de χ donc elle ne suit pas un des principes de base postulés par Pope (voir la section 2.1.1).
- 2) Si la valeur absolue de χ tend vers l'infini, le terme correcteur est limité à 1/18 du terme principal de dissipation.

Nous n'avons pas l'intention de recopier la limitation (2.16) car elle a été ajustée au modèle de turbulence de Wilcox.

Dans le but de trouver une limitation appropriée pour la correction de Pope, nous allons considérer le jet rond autosemblable. Comme moyen de simulation, nous avons choisi le code JET qui accompagne le livre de Wilcox (1998). Ce code génère des simulations de similitude pour le jet plan ou rond incompressible, isotherme, injecté dans un milieu au repos du même fluide. Le code intègre plusieurs modèles de turbulence y compris le modèle $k-\varepsilon$ avec la correction de Pope. La solution de similitude est obtenue en fonction de la coordonnée adimensionnée y/x . Les bases théoriques du code et son mode d'utilisation sont décrits dans le livre de Wilcox (1998). Nous avons modifié la version originale du code JET afin d'y implanter notre limitation pour la correction de Pope.

Le paramètre qui caractérise le jet autosemblable est le taux d'épanouissement $\delta_{0.5}$ défini comme :

$$\delta_{0.5} = dy_{0.5}/dx \quad (2.17)$$

$y_{0.5}$ est le demi-rayon dynamique du jet où la composante longitudinale U de vitesse vaut 50 % de la vitesse sur l'axe U_a .

Remarque : Nous avons adopté la notation U pour la projection du vecteur vitesse moyenne sur la direction de l'axe du jet quelle que soit l'origine de cette valeur (calculée ou

mesurée) et quelle que soit l'orientation des axes des coordonnées physiques. Les valeurs calculées correspondent à la composante \tilde{u} de vitesse.

L'effet de la correction de Pope sur le taux d'épanouissement dépend du coefficient $C_{\varepsilon 3}$. La figure 2.1 montre le taux d'épanouissement calculé en fonction de $C_{\varepsilon 3}$. Les traits horizontaux sur cette figure correspondent aux résultats expérimentaux sur $\delta_{0.5}$ publiés par : Wygnanski et Fiedler (1969), Rodi (1972), Capp et al. (1990), Panchapakesan et Lumley (1993). Capp et al. (1990) ont obtenu deux résultats différents en mesurant le champ de vitesse par la technique de fil chauffant et par l'anémométrie laser à effet Doppler (LDA).

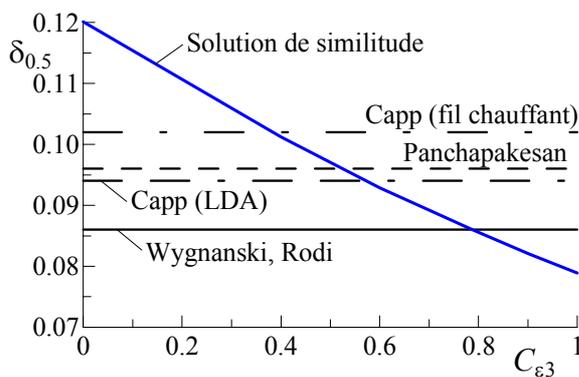


Figure 2.1. Taux d'épanouissement du jet rond en fonction du coefficient $C_{\varepsilon 3}$.

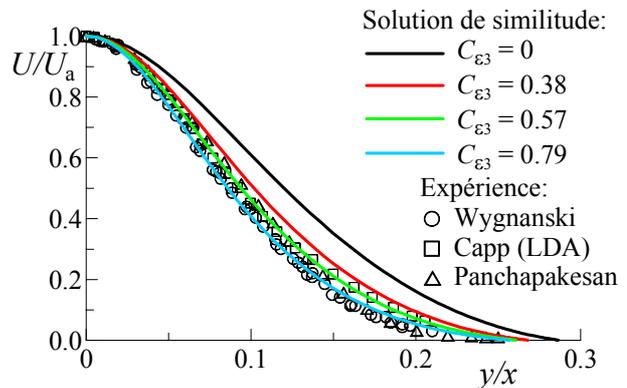


Figure 2.2. Profils radiaux de vitesse du jet rond.

Le tableau 2.1 regroupe les données expérimentales sur $\delta_{0.5}$ et les valeurs correspondantes de $C_{\varepsilon 3}$. Remarquons que les résultats expérimentaux sont loin d'être identiques. Le taux d'épanouissement le plus grand de 0.102 correspond à $C_{\varepsilon 3} = 0.381$ tandis que le plus petit de 0.086 correspond à $C_{\varepsilon 3} = 0.786$. Cette dernière estimation de $C_{\varepsilon 3}$ est en accord avec le coefficient de Pope ajusté au même taux d'épanouissement [Pope (1978)].

Tableau 2.1.

Référence	$\delta_{0.5}$	$C_{\varepsilon 3}$	χ_{lim}	$\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}(\chi_{lim})$
k - ε standard	0.120	0	0	1.920
Capp (fil chauffant)	0.102	0.381	0.095	1.845
Panchapakesan	0.096	0.524	0.130	1.817
Capp (LDA)	0.094	0.573	0.143	1.807
Wygnanski, Rodi	0.086	0.786	0.222	1.745

La dépendance $\delta_{0.5}(C_{\varepsilon 3})$ peut être approchée par le polynôme suivant :

$$\delta_{0.5} = 0.0097C_{\varepsilon 3}^2 - 0.0509C_{\varepsilon 3} + 0.12 \quad (2.18)$$

Les profils adimensionnés de vitesse, calculés avec $C_{\varepsilon 3} = 0, 0.381, 0.573$ et 0.786 , sont tracés sur la figure 2.2 en comparaison avec les profils expérimentaux de Panchapakesan, de Capp (LDA) et de Wygnanski. Les profils calculés et mesurés, correspondant aux mêmes $\delta_{0.5}$, montrent un bon accord. En revanche, le modèle standard sans correction ($C_{\varepsilon 3} = 0$) produit un profil trop large.

Nous avons ainsi obtenu une variété de $C_{\varepsilon 3}$ répondant à quelques résultats expérimentaux. Ceci indique que la valeur de 0.79, proposée par Pope, n'est pas universelle tant que l'expérience ne donne pas de taux d'épanouissement unique.

Maintenant, nous proposons une fonction limitée pour le coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé. Elle s'exprime comme :

$$\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}(\chi) = C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 3} \min(|\chi|, \chi_{\text{lim}}) \text{sign}(\chi) \quad (2.19)$$

χ_{lim} est un paramètre non négatif qui limite la valeur absolue de χ . Cette fonction limitée nous permet d'obtenir un résultat fixe pour $\delta_{0.5}$ avec différents $C_{\varepsilon 3}$ si nous ajustons le paramètre χ_{lim} . Il faut remarquer que la limitation n'a de sens que si $\delta_{0.5}$ imposé est supérieure à l'estimation par la formule (2.18) pour une valeur donnée de $C_{\varepsilon 3}$.

À titre d'exemple, prenons $\delta_{0.5} = 0.094$ et plusieurs valeurs de $C_{\varepsilon 3}$: 0.573, 1, 2 et 10. Les valeurs respectives de χ_{lim} sont les suivantes : 0, 0.1101, 0.0531 et 0.0105. L'évolution du coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé à travers le jet est présentée sur la figure 2.3. La courbe correspondant à $C_{\varepsilon 3} = 0.573$ représente la correction non limitée. Plus $C_{\varepsilon 3}$ est grand, plus la limitation est restrictive. La correction contribue à la diminution de $\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}$ dans la zone centrale du jet, où la vitesse est supérieure à environ 26 % de U_a , et agit inversement dans la zone périphérique. Quant à l'énergie cinétique turbulente, les quatre profils calculés sont tracés sous forme adimensionnée sur la figure 2.4 en comparaison avec le profil expérimental extrait des données de Capp (LDA). Les quatre profils calculés sont identiques et suffisamment proches du profil expérimental. Nous avons d'ailleurs trouvé que les profils calculés de vitesse sont aussi coïncidents. Cela montre que la forme de la fonction $\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}(\chi)$ est peu importante pour la qualité de la simulation.

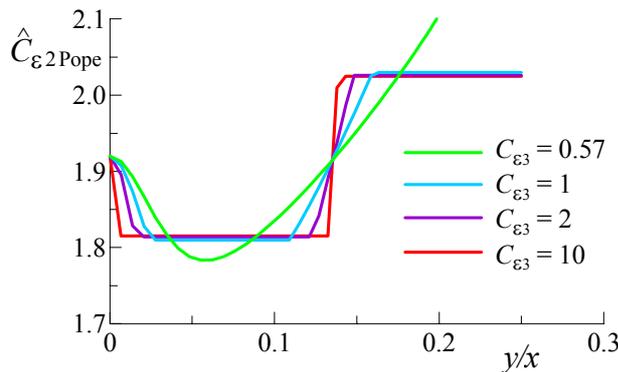


Figure 2.3. Variations radiales du coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé pour $\delta_{0.5} = 0.094$.

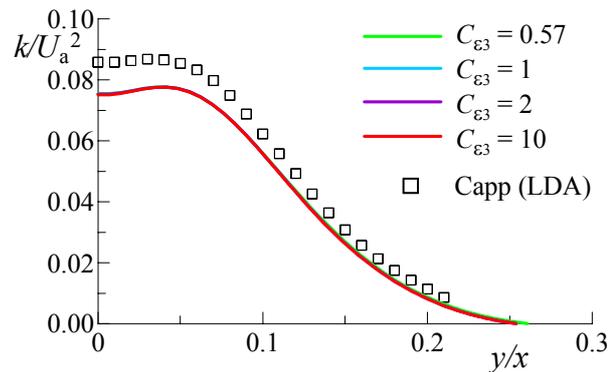


Figure 2.4. Profils radiaux d'énergie cinétique turbulente pour $\delta_{0.5} = 0.094$.

Il y a deux possibilités pour utiliser la correction limitée : soit fixer le coefficient $C_{\varepsilon 3}$ et adapter le limiteur χ_{lim} à un $\delta_{0.5}$ voulu, soit ajuster $C_{\varepsilon 3}$ pour un χ_{lim} constant, en sachant que ce choix ne change pas la solution. Finalement, nous avons préféré garder le coefficient de Pope $C_{\varepsilon 3} = 0.79$ et adapter le paramètre χ_{lim} en fonction de $\delta_{0.5}$. Le tableau 2.1 présente les valeurs de χ_{lim} , ajustées aux différents $\delta_{0.5}$, et les valeurs minimales de $\hat{C}_{\varepsilon 2 \text{Pope}}$. Nous proposons une approximation de χ_{lim} en fonction de $\delta_{0.5}$ valable dans l'intervalle $0.086 \leq \delta_{0.5} \leq 0.12$. Cette approximation a pour forme :

$$\chi_{\text{lim}} = -4258.8\delta_{0.5}^3 + 1390.5\delta_{0.5}^2 - 156.15\delta_{0.5} + 6.0727 \quad (2.20)$$

Comme conclusion finale, nous pouvons dire que la correction de Pope limitée assure un comportement correct du modèle $k-\varepsilon$ et une bonne qualité de la solution du jet autosemblable. Nos essais avec d'autres codes de calcul ont montré que la correction limitée

ne cause ni instabilité numérique ni problème de convergence. Si nécessaire, elle permet d'ajuster la solution à un cas particulier via le paramètre χ_{lim} .

2.2.2. Validation

La correction de Pope limitée a été implantée dans le code MSD. Pour sa validation, nous avons choisi un cas-test correspondant à une expérience réalisée par Joël Pagé au CNRS-LCSR. Parmi plusieurs jets étudiés par Pagé au cours de sa thèse [Pagé (1998)], nous avons choisi le jet d'air parce que ce cas représente purement les effets dynamiques sans aucune influence due à la pesanteur.

2.2.2.1. Conditions expérimentales

Une vue schématique du caisson d'essai est présentée sur la figure 2.5. Un jet rond d'air est créé dans un co-courant du même gaz. Le jet sort d'un tube cylindrique ayant un diamètre interne D_j de 7 mm, un diamètre externe $D_{j,e}$ de 9 mm et une longueur de 560 mm, ou $80 D_j$. L'injecteur est aligné sur l'axe d'un canal d'une section carrée de 300 mm par 300 mm et d'une longueur de 1300 mm. La sortie de l'injecteur se trouve à 300 mm en aval du plan d'entrée du co-courant. Le jet est orienté verticalement vers le haut.

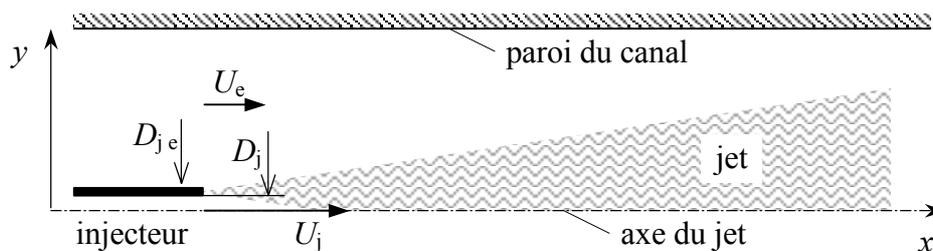


Figure 2.5. Schéma du dispositif expérimental de Pagé.

Le jet a une vitesse maximale U_j de 40 m/s mesurée à 2 mm ($0.3 D_j$) en aval de la sortie de l'injecteur. La vitesse moyenne du co-courant U_e est de 3 m/s. La pression dans le caisson est constante au niveau atmosphérique. La température totale des deux courants est de 290 K.

Pour le jet, le nombre de Reynolds, déterminé à partir des conditions d'injection et du diamètre D_j vaut $1.92 \cdot 10^4$, par conséquent l'écoulement dans l'injecteur est turbulent. Le co-courant passe par plusieurs couches de nids d'abeille avant d'entrer dans le caisson donc il a un profil uniforme de vitesse et un faible niveau de turbulence.

Pagé (1998) a vérifié que la présence du caisson n'a pas altéré le processus d'entraînement du co-courant par le jet. Dans ce but, il a appliqué le critère de Curtet (1957) qui doit rester supérieur à 0.8 pour qu'une recirculation ne se produise pas autour du jet. Selon l'analyse de Pagé, le critère de Curtet vaut 1.42 pour le jet d'air donc le phénomène de recirculation ne doit pas apparaître.

Les mesures de vitesse ont été effectuées grâce à l'anémométrie laser à effet Doppler sur l'axe et dans plusieurs sections du jet. Les mesures des débits n'ont pas été faites systématiquement donc le débit passé par l'injecteur n'a pas été déterminé. D'autres détails sur le dispositif expérimental et les moyens de mesures sont décrits par Pagé (1998). Nous n'avons pas pu obtenir les résultats d'origine donc les profils expérimentaux ont été recueillis sur des graphiques numérisés.

2.2.2.2. Conditions de simulation

La largeur mesurée du jet est toujours petite par rapport à la largeur du canal donc le jet n'est pas directement influencé par des effets pariétaux (confinement, interaction visqueuse, etc.). Cela nous permet de supposer que le jet est axisymétrique et d'utiliser l'approche bidimensionnelle afin de simplifier le calcul. Nous avons remplacé la forme parallélépipédique du canal par une forme cylindrique circulaire. Le canal axisymétrique a un diamètre de 340 mm, par conséquent l'aire de sa section est équivalente à celle du canal réel.

La zone de calcul comporte trois domaines : intérieur de l'injecteur (D1), co-courant autour de l'injecteur (D2), zone de mélange (D3). L'origine de la coordonnée axiale x correspond au plan de sortie de l'injecteur. La disposition des domaines et de leurs frontières est schématisée sur la figure 2.6.

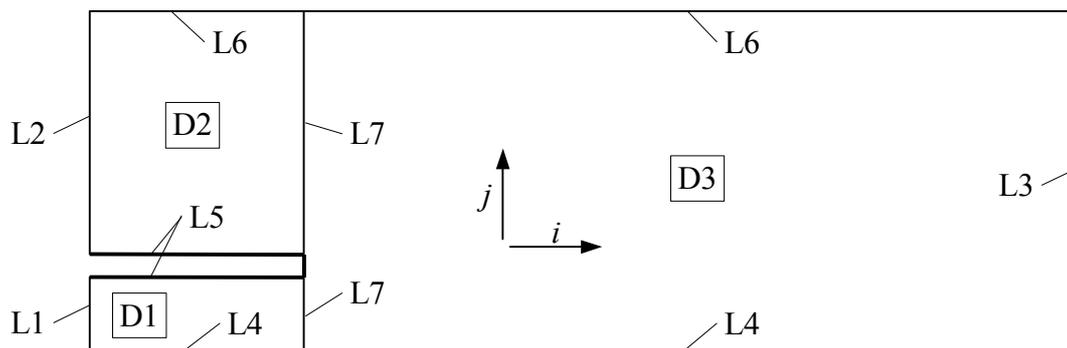


Figure 2.6. Schéma de la zone de calcul.

Les dimensions des domaines sont les suivants :

- D1 : $L = 2 \text{ mm}$, $y_{\max} = 3.5 \text{ mm}$;
- D2 : $L = 25 \text{ mm}$, $y_{\min} = 4.5 \text{ mm}$, $y_{\max} = 170 \text{ mm}$;
- D3 : $L = 400 \text{ mm}$, $y_{\max} = 170 \text{ mm}$.

La liste suivante spécifie les conditions aux limites :

L1 : Entrée du courant du jet

- Type de frontière : entrée débit
- Débit massique : $\rho_j U_j = 48.83 \text{ kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$
- Température totale : $T_{tj} = 290 \text{ K}$
- Taux de turbulence : $\tau_{Tj} = 6.5 \%$
- Échelle de turbulence : $l_j = 0.57 \text{ mm}$

Remarque : Plusieurs profils de vitesse ont été essayés sur cette frontière en gardant la vitesse maximale du jet égale à 40 m/s. Nous avons d'abord imposé un profil de vitesse turbulent pleinement développé. Cela nous a donné une quantité de mouvement du jet largement inférieure à la quantité de mouvement correspondant aux profils de vitesse mesurés. Nous avons finalement choisi un profil de vitesse uniforme. Le taux et l'échelle de turbulence ont été pris sur l'axe de l'écoulement turbulent pleinement développé.

L2 : Entrée du co-courant

- Type de frontière : entrée débit
- Débit massique : $\rho_e U_e = 3.65 \text{ kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$
- Température totale : $T_{te} = 290 \text{ K}$
- Taux de turbulence : $\tau_{Te} = 1 \%$
- Échelle de turbulence : $l_e = 1 \text{ mm}$

Remarque : D'après nos estimations, la couche limite est laminaire sur la paroi externe de l'injecteur. Le nombre de Reynolds Re , déterminé pour une longueur de 0.3 m et pour les conditions dans le co-courant, est environ $8 \cdot 10^5$ contre la limite de transition sur une plaque plane 10^6 - 10^7 [Wilcox (1998)]. Nous avons imposé un profil de vitesse obtenu par un calcul du co-courant laminaire sur une longueur de 275 mm. Nos essais ont montré que le jet est pratiquement insensible au profil de vitesse dans le co-courant même s'il était uniforme. En revanche, les conditions de turbulence sont importantes pour la stabilité de la solution. Sans la turbulence dans le co-courant, la solution fluctue fortement dans la zone autour de la sortie de l'injecteur. Nous avons imposé les conditions d'une faible turbulence pour que la solution soit localement stationnaire.

L3 : Sortie

- Type de frontière : sortie pression
- Pression statique : 101.3 kPa

L4 : Axes de l'injecteur et du jet

- Type de frontière : axe de symétrie

L5 : Parois de l'injecteur

- Type de frontière : paroi
- Flux de chaleur : 0

L6 : Paroi du canal

- Type de frontière : plan de symétrie

Remarque : Nous avons spécifié les conditions de glissement pour cette frontière suivant l'hypothèse que le jet n'a pas été influencé par la paroi du canal.

L7 : Frontières multidomaines

- Type de frontière : raccordement exact

Le maillage a des pas variables. Il a été resserré dans les zones de forts gradients de vitesse (près des parois de l'injecteur, dans la couche cisailée du jet). Un fragment du maillage à la proximité de la sortie de l'injecteur est présenté sur la figure 2.7. Le tableau 2.2 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions (N_i , N_j) et les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}$, $\Delta_{j\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}$, $\Delta_{j\max}$). Les cellules les plus petites sont placées sur la lèvre de l'injecteur.

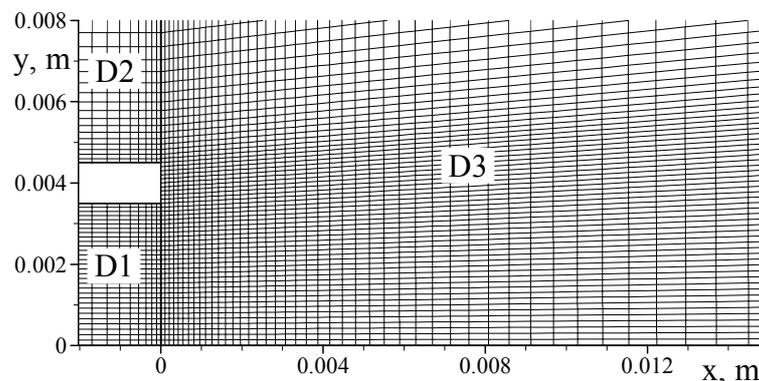


Figure 2.7. Maillage à la proximité de la sortie de l'injecteur.

Tableau 2.2. Caractéristiques du maillage

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
D1	9	30	270	0.1	0.45	0.1	0.135
D2	21	60	1260	0.1	4.4	0.1	13.2
D3	140	100	14000	0.1	5.0	0.1	13.2

L'air est considéré comme un gaz monoespèce. Ses propriétés sont établies correspondant aux propriétés moyennes du mélange représentant l'air standard.

2.2.2.3. Résultats de simulation

Nous présentons d'abord quelques résultats qui justifient notre choix concernant les conditions dans l'injecteur. L'effet du profil de vitesse, imposé à la frontière d'entrée L1, est illustré par les figures 2.8 et 2.9. Les simulations ont été réalisées avec $\chi_{\text{lim}} = 0.143$.

La figure 2.8 montre des profils radiaux de vitesse U à deux distances axiales : $x = 2$ mm ($0.3 D_j$) et $x = 70$ mm ($10 D_j$). Les courbes bleues correspondent à la simulation où le profil de vitesse dans l'injecteur est turbulent pleinement développé. Les courbes vertes correspondent au profil de vitesse uniforme à l'entrée.

Dans la première section, le profil expérimental de vitesse passe entre les deux profils calculés. Nous pouvons constater que le profil turbulent fait apparaître un déficit de quantité de mouvement. Pour le profil uniforme, la vitesse semble trop élevée sur le bord du jet, mais la région des mesures n'est pas assez large pour estimer correctement la quantité de mouvement du jet.

Dans la deuxième section, le jet avec le profil initial turbulent a un grand déficit de quantité de mouvement. En revanche, le jet avec le profil initial uniforme a une quantité de mouvement correcte.

La figure 2.9 montre l'évolution de la vitesse sur l'axe représentant l'expérience et les deux simulations. Concernant le jet avec le profil initial turbulent, nous pouvons conclure que la longueur du cœur potentiel est sous-estimée et que la vitesse sur l'axe diminue trop vite. Le jet avec le profil initial uniforme a un accord général nettement meilleur avec l'expérience.

Dans la suite, nous considérons les résultats de calculs obtenus avec le profil uniforme. Nous ne voulons pas présenter d'autres simulations avec des profils intermédiaires car nos points expérimentaux ne sont pas assez précises pour une analyse minutieuse.

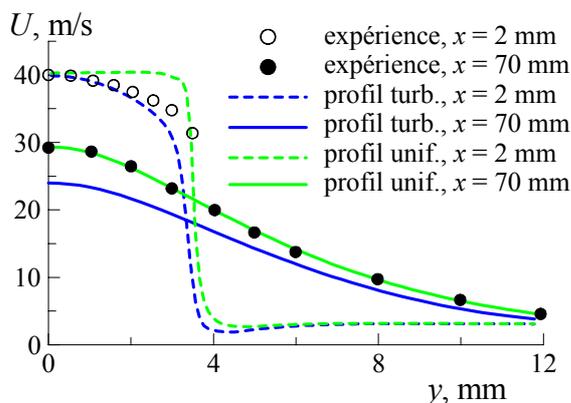


Figure 2.8. Profils radiaux de vitesse à 2 mm et 70 mm de la sortie de l'injecteur.

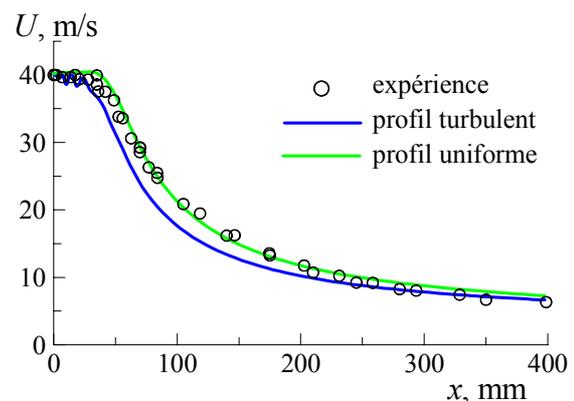


Figure 2.9. Profils de vitesse le long de l'axe du jet.

Nous avons étudié l'effet de la correction de Pope limitée sur la solution en prenant les quatre valeurs suivantes du paramètre limiteur χ_{lim} : 0, 0.094, 0.143, 0.222. Ces valeurs ont

été déjà utilisées pour le jet autosemblable (voir le tableau 2.1). Les résultats des quatre simulations sont comparés avec les données expérimentales sur les figures 2.10-2.13. Les résultats sont présentés sous forme adimensionnée.

Les profils radiaux de vitesse à $x = 175 \text{ mm}$ ($25 D_j$) sont tracés sur la figure 2.10. Le modèle $k-\varepsilon$ sans la correction de Pope ($\chi_{\text{lim}} = 0$) prédit un profil de vitesse trop large et un maximum considérablement sous-estimé. Le limiteur $\chi_{\text{lim}} = 0.222$ donne le meilleur accord avec l'expérience pour la forme du profil.

Les profils longitudinaux de la vitesse inversée sur l'axe du jet sont illustrés par la figure 2.11. Les quatre solutions prédisent la même longueur du cœur potentiel du jet. La vitesse calculée montre une décroissance parfaitement hyperbolique après le cœur potentiel, avec un taux de décroissance qui varie en fonction du limiteur χ_{lim} . La définition du taux de décroissance K_U utilisée par Pagé s'écrit comme :

$$K_U = \frac{U_a - U_e}{U_j - U_e} \frac{x - x_0}{D_j} \quad (2.21)$$

x_0 est l'origine fictive du jet. Pour les quatre χ_{lim} considérés, les valeurs estimées de K_U sont les suivantes : 5.16, 6.00, 6.46, 6.79. Pagé (1998) a rapporté $K_U = 5.49$ ce qui correspond plutôt à la solution sans la correction. Pourtant, nous voyons que le taux de décroissance varie dans l'expérience. Si nous considérons l'intervalle de x/D_j entre 10 et 30, l'approximation des données expérimentales donne $K_U \approx 6.3$ ce qui est conforme à la simulation avec $\chi_{\text{lim}} = 0.143$. Sans la correction de Pope, la vitesse sur l'axe est notablement sous-estimée jusqu'à $x/D_j = 40$. Plus loin, la vitesse calculée s'accorde bien avec l'expérience. Avec la correction, les meilleurs résultats ont été obtenus pour $\chi_{\text{lim}} = 0.143$ et 0.222 dans l'intervalle où x/D_j est compris entre 10 et 30.

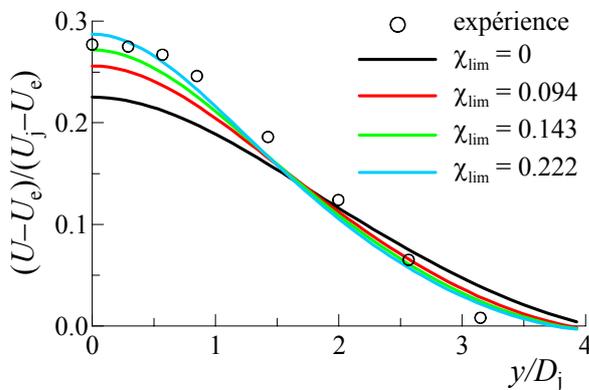


Figure 2.10. Profils radiaux de vitesse à $x/D_j = 25$.

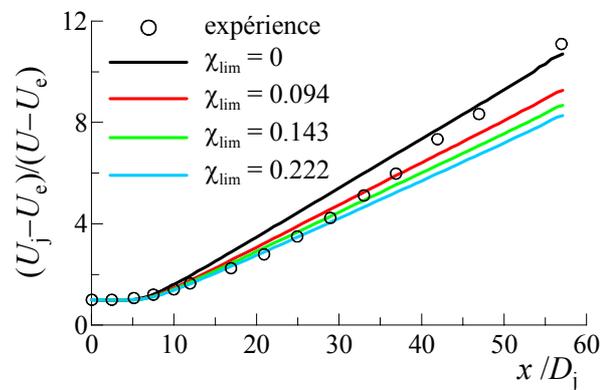


Figure 2.11. Profils de vitesse inversée le long de l'axe du jet.

Les profils longitudinaux de l'énergie cinétique turbulente sont montrés sur la figure 2.12. L'effet du limiteur χ_{lim} est marqué autour de $x/D_j = 10$ où l'énergie cinétique turbulente atteint son maximum. La simulation sans la correction de Pope, donne un maximum trop élevé ce qui explique pourquoi la décroissance de la vitesse est excessivement rapide sur l'axe du jet. La meilleure prédiction du maximum de k est obtenue avec $\chi_{\text{lim}} = 0.222$. À $x/D_j > 15$, les résultats du calcul sont pratiquement identiques et s'accordent bien avec l'expérience.

L'évolution longitudinale du demi-rayon dynamique est présentée sur la figure 2.13. Sans la correction de Pope, le jet calculé est trop large jusqu'à $x/D_j = 35$ mais, à partir de $x/D_j = 40$, il a le même $y_{0.5}$ que le jet expérimental. La courbe correspondant à $\chi_{\text{lim}} = 0.094$ suit le mieux les points expérimentaux jusqu'à $x/D_j = 35$.

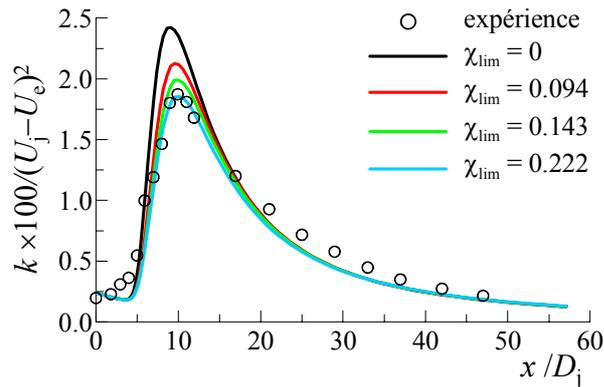


Figure 2.12. Profils d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe du jet.

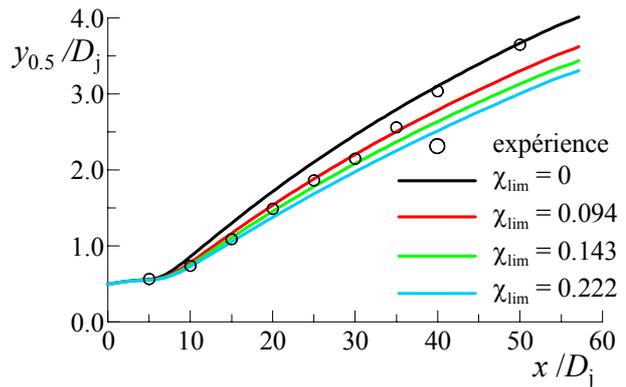


Figure 2.13. Distributions longitudinales de demi-rayon du jet.

La présente analyse prouve que la correction de Pope limitée améliore considérablement la qualité de la simulation. Le meilleur accord avec l'expérience a été obtenu avec $\chi_{\text{lim}} = 0.222$ pour les profils de vitesse et d'énergie cinétique turbulente tandis que le limiteur $\chi_{\text{lim}} = 0.094$ a donné les meilleurs résultats pour le demi-rayon dynamique du jet. En général, le limiteur $\chi_{\text{lim}} = 0.143$ peut être considéré raisonnablement bien adapté à ce cas test. Sans la correction de Pope, la simulation a produit un taux de mélange trop élevé qui se traduit par un écart important par rapport à l'expérience. Cependant à $x/D_j > 40$, cette simulation a donné le meilleur accord avec les résultats expérimentaux pour la vitesse sur l'axe et pour le demi-rayon dynamique. Pagé (1998) a remarqué que le comportement du jet changeait à une distance élevée de l'injecteur. Cela a été expliqué, soit par la présence du caisson et par l'effet de confinement, soit par l'influence de la hotte qui aspirait de l'air à la sortie du canal. Avec une référence aux résultats expérimentaux d'Antonia et Bilger (1973), Pagé a conclu que le confinement est responsable d'une intensification de la turbulence au milieu du canal. Si ce raisonnement est correct, il peut justifier l'écart observé pour les solutions avec la correction de Pope à $x/D_j > 40$.

Nous terminons par une remarque concernant la stabilité numérique. Nous avons post-traité une solution convergée du jet en appliquant la formulation originale de la correction de Pope (2.1) avec l'expression simplifiée pour χ (2.4). Près de la sortie de l'injecteur, nous avons obtenu des valeurs du coefficient $C_{\varepsilon 2}$ corrigé au niveau de $1.6 \cdot 10^5$ ce qui dépasse 10^5 fois de son ordre de grandeur normal. Cela explique pourquoi la correction de Pope originale n'a pas encore trouvé un large champ d'application.

2.3. Validation de la correction de Sarkar

2.3.1. Présentation générale des cas test

Le modèle de compressibilité de Sarkar sous la forme (2.8) a été implanté dans le code MSD. Afin de valider ce modèle, nous avons choisi des cas tests correspondant aux expériences de Goebel et al. (1990) et de Goebel et Dutton (1991) avec des couches de mélange planes compressibles. Les deux raisons principales pour ce choix sont les suivantes :

- 1) Goebel et ses collaborateurs ont étudié plusieurs couches de mélange caractérisées par une gamme de nombre de Mach convectif allant de 0.2 à 0.99 sur le même dispositif expérimental. Le cas expérimental est relativement simple et bien documenté. Tout cela facilite la simulation et l'analyse des résultats.
- 2) Ces couches de mélange ont été simulées numériquement par plusieurs auteurs en utilisant le modèle $k-\varepsilon$ avec des corrections de compressibilité. Il est donc intéressant de comparer nos résultats avec ceux publiés précédemment.

Dans l'analyse de résultats présentée plus loin nous utilisons la notion de taux d'épaississement de la couche de mélange qui est défini de la même façon que dans l'étude de Goebel et Dutton (1991) :

$$\delta_{0.8} = db_{0.8}/dx \quad (2.22)$$

$b_{0.8}$ est l'épaisseur de la couche de mélange correspondant à une variation de la vitesse longitudinale moyenne de $U_1 - 0.1(U_1 - U_2)$ à $U_2 + 0.1(U_1 - U_2)$ ce qui représente 80 % de la différence totale de vitesse $U_1 - U_2$. Selon Pui et Gartshore (1979), l'épaisseur $b_{0.8}$ est reliée à l'épaisseur de vorticité b_ω si le profil de vitesse peut être approché par la fonction d'erreur erf :

$$b_\omega \equiv \frac{U_1 - U_2}{(\partial U / \partial y)_{\max}} = 1.1 b_{0.8} \quad (2.23)$$

Dash et al. (1992) ont présenté des résultats de simulation sur les expériences de Goebel et Dutton (1991). Leurs simulations ont été réalisées en utilisant le modèle $k-\varepsilon$ sans et avec le terme de dissipation compressible ε_d (2.9). Dash et al. ont montré qu'avec le modèle $k-\varepsilon$ standard, la simulation surestime l'intensité turbulente dans la couche de mélange et le taux d'épaississement lorsque le nombre de Mach convectif M_c est entre 0.46 et 0.99. L'ajout du terme ε_d a amélioré considérablement les résultats de simulation. Les détails concernant les conditions de simulation n'ont pas été précisés.

Cottrell (1996), Cottrell et Plesniak (2001) ont publié des résultats de simulation avec le code FLUENT. Les versions standard et RNG du modèle $k-\varepsilon$ ont été testées. L'effet de compressibilité a été pris en compte grâce à la correction de Sarkar sous la forme (2.5) avec $\alpha_1 = 1$. Ces publications donnent des détails sur la technique de la simulation, en particulier sur les dimensions du maillage et sur les conditions aux limites. Cottrell a conclu que la version RNG du modèle $k-\varepsilon$ montre une meilleure performance par rapport à sa version standard notamment pour le taux d'épaississement.

Nous avons pour objectif d'analyser l'effet de la correction de Sarkar sur les résultats de simulation. Nous voulons aussi comparer la performance des deux modèles de compressibilité de Sarkar présentés dans la section 2.1.2 afin d'en choisir un pour la suite de notre étude.

Pour le taux d'épaississement, nous comparons les résultats de nos calculs avec le code MSD et avec le code MIXER de Wilcox (1998). MIXER calcule des solutions de

similitude pour la couche de mélange non compressible ou compressible. Ce code intègre le modèle $k-\varepsilon$ et la correction de Sarkar sous la forme (2.5). Nous avons introduit quelques modifications dans le code MIXER pour pouvoir simuler les couches de mélange compressibles correspondant à nos cas tests. Sinon, avec MIXER d'origine, nous n'aurions pas pu spécifier le rapport des masses volumiques ρ_2/ρ_1 pour la couche de mélange compressible.

2.3.2. Conditions expérimentales

Goebel et ses collaborateurs ont étudié des couches de mélange dans un canal de section rectangulaire avec une largeur constante de 96 mm. Le schéma du canal est présenté sur la figure 2.14. Dans le tronçon d'entrée, les deux écoulements sont séparés par une plaque en forme de cale oblique avec un angle de 2.5° . Le bord de fuite de la plaque a une épaisseur de 0.5 mm. Au bord de fuite, la plaque divise la section du canal, dont la hauteur est de 48 mm, en deux parties égales. Le tronçon de mélange du canal a une longueur de 500 mm. La divergence du canal est ajustée, en inclinant ses parois inférieure et supérieure, afin d'obtenir une pression constante le long de l'axe du canal.

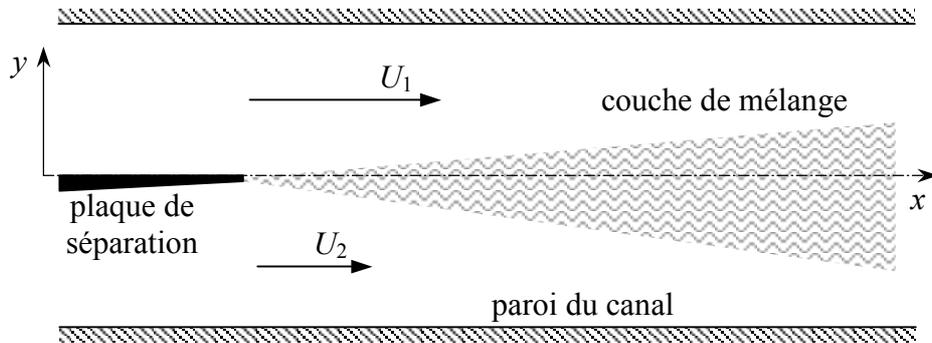


Figure 2.14. Schéma du dispositif expérimental de Goebel.

Les conditions expérimentales sont récapitulées dans le tableau 2.3 pour les cas test considérés dans la présente étude. Il faut noter que les valeurs de M , U et P correspondent à des états moyens des courants le long de la zone de mesures. Parmi les cinq cas, les deux premiers représentent les couches de mélange entièrement supersoniques. Dans les autres cas, seul le courant rapide est supersonique. Dans les cas 2, 4 et 5, le courant rapide est préchauffé, ce qui explique un niveau élevé de sa température totale. Le nombre de Reynolds Re_{1-2} est défini comme $(U_1 - U_2)\rho_{\text{moy}}/\mu_{\text{moy}}$ où ρ_{moy} et μ_{moy} sont les propriétés moyennes des deux courants. La plage x_δ spécifie la zone dans laquelle le taux d'épaississement a été déterminé. La plage x_k a été définie par Goebel comme la zone de similitude où l'intensité des fluctuations turbulentes est relativement stable.

Les mesures de vitesse ont été effectuées par l'anémométrie laser à effet Doppler. Les résultats de mesures ont été rapportés pour la vitesse moyenne U , pour les intensités des fluctuations u' et v' de vitesse et pour les corrélations de u' et v' . Les profils expérimentaux présentés par la suite ont été obtenus à partir des figures publiées par Cottrell (1996).

L'intensité initiale de u' a été mesurée mais n'a pas été rapportée pour tous les cas. Goebel et al. (1990) ont indiqué que le rapport $(\overline{u'^2})^{1/2}/U$ est de 1-1.4 % pour le cas 1 et de 1.3-2 % pour le cas 2. L'épaisseur de la couche limite au bord de fuite de la plaque est donnée pour tous les cas. Elle est comprise entre 1.7 mm et 3.1 mm sur la surface supérieure et entre 1.3 mm et 3 mm sur la surface inférieure pour les différents cas.

Tableau 2.3. Conditions expérimentales.

Cas	1	2	3	4	5
M_c	0.2	0.46	0.69	0.86	0.99
M_1 / M_2	2.01 / 1.38	1.91 / 1.36	1.96 / 0.27	2.35 / 0.3	2.27 / 0.38
U_1 / U_2	515 / 404	700 / 399	499 / 92	616 / 100	830 / 131
T_{t1} / T_{t2}	295 / 295	578 / 295	285 / 285	360 / 290	675 / 300
P , kPa	46	49	53	36	32
Re_{1-2} , m^{-1}	$7.7 \cdot 10^6$	$1.2 \cdot 10^7$	$2.6 \cdot 10^7$	$2.1 \cdot 10^7$	$1.3 \cdot 10^7$
$\delta_{0.8}$	0.020	0.038	0.059	0.050	0.049
x_δ , mm	300-450	100-450	25-200	10-175	10-150
x_k , mm	350-450	300-400	150-200	100-150	75-125

2.3.3. Conditions de simulation

Nous avons choisi l'approche 2D en supposant que les parois latérales du canal ont une influence négligeable sur l'écoulement dans son plan vertical de symétrie. Cette supposition repose sur le fait que la largeur du canal est deux fois plus grande que sa hauteur donc les effets pariétaux sont deux fois plus importants sur les parois horizontales. En outre, la longueur du tronçon de mélange n'est pas très grande par rapport à la largeur ce qui tend à conforter l'hypothèse selon laquelle l'effet des parois latérales n'est pas considérable.

La zone de calcul est composée d'un seul domaine. La disposition des frontières du domaine est schématisée sur la figure 2.15. L'origine des coordonnées x et y correspond au coin supérieur du bord de fuite de la plaque. L'aire occupée par la plaque est exclue de la zone de calcul en plaçant les frontières de la plaque le long des lignes du maillage.

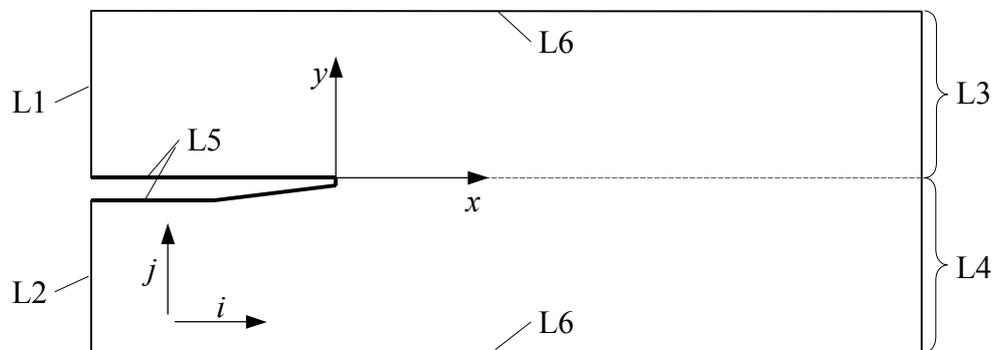


Figure 2.15. Schéma de la zone de calcul.

Par la simulation, nous cherchons à reproduire les conditions de confluence des deux courants. Les frontières d'entrée L1 et L2 sont positionnées 172 mm en amont du bord de fuite afin d'obtenir les couches limites sur la plaque d'une épaisseur comparable aux épaisseurs mesurées. Sans connaître la géométrie exacte de la plaque, nous avons pris une épaisseur constante de 3 mm sur une longueur de 116 mm puis la surface inférieure était inclinée à 2.5° , comme dans l'expérience, pour arriver à une épaisseur de 0.5 mm au bord de fuite.

Le canal a un angle de divergence de 0.25° selon la publication de Goebel et al. (1990). La longueur du domaine est variable : pour les couches de mélange partiellement supersoniques, la zone de calcul est raccourcie dans le tronçon de mélange. Cette mesure est nécessaire pour avoir des conditions correctes dans le courant subsonique. Sur une longueur

de 500 mm, le courant subsonique est fortement entraîné par le courant supersonique, par conséquent, sa pression statique chute en provoquant une augmentation importante de la vitesse à l'entrée. En outre, le plan de sortie est divisé en deux parties L3 et L4 afin d'imposer indépendamment la pression dans les zones supersonique et subsonique. La pression imposée sur L3 n'influence que la couche limite sur la paroi supérieure.

Pour étudier l'effet des parois du canal sur la couche de mélange, nous avons construit un autre domaine de calcul qui a une hauteur de 200 mm. La section du canal est donc augmentée de 4.2 fois. Les cas 3, 4 et 5 avec cette géométrie modifiée sont désignés comme 3H, 4H et 5H.

Le tableau 2.4 regroupe les repères géométriques principaux de la zone de calcul pour tous les cas considérés.

Tableau 2.4. Géométrie de la zone de calcul

Cas	1	2	3	3H	4	4H	5	5H
x_{\min} , mm	-172							
x_{\max} , mm	500	500	230	230	200	200	175	175
$y_{\min}(x=0)$, mm	-24.25	-24.25	-24.25	-100	-24.25	-100	-24.25	-100
$y_{\max}(x=0)$, mm	23.75	23.75	23.75	100	23.75	100	23.75	100

La liste suivante spécifie les conditions aux limites :

L1 : Entrée du courant rapide

Conditions de type entrée pression. Les conditions imposées à cette frontière sont récapitulées dans le tableau 2.5. Les valeurs du nombre de Mach M_1 et de la pression totale P_{t1} sont ajustées afin de respecter les conditions expérimentales au voisinage du bord de fuite. L'échelle turbulente l_1 est égale à 1 mm dans toutes les simulations.

Tableau 2.5. Conditions imposées à L1

Cas	1	2	3	3H	4	4H	5	5H
M_1	2.114	1.942	2.057	1.967	2.478	2.350	2.266	2.254
P_{t1} , kPa	399.6	313.2	401.3	375.4	513.3	453.1	340.5	372.4
T_{t1} , K	295	578	285	285	360	360	675	675
τ_{T1} , %	1.4	1.8	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0

L2 : Entrée du courant lent

Conditions de type entrée débit ou entrée pression. Les conditions imposées à cette frontière sont récapitulées dans le tableau 2.6. Un ajustement est nécessaire pour observer les conditions expérimentales au voisinage du bord de fuite. L'échelle turbulente l_2 est égale à 1 mm dans toutes les simulations.

Tableau 2.6. Conditions imposées à L2

Cas	1	2	3	3H	4	4H	5	5H
M_2	1.032	1.086	–	–	–	–	–	–
$\rho_2 U_2$, kg/(s·m ²)	336.34	350.43	–	–	–	–	–	–
P_{t2} , kPa	–	–	54.65	53.73	36.50	36.13	35.00	35.40
T_{t2} , K	295	295	285	285	290	290	300	300
τ_{T2} , %	2.0	2.8	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0

L3 et L4 : Sorties des courants rapide et lent

Conditions de type sortie pression. Les pressions spécifiées pour ces frontières sont récapitulées dans le tableau 2.7. Le plus important est d'ajuster la pression P_4 à la sortie du courant subsonique car cette pression influence les conditions en amont. La pression P_3 imposée à la sortie du courant supersonique est égale ou inférieure à P_4 afin de ne pas perturber l'écoulement au voisinage de la paroi supérieure.

Tableau 2.7. Conditions imposées à L3 et à L4

Cas	1	2	3	3H	4	4H	5	5H
P_3 , kPa	49.0	50.0	51.0	51.0	34.0	34.0	32.0	32.0
P_4 , kPa	49.0	50.0	55.3	52.1	35.7	34.8	33.1	32.8

L5 : Parois de la plaque de séparation

Conditions de type paroi adiabatique.

L6 : Paroi du canal

Conditions de type paroi ou plan de symétrie. Cette frontière est spécifiée comme paroi adiabatique sauf les cas 3H, 4H, 5H pour lesquels il s'agit d'un plan de symétrie.

Le maillage est construit pour le domaine le plus long puis tronqué selon la coordonnée x_{\max} . Il est resserré dans les zones de forts gradients de vitesse (près des parois, dans la zone de la couche de mélange). La zone du maillage le plus fin, située à la proximité du bord de fuite, est présentée sur la figure 2.16. Le premier rang de cellules entourant la plaque a une épaisseur de 0.05 mm. Le tableau 2.8 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions maximales (N_i , N_j) et le nombre total de cellules.

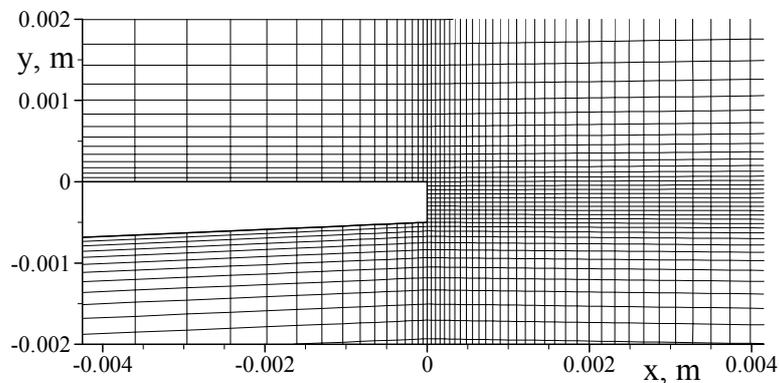


Figure 2.16. Maillage à la proximité du bord de fuite de la plaque.

Tableau 2.8. Caractéristiques du maillage

Cas	1	2	3	3H	4	4H	5	5H
N_i	284	284	232	232	224	224	216	216
N_j	130	130	130	158	130	158	130	158
$N_i \times N_j$	36180	36180	29420	35916	28380	34652	27340	33388

L'air est considéré comme un gaz monoespèce. Ses propriétés ont été établies correspondant aux propriétés moyennes du mélange représentant l'air standard.

Nous avons utilisé trois approches pour le modèle de compressibilité (2.8) qui sont définies comme il suit :

ST – $\alpha_{1-3} = \alpha_2 = 0$ (k - ϵ standard, les effets de compressibilité ne sont pas pris en compte)

DC – $\alpha_{1-3} = 1$ et $\alpha_2 = 0$ (dissipation compressible)

DCDP – $\alpha_{1-3} = 0.3$ et $\alpha_2 = 0.15$ (dissipation compressible et dilatation de pression)

2.3.4. Résultats de simulation

Nous avons effectué les simulations pour les cas 1, 2, 3H, 4H et 5H avec l'approche ST. Quant aux cas 3, 4 et 5, nous n'avons pas réussi à obtenir de solutions satisfaisantes à cause d'une interaction trop forte entre les courants qui altérerait complètement la structure de l'écoulement. Avec DC, nous avons simulé tous les cas. Avec DCDP, nous avons simulé les cas de 1 à 5 sans la géométrie modifiée.

Nous présentons d'abord les résultats pour les cas 4 et 4H afin de donner une vue générale de la qualité de simulation et de comparer les différentes approches d'une façon détaillée. Sur la figure 2.17, les profils de vitesse adimensionnée sont tracés dans quatre sections transversales dont les positions sont $x = 10$ mm, 50 mm, 100 mm et 150 mm. Dans chaque section, nous comparons le profil expérimental et les profils calculés correspondant aux cas 4 et 4H avec DC et au cas 4H avec ST. Les profils obtenus avec DC et ceux avec DCDP coïncident pour le cas 4. Ces derniers ne sont pas présentés. Les profils « cas 4, DC » suivent correctement les profils expérimentaux mais ils sont moins raides du côté du courant lent et, par conséquent, ils sont plus larges. Les profils « cas 4H, DC » ont presque la même largeur cependant ils sont écartés vers le courant rapide donc la couche de mélange est plus centrée par rapport à l'axe du canal. Les profils « cas 4H, ST » sont trop étendus ce qui indique que le taux de mélange est fortement surestimé.

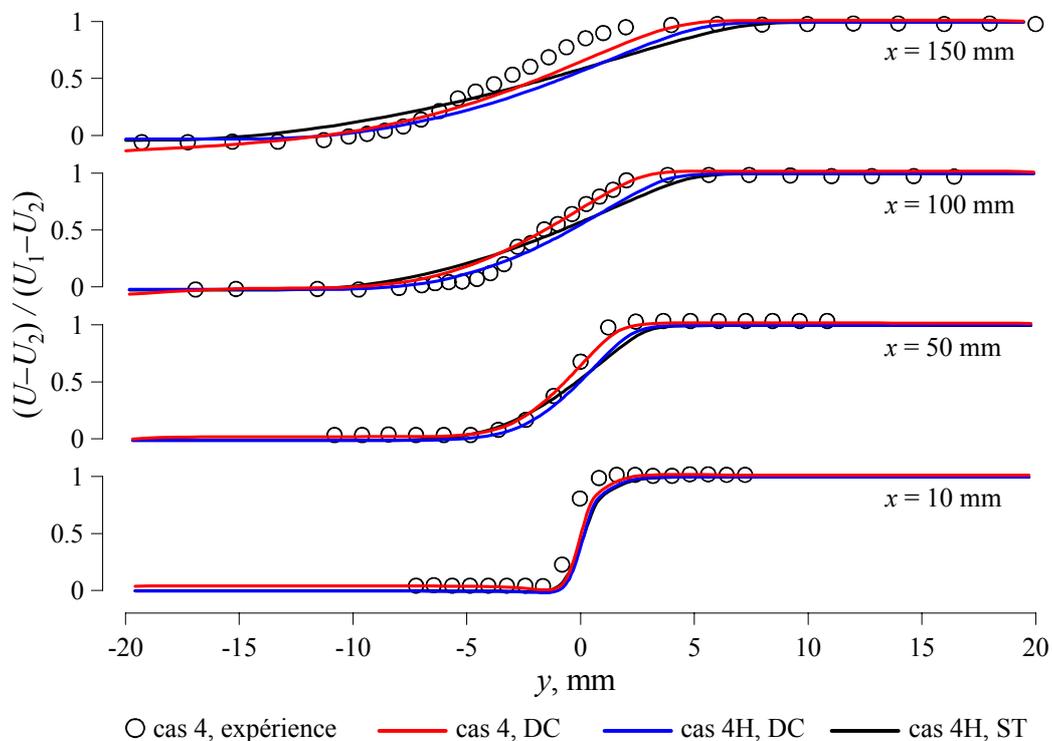


Figure 2.17. Profils transversaux de vitesse adimensionnée.

Une comparaison analogue est présentée sur la figure 2.18 pour les profils transversaux d'énergie cinétique turbulente. Les données sur k sont normalisées par $(U_1 - U_2)^2$. Il faut remarquer que les données expérimentales ont été déterminées à partir des composantes fluctuantes u' et v' de vitesse sans tenir compte de la composante w' qui n'a pas été mesurée. Les profils calculés avec DC ont une amplitude correcte mais leur largeur est notablement surestimée à $x = 150$ mm. Dans cette même section, les deux profils calculés sont plus étendus vers le courant rapide par rapport au profil expérimental. Les profils « cas 4H, ST » ont une amplitude et une largeur beaucoup plus grandes donc la turbulence est surdéveloppée dans la couche de mélange. Cela explique pourquoi le mélange est beaucoup plus intense par rapport aux simulations avec DC.

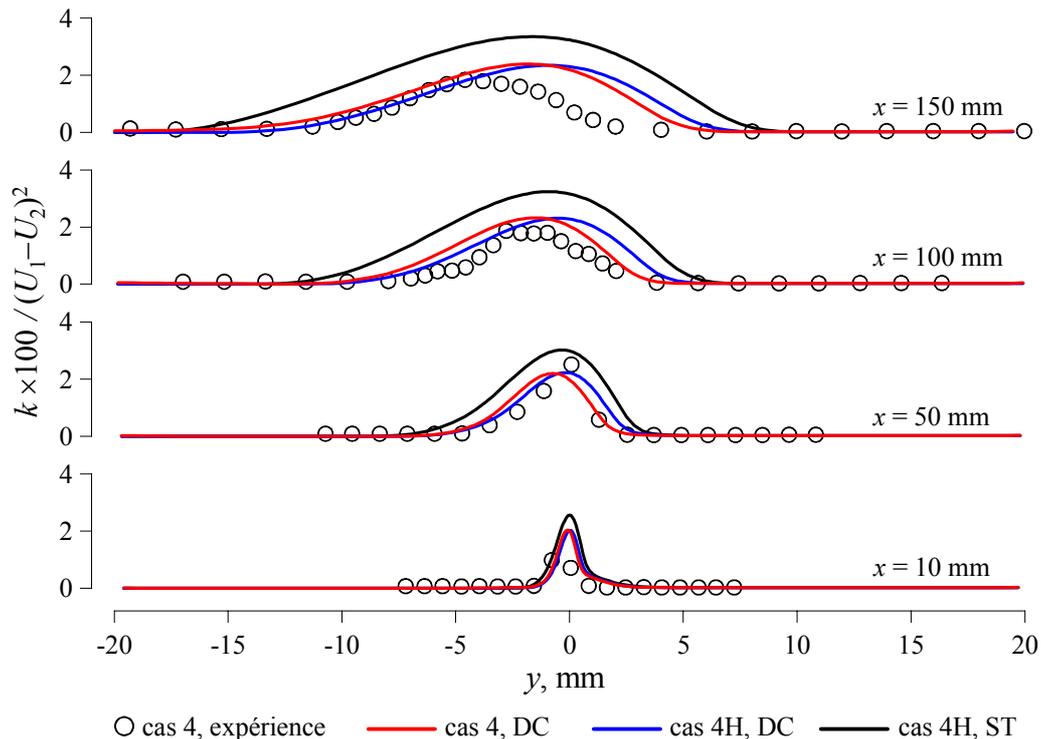


Figure 2.18. Profils transversaux d'énergie cinétique turbulente adimensionnée.

Pour compléter la vue d'ensemble, les figures 2.19 et 2.20 montrent les évolutions longitudinales de l'épaisseur $b_{0.8}$ et du maximum de l'énergie cinétique turbulente k_{\max} . Pour les cas 4 et 4H, les simulations avec DC surestiment l'épaisseur de la couche de mélange à partir de $x = 50$ mm. En même temps, les deux simulations donnent des résultats très proches jusqu'à $x = 150$ mm. Cela veut dire que le canal n'a pas d'effet important donc l'écart par rapport à l'expérience est dû essentiellement au modèle de turbulence. Nous voyons aussi qu'avec ST, l'épaisseur calculée a un écart au moins deux fois plus grand.

Les distributions de k_{\max} confirment que le canal n'a pas d'influence sur la simulation avec DC. Les solutions donnent un niveau stable de k_{\max} dans l'intervalle $50 \text{ mm} < x < 150 \text{ mm}$. Dans cet intervalle, les données expérimentales varient autour du niveau calculé mais Goebel et Dutton (1991) ont choisi les trois points entre $x = 100$ mm et $x = 150$ mm afin de caractériser l'état de la turbulence qu'ils ont défini comme l'état de similitude. Avec ST, le niveau de k_{\max} est environ 50 % plus grand et croît progressivement le long de la couche de mélange.

Nous pouvons remarquer que les distributions obtenues pour les cas 4 et 4H avec DC divergent à partir de $x = 150$ mm. Cette divergence est apparemment due à l'effet combiné du canal et des conditions imposées à la frontière de sortie.

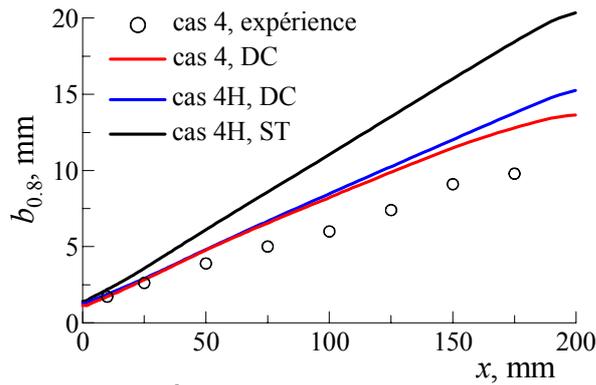


Figure 2.19. Évolution longitudinale de l'épaisseur de la couche de mélange.

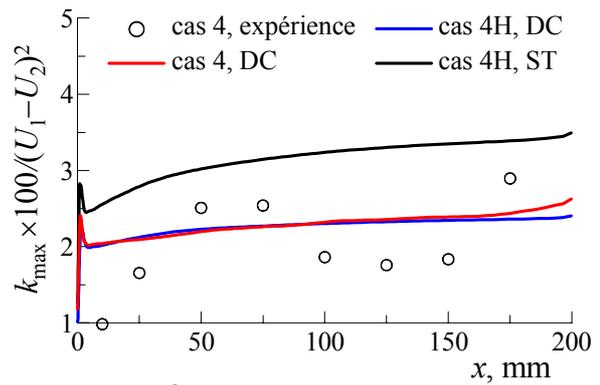


Figure 2.20. Évolution longitudinale de l'énergie cinétique turbulente maximale.

L'ensemble des résultats sur le taux d'épaississement $\delta_{0,8}$ en fonction du nombre de Mach convectif M_c est présenté sur la figure 2.21. Cette comparaison montre que les résultats issus de l'expérience et de la simulation sont très proches pour les cas 1 et 2. Les écarts par rapport à l'expérience sont autour de 5 %. Les corrections de compressibilité produisent un effet relativement faible à $M_c = 0.2$ et 0.46 .

Pour les cas 3, 4 et 5, les simulations avec les corrections de compressibilité surestiment $\delta_{0,8}$ de 22 %, de 39 % et de 33 % respectivement. Les deux modèles de Sarkar montrent les résultats pratiquement identiques. Si nous considérons aussi les cas 3H, 4H et 5H, nous voyons que l'effet du canal n'est pas important vis-à-vis de la différence entre l'expérience et la simulation. L'effet des corrections de compressibilité est fort car les simulations avec ST donnent des écarts 2.5-3 fois plus grands.

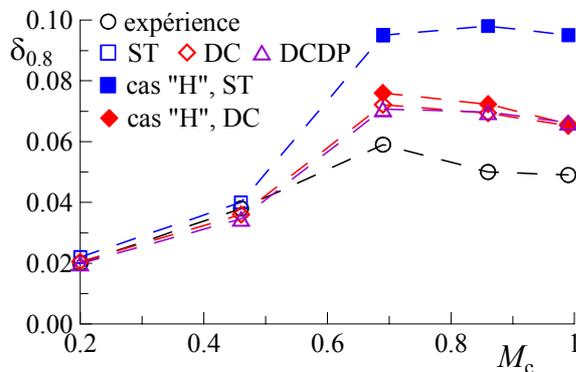


Figure 2.21. Taux d'épaississement de la couche de mélange en fonction de M_c .

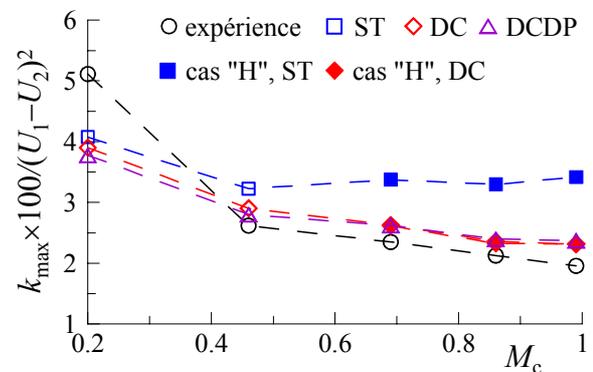


Figure 2.22. Énergie cinétique turbulente maximale en fonction de M_c .

La figure 2.22 montre les maximums de l'énergie cinétique turbulente k_{max} en fonction de M_c . Les données expérimentales sont corrigées afin d'y inclure la contribution de la composante fluctuante w' de vitesse. La correction est basée sur les observations expérimentales de Gruber et al. (1993) concernant les intensités de v' et de w' : l'effet de compressibilité réduit v' tandis que le niveau de w' reste stable ; leur rapport est proche de l'unité dans une couche de mélange non compressible. Les points représentant les simulations correspondent aux valeurs moyennes de k_{max} dans les intervalles x_k définis dans le tableau 2.3. D'après nos résultats, nous pouvons confirmer que les deux modèles de Sarkar donnent les mêmes résultats et que l'effet dû au canal est faible. Les résultats obtenus avec les corrections de compressibilité sont en bon accord avec l'expérience à l'exception du cas 1 pour lequel la

valeur expérimentale de k_{\max} est sensiblement élevée. Sans la correction de compressibilité, la simulation a produit une erreur importante à partir de $M_c = 0.46$.

Sur la figure 2.23, nous comparons les résultats sur $\delta_{0.8}$ donnés par trois codes de calcul : MSD avec ST et DC, MIXER avec ST et DC, FLUENT avec DC [Cottrell (1996)]. L'accord est très bon entre les différents codes et en plus entre les résultats RANS et les solutions de similitude. Avec DC, les trois codes ont donné pratiquement les mêmes résultats. Les solutions de similitude par MIXER sont particulièrement conformes aux résultats pour les cas 3H et 4H avec ST et DC.

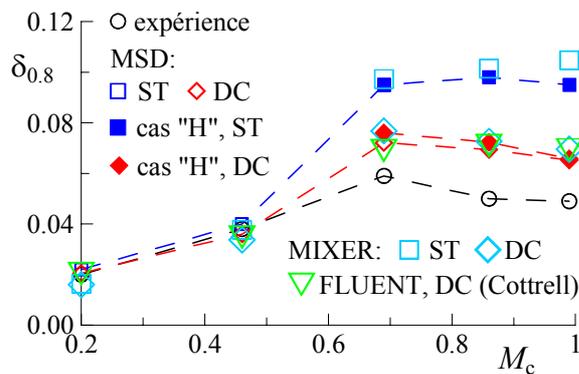


Figure 2.23. Taux d'épaissement en fonction de M_c par les différents codes.

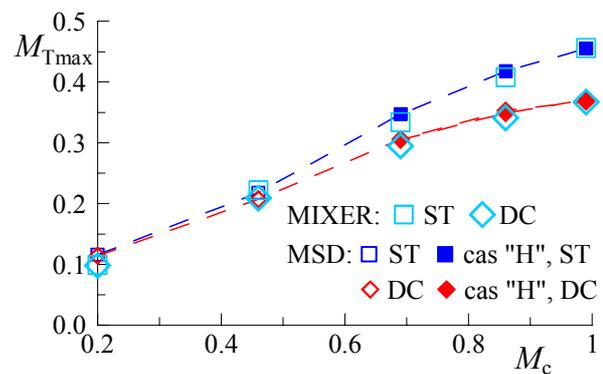


Figure 2.24. Nombre de Mach turbulent maximal en fonction de M_c .

L'évolution du nombre de Mach turbulent maximal $M_{T\max}$ en fonction de M_c est illustrée sur la figure 2.24. Cette figure montre également l'effet de la correction de compressibilité sur la tendance $M_{T\max}(M_c)$. La tendance donnée par ST est pratiquement linéaire : les données $M_{T\max}$ sont bornées par les droites $0.45M_c$ et $0.5M_c$. Avec DC, la correction de compressibilité est proportionnelle à M_T^2 donc la tendance devient non linéaire. D'après Sarkar et Lakshmanan (1991), $M_{T\max}(M_c)$ tend vers un niveau constant d'environ 0.48. La conformité des résultats MSD et MIXER prouve que les couches de mélange modélisées sont en état de similitude, malgré les perturbations induites par la plaque et par le canal.

Nous pouvons finalement conclure que la correction de compressibilité est importante pour la simulation de la couche de mélange compressible. Les modèles de compressibilité de Sarkar, introduits dans le modèle $k-\varepsilon$, améliorent considérablement sa capacité à réagir à l'augmentation du nombre de Mach convectif. Nous pouvons en principe atteindre un meilleur accord avec l'expérience de Goebel en utilisant un autre modèle de compressibilité, par exemple analogue au modèle (2.9) de Dash et al. (1992), mais plus loin, nous allons voir que la correction de Sarkar est bien adaptée au jet compressible. Entre les deux modèles considérés de Sarkar nous avons choisi DC pour la suite de notre étude. Nous allons l'appeler simplement la correction de Sarkar.

2.4. Validation du modèle k - ε avec les corrections de Pope et de Sarkar

Dans la présente section, nous testons le modèle k - ε avec la correction de Pope limité et avec la correction de Sarkar afin d'analyser leur effet intégral sur la solution. Le jet rond compressible est un bon candidat pour cette analyse. Nous allons considérer trois cas test issus des études expérimentales. Parmi ces cas test, deux cas correspondent à l'injection d'un gaz léger dans un co-courant d'air. Nous pouvons donc évaluer le nombre de Schmidt turbulent par l'analyse du champ de composition du jet.

2.4.1. Jet supersonique d'air dans l'atmosphère au repos

2.4.1.1. Présentation générale du cas test

Nous avons choisi le jet d'Eggers (1966) comme le premier cas test car il s'agit d'un bon exemple du jet rond compressible dans le milieu au repos. Les avantages de ce cas test sont les suivants :

- Le jet a un champ de température relativement homogène. Le jet a la même composition que le milieu dans lequel il est émis. Ainsi, seul le transfert de quantité de mouvement est important pour la simulation. Les problèmes de détermination des nombres de Prandtl turbulent et de Schmidt turbulent ne se posent pas.
- La pression à la sortie de l'injecteur est équilibrée avec la pression atmosphérique donc le processus de mélange n'est pas perturbé par des ondes de pression.
- Le jet n'est pas confiné. Son champ dynamique est étudié jusqu'à une distance très grande par rapport à son diamètre initial.
- Ce cas test est devenu classique pour la validation des modèles de turbulence. Beaucoup de résultats de simulation sur ce cas test sont disponibles dans la littérature.

Voici une liste non exhaustive des publications présentant les simulations du jet d'Eggers (1966) avec le modèle k - ε : Dash et al. (1992), Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994), Pao et Abdol-Hamid (1996), Thies et Tam (1996), Turpin et Troyes (2000).

Sur un site Internet de la NASA, Slater J. W.¹ a créé quelques pages consacrées à ce cas test. Il a publié les conditions et les données expérimentales, la géométrie de la tuyère d'injection ainsi qu'un fichier de maillage pour la validation de codes de calcul. Nous avons utilisé les fichiers disponibles sur ce site afin de comparer nos résultats avec les données expérimentales.

Pour ce cas test, la validation du code PAB3D avec le modèle k - ε et la correction de compressibilité de Sarkar a été publiée sur le site Internet d'Analytical Services & Materials, Inc.² Quelques résultats sur la sensibilité de la solution au maillage sont disponibles.

Une simulation du jet d'Eggers (1966), avec la modification du modèle k - ε selon Turpin et Troyes (2000), fait partie du dossier de validation du code MSD. Ce dossier a été établi par l'ONERA et fourni aux utilisateurs MSD. Nous avons pris les fichiers de données existant dans le dossier MSD pour effectuer nos calculs.

¹ <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/axinoz/axinoz.html>

² <http://www.asm-usa.com/software/PAB3D/validation/axinoz/axinoz01/axinoz01.html>

2.4.1.2. Conditions expérimentales

La configuration expérimentale du jet d'Eggers (1966) est schématisée en figure 2.24. Le jet est émis dans l'atmosphère au repos par une tuyère de Laval dont le diamètre de sortie est égal à 25.58 mm. Le diamètre du col de la tuyère vaut 17.96 mm. Le tronçon supersonique de la tuyère a une longueur de 39.7 mm.

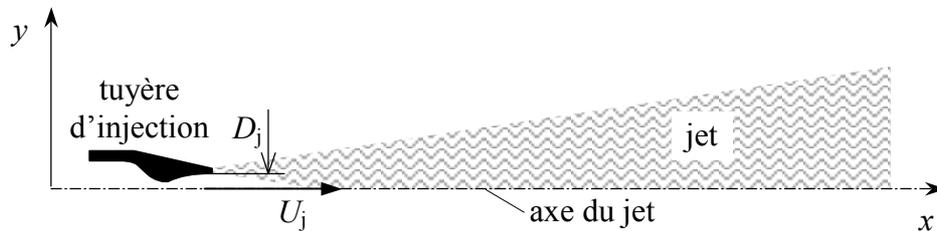


Figure 2.24. Schéma du jet d'air d'Eggers.

Les conditions d'injection sont les suivantes : nombre de Mach $M_j = 2.22$, vitesse $U_j = 538$ m/s, pression totale $P_{tj} = 1118.3$ kPa, température totale $T_{tj} = 292.7$ K, nombre de Reynolds $\rho_j U_j D_j / \mu_j = 3.1 \cdot 10^6$. Les conditions atmosphériques sont caractérisées par une pression de 101.4 kPa et une température de 292.7 K. Pour ce jet, nous avons évalué le nombre de Mach convectif $M_c = 0.91$.

Les mesures du champ dynamique du jet ont été effectuées par un tube de Pitot. Les données sur la pression Pitot ont été ensuite converties en vitesse *via* les relations théoriques classiques en supposant que l'air est un gaz parfait et que le champ de pression statique est uniforme [Eggers (1966)].

2.4.1.3. Conditions de simulation

Nous avons choisi l'approche bidimensionnelle axisymétrique pour la simulation suivant la configuration du jet. La zone de calcul est constituée de trois domaines : intérieur de l'injecteur (D1), zone autour de l'injecteur (D2), zone de mélange (D3). L'origine de la coordonnée axiale x correspond au plan de sortie de l'injecteur. La disposition des domaines et de leurs frontières est schématisée sur la figure 2.25.

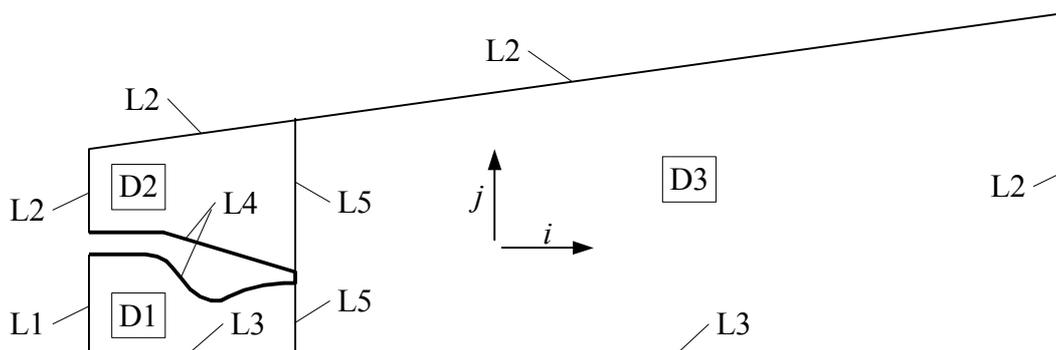


Figure 2.25. Schéma de la zone de calcul.

Les dimensions des domaines sont les suivantes :

- D1 : $L = 117$ mm, $y_{\max} = 12.8\text{-}15.9$ mm ;
- D2 : $L = 117$ mm, $y_{\min} = 14.3\text{-}30.5$ mm, $y_{\max} = 127\text{-}155$ mm ;
- D3 : $L = 1865$ mm, $y_{\max} = 155\text{-}610$ mm.

La liste suivante spécifie les conditions aux limites :

L1 : Entrée de l'écoulement du jet

- Type de frontière : entrée pression
- Pression totale : $P_{tj} = 1118.3 \text{ kPa}$
- Température totale : $T_{tj} = 292.7 \text{ K}$
- Taux de turbulence : $\tau_{Tj} = 10 \%$
- Échelle de turbulence : $l_j = 2 \text{ mm}$

Remarque : Les conditions de turbulence ont été choisies correspondantes à une turbulence développée dans le canal de la tuyère. Sans la turbulence initiale, la simulation donne une longueur surestimée du cœur potentiel du jet.

L2 : Frontières libres

- Type de frontière : sortie pression
- Pression statique : 101.4 kPa

L3 : Axes de la tuyère et du jet

- Type de frontière : axe de symétrie

L4 : Parois de l'injecteur

- Type de frontière : paroi
- Flux de chaleur : 0

L5 : Frontières multidomaines

- Type de frontière : raccordement exact

Le maillage est issu du dossier de validation de MSD. La zone la plus raffinée du maillage à la proximité de la lèvre de la tuyère est présentée sur la figure 2.26. Le tableau 2.9 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions (N_i , N_j) et les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}$, $\Delta_{j\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}$, $\Delta_{j\max}$).

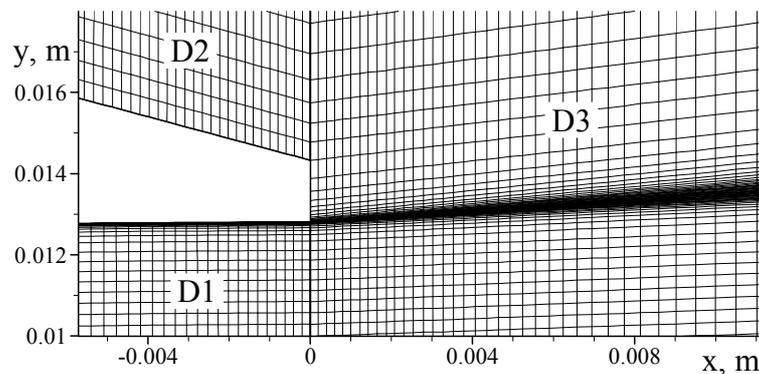


Figure 2.26. Maillage à la proximité de la lèvre de la tuyère.

Tableau 2.9. Caractéristiques du maillage

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
D1	187	58	10846	0.2	3.39	$2.4 \cdot 10^{-4}$	0.4
D2	187	25	4675	0.2	1.8	0.45	25.7
D3	148	106	15688	0.2	82.9	$2.4 \cdot 10^{-4}$	31.7

L'air a été considéré comme un gaz monoespèce, dont les propriétés sont établies à partir des propriétés de ses constituants pour la composition standard.

Concernant le modèle de turbulence, nous avons utilisé trois approches qui sont désignées comme :

ST – modèle $k-\varepsilon$ standard sans les corrections

DC – avec la correction de Sarkar (dissipation compressible)

DCPL – avec la correction de Sarkar et avec la correction de Pope limitée

Pour la correction de Pope, le limiteur $\chi_{lim} = 0.143$ a été pris car il a montré une bonne performance générale dans le cas du jet de Pajé considéré dans la section 2.2.2.

2.4.1.4. Résultats de simulation

Nous allons d'abord valider notre choix concernant les conditions initiales de turbulence imposées à la frontière d'entrée L1. La figure 2.27 montre une comparaison de trois profils adimensionnés de vitesse le long de l'axe du jet : le profil expérimental et deux profils calculés, en utilisant DCPL, avec et sans la turbulence initiale. Le profil calculé sans la turbulence initiale a un cœur potentiel plus long et une rupture de pente plus raide que dans l'expérience. Le profil obtenu avec la turbulence initiale suit plus étroitement le profil expérimental.

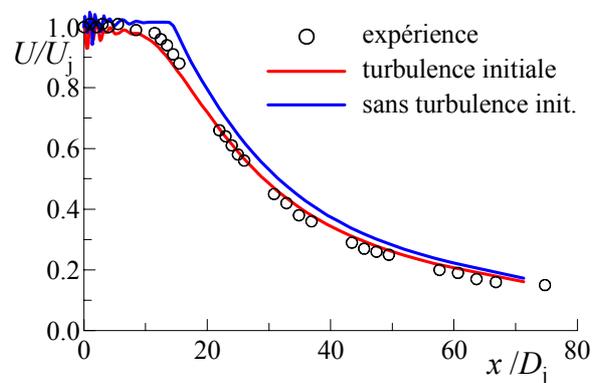


Figure 2.27. Profils de vitesse le long de l'axe du jet pour les différentes conditions initiales de turbulence dans la tuyère. Approche DCPL.

Pour ce jet, une surestimation de la longueur du cœur potentiel a été également observée dans les publications suivantes : Dash et al. (1992), Lakshmanan et Abdol-Hamid (1994), Pao et Abdol-Hamid (1996), Turpin et Troyes (2000). Pao et Abdol-Hamid (1996) ont remarqué que le cœur potentiel est plus court dans l'expérience à cause d'un profil de vitesse non uniforme en amont et de la turbulence initiale mais ils n'ont pas étudié cet effet.

Pour les trois approches examinées, les profils radiaux de vitesse sont tracés sur la figure 2.28 pour la section $x/D_j = 15.4$ ($x = 395$ mm) et sur la figure 2.29 pour $x/D_j = 63.6$ ($x = 1628$ mm). La première section se trouve juste après la fin du cœur potentiel alors que la deuxième section représente le champ dynamique lointain. Avec ST, la simulation surestime fortement le taux de mélange ce qui s'est traduit par les profils de vitesse trop larges. Avec DC, une dissipation plus intense de l'énergie cinétique turbulente réduit considérablement le taux de mélange mais cette approche n'est pas suffisante. DCPL donne le meilleur accord avec l'expérience.

Les mêmes observations peuvent être faites concernant les profils de vitesse le long de l'axe du jet présentés sur la figure 2.30 et concernant les distributions de demi-rayon du jet illustrées sur la figure 2.31. Nous pouvons aussi conclure que la simulation avec ST a fortement sous-estimé la longueur du cœur potentiel. Nous avons vérifié que la turbulence initiale n'est pas responsable de ce résultat. Sans la turbulence initiale, la solution n'est pas sensiblement améliorée. Avec DCPL, la simulation reproduit correctement le champ

dynamique du jet dans son intégralité. L'effet de la correction de Pope limitée est marqué après le cœur potentiel du jet.

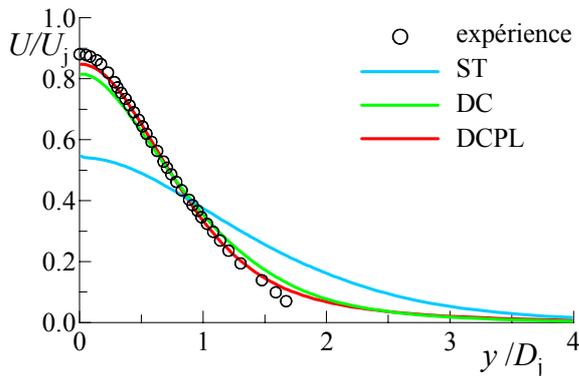


Figure 2.28. Profils radiaux de vitesse à $x/D_j = 15.4$.

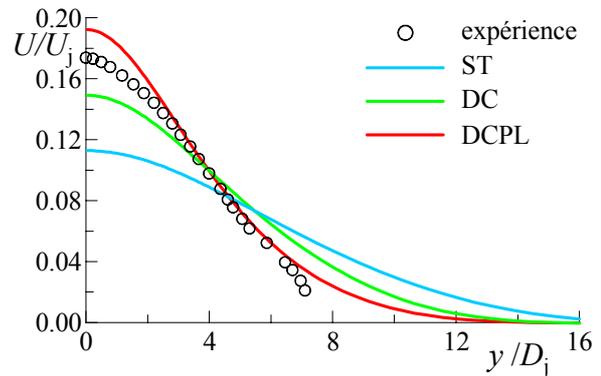


Figure 2.29. Profils radiaux de vitesse à $x/D_j = 63.6$.

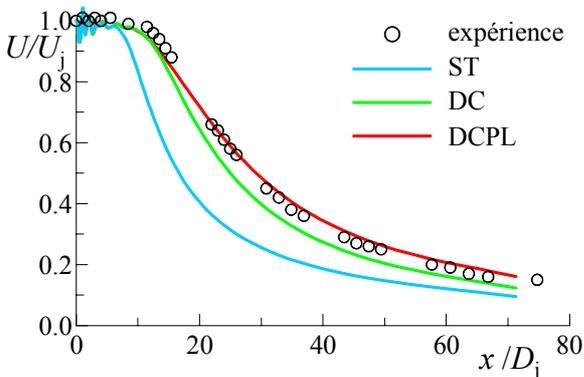


Figure 2.30. Profils de vitesse le long de l'axe du jet.

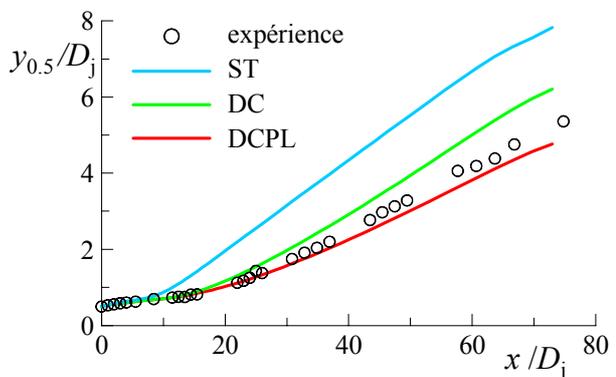


Figure 2.31. Distributions longitudinales du demi-rayon du jet.

Afin d'examiner l'action de la correction de Sarkar, nous avons comparé les distributions longitudinales du nombre de Mach turbulent maximal $M_{T\max}$ sur la figure 2.32. Le long du cœur potentiel, $M_{T\max}$ reste relativement stable et proche du niveau obtenu dans la couche de mélange. Rappelons que nos simulations ont donné $M_{T\max} = 0.41\text{-}0.46$ avec ST et $M_{T\max} = 0.34\text{-}0.37$ avec DC pour la gamme de nombre de Mach convectif $M_c = 0.86\text{-}0.99$ (voir la section 2.3.4). Il s'ensuit que la couche cisailée autour du cœur potentiel ressemble à une couche de mélange plane. En aval du cœur potentiel, $M_{T\max}$ décroît ce qui est conforme à l'évolution de la vitesse sur l'axe. Il est plus remarquable que la courbe « ST » croise les deux autres courbes. L'intensité turbulente devient moins importante pour cette solution à partir de $x/D_j \approx 20$. Pour les solutions DC et DCPL, le niveau supérieur de l'énergie cinétique turbulente s'explique par le taux de cisaillement plus élevé (profils radiaux de vitesse plus raides).

L'action de la correction de Pope limitée est illustrée sur la figure 2.33 où nous avons tracé les profils radiaux du coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé pour trois sections $x/D_j = 8.45, 15.4$ et 63.6 . La coordonnée radiale est normalisée par le demi-rayon dynamique $y_{0.5}$ du jet. La première section se trouve au milieu du cœur potentiel. Là, le coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé passe par plusieurs extremums ce qui donne un faible effet intégral. Après la fin du cœur potentiel, le profil prend finalement la forme que nous avons déjà observée pour le jet autosemblable dans la section 2.2.1.

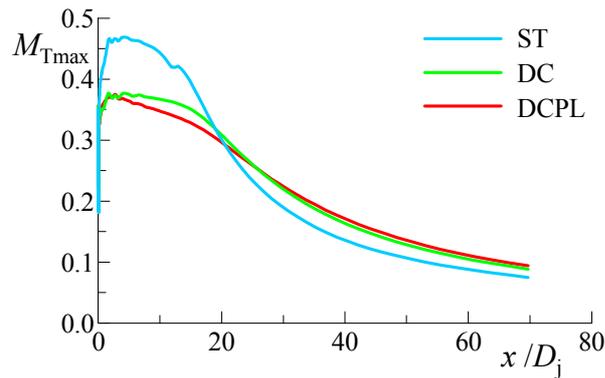


Figure 2.32. Distributions longitudinales du nombre de Mach turbulent maximal.

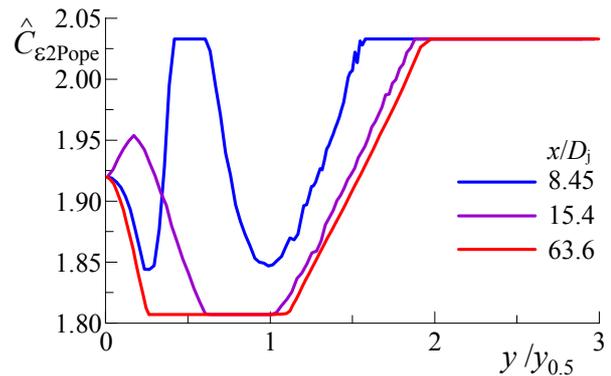


Figure 2.33. Variations radiales du coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé. Approche DCPL.

Remarque : Nous avons analysé le comportement de la correction de Wilcox (2.16) en post-traitant la solution obtenue avec DCPL. Nous avons trouvé que le coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé est la plupart du temps à sa limite inférieure donc, pour ce cas test, la correction de Wilcox est pratiquement équivalente à une simple modification du coefficient $C_{\epsilon 2}$.

Ce cas test confirme l'importance des deux corrections pour la simulation du jet rond compressible. Nous avons également mis en évidence le rôle considérable des conditions initiales de turbulence et analysé l'action des corrections de Sarkar et de Pope dans le jet.

2.4.2. Jets compressibles co-axiaux hydrogène-air dans l'atmosphère au repos

2.4.2.1. Présentation générale des cas test

Les cas test étudiés dans cette section correspondent aux expériences d'Eggers (1971) avec un jet rond transsonique d'hydrogène (H_2) injecté dans un jet rond supersonique d'air le long de son axe. Eggers a rapporté ses résultats expérimentaux pour deux vitesses du jet d'air définies par les nombres de Mach 1.32 et 2.5. Les caractéristiques principales des cas test sont les suivantes :

- Le jet central de H_2 est entièrement inclus dans le cœur potentiel du jet d'air. Le champ dynamique a deux zones cisailées distinctes : le jet de H_2 et la couche de mélange autour du jet d'air. Le jet de H_2 peut être vu comme s'il était dans un co-courant libre.
- Le champ de température est relativement homogène à travers l'écoulement donc le transfert de chaleur n'est pas important vis-à-vis du transfert de quantité de mouvement et du transfert de masse des espèces. Seul le nombre de Schmidt turbulent doit être imposé.
- La pression statique est équilibrée entre les deux courants et l'atmosphère donc le processus de mélange n'est pas perturbé par des ondes de pression.
- L'écoulement n'est pas confiné. Le champ dynamique et le champ de composition ont été étudiés jusqu'à une distance très grande par rapport au diamètre initial du jet de H_2 .

À notre connaissance, ces cas test n'ont pas été largement exploités pour valider les modèles numériques. Pour la zone du jet de H_2 , des simulations ont été faites par Eggers (1971) afin de valider trois modèles algébriques de viscosité turbulente. Dans ces simulations, le nombre de Schmidt turbulent Sc_T était pris entre 0.8 et 1.

Eklund et al. (1990) ont simulé le jet de H_2 dans le co-courant, dont le nombre de Mach était égal à 2.5. Les simulations ont été effectuées avec deux modèles algébriques de viscosité turbulente et avec $Sc_T = 0.9$ et 1. Les conditions de symétrie ont été imposées à la frontière externe du co-courant. Le domaine de simulation a été raccourci à 22.5 diamètres du jet de H_2 .

2.4.2.2. Conditions expérimentales

Le dispositif expérimental d'Eggers (1971) est schématisé sur la figure 2.34. Le jet central de H_2 est émis par un injecteur sous la forme d'un tube légèrement convergent. La longueur du tube est d'environ 100 mm. Le diamètre du tube varie de 12.1 mm en entrée à 11.6 mm en sortie (ce dernier diamètre est désigné par D_j sur le schéma). Le tube est précédé d'un canal plus large d'un diamètre de 25.4 mm.

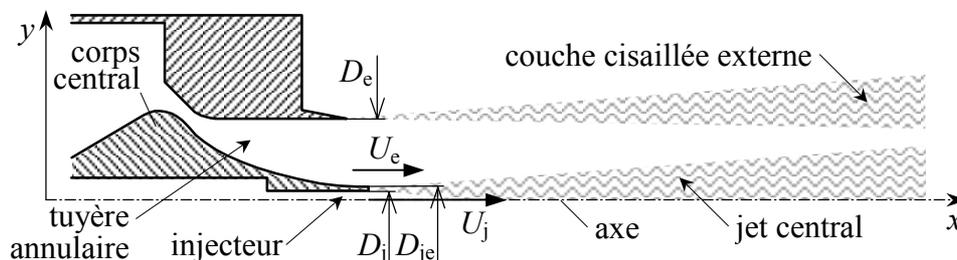


Figure 2.34. Schéma du dispositif expérimental d'Eggers.

L'injecteur est intégré dans le corps central d'une tuyère annulaire supersonique. Le diamètre du corps central à la sortie de l'injecteur D_{je} est de 12.7 mm. Le diamètre de la sortie de la tuyère D_e est de 152.4 mm. La tuyère, conçue pour le nombre de Mach 1.32, a le plan de sortie aligné à la sortie de l'injecteur. La tuyère pour le nombre de Mach 2.5 a le plan de sortie

à 25.4 mm en amont de la sortie de l'injecteur. Le conduit subsonique en amont de la tuyère a un diamètre de 360 mm. Eggers a publié les profils tabulés des deux tuyères.

Le tableau 2.10 récapitule les conditions expérimentales aux sorties de l'injecteur et de la tuyère. À noter que seule la température totale a été mesurée directement. Les nombres de Mach et les vitesses ont été évalués par Eggers (1971). Les indices et les exposants des valeurs de T_{tj} et de T_{te} donnent les déviations maximales par rapport aux valeurs indiquées. Nous avons calculé les nombres de Reynolds et de Mach convectif. Les nombres de Reynolds Re_j et Re_e ont été déterminés pour les diamètres D_j et D_e respectivement. Le nombre de Mach convectif M_{cj} correspond à la couche cisailée entre les courants de H_2 et d'air, tandis que M_{ce} correspond à la couche cisailée externe du jet d'air.

Tableau 2.10. Conditions de sortie du jet de H_2 et du jet d'air

Cas	M_j	U_j , m/s	T_{tj} , K	Re_j	M_{cj}	M_e	U_e , m/s	T_{te} , K	Re_e	M_{ce}
1	0.886	1074	295_{-7}^{+11}	$1.94 \cdot 10^5$	0.42	1.32	394	298_{-5}^{+5}	$6.68 \cdot 10^6$	0.61
2	0.907	1107	300_{-6}^{+2}	$1.96 \cdot 10^5$	0.32	2.5	603	324_{-16}	$2.47 \cdot 10^7$	1.01

Les mesures du champ dynamique du jet ont été effectuées par un tube de Pitot. Les données sur la pression Pitot ont été ensuite converties en nombre de Mach *via* les relations théoriques classiques en supposant que H_2 et l'air sont des gaz parfaits et que le champ de pression statique est uniforme. La vitesse a été déterminée en utilisant la fraction mesurée de H_2 . Les détails de la réduction de données ont été décrits par Eggers (1971).

Les mesures de la fraction volumique de H_2 ont été réalisées avec deux types de sondes. Eggers (1971) a trouvé que les résultats des mesures dépendaient des sondes. Afin de valider les données, il a essayé d'établir un bilan de masse de H_2 à partir d'une intégration approchée du flux massique de H_2 suivant les sections de mesure. Pour le cas 1, le bilan de masse est relativement correct avec un écart moyen de 4 %, l'erreur maximale de -16% a été obtenue à $x/D_j = 5.51$. Pour le cas 2, l'analyse a donné un déficit de débit d'environ 9 % sauf dans les trois sections à $x/D_j = 4.31, 8.75, \text{ et } 15.36$ où un excès de débit d'environ 27 % a été trouvé. Ces faits ne permettent pas de considérer les données sur la vitesse et sur la fraction de H_2 comme absolument fiables.

Les pressions génératrices des écoulements de H_2 et d'air ont été mesurées mais n'ont pas été rapportées par Eggers (1971). Les conditions de turbulence dans les écoulements sont inconnues.

2.4.2.3. Conditions de simulation

Nous avons choisi l'approche bidimensionnelle axisymétrique pour la simulation suivant la configuration de l'écoulement. La zone de calcul est composée de huit domaines : tube de l'injecteur (D1), entrée de la tuyère (D2), intérieur de la tuyère (D3), extérieur de la tuyère (D4), zone de mélange (D5-D8). L'origine de la coordonnée axiale x correspond au plan de sortie de l'injecteur. La disposition des domaines et de leurs frontières est schématisée sur la figure 2.35.

Les dimensions des domaines sont les suivants :

- D1 : $L = 100$ mm, $y_{\max} = 5.8\text{-}6.05$ mm ;
- D2, cas 1 : $L = 104$ mm, $y_{\min} = 37.6\text{-}38.1$ mm, $y_{\max} = 180$ mm ;
- D2, cas 2 : $L = 104$ mm, $y_{\min} = 38.1\text{-}88.1$ mm, $y_{\max} = 180$ mm ;
- D3, cas 1 : $L = 157.5$ mm, $y_{\min} = 6.35\text{-}37.6$ mm, $y_{\max} = 76.2\text{-}116.3$ mm ;
- D3, cas 2 : $L = 240$ mm, $y_{\min} = 6.35\text{-}88.1$ mm, $y_{\max} = 76.2\text{-}116.3$ mm ;
- D4, cas 1 : $L = 50$ mm, $y_{\min} = 76.2\text{-}85$ mm, $y_{\max} = 425$ mm ;
- D4, cas 2 : $L = 75.4$ mm, $y_{\min} = 76.2\text{-}85$ mm, $y_{\max} = 425$ mm ;

– D5-D8 : $L = 1000 \text{ mm}$, $y_{\max} = 425 \text{ mm}$;

Remarque : Nous avons trouvé que les profils tabulés des tuyères ont une dérivée dy/dx fluctuante. Les fluctuations de dy/dx dépassent la limite d'erreur due à la troncature des coordonnées tabulées. Nous avons lissé les profils tabulés afin d'avoir une variation continue de dy/dx le long des profils.

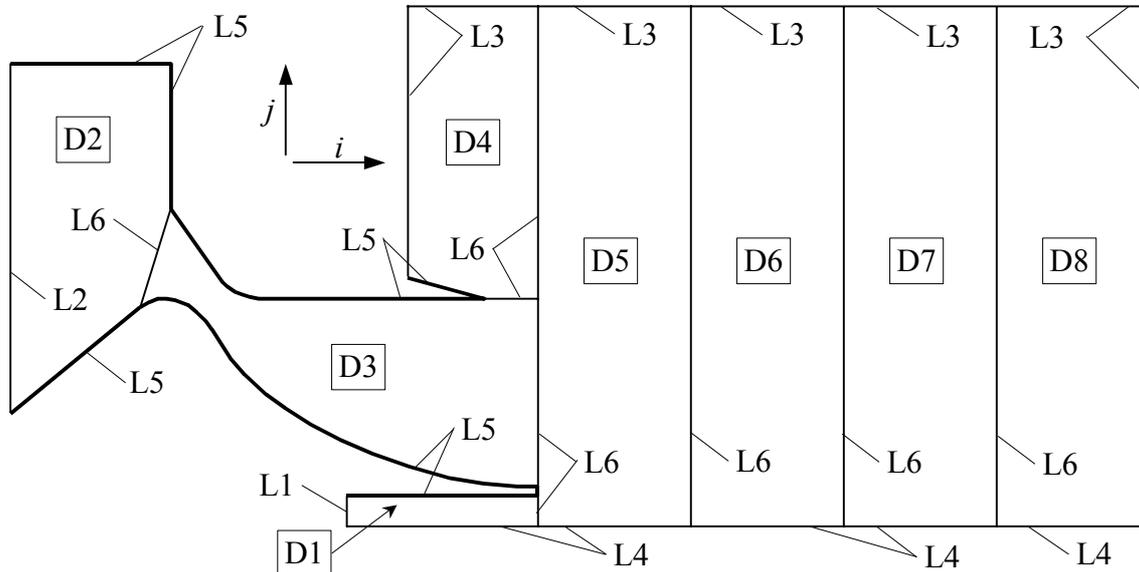


Figure 2.35. Schéma de la zone de calcul.

La liste suivante spécifie les conditions aux limites :

L1 : Entrée de H_2

Les conditions imposées à cette frontière sont données dans le tableau 2.11. La pression totale P_{tj} est ajustée afin d'obtenir la pression Pitot expérimentale à la sortie de l'injecteur. Cette pression Pitot est calculée par l'inversion des données sur le nombre de Mach dans la première section de mesure. Nos essais montrent que le jet de H_2 n'est pas sensible aux conditions génératrices de turbulence.

Tableau 2.11. Conditions imposées à L1

Cas	P_{tj} , kPa	T_{tj} , K	τ_{Tj} , %	l_j , mm
1	168.4	296.0	10	1
2	172.4	299.9	10	1

L2 : Entrée d'air

Les conditions imposées à cette frontière sont récapitulées dans le tableau 2.12. La pression totale P_{te} est ajustée de la même façon que P_{tj} pour L1. Nous avons trouvé que le profil de vitesse du jet d'air et le taux de mélange sont sensibles aux conditions génératrices de turbulence surtout si l'échelle l_e est grande (5-10 mm). Les conditions choisies donnent le meilleur accord avec les profils expérimentaux.

L3 : Frontières libres

- Type de frontière : sortie pression
- Pression statique : 101.3 kPa

L4 : Axes de l'injecteur et du jet

- Type de frontière : axe de symétrie

Tableau 2.12. Conditions imposées à L2

Cas	P_{te} , kPa	T_{te} , K	τ_{Te} , %	l_e , mm
1	291	298.4	10	1
2	1759	313.6	10	1

L5 : Parois de l'injecteur et de la tuyère

- Type de frontière : paroi
- Flux de chaleur : 0

L6 : Frontières multidomaines

- Type de frontière : raccordement exact

Le maillage est resserré dans les zones de la couche limite le long des parois et dans les zones de mélange. Les zones du maillage le plus fin, situées à la proximité des lèvres de l'injecteur et de la tuyère, sont illustrées sur la figure 2.36. Le tableau 2.13 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions (N_i , N_j) et les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}$, $\Delta_{j\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}$, $\Delta_{j\max}$) pour tous les domaines. Le maillage des domaines D2, D3 et D4 est adapté aux cas 1 et 2.

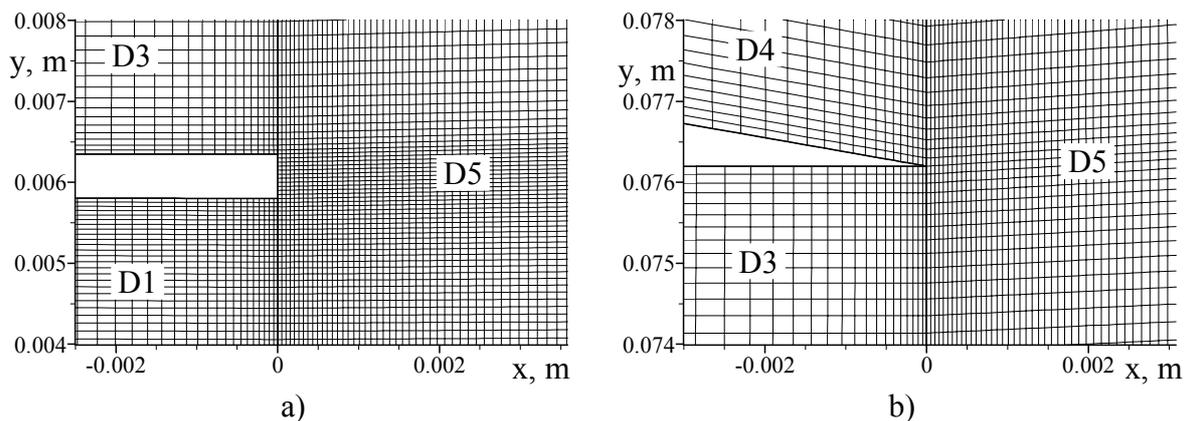


Figure 2.36. Maillage dans les zones des lèvres de l'injecteur (a) et de la tuyère (b).

Tableau 2.13. Caractéristiques du maillage

Cas	Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
1, 2	D1	83	50	4150	0.05	2.0	0.05	0.24
1	D2	60	250	15000	0.10	7.7	0.05	1.31
2	D2	60	250	15000	0.09	7.7	0.05	1.31
1	D3	120	180	21600	0.05	2.7	0.03	0.67
2	D3	197	180	35460	0.05	3.1	0.02	0.55
1	D4	40	70	2800	0.05	5.9	0.10	27.1
2	D4	89	70	6230	0.05	5.8	0.10	27.1
1, 2	D5	82	311	25502	0.05	0.28	0.05	24.8
1, 2	D6	82	311	25502	0.28	1.54	0.06	25.4
1, 2	D7	82	311	25502	1.55	5.0	0.09	25.6
1, 2	D8	82	311	25502	5.0	12.6	0.29	21.3

Le découpage de la zone de mélange en plusieurs domaines est adapté au calcul en parallèle sur six processeurs.

Le mélange $\text{H}_2\text{-air}$ est non réactif. L'air est considéré comme un gaz monoespèce, dont les propriétés sont établies à partir des propriétés de ses constituants pour la composition standard.

Pour le modèle de turbulence, nous avons utilisé les approches ST, DC et DCPL ($\chi_{\text{lim}} = 0.143$).

2.4.2.4. Résultats de simulation

Afin de comparer les résultats expérimentaux et numériques, nous allons présenter les données sur la pression Pitot et sur la fraction massique de H_2 . Les données expérimentales sur la pression Pitot n'ont pas été publiées par Eggers (1971), nous les avons obtenues par l'inversion des données tabulées sur le nombre de Mach en respectant la méthode de réduction décrite par Eggers. Les données sur le nombre de Mach et sur la vitesse sont moins précises car elles contiennent une erreur due à l'hypothèse que la pression statique est constante dans la zone de mélange. Sur les figures affichées ci-dessous, la pression Pitot est adimensionnée par la pression totale P_{te} spécifiée dans le tableau 2.12. Les profils expérimentaux sont pliés en deux le long de l'axe afin de démontrer leur asymétrie éventuelle.

La figure 2.37 montre les profils radiaux de pression Pitot dans le plan de sortie de l'injecteur pour les deux cas. Les simulations ont été effectuées avec DCPL. Les profils simulés suivent bien les points expérimentaux sauf une zone au milieu du courant d'air pour le cas 2 où le profil mesuré est perturbé. Cette perturbation a probablement pour cause une imperfection géométrique de la tuyère.

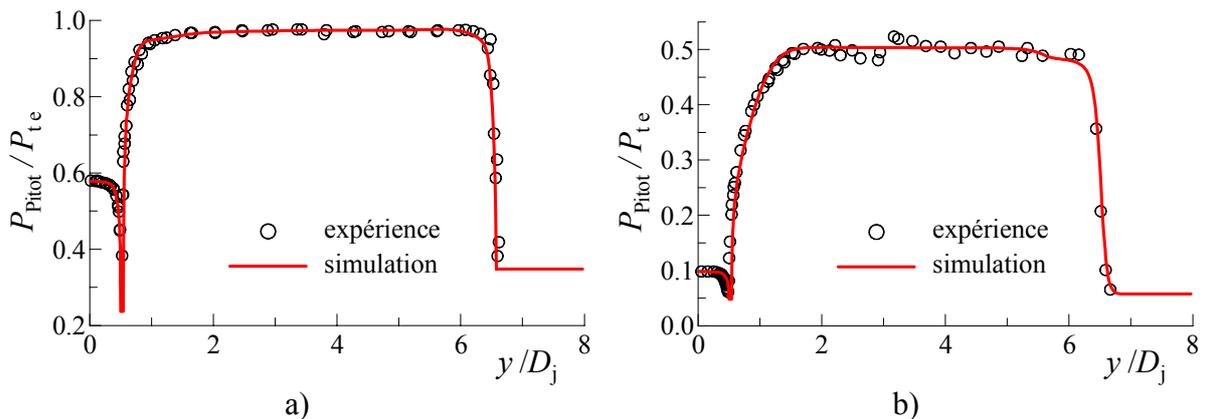
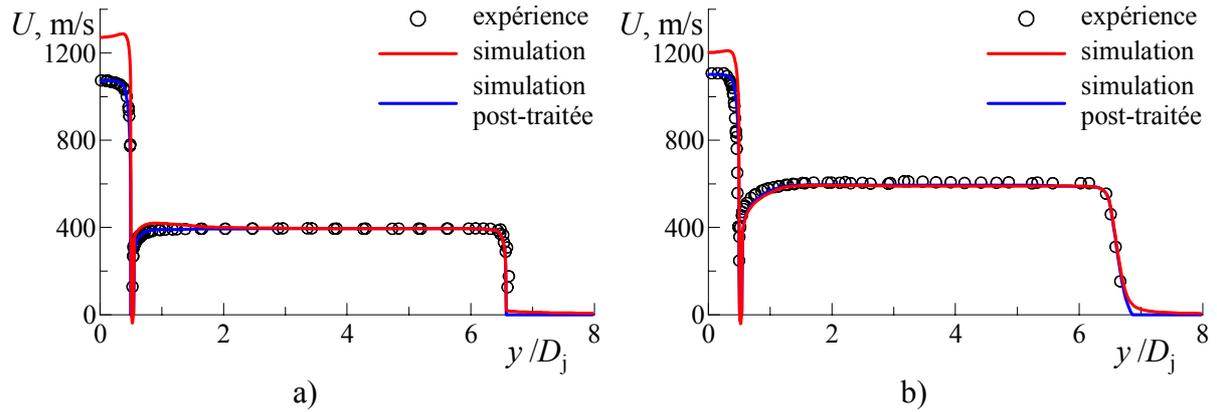


Figure 2.37. DCPL. Profils radiaux de pression Pitot à $x = 0$ pour les cas 1 (a) et 2 (b).

Les profils de vitesse correspondant à la même section sont tracés sur la figure 2.38 afin de mettre en évidence les erreurs qu'on obtient en supposant que la pression statique est constante. Les données d'Eggers (1971), dites « expérimentales », sont comparées avec les données issues directement de la simulation (courbes rouges) et avec les résultats numériques post-traités selon la procédure de réduction (courbes bleues). Les résultats numériques post-traités sont en bon accord avec les données d'Eggers, en revanche, les résultats numériques bruts sont différents surtout dans le jet de H_2 . Le tableau 2.14 compare les conditions évaluées de l'expérience et simulées sur l'axe à $x = 0$. Le rapport entre la pression statique d'injection P_j et la pression ambiante P_{amb} indique une détente. Le nombre de Mach calculé $M_{j\text{simul}}$ correspond aux conditions soniques. La vitesse calculée est plus grande d'environ 200 m/s pour le cas 1 et d'environ 100 m/s pour le cas 2. Cela explique en particulier pourquoi Eggers a eu un déficit de débit de H_2 de 10 % à cette section pour le cas 2.

Figure 2.38. DCPL. Profils radiaux de vitesse à $x = 0$ pour les cas 1 (a) et 2 (b).Tableau 2.14. Conditions sur l'axe à $x = 0$

Cas	P_j/P_{amb}	$M_{j \text{ exper}}$	$M_{j \text{ simul}}$	$U_{j \text{ exper, m/s}}$	$U_{j \text{ simul, m/s}}$
1	0.799	0.886	1.076	1074	1269
2	0.893	0.907	1.002	1107	1205

Nous présentons premièrement une analyse détaillée concernant le cas 2 pour lequel la simulation s'accorde mieux avec l'expérience. Les résultats pour le cas 1 sont considérés par la suite.

Les résultats de simulation avec ST sont comparés aux résultats expérimentaux sur la figure 2.39. Les profils de fraction massique Y_{H_2} et de pression Pitot le long de l'axe sont tracés pour trois nombres de Schmidt turbulent $Sc_T = 0.6, 0.7$ et 0.8 . La diminution de Sc_T mène à l'intensification du mélange et, par conséquent, à l'accélération de la décroissance de Y_{H_2} et de la croissance de P_{Pitot} . Néanmoins en adaptant Sc_T , nous ne pouvons pas faire coïncider la solution avec tous les points expérimentaux : $Sc_T = 0.8$ donne un bon accord jusqu'à $x/D_j = 10$; $Sc_T = 0.7$ est le mieux adapté entre $x/D_j = 10$ et 20 ; plus loin, il faut préférer $Sc_T = 0.6$. Eggers (1971) a eu le même problème avec des solutions données par un modèle algébrique de viscosité turbulente. Dans la suite de l'analyse, nous adoptons $Sc_T = 0.6$ pour l'approche ST.

Une comparaison analogue est présentée sur la figure 2.40 pour les résultats obtenus avec DC. Cette fois-ci, les trois valeurs adaptées de Sc_T sont $0.55, 0.6$ et 0.65 . Les solutions correspondant à $Sc_T = 0.55$ et 0.65 sont proches de celles calculées avec ST en prenant $Sc_T = 0.7$ et 0.8 . Les tendances sont les mêmes mais la correction de Sarkar diminue l'intensité turbulente donc il faut abaisser davantage Sc_T afin d'avoir le même taux de mélange. Avec DC, $Sc_T = 0.6$ représente le choix optimal pour l'ensemble des résultats.

Concernant l'approche DCPL, les résultats sont illustrés sur la figure 2.41 pour $Sc_T = 0.5, 0.55$ et 0.6 . Avec la correction de Pope limitée, il est nécessaire de réduire Sc_T encore plus pour ajuster les profils calculés de Y_{H_2} . En même temps, le caractère des solutions change : la courbe de Y_{H_2} , correspondant à $Sc_T = 0.55$, suit correctement tous les points expérimentaux. Si la correction de Sarkar décélère simplement le mélange, la correction de Pope le fait à une distance modérée et ensuite elle contribue à l'intensification du mélange. La correction de Pope ne change pas l'allure des courbes de P_{Pitot} , par exemple, les profils « DC » et « DCPL » sont pratiquement identiques pour $Sc_T = 0.6$. Dans la suite de l'analyse, nous préférons $Sc_T = 0.55$ pour l'approche DCLP.

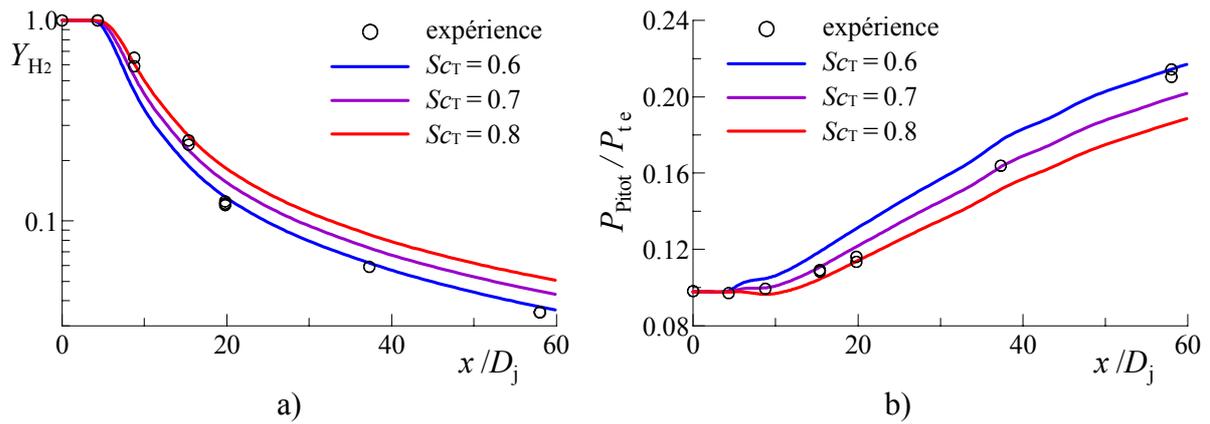


Figure 2.39. Cas 2, ST. Profils de fraction massique de H_2 (a) et de pression Pitot (b) le long de l'axe.

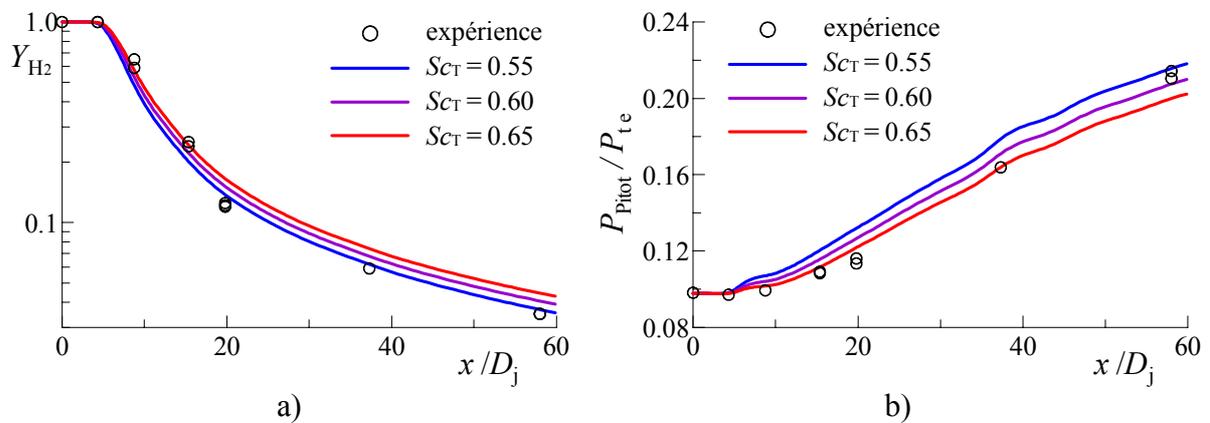


Figure 2.40. Cas 2, DC. Profils de fraction massique de H_2 (a) et de pression Pitot (b) le long de l'axe.

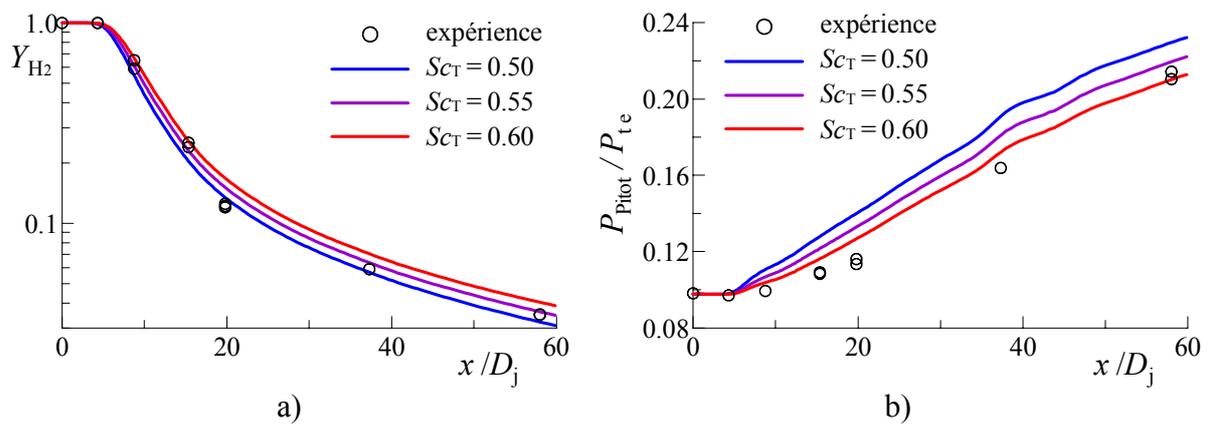


Figure 2.41. Cas 2, DCPL. Profils de fraction massique de H_2 (a) et de pression Pitot (b) le long de l'axe.

Afin de comparer les trois approches, les profils radiaux de Y_{H_2} sont mis ensemble sur la figure 2.42. Les profils sont tracés pour les sections $x/D_j = 15.36$ et 58 . Nous voyons que la solution correspondant à DCPL suit le mieux les points expérimentaux. Nous pouvons remarquer qu'à $x/D_j = 15.36$, tous les points expérimentaux sont au-dessus du profil « DCPL ». C'est dans cette section qu'Eggers (1971) a obtenu un débit intégral de H_2 supérieur au débit injecté de 27 %. En revanche à $x/D_j = 58$, le bilan massique de H_2 est

correct (seulement 6 % de déficit selon Eggers). Notre considération reste quand même incertaine tant que nous ne connaissons pas le débit exact de H_2 .

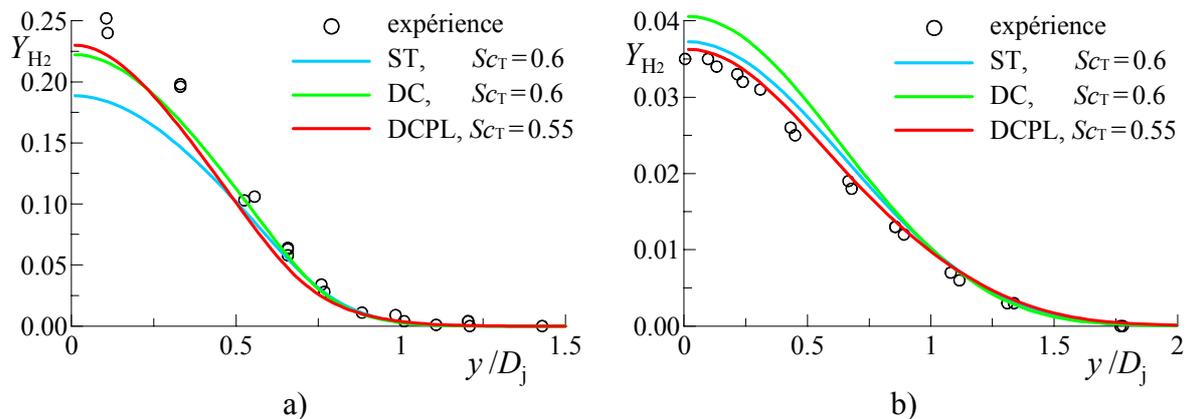


Figure 2.42. Cas 2. Profils radiaux de fraction massique de H_2 à $x/D_j = 15.36$ (a) et à $x/D_j = 58$ (b).

Les profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 58$ sont présentés sur la figure 2.43. Les profils calculés pour les trois approches sont en accord avec l'expérience dans la zone du jet de H_2 . Le profil « DCPL » suit mieux les points expérimentaux au bord du jet de H_2 . Les différences sont remarquables dans la couche cisailée autour du jet d'air. La simulation avec ST élargit fortement la couche cisailée autour du cœur potentiel du jet d'air, l'effet que nous avons vu dans les sections précédentes. La prise en compte de la compressibilité par l'approche DC améliore considérablement la solution dans cette zone. La correction de Pope limitée n'a pas d'influence notable sur le jet d'air.

L'action de la correction de Pope limitée est illustrée sur la figure 2.44 qui compare les profils radiaux de coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé à $x/D_j = 5, 25$ et 58 . La coordonnée radiale est normalisée par $y_{0.5}$ correspondant au rayon auquel Y_{H_2} vaut 50 % de sa valeur sur l'axe. À une petite distance axiale, le coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé est diminué dans une large zone près de l'axe donc le mélange est ralenti. Dans la section intermédiaire, le profil ressemble à celui que nous avons obtenu pour le jet autosemblable dans la section 2.2.1. À une grande distance axiale, le coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé est au niveau standard dans la zone centrale et augmenté sur la périphérie du jet de H_2 alors le mélange est accéléré. Nous pouvons ainsi constater que le jet de H_2 n'est pas en état de similitude malgré l'envergure importante du cœur potentiel du jet d'air.

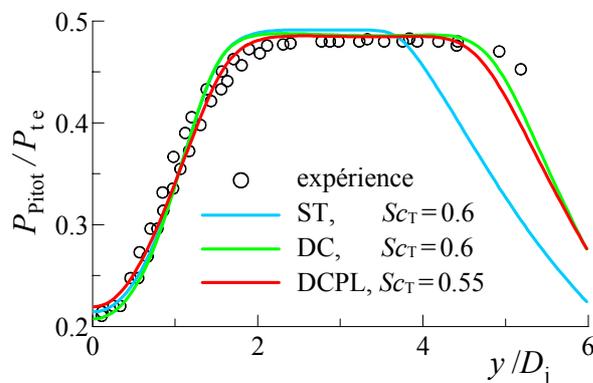


Figure 2.43. Cas 2. Profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 58$.

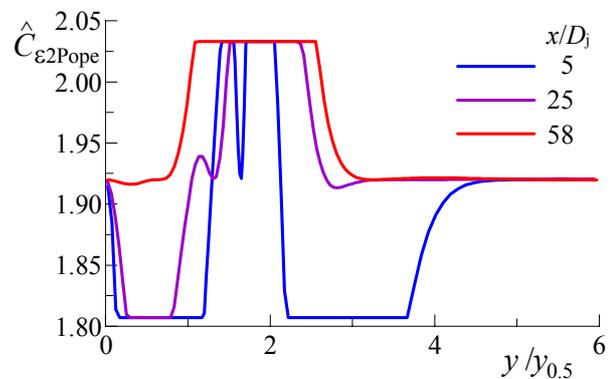


Figure 2.44. Cas 2, DCPL. Variations radiales du coefficient $C_{\epsilon 2}$ corrigé.

Maintenant, nous procédons à l'analyse du cas 1 qui nous a posé quelques difficultés. Les profils axiaux de Y_{H_2} sont montrés sur la figure 2.45 pour les trois approches étudiées. Le meilleur accord est obtenu grâce à DCPL jusqu'à $x/D_j = 15.44$. Plus loin, la tendance des données expérimentales ne correspond à aucune courbe calculée car Y_{H_2} diminue avec un taux très grand. En réduisant Sc_T , nous pouvons ajuster la solution à un seul point expérimental comme la courbe « ST » le montre à $x/D_j = 25.2$.

Les profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 63.6$ sont comparés sur la figure 2.46. Les résultats expérimentaux témoignent de la disparition du cœur potentiel du jet d'air alors que les résultats de calcul le montrent encore. Il y a donc un facteur dans l'expérience qui accélère le mélange à une grande distance de la sortie de l'injecteur et qui n'a pas été pris en compte dans les simulations.

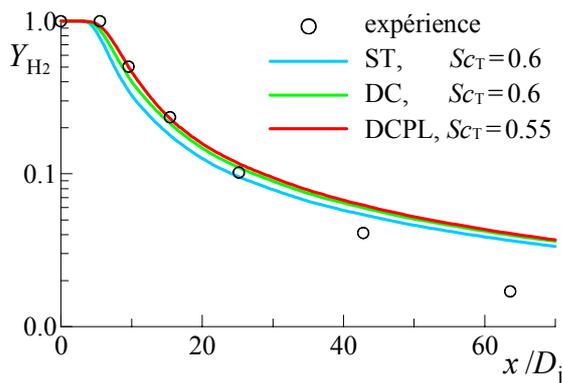


Figure 2.45. Cas 1. Profils de fraction massique de H_2 le long de l'axe.

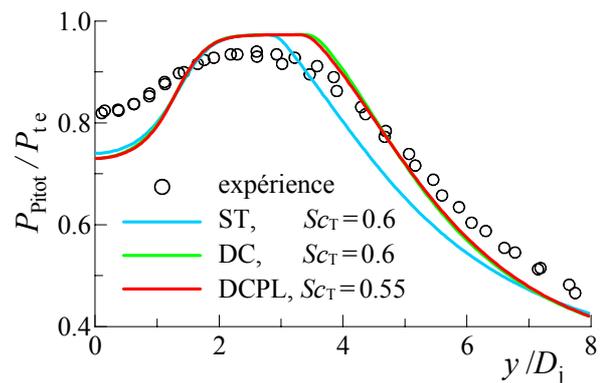


Figure 2.46. Cas 1. Profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 63.6$.

Eggers (1971) a publié des images strioscopiques des jets pour les deux cas. En les comparant, nous avons constaté que les structures turbulentes de l'écoulement d'air sont plus grandes et plus distinctes dans le cas 1. Cela nous a suggéré l'idée d'étudier l'effet de l'échelle turbulente dans l'écoulement d'air. Nous avons fait deux calculs avec DCPL en imposant des échelles turbulentes $l_e = 5$ mm et 10 mm à la frontière d'entrée de l'écoulement d'air (L2). Les profils de pression Pitot et d'échelle turbulente à $x = 0$ sont présentés sur la figure 2.47 pour les trois échelles à l'entrée L2. Les profils de P_{Pitot} diffèrent aux bords du courant d'air où l'augmentation de l_e détériore la qualité de la solution. L'influence des conditions à l'entrée sur les profils de l est marquée surtout au milieu du courant d'air parce que l est toujours limitée au voisinage des parois.

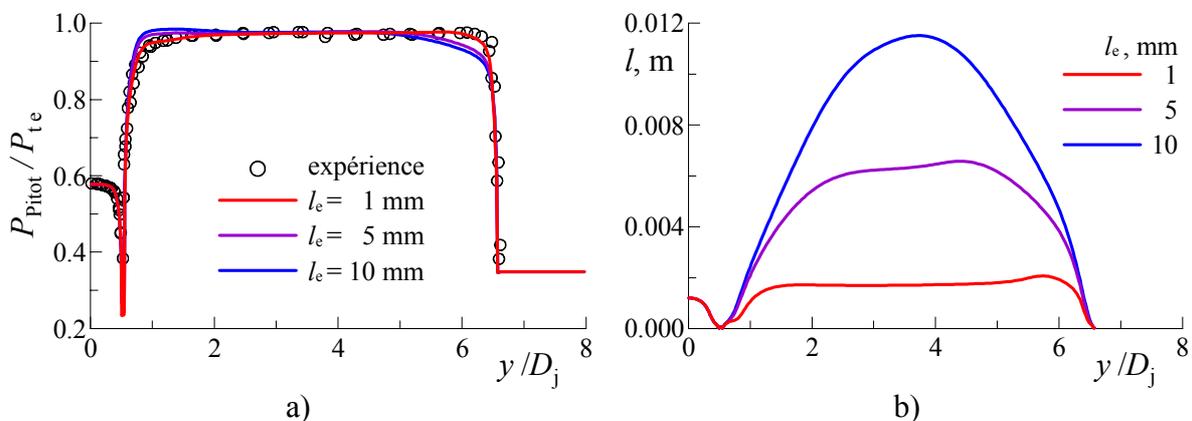


Figure 2.47. Cas 2, DCPL. Profils radiaux de pression Pitot (a) et d'échelle turbulente (b) à $x = 0$.

L'impact global de l'augmentation de l_e est illustré par les figures 2.48 et 2.49. La figure 2.48 montre que le mélange est effectivement accéléré à $x/D_j > 15$. L'effet sur le taux de mélange est retardé à cause du délai de transport de l du milieu de l'écoulement d'air à travers la zone de sillage où l est petit. La courbe correspondant à $l_e = 5$ mm est en bon accord avec les points expérimentaux tandis que celle correspondant à $l_e = 10$ mm passe au-dessous. Sur la figure 2.49, le profil radial de P_{Pitot} pour $l_e = 5$ mm est également en bon accord avec l'expérience à $x/D_j = 63.6$. Notre hypothèse concernant la turbulence dans l'écoulement d'air est confirmée par la simulation mais nous ne pouvons pas en déduire si les conditions de turbulence sont différentes à l'entrée de la tuyère où la turbulence est générée plus en aval.

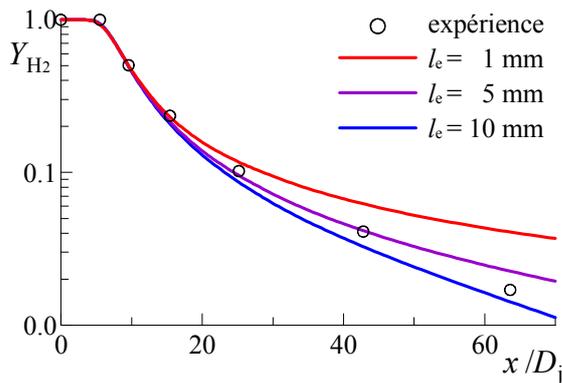


Figure 2.48. Cas 1, DCPL. Profils de fraction massique de H_2 le long de l'axe.

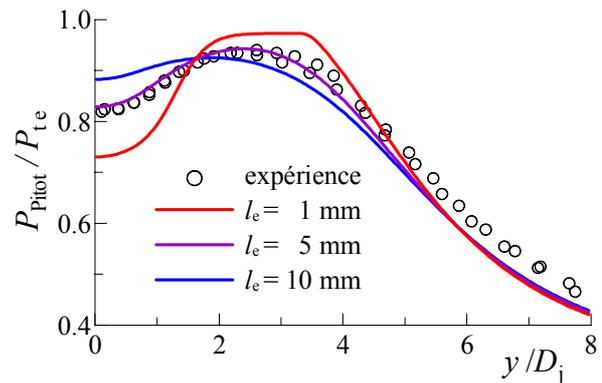


Figure 2.49. Cas 1, DCPL. Profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 63.6$.

Ainsi, l'incertitude sur les conditions génératrices suscite des difficultés pour la validation de notre modèle de turbulence. Néanmoins, nous avons obtenu des solutions qui sont en bon accord avec l'expérience pour le champ dynamique et pour la composition. Nous avons aussi montré les effets des deux corrections, du nombre de Schmidt turbulent et de l'échelle turbulente dans le jet d'air.

2.4.3. Jets supersoniques co-axiaux de mélange hélium-oxygène et d'air dans l'atmosphère au repos

2.4.3.1. Présentation générale du cas test

Le cas test que nous considérons dans cette section ressemble aux cas des jets co-axiaux d'Eggers (1971) présentés dans la section 2.4.2. Il correspond aux expériences de Cutler et de ses collaborateurs [Cutler et al. (1999), Cutler et White (2001)] sur un jet rond supersonique de mélange hélium-oxygène (95 % de He et 5 % de O₂ en volume) injecté dans un jet rond supersonique d'air le long de son axe. Les caractéristiques principales du cas test sont les suivantes :

- Le jet central de He-O₂ est inclus dans le cœur potentiel du jet d'air sauf la dernière section explorée où le cœur potentiel disparaît. Le champ dynamique a deux zones cisailées distinctes : le jet central et la couche de mélange autour du jet d'air.
- Le champ de température est relativement homogène à travers l'écoulement donc le transfert de chaleur n'est pas important vis-à-vis du transfert de quantité de mouvement et du transfert de masse des espèces. Néanmoins, un profil de température totale a été mesuré ce qui permet de valider le modèle de transport turbulent pour le champ de température.
- La pression statique est équilibrée entre les deux courants et l'atmosphère donc le processus de mélange n'est pas perturbé par des ondes de pression.
- L'écoulement n'est pas confiné. Malgré ce fait, la région explorée n'est pas très longue, cependant elle a été particulièrement bien étudiée à l'aide de plusieurs moyens de mesures.

Jusqu'à présent, les simulations connues concernant ce cas test ne sont pas nombreuses. Cutler et White (2001) ont présenté des résultats de simulation obtenus avec le modèle de turbulence $k\text{-}\omega$ de Wilcox (1998). Ce modèle tient compte des effets de compressibilité et d'étirement des tourbillons. La zone de calcul couvre les conduits en amont du plan d'injection et la zone de mélange des deux jets. Une étude paramétrique a été effectuée sur les effets des corrections dans le modèle de turbulence et du nombre de Schmidt turbulent Sc_T . Ces résultats de simulation ne sont pas satisfaisants, en particulier, les profils radiaux qui ont des ruptures de pente très marquées aux bords des couches cisailées. La valeur recommandée de Sc_T est de 0.75.

Drummond et al. (2002) ont publié des résultats issus d'une simulation avec un modèle algébrique de viscosité turbulente. La simulation a été faite pour le jet He-O₂ en imposant les conditions de symétrie aux frontières le long du co-courant d'air. La zone de calcul a été limitée à 15 diamètres du jet He-O₂.

Xiao et al. (2005) ont présenté des simulations du champ complet d'écoulement avec le modèle de turbulence $k\text{-}\zeta$. Ils ont montré l'effet de Sc_T en comparant les résultats obtenus pour $Sc_T = 0.6$ et 0.9 . Avec $Sc_T = 0.9$, l'accord avec l'expérience est meilleur mais le taux de mélange est néanmoins surestimé. Xiao et al. ont aussi validé un modèle de transport de la somme des variances $\overline{Y_s''^2}$ qui leur a permis d'évaluer localement Sc_T . D'après cette dernière simulation, Sc_T est supérieur à 0.95 partout sauf une zone accrochée au bord de fuite de la tuyère centrale dans laquelle Sc_T est sensiblement plus bas. À titre d'exemple, la taille de la zone $Sc_T < 0.5$ est de 10 mm par 1 mm dans le plan $x\text{-}y$. L'accord avec l'expérience a été amélioré grâce à ce modèle additionnel mais on n'a pas donné d'exemple pour un Sc_T fixe et proche de l'unité afin de prouver la pertinence de ce modèle.

2.4.3.2. Conditions expérimentales

Le dispositif expérimental de Cutler et al. (1999) est schématisé sur la figure 2.50. Le jet central de He-O₂ est émis par une tuyère circulaire de Laval avec un diamètre de sortie D_j de 10 mm. Le diamètre du col de cette tuyère est de 8.48 mm et la longueur du tronçon supersonique est de 17.13 mm. Le conduit subsonique de la tuyère d'injection a une longueur d'environ 350 mm et un diamètre d'entrée de 15.88 mm. À l'entrée de ce conduit, il y a quelques grilles pour homogénéiser l'écoulement. Le canal de la tuyère d'injection est intégré dans le corps central d'une tuyère annulaire.

La tuyère annulaire sert à accélérer le courant d'air. Son tronçon supersonique est formé par la paroi profilée du corps central et par la paroi cylindrique du canal de la tuyère. Le diamètre du corps central est de 34.26 mm au col et de 10.5 mm au bord de fuite (D_{je}). Le diamètre externe du canal D_e est de 60.47 mm. Le tronçon supersonique a une longueur de 72.5 mm. Le canal de la tuyère est prolongé jusqu'à 12.66 mm en aval du plan de sortie de l'injecteur. Le conduit subsonique annulaire a une longueur de 298 mm. À son entrée, le diamètre du corps central est de 41.9 mm et le diamètre externe du canal est de 152.3 mm.

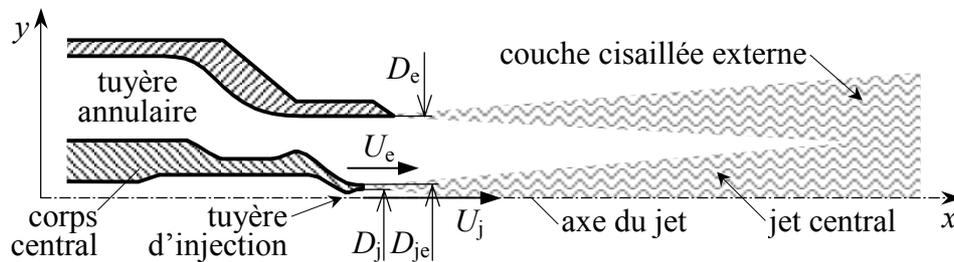


Figure 2.50. Schéma du dispositif expérimental de Cutler.

Le tableau 2.15 récapitule les conditions expérimentales dans les plans de sortie des deux tuyères. Le nombre de Mach correspond aux spécifications de conception. La vitesse a été directement mesurée à 2 mm en aval du plan d'injection. La pression statique, mesurée à l'entrée du conduit central, est égale à 614.8 kPa. Nous avons déterminé la pression totale correspondante *via* les relations thermodynamiques en imposant les conditions suivantes :

- écoulement uniforme ;
- égalité des débits, des pressions totales et des températures totales à l'entrée et au col de la tuyère ;
- vitesse sonique au col ;
- rapport des aires à l'entrée et au col selon leurs diamètres géométriques.

La pression totale du courant d'air a été mesurée en amont de l'entrée. La température totale a été mesurée dans les deux courants. Un essai particulier a été effectué avec $T_{tj} = 318$ K afin d'étudier le profil de température totale dans la zone de mélange.

Tableau 2.15. Conditions de sortie des jets et conditions ambiantes

Zone	M	U , m/s	P_t , kPa	T_t , K	Re	M_c
Jet de He-O ₂	1.8	1103±33	628.3±4.7	306±15	4.98·10 ⁵	0.689
Jet d'air	1.8	487±15	580.0±2.0	300±6	4.67·10 ⁶	0.781
Environnement	0	0	102.0±0.7	295±5	–	–

Le tableau 2.15 contient aussi les nombres de Reynolds et de Mach convectif que nous avons évalués. Le nombre de Reynolds est basé sur D_j pour le jet de He-O₂ et sur D_e pour le jet d'air. Le nombre de Mach convectif, indiqué pour le jet de He-O₂, correspond à la couche

cisaillée entre les deux écoulements, tandis que la deuxième valeur correspond à la couche cisaillée externe du jet d'air.

Le champ dynamique de l'écoulement a été caractérisé par les mesures directes de la pression Pitot et de la vitesse. La vitesse a été mesurée à l'aide de la méthode optique RELIEF (*Raman Excitation plus Laser-Induced Electronic Fluorescence*). Les mesures de la fraction volumique de He-O₂ ont été réalisées par prélèvement par une sonde. La température totale a été mesurée par un thermocouple. Selon Cutler et al. (1999) et Cutler et White (2001), la vitesse a été mesurée avec une erreur inférieure à 3 % et les autres mesures ont une incertitude inférieure à 1.5 %.

À notre demande, le Professeur Cutler nous a fourni les profils des conduits central et annulaire ainsi que les données expérimentales sous forme informatique.

2.4.3.3. Conditions de simulation

Nous avons adopté l'approche bidimensionnelle axisymétrique pour la simulation suivant la configuration de l'écoulement. La zone de calcul est constituée de cinq domaines : tronçon supersonique de la tuyère d'injection (D1), tronçon supersonique de la tuyère annulaire (D2), zone interne de mélange (D3), extérieur de la tuyère annulaire (D4), zone externe de mélange (D5). L'origine de la coordonnée axiale x correspond au plan de sortie de l'injecteur. La disposition des domaines et de leurs frontières est schématisée sur la figure 2.51.

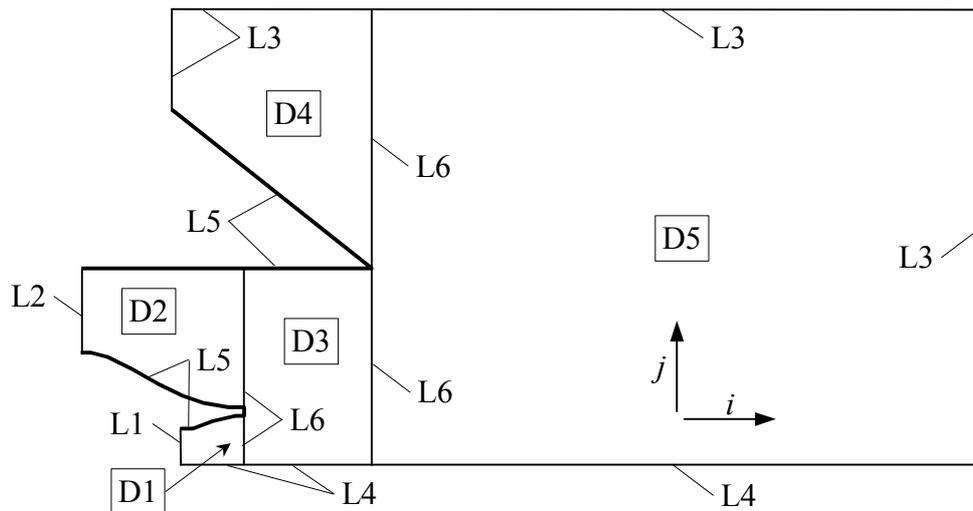


Figure 2.51. Schéma de la zone de calcul.

Les dimensions des domaines sont les suivants :

- D1 : $L = 17$ mm, $y_{\max} = 4.24-5$ mm ;
- D2 : $L = 72.4$ mm, $y_{\min} = 5.25-17.1$ mm, $y_{\max} = 30.23$ mm ;
- D3 : $L = 12.7$ mm, $y_{\max} = 30.23$ mm ;
- D4 : $L = 62.7$ mm, $y_{\min} = 30.23-80.3$ mm, $y_{\max} = 150$ mm ;
- D5 : $L = 337.3$ mm, $y_{\max} = 150$ mm.

Afin de déterminer les conditions aux cols des tuyères (L1 et L2), nous avons construit deux domaines auxiliaires correspondant aux conduits complets des tuyères. Nous avons calculé ces deux domaines séparément en utilisant le modèle $k-\epsilon$ standard et en imposant les conditions expérimentales, données dans le tableau 2.15, aux frontières d'entrée des deux écoulements. Les conditions de turbulence aux entrées ont été ajustées afin d'obtenir le meilleur accord avec l'expérience. Nous avons ensuite extrait les profils des quantités

nécessaires aux sections de col. Cette technique nous a permis d'effectuer plus facilement une étude paramétrique de la zone de mélange sans recalculer à chaque fois les écoulements internes.

Concernant le choix des conditions de turbulence dans les deux écoulements, nous considérons plus loin trois cas : laminaire, turbulence ajustée, turbulent. Les caractéristiques de ces cas sont résumées dans le tableau 2.16. L définit les longueurs des domaines auxiliaires.

Tableau 2.16. Conditions de turbulence aux entrées de He-O₂ et d'air

Cas	Entrée	τ_T , %	l , mm	L , mm
Laminaire	He-O ₂	0	0.0	260
	air	0	0.0	260
Turbulence ajustée	He-O ₂	1	0.2	260
	air	5	1.0	363
Turbulent	He-O ₂	10	1.0	363
	air	10	5.0	363

La liste suivante spécifie les conditions aux limites :

L1 : Entrée de He-O₂

- Type de frontière : entrée débit
- Conditions imposées : profils de $\bar{u}/|\bar{u}|$, $\bar{\rho}|\bar{u}|$, M , T_t , τ_T et l

L2 : Entrée d'air

- Type de frontière : entrée débit
- Conditions imposées : profils de $\bar{u}/|\bar{u}|$, $\bar{\rho}|\bar{u}|$, M , T_t , τ_T et l

L3 : Frontières libres

- Type de frontière : sortie pression
- Pression statique : 102 kPa

L4 : Axes de l'injecteur et du jet

- Type de frontière : axe de symétrie

L5 : Parois de l'injecteur et de la tuyère

- Type de frontière : paroi
- Flux de chaleur : 0

L6 : Frontières multidomaines

- Type de frontière : raccordement exact

Le maillage est resserré dans les zones de la couche limite le long des parois et dans les zones de mélange. Les zones du maillage le plus fin, situées à proximité des lèvres de l'injecteur et de la tuyère, sont illustrées sur la figure 2.52. Le tableau 2.17 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions (N_i , N_j), les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}$, $\Delta_{j\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}$, $\Delta_{j\max}$) pour tous les domaines.

Le mélange He-O₂ et l'air sont considérés comme des gaz monoespèces. Leurs propriétés ont été établies à partir des propriétés des espèces qui les constituent.

Les trois approches utilisées pour le modèle de turbulence sont ST, DC, DCPL ($\chi_{\text{lim}} = 0.143$).

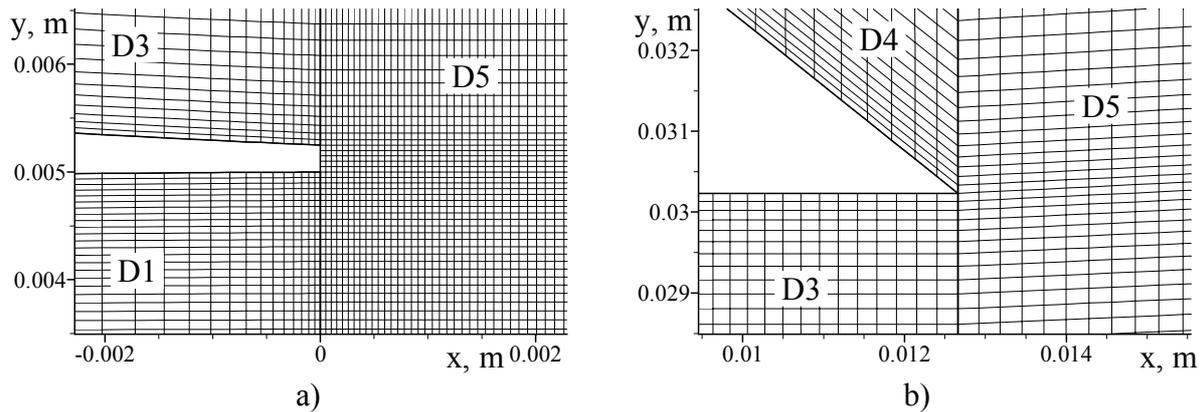


Figure 2.52. Maillage dans les zones des lèvres du corps central (a) et de la tuyère (b).

Tableau 2.17. Caractéristiques du maillage

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
D1	38	50	1900	0.05	1.09	0.04	0.17
D2	80	100	8000	0.05	2.0	0.02	0.34
D3	100	155	15500	0.05	0.26	0.05	0.34
D4	50	60	3000	0.26	4.5	0.10	8.9
D5	200	215	43000	0.26	5.4	0.05	8.8

Nous avons considéré l'effet du nombre de Schmidt turbulent Sc_T dans la section 2.4.2. Dans la présente analyse, Sc_T est ajusté pour chaque cas particulier de sorte que le profil calculé de fraction de He-O₂ coïncide avec les données expérimentales dans la dernière section de mesures à $x/D_j = 26.1$ (261 mm). En outre, Sc_T ne peut pas dépasser 1. Nous avons ainsi choisi $Sc_T = 1$ pour les simulations avec ST et DC et $Sc_T = 0.8$ pour les simulations avec DCPL. Le choix du nombre de Prandtl turbulent Pr_T est important pour l'analyse du profil de température totale. Les simulations ont été réalisées en supposant que $Pr_T = Sc_T$.

2.4.3.4. Résultats de simulation

Nous présentons d'abord l'effet des conditions de turbulence imposées aux entrées sur la qualité de la solution. Les simulations comparées ont été effectuées avec DCPL. La figure 2.53 montre les profils de fraction massique $Y_{\text{He-O}_2}$ le long de l'axe pour les conditions laminaires et turbulentes aux entrées de He-O₂ et d'air (voir le tableau 2.16). Les deux cas correspondent aux conditions extrêmes dans lesquelles la longueur du cœur du jet de He-O₂ est soit surestimée soit sous estimée par rapport à l'expérience. Cet effet est dû aux conditions dans le courant de He-O₂.

Les conditions de turbulence dans le courant d'air sont importantes pour la forme du profil radial de pression Pitot dont les exemples sont affichés sur la figure 2.54 pour la section $x/D_j = 22$. La pression Pitot P_{Pitot} est adimensionnée par la pression génératrice du courant d'air P_{te} , spécifiée dans le tableau 2.15. Quand le cœur de l'écoulement d'air est laminaire, le profil de P_{Pitot} a des ruptures de pente marquées aux bords des zones de cisaillement. À part ces détails, les deux profils calculés coïncident donc la turbulence dans le jet d'air n'influence pas globalement le champ dynamique. Par la suite, nous considérons uniquement les résultats obtenus avec les conditions ajustées de turbulence.

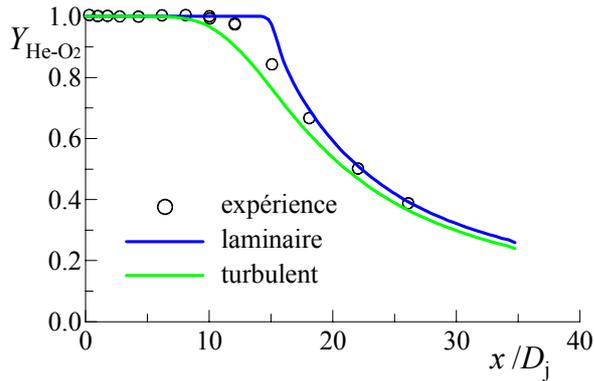


Figure 2.53. Profils de fraction massique de He-O₂ le long de l'axe. Approche DCPL.

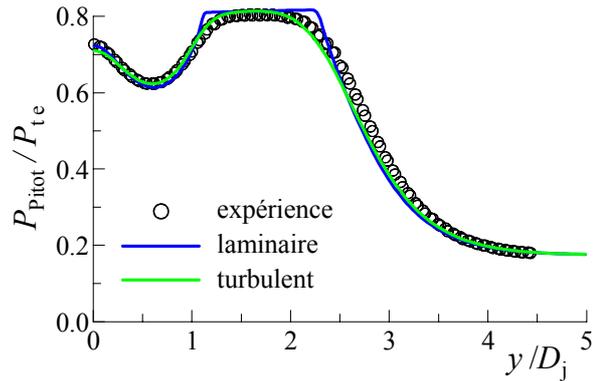


Figure 2.54. Profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 22$. Approche DCPL.

Considérons les résultats obtenus avec les approches ST, DC et DCPL. Les profils de fraction massique $Y_{\text{He-O}_2}$ sont tracés le long de l'axe sur la figure 2.55 et suivant la direction radiale dans la section $x/D_j = 22$ sur la figure 2.56. Les deux figures montrent que le mélange est trop intense dans la simulation avec ST malgré $Sc_T = 1$. Pour DC et DCPL, Sc_T est optimal. Ainsi, les résultats de simulation sont en bon accord avec les données expérimentales.

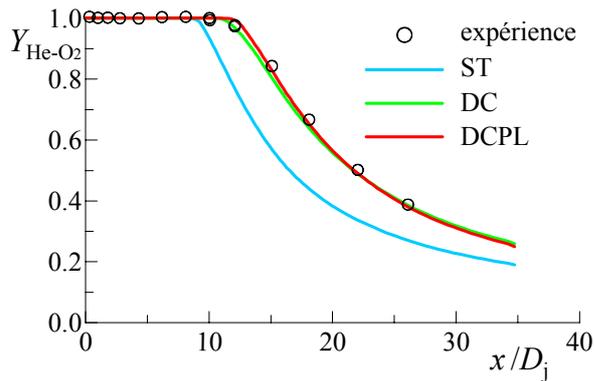


Figure 2.55. Profils de fraction massique de He-O₂ le long de l'axe

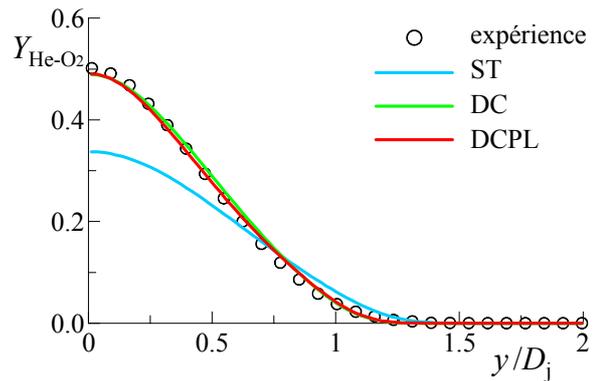


Figure 2.56. Profils radiaux de fraction massique de He-O₂ à $x/D_j = 22$.

Les profils axiaux et radiaux de pression Pitot, issus des mêmes simulations, sont comparés sur les figures 2.57 et 2.58. Les fluctuations de P_{Pitot} le long de l'axe sont dues aux ondes de choc et de détente générées par l'interaction des deux courants. Parmi les profils axiaux calculés, seul le profil « DCPL » est en accord avec les résultats de mesures sur toute la zone explorée. Les profils « ST » et « DC » suivent les points expérimentaux jusqu'à la fin du cœur potentiel du jet simulé puis P_{Pitot} chute de 25-30 % par rapport aux données expérimentales. À $x/D_j = 22$, le profil radial mesuré a un pic au centre et un minimum local dû au sillage provenant du bord de fuite de la tuyère d'injection. La simulation avec ST ne peut produire ni le pic central ni la bonne largeur de la couche cisailée autour du jet d'air. La prise en compte des effets de compressibilité par DC corrige le profil de la couche externe mais ne résout pas le problème avec le pic central. Seule l'approche DCPL donne le profil radial correct. Sans la correction de Pope, le pic central est dissipé rapidement car le transfert radial de quantité de mouvement est surestimé. Cela explique la différence entre les solutions avec DC et DCPL.

Les profils de vitesse axiaux et radiaux sont comparés sur les figures 2.59 et 2.60. La vitesse est adimensionnée par la vitesse du jet de He-O₂ à la sortie de la tuyère (voir le tableau

2.15). Les points expérimentaux ont des barres d'erreur correspondant à l'écart-type des vitesses mesurées. La simulation avec ST donne une vitesse faible sur l'axe après le cœur potentiel du jet ce qui est cohérent avec les résultats sur la pression Pitot. La simulation avec DC produit les profils de vitesse corrects malgré les désaccords pour la pression Pitot. L'approche DCPL surestime la vitesse sur l'axe après le cœur potentiel sauf à $x/D_j = 19$. L'écart sur l'axe est au moins deux fois plus grand que l'erreur de 3 % estimée pour la technique de mesure. Sans vouloir discréditer les résultats expérimentaux sur la vitesse, nous pouvons faire deux observations importantes concernant ces résultats :

- 1) Sur le profil axial, le point expérimental à $x/D_j = 19$ est nettement écarté de la tendance générale alors que les profils calculés ne montrent pas cette particularité. Nous avons vérifié qu'à $x/D_j = 19$, le profil expérimental de vitesse s'accorde bien avec le profil calculé avec DCPL mais ce n'est pas le cas pour les deux sections voisines.
- 2) Nous avons essayé d'évaluer la vitesse à partir de la pression Pitot et vice versa sur la base des données expérimentales à $x/D_j = 22$. Pour le premier test, nous avons pris la pression Pitot mesurée et nous avons admis que la pression statique sur l'axe est égale à la pression ambiante. La température totale a été évaluée à partir des températures totales génératrices et de la composition mesurée *via* l'enthalpie totale du mélange. Les relations pour le gaz parfait nous donnent un nombre de Mach de 1.6 et une vitesse de 804 m/s. Les nombres de Mach calculés avec DC et DCPL sont 1.53 et 1.63, les vitesses respectives sont 768 m/s et 819 m/s. La vitesse mesurée est de 762 m/s. Les résultats DCPL sont confirmés par ce test. Pour le deuxième test, nous avons utilisé la pression statique et la température statique issues de la simulation. Les approches DC et DCPL donnent les résultats très proches pour ces deux quantités. La vitesse et la composition sont prises de l'expérience. La pression Pitot estimée est d'environ $0.62 P_{te}$ alors que celle mesurée est proche de $0.73 P_{te}$. Les deux tests confirment ainsi l'incompatibilité des données expérimentales sur la pression Pitot et sur la vitesse.

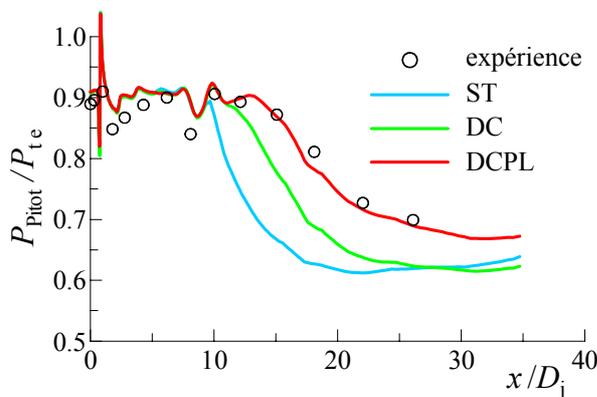


Figure 2.57. Profils de pression Pitot le long de l'axe

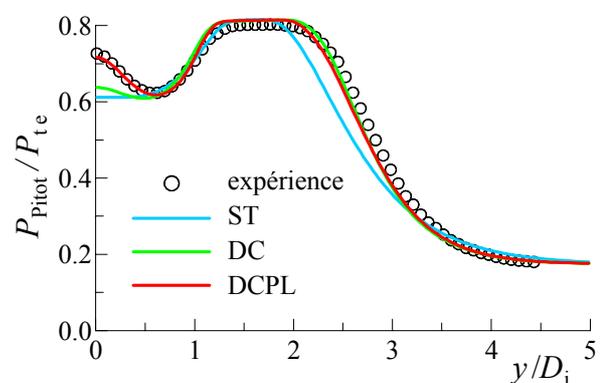


Figure 2.58. Profils radiaux de pression Pitot à $x/D_j = 22$.

Le seul profil disponible de température totale a été mesuré dans la section $x/D_j = 10$. Les résultats de mesures et de simulations sont comparés sur la figure 2.61. La température totale T_t est adimensionnée par la température totale génératrice du courant d'air T_{te} (voir le tableau 2.15). Pour la simulation avec DCPL, nous avons tracé un profil en pointillés qui représente seulement l'effet du mélange (T_t évaluée à partir des températures totales génératrices et de la composition du mélange). La température mesurée sur l'axe et dans le cœur du courant d'air est plus basse de 1 % par rapport aux températures génératrices et aux températures calculées. Cutler et White (2001) ont attribué cette différence aux conditions imparfaites dans la sonde. Parmi les approches numériques, seule DCPL reproduit l'évolution

sinusoïdale de la température mesurée. Cette forme est due au transfert de chaleur à travers l'écoulement.

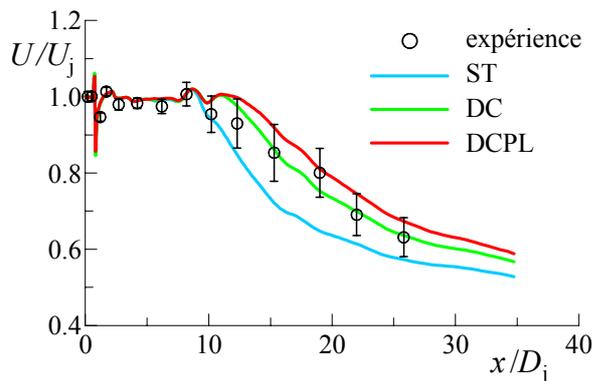


Figure 2.59. Profils de vitesse le long de l'axe

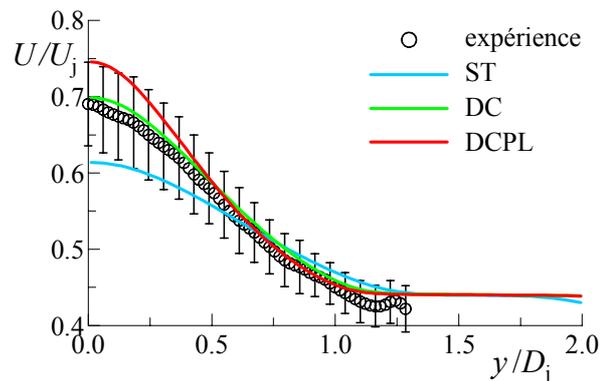


Figure 2.60. Profils radiaux de vitesse à $x/D_j = 22$.

L'explication à ce phénomène est donnée par les profils radiaux de température statique T sur la figure 2.62. Les deux courants sont entraînés dans le sillage provenant du bord de fuite de la tuyère d'injection. Dans le sillage, l'énergie cinétique des fluides entraînés se dissipe en énergie cinétique turbulente et en chaleur. Le dégagement de chaleur se manifeste par un pic sur les profils de T . La chaleur se diffuse et, par conséquent, la température totale diminue dans la zone préalablement échauffée (en amont) et elle augmente dans les couches voisines. Le pic de T_t près de l'axe est plus marqué car premièrement la variation de T est plus grande et deuxièmement le flux de chaleur est distribué sur l'aire, qui diminue vers le centre de la section.

Nous pouvons remarquer également que les profils « DC » et « DCPL » de T sont identiques tandis que ceux de T_t ont des formes différentes. Cela est à cause des différents Pr_T choisis pour les deux simulations. Nous avons vérifié que le profil calculé de T_t est même plus proche des points expérimentaux si $Pr_T = 0.75$.

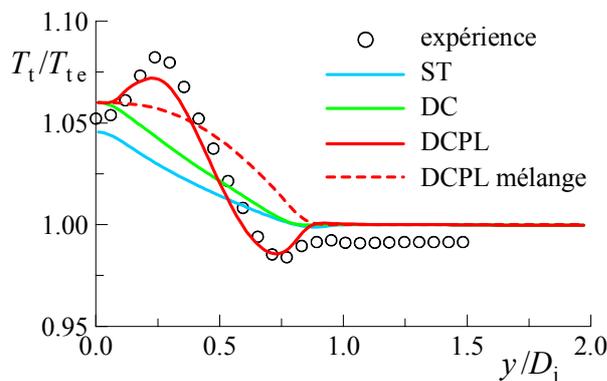


Figure 2.61. Profils radiaux de température totale à $x/D_j = 10$.

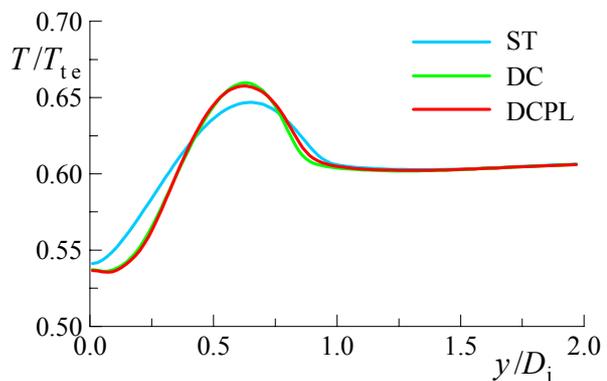


Figure 2.62. Profils radiaux de température statique à $x/D_j = 10$.

En conclusion, nous pouvons affirmer que le cas test considéré représente une base solide pour la validation des modèles de turbulence. Nous avons prouvé que le modèle $k-\epsilon$, avec la correction de compressibilité de Sarkar et avec la correction de Pope limitée, permet d'obtenir les résultats corrects pour l'ensemble des données expérimentales et d'expliquer certains phénomènes observés dans l'expérience. La méconnaissance des conditions de turbulence dans les deux courants a nécessité qu'elles soient ajustées afin d'optimiser la qualité de la simulation. Cela nous a donné l'occasion d'étudier l'effet de la turbulence initiale sur la solution.

2.5. Paramètres du transport turbulent

Dans les sections précédentes, nous avons analysé plusieurs jets de gaz différents pour lesquels nous avons ajusté le nombre de Schmidt turbulent Sc_T . Nous avons mis en évidence l'importance de Sc_T mais notre analyse a montré que le choix de Sc_T dépend des cas particuliers pour lesquels ce paramètre ne prend pas de valeur unique (voir les sections 2.4.2, 2.4.3).

Nous n'avons pas encore analysé de jet fortement non isotherme pour lequel le nombre de Prandtl turbulent Pr_T joue un rôle important. Il est évident que le choix de Pr_T dépend aussi de conditions particulières. Pour preuve, Tam et Ganesan (2004) ont appliqué une version modifiée du modèle $k-\varepsilon$ avec un Pr_T fixe à plusieurs jets chauds et ils ont trouvé que l'accord avec l'expérience n'était pas satisfaisant pour un rapport fort des températures du jet et du milieu ambiant. Ils ont proposé une considération théorique concernant l'effet du rapport des masses volumiques sur la stabilité spatiale d'une couche cisailée. Selon leur analyse, le taux de mélange augmente si le courant léger est plus rapide. En tenant compte de cet effet par un terme correcteur à la viscosité turbulente, Tam et Ganesan ont confirmé leur théorie pour plusieurs jets à température variable.

Dans la présente étude, nous restons avec l'approche basée sur l'ajustement de Pr_T et de Sc_T . Il est néanmoins important d'essayer de réduire le nombre de paramètres « libres ». Dans ce but, nous étudions le comportement des deux paramètres et de leur rapport représenté par le nombre de Lewis turbulent Le_T . Notre étude repose sur l'analyse de données DNS sur une couche de mélange non isotherme bi-espèces. Cette section présente les données DNS, la méthode et les résultats de notre analyse.

2.5.1. Présentation des données DNS

Nous avons eu à notre disposition les résultats DNS obtenus par Nicolas Lardjane au cours de sa thèse au CNRS-LCSR [Lardjane (2002)]. Lardjane a simulé plusieurs couches de mélange parmi lesquelles nous avons choisi un cas du mélange de l'oxygène chaud avec de l'hydrogène à température normale. La couche de mélange a été simulée en développement temporel dans un domaine tridimensionnel.

Le schéma du domaine de simulation est montré sur la figure 2.63. La couche de mélange se forme entre un courant de O_2 en haut et un courant de H_2 en bas. Les courants ont les sens opposés avec les vitesses U et $-U$ à l'infini. Les températures statiques à l'infini sont désignées par T_1 pour le courant supérieur et par T_2 pour celui inférieur. La pression statique initiale P est uniforme dans le domaine. Les conditions de périodicité sont imposées aux frontières normales aux axes x et y . Les frontières supérieure et inférieure sont des frontières libres auxquelles on impose les conditions non réfléchives [Lardjane (2002)].

L'état initial est déterminé à partir d'une solution de similitude temporelle pour une couche laminaire de mélange. Afin de faciliter le développement des instabilités de Kelvin-Helmholtz dans la zone de calcul, les champs initiaux des composantes v et w de vitesse sont perturbés par un bruit avec dix modes à phases aléatoires suivant les trois directions du maillage. L'intensité du bruit est limitée par une fonction gaussienne dans la zone de cisaillement. La procédure de l'initialisation a été détaillée par Lardjane (2002).

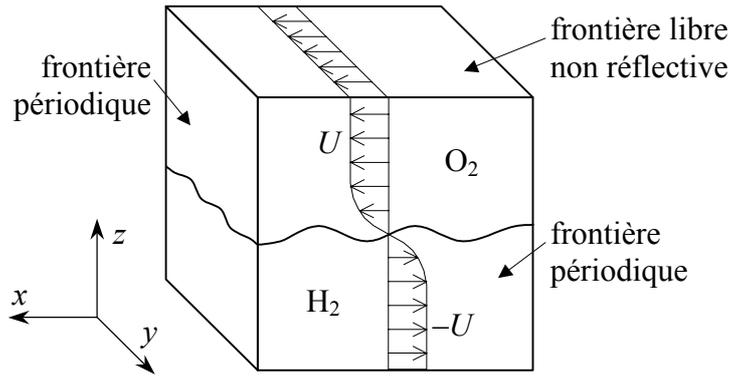


Figure 2.63. Schéma du domaine de simulation de la couche de mélange.

Les conditions à l’infini et les conditions dans le mélange avec les fractions massiques égales des gaz sont présentées dans le tableau 2.18. La pression statique est de 100 kPa. Dans la suite, les conditions du mélange sont désignées par l’indice « m ».

Tableau 2.18. Conditions à l’infini et dans le mélange des gaz

$Y_{O_2}:Y_{H_2}$	u m/s	T K	ρ kg/m ³	c_p J/(kg·K)	h kJ/kg	μ Pa·s	λ W/(m·K)	D m ² /s
1 : 0	100	600.0	0.6414	1003	289.49	$3.445 \cdot 10^{-5}$	0.0491	$7.151 \cdot 10^{-5}$
0 : 1	-100	300.0	0.0808	14328	26.51	$8.197 \cdot 10^{-6}$	0.1594	$1.627 \cdot 10^{-4}$
0.5 : 0.5	0	319.3	0.1429	7710	163.00	$1.347 \cdot 10^{-5}$	0.1373	$1.695 \cdot 10^{-4}$

Selon Lardjane (2002), ce problème est caractérisé par un nombre de Mach convectif $M_c = 0.113$ et par un nombre de Reynolds $Re_{ref} = 100$ défini comme :

$$Re_{ref} = \frac{\rho_{ref} U L_{ref}}{\mu_{ref}} \quad (2.24)$$

avec

$$\rho_{ref} = \frac{P}{R_m T_{ref}} = 0.1014 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (2.25)$$

$$T_{ref} = \frac{T_1 + T_2}{2} = 450 \text{ K}$$

$$\mu_{ref} = \mu(T_{ref}, Y_{sm}) = 1.415 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s} \quad (2.26)$$

La longueur de référence L_{ref} du problème est égale à l’épaisseur initiale de vorticit  de la couche de m lange :

$$L_{ref} = \frac{2U}{(\partial u / \partial z)_{max}} = 0.1396 \text{ mm} \quad (2.27)$$

Le temps de r f rence t_{ref} est :

$$t_{ref} = L_{ref} / U = 1.396 \cdot 10^{-5} \text{ s} \quad (2.28)$$

Le domaine parall lepipedique de simulation a les dimensions suivantes : $20.1 L_{ref} = 2.80 \text{ mm}$ le long des axes x et y ; $60 L_{ref} = 8.38 \text{ mm}$ le long de l’axe z . Le maillage

a 199 nœuds suivant x et y avec un pas uniforme et 485 nœuds suivant z avec des pas variables adaptés au gradient de vitesse moyenne.

L'image de la couche de mélange, empruntée de la thèse de Lardjane, est affichée sur la figure 2.64. Son état correspond à l'instant $100 t_{\text{ref}}$. Les coordonnées sont normalisées par L_{ref} . Nous pouvons observer des structures tourbillonnaires très irrégulières d'un caractère tridimensionnel. Dans le plan d'homogénéité x - y le nombre de structures est relativement petit.

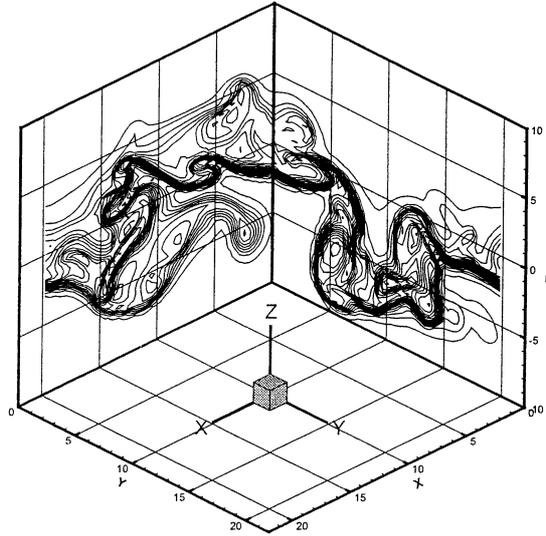


Figure 2.64. Iso-lignes de la fraction massique de O_2 à l'instant $100 t_{\text{ref}}$.
Image créée par Lardjane (2002).

2.5.2. Méthode du post-traitement des données DNS

Les moyennes de Reynolds et de Favre d'une quantité q sont approchées par moyennes spatiales dans les plans d'homogénéité x - y :

$$\bar{q}_k = (N_i N_j)^{-1} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{i=1}^{N_i} q_{ijk} \quad (2.29)$$

$$\tilde{q}_k = (N_i N_j \bar{\rho}_k)^{-1} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{i=1}^{N_i} \rho_{ijk} q_{ijk} \quad (2.30)$$

Les indices i , j et k correspondent aux directions du maillage le long des axes x , y , et z respectivement.

Les fluctuations par rapport aux quantités moyennes sont :

$$q'_{ijk} = q_{ijk} - \bar{q}_k \quad (2.31)$$

$$q''_{ijk} = q_{ijk} - \tilde{q}_k \quad (2.32)$$

L'énergie cinétique turbulente est déterminée selon la formule (1.53) :

$$k_k = \frac{\overline{(\rho u'^2)}_k + \overline{(\rho v'^2)}_k + \overline{(\rho w'^2)}_k}{2 \bar{\rho}} \quad (2.33)$$

Les flux turbulents selon la direction z sont :

– flux de quantité de mouvement

$$(\overline{\rho w'' u''})_k \quad (2.34)$$

– flux de chaleur

$$(\overline{\rho w'' h''})_k \quad (2.35)$$

– flux de masse de O_2

$$(\overline{\rho w'' Y_{O_2}''})_k \quad (2.36)$$

Les coefficients de transport turbulent sont obtenus *via* les relations suivantes :

$$\mu_{Tk} = -\frac{(\overline{\rho w'' u''})_k}{\partial \tilde{u}_k / \partial z} \quad (2.37)$$

$$\lambda_{Tk} = -\tilde{c}_{Pk} \frac{(\overline{\rho w'' h''})_k}{\partial \tilde{h}_k / \partial z} \quad (2.38)$$

$$D_{Tk} = -\frac{(\overline{\rho w'' Y_{O_2}''})_k}{\bar{\rho}_k (\partial \tilde{Y}_{O_2 k} / \partial z)} \quad (2.39)$$

Les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents sont définis comme :

$$Pr_{Tk} = \frac{\tilde{c}_{Pk} \mu_{Tk}}{\lambda_{Tk}} \quad (2.40)$$

$$Sc_{Tk} = \frac{\mu_{Tk}}{\bar{\rho}_k D_{Tk}} \quad (2.41)$$

L'épaisseur moyenne $b_{0.8}$ de la couche de mélange est évaluée à partir du profil de \bar{u}_k entre les coordonnées $z_{-0.8}$ et $z_{0.8}$ correspondant à $-0.8 U$ et à $0.8 U$. Nous avons préféré \bar{u}_k à \tilde{u}_k car les limites des champs dynamique et de composition sont plus proches. La coordonnée z_0 correspond à $\bar{u}_k = 0$. La coordonnée z normalisée est alors définie comme $(z - z_0)/b_{0.8}$. Les indices $k_{-0.8}$, k_0 et $k_{0.8}$ sont associés aux plans du maillage avec les coordonnées $z_{-0.8}$, z_0 et $z_{0.8}$.

Les quantités moyennes sont aussi évaluées pour les zones de z_0 à $z_{0.8}$, de $z_{-0.8}$ à z_0 et de $z_{-0.8}$ à $z_{0.8}$. Pour les quantités moyennées de $z_{-0.8}$ à $z_{0.8}$, les formules sont :

$$\bar{q}_{[z_{-0.8}, z_{0.8}]} = \frac{\sum_{k_{-0.8}}^{k_{0.8}} \bar{q}_k \Delta_k}{\sum_{k_{-0.8}}^{k_{0.8}} \Delta_k} \quad (2.42)$$

$$\tilde{q}_{[z_{-0.8}, z_{0.8}]} = \frac{\sum_{k_{-0.8}}^{k_{0.8}} \bar{\rho}_k \tilde{q}_k \Delta_k}{\sum_{k_{-0.8}}^{k_{0.8}} \bar{\rho}_k \Delta_k} \quad (2.43)$$

Δ_k est le pas local de maillage suivant l'axe z .

Afin d'estimer les coefficients moyens de transport, les dérivées spatiales sont approchées globalement. Cette approche est nécessaire car les dérivées locales sont très irrégulières. Par exemple, pour la couche entière de mélange, la dérivée d'une quantité est calculée selon la formule :

$$(\partial \tilde{q} / \partial z)_{[z_{-0.8}, z_{0.8}]} = \frac{\tilde{q}_{k_{0.8}} - \tilde{q}_{k_{-0.8}}}{z_{k_{0.8}} - z_{k_{-0.8}}} \quad (2.44)$$

2.5.3. Résultats du post-traitement des données DNS

Les données DNS disponibles correspondent aux instants $100 t_{\text{ref}}$ et $105 t_{\text{ref}}$. Nous les désignons comme les états 1 et 2 de la couche de mélange. Sur la figure 2.65, les profils transversaux sont affichés pour la masse volumique $\bar{\rho}_k$, pour les trois composantes de vitesse \tilde{u}_k , \tilde{v}_k et \tilde{w}_k , pour l'enthalpie \tilde{h}_k et pour la fraction massique $\tilde{Y}_{\text{O}_2 k}$. Les quantités sont normalisées par leurs variations maximales à travers la couche de mélange sauf \tilde{v}_k et \tilde{w}_k qui sont normalisées par $2U$. L'indice k est omis dans les titres des axes. En comparant les profils correspondant aux deux états, nous pouvons constater qu'ils sont assez proches les uns des autres. Les profils de l'état 2 sont plus bruités parce que, au fil du temps, les structures tourbillonnaires grandissent et leur nombre diminue donc la statistique devient moins représentative dans un domaine de taille fixe.

Les évolutions des écarts-types des mêmes quantités et les profils d'énergie cinétique turbulente à travers la couche de mélange sont présentées sur la figure 2.66. Les écarts-types sont normalisés de la même façon que les quantités moyennes. Les profils d'écarts-types sont aussi similaires donc l'intensité turbulente n'a pas changé entre les deux états. Les amplitudes maximales de tous les écarts-types ont le même ordre de grandeur. Le maximum de $(\overline{\rho'^2})_k^{0.5}$ est décentré vers le côté O_2 ce qui bien en accord avec le maximum du gradient de $\bar{\rho}_k$ (voir la figure 2.65(a)). Le maximum de $(\overline{u'^2})_k^{0.5}$ est au contraire décalé vers le côté H_2 . L'amplitude maximale de $(\overline{u'^2})_k^{0.5}$ est plus grande d'environ 70 % que celles de $(\overline{v'^2})_k^{0.5}$ et de $(\overline{w'^2})_k^{0.5}$. Les profils de $(\overline{h'^2})_k^{0.5}$ et de $(\overline{Y_{\text{O}_2}^{\prime 2}})_k^{0.5}$ sont centrés et montrent des formes très similaires. Le profil de k_k est semblable au profil de $(\overline{u'^2})_k^{0.5}$ parce que la contribution de ce dernier à k_k est la plus importante. Le tableau 2.19 récapitule les valeurs maximales normalisées des écarts-types et de l'énergie cinétique turbulente pour les deux états.

Tableau 2.19. Maximums des écarts-types et de l'énergie cinétique turbulente

État	$\frac{(\overline{\rho'^2})_k^{0.5}}{\rho_1 - \rho_2}$	$\frac{(\overline{u'^2})_k^{0.5}}{2U}$	$\frac{(\overline{v'^2})_k^{0.5}}{2U}$	$\frac{(\overline{w'^2})_k^{0.5}}{2U}$	$\frac{(\overline{h'^2})_k^{0.5}}{h_1 - h_2}$	$(\overline{Y_{\text{O}_2}^{\prime 2}})_k^{0.5}$	$\frac{k}{(2U)^2}$
1	0.287	0.275	0.164	0.167	0.369	0.322	0.053
2	0.289	0.271	0.142	0.172	0.368	0.324	0.054

Les résultats sur les propriétés du transport turbulent sont illustrés sur la figure 2.67. Les coefficients de transport turbulent sont adimensionnés par leurs homologues laminares du mélange (voir le tableau 2.18). Les profils des coefficients de transport sont fortement bruités puisqu'ils ont été déterminés à partir des dérivées spatiales qui étaient perturbées par les erreurs statistiques. Pour notre analyse, il est plus important de constater que le transport turbulent domine dans la couche de mélange car les rapports des coefficients turbulents et laminares valent plusieurs dizaines. Les profils de Pr_{Tk} et de Sc_{Tk} sont superposés pour chaque état afin de mettre en évidence la cohérence de ces deux paramètres. Les fluctuations de Pr_{Tk} sont plus intenses que celles de Sc_{Tk} mais, en général, la cohérence entre les

évolutions de Pr_{Tk} et de Sc_{Tk} est très étroite. Nous pouvons remarquer que les niveaux moyens de Pr_{Tk} et de Sc_{Tk} ne sont pas constants à travers la couche de mélange. Finalement, les profils de Le_{Tk} fluctuent principalement autour de 1 ce qui permet de supposer que $Pr_{Tk} = Sc_{Tk}$.

Nous présentons maintenant les résultats récapitulatifs sur les propriétés du transport turbulent. Les tableaux 2.20 et 2.21 regroupent les propriétés moyennes pour les états 1 et 2 respectivement. Chaque tableau contient les données pour les trois zones de la couche de mélange : moitié supérieure, moitié inférieure et couche entière. Les coefficients de transport turbulent sont plus grands dans la moitié inférieure parce que le maximum de l'énergie cinétique turbulente s'y trouve. Pr_T et Sc_T s'élèvent jusqu'à 0.41-0.55 dans la moitié supérieure et jusqu'à 0.98-1.06 dans la moitié inférieure. Le niveau global de Pr_T et Sc_T est entre 0.7 et 0.8. En même temps, Le_T reste stable et proche de 1.05 partout.

Tableau 2.20. Propriétés moyennes du transport turbulent pour l'état 1

Zone	μ_T/μ_m	λ_T/λ_m	D_T/D_m	Pr_T	Sc_T	Le_T
$[z_0, z_{0.8}]$	49.3	45.8	34.6	0.407	0.444	1.092
$[z_{-0.8}, z_0]$	66.1	51.2	36.7	1.032	1.058	1.025
$[z_{-0.8}, z_{0.8}]$	58.6	44.0	32.3	0.696	0.737	1.058

Tableau 2.21. Propriétés moyennes du transport turbulent pour l'état 2

Zone	μ_T/μ_m	λ_T/λ_m	D_T/D_m	Pr_T	Sc_T	Le_T
$[z_0, z_{0.8}]$	58.8	42.0	33.0	0.526	0.552	1.051
$[z_{-0.8}, z_0]$	71.2	56.7	40.0	0.983	1.028	1.046
$[z_{-0.8}, z_{0.8}]$	65.3	44.7	33.1	0.757	0.796	1.052

La présente analyse a confirmé que les transferts de chaleur et de masse des espèces sont fortement couplés dans la couche de mélange turbulente. Malgré la variation de Pr_T et de Sc_T à travers la couche de mélange, leur rapport est constamment proche de 1. Nous ne pouvons pas faire de conclusions générales concernant les valeurs de Pr_T et de Sc_T car l'analyse est restreinte à un seul cas. Nous pouvons néanmoins accepter l'hypothèse de l'égalité $Pr_T = Sc_T$ donc nous n'avons qu'un seul paramètre à ajuster dans la suite de notre étude.

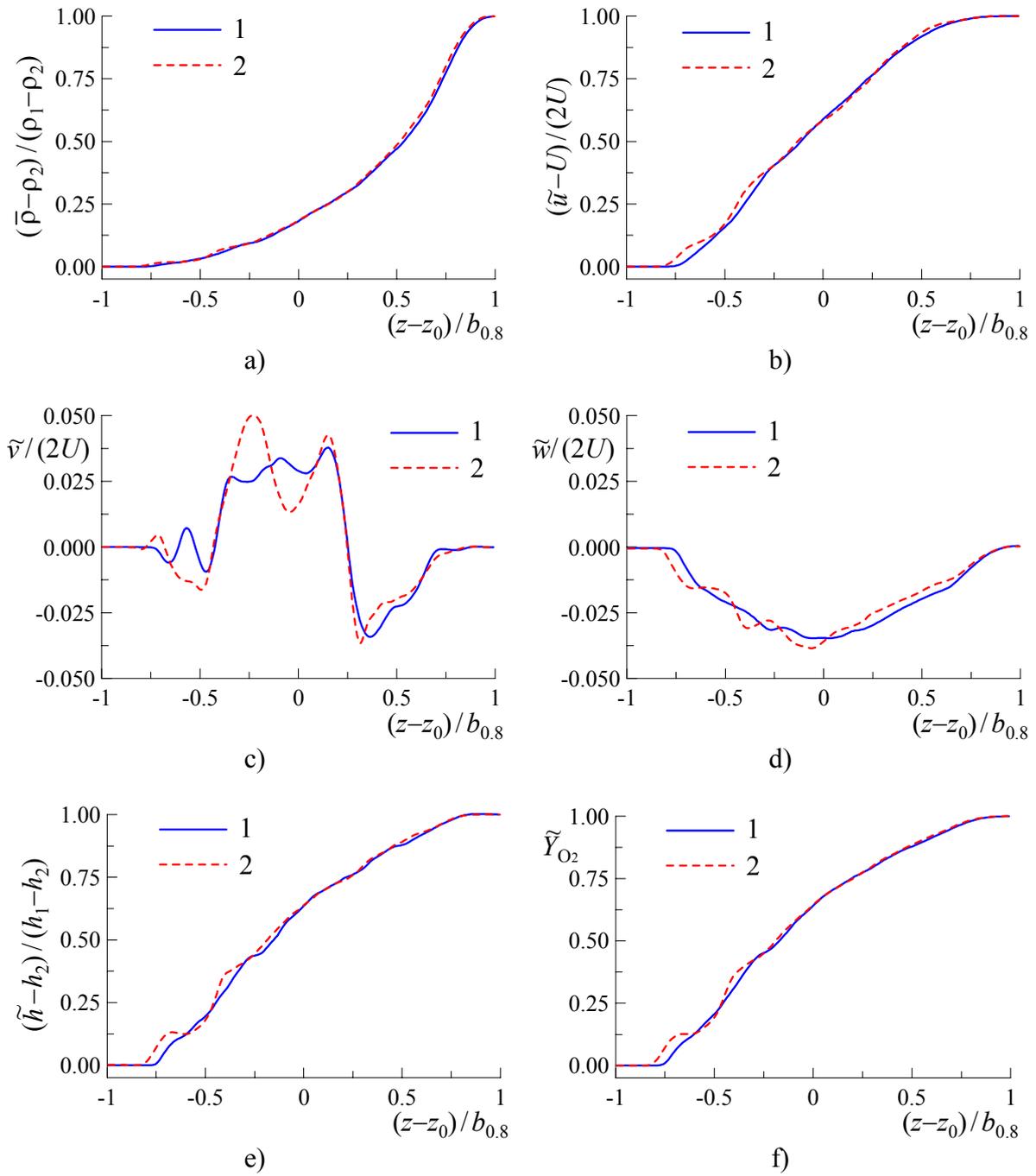


Figure 2.65. Profils des quantités moyennes selon la direction z pour les états 1 et 2 de la couche de mélange

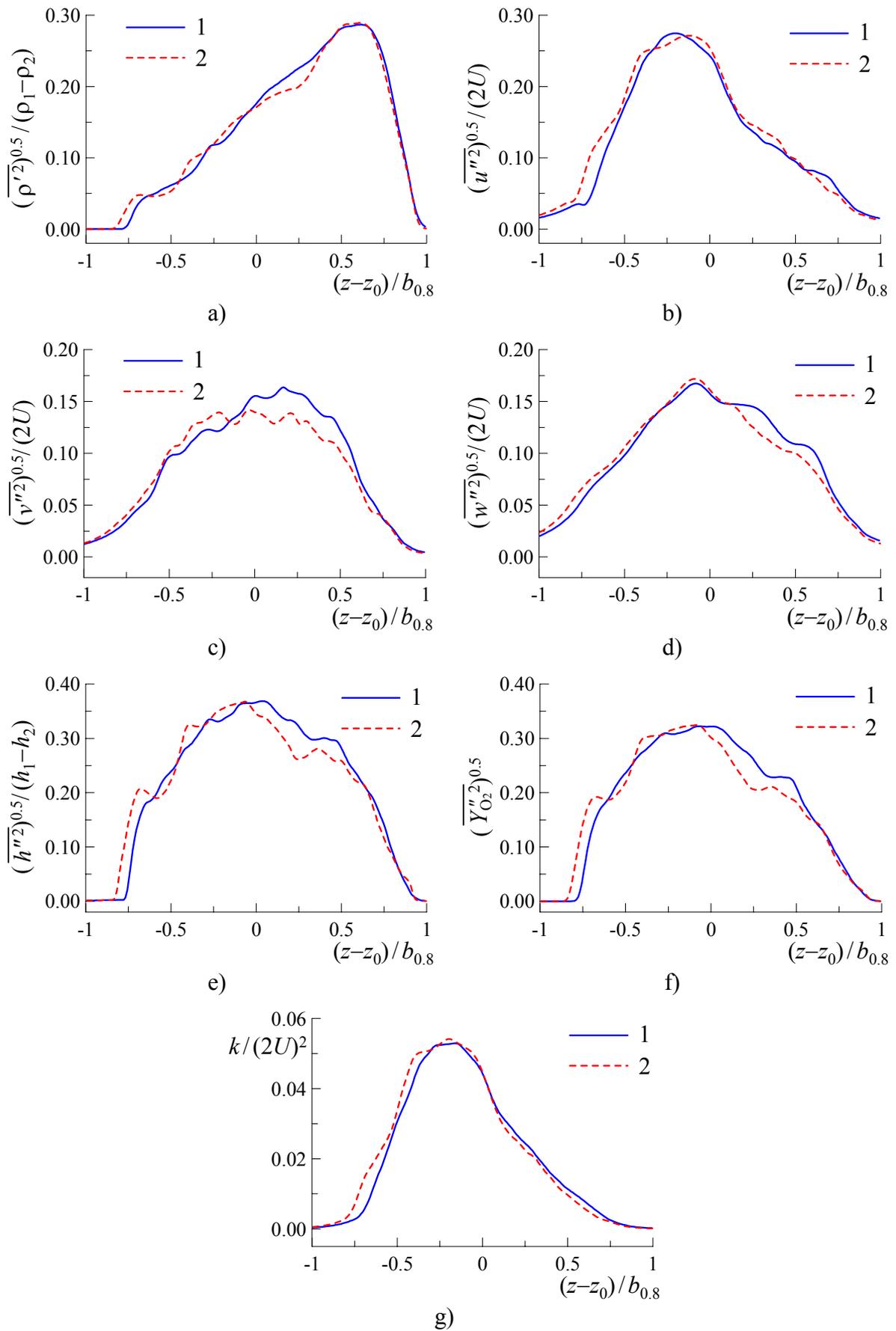


Figure 2.66. Profils des écarts-types (a-f) et de l'énergie cinétique turbulente (g) selon la direction z pour les états 1 et 2 de la couche de mélange

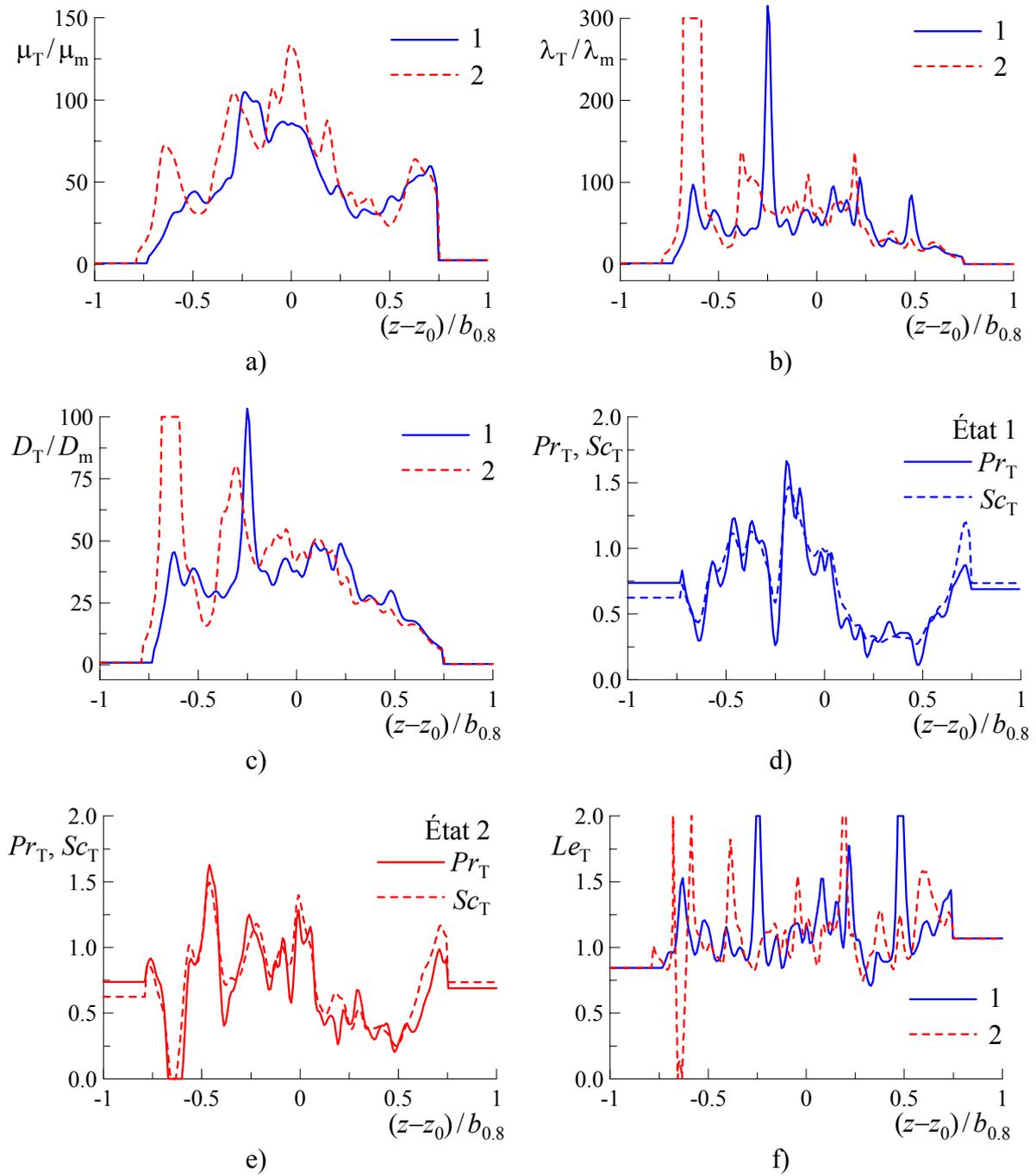


Figure 2.67. Profils des propriétés du transport turbulent selon la direction z pour les états 1 et 2 de la couche de mélange

2.6. Conclusions

Les études que nous avons réalisées concernant le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ se résument par les conclusions suivantes :

- 1) Nous avons examiné l'effet de la correction de Pope sur la solution de similitude du jet rond incompressible et proposé une limitation pour cette correction qui assure à la fois la qualité de la solution et la stabilité numérique. Nous avons mis en évidence que la seule caractéristique importante de la solution de similitude est le taux d'épanouissement $\delta_{0.5}$ du jet indépendamment du choix du coefficient $C_{\varepsilon 3}$ et du paramètre limiteur χ_{lim} . Nous avons proposé une corrélation permettant d'évaluer χ_{lim} en fonction de $\delta_{0.5}$ pour $C_{\varepsilon 3} = 0.79$. La correction de Pope limitée a été implantée dans le code MSD. Un jet rond incompressible d'air dans un co-courant du même gaz a été simulé afin de valider le modèle $k-\varepsilon$ avec la correction. La comparaison avec les résultats expérimentaux a confirmé que la correction de Pope limitée est indispensable pour simuler correctement le champ dynamique du jet. D'après cette validation, nous avons fixé le paramètre limiteur $\chi_{\text{lim}} = 0.143$.
- 2) La correction de compressibilité de Sarkar a été intégrée dans le code MSD. Plusieurs couches de mélange planes compressibles ont été simulées pour valider le code et pour étudier l'effet de cette correction sur la solution. Nous avons confirmé l'importance de la correction de Sarkar par la comparaison des résultats de simulation avec les données expérimentales sur le taux d'épaississement et sur l'énergie cinétique turbulente maximale. Nous avons démontré que les deux modèles de compressibilité considérés sont équivalents pour les cas test. Nous avons par ailleurs justifié que les couches de mélange sont en état de similitude et que la présence du canal ne les influence pas. Nous avons trouvé que les résultats de MSD sont en accord avec les résultats produits par d'autres codes. Cette validation nous a permis de choisir la correction de compressibilité sous forme du modèle de la dissipation compressible.
- 3) Le modèle $k-\varepsilon$ avec la correction de Sarkar et avec la correction de Pope limitée a été appliqué aux simulations de jets ronds compressibles. Pour plusieurs cas test, nous avons prouvé que les deux corrections sont nécessaires afin d'atteindre un bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous avons montré comment les deux corrections agissent dans différentes zones le long du jet. Nous avons mis en évidence que la correction de Sarkar est importante pour le développement de la couche cisailée compressible autour du cœur potentiel du jet alors que la correction de Pope influence principalement le jet après le cœur potentiel. Pour les cas des jets co-axiaux de H_2 , nous avons trouvé que l'action de la correction de Pope change à une grande distance de l'injecteur car elle accélère le mélange.
- 4) L'effet des conditions amont de turbulence a été examiné pour tous les cas tests des jets compressibles parce que ces conditions sont importantes pour les simulations mais elles n'ont pas été caractérisées par les moyens expérimentaux. Nous avons démontré que la turbulence initiale dans le jet influence la zone du cœur potentiel, en particulier, elle a un effet considérable sur sa longueur. En cas de co-courant, la turbulence en amont est importante pour le développement du champ lointain du jet. Nous avons réussi à accorder les résultats de simulation avec les données expérimentales grâce aux investigations sur les conditions amont de turbulence.
- 5) Nous avons étudié l'effet du nombre de Schmidt turbulent Sc_T sur le champ de composition de jets. Nous avons trouvé que le choix de Sc_T dépend des conditions particulières : $Sc_T = 0.55$ pour les jets de H_2 et $Sc_T = 0.8$ pour le jet de $He-O_2$. Ces résultats confirment en quelque sorte les considérations de Tam et Ganesan (2004) que le taux de

mélange s'intensifie avec la diminution de la masse volumique dans le jet. Nous avons justifié qu'il est possible d'obtenir une solution correcte avec un Sc_T fixe.

- 6) Notre analyse de données DNS sur une couche de mélange non isotherme bi-espèces a mis en évidence un couplage fort entre les transferts de chaleur et de masse des espèces. Nous avons confirmé l'hypothèse de l'égalité des nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents. En outre, cette hypothèse a donné un bon résultat pour le profil de température totale dans le jet de He-O₂.

Chapitre 3.

Modèles chimiques pour la combustion supersonique de l'hydrogène et du mélange méthane-hydrogène dans de l'air

3.1. Objectifs principaux et conditions générales

L'hydrogène H_2 et le méthane CH_4 sont deux combustibles importants du point de vue scientifique ainsi que pour l'application pratique. Ils sont les plus simples et les mieux étudiés. En outre, la description physico-chimique de leur oxydation est l'élément de base pour des combustibles plus complexes.

En pratique, H_2 est utilisé principalement comme combustible de moteurs-fusées de lanceurs spatiaux grâce à une haute impulsion spécifique et un pouvoir important de refroidissement. H_2 est aussi considéré comme combustible potentiel dans des projets de lanceurs propulsés par des moteurs aérobies hypersoniques durant le vol dans l'atmosphère [Bouchez et al. (2001)]. Les deux premiers démonstrateurs hypersoniques essayés en vol aux nombres de Mach de 7 et de 10 par la NASA ont été alimentés en H_2 [Vachon et al. (2005)]. Les désavantages principaux de H_2 sont reliés à sa faible masse volumique, à la nécessité d'utiliser des équipements cryotechniques et à des problèmes de sécurité. Ces facteurs limitent l'utilisation de H_2 aux appareils destinés au vol atmosphérique de type croisière jusqu'au nombre de Mach de 8-10 [Lewis (2001)].

CH_4 a une application pratique importante dans le secteur énergétique puisqu'il est le constituant majeur du gaz naturel. CH_4 n'est pas actuellement utilisé pour la propulsion aérospatiale mais il est considéré comme une alternative à H_2 car son pouvoir calorifique par unité de volume est deux fois et demi plus grand dans l'état cryogénique [Lewis (2001)]. En comparaison avec H_2 et avec d'autres hydrocarbures légers, CH_4 pur a les caractéristiques les moins favorables en terme d'inflammabilité [Turns (1996), Colket et Spadaccini (2001)], de vitesse de flamme laminaire de prémélange [Law (1993)], d'extinction de flamme laminaire de diffusion [Egolfopoulos et Dimotakis (1998)].

Les caractéristiques d'inflammation et de combustion de CH_4 peuvent être améliorées par l'ajout de H_2 [Cheng et Oppenheim (1984), Schefer et al. (2002), Dagaut et Nicolle (2005), Halter et al. (2005a,b), Petersen et al. (2005)]. L'intérêt porté au mélange CH_4 - H_2 en tant que combustible s'est considérablement accru depuis les trois dernières années. Cette tendance est attestée par la croissance du nombre de publications sur ce sujet. Pour nous, ce mélange est en effet important comme combustible modèle puisque nous pouvons contrôler ses propriétés par une simple variation des fractions des deux composants. Nous pouvons ainsi obtenir une gamme de propriétés de combustion limitée par les propriétés des deux espèces pures.

Notre objectif principal est d'établir un modèle de cinétique chimique pour la combustion du mélange CH_4 - H_2 . Ce modèle est un élément clef pour la simulation de la combustion supersonique parce que le temps de séjour du mélange réactif dans la chambre de combustion est très court donc le dégagement de chaleur dépend fortement de la cinétique chimique. Nos exigences principales concernant le modèle chimique sont les suivantes :

- 1) Le modèle doit être suffisamment compact pour que son application aux simulations de problèmes pratiques soit envisageable.
- 2) Le modèle doit être capable de prédire correctement le délai d'autoinflammation et l'évolution temporelle des quantités macroscopiques durant la combustion jusqu'à l'équilibre chimique dans les milieux homogène et avec la diffusion.

- 3) Le modèle doit être valable dans un domaine assez large de conditions en terme de pression, de température initiale et de composition du mélange. Il doit reproduire l'effet d'une viciation éventuelle de l'oxydant.

Nous avons défini le domaine de validité du modèle chimique correspondant aux conditions à l'entrée d'une chambre générique de combustion supersonique. Les conditions d'entrée ont été déterminées pour une plage de nombre de Mach de vol M_0 entre 6 et 10 et pour une plage de pression dynamique de l'écoulement libre entre 25 kPa et 100 kPa. Nous avons utilisé les approches et les modèles élaborés précédemment pour les études dont les résultats ont été publiés par Bouchez et al. (2001). À l'entrée de la chambre, la pression statique de l'écoulement d'air varie entre 60 kPa et 240 kPa à $M_0 = 6$ et entre 30 kPa et 120 kPa à $M_0 = 10$; la température statique est comprise entre 1000 K à $M_0 = 6$ et 1650 K à $M_0 = 10$; la vitesse est proche de 1250 m/s à $M_0 = 6$ et de 2600 m/s à $M_0 = 10$.

Il est difficile de caractériser les conditions statiques pour le mélange combustible car elles dépendent des conditions d'injection. À titre d'exemple, supposons que : le combustible est H_2 ; la température totale du combustible est 500 K à $M_0 = 6$ et 900 K à $M_0 = 10$; la vitesse et la pression statique d'injection sont égales à celles du courant d'air. Pour un mélange stœchiométrique, nous avons une perte de température supérieure à 100 K pour $M_0 = 6$ et supérieure à 200 K pour $M_0 = 10$. En général, plus le mélange est pauvre, plus sa température est grande.

Il est aussi important de fixer un délai d'autoinflammation admissible vu les vitesses très élevées. Si la longueur de la chambre est de l'ordre de 1 m, un délai d'autoinflammation supérieur à 1 ms n'a pas de sens pratique car le parcours de l'écoulement dépasse la longueur de la chambre.

Pour valider le modèle chimique de CH_4-H_2 , nous avons choisi les conditions suivantes : fraction massique de H_2 dans le combustible de 0 à 0.5, richesse de 0.25 à 4, température de 1000 K à 2000 K, pression de 10 kPa à 1000 kPa. Pour H_2 , nous pouvons abaisser la limite de température jusqu'à 900 K parce que H_2 pur s'enflamme plus rapidement qu'en mélange avec CH_4 . Le domaine de validité, que nous avons ainsi établi, couvre largement la variation des conditions dans la chambre de combustion supersonique.

Il est nécessaire de considérer l'effet de viciation de l'oxydant si nous voulons simuler des essais au sol pour lesquels on utilise de l'air préchauffé. Nous étudions plus loin la combustion dans une chambre expérimentale alimentée en air vicié par produits de combustion de H_2 . L'air vicié contient ainsi des radicaux actifs, de la vapeur d'eau et des oxydes d'azote. Par conséquent, nous devons analyser leur effet sur la cinétique chimique.

3.2. Synthèse bibliographique

3.2.1. Mécanismes cinétiques chimiques d'oxydation de l'hydrogène

Le mécanisme d'oxydation de H_2 a une importance particulière pour nos simulations parce que le cas test que nous avons choisi pour une étude méthodologique correspond à la combustion supersonique de H_2 . L'autoinflammation de H_2 peut être caractérisée par plusieurs modes. Dans la présente étude, nous utilisons le terme « limite d'explosion » afin de diviser le domaine de conditions d'autoinflammation en zones dans lesquelles le mode d'autoinflammation est explosif (une période d'induction suivie d'inflammation et de combustion très rapides) et thermique/explosif ou thermique (une période d'induction suivie de croissance progressive de la température et éventuellement de combustion rapide). Sur le diagramme pression-température schématisé en figure 3.1, la limite d'explosion correspond à la seconde limite d'autoinflammation puis elle continue vers les températures plus élevées.

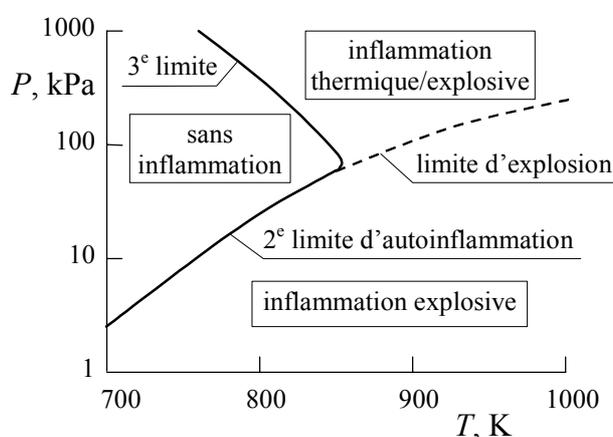


Figure 3.1. Schématisation du domaine d'autoinflammation de H_2 .

L'autoinflammation explosive se réalise par un mécanisme cinétique en chaîne. La zone au-dessous de la limite d'explosion est classiquement définie par la condition suivante :

$$2 \cdot K(H + O_2 \Rightarrow OH + O) > K(H + O_2 (+M) \Rightarrow HO_2 (+M)) \quad (3.1)$$

K est la constante de vitesse de la réaction entre parenthèses. Mueller et al. (1999a) ont mis en évidence que la limite d'explosion réelle passe au-dessus de la limite d'explosion classique à partir d'une certaine température grâce aux mécanismes en chaîne qui se réalisent *via* la consommation de HO_2 et de H_2O_2 .

Nous pouvons ranger les modèles cinétiques existants en trois groupes : mécanismes détaillés, simplifiés, réduits et globaux. Les mécanismes détaillés contiennent habituellement une vingtaine de réactions réversibles entre huit espèces réactives : H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 . L'azote N_2 et d'autres espèces neutres peuvent participer aux réactions en tant que 3^e corps. Afin de modéliser l'effet de viciation par des oxydes d'azote NO_x , le modèle chimique doit inclure un sous-mécanisme pour N_2 .

Nous n'avons pas pour but de considérer tous les mécanismes existants puisque leur quantité est trop importante et les mécanismes continuent à évoluer. Parmi les modèles cinétiques détaillés, nous devons mentionner le mécanisme de Jachimowski (1988) qui a servi de base pour des modèles cinétiques simplifiés [Eklund et al. (1990), Baurle et Girimaji (2003)]. Par des simulations, Jachimowski (1988) a mis en évidence l'importance particulière

des espèces HO₂ et H₂O₂ pour la combustion supersonique dans les conditions de vol à $M_0 \geq 8$.

Pour nos études, nous avons utilisé le mécanisme détaillé de Mueller et al. (1999a) seul ou avec le sous-mécanisme NO_x de Mueller et al. (1999b). Ce mécanisme a été validé sur les résultats d'essais avec un réacteur à écoulement dans les conditions suivantes : richesse de 0.27 à 0.97, pression de 30 kPa à 1600 kPa et température entre 880 K et 940 K.

Nous avons aussi testé et appliqué à des simulations de combustion supersonique les sous-mécanismes d'oxydation de H₂ et de N₂ du modèle GRI-Mech v.3.0¹. GRI-Mech v.3.0 a été développé essentiellement pour l'oxydation du gaz naturel. Cependant il a été validé sur une large base de données expérimentales et est devenu un des modèles les plus cités.

Del Álamo et al. (2004), Konnov (2004), Ströhle et Myhrvold (2005) ont publié des résultats de tests des mécanismes de Mueller et GRI-Mech v.3.0 en comparaison avec des données expérimentales sur le délai d'autoinflammation de H₂ dans le tube à choc. On a montré que les deux mécanismes ne donnaient pas toujours des résultats satisfaisants, en particulier GRI-Mech v.3.0 qui surestimait systématiquement le délai d'autoinflammation.

Le mécanisme détaillé d'oxydation de H₂ a été révisé par plusieurs auteurs très récemment. Les raisons pour lesquelles la révision a été faite sont les suivantes : mise à jour des données cinétiques sur les réactions élémentaires, corrections des données thermodynamiques notamment sur l'enthalpie de formation du radical OH, nécessité de valider le mécanisme sur l'ensemble compréhensif de données expérimentales. Les modèles les plus récents ont été publiés par les auteurs suivants : del Álamo et al. (2004), Li et al. (2004), Konnov (2004), Ó Conaire et al. (2004). Ce nouvel effort a produit des mécanismes qui sont encore loin d'être identiques. Des différences significatives existent en particulier pour les constantes de vitesse des réactions importantes telles que $H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$, $H + O_2 (+M) \rightleftharpoons HO_2 (+M)$, $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$. Konnov (2004) a donné les facteurs d'incertitude pour les constantes de vitesse des réactions dont la plupart sont au niveau de 2-3. Nous n'avons pas pu appliquer ces nouveaux mécanismes à des simulations de combustion supersonique à cause de leur apparition très récente.

Les mécanismes simplifiés sont composés de réactions élémentaires comme les mécanismes détaillés mais certaines espèces et réactions sont rejetées afin de rendre le modèle chimique applicable à des simulations complexes. Nous utilisons le terme « simplifié » si nous ne savons pas quels critères ont été utilisés pour la troncature. Nous avons appliqué les mécanismes publiés par Eklund et al. (1990) et par Baurle et Girimaji (2003) qui ont le même jeu de sept réactions entre les six espèces suivantes : H₂, O₂, H₂O, H, O, OH. Les deux mécanismes ont été largement utilisés pour des simulations de combustion supersonique. Le mécanisme publié par Eklund a été précédemment intégré dans le code MSD. Vu le jeu d'espèces, on peut dire *a priori* que leur domaine de validité se trouve au-dessous de la limite d'explosion.

Les mécanismes réduits sont obtenus à partir des modèles détaillés en introduisant l'approche de l'équilibre partiel pour certaines réactions et/ou l'approche de l'état quasi-stationnaire pour certaines espèces [Chen et Kollmann (1990)]. Ces approches permettent de réduire le nombre d'espèces transportées. Des exemples de mécanismes réduits élaborés pour les problèmes d'autoinflammation ont été publiés par Ju et Niioka (1994) et par Sánchez et al. (1998). Les mécanismes globaux sont exprimés par une ou deux réactions globales dont les taux sont approchés par des fonctions algébriques afin de reproduire soit des données expérimentales soit des résultats de simulation avec un mécanisme détaillé. Un tel mécanisme

¹ Smith G. P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Song S., Gardiner W. C., Lissianski V. V., Qin Z., http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html

créé par Rogers et Chinitz (1983) a été précédemment intégré dans le code MSD. Nous n'avons pas utilisé de modèles chimiques de ces deux types car son usage est réservé à des conditions très restreintes.

3.2.2. Mécanismes cinétiques chimiques d'oxydation du méthane

3.2.2.1. Mécanismes détaillés

Le mécanisme d'oxydation de CH_4 est à la base des mécanismes détaillés pour le gaz naturel et pour d'autres hydrocarbures. De nombreux mécanismes détaillés sont disponibles dans la littérature et sur l'Internet. Les mécanismes détaillés comptent plusieurs centaines de réactions mettant en jeu plusieurs dizaines d'espèces. Une vue d'ensemble de modèles applicables à l'oxydation de CH_4 et d'autres hydrocarbures a été présentée dans la publication de Simmie (2003). Simmie a donné une comparaison de cinq modèles cinétiques en terme de nombres d'espèces et de réactions communes qui justifiait qu'il n'y avait pas de description détaillée généralement acceptée pour l'oxydation de CH_4 . La même conclusion a été faite par Hughes et al. (2001) qui ont analysé quatre mécanismes détaillés en comparant les constantes de vitesse des réactions les plus importantes.

En essayant d'établir une base pour la validation de modèles réduits, nous avons choisi six mécanismes détaillés bien reconnus et disponibles sous forme informatique. La deuxième condition est importante puisque les mécanismes sont très grands et chacun s'utilise avec sa propre base thermodynamique. Voici une brève description des mécanismes sélectionnés :

GRI-Mech v.1.2²

Ce mécanisme a été développé au sein du *Gas Research Institute* (GRI) pour le gaz naturel. Il est caractérisé comme modèle cinétique optimisé car les paramètres cinétiques ont été ajustés afin de reproduire le mieux possible un ensemble de résultats expérimentaux de référence. La procédure d'optimisation a été décrite par Frenklach et al. (1992). Le mécanisme a été largement exploité dans de nombreux travaux de modélisation et de développement de mécanismes cinétiques détaillés et réduits. Parmi les mécanismes détaillés créés sur sa base, nous avons testé les mécanismes publiés par Sung et al. (1998), par Petersen et al. (1999a) et par Huang et al. (2004) ainsi que GRI-Mech v.2.11 contenant un sous-mécanisme d'oxydation de N_2 .

GRI-Mech v.3.0¹

Il s'agit de la dernière version disponible de GRI-Mech. Comme pour les versions précédentes, ce mécanisme a été développé premièrement pour le gaz naturel mais il a été validé sur une grande base de données expérimentales en particulier sur le délai d'autoinflammation des combustibles H_2 , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et certains mélanges. Le mécanisme intègre la cinétique d'oxydation de N_2 .

² Frenklach M., Wang H., Yu C.-L., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Davidson D. F., Chang E. J., Smith G. P., Golden D. M., Gardiner W. C., Lissianski V., http://diesel.me.berkeley.edu/~gri_mech/new21/version12/text12.html

Konnov v.0.5³

Ce mécanisme, créé par A. Konnov, décrit l'oxydation d'hydrocarbures légers composés d'espèces avec 2-3 atomes de C (C₂-C₃). Il contient une cinétique comprehensive pour les espèces azotées. Concernant l'autoinflammation, le mécanisme a été validé principalement sur des résultats expérimentaux pour H₂ et pour le mélange H₂-CO. Quant aux hydrocarbures, la validation portait sur la vitesse de la flamme laminaire.

LCSR

Ce mécanisme a été élaboré par une équipe scientifique du CNRS-LCSR pour l'oxydation du gaz naturel. La version de ce mécanisme utilisée dans notre étude a été établie par Voisin (1997) sur la base du mécanisme de Tan et al. (1994a). Le mécanisme inclut la cinétique d'hydrocarbures jusqu'à C₆ et d'espèces azotées. Le mécanisme a été validé sur une base de données expérimentales sur l'autoinflammation et la combustion des carburants CH₄, C₂H₆, C₃H₈, et C₂H₂ [Tan et al. (1994a,b,c), Tan et al. (1995)]. Le développement ultérieur du mécanisme a été réalisé par Dagaut (2002).

Leeds v.1.5⁴

Ce mécanisme a été développé à l'Université de Leeds. Le mécanisme décrit la cinétique d'oxydation de CH₄ ainsi que des combustibles H₂, CO, C₂H₆ et C₂H₄ dans la flamme de prémélange et dans le milieu homogène. Hughes et al. (2001) ont présenté la procédure de validation du mécanisme. Le mécanisme a été optimisé en gardant les constantes de vitesse des réactions dans les limites d'incertitude afin de faciliter ses ultérieures mises à jour et/ou extensions. Un sous-mécanisme compatible d'oxydation de N₂ a été publié sur le site de l'Université de Leeds⁵.

San Diego 20030830⁶ (CERMECH)

Ce modèle cinétique a été élaboré au sein du *Center for Energy Research* (CER) de l'Université de San Diego (California). Le mécanisme repose sur le principe d'une représentativité maximale des réactions plutôt que sur la description la plus complète des étapes élémentaires. Le mécanisme a été validé dans les conditions de flamme et d'autoinflammation des combustibles H₂, CH₄, CO, CH₃OH, C₂H₆, C₂H₄, C₂H₂, C₃H₈. Nous avons utilisé la version du mécanisme datée le 30 août 2003. Des versions plus récentes du mécanisme ainsi qu'un sous-mécanisme d'oxydation de N₂ ont été publiés sur le site de CER⁷.

Le tableau 3.1 récapitule les caractéristiques générales des mécanismes présentés ci-dessus. Le nombre d'espèces compte N₂ et Ar pour tous les mécanismes. Les réactions sont considérées comme réversibles.

³ Konnov A., Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion, <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/science/mechanism/main.html#refer>

⁴ The Leeds methane oxidation mechanism, <http://www.chem.leeds.ac.uk/Combustion/methane.htm>

⁵ Leeds NOx Mechanism, <http://www.chem.leeds.ac.uk/Combustion/nox.htm>

⁶ San Diego Mechanism 2003/08/30, <http://maemail.ucsd.edu/~combustion/cermech/olderversions/sandiego20030830/>

⁷ Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, <http://maemail.ucsd.edu/~combustion/cermech/>

Tableau 3.1. Caractéristiques des mécanismes détaillés.

Mécanisme	Combustibles	NO _x	Nombre d'espèces	Nombre de réactions
GRI-Mech v.1.2	gaz naturel	non	32	177
GRI-Mech v.3.0	gaz naturel	oui	53	325
Konnov v.0.5	CH ₄ – C ₃ H ₈	oui	127	1207
LCSR	gaz naturel	oui	101	618
Leeds v.1.5	CH ₄ – C ₂ H ₆	non	37	175
CERMECH	CH ₄ – C ₃ H ₈	non	39	173

3.2.2.2. Mécanismes squelettiques

Les mécanismes squelettiques, dédiés à une classe particulière des problèmes d'oxydation et/ou à un certain domaine de conditions, sont usuellement dérivés des mécanismes détaillés. Dans des mécanismes publiés, la description squelettique d'oxydation de CH₄ compte de quelques dizaines à une centaine de réactions entre 15-30 espèces.

L'obtention d'un mécanisme squelettique se fait par l'élimination des espèces et des réactions sans importance pour le problème considéré. Les constantes de vitesse des réactions retenues restent inchangées. De ce fait, cette méthode est identifiée comme réduction détaillée [Wang et Frenklach (1991)]. Dans la méthode de réduction systématique [Peters (1991)], la création d'un mécanisme squelettique constitue une étape nécessaire à la réduction.

Dans nos recherches bibliographiques, nous nous sommes intéressés essentiellement aux mécanismes dédiés au problème d'autoinflammation bien qu'il existe d'autres mécanismes pour la flamme [Smooke (1991), Peters et Rogg (1993)] et pour le réacteur parfaitement agité [Frousakis et Boulouchos (2000)]. Les cinq mécanismes sélectionnés pour nos études sont présentés ci-dessous.

Mécanismes de Kazakov et Frenklach

Kazakov et Frenklach⁸ ont publié deux mécanismes nommés DRM19 et DRM22. Ces mécanismes ont été obtenus à partir du mécanisme GRI-Mech v.1.2² *via* la technique de réduction détaillée [Wang et Frenklach (1991)]. DRM19 et DRM22 ont respectivement 19 et 22 espèces réactives. DRM19 peut être vu comme une version tronquée de DRM22 car il ne contient pas les espèces H₂O₂, C₂H₂ et C₂H₃. Les deux mécanismes ont été validés par rapport à GRI-Mech v.1.2 en comparant des résultats de simulation sur le délai d'autoinflammation (richesse 0.2-2, pression initiale de 10 kPa à 5000 kPa, température initiale 1300-2500 K) et sur la vitesse de flamme laminaire (pression 100 kPa et 2000 kPa) pour le mélange CH₄-air.

Mécanisme de Yungster et Rabinowitz

Yungster et Rabinowitz (1994) ont développé un mécanisme squelettique sur la base d'un modèle cinétique détaillé et de onze résultats expérimentaux sur le délai d'autoinflammation [Frenklach et al. (1992)]. Le nombre d'espèces réactives a diminué de 33 à 19 grâce à l'élimination des réactions sans importance. Le mécanisme a montré une performance proche de celle du modèle détaillé pour les délais expérimentaux d'autoinflammation et pour la vitesse de flamme dans le mélange CH₄-air stœchiométrique à

⁸ Kazakov A., Frenklach M., Reduced Reaction Sets based on GRI-Mech 1.2, <http://www.me.berkeley.edu/drm/>

pression atmosphérique. Le mécanisme squelettique a été ensuite utilisé pour des simulations bidimensionnelles de combustion induite par des ondes de choc.

Mécanisme de Petersen et Hanson

Petersen et Hanson (1999) ont proposé un mécanisme squelettique nommé REDRAM applicable au statoréacteur pour l'accélérateur de projectile. Les conditions sont caractérisées par une richesse élevée (jusqu'à 6), par une haute pression (5-30 MPa) et par une température modérée (1000-1500 K). Le modèle détaillé RAMEC [Petersen et al. (1999a)], spécialement élaboré et validé pour ce type de problème, a été choisi comme mécanisme de départ. La méthode de réduction détaillée a été utilisée en respectant le délai d'autoinflammation et la température d'équilibre chimique. Suite à la réduction, le nombre d'espèces réactives a diminué de 35 à 21. Les différences des résultats donnés par RAMEC et par le mécanisme squelettique étaient inférieures à 5 % pour le délai d'autoinflammation et à 10 K pour la température finale.

Mécanisme de Li et Williams

Li et Williams (2002) ont obtenu un mécanisme squelettique à 16 espèces réactives à partir d'un mécanisme détaillé à 30 espèces réactives. La réduction a été effectuée en respectant le délai d'autoinflammation dans le domaine de conditions suivant : richesse 0.4-3, pression initiale 100-15000 kPa, température initiale 1000-2000 K. Le mécanisme de départ et le mécanisme squelettique ont donné des résultats satisfaisants sur le délai d'autoinflammation par rapport aux résultats expérimentaux de Spadaccini et Colket (1994) et de Petersen et al. (1999b).

Le tableau 3.2 récapitule les caractéristiques générales des mécanismes squelettiques présentés ci-dessus. Le nombre d'espèces compte les espèces réactives (N_2 et Ar n'en sont pas). Les réactions sont considérées comme réversibles.

Tableau 3.2. Caractéristiques des mécanismes squelettiques.

Auteurs	Désignation	Nombre d'espèces	Nombre de réactions
Kazakov et Frenklach	DRM19	19	84
Kazakov et Frenklach	DRM22	22	104
Yungster et Rabinowitz	Yungster	19	52
Petersen et Hanson	REDRAM	21	35
Li et Williams	Li	16	24

3.2.2.3. Mécanismes réduits et globaux

Un effort remarquable de développement de mécanismes réduits et globaux a été fait dans les deux dernières décennies car ce type de modèles est nécessaire pour des simulations numériques complexes ainsi que pour des études analytiques. Les mécanismes diffèrent par leurs origines, par le niveau de complexité, par la structure et par leurs domaines de validité strictement limités.

Nous avons réussi à trouver une quinzaine de mécanismes réduits et globaux pour l'oxydation de CH_4 . Chacun d'eux a des jeux spécifiques d'espèces et de réactions, des particularités concernant l'approximation des taux des réactions et l'application pratique. Parmi ces mécanismes, il existe ceux qui ont été élaborés pour les flammes [Westbrook et Dryer (1981), Peters et Rogg (1993), Hewson et Bollig (1996), Seshadri et al. (1998)], pour l'autoinflammation [Treviño et Méndez (1992), Revel et al. (1994), Jiang et al. (1995),

Lissianski et al. (1995), Kundu et al. (1998), Li et Williams (2002)] et pour le réacteur parfaitement agité [Mulholland et al. (1992), Frousakis et Boulouchos (2000), Chang et Chen⁹].

Nous avons sélectionné les mécanismes pour l'analyse selon les critères suivants :

- Le mécanisme doit être élaboré pour le problème d'autoinflammation.
- La présence explicite d'un sous-mécanisme d'oxydation de H₂ doit permettre d'appliquer le mécanisme au mélange CH₄-H₂.
- L'expression des constantes de vitesse des réactions sous forme d'Arrhenius est préférable pour l'implantation du mécanisme dans un code de calcul.
- Le coût de calcul doit être raisonnablement faible.

Le dernier critère concerne la famille des mécanismes réduits générés automatiquement [Chen (1997)]. Nous avons testé un tel mécanisme¹⁰ dérivé de GRI-Mech v.1.2 et trouvé que, pour une simulation 0D d'autoinflammation, le mécanisme réduit était largement moins performant en terme de coût de calcul que le mécanisme de départ. Cela s'explique par le fait que le mécanisme réduit utilise intérieurement les mêmes jeux d'espèces et de réactions que le mécanisme de départ. Parmi trente espèces réactives, la moitié sont supposées en état quasi-stationnaire ce qui implique la résolution interne d'un système de quinze équations non linéaires.

Les quatre mécanismes sélectionnés sont brièvement présentés ci-dessous.

Mécanisme global de Revel

Revel et al. (1994) ont proposé un mécanisme global d'autoinflammation et de combustion de CH₄ tenant compte de la formation de NO. Ce mécanisme décrit l'oxydation de CH₄ par cinq réactions entre huit espèces (CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H₂, CH₃, CH₂O). Trois réactions irréversibles expriment la consommation de CH₄ et la production de H₂ et de CO. L'oxydation de H₂ et de CO est représentée par deux réactions réversibles. Une réaction réversible sert à décrire la formation thermique de NO.

Une forme algébrique complexe a été proposée pour les taux des réactions afin de modéliser les profils temporels de température et de concentrations dans un réacteur homogène à pression constante. Le mécanisme a été validé par comparaison à son mécanisme détaillé de départ dans les conditions suivantes : richesse 0.1-2.2, pression atmosphérique, température 900-1500 K.

Ce mécanisme pose un problème pour l'usage pratique parce que la consommation de CH₄ dépend des concentrations de CH₃ et de CH₂O. Par conséquent, elle ne commence pas avant que la concentration d'une des espèces intermédiaires soit non nulle.

Mécanisme global de Jiang

Jiang et al. (1995) ont créé un mécanisme global composé de cinq réactions entre huit espèces réactives (CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H₂, H, OH) afin de décrire l'autoinflammation et la combustion de CH₄ dans le tube à choc. Les réactions et leurs taux sont exprimés sous la forme typique pour les réactions élémentaires. Les paramètres d'Arrhenius des constantes de vitesse ont été ajustés de sorte que le mécanisme global approche les taux nets de production des espèces.

Le mécanisme global a montré un bon accord avec son mécanisme détaillé de référence en terme de composition des produits de combustion dans les conditions suivantes :

⁹ Chang W.-C., Chen J.-Y., Reduced Mechanisms based on GRI-Mech 1.2, <http://firebrand.me.berkeley.edu/griREDU.html>

¹⁰ 12-step reduced mechanism for methane oxidation, <http://www.princeton.edu/~cnflab/kinetics/12-step/>

richesse 0.25-4, pression 100-3000 kPa, température 1300-2900 K. Pour deux cas, Jiang et al. ont montré que les mécanismes global et détaillé donnaient les mêmes délais d'autoinflammation mais pendant la phase de combustion les profils temporels de concentrations s'écartaient.

Le mécanisme global implique que la consommation de CH_4 est contrôlée par le radical OH. Par conséquent, l'autoinflammation a lieu à condition qu'il y ait une quantité initiale soit des radicaux OH ou H soit des espèces H_2 ou H_2O . Dans leurs propres simulations, Jiang et al. ont supposé qu'il y avait une petite quantité de H_2O dans le mélange frais.

Mécanismes quasi-globaux de Kundu

Kundu et al. (1998) ont proposé deux mécanismes d'oxydation d'hydrocarbures dans le but de les appliquer à des problèmes de combustion de CH_4 , de C_3H_8 et du combustible « Jet-A ». L'objectif principal était de développer un mécanisme réduit capable de prédire la formation des polluants CO et NO_x au cours de combustion d'un hydrocarbure pratique. Les mécanismes composés de 13 et de 23 réactions ont été construits suivant les principes suivants :

- Une réaction irréversible globale représente la consommation du carburant. La constante de vitesse de cette réaction dépend de la pression.
- Un sous-mécanisme réduit à 8 ou à 14 réactions élémentaires décrit l'oxydation des produits de décomposition jusqu'à CO_2 et H_2O .
- La formation de NO_x est exprimée par 4 ou par 8 réactions.

Les mécanismes quasi-globaux pour CH_4 ont été validés par comparaison à un mécanisme détaillé de référence en simulant le réacteur homogène à pression constante dans les conditions suivantes : richesse 0.5-2, pression 505 kPa, température initiale 908 K. Les mécanismes quasi-globaux et le mécanisme détaillé ont donné des profils temporels de température dont les formes étaient similaires mais les délais d'autoinflammation étaient considérablement différents.

Le tableau 3.3 récapitule les caractéristiques générales des mécanismes présentés ci-dessus. Le nombre d'espèces compte les espèces réactives. Les réactions sont considérées comme réversibles.

Tableau 3.3. Caractéristiques des mécanismes réduits.

Mécanisme	Nombre d'espèces		Nombre de réactions	
	Total	Sans NO_x	Total	Sans NO_x
Revel	10	8	6	5
Jiang	8	8	5	5
Kundu (12 espèces)	12	9	13	9
Kundu (16 espèces)	16	12	23	15

3.2.3. Expériences sur l'autoinflammation

Dans le but d'évaluer les mécanismes sélectionnés, nous devons les valider à partir des résultats expérimentaux sur le délai d'autoinflammation. Il existe de nombreuses publications consacrées aux mesures expérimentales du délai d'autoinflammation dans le tube à choc. Ces données expérimentales sont habituellement utilisées pour la validation des mécanismes cinétiques en supposant que le processus d'oxydation se déroule dans un milieu homogène et

dans un volume constant [Lamoureux et al. (2002), Huang et al. (2004)]. Cela permet de mettre en œuvre un modèle 0D simple et donc applicable aux mécanismes les plus complexes.

Malgré la simplicité apparente du fonctionnement du tube à choc, la caractérisation précise des conditions derrière l'onde de choc n'est pas facile à cause des effets non idéaux. En outre, les expériences diffèrent par la technique de compression (choc incident ou réfléchi), par la composition du mélange (nature du diluant et degré de dilution) et par la méthode de détermination du délai d'autoinflammation. Spadaccini et Colket (1994), Petersen et Hanson (2001) ont analysé les erreurs et les incertitudes issues des expériences avec le tube à choc. Vu ces problèmes, il nous faut établir une base de données rassemblant un nombre considérable de résultats expérimentaux.

Les difficultés principales d'obtention de données à partir des publications sont reliées à une forme réduite de résultats, à la représentation graphique plutôt que tabulée et à la spécification incomplète des conditions après le passage du choc.

3.2.3.1. Autoinflammation de l'hydrogène

Les études expérimentales sur l'autoinflammation de H₂ dans le tube à choc menées depuis plus d'un demi-siècle ont donné un grand nombre de résultats. Nous avons essayé de sélectionner des résultats représentatifs correspondant surtout aux conditions au-dessous de la limite d'explosion.

Tableau 3.4. Expériences sur l'autoinflammation de H₂.

Source	ϕ	P , kPa	T , K	Diluant	Détection
Schott et Kinsey (1958)	0.25-2.75	≈ 50-1000	1100-2670	Ar 94-99 %	absorption par OH
Miyama et Takeyama (1964)	0.25-1	460-570	890-1350	Ar 70-90 %	absorption par OH, pression
Asaba et al. (1965)	0.085-1.6	≈ 20-40	1400-2400	Ar 96-99 %	absorption par OH
Belles et Lauver (1965)	0.125-0.6	24-53	1110-1940	N ₂ 63-75 %	émission par OH
White et Moore (1965)	0.004-50	≈ 200	1030-2200	Ar 33% ($\phi \geq 25$)	interférométrie
White (1967)	0.004-0.125	non spécifiée	1040-2150	Ar 93-96 % He 50 %	interférométrie
Jachimowski et Houghton (1971)	0.063-2	21-78	1200-1800	Ar 91-95 %	absorption par OH
Slack et Grillo (1977)	1	27-200	800-1500	N ₂ 55.6 %	émission par OH et H ₂ O, pression
Brabbs et Robertson (1987)	0.99	104-129	930-1320	Ar 94 %	pression
Paillard et Dupré (1991)	1	177-310	1120-1550	Ar 91 %	émission par OH, pression
Yuan et al. (1991)	0.056-2	131-350	1050-2700	Ar 75-99 %	absorption par OH
Wang et al. (2003)	0.42	300-1720	935-1333	N ₂ 40-67 % H ₂ O 0-40 %	émission par OH

Le tableau 3.4 regroupe les sources bibliographiques et les conditions des essais sélectionnés. La colonne « ϕ » donne la plage de richesse du mélange réactif. Les deux colonnes suivantes spécifient les plages de pression P et de température T derrière le choc. La colonne « Diluant » indique la nature et la concentration du gaz diluant le mélange de H_2 et de O_2 . La dernière colonne spécifie la méthode de détection de l'inflammation.

Les études de Slack et Grillo (1977) et de Wang et al. (2003) sont particulièrement intéressantes parce qu'elles ont fourni des résultats expérimentaux relatifs à l'effet de NO_x et de H_2O sur le délai d'autoinflammation.

Certains auteurs ont proposé des corrélations empiriques pour le délai d'autoinflammation qui peuvent être exprimées sous la forme généralisée suivante :

$$t_{inf} C_{H_2}^\alpha C_{O_2}^\beta = A \exp(\theta/T) \quad (3.2)$$

t_{inf} est le délai d'autoinflammation mesuré en s. C_{H_2} et C_{O_2} sont les concentrations de H_2 et de O_2 en mol/m^3 . La température T est exprimée en K. A , θ , α , β sont les paramètres de la corrélation dont les valeurs sont présentées dans le tableau 3.5 pour quelques exemples.

Tableau 3.5. Corrélations pour le délai d'autoinflammation de H_2 .

Source	A	θ	α	β
Schott et Kinsey (1958)	$2.254 \cdot 10^{-8}$	9132	0	1
Miyama et Takeyama (1964)	$3.715 \cdot 10^{-8}$	9533	0	1
White et Moore (1965)	$1.585 \cdot 10^{-7}$	7138	0.5	0.5
White (1967)	$3.631 \cdot 10^{-8}$	8647	0.667	0.333
Cheng et Oppenheim (1984)	$5.099 \cdot 10^{-8}$	8655	-0.14	0.56
Colket et Spadaccini (2001)	$1.600 \cdot 10^{-8}$	9913	0	1

Les corrélations de Schott et Kinsey (1958), de Miyama et Takeyama (1964), de Colket et Spadaccini (2001) ont l'exposant α égale à 0 ce qui signifie que le délai d'autoinflammation ne dépend pas de la richesse. Les autres corrélations tiennent compte de la richesse mais les dépendances sont très différentes donc il n'y a pas d'accord général entre les approximations.

3.2.3.2. Autoinflammation du méthane

La quantité et la diversité des résultats portant sur le délai d'autoinflammation de CH_4 sont très grandes. Spadaccini et Colket (1994) ont publié une large analyse des études réalisées avant les années 1990. Pour la présente étude, nous avons sélectionné quelques publications déjà revues par Spadaccini et Colket ainsi que d'autres publications. Le tableau 3.6 récapitule les informations générales sur les essais sélectionnés.

Les expériences de Seery et Bowman (1970), de Borisov et al. (1983), de Frenklach et Bornside (1984) ont été effectuées avec des mélanges réactifs concentrés. En outre, Borisov et al. (1983) ont mesuré des délais très longs (autour de 1 s) à une température basse (950-1000 K) dans un appareil statique. Plus récemment, Borisov et al. (1998) ont rapporté des incertitudes associées à leur technique expérimentale qui peuvent induire un facteur de 0.3-0.5 sur le délai d'autoinflammation. Ces incertitudes sont dues à une température non uniforme dans le mélange réactif après son admission dans un vaisseau préchauffé. Malgré ce problème, nous utilisons les résultats de Borisov et al. (1983) dans la présente analyse car nous ne connaissons pas d'autres sources de données plus fiables pour les mêmes conditions.

Tableau 3.6. Expériences sur l'autoinflammation de CH₄.

Source	ϕ	P , kPa	T , K	Diluant	Détection
Seery et Bowman (1970)	0.2-5	158-490	1350-1880	Ar 53-78 %	émission par OH, pression
Krishnan et Ravikumar (1981)	0.2-4	300-610	1570-2200	Ar 95 %	émission visible, pression
Borisov et al. (1983)	0.5-1	100	950-1820	Ar 70-82 %	absorption or émission par OH
Frenklach et Bornside (1984)	1	230-280	1400-1600	Ar 72 %	pression
Spadaccini et Colket (1994)	0.45-1.25	300-1510	1340-2030	Ar 81-91 %	émission par OH, pression
Petersen et al. (1996)	0.5-4	950-48800	1480-2040	Ar 90-99 % ou N ₂ 97 %	absorption par OH, émission par CH ₄ , pression
Hidaka et al. (1999)	0.5-2	230-370	1670-2360	Ar 95-99 %	émission par CO ₂
Lamoureux et al. (2002)	0.5-2	370-1780	1530-1980	Ar 89-97 %	émission par OH

D'autres études effectuées avec des mélanges concentrés ont été réalisées récemment par Petersen et al. (1999b) et par Huang et al. (2004) à des pressions élevées (> 1200 kPa) et à des températures basses et modérées (1000-1600 K). Ces deux études ont mis en évidence une baisse du délai d'autoinflammation par rapport à des tendances observées à des pressions modérées et à des températures relativement hautes. Nous n'avons pas utilisé les résultats de ces études car leurs conditions sont en dehors du domaine qui nous intéresse.

L'effet du diluant a été examiné par plusieurs auteurs. Petersen et al. (1996) ont comparé Ar et N₂ comme diluants, Petersen et al. (1999b) ont utilisé trois diluants Ar, He et N₂. Aucun effet notable dû au diluant n'a été observé. Par ailleurs, Lifchitz et al. (1971), Frenklach et Bornside (1984), Spadaccini et Colket (1994), Petersen et al. (1999b) ont conclu que le délai d'autoinflammation dépendait des concentrations de CH₄ et de O₂ mais pas de celle du diluant. Cela permet d'espérer qu'une corrélation établie pour le mélange CH₄-O₂-Ar doit être valable pour le mélange CH₄-air.

La plupart des corrélations proposées pour le délai d'autoinflammation peuvent être exprimées sous la forme analogue à (3.2) :

$$t_{\text{inf}} C_{\text{CH}_4}^{\alpha} C_{\text{O}_2}^{\beta} = A \exp(\theta/T) \quad (3.3)$$

Les paramètres A , θ , α , β sont donnés dans le tableau 3.7 pour quelques exemples.

Tableau 3.7. Corrélations pour le délai d'autoinflammation de CH₄.

Source	A	θ	α	β
Seery et Bowman (1970)	$1.212 \cdot 10^{-10}$	25870	-0.40	1.60
Lifchitz et al. (1971)	$5.737 \cdot 10^{-10}$	23400	-0.33	1.03
Krishnan et Ravikumar (1981)	$4.617 \cdot 10^{-10}$	22650	-0.33	1.05
Cheng et Oppenheim (1984)	$6.848 \cdot 10^{-10}$	23350	-0.48	1.94
Petersen et al. (1996)	$8.462 \cdot 10^{-11}$	26070	-0.33	1.05
Lamoureux et al. (2002)	$3.282 \cdot 10^{-11}$	27250	-0.36	1.04

Les paramètres des corrélations sont assez homogènes. À l'exception des corrélations de Seery et Bowman (1970) et de Cheng et Oppenheim (1984), les exposants des concentrations sont très proches. Spadaccini et Colket (1994) ont validé la corrélation empirique de Krishnan et Ravikumar (1981) contre un grand nombre de données expérimentales y compris leurs propres résultats.

3.2.3.3. Autoinflammation du combustible méthane-hydrogène

Les publications consacrées aux études de l'autoinflammation de CH₄-H₂ sont relativement rares. Nous en avons sélectionné cinq pour la présente étude. Le tableau 3.8 récapitule les caractéristiques générales des expériences sélectionnées.

Tableau 3.8. Expériences sur l'autoinflammation de CH₄-H₂.

Source	ζ	ϕ	P , kPa	T , K	Diluant	Détection
Skinner et Ringrose (1965)	0.91	2.8	510	970-1130	Ar 89 %	émission par OH
Lifshitz et al. (1971)	0.02-0.13	1	260-1160	1630-1760	Ar 89 %	pression, flux de chaleur
Cheng et Oppenheim (1984)	0.33-0.67	0.56-1.5	100-300	1290-2300	Ar 90 %	strioscopie, pression
Hidaka et al. (1999)	0.71-0.91	0.7-1.3	160-270	1340-1870	Ar 98 %	émission par H ₂ O
Petersen et al. (2005)	0.2-0.4	0.5	1840-2400	1130-1460	N ₂ 74 %	émission par OH et par CH, pression

ζ est la fraction molaire de H₂ dans le combustible :

$$\zeta = \frac{X_{\text{H}_2}}{X_{\text{CH}_4} + X_{\text{H}_2}} = \frac{C_{\text{H}_2}}{C_{\text{CH}_4} + C_{\text{H}_2}} \quad (3.4)$$

Skinner et Ringrose (1965) ont démontré l'effet inhibiteur de CH₄ par une comparaison de résultats obtenus pour CH₄-H₂ et pour H₂ pur. Les conditions des essais en terme de pression et de température dépassent la limite d'explosion de H₂. Le délai d'autoinflammation a été mesuré au moment où l'émission par OH avait une intensité maximale donc le délai était apparemment surestimé.

Lifshitz et al. (1971) ont au contraire analysé l'effet promoteur de H₂ par rapport à des résultats pour CH₄ pur. Ils ont proposé l'idée que l'effet promoteur avait une nature purement thermique : H₂ s'enflammait plus tôt que CH₄ en augmentant la température du mélange.

Cheng et Oppenheim (1984) ont mesuré le délai d'autoinflammation des combustibles purs et de leur mélange. Ils ont proposé les corrélations pour H₂ et pour CH₄ dont les paramètres sont présentés dans les tableaux 3.5 et 3.7. À partir de ces deux corrélations, Cheng et Oppenheim ont proposé une corrélation mixte pour CH₄-H₂ et l'ont validée sur les résultats expérimentaux. La corrélation mixte a pour forme :

$$t_{\text{inf}} C_{\text{H}_2}^{\zeta \alpha_1} C_{\text{CH}_4}^{(1-\zeta) \alpha_2} C_{\text{O}_2}^{\zeta \beta_1 + (1-\zeta) \beta_2} = A_1^\zeta A_2^{1-\zeta} \exp\left(\frac{\zeta \theta_1 + (1-\zeta) \theta_2}{T}\right) \quad (3.5)$$

Les indices « 1 » et « 2 » identifient respectivement les paramètres des corrélations (3.2) et (3.3).

Hidaka et al. (1999) ont étudié l'autoinflammation du mélange CH₄-H₂ dont le composant majoritaire était H₂ et ont comparé les résultats avec ceux pour H₂ pur. Ils ont présenté également des données sur l'autoinflammation de CH₄ dans des conditions proches (voir le tableau 3.6).

Petersen et al. (2005) ont publié quelques résultats sur l'autoinflammation de CH₄-H₂ mélangé avec de l'air à une pression élevée et à une température modérée. Dans les conditions $P = 2400$ kPa, $T < 1250$ K et $\zeta = 0.4$, ils ont observé un changement du mode d'inflammation caractérisé par une baisse de l'énergie globale d'activation.

3.2.4. Méthodes de réduction de modèles chimiques

Il existe une large diversité de méthodes de réduction de modèles chimiques. Griffiths (1995), Tomlin et al. (1997), Lissianski et al. (2000) ont donné des vues d'ensemble sur ces méthodes. Law et al. (2000) ont considéré des problèmes d'obtention et de validation de mécanismes cinétiques réduits. Ils ont démontré que la validité d'un mécanisme réduit doit être vérifiée pour des caractéristiques intégrales et locales du processus d'oxydation. En outre, Law et al. ont conclu que malgré tout l'intérêt à atteindre une réduction maximale, il faut éviter la surréduction du modèle chimique afin de ne pas perdre sa précision.

Nous n'avons pas l'intention de revisiter toutes les méthodes existantes. Celle qui nous intéresse repose sur les principes de la réduction systématique composée des étapes suivantes :

- 1) Réduction d'un mécanisme détaillé en minimisant le nombre d'espèces réactives.
- 2) Élimination des réactions sans importance pour le problème considéré.
- 3) Application de l'approche de l'état quasi-stationnaire à certaines espèces.

Il faut qu'à chaque étape de la réduction le système réactif soit testé durant la période d'oxydation et en tout point de référence du domaine de validité.

Dans un mécanisme cinétique, les espèces redondantes, pour le problème considéré, peuvent être identifiées par différentes méthodes. Une telle méthode décrite par Tomlin et al. (1997) consiste à analyser la norme des coefficients de sensibilité $S_{sq} = \partial W_s / \partial C_q$, où W_s sont les taux nets de production des espèces importantes, C_q est la concentration de l'espèce évaluée. L'espèce évaluée est jugée comme redondante si la norme est inférieure à un certain seuil.

Revel et al. (1994) ont proposé une méthode d'analyse des flux atomiques entre les espèces. Une espèce peut être rejetée si la norme des échanges d'atomes passant par cette espèce est assez petite.

Les deux méthodes sont convenables pour le traitement automatique. Leurs désavantages sont dus à leur caractère local en temps (des tests multiples sont nécessaires durant la période d'oxydation) et à l'impossibilité d'évaluer l'impact d'une espèce sur les caractéristiques intégrales du processus d'oxydation en particulier sur le délai d'autoinflammation.

Plusieurs méthodes existent pour l'évaluation de l'importance des réactions. La méthode de réduction détaillée [Wang et Frenklach (1991)] est basée sur l'analyse des taux molaires et thermiques des réactions. Deux critères sont utilisés afin d'identifier une réaction sans importance : son taux molaire est inférieur à une petite fraction du taux d'une réaction de référence qui limite l'avancement du processus global ; son taux thermique est beaucoup plus petit que le taux thermique maximal pour l'ensemble des réactions.

Une autre méthode repose sur « l'analyse des composantes principales » [Vajda et al. (1985)]. Elle consiste à construire une matrice dont les éléments caractérisent l'influence des constantes de vitesse des réactions sur les fractions des espèces. Les valeurs propres de cette

matrice correspondent à des groupes de réactions et leurs amplitudes estiment l'importance de ces groupes. L'application d'un seuil aux valeurs propres permet de diviser le mécanisme en parts influente et non influente. Parmi les réactions associées à la part influente, on retient celles qui ont des contributions significatives aux vecteurs propres respectifs.

Bhattacharjee et al. (2003) ont considéré l'élimination de réactions comme un problème d'optimisation globale dont le critère était le nombre de réactions. Pour la procédure d'optimisation, les contraintes ont été définies comme les écarts maximaux entre les termes de production de masse et de chaleur calculés avec le mécanisme de référence et avec le mécanisme réduit. En outre, Bhattacharjee et al. ont comparé des mécanismes réduits à l'aide des trois méthodes mentionnées ci-dessus pour un cas test commun. Les trois méthodes ont donné des mécanismes de taille comparable, la dernière méthode étant relativement meilleure.

Les trois méthodes d'élimination de réactions ont un caractère local permettant de réduire le nombre de réactions à un instant donné du processus d'oxydation. Aucune des trois méthodes n'est basée sur l'analyse des caractéristiques intégrales du processus d'oxydation.

Une espèce chimique est considérée en état quasi-stationnaire (EQS) si son taux de production instantané est égal à zéro. Hors équilibre chimique, l'approche EQS est valable pour une espèce donnée si ces taux de formation W_s^+ et de consommation $|W_s^-|$ sont très grands par rapport à leur somme $|W_s|$. Cela ne veut pas dire que la concentration de cette espèce est constante mais qu'elle réagit instantanément à un changement de l'état du système réactif. Si cette espèce est toujours minoritaire ($Y_s \ll 1$), son équation différentielle peut être exclue du système d'équations de bilan et sa concentration peut être déterminée par une relation algébrique en fonction des concentrations des autres espèces. L'approche EQS permet ainsi de réduire le nombre d'espèces transportées sans les exclure complètement du modèle chimique.

Plusieurs critères ont été proposés pour identifier les espèces susceptibles d'être considérées en EQS. Un critère simple est associé à la durée de vie d'une espèce qui doit être suffisamment courte pour que l'approche EQS soit applicable [Tomlin et al. (1997)]. La durée de vie peut être estimée comme $-(\partial W_s / \partial C_s)^{-1}$.

La méthode dit CSP (*Computational Singular Perturbation*) permet aussi d'identifier les espèces en EQS via l'analyse des valeurs et des vecteurs propres de la matrice jacobienne de W_s [Massias et al. (1999)]. La méthode CSP aide à séparer les réactions et les espèces associées aux échelles temporelles lentes et rapides. Les espèces caractérisées par les échelles rapides peuvent être supposées en EQS. Massias et al. ont trouvé des moyens pour caractériser les espèces globalement tout le long du processus d'oxydation.

Løvås et al. (2002) ont proposé un critère d'importance d'une espèce exprimé comme produit de la concentration, de la durée de vie et d'un coefficient de sensibilité spécifique au problème. Pour le problème d'autoinflammation, le coefficient de sensibilité peut être le rapport des erreurs causées par l'approche EQS sur le délai d'autoinflammation et sur la concentration. Løvås et al. ont comparé des mécanismes réduits dont les lots des espèces en EQS ont été formés par leur critère d'importance et par la méthode CSP pour un problème d'autoinflammation de CH_4 . Les deux méthodes ont donné des résultats comparables.

Lepage (2000) a utilisé un critère basé sur le rapport des taux de formation et de consommation d'une espèce $K' = (W_s^+ / |W_s^-| - 1)X_s$. En intégrant ce critère sur la période d'oxydation pour différentes conditions, on obtient une mesure globale qui doit être suffisamment petite pour que l'approche EQS soit applicable.

Nous pouvons conclure qu'il existe une large diversité de méthodes applicables à chaque étape de la réduction. Ces méthodes reposent parfois sur une analyse mathématique sophistiquée. Elles ont pourtant les inconvénients suivants :

- Certaines méthodes ont un caractère local qui nécessite d'élaborer des critères supplémentaires associés à l'intégralité du processus d'oxydation et du domaine de validité.
- Il est difficile de relier les critères utilisés aux erreurs globales sur les caractéristiques intégrales du processus d'oxydation et sur les quantités macroscopiques telles que la température et la masse molaire du mélange réactif. Les seuils impliqués sont assez arbitraires ce qui se traduit par la nécessité d'établir leurs valeurs empiriquement.

3.2.5. Effets de la viciation

La viciation de l'oxydant par des radicaux actifs tels que O, H et OH raccourcit toujours le délai d'autoinflammation car l'initiation de l'oxydation est moins limitative. Selon Zamansky et Borisov (1992), la concentration des radicaux doit être supérieure à 0.5 % pour que le délai d'autoinflammation soit réduit sensiblement lorsque le mode d'autoinflammation est thermique/explosive. Sander et al. (2004) ont montré que l'autoinflammation de H₂ injecté dans une chambre de combustion supersonique était fortement favorisée par les radicaux à cause d'une combustion incomplète dans le réchauffeur d'air.

La présence de H₂O en quantité appréciable augmente le délai d'autoinflammation. Cet effet a été étudié par Wang et al. (2003) dans leurs expériences avec un tube à choc. La même conclusion a été tirée par Sung et al. (1999) et par Han et al. (2004) d'après leurs simulations numériques. En phase d'inflammation, la présence de H₂O facilite la suppression des radicaux car H₂O a une grande efficacité catalytique en tant que 3^e corps dans les réactions de recombinaison et en particulier dans la réaction $H + O_2 (+M) \leftrightarrow HO_2 (+M)$ qui produit le radical HO₂ moins actif que H. En phase de combustion, H₂O joue aussi un rôle catalytique important qui promeut le dégagement de chaleur *via* la réaction $H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$. H₂O a également un effet thermodynamique proportionnel à sa fraction massique [Han et al. (2004)]. L'ajout de H₂O, ayant une grande chaleur spécifique, réduit la croissance de la température.

Dans l'air vicié contenant des produits de combustion, les oxydes d'azote NO_x sont principalement représentés par NO et par NO₂. L'effet de viciation par NO_x est complexe car il dépend de la concentration de NO_x. Slack et Grillo (1977) ont démontré qu'en petite quantité (< 0.5% en volume), NO et NO₂ catalysaient considérablement l'autoinflammation. Avec la croissance de la concentration de NO_x, l'effet catalytique se stabilisait et même s'inversait à une pression de 200 kPa. Tan et al. (1999) ont confirmé ces effets par leur expérience sur l'autoinflammation de H₂ dans une couche de diffusion avec de l'air préchauffé. Ils ont réussi à montrer que l'effet promoteur maximal de NO dépendait de la pression : la concentration optimale de NO était de 0.3 % à 50 kPa et de 0.05 % à 200 kPa. L'effet favorable est dû principalement aux réactions suivantes [Mueller et al. (1999b), Tan et al. (1999)] :



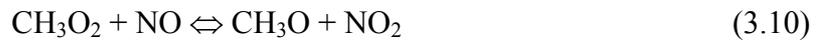
Le bilan de ces deux réactions peut s'écrire :



En quantité élevée, NO inhibe l'oxydation en contribuant à l'élimination des radicaux principalement par des réactions de recombinaison [Mueller et al. (1999b), Tan et al. (1999)]

Tan et al. (1999) ont également étudié l'effet de NO_x sur l'autoinflammation de CH₄. Cet effet est même plus fort que pour H₂ en terme de baisse de la température d'inflammation.

Selon Tan et al., l'effet cinétique de NO opère essentiellement *via* les trois réactions suivantes :



Dagaut et Nicolle (2005) ont rapporté des résultats d'une étude expérimentale et théorique concernant l'oxydation de CH₄ dans un réacteur autoagité en présence de NO dans les réactifs. Ils ont étudié l'effet de la richesse, de la pression, de la température et du temps de séjour sur la composition des produits d'oxydation. Ils ont trouvé que la réactivité du mélange croît lors de la diminution de la richesse. Sur la base d'un modèle cinétique, Dagaut et Nicolle ont confirmé l'importance particulière des réactions (3.6), (3.7) et (3.9)-(3.11) pour l'oxydation de CH₄ et pour la conversion de NO en NO₂.

Nous voyons que les effets dus à la viciation sont assez complexes. Ils peuvent soit accélérer l'autoinflammation soit la ralentir, selon les quantités de polluants.

3.2.6. Réactions dépendantes de la pression

Dans la présentation du modèle chimique détaillé réalisé dans le code MSD (section 1.1.5), nous avons donné l'expression de la constante de vitesse d'une réaction en fonction de la température. Pratiquement tous les mécanismes détaillés contemporains contiennent des réactions dont les constantes de vitesse dépendent aussi de la pression. Les expressions générales des réactions de ce type sont les suivantes :

– réaction unimoléculaire



– réaction bimoléculaire



A, B, C, D désignent des espèces chimiques. M entre parenthèses spécifie la dépendance de la pression.

Les constantes de vitesse K_0 et K_∞ , correspondant aux deux limites extrêmes de la pression $P \rightarrow 0$ et $P \rightarrow \infty$, sont exprimées de la façon habituelle par la loi d'Arrhenius (1.50). Les paramètres d'Arrhenius sont définis indépendamment pour K_0 et pour K_∞ . À une pression donnée, la constante de vitesse est déterminée par les formules suivantes :

– réaction unimoléculaire

$$K = K_\infty \frac{P_r}{P_r + 1} F \quad (3.14)$$

– réaction bimoléculaire

$$K = K_0 \frac{1}{P_r + 1} F \quad (3.15)$$

avec $P_r = C_M K_0 / K_\infty$

F est une fonction qui dépend généralement de P_r et de T . L'expression (3.14) mène à $K \rightarrow C_M K_0$ si $P \rightarrow 0$ donc la réaction (3.12) prend la forme $\text{A} + \text{M} = \text{B} + \text{C} + \text{M}$. En revanche, si $P \rightarrow \infty$, $K \rightarrow K_\infty$ donc la réaction (3.12) devient $\text{A} = \text{B} + \text{C}$. Pour une réaction bimoléculaire (3.13) c'est l'inverse : $K \rightarrow K_0$ si $P \rightarrow 0$; $K \rightarrow K_\infty / C_M$ si $P \rightarrow \infty$.

Voici les trois approximations de la fonction F le plus souvent utilisées dans les mécanismes publiés :

- Approximation de Lindemann (1922)

$$F = 1 \quad (3.16)$$

- Approximation de Troe [Gilbert et al. (1983)]

$$F = F_c^\chi \quad (3.17)$$

avec

$$F_c = (1 - \alpha) \exp \frac{-T}{T^{***}} + \alpha \exp \frac{-T}{T^*} + \exp \frac{-T^{**}}{T} \quad (3.18)$$

$$\chi = \left[1 + \left(\frac{\lg P_r + c}{n - d (\lg P_r + c)} \right)^2 \right]^{-1} \quad (3.19)$$

$$c = -0.4 - 0.67 \lg F_c, \quad n = 0.75 - 1.27 \lg F_c, \quad d = 0.14$$

$\alpha, T^{***}, T^*, T^{**}$ sont les paramètres empiriques de l'approximation.

- Approximation SRI [Stewart et al. (1989)]

$$F = d \left[a \exp \frac{-b}{T} + \exp \frac{-T}{c} \right]^\chi \quad (3.20)$$

avec

$$\chi = \frac{1}{\lg^2 P_r + 1} \quad (3.21)$$

a, b, c, d sont les paramètres empiriques de l'approximation.

3.2.7. Conclusions

Lors de nos recherches bibliographiques, nous avons trouvé un grand nombre de modèles cinétiques chimiques de tous ordres (détaillés, squelettiques, réduits et globaux). Nous avons par ailleurs découvert que la description cinétique n'est pas encore complètement établie même pour l'oxydation de H_2 . Ce fait impose la nécessité de valider les modèles sélectionnés à partir des données expérimentales sur le délai d'autoinflammation.

Vu le grand nombre de modèles à tester et la quantité considérable de résultats expérimentaux disponibles, il ne nous semble pas raisonnable de tester chaque modèle sur chaque expérience car :

- les expériences ont été effectuées dans des conditions particulières qui ne couvrent pas forcément le domaine de conditions qui nous intéresse ;
- les résultats expérimentaux ne sont pas tout à fait cohérents (désaccord entre les corrélations empiriques) tandis qu'il est impossible de vérifier quelle donnée est plus fiable.

Nous considérons qu'il est plus pertinent d'établir une corrélation empirique basée sur des résultats expérimentaux, et ensuite de tester les modèles cinétiques en utilisant la corrélation dans des conditions représentatives.

3.3. Développement d'une corrélation pour le délai d'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène avec de l'air

Pour développer une corrélation sur le délai d'autoinflammation, nous allons utiliser la forme mixte (3.5) proposée par Cheng et Oppenheim (1984). Il nous faut donc, soit revalider les corrélations existantes pour H_2 (tableau 3.4) et pour CH_4 (tableau 3.6), soit proposer de nouvelles corrélations pour l'ensemble des résultats sélectionnés.

3.3.1. Corrélation pour le délai d'autoinflammation de l'hydrogène

L'élaboration d'une corrélation sous la forme (3.2) pour H_2 est compliquée par les deux circonstances suivantes :

- 1) Une bonne moitié des résultats sélectionnés sont présentés sous la forme réduite $t_{inf} C_{H_2}^\alpha C_{O_2}^\beta$ [Schott et Kinsey (1958), Miyama et Takeyama (1964), Asaba et al. (1965), White et Moore (1965), White (1967)]. Cela empêche de choisir les exposants α et β indépendamment afin d'optimiser la corrélation. La seule cohérence entre les représentations réduites est l'égalité $\alpha + \beta = 1$. Par conséquent, si nous voulons utiliser ces résultats, nous devons nous contenter par l'optimisation d'un des exposants en gardant leur somme intacte.
- 2) Certains points expérimentaux ont été obtenus au-delà de la limite d'explosion où la variation de t_{inf} en fonction de T ne peut plus être approchée par la formule (3.2). Nous avons dû rejeter ces points en augmentant ainsi la limite inférieure de la plage de température. Cette restriction est d'autant plus sévère que la pression est grande.

Parmi les données expérimentales que nous avons rassemblées, le groupe le plus important correspond à $\phi \approx 1$. Nous l'avons choisi comme groupe de référence. Nous allons d'abord vérifier si la condition $\alpha + \beta = 1$ est applicable aux données rapportées sous forme de t_{inf} sans la réduction.

Si l'on exprime la richesse comme $\phi = C_{H_2}/(2C_{O_2})$, la corrélation (3.2) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$t_{inf} C_{O_2}^\gamma \phi^\alpha = A_\phi \exp(\theta/T) \quad (3.22)$$

avec $A_\phi = A/2^\alpha$ et $\gamma = \alpha + \beta$

Pour $\phi \approx 1$, nous avons :

$$t_{inf} C_{O_2}^\gamma = A_\phi \exp(\theta/T) \quad (3.23)$$

Le tableau 3.9 récapitule les conditions des expériences pour l'optimisation de l'exposant γ . Les expériences sont désignées par les noms des premiers auteurs (les références sont données dans le tableau 3.4). La colonne « N » indique le nombre de points expérimentaux. Il y a 58 points au total.

L'optimisation de γ a été effectuée en minimisant la somme des carrés :

$$\sum_n^{\Sigma N} [\lg(t_{inf_n} C_{O_2_n}^\gamma) - \lg(A_\phi \exp(\theta/T_n))]^2 \quad (3.24)$$

L'indice n identifie les points expérimentaux. Pour chaque valeur testée de γ , les paramètres A_ϕ et θ ont été recalculés par une procédure standard des moindres carrés. L'exposant optimal $\gamma_{opt} = 1.052$ est proche de l'unité. Le coefficient de détermination, autrement dit le coefficient

de corrélation au carré, r^2 est égal à 0.962 pour γ_{opt} et à 0.960 pour $\gamma = 1$. Nous pouvons donc admettre la condition $\alpha + \beta = 1$.

Tableau 3.9. Conditions des expériences pour l'optimisation de γ .

Expérience	ϕ	P , kPa	T , K	Diluant	N
Slack	1	27-203	1100*-1460	N ₂ 55.6 %	19
Brabbs	0.99	105-129	1000*-1320	Ar 94 %	9
Paillard	1	177-310	1120-1550	Ar 91 %	10
Yuan	1	131-308	1340-2360	Ar 97 %	20

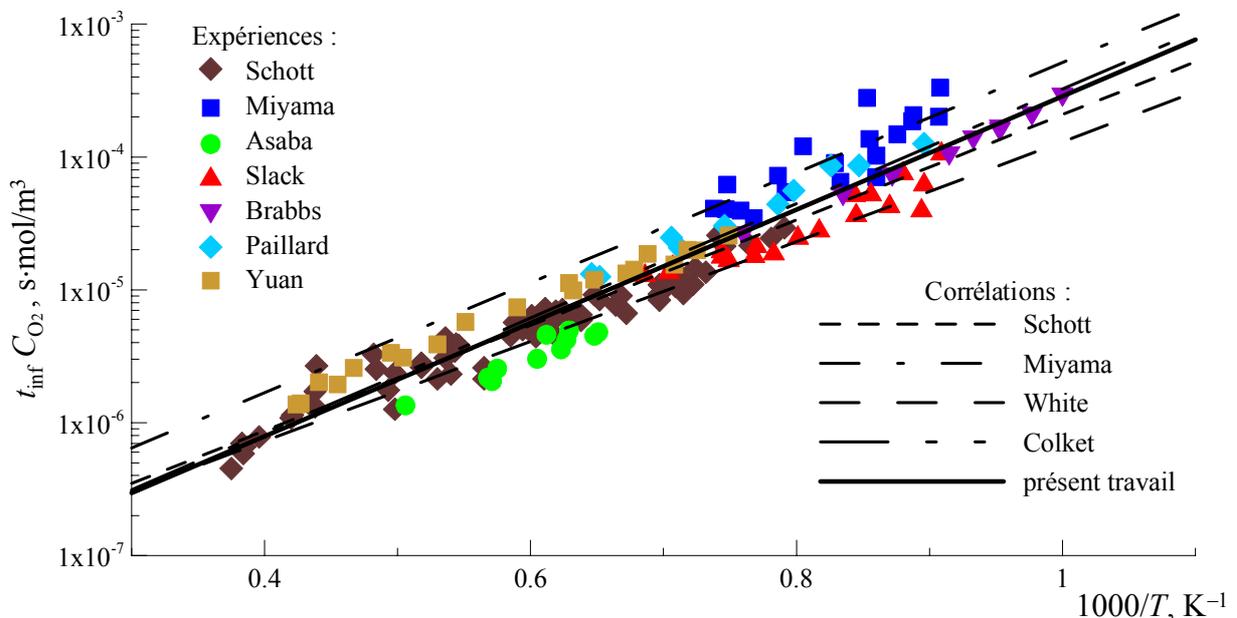
*Température restreinte par la limite d'explosion.

La corrélation finale pour $\phi \approx 1$, a été établie pour l'ensemble des données qui compte 166 points expérimentaux. Le tableau 3.10 spécifie les conditions des expériences que nous avons rajoutées au groupe présenté dans le tableau 3.9.

Tableau 3.10. Conditions des expériences supplémentaires pour $\phi \approx 1$.

Expérience	ϕ	P , kPa	T , K	Diluant	N
Schott	0.95-1	≈ 50 -1000	1270-2670	Ar 94-99 %	78
Miyama	1	≈ 450 -500	1100*-1360	Ar 70-90 %	19
Asaba	1	≈ 20 -30	1540-1980	Ar 96-97 %	11

La corrélation que nous avons obtenue pour $\phi \approx 1$ a les paramètres suivants : $A_\phi = 1.555 \cdot 10^{-8}$ et $\theta = 9820$. Elle est caractérisée par $r^2 = 0.927$. En désignant la fonction $A_\phi \exp(\theta/T)$ par $\tau_\phi(T)$, nous avons 70 % de points entre $\tau_\phi(T)/1.5$ et $\tau_\phi(T) \cdot 1.5$ et 94 % de points entre $\tau_\phi(T)/2$ et $\tau_\phi(T) \cdot 2$.

Figure 3.2. Résultats expérimentaux et corrélations empiriques sur le délai d'autoinflammation de H₂ pour $\phi \approx 1$.

Les points expérimentaux pour $\phi \approx 1$ sont affichés sur la figure 3.2 en comparaison avec la présente corrélation et les corrélations de Schott et Kinsey (1958), de Miyama et

Takeyama (1964), de White (1967) et de Colket et Spadaccini (2001). La présente corrélation est proche de la corrélation de Schott et Kinsey (1958) et elle est en très bon accord avec la corrélation de Colket et Spadaccini (2001). Les deux autres corrélations donnent des écarts importants.

Afin de rendre notre corrélation valable pour $\phi \neq 1$, nous avons optimisé le paramètre α pour les données restantes. Nous les avons regroupées selon ϕ et pour chaque groupe, nous avons déterminé une valeur optimale α_{opt} en minimisant la somme suivante :

$$\sum_n^{N_\phi} [\lg((t_{\text{inf}} C_{\text{O}_2})_n \phi^\alpha) - \lg(A_\phi \exp(\theta/T_n))]^2 \quad (3.25)$$

N_ϕ est le nombre de points dans un groupe.

Le tableau 3.11 rassemble les valeurs α_{opt} et les valeurs correspondantes de β_{opt} pour 428 points expérimentaux répartis parmi 24 groupes. Pour $\phi = 0.5$ et 2, nous avons obtenu deux paires de α_{opt} très différents à cause d'une dispersion importante des points. α_{opt} varie globalement entre -0.28 et 1.

Tableau 3.11. Exposants optimaux α_{opt} et β_{opt} selon ϕ .

Expérience	N_ϕ	ϕ	α_{opt}	$\beta_{\text{opt}} = 1 - \alpha_{\text{opt}}$
White&Moore, White	15	0.0038	0.592	0.408
White&Moore, White	15	0.0075	0.533	0.467
White&Moore, White	21	0.0155	0.551	0.449
White&Moore	19	0.032	0.499	0.501
White&Moore	7	0.050	0.451	0.549
Yuan	16	0.056	0.495	0.505
Jachimowski	14	0.063	0.319	0.681
Asaba	10	0.085	0.158	0.842
Belles, White, Jachimowski	71	0.125	0.441	0.559
Asaba	10	0.145	-0.028	1.028
Asaba, White&Moore	22	0.165	0.289	0.711
Schott, Miyama, Yuan	42	0.25	0.391	0.609
Miyama, Asaba, Jachimowski	35	0.50	-0.280	1.280
Yuan	10	0.50	0.741	0.259
Belles	26	0.60	-0.041	1.041
Asaba	10	1.60	1.000	0.000
Jachimowski	19	2.0	0.510	0.490
Yuan	18	2.0	-0.220	1.220
Schott	12	2.75	0.104	0.896
White&Moore	8	3.5	0.155	0.845
White&Moore	8	6.0	0.290	0.710
White&Moore	9	12.0	0.376	0.624
White&Moore	9	25	0.274	0.726
White&Moore	2	50	0.230	0.770

Les résultats d'optimisation sont illustrés sur la figure 3.3. La taille des marques, associées aux groupes de données, varie en fonction de N_ϕ . La dispersion maximale est observée dans l'intervalle de ϕ entre 0.1 et 2. La ligne droite représente une approximation logarithmique exprimée par la formule :

$$\alpha_{\text{opt}} = -0.1233 \lg \phi + 0.2308 \quad (3.26)$$

La moyenne des valeurs α_{opt} pondérées par N_ϕ est égale à 0.309.

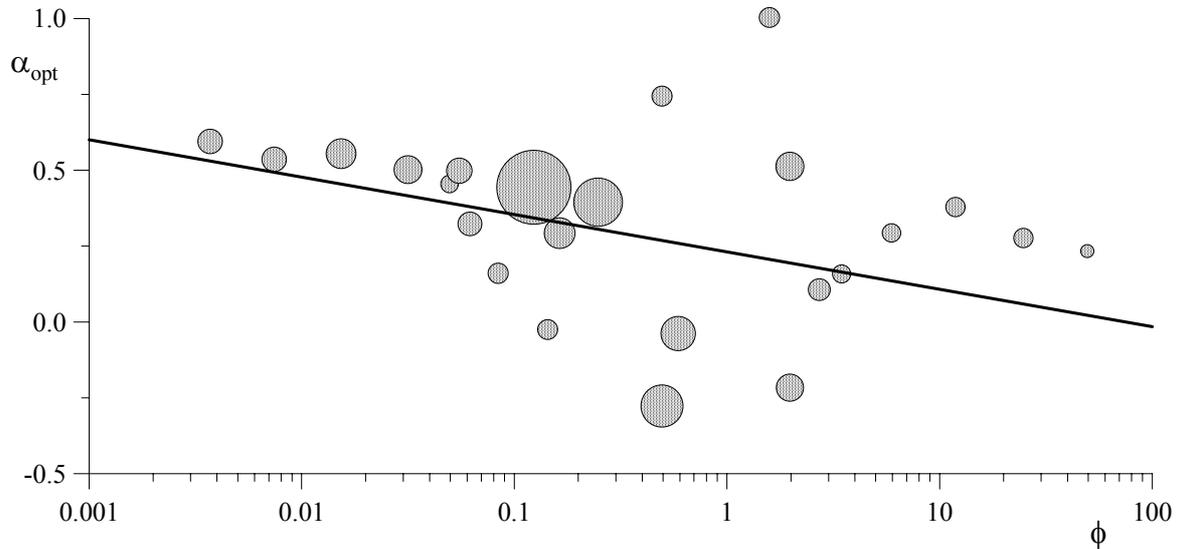


Figure 3.3. Résultats d'optimisation de l'exposant α en fonction de la richesse (la taille des marques est proportionnelle au nombre de données utilisées) et leur approximation logarithmique.

Une comparaison des résultats expérimentaux pour ϕ variable et de la corrélation (3.22) est présentée sur la figure 3.4 pour deux approches : a) l'exposant α dépend de ϕ selon l'approximation $\alpha_{\text{opt}}(\phi)$ (3.26) ; b) l'exposant α est constant et égal à 0.309. Nous voyons que la première approche donne une dispersion moins grande parce que α suit mieux les valeurs de α_{opt} . Avec $\alpha = 0.309$, les points issus des publications de White et Moore (1965) et de White (1967) s'écartent de la tendance générale tandis que les autres points ne sont visiblement pas influencés. Nous avons aussi tracé les limites de variation du délai définies par des facteurs de 1.5 et de 2 par rapport à la corrélation.

Les caractéristiques des deux approches pour α sont résumées dans le tableau 3.12. Nous pouvons constater que les deux approches sont statistiquement équivalentes si les données de White et Moore (1965) et de White (1967) ne sont pas considérées.

Tableau 3.12. Caractéristiques des corrélations sur la figure 3.4.

Données	α	r^2	Pourcentage de points entre	
			$\tau_\phi(T)/1.5$ et $\tau_\phi(T) \cdot 1.5$	$\tau_\phi(T)/2$ et $\tau_\phi(T) \cdot 2$
White&Moore et White incluses	$\alpha_{\text{opt}}(\phi)$	0.898	60 %	89 %
	0.309	0.847	54 %	82 %
White&Moore et White exclues	$\alpha_{\text{opt}}(\phi)$	0.916	64 %	91 %
	0.309	0.912	61 %	92 %

Pour la suite de notre étude, nous prenons la corrélation avec $\alpha = 0.309$ dont la forme finale est :

$$t_{\text{inf}} C_{\text{H}_2}^{0.309} C_{\text{O}_2}^{0.691} = 1.927 \cdot 10^{-8} \exp(9820/T) \quad (3.27)$$

Nous avons ainsi proposé une nouvelle corrélation pour le délai d'autoinflammation de H_2 basée sur environ 600 points expérimentaux couvrant un large domaine de conditions

en termes de richesse, de pression et de température. Notre corrélation est proche de celle de Colket et Spadaccini (2001) pour $\phi = 1$ mais elle tient compte de l'effet de ϕ qui paraît important. Elle est valable au-dessous de la limite d'explosion.

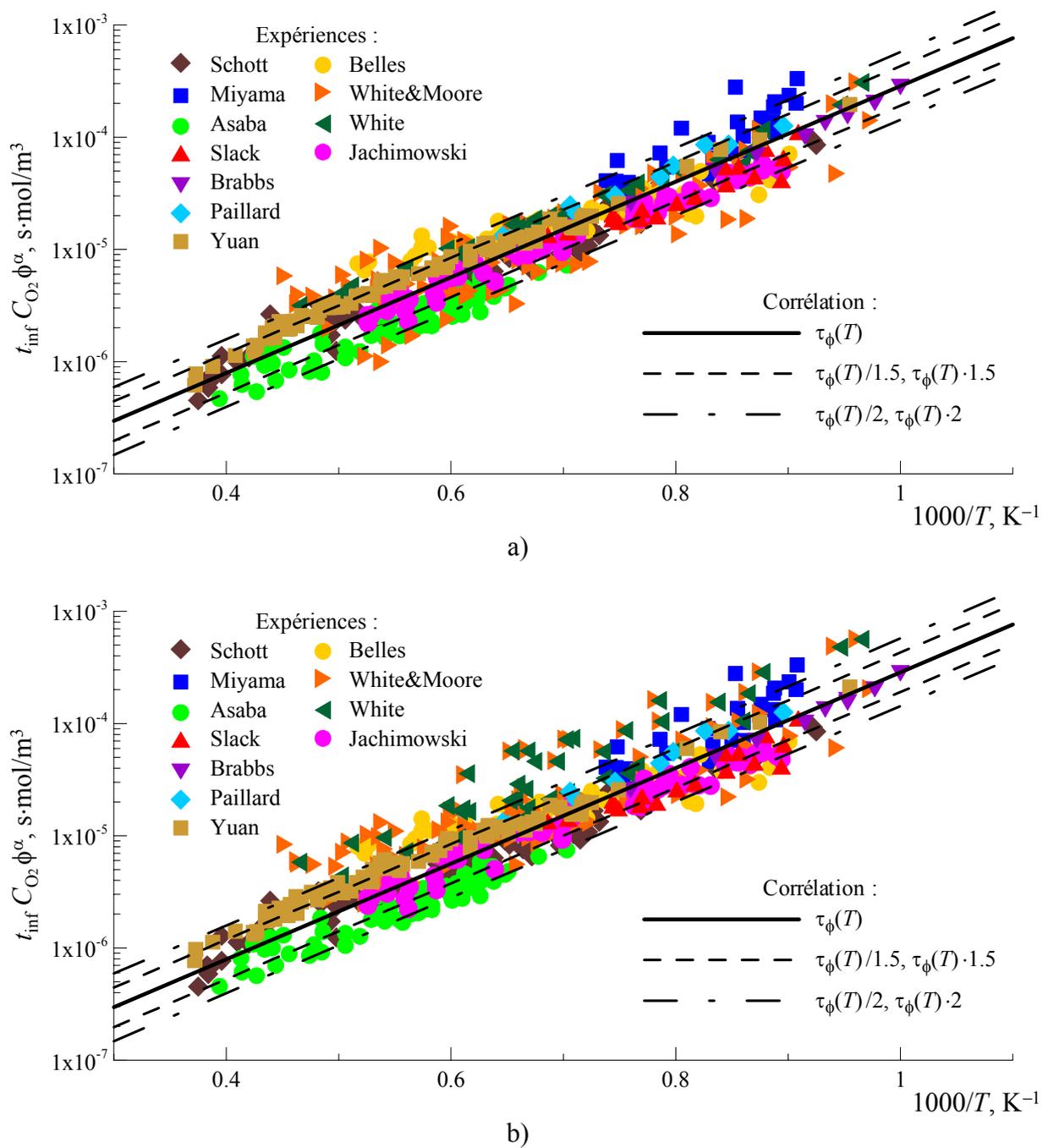


Figure 3.4. Corrélations des résultats expérimentaux sur le délai d'autoinflammation de H₂ :
 a) $\alpha = \alpha_{opt}(\phi)$; b) $\alpha = 0.309$.

3.3.2. Corrélation pour le délai d'autoinflammation du méthane

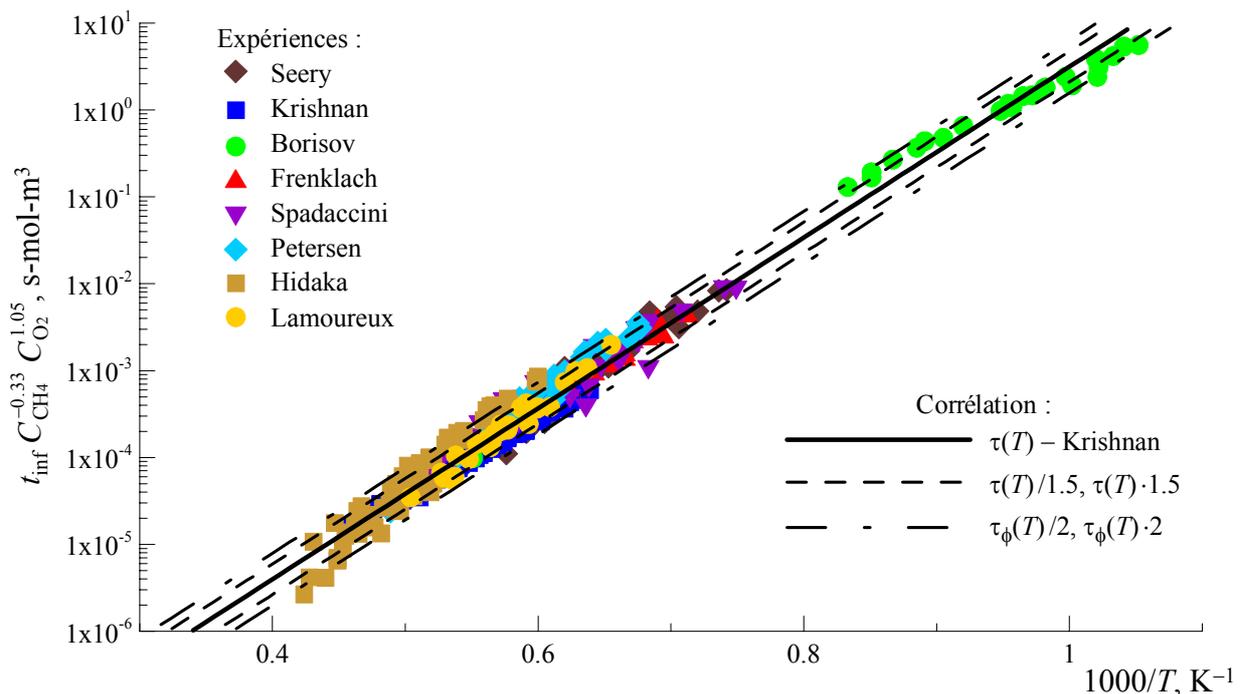
Comme nous l'avons remarqué plus tôt, les paramètres des corrélations sur le délai d'autoinflammation de CH_4 , présentées dans le tableau 3.7, sont assez homogènes. Nous revalidons les corrélations sélectionnées sur les résultats des expériences dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau 3.6. La totalité des résultats compte 384 points.

Le tableau 3.13 donne les valeurs du coefficient de détermination r^2 évalué pour les six corrélations. Les corrélations sont identifiées par le nom du premier auteur. Nous constatons que la corrélation de Krishnan et Ravikumar (1981) a le coefficient r^2 le plus grand. Cette corrélation est encore plus préférable car elle a été déjà validée par Spadaccini et Colket (1994) à partir d'un autre ensemble de données expérimentales.

Tableau 3.13. Évaluation des corrélations pour le délai d'autoinflammation de CH_4 .

Corrélation	Seery	Lifchitz	Krishnan	Cheng	Petersen	Lamoureux
r^2	0.939	0.934	0.982	0.911	0.959	0.960

La figure 3.5 montre les points expérimentaux et la corrélation de Krishnan et Ravikumar (1981) ainsi que les limites de variation définies par des facteurs de 1.5 et de 2. D'après nos estimations, la variation du délai expérimental par rapport à l'approximation est quantifiée par un facteur inférieur à 1.5 pour 79 % de points et par un facteur inférieur à 2 pour 96 % des points.

Figure 3.5. Corrélation des résultats expérimentaux sur le délai d'autoinflammation de CH_4 .

Nous avons ainsi revalidé la corrélation de Krishnan et Ravikumar (1981) sur un ensemble important de données expérimentales qui couvre un large domaine de conditions en termes de richesse, de pression et de température.

3.3.3. Corrélation pour le délai d'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène

Pour le délai d'autoinflammation du combustible CH₄-H₂, nous avons construit une corrélation mixte selon (3.5) sur la base de la corrélation (3.27) pour H₂ et de la corrélation de Krishnan et Ravikumar (1981) pour CH₄.

La corrélation mixte obtenue ainsi prend la forme suivante :

$$t_{\text{inf}} C_{\text{H}_2}^{0.31\zeta} C_{\text{CH}_4}^{-0.33(1-\zeta)} C_{\text{O}_2}^{0.69\zeta+1.05(1-\zeta)} = (1.927 \cdot 10^{-8})^\zeta (4.617 \cdot 10^{-10})^{1-\zeta} \exp\left(\frac{9820\zeta + 22650(1-\zeta)}{T}\right) \quad (3.28)$$

Nous validons cette corrélation contre quelques résultats expérimentaux disponibles issus des expériences dont les conditions sont résumées dans le tableau 3.8. Nous la comparons en même temps avec la corrélation de Cheng et Oppenheim (1984) qui a pour forme :

$$t_{\text{inf}} C_{\text{H}_2}^{-0.14\zeta} C_{\text{CH}_4}^{-0.48(1-\zeta)} C_{\text{O}_2}^{0.56\zeta+1.94(1-\zeta)} = (5.099 \cdot 10^{-8})^\zeta (6.848 \cdot 10^{-10})^{1-\zeta} \exp\left(\frac{8655\zeta + 23350(1-\zeta)}{T}\right) \quad (3.29)$$

La comparaison est présentée sur la figure 3.6 pour les cinq expériences sélectionnées. Puisque les membres de gauche des deux corrélations sont différents, nous comparons les données brutes sur le délai d'autoinflammation t_{inf} .

Les résultats de Skinner et Ringrose (1965) sont montrés sur la figure 3.6(a). Comme nous l'avons remarqué précédemment, les conditions expérimentales dépassent la limite d'explosion de H₂, ainsi cette comparaison donne plutôt un exemple d'application des corrélations hors de leur domaine de validité.

Les corrélations sont en meilleur accord avec les résultats de Lifshitz et al. (1971) présentés sur la figure 3.6(b). La corrélation de Cheng et Oppenheim (1984) est plus proche des points expérimentaux pour CH₄ pur ($\zeta = 0$), en revanche, notre corrélation est plus correcte pour le mélange avec une faible fraction de H₂.

Les résultats de Cheng et Oppenheim (1984) sont donnés sur la figure 3.6(c). Comme dans le cas précédent, la corrélation de Cheng et Oppenheim (1984) est meilleure pour CH₄ pur ($\zeta = 0$) mais pour le mélange CH₄-H₂ ($\zeta = 0.67$) et pour H₂ pur ($\zeta = 1$), les deux corrélations sont pratiquement équivalentes.

En considérant les résultats de Hidaka et al. (1999) sur la figure 3.6(d), nous pouvons conclure que notre corrélation est définitivement meilleure sauf pour le mélange avec $\zeta = 0.71$ pour lequel les deux corrélations ont donné des délais identiques. Notre corrélation est aussi en meilleur accord avec les résultats de Petersen et al. (2005) montrés sur la figure 3.6(e).

La présente analyse suggère que la corrélation (3.28) donne des prédictions satisfaisantes compte tenu de l'amplitude de la dispersion des données expérimentales pour H₂ (figure 3.4) et pour CH₄ (figure 3.5). Pourtant, nous avons vu que la corrélation de Cheng et Oppenheim (1984) donnait parfois un meilleur accord avec l'expérience. Les deux corrélations sont retenues pour la suite de notre étude.

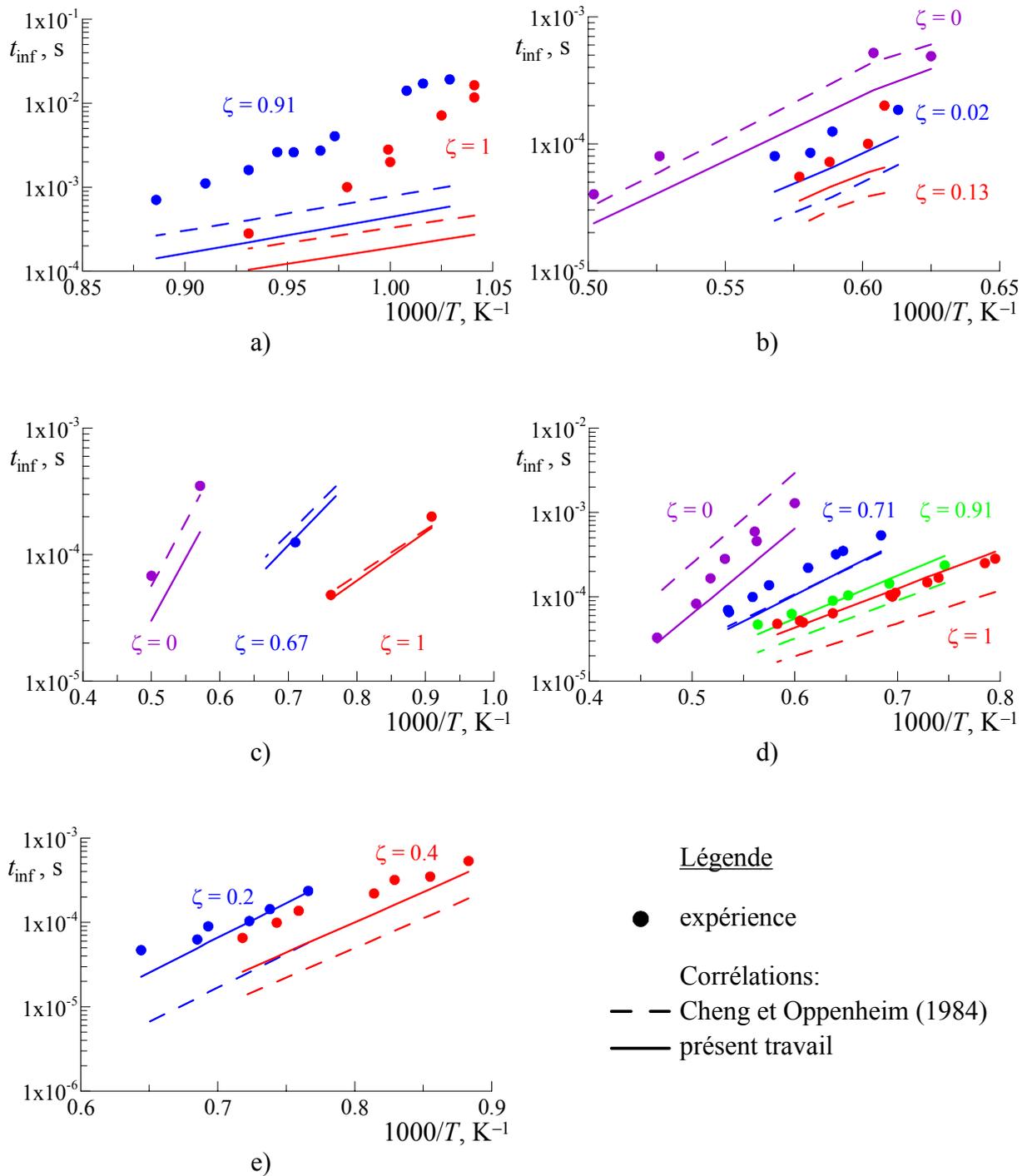


Figure 3.6. Délai d'autoinflammation du mélange CH₄-H₂ et des combustibles purs prédit par les corrélations en comparaison avec les résultats expérimentaux :
 a) Skinner et Ringrose (1965), b) Lifshitz et al. (1971),
 c) Cheng et Oppenheim (1984), d) Hidaka et al. (1999),
 e) Petersen et al. (2005)

Au début du chapitre en cours, nous avons fixé une limite maximale de 1 ms pour le délai d'autoinflammation. La corrélation (3.28) nous permet d'évaluer la température correspondant à cette limite, que nous désignons par $T_{1\text{ ms}}$, pour $\text{CH}_4\text{-H}_2$ en mélange avec de l'air. $T_{1\text{ ms}}$ peut être vue comme une limite d'inflammation en terme de température du mélange pour une chambre de combustion supersonique. Afin de calculer $T_{1\text{ ms}}$, nous avons considéré trois compositions du combustible : CH_4 pur ($\zeta = 0$), mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ ($\zeta = 0.5$) et H_2 pur ($\zeta = 1$). La fraction massique de H_2 dans le mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ contenant 50 % de H_2 en volume est égale à 11 %. La figure 3.7 montre l'évolution de $T_{1\text{ ms}}$ en fonction de ϕ pour les trois combustibles et pour trois pressions : 50 kPa, 100 kPa et 200 kPa. $T_{1\text{ ms}}$ augmente lorsque P et ζ diminuent. L'augmentation de $T_{1\text{ ms}}$ lors de la croissance de ϕ est significative pour $\zeta < 0.5$. Parmi les facteurs examinés, ζ est le plus fort. En observant les résultats pour $\zeta = 0$ et $\zeta = 0.5$, nous pouvons conclure que l'autoinflammation est réalisable si la température est supérieure à 1400-1550 K pour $\zeta = 0$ et à 1150-1300 K pour $\zeta = 0.5$. La différence moyenne de $T_{1\text{ ms}}$ à $\zeta = 0$ et à $\zeta = 0.5$ est d'environ 260 K. Pour H_2 pur, la corrélation a prédit un niveau très bas de $T_{1\text{ ms}}$ qui dépasse certainement le domaine de validité de la corrélation.

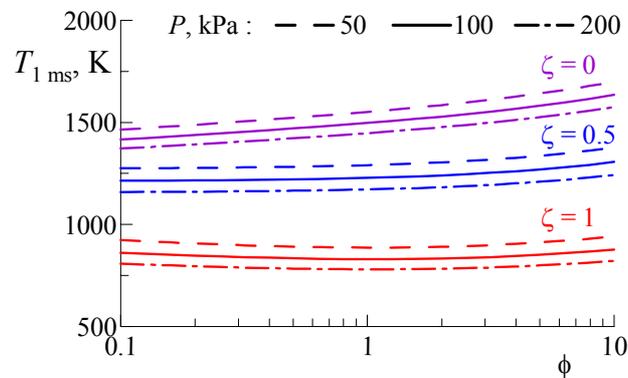


Figure 3.7. Température en fonction de la richesse pour $t_{\text{inf}} = 1$ ms.

3.4. Analyse de performances de mécanismes cinétiques chimiques

3.4.1. Méthode d'analyse

Dans la section précédente, nous avons choisi deux corrélations empiriques que nous allons utiliser comme représentants de résultats expérimentaux pour tester les mécanismes cinétiques chimiques présentés dans la section 3.2. Afin de faire une première évaluation, nous allons comparer les délais d'autoinflammation prédits par les corrélations et par les mécanismes cinétiques pour plusieurs compositions du combustible CH₄-H₂. Nous allons ensuite considérer l'effet de H₂O et de NO_x sur le délai d'autoinflammation de H₂ sur la base de données expérimentales particulières.

Nous ne pouvons pas avoir une confiance totale en corrélations sélectionnées car elles sont des modèles très simples. D'après notre précédente analyse, la variation du délai expérimental est limitée par un facteur de 2 pour la majorité absolue des points expérimentaux. Par conséquent, un résultat de simulation a peu de chance d'être correct si son écart aux corrélations est mesuré par un facteur supérieur à 2 sauf hors du domaine de validité des corrélations.

Les corrélations empiriques ont été obtenues sur la base de résultats issus d'expériences avec le tube à choc. Le modèle couramment utilisé pour simuler l'autoinflammation dans un tube à choc est représenté par un réacteur homogène fermé à volume constant [Lamoureux et al. (2002), Huang et al. (2004)].

La plupart des calculs cinétiques, dont les résultats sont analysés par la suite, ont été effectués à l'aide du code SENKIN appartenant à la bibliothèque numérique CHEMKIN-II, version 4.4. Cette bibliothèque a été développée au sein de Sandia National Laboratories à Livermore en Californie. Le code SENKIN a été choisi car tous les mécanismes détaillés ont le format compatible avec CHEMKIN-II. Les détails concernant la bibliothèque CHEMKIN-II et le code SENKIN sont décrits dans les rapports de Kee et al. (1989) et de Lutz et al. (1988).

SENKIN permet de simuler l'évolution temporelle de l'état d'un système réactif homogène fermé. Nous avons principalement exploité les approches de masse volumique constante et de pression constante. Le code résout le système d'équations différentielles suivant :

$$\frac{dY_s}{dt} = \frac{W_s}{\rho} \quad (3.30)$$

– masse volumique constante

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\rho c_V} \sum_s^{N_s} e_s W_s \quad (3.31a)$$

– pression constante

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\rho c_P} \sum_s^{N_s} h_s W_s \quad (3.31b)$$

Nous avons eu quelques problèmes numériques avec le code SENKIN en essayant de mettre en œuvre les mécanismes globaux et semi-globaux pour CH₄. Puisque l'interface du code ne permet pas de contrôler le solveur numérique, nous avons créé un code de calcul spécialisé sur la base des routines de CHEMKIN-II. Notre code intègre les équations (3.30) et

(3.31) selon le schéma semi-implicite d'ordre deux de Crank-Nicolson et utilise la méthode de Newton-Raphson à chaque pas de temps pour résoudre le système d'équations implicites. Le pas de temps est limité par la condition suivante :

$$1.5^{-1} < Y_{sn+1}/Y_{sn} < 1.5 \quad (3.32)$$

n est le numéro du pas de temps. Cette condition limite suffisamment le pas de temps pour que le schéma d'intégration produise une solution précise.

Le délai d'autoinflammation peut être défini selon plusieurs critères. D'après notre étude bibliographique, les critères expérimentaux sont divers. Par conséquent, les corrélations donnent une estimation moyenne du délai pour l'ensemble des critères utilisés. Le code SENKIN offre la possibilité de déterminer le délai d'autoinflammation à l'instant où la température atteint un niveau prédéfini. Cette méthode est rarement mentionnée dans la littérature car il est difficile de la relier aux conditions d'essai. Lamoureux et al. (2002) ont choisi l'instant du maximum de dT/dt comme le moment d'inflammation. D'après notre expérience, le maximum de dT/dt est observé pendant la phase de combustion quand la température augmente considérablement. Si la température initiale est grande, la durée de la phase de combustion devient comparable avec la période d'induction donc cette dernière méthode peut surestimer le délai d'autoinflammation. Huang et al. (2004) ont préféré une méthode de détection d'un changement brusque de pression et de température sans préciser les détails. Nous avons choisi une méthode utilisée souvent dans l'expérience selon laquelle l'instant d'inflammation est déterminé par l'intersection de la pente maximale de la courbe de pression avec le niveau initial [Petersen et al. (1996)]. Le délai d'autoinflammation est ainsi calculé comme :

$$t_{\text{inf}} = t(P'_{\text{max}}) - [P(P'_{\text{max}}) - P_{\text{ini}}]/P'_{\text{max}} \quad (3.33)$$

P_{ini} est la pression initiale. P'_{max} est la dérivée dP/dt maximale.

Pour caractériser la composition du combustible $\text{CH}_4\text{-H}_2$, nous utilisons la fraction massique de H_2 dans le combustible :

$$\eta = \frac{Y_{\text{H}_2}}{Y_{\text{CH}_4} + Y_{\text{H}_2}} \quad (3.34)$$

La fraction massique η est préférable à la fraction volumique ζ quand il s'agit des applications énergétiques.

Les conditions suivantes ont été choisies pour tester les mécanismes cinétiques : $\phi = 0.25\text{-}4$, $P_{\text{ini}} = 100$ kPa, $T_{\text{ini}} = 1000\text{-}2000$ K. Les cinq compositions considérées sont caractérisées par les valeurs suivantes de η et de ζ : a) $\eta = \zeta = 0$; b) $\eta = 0.05$, $\zeta = 0.295$; c) $\eta = 0.1$, $\zeta = 0.469$; d) $\eta = 0.2$, $\zeta = 0.666$ e) $\eta = \zeta = 1$.

3.4.2. Simulations d'autoinflammation de $\text{CH}_4\text{-H}_2$ dans de l'air pur avec les mécanismes détaillés

Les six mécanismes détaillés, présentés dans la section 3.2.2.1, ont été testés. Les résultats de simulation sur le délai d'autoinflammation de CH_4 dans de l'air pur sont comparés aux corrélations sur la figure 3.8 pour quatre températures initiales $T_{\text{ini}} = 1000$ K, 1200 K, 1500 K et 2000 K. Les courbes de t_{inf} sont tracées en fonction de ϕ . La corrélation de Cheng et Oppenheim (1984) est limitée à l'intervalle $\phi = 0.6\text{-}1.5$. Cet intervalle correspond à peu près à la plage expérimentale de ϕ pour laquelle la corrélation a été établie.

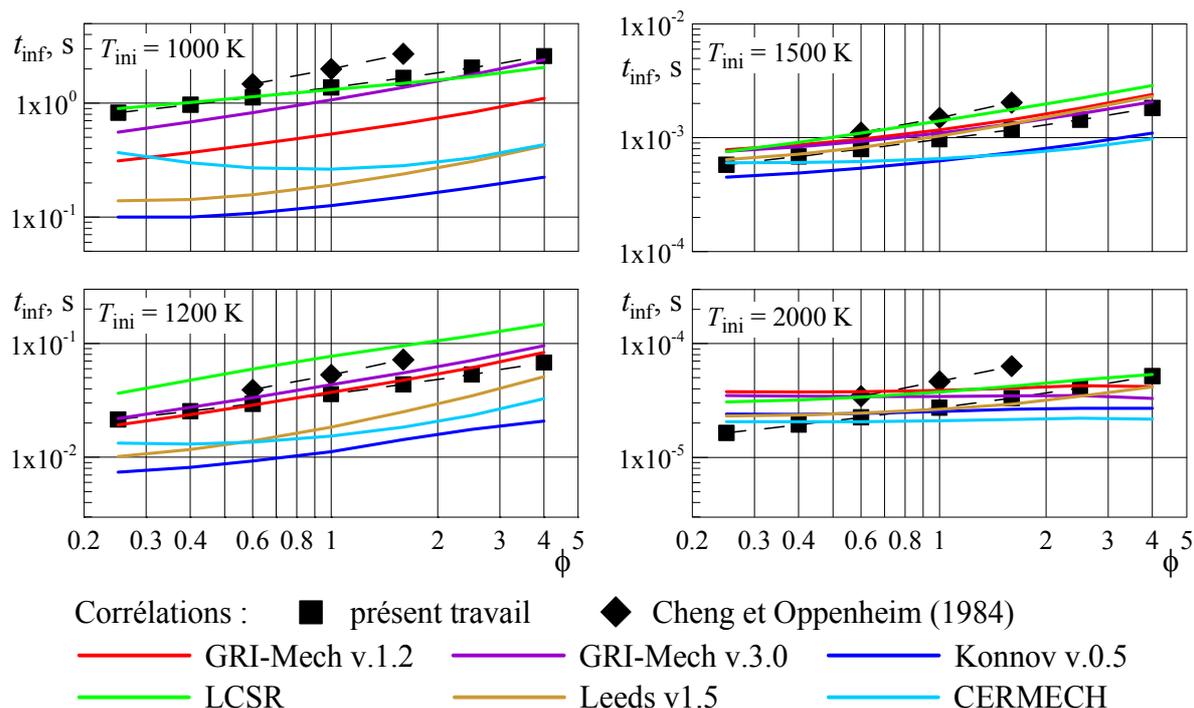


Figure 3.8. Mécanismes détaillés : Délai d'autoinflammation pour $\eta = 0$.

À $T_{ini} = 1000$ K, seuls les mécanismes LCSR et GRI-Mech v.3.0 ont donné des délais proches des corrélations. Les autres mécanismes ont prédit des délais beaucoup plus courts, surtout le mécanisme Konnov v.0.5. À $T_{ini} = 1200$ K, GRI-Mech v.1.2 et GRI-Mech v.3.0 sont en bon accord avec les corrélations. Le mécanisme LCSR a produit des délais plus grands et les autres mécanismes ont donné des délais considérablement plus courts. À $T_{ini} = 1500$ K, les deux mécanismes de GRI et les mécanismes LCSR et Leeds v.1.5 ont prédit des délais entre les deux corrélations. Les autres mécanismes ont donné des délais plus petits. À $T_{ini} = 2000$ K, tous les mécanismes sont plus ou moins en accord avec les corrélations. Cette comparaison nous permet de constater que les mécanismes détaillés, censés décrire correctement le processus d'autoinflammation, sont loin de correspondre. Les mécanismes s'accordent mieux entre eux, ainsi qu'avec les corrélations, lorsque la température est plus élevée.

Une comparaison analogue est présentée sur la figure 3.9 pour l'autoinflammation du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ ($\eta = 0.1$) dans de l'air pur. Seul le mécanisme LCSR a donné des résultats proches des corrélations empiriques sur toute la plage de T_{ini} . Les délais prédits par ce mécanisme sont les plus élevés. Néanmoins, l'accord global entre les mécanismes et les corrélations est plus étroit que pour $\eta = 0$.

Les résultats obtenus pour $\eta = 0.05$ et 0.2 confirment les mêmes tendances générales : l'accord entre les mécanismes s'améliore lorsque T_{ini} et η augmentent. Ces tendances s'expliquent par le fait que la cinétique d'oxydation à haute température est moins complexe parce qu'elle se réalise principalement *via* des réactions entre les espèces C_1 . En outre, l'autoinflammation du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ est gouvernée par la cinétique d'oxydation de H_2 qui est relativement complète dans tous les mécanismes. Comme conclusion, les mécanismes LCSR et GRI-Mech v.3.0 ont montré le meilleur accord global avec les corrélations empiriques.

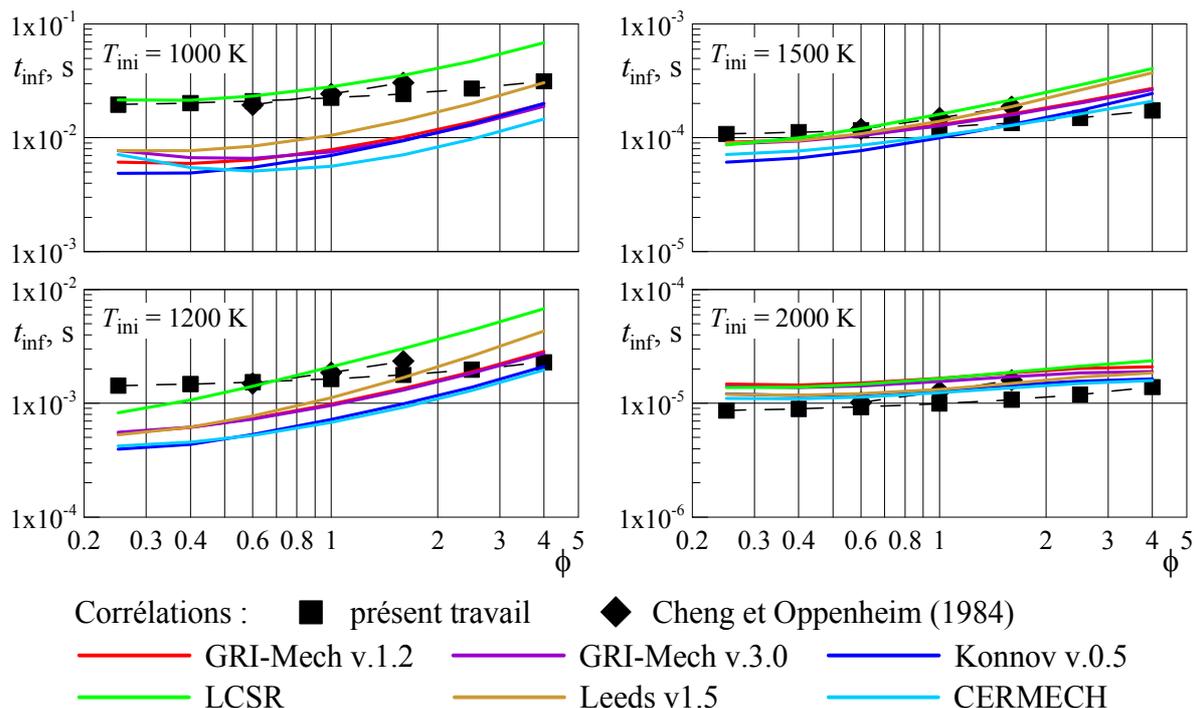


Figure 3.9. Mécanismes détaillés : Délai d'autoinflammation pour $\eta = 0.1$.

3.4.3. Simulations d'autoinflammation de $\text{CH}_4\text{-H}_2$ dans de l'air pur avec les mécanismes squelettiques

Nous analysons ici les performances des cinq mécanismes squelettiques dont les résumés ont été donnés dans la section 3.2.2.2. Les résultats de simulation sur le délai d'autoinflammation sont illustrés sur la figure 3.10 pour $\eta = 0$ et sur la figure 3.11 pour $\eta = 0.1$.

Les mécanismes DRM19 et DRM22 ont donné des résultats pratiquement coïncidents. Les différences sont visibles à des températures de 1000 K et de 1200 K ainsi qu'à $\phi > 2$. Les délais prédits par les deux mécanismes squelettiques et par leur mécanisme parental, GRI-Mech v.1.2, sont très proches. Cela indique que la description squelettique de la cinétique d'inflammation est équivalente à la cinétique détaillée.

Le mécanisme Yungster est en bon accord avec les corrélations dans les conditions $\eta = 0$, $T_{\text{ini}} = 1200$ K et $\eta = 0.1$, $T_{\text{ini}} = 1500$ K. Il a donné des délais particulièrement élevés pour $T_{\text{ini}} = 2000$ K.

Le mécanisme parental de REDRAM a été créé sur la base de GRI-Mech v.1.2 ce qui explique une certaine cohérence entre les résultats issus des simulations avec REDRAM et avec les DRM. REDRAM a une cinétique à basse température modifiée grâce à laquelle il est en meilleur accord avec les corrélations à $\eta = 0.1$ et à $T_{\text{ini}} = 1000$ K et 1200 K. Cependant, il tend à prédire des délais considérablement élevés pour le mélange pauvre ($\phi < 1$) à des températures plus grandes.

Le mécanisme Li, dérivé d'une version antérieure du mécanisme détaillé CERMECH, a donné des résultats comparables aux résultats de CERMECH. Cela confirme la cohérence des descriptions détaillée et squelettique de l'autoinflammation.

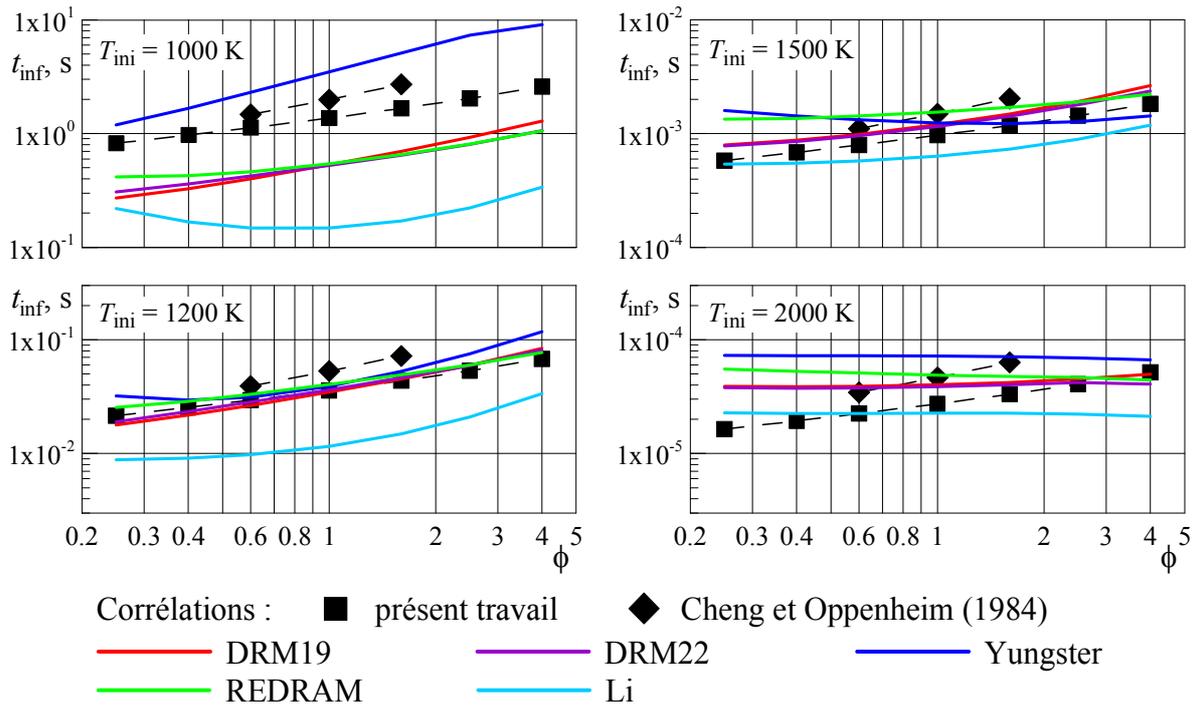


Figure 3.10. Mécanismes squelettiques : Délai d'autoinflammation pour $\eta = 0$.

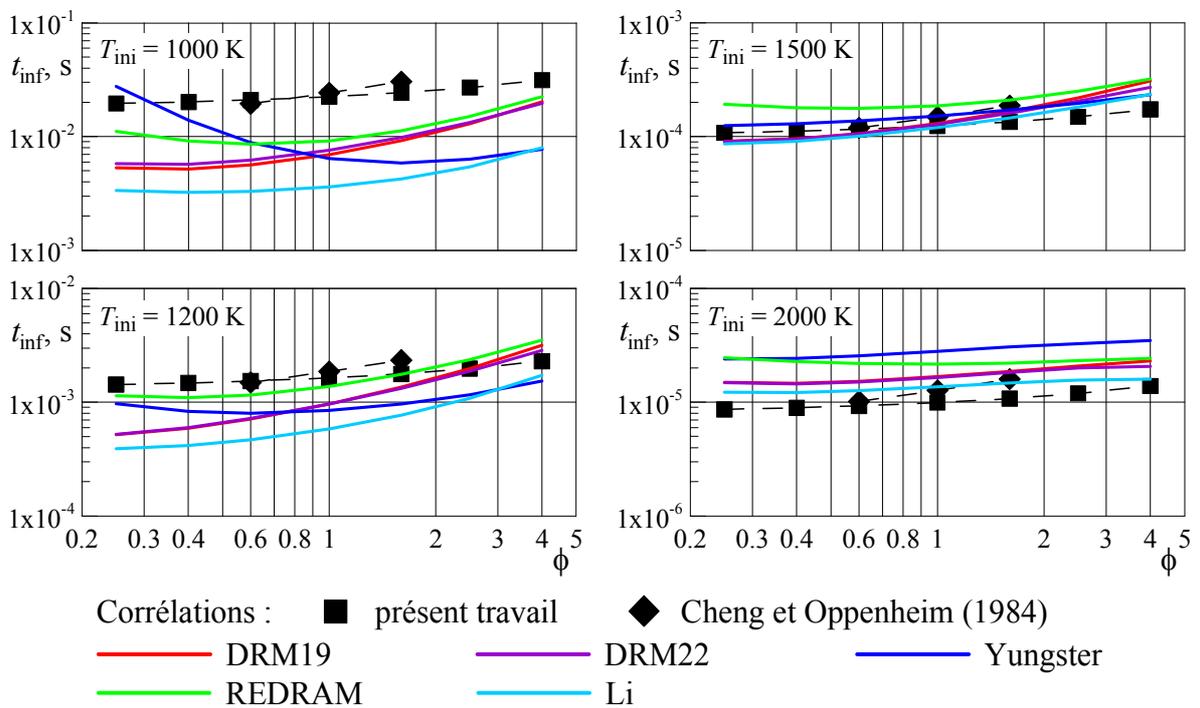


Figure 3.11. Mécanismes squelettiques : Délai d'autoinflammation pour $\eta = 0.1$.

3.4.4. Simulations d'autoinflammation de CH₄-H₂ dans de l'air pur avec les mécanismes globaux et semi-globaux

Nous avons testé les quatre mécanismes globaux et semi-globaux présentés dans la section 3.2.2.3. Les résultats de simulation sur le délai d'autoinflammation de CH₄ dans de l'air pur sont montrés sur la figure 3.12.

Avec le mécanisme de Revel, les simulations ont été effectuées en prenant la somme des concentrations initiales de CH₃ et de CH₂O égale à la concentration totale du mélange multipliée par 10⁻⁴. Cette mesure nous a permis de démarrer la réaction et d'obtenir des résultats proches des corrélations à $T_{ini} = 1000$ K et 1200 K. À des températures plus grandes, l'ajustement du délai nécessite d'augmenter encore plus les concentrations initiales de CH₃ et de CH₂O. La sensibilité du mécanisme aux concentrations de CH₃ et de CH₂O n'a pas été très forte. À titre d'exemple, l'augmentation de la somme de ces concentrations de 10⁻¹⁴ à 10⁻⁴ a réduit globalement le délai par un facteur de 1.3-1.6.

Pour déclencher la réaction avec le mécanisme de Jiang, nous avons admis une petite quantité de H₂ dans le mélange réactif. Ce mécanisme a montré une forte sensibilité à la fraction de H₂. En essayant d'obtenir des résultats pas très loin des corrélations, nous avons pris $\eta = 10^{-5}$. Malgré des essais multiples, le mécanisme n'a pas donné de résultats satisfaisants.

Dans la publication du mécanisme de Kundu à 12 espèces, nous avons trouvé que la réaction globale de consommation de CH₄ a une constante de vitesse trop basse. Nous avons admis un facteur pré-exponentiel de 2·10³ pour cette constante au lieu de 2·10⁻³ selon la publication. Pour l'ensemble des résultats, les deux mécanismes de Kundu n'ont pas montré de qualités appréciables.

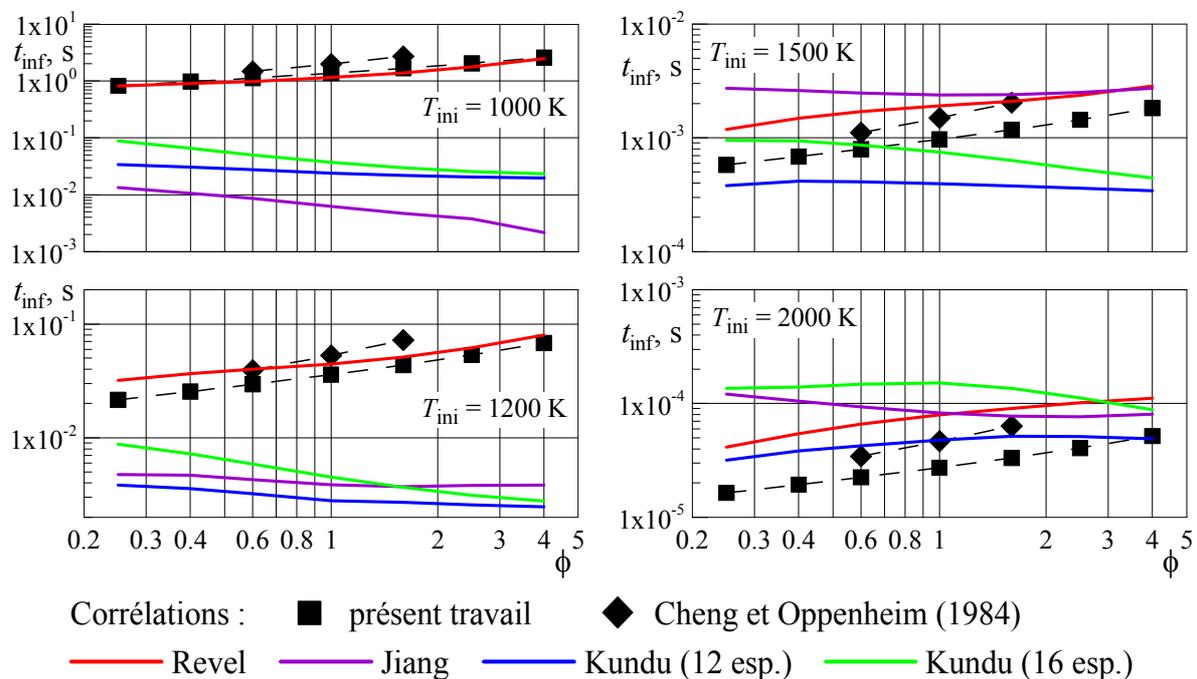


Figure 3.12. Mécanismes (semi-)globaux : Délai d'autoinflammation pour $\eta = 0.0$.

Afin de mettre en évidence d'autres faiblesses des mécanismes simples, nous avons comparé les profils temporels de température générés par le mécanisme détaillé GRI-Mech v.3.0 et par les mécanismes globaux et semi-globaux. La figure 3.13 montre les profils de température pour les conditions suivantes : $\eta = 0$ et 0.1, $\phi = 1$, $T_{ini} = 1500$ K. À $\eta = 0$, seul le

mécanisme de Jiang a donné un profil acceptable en terme de forme et de température finale. Le mécanisme de Kundu à 12 espèces a également prédit la bonne température finale, ce qui n'est pas le cas pour les mécanismes de Revel et de Kundu à 16 espèces. Les profils correspondant aux deux mécanismes de Kundu sont caractérisés par un échauffement trop étendu durant la phase d'inflammation. À $\eta = 0.1$, la situation s'aggrave surtout pour les mécanismes de Kundu qui ont produit des profils à deux marches : une première augmentation de la température associée à l'oxydation de H_2 suivie de l'inflammation de CH_4 . Ce comportement est dû au fait que la consommation de CH_4 dépende de la température et non de la présence des radicaux issus de l'oxydation de H_2 .

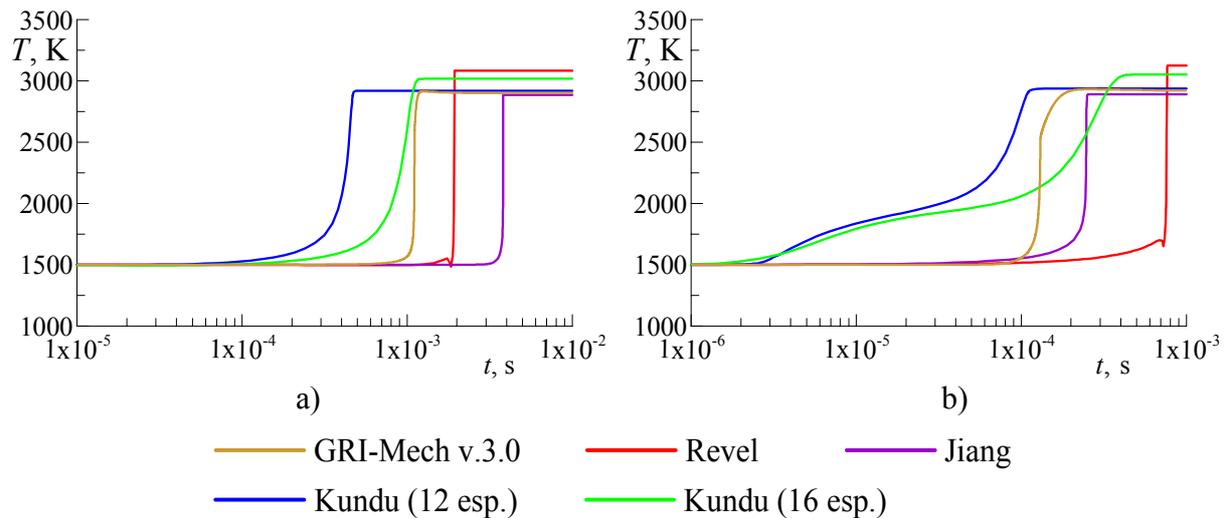


Figure 3.13. Profils temporels de température prédits par GRI-Mech v.3.0 et par les mécanismes (semi-)globaux pour $\eta = 0.0$ (a) et pour $\eta = 0.1$ (b).

3.4.5. Conclusions concernant les simulations d'autoinflammation de CH_4 - H_2

Notre méthode d'analyse très simple a permis de comparer de nombreux mécanismes cinétiques en terme de capacité à prédire le délai d'autoinflammation de CH_4 et de plusieurs mélanges CH_4 - H_2 dans de l'air pur. Les conclusions générales issues de la présente analyse sont les suivantes :

- 1) Il n'existe pas de description cinétique généralement acceptée de l'autoinflammation de CH_4 même au niveau le plus détaillé.
- 2) L'accord entre les mécanismes détaillés s'améliore lors de la croissance de T_{ini} et de η donc la cinétique à haute température et la cinétique associée à H_2 s'accordent mieux dans les mécanismes testés.
- 3) La description squelettique de la cinétique d'autoinflammation est adéquate à la description détaillée dans les conditions que nous avons considérées.
- 4) Parmi les mécanismes globaux et semi-globaux que nous avons testés, aucun mécanisme n'a montré de performances satisfaisantes dans le domaine entier de conditions. Aucun mécanisme simple n'a été capable de reproduire correctement l'effet promoteur de H_2 .
- 5) Les mécanismes GRI-Mech v.3.0 et LCSR ont montré un accord satisfaisant avec les corrélations empiriques. Pourtant, il n'y a pas de modèles chimiques réduits basés sur ces mécanismes que nous puissions appliquer dans nos simulations de la combustion supersonique. Nous devons alors développer et valider de tels modèles par nos propres moyens.

3.4.6. Simulations d'autoinflammation de H₂ dans de l'air pur

L'autoinflammation de H₂ dans de l'air pur a été simulée avec les mécanismes détaillés GRI-Mech v.3.0 et LCSR que nous avons retenus pour la suite de notre étude ainsi qu'avec le mécanisme détaillé de Mueller [Mueller et al. (1999a)] et avec les mécanismes simplifiés d'Eklund [Eklund et al. (1990)], de Baurle [Baurle et Girimaji (2003)] et de l'ONERA. Le mécanisme de l'ONERA, analogue au mécanisme d'Eklund, nous a été fourni avec le code MSD. Les trois mécanismes simplifiés sont donnés dans l'annexe A.

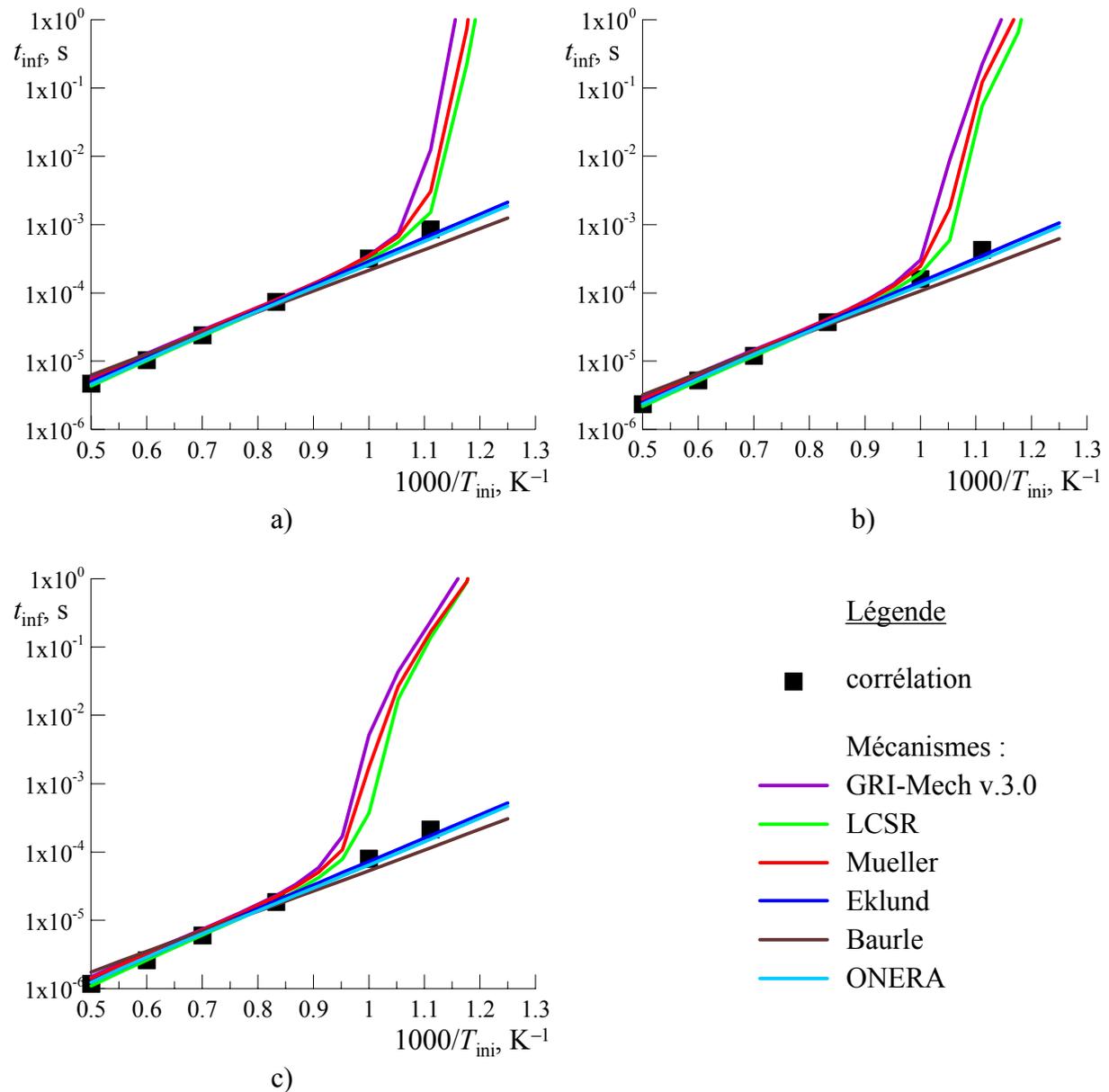


Figure 3.14. Délai d'autoinflammation de H₂ prédit par les mécanismes détaillés et simplifiés en comparaison avec la corrélation (3.27) pour $\phi = 1$ et pour $P_{ini} = 50$ kPa (a), 100 kPa (b), 200 kPa (c).

Les évolutions du délai d'autoinflammation du mélange stœchiométrique ($\phi = 1$) en fonction de T_{ini} sont montrées sur la figure 3.14 pour $P_{ini} = 50$ kPa, 100 kPa et 200 kPa. Les résultats de simulation sont comparés avec la corrélation (3.27). Tous les mécanismes sont en bon accord avec la corrélation à $T_{ini} > 1150$ K. Les simulations avec les trois mécanismes

détaillés ont prédit une augmentation de t_{inf} à des températures plus basses. L'écart des courbes calculées à la corrélation marque la limite d'explosion qui correspond ainsi à $T_{\text{ini}} = 900\text{-}950\text{ K}$ pour $P_{\text{ini}} = 50\text{ kPa}$, à $T_{\text{ini}} \approx 1000\text{ K}$ pour $P_{\text{ini}} = 100\text{ kPa}$ et à $T_{\text{ini}} = 1050\text{-}1100\text{ K}$ pour $P_{\text{ini}} = 200\text{ kPa}$. Le changement du mode d'autoinflammation a été observé à des températures plus basses pour le mécanisme de LCSR par rapport aux résultats obtenus avec GRI-Mech v.3.0. Le mécanisme de Mueller a fourni des résultats intermédiaires.

Comme nous l'avons remarqué dans la section 3.2.1, le jeu d'espèces inclus dans les mécanismes simplifiés ne permet pas de prédire la limite d'explosion car elle est associée à la compétition des réactions directes $\text{H} + \text{O}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{O}$ et $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \Rightarrow \text{HO}_2 (+\text{M})$. Par conséquent, les résultats issus des simulations avec les trois mécanismes simplifiés suivent la corrélation le long de l'intervalle entier de T_{ini} . Le mécanisme de Baurle a donné des écarts plus importants à la corrélation que les mécanismes d'Eklund et de l'ONERA.

Nous n'avons pas présenté de résultats pour d'autres richesses car ils sont similaires à ceux pour $\phi = 1$.

3.4.7. Simulations d'autoinflammation de H_2 dans de l'air vicié par H_2O

L'effet de la viciation d'air par H_2O sur le délai d'autoinflammation de H_2 a été étudié par Wang et al. (2003). Les conditions expérimentales de cette étude sont présentées dans le tableau 3.4. Le délai d'autoinflammation de H_2 a été mesuré pour un mélange réactif pauvre ($\phi = 0.42$) non contaminé ainsi que pour trois mélanges contenant 15 %, 25 % et 40 % de vapeur de H_2O sur la base molaire.

Nous avons effectué des simulations de ces expériences en utilisant les mécanismes détaillés GRI-Mech v.3.0, LCSR et Mueller ainsi que le mécanisme simplifié de l'ONERA. Les résultats de nos simulations sont comparés avec les données expérimentales sur la figure 3.15 pour les quatre mélanges considérés. Les données expérimentales correspondent à $P_{\text{ini}} = 300\text{-}500\text{ kPa}$ tandis que les simulations ont été réalisées pour une pression intermédiaire de 400 kPa.

L'application du mécanisme GRI-Mech v.3.0 (figure 3.15(a)) a donné un changement du mode d'autoinflammation, marqué par une rupture de pente de la courbe calculée, à une température relativement grande par rapport à l'expérience. Ce mécanisme a surestimé considérablement t_{inf} pour $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.15$. En revanche, il a donné de bons résultats pour $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.4$.

Les simulations avec le mécanisme LCSR (figure 3.15(b)) ont prédit correctement la rupture de pente pour le mélange non contaminé. Pourtant, ce mécanisme n'a pas réagi de façon satisfaisante à la présence de H_2O . Ce comportement a découlé des efficacités de 3^e corps dans la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \Leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$ qui ont été mises à 1 pour toutes les espèces. Ce défaut sera corrigé dans la suite de la présente étude.

Le mécanisme de Mueller (figure 3.15(c)) a fourni des résultats satisfaisants pour $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0$ et 0.15 pourtant il a sous-estimé t_{inf} à $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.25$ et 0.4. Nous acceptons ce résultat car les conditions de viciation qui nous intéressent correspondent à $X_{\text{H}_2\text{O}}$ inférieur à 0.2.

Le mécanisme de l'ONERA (figure 3.15(d)) a donné des prédictions erronées de t_{inf} pour tous les mélanges. Cela montre que les mécanismes simples ne peuvent pas décrire l'effet de viciation par H_2O à cause des limitations intrinsèques.

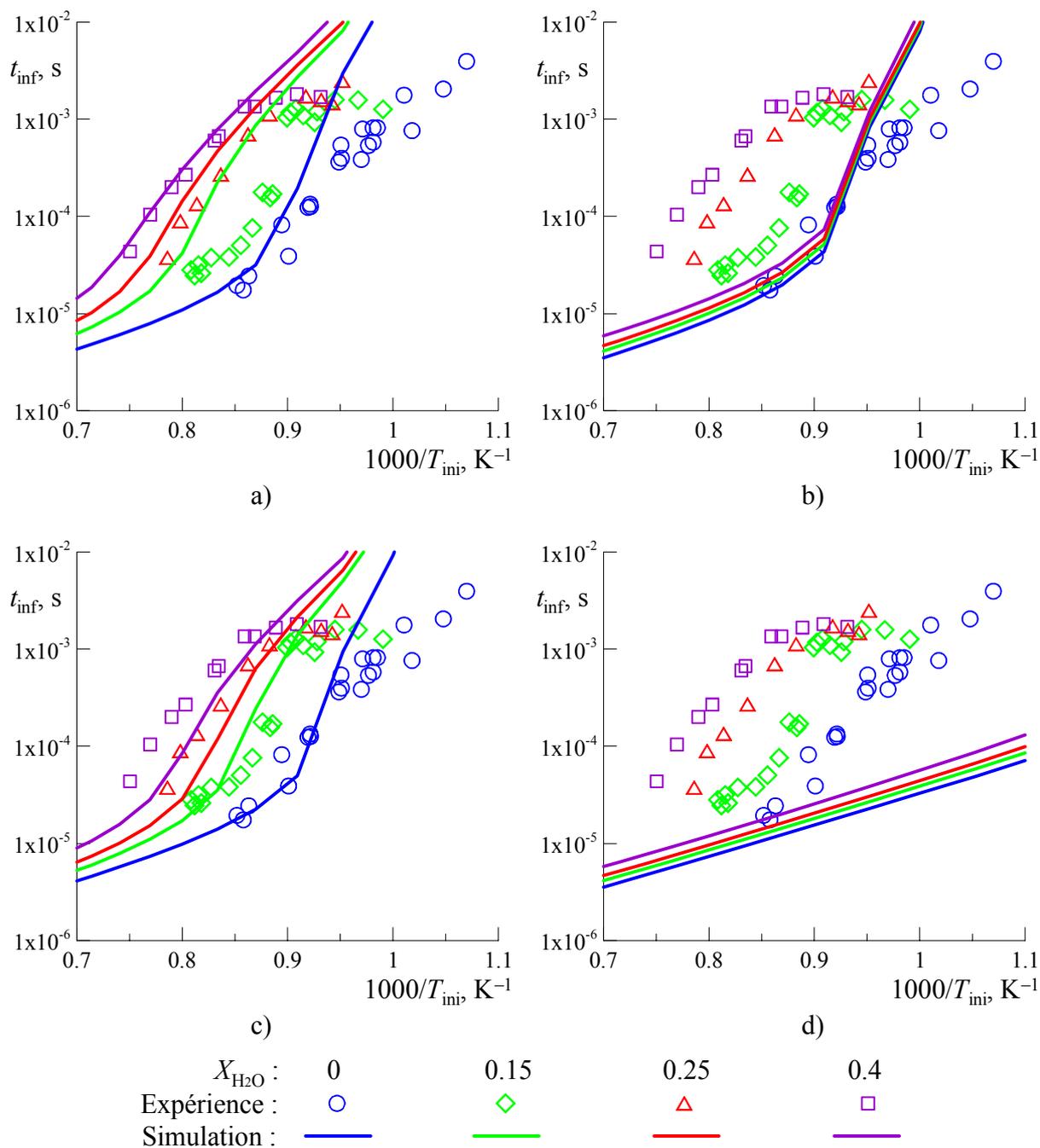


Figure 3.15. Effet de la viciation d'air par H₂O sur le délai d'autoinflammation de H₂. Comparaison de l'expérience de Wang et al. (2003) et de simulations avec les mécanismes GRI-Mech v.3.0 (a), LCSR (b), Mueller (c), ONERA (d).

3.4.8. Simulations d'autoinflammation de H₂ dans de l'air vicié par NO

L'oxyde nitrique est le polluant le plus abondant parmi les espèces azotées qu'on peut avoir dans l'air vicié en sortie d'un réchauffeur à flamme. Considérons les conditions dans le réchauffeur sur le banc d'essai LAERTE à l'ONERA caractérisées par une pression de 710 kPa et par une température de 1850 K. Les détails sur ce banc d'essai sont présentés dans le chapitre 4. Issues d'un calcul de l'équilibre chimique, les fractions molaires des espèces azotées sont les suivantes : $X_{NO} = 4.6 \cdot 10^{-3}$, $X_{NO_2} = 2.6 \cdot 10^{-5}$, $X_{N_2O} \sim X_{HONO} \sim 10^{-7}$, $X_{HNO} \sim 10^{-8}$,

$< 10^{-9}$ pour les autres espèces. L'accélération de l'air vicié par une tuyère supersonique conduit à une chute rapide de la pression et de la température ce qui fige la composition des polluants. Nous pouvons donc supposer que les rapports de leurs fractions restent globalement inchangés à l'entrée d'une chambre de combustion supersonique testée sur le banc d'essai.

Slack et Grillo (1977) ont étudié l'effet de la viciation par NO et par NO₂ sur le délai d'autoinflammation de H₂ dans de l'air. Les conditions expérimentales de leur étude sont résumées dans le tableau 3.4. Pour nous, seul l'effet de viciation par NO est intéressant parce que les fractions expérimentales de NO₂ sont trop grandes ($\sim 10^{-2}$).

Les simulations ont été effectuées avec les mécanismes détaillés GRI-Mech v.3.0, LCSR et Mueller [Mueller et al. (1999a,b)] qui intègrent la cinétique d'oxydation de N₂. Les variations de t_{inf} en fonction de X_{NO} mesurés et calculés sont illustrés sur la figure 3.16 pour $P_{\text{ini}} = 51$ kPa et 203 kPa et pour $T_{\text{ini}} = 1000$ K. À $P_{\text{ini}} = 51$ kPa (figure 3.16(a)), l'expérience a montré que la viciation réduisait t_{inf} de 45-50 % alors que les simulations n'ont donné que 20 % de réduction. D'ailleurs, les délais expérimentaux et calculés sont très différents. Cette différence a été observée également à d'autres températures. À $P_{\text{ini}} = 203$ kPa (figure 3.16(b)), l'effet de la viciation est plus marqué. Malgré une forte différence de t_{inf} pour le mélange non contaminé, les trois mécanismes se sont mis en accord après l'ajout de NO. Le mécanisme de LCSR a donné un bon accord avec l'expérience.

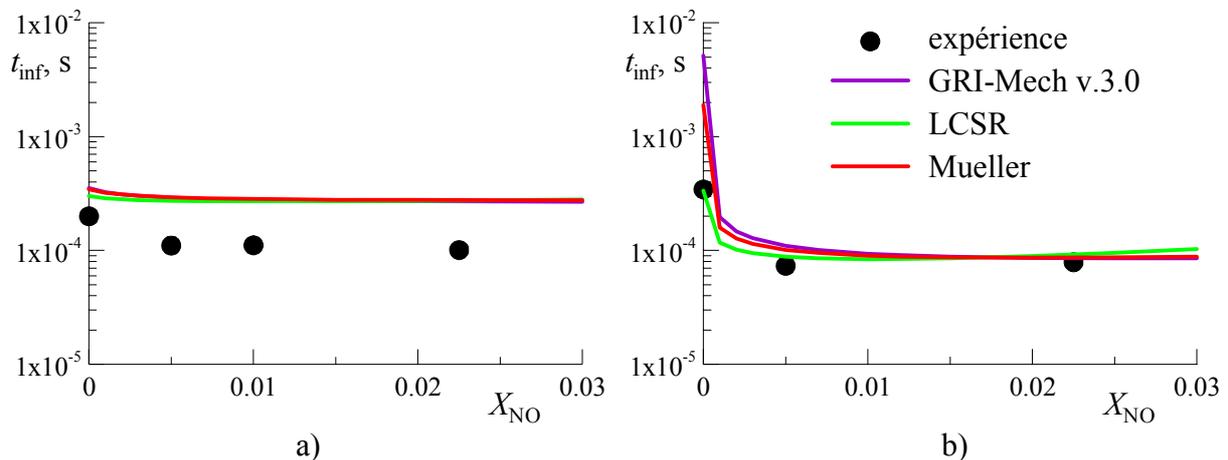


Figure 3.16. Effet de la viciation d'air par NO sur le délai d'autoinflammation de H₂. Comparaison de l'expérience de Slack et Grillo (1977) et de simulations avec les mécanismes détaillés pour $T_{\text{ini}} = 1000$ K et pour $P_{\text{ini}} = 51$ kPa (a) et 203 kPa (b).

L'effet de la viciation sur l'évolution de t_{inf} en fonction de T_{ini} est présenté sur la figure 3.17 pour $P_{\text{ini}} = 203$ kPa et pour trois mélanges avec $X_{\text{NO}} = 0$, $5 \cdot 10^{-3}$ et $2.25 \cdot 10^{-2}$. Pour le mélange non contaminé (figure 3.17(a)), les mécanismes GRI-Mech v.3.0 et Mueller ont surestimé t_{inf} surtout à $T_{\text{ini}} < 1050$ K ce qui explique la différence de t_{inf} observée sur la figure 3.16(b). Les résultats fournis par le mécanisme LCSR suivent correctement les points expérimentaux. Pour $X_{\text{NO}} = 5 \cdot 10^{-3}$ (figure 3.17(b)), t_{inf} a changé principalement à $T_{\text{ini}} < 1100$ K dû à l'effet promoteur des réactions (3.6) et (3.7). Les simulations sont en accord avec l'expérience sauf à $T_{\text{ini}} < 850$ K où les courbes correspondant aux mécanismes LCSR et Mueller s'écartent de la tendance expérimentale. Pour $X_{\text{NO}} = 2.25 \cdot 10^{-3}$ (figure 3.17(c)), les simulations avec les mécanismes LCSR et Mueller montrent l'inversion de l'effet de NO plus tôt par rapport à l'expérience et aux simulations avec GRI-Mech v.3.0.

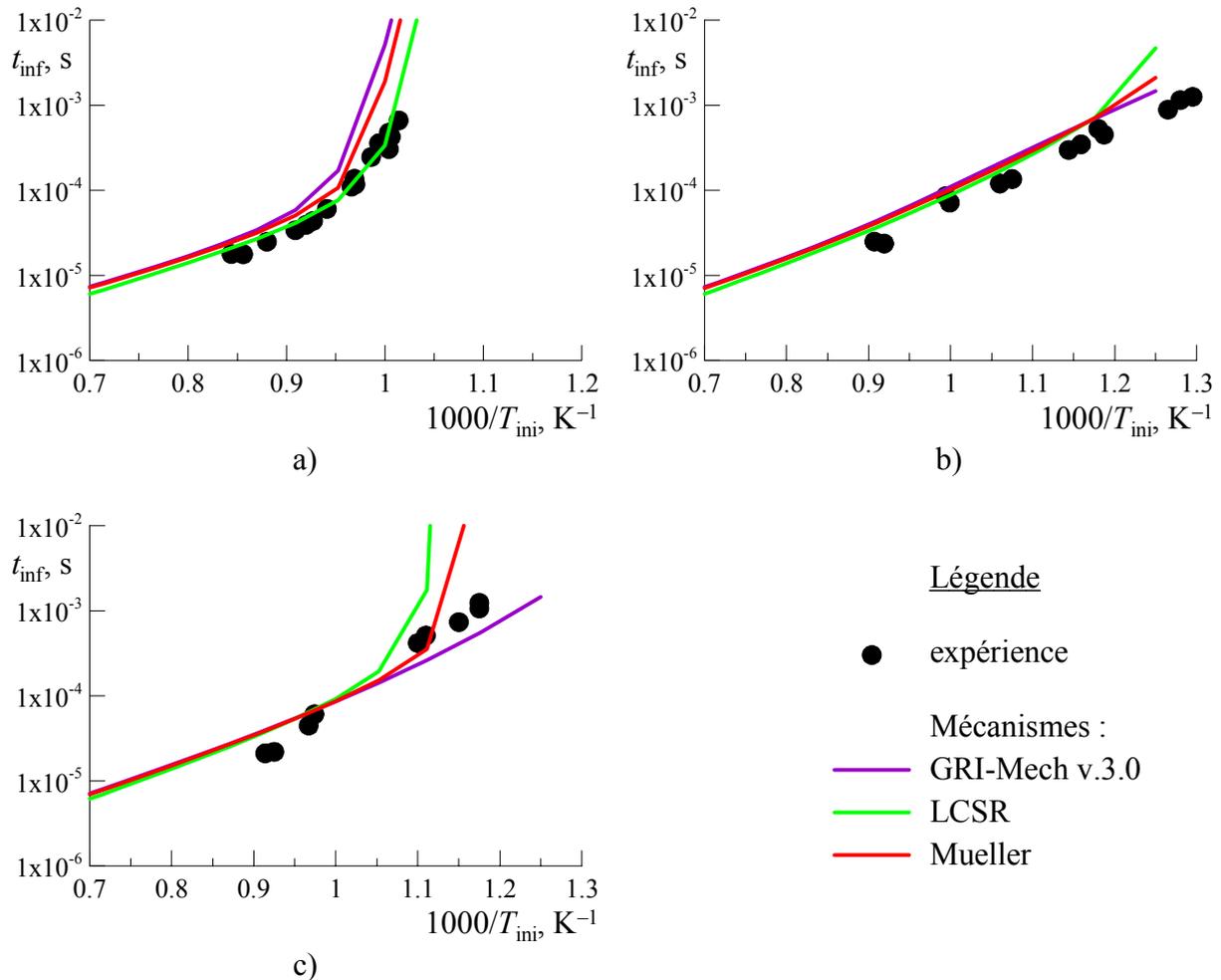


Figure 3.17. Délai d'autoinflammation de H_2 prédit par des mécanismes détaillés en comparaison avec l'expérience de Slack et Grillo (1977) pour $P_{ini} = 203$ kPa et pour $X_{NO} = 0$ (a), $5 \cdot 10^{-3}$ (b) et $2.25 \cdot 10^{-2}$ (c).

3.4.9. Conclusions concernant les simulations d'autoinflammation de H_2

L'analyse des résultats sur l'autoinflammation de H_2 dans de l'air pur et vicié nous ont suggéré les conclusions suivantes :

- 1) La comparaison des résultats de simulation avec la corrélation (3.27) a montré un bon accord dans des conditions au-dessous de la limite d'explosion. Les simulations avec les mécanismes détaillés ont permis d'estimer cette limite. Les mécanismes simplifiés sont également en accord avec la corrélation, cependant, ils ne décrivent que le mode explosif d'inflammation donc leur domaine de validité est aussi limité par la limite d'explosion.
- 2) Les mécanismes détaillés GRI-Mech v.3.0 et LCSR n'ont pas donné de résultats satisfaisants concernant l'effet de viciation par H_2O pour X_{H_2O} proche de 0.15. Ce défaut doit être corrigé dans des mécanismes réduits issus de ces deux mécanismes détaillés. Les mécanismes simplifiés ne sont pas capables de reproduire l'effet de viciation.
- 3) Les mécanismes détaillés GRI-Mech v.3.0, LCSR et Mueller décrivent plus ou moins correctement l'effet promoteur de NO dans la plage de X_{NO} correspondant aux conditions à l'entrée d'une chambre de combustion supersonique lors des essais au sol. Une certaine stabilisation de cet effet à X_{NO} autour de $5 \cdot 10^{-3}$ est favorable car elle peut atténuer l'erreur issue d'une estimation approchée de X_{NO} .

- 4) Vu les limitations des mécanismes simplifiés, leur utilisation pour une simulation de combustion supersonique nécessite une validation préliminaire par rapport à un mécanisme détaillé dans des conditions compatibles afin de confirmer leur applicabilité au problème étudié.

3.5. Obtention de mécanismes réduits pour l'autoinflammation du mélange méthane-hydrogène et de l'hydrogène

3.5.1. Méthode de réduction

La méthode de réduction consiste globalement en trois phases suivantes :

- 1) Minimisation du nombre d'espèces réactives.
- 2) Minimisation du nombre de réactions.
- 3) Réduction du nombre d'espèces transportées *via* l'approche EQS.

La méthode de réduction doit donner un mécanisme réduit suffisamment précis par rapport à son mécanisme de référence dans le domaine de conditions que nous avons défini dans la section 3.1. La précision doit être contrôlée pour les grandeurs physiques pratiquement importantes notamment pour le délai d'autoinflammation t_{inf} et pour les profils temporels de température $T(t)$ et de masse molaire du mélange $M(t)$. Les quantités microscopiques telles que la concentration d'une espèce ou que son taux de production instantané sont moins importantes.

La méthode que nous utilisons pour valider un mécanisme réduit par rapport à son mécanisme de référence est la suivante :

- 1) Définir une grille paramétrique dans le domaine de validité sur laquelle les mécanismes sont comparés.
- 2) À chaque point de la grille, effectuer des simulations avec le mécanisme de référence et avec le mécanisme réduit.
- 3) Selon les critères imposés, comparer les deux solutions et évaluer leur compatibilité.

La grille paramétrique doit être établie de sorte qu'elle couvre le domaine de validité spécifié en terme de quantités η , ϕ , P_{ini} et T_{ini} . Pour que le nombre total de points de la grille soit raisonnable, nous devons supposer que le processus d'oxydation varie progressivement entre les points. Cette hypothèse peut être vérifiée après la réduction en augmentant localement la densité de la grille.

Pour les simulations, nous avons choisi l'approche de pression constante. Avec cette approche, l'estimation du délai d'autoinflammation selon la formule (3.33) n'est plus possible. Pour déterminer t_{inf} nous avons considéré l'instant $t(T'_{max})$ correspondant au maximum de dT/dt .

La durée totale simulée t_{eq} est définie pour la solution de référence lors de l'évolution de l'état du système réactif jusqu'à l'équilibre chimique. L'arrivée à l'état d'équilibre est vérifiée par les conditions suivantes :

$$|T(t_{eq}) - T_{eq}|/T_{eq} \leq \varepsilon_T \quad (3.35)$$

$$|Y_s(t_{eq}) - Y_{s,eq}| \leq \varepsilon_Y \quad (3.36)$$

L'indice « eq » identifie les conditions d'équilibre chimique déterminées par l'utilitaire thermodynamique STANJAN [Reynolds (1986)] implanté dans la bibliothèque CHEMKIN-II [Lutz et al. (1998)]. ε_T et ε_Y sont les seuils dont les valeurs imposées sont de l'ordre de 10^{-5} . Par la suite, l'état simulé à t_{eq} est confondu à l'équilibre chimique.

La solution donnée par le mécanisme réduit (solution testée) est évaluée par les erreurs suivantes :

- différence relative du délai d'autoinflammation

$$\delta t_{inf} = |t_{inf} - t_{inf}^{ref}|/t_{inf}^{ref} \quad (3.37)$$

- différence absolue de la température à l'état d'équilibre

$$\Delta T_{\text{eq}} = |T_{\text{eq}} - T_{\text{eq}}^{\text{ref}}| \quad (3.38)$$

- différence relative de la masse molaire à l'état d'équilibre

$$\delta M_{\text{eq}} = |M_{\text{eq}} - M_{\text{eq}}^{\text{ref}}| / M_{\text{eq}}^{\text{ref}} \quad (3.39)$$

- différence absolue maximale pour le profil de température

$$\Delta_{\text{max}} T = \max [\Delta T(t_n)], n \in [1, N] \quad (3.40)$$

- différence relative maximale pour le profil de masse molaire

$$\delta_{\text{max}} M = \max [\delta M(t_n)], n \in [1, N] \quad (3.41)$$

- différence absolue moyenne pour le profil de température

$$\Delta_{\text{moy}} T = N^{-1} \sum_{n=1}^N \Delta T(t_n) \quad (3.42)$$

- différence relative moyenne pour le profil de masse molaire

$$\delta_{\text{moy}} M = N^{-1} \sum_{n=1}^N \delta M(t_n) \quad (3.43)$$

L'exposant « ref » identifie la solution de référence. L'indice n compte les instants pour lesquels la solution numérique a été obtenue. N est le nombre total d'états simulés.

Au n -ième instant, les différences sont déterminées selon les formules suivantes :

$$\Delta T(t_n) = |T(t_n^{\text{d}}) - T^{\text{ref}}(t_n)| \quad (3.44)$$

$$\delta M(t_n) = |M(t_n^{\text{d}}) - M^{\text{ref}}(t_n)| / M^{\text{ref}}(t_n) \quad (3.45)$$

Le temps t^{d} est défini comme :

$$t^{\text{d}} = t - (t_{\text{inf}} - t_{\text{inf}}^{\text{ref}}) \quad (3.46)$$

L'utilisation du temps décalé t^{d} pour la solution testée fait coïncider les instants quand la dérivée dT/dt atteint son maximum pour les deux solutions. Cela permet de comparer indépendamment les formes des profils et leur décalage en temps. Par conséquent, l'erreur δt_{inf} et les erreurs $\Delta_{\text{max}} T$, $\Delta_{\text{moy}} T$, $\delta_{\text{max}} M$ et $\delta_{\text{moy}} M$ sont découplées.

La figure 3.18 montre l'effet du couplage entre le décalage en temps et la différence de T à l'instant t_{inf} . Quand le profil de T est raide, un petit décalage en temps de ce profil donne une différence importante de T si l'on utilise la même échelle temporelle. En revanche, la différence de T disparaît si l'on applique (3.44) à cet exemple.

Les erreurs (3.37)-(3.43) sont associées aux scores :

$$s_1 = \frac{\delta t_{\text{inf}}}{\delta^* t_{\text{inf}}}, s_2 = \frac{\Delta T_{\text{eq}}}{\Delta^* T_{\text{eq}}}, s_3 = \frac{\delta M_{\text{eq}}}{\delta^* M_{\text{eq}}}, s_4 = \frac{\Delta_{\text{max}} T}{\Delta^*_{\text{max}} T}, s_5 = \frac{\delta_{\text{max}} M}{\delta^*_{\text{max}} M}, s_6 = \frac{\Delta_{\text{moy}} T}{\Delta^*_{\text{moy}} T}, s_7 = \frac{\delta_{\text{moy}} M}{\delta^*_{\text{moy}} M} \quad (3.47)$$

Les différences marquées par l'astérisque sont les valeurs plafond admissibles pour chaque erreur. À partir des sept scores, nous estimons le score total :

$$S = \sum_{m=1}^7 \sigma_m s_m \quad (3.48)$$

σ_m est le poids correspondant à s_m . Plus S est bas, meilleur est l'accord entre les solutions comparées.

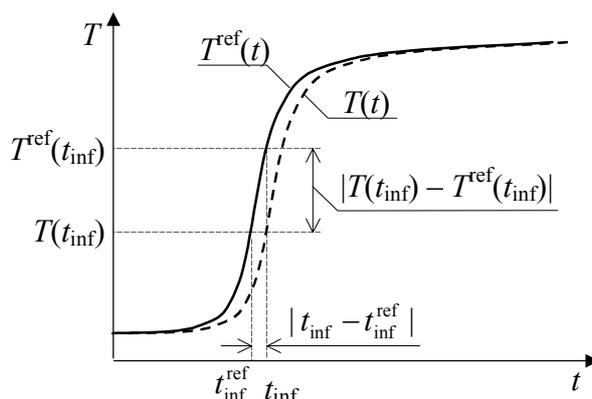


Figure 3.18. Effet du couplage entre le décalage en temps et la différence de température.

Nous proposons une méthode qui peut servir également à l'élimination de réactions ou d'espèces en respectant le système des critères décrit ci-dessus. L'élimination d'une espèce conduit à l'élimination de toutes les réactions auxquelles cette espèce participe. Dans tous les cas, la réduction s'effectue par l'élimination de réactions.

Supposons que nous avons fixé un point de la grille paramétrique et que la solution de référence est connue pour ce point. L'algorithme de l'élimination des réactions sans importance est composé des étapes suivantes :

- 1) Évaluer les scores des réactions disponibles
 - a) Désactiver une réaction parmi celles disponibles.
 - b) Effectuer une simulation et évaluer les scores (s_m , $m = 1, \dots, 7$) et S pour la réaction désactivée.
 - c) Réactiver cette réaction.
- 2) Parmi les réactions évaluées, choisir la réaction la moins importante dont le score S est minimal à condition que tous $s_m \leq 1$. Les réactions ayant au moins un $s_m > 1$ sont importantes et ne peuvent pas être éliminées.
- 3) Éliminer la réaction la moins importante et retourner à l'étape 1). Cette boucle est répétée jusqu'à ce qu'il ne reste que les réactions importantes.

L'algorithme proposé garantit qu'à chaque fois qu'une réaction est éliminée, la qualité de la solution est dégradée le moins possible. Afin d'appliquer cet algorithme à l'élimination d'espèces, il faut évaluer les scores pour les groupes de réactions associés aux espèces. S'il s'agit de l'élimination des réactions une par une, cet algorithme est assez cher car il nécessite $(N_{r1} + N_{r2})(N_{r1} - N_{r2} + 1)/2$ simulations, N_{r1} et N_{r2} sont les nombres de réactions au départ et à la fin. L'élimination d'espèces est ainsi plus efficace dès le début de la réduction.

Nous pouvons envisager deux stratégies pour identifier les réactions importantes sur l'ensemble des points de la grille paramétrique :

- Traiter chaque point de la grille indépendamment puis unir les jeux des réactions importantes. Cette stratégie offre comme avantages la possibilité de connaître les réactions importantes pour chaque point particulier de la grille et la facilité de paralléliser le calcul. Si l'on veut modifier le domaine de validité, les informations obtenues pour les points retenus restent valides. Le désavantage principal est le coût de calcul très élevé.
- Traiter les points successivement en cumulant les réactions importantes. Les réactions importantes identifiées antérieurement ne sont pas remises en cause. Cette stratégie permet d'optimiser le coût de calcul parce qu'on diminue le nombre de réactions testées lors de l'avancement sur la grille. Comme inconvénients, nous avons la nécessité

d'effectuer le calcul en séquentiel et l'impossibilité de réutiliser les résultats antérieurs si l'on veut modifier le domaine de validité de sorte que le domaine précédent n'est pas entièrement inclus dans le domaine modifié.

Dans le but d'analyser l'évolution du jeu des réactions importantes dans le domaine de validité, nous avons choisi la première stratégie. La phase finale de la réduction consiste à tester le mécanisme obtenu sur la grille paramétrique et à vérifier que les conditions ($s_m \leq 1$, $m = 1, \dots, 7$) sont satisfaites pour l'ensemble des points.

La méthode présentée ci-dessus a été réalisée sous forme d'un outil informatique permettant de tester les mécanismes et d'automatiser l'élimination de réactions et d'espèces. Cet outil a été développé sur la base du code SENKIN et des routines de CHEMKIN-II. Ses deux versions sont adaptées au calcul séquentiel et parallèle.

Afin d'identifier une espèce susceptible d'être considérée en EQS nous avons trois conditions à respecter :

- Le maximum de sa fraction massique le long de la période d'oxydation doit être suffisamment bas ($Y_{s_{\max}} \sim 10^{-3}$).
- Sa durée de vie doit être limitée donc le taux de formation ne doit pas dépasser largement le taux de consommation. Cette condition peut être vérifiée à l'aide du critère K' de Lepage (2000). Nous utilisons ici une version modifiée du critère qui est basée sur la fraction massique Y_s : $K''_{s_{\max}} = \max[(W_{s_n}^+ / |W_{s_n}^-| - 1) Y_{s_n}] \sim 10^{-4}$.
- Cette espèce ne doit pas être couplée avec d'autres espèces en EQS *via* des réactions communes. Cela permet d'exprimer explicitement sa concentration et ainsi d'assurer une bonne performance numérique du modèle chimique.

Le choix des espèces en EQS doit être finalement confirmé par la procédure de validation.

3.5.2. Réduction du mécanisme LCSR

3.5.2.1. Conditions de réduction

Le mécanisme réduit est créé pour simuler l'oxydation du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ dans de l'air pur. La grille paramétrique que nous avons établie pour la procédure de réduction est définie comme :

η : 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5

ϕ : 0.25, 0.5, 1, 2, 4

P , kPa : 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000

T_{ini} , K : 1000, 1200, 1400, 1600, 1800, 2000

La totalité des points de la grille est 1050.

Pour valider le mécanisme après chaque étape de la réduction nous utilisons une grille plus dense pour ϕ et pour T_{ini} . Les valeurs de ϕ sont 0.25, 0.3, 0.4, 0.5, 0.625, 0.8, 1.0, 1.25, 1.60, 2.0, 2.5, 3.2, 4.0. La plage de T_{ini} de 1000 K à 2000 K est divisée en intervalles de 100 K.

3.5.2.2. Minimisation du nombre d'espèces réactives

Pour étudier l'importance de certaines espèces ou certains groupes d'espèces, nous avons effectué l'élimination d'espèces « à la main » sans utiliser l'outil automatique. Après chaque modification nous analysons son impact sur les erreurs δt_{inf} , ΔT_{eq} , $\Delta_{\text{max}} T$, δM_{eq} et $\delta_{\text{max}} M$. Le mécanisme LCSR complet est considéré comme mécanisme de référence.

Le mécanisme LCSR de départ est composé de 100 espèces réactives et de 618 réactions. Pour l'inflammation et la combustion suivante du combustible dans de l'air pur, la partie du mécanisme représentée par les espèces azotées n'est pas importante. Après l'élimination des espèces azotées, il nous reste 79 espèces réactives et 506 réactions. Les tests ont montré que les erreurs significatives induites par cette modification sont ΔT_{eq} et $\Delta_{max}T$. À titre d'exemple, la figure 3.19 présente les champs de ΔT_{eq} et de $\Delta_{max}T$ dans le plan ϕ - T_{ini} pour $\eta = 0$ et pour $P = 100$ kPa. ΔT_{eq} et $\Delta_{max}T$ ont le même maximum de 29 K. Les deux champs montrent que la différence maximale est atteinte à la fin de l'oxydation car la chimie d'oxydation de N_2 est relativement lente.

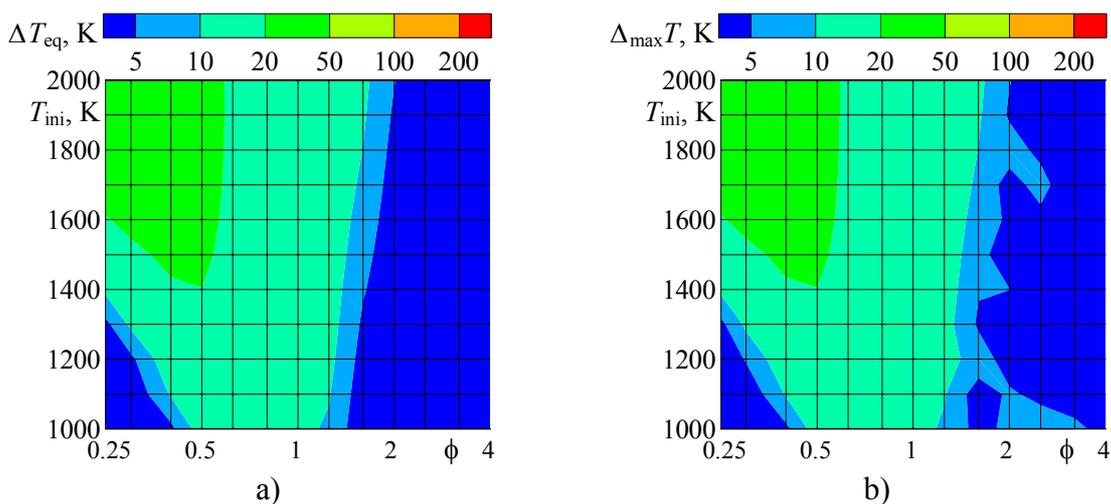


Figure 3.19. Champs d'erreurs pour le mécanisme sans les espèces azotées :
a) ΔT_{eq} , b) $\Delta_{max}T$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 100$ kPa.

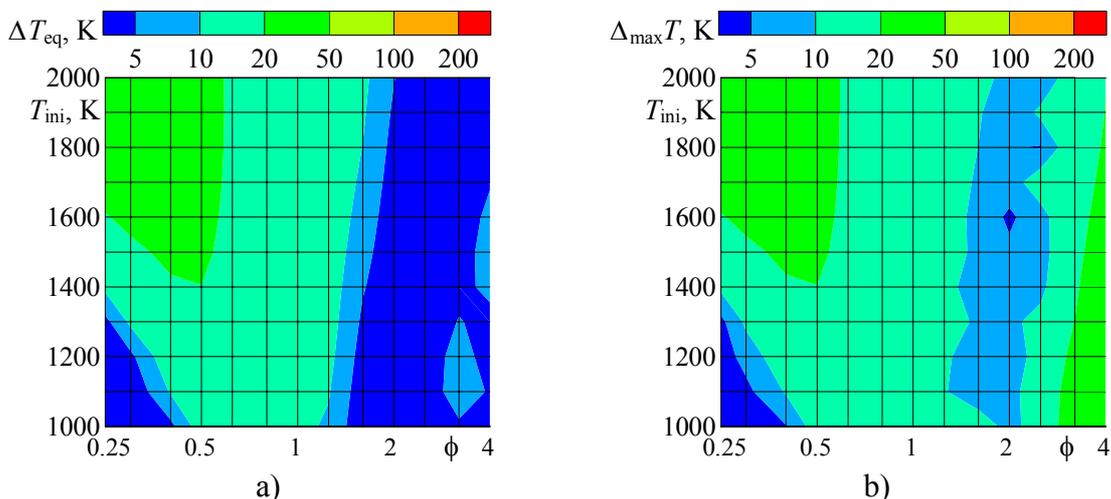


Figure 3.20. Champs d'erreurs pour le mécanisme sans les espèces azotées
et sans les espèces C_3 - C_6 : a) ΔT_{eq} , b) $\Delta_{max}T$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 100$ kPa.

Après avoir éliminé toutes les espèces contenant plus de deux atomes de C, nous avons obtenu un mécanisme composé de 38 espèces réactives et 233 réactions. Cette modification a contribué à l'erreur $\Delta_{max}T$ dont le maximum s'élève jusqu'à 42 K. Les différences relatives de masse molaire restent inférieures à 1-1.5 %. Pour illustrer l'effet produit sur la température, les champs de ΔT_{eq} et de $\Delta_{max}T$ sont donnés pour les mêmes

conditions qu'avant sur la figure 3.20. Le champ de ΔT_{eq} reste presque inchangé. Cette fois-ci, le processus d'oxydation a été touché au milieu de son développement et surtout dans des conditions riches.

Suite à une élimination progressive, nous sommes arrivés à réduire le nombre d'espèces réactives jusqu'à 21 ce qui a donné un mécanisme à 123 réactions. Le tableau 3.14 récapitule les erreurs maximales dans des plans ϕ - T_{ini} pour quelques valeurs fixes de η et de P . En comparant les données obtenues pour $\eta = 0$ et pour P variable, nous pouvons constater que la croissance de P diminue les erreurs sur t_{inf} et sur M mais augmente les erreurs sur T . L'ajout de H_2 dans le combustible diminue globalement les erreurs si P est constante.

Tableau 3.14. Erreurs dues à la réduction du mécanisme LCSR jusqu'à 21 espèces.

η	P , kPa	δt_{inf} , %	ΔT_{eq} , K	$\Delta_{max}T$, K	δM_{eq} , %	$\delta_{max}M$, %
0	10	27	70	87	12	13
0	100	23	103	103	12	13
0	1000	18	133	144	5	12
0.05	100	11	83	92	12	12
0.1	100	8	82	90	11	11
0.2	100	6	76	84	9	9
0.5	100	2	29	81	0.3	4

Pour montrer les évolutions des erreurs dans un plan ϕ - T_{ini} , nous avons choisi comme cas représentatif le plan correspondant à $\eta = 0$ et à $P = 100$ kPa. Les champs de δt_{inf} , ΔT_{eq} , $\Delta_{max}T$, δM_{eq} et $\delta_{max}M$ sont présentés sur la figure 3.21. Globalement, l'accord entre les mécanismes complet et réduit est satisfaisant. Suite à la réduction, les erreurs augmentent dans la zone $\phi > 2.5-3$. Concernant le délai d'autoinflammation, l'erreur est supérieure à 5-10 % pour le mélange riche à $T_{ini} > 1500$ K (figure 3.21(a)). La différence de la température d'équilibre est supérieure à 50 K pour le mélange très riche à $T_{ini} < 1500$ K (figure 3.21(b)). L'écart maximal le long du profil de T est supérieur à 50 K pour $\phi > 1$ (figure 3.21(c)). Quant à la masse molaire du mélange, sa différence à l'état d'équilibre dépasse 1 % pour le mélange très riche à $T_{ini} < 1500$ K (figure 3.21(d)). Le profil de M a un écart maximal supérieur à 5 % également pour le mélange très riche (figure 3.21(e)).

Les 21 espèces réactives restant dans le mécanisme sont :

- réactifs : CH_4 , H_2 , O_2
- produits finaux : CO_2 , H_2O
- groupe H-O : H , O , OH , HO_2 , H_2O_2
- groupe C-H : CH_3 , CH_2 , C_2H_6 , C_2H_5 , C_2H_4 , C_2H_3 , C_2H_2
- groupe C-H-O : CH_3O , CH_2O , HCO , CO

Afin de mettre en évidence l'importance de ces espèces, nous présentons ici les résultats concernant HO_2 , H_2O_2 , CH_3O , CH_2 , HCO , C_2H_6 , C_2H_5 , C_2H_4 , C_2H_3 , C_2H_2 . Les autres espèces ne sont pas considérées car elles sont indispensables au mécanisme. Nous avons estimé les erreurs en éliminant une espèce à la fois. Le tableau 3.15 résume les erreurs maximales évaluées dans le plan ϕ - T_{ini} pour $\eta = 0$ et pour $P = 100$ kPa.

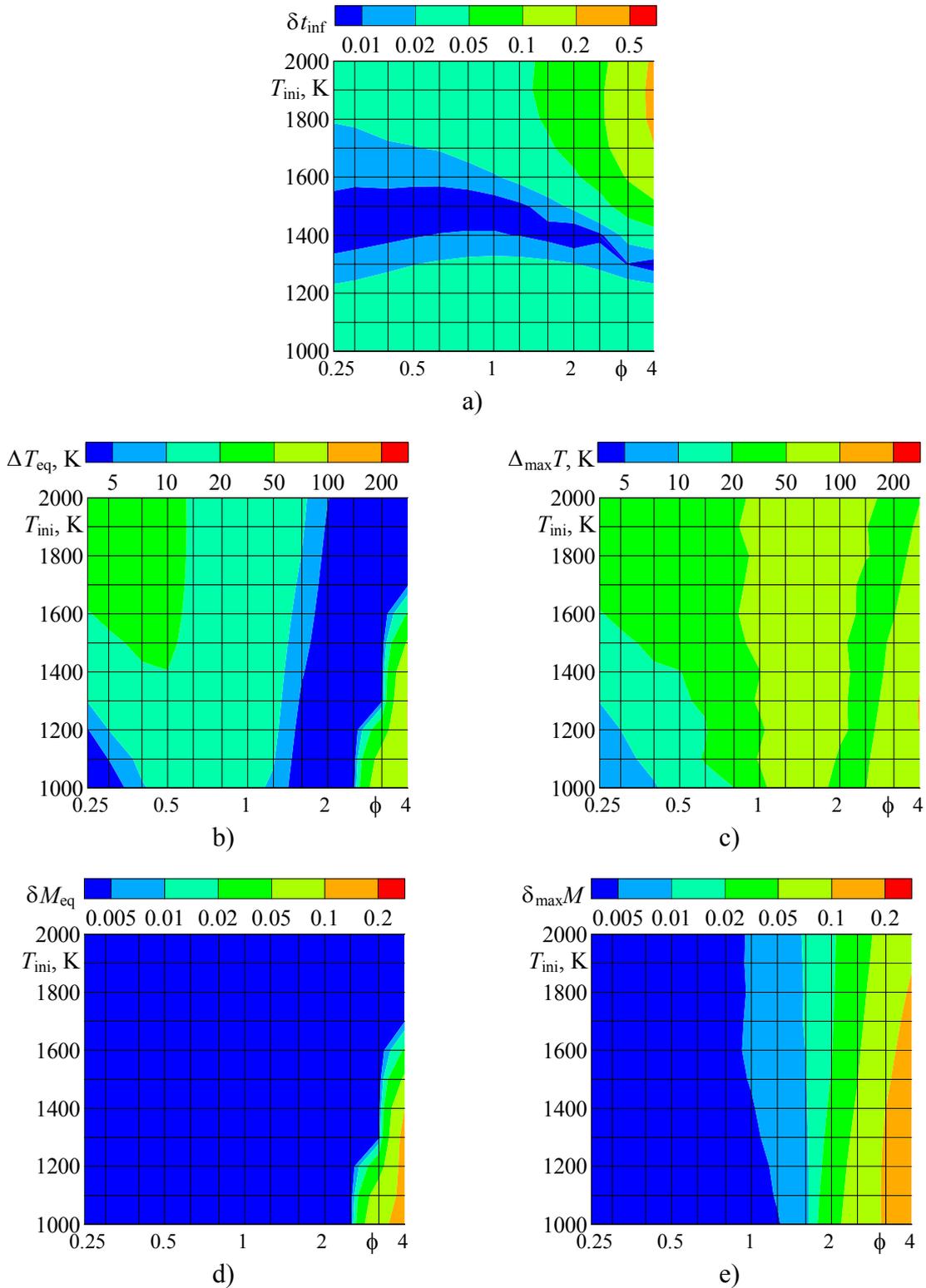


Figure 3.21. Champs d'erreurs pour le mécanisme à 21 espèces : a) δt_{inf} , b) ΔT_{eq} , c) $\Delta_{max} T$, d) δM_{eq} , e) $\delta_{max} M$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 100$ kPa.

Tableau 3.15. Erreurs après l'élimination d'une espèce du mécanisme réduit.

Espèce	δt_{inf} , %	ΔT_{eq} , K	$\Delta_{\text{max}}T$, K	δM_{eq} , %	$\delta_{\text{max}}M$, %
HCO	819	1530	1531	19	19
CH ₃ O	768	1381	1386	14	14
HO ₂	497	1456	1460	12	13
C ₂ H ₄	108	147	314	3	6
C ₂ H ₆	95	100	228	11	12
C ₂ H ₅	62	114	284	10	10
CH ₂	30	108	321	15	16
H ₂ O ₂	89	103	103	12	13
C ₂ H ₂	11	187	215	7	8
C ₂ H ₃	21	104	164	13	13

Les espèces HCO, CH₃O et HO₂ sont très importantes. Dans certaines conditions, le mélange ne s'enflamme pas en l'absence d'une de ces espèces. Les zones de sensibilité particulière sont :

HCO : $T_{\text{ini}} < 1500$ K pour δt_{inf} ; $\phi < 2.5$ pour ΔT_{eq} et pour $\Delta_{\text{max}}T$

CH₃O : plan entier ϕ - T_{ini} pour δt_{inf} ; $0.6 < \phi < 2.5$ et $T_{\text{ini}} < 1500$ K pour ΔT_{eq} et pour $\Delta_{\text{max}}T$

HO₂ : $\phi > 0.8$ et $T_{\text{ini}} < 1500$ K pour δt_{inf} ; $1 < \phi < 2$ et $T_{\text{ini}} < 1100$ K pour ΔT_{eq} ;
 $\phi < 2$ pour $\Delta_{\text{max}}T$

Les espèces C₂H₄, C₂H₆, C₂H₅, CH₂ sont importantes pour le délai d'autoinflammation et également pour le profil de température. Les zones de sensibilité particulière sont :

C₂H₄ : $\phi < 0.5$, $T_{\text{ini}} < 1500$ K pour δt_{inf} ; $\phi > 0.5$ pour $\Delta_{\text{max}}T$

C₂H₆ : $T_{\text{ini}} < 1600$ K pour δt_{inf} ; $\phi > 1.5$ et $T_{\text{ini}} < 1200$ K pour $\Delta_{\text{max}}T$

C₂H₅ : $\phi < 0.4$, $T_{\text{ini}} < 1400$ K pour δt_{inf} ; $\phi > 1$ pour $\Delta_{\text{max}}T$

CH₂ : $1 < \phi < 2.5$ pour $\Delta_{\text{max}}T$

H₂O₂ est important pour le délai d'autoinflammation à $T_{\text{ini}} < 1200$ K. C₂H₂ et C₂H₃ sont importants principalement pour le profil de température quand le mélange est riche $\phi > 1.5-2$.

3.5.2.3. Modification du mécanisme à 21 espèces et à 123 réactions

Nous allons utiliser le mécanisme à 21 espèces et à 123 réactions en tant que mécanisme de référence pour les phases suivantes de la réduction. Avant de continuer la réduction, nous introduisons ici une version modifiée de ce mécanisme qui a de meilleures performances en particulier la capacité de prédire l'effet de la viciation par H₂O sur le délai d'autoinflammation. Les modifications ont porté sur la mise à jour des constantes de vitesse de quelques réactions, sur l'implantation des réactions dépendantes de la pression et sur la révision des efficacités de 3^e corps. Nous n'avons pas eu l'intention d'implanter ces modifications dans le mécanisme complet parce qu'il a été conçu et validé pour un large spectre d'applications et nous n'avons pas eu l'intérêt de le revalider complètement. La version modifiée du mécanisme à 21 espèces est présentée dans l'annexe B. Nous donnons ici quelques commentaires concernant les modifications apportées. Les numéros des réactions mentionnées commençant par « s- » correspondent à la numérotation attribuée au mécanisme à 123 réactions.

Selon une récente version du mécanisme établie par Dagaut (2002), nous avons mis à jour les constantes de vitesse des réactions suivantes :



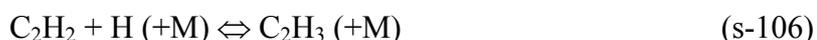
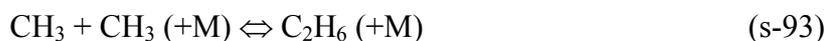
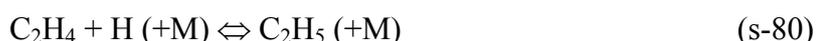
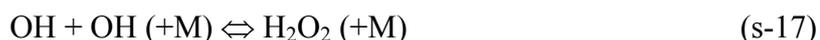
La constante de vitesse de la réaction s-37 a été augmentée d'un facteur de 1.4 dans le but d'améliorer la prédiction du délai d'autoinflammation pour une température de 1200 K.

Nous avons adopté les constantes de vitesse généralement acceptées dans la littérature pour les réactions suivantes :

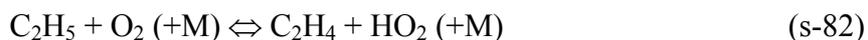
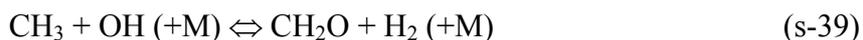
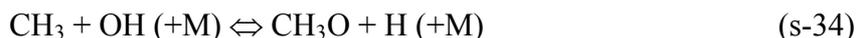


Dans le mécanisme complet, les constantes de vitesse des réactions dépendant de la pression ont été présentées par leurs approximations pour une pression fixe. Cela empêche d'appliquer le mécanisme aux problèmes de pression variable. Nous avons représenté l'ensemble des données à pression constante pour chaque réaction sous la forme (3.14) ou (3.15) conformément à l'approximation SRI (3.20)-(3.21). Les réactions dépendant de la pression sont :

– réactions unimoléculaires



– réactions bimoléculaires



Remarque : Certaines routines de CHEMKIN-II ne sont pas applicables au traitement des réactions bimoléculaires. Nous avons adapté les routines concernées à ce type de réactions. Pour une utilisation éventuelle du mécanisme avec CHEMKIN-II standard, nous

donnons les approximations des constantes de vitesse des réactions bimoléculaires pour une pression de 100 kPa dans l'annexe B.

Les efficacités de 3^e corps ont été établies d'après une compilation de données figurant dans des mécanismes publiés récemment [Hughes et al. (2001), Li et al. (2004), CERMECH]. L'efficacité catalytique de H₂O dans la réaction $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ a été spécialement ajustée afin d'obtenir un accord satisfaisant avec les résultats expérimentaux de Wang et al. (2003) sur l'effet de viciation par H₂O.

Les résultats de validation du mécanisme modifié à 21 espèces et à 123 réactions sont présentés plus loin.

3.5.2.4. Minimisation du nombre de réactions

Afin de minimiser le nombre de réactions dans le mécanisme à 21 espèces réactives, nous avons utilisé la méthode décrite dans la section 3.5.1. Le mécanisme modifié à 21 espèces et 123 réactions a été pris comme référence pour la procédure d'élimination. Les valeurs plafond choisies pour les erreurs de réduction sont les suivantes : $\delta^* t_{inf} = 2\%$, $\Delta^* T_{eq} = 10\text{ K}$, $\delta^* M_{eq} = 0.5\%$, $\Delta^*_{max} T = \Delta^*_{moy} T = 20\text{ K}$, $\delta^*_{max} M = \delta^*_{moy} M = 1\%$. Les poids attribués aux scores des erreurs sont égaux à 1.

Considérons d'abord les résultats pour l'oxydation de CH₄ pur ($\eta = 0$). La figure 3.22 montre l'évaluation du nombre de réactions N_r dans le plan $\phi - T_{ini}$ pour $\eta = 0$ et pour trois pressions : 50 kPa, 100 kPa et 200 kPa. Les jeux contenant plus de 40 réactions correspondent aux conditions $\phi = 0.3-2$ et $T_{ini} < 1500\text{ K}$. Les jeux de réactions les plus simples, composés de moins de 30 réactions, sont obtenus pour $\phi < 0.5$ et pour $T_{ini} > 1800\text{ K}$.

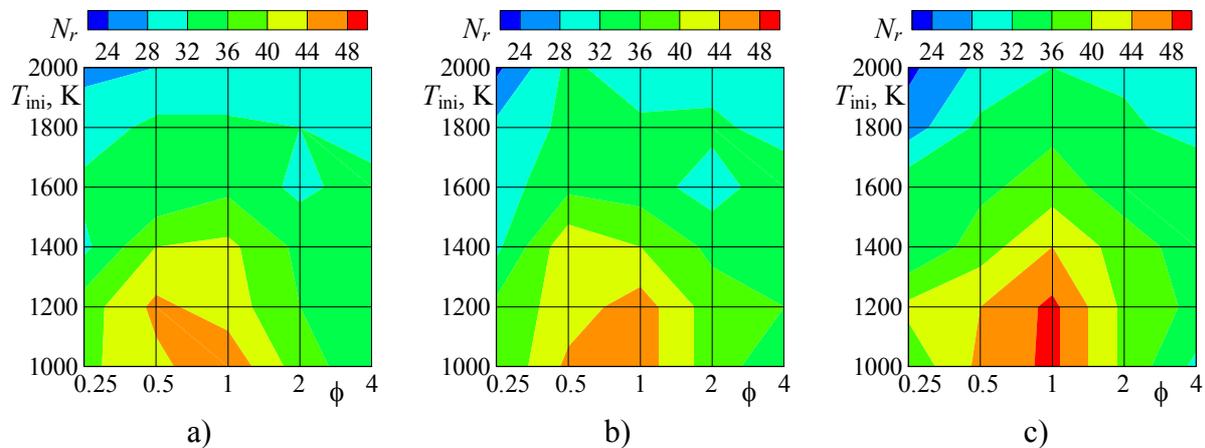


Figure 3.22. Évaluation du nombre de réactions dans le plan $\phi - T_{ini}$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 50\text{ kPa}$ (a) ou $P = 100\text{ kPa}$ (b) ou $P = 200\text{ kPa}$ (c).

La minimisation locale du nombre de réactions permet parfois d'éliminer certaines espèces si elles ne participent plus à aucune réaction. La figure 3.23 présente la répartition du nombre d'espèces N_s pour les mêmes plans que sur la figure précédente. Le nombre d'espèces diminue principalement dans les zones $\phi < 0.5$ et $T_{ini} > 1600\text{ K}$. En comparant les figures 3.22 et 3.23, nous pouvons constater que les zones dans lesquelles N_r et N_s sont les plus élevés ne sont pas forcément coïncidentes. Les espèces les plus souvent éliminées sont H₂O₂ ($T_{ini} \geq 1600\text{ K}$) et C₂H₂ ($\phi < 0.5$).

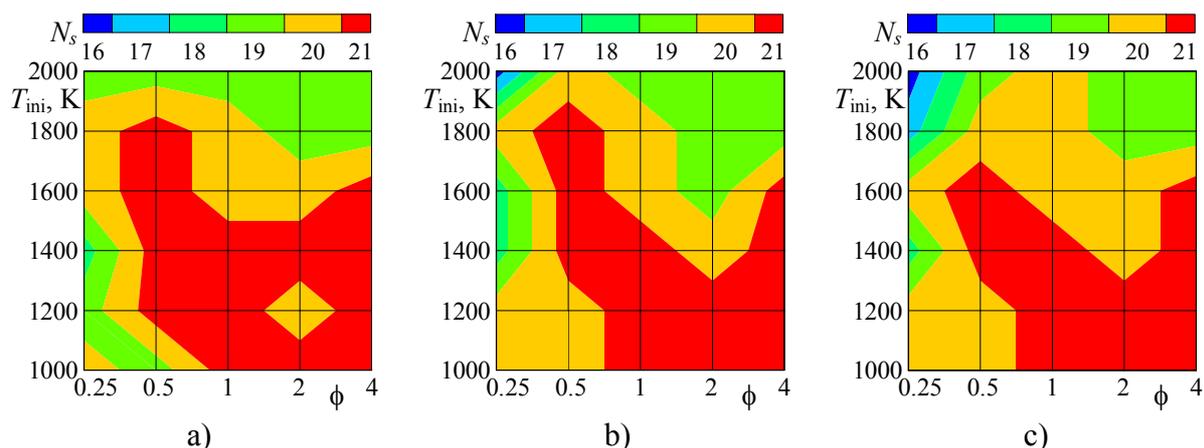


Figure 3.23. Évaluation du nombre d'espèces dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

Tableau 3.16. Réactions les plus fréquentes dans les mécanismes locaux selon η .

N ^o	Réaction	Ψ_r^*		
		$\eta = 0$	$\eta = 0.1$	$\eta = 0-0.5$
s-2	$O + H_2 \Leftrightarrow OH + H$	0.900	0.995	0.978
s-3	$H + O_2 \Leftrightarrow OH + O$	1	1	1
s-6	$H_2 + OH \Leftrightarrow H_2O + H$	0.881	1	0.976
s-9	$H_2 + O_2 \Leftrightarrow OH + OH$	0.010	0.967	0.770
s-13	$H + HO_2 \Leftrightarrow OH + OH$	0.700	0.910	0.806
s-24	$CO + OH \Leftrightarrow CO_2 + H$	0.776	0.686	0.698
s-26	$CH_4 + O \Leftrightarrow CH_3 + OH$	0.976	0.943	0.808
s-27	$CH_3 + H (+M) \Leftrightarrow CH_4 (+M)$	0.890	0.924	0.885
s-28	$CH_4 + H \Leftrightarrow CH_3 + H_2$	0.995	1	0.997
s-29	$CH_4 + OH \Leftrightarrow CH_3 + H_2O$	0.962	1	0.930
s-32	$CH_3 + O \Leftrightarrow CH_2O + H$	0.929	0.976	0.975
s-33	$CH_3O + M \Leftrightarrow CH_2O + H + M$	1	1	0.828
s-35	$CH_3 + HO_2 \Leftrightarrow CH_3O + OH$	0.838	0.557	0.508
s-36	$CH_3 + O_2 \Leftrightarrow CH_3O + O$	1	0.971	0.782
s-37	$CH_3 + O_2 \Leftrightarrow CH_2O + OH$	0.938	0.886	0.676
s-52	$CH_2O + H \Leftrightarrow HCO + H_2$	0.681	0.933	0.865
s-55	$HCO + CH_3 \Leftrightarrow CO + CH_4$	0.867	0.814	0.695
s-57	$HCO + M \Leftrightarrow H + CO + M$	1	1	0.973
s-58	$HCO + O_2 \Leftrightarrow CO + HO_2$	1	0.933	0.855
s-80	$C_2H_4 + H (+M) \Leftrightarrow C_2H_5 (+M)$	1	0.943	0.828
s-81	$CH_3 + CH_3 \Leftrightarrow C_2H_5 + H$	0.871	0.852	0.766
s-93	$CH_3 + CH_3 (+M) \Leftrightarrow C_2H_6 (+M)$	0.900	0.833	0.748
s-102	$C_2H_2 + O \Leftrightarrow CH_2 + CO$	0.790	0.657	0.609
s-106	$C_2H_2 + H (+M) \Leftrightarrow C_2H_3 (+M)$	0.790	0.657	0.610

* Les cellules grisées marquent les réactions qui n'appartiennent pas à la sélection.

Parmi tous les jeux locaux, le jeu minimal a 23 réactions et le maximal 49. Le nombre minimal d'espèces est 16. L'union de tous les jeux de réactions locaux pour $\eta = 0$ donne un mécanisme à 72 réactions. En même temps, leur intersection contient seulement 6 réactions. Cela signifie que la cohérence entre les jeux de réactions locaux est faible. Nous pouvons ainsi conclure qu'il n'y a pas de sous-mécanisme ferme qui puisse être considéré comme corps cinétique de l'oxydation de CH_4 dans toutes les conditions. En outre, cette conclusion affirme qu'un mécanisme réduit généré localement a un domaine de validité très restreint.

Afin de caractériser l'importance d'une réaction, nous proposons le critère Ψ_r , qui définit la fraction des points de la grille paramétrique pour lesquels cette réaction est présente dans les mécanismes locaux. En fixant un seuil pour Ψ_r , nous pouvons séparer les réactions les plus fréquemment utilisées. Le tableau 3.16 regroupe, dans la colonne « $\eta = 0$ », 21 réactions dont le niveau de Ψ_r est supérieur à 0.75. Les 6 réactions incluses dans tous les mécanismes locaux sont les réactions s-3, s-33, s-36, s-57, s-58 et s-80. Une liste de toutes les réactions avec leurs valeurs de Ψ_r est donnée dans l'annexe B.

Nous pouvons évaluer de la même manière les fréquences Ψ_s , associées aux espèces. Le tableau 3.17 présente 11 espèces parmi lesquelles 7 espèces, dont le niveau de Ψ_s est inférieur à l'unité pour $\eta = 0$, sont les suivantes : H_2 , H_2O_2 , CO_2 , CH_2 , C_2H_6 , C_2H_3 , C_2H_2 . Il est surprenant que le produit final CO_2 ne soit pas dans tous les mécanismes locaux. La zone où CO_2 est parfois exclu des mécanismes locaux correspond à $\phi > 2$ pour tous les niveaux de P .

Tableau 3.17. Fréquences d'espèces Ψ_s selon η .

η	H_2	HO_2	H_2O_2	CO_2	CH_3O	CH_2	C_2H_6	C_2H_5	C_2H_4	C_2H_3	C_2H_2
0	0.995	1	0.590	0.824	1	0.948	0.900	1	1	0.900	0.790
0.1	1	0.971	0.343	0.690	1	0.857	0.833	0.948	0.948	0.690	0.657
0-0.5	0.999	0.967	0.458	0.713	0.839	0.757	0.748	0.851	0.839	0.667	0.610

L'ajout de H_2 dans le combustible modifie sensiblement les mécanismes locaux pour les mêmes conditions ϕ , P et T_{ini} . La figure 3.24 montre l'évaluation du nombre de réactions N_r dans le plan ϕ - T_{ini} pour $\eta = 0.1$ et pour trois pressions : 50 kPa, 100 kPa et 200 kPa.

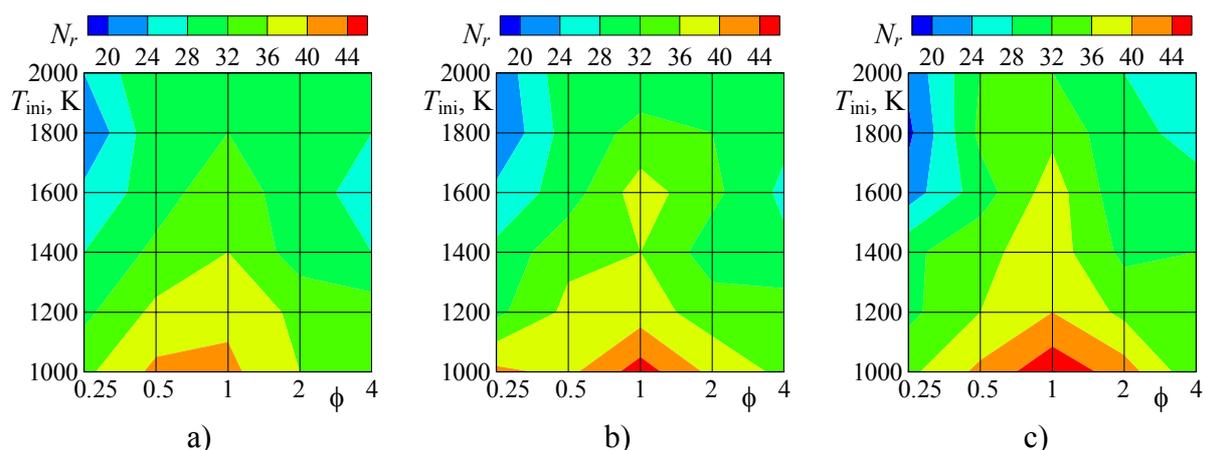


Figure 3.24. Évaluation du nombre de réactions dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0.1$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

Les jeux contenant plus de 40 réactions correspondent aux températures plutôt basses $T_{\text{ini}} < 1200$ K. Les jeux de réactions les plus simples, composés de moins de 30 réactions, sont

obtenus pour des mélanges pauvres $\phi < 0.5$ ou pour des mélanges riches $\phi > 2$ et principalement pour $T_{\text{ini}} > 1400$ K.

La diminution locale du nombre d'espèces est plus marquée que dans le cas de CH_4 pur. La figure 3.25 présente la répartition du nombre d'espèces N_s pour les mêmes plans que sur la figure précédente. Le nombre d'espèces diminue principalement dans les zones $\phi < 0.5$ et $T_{\text{ini}} > 1000$ K. Les espèces les plus souvent éliminées sont H_2O_2 ($T_{\text{ini}} \geq 1000$ K et $P \leq 200$ kPa, $T_{\text{ini}} > 1200$ -1400 K et $P \geq 500$ kPa), C_2H_2 et C_2H_3 ($\phi < 0.5$ -1), CO_2 ($\phi > 1$ -2).

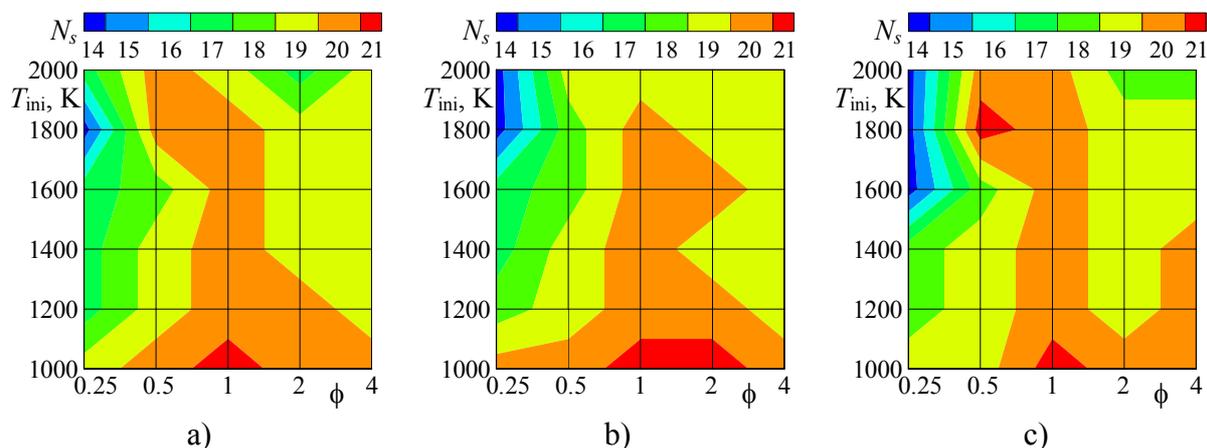


Figure 3.25. Évaluation du nombre d'espèces dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0.1$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

Parmi tous les jeux locaux, le jeu minimal a 19 réactions et le maximal 47. Le nombre minimal d'espèces est 14. Malgré la diminution de la taille moyenne des mécanismes locaux, leur union donne encore un mécanisme à 72 réactions et leur intersection contient également 6 réactions comme dans le cas $\eta = 0$. Cela ne veut pas dire que les unions des mécanismes établis pour $\eta = 0$ et $\eta = 0.1$ sont identiques. En les comparant, nous avons trouvé que le mécanisme pour $\eta = 0.1$ ne contient plus les réactions suivantes :



Parmi ces réactions, la réaction (s-25) n'est pas négligeable ($\Psi_{\text{s-25}} = 0.148$) et la réaction (s-49) est assez fréquemment utilisée ($\Psi_{\text{s-49}} = 0.548$) dans les mécanismes locaux pour $\eta = 0$. En revanche, les quatre réactions suivantes ont été rajoutées :



Leurs fréquences sont pourtant faibles ($\Psi_r < 0.05$).

Le tableau 3.16 regroupe, dans la colonne « $\eta = 0.1$ », 20 réactions dont le niveau de Ψ_r est supérieur à 0.75. En comparant les colonnes « $\eta = 0$ » et « $\eta = 0.1$ », nous pouvons observer l'évolution de Ψ_r des réactions présentes le plus fréquemment. Les réactions s-3, s-6,

s-28, s-29, s-33 et s-57 sont incluses dans tous les mécanismes locaux pour $\eta = 0.1$. Notons que s-3, s-33 et s-57 sont dans tous les mécanismes locaux pour $\eta = 0$. Une liste de toutes les réactions avec leurs valeurs de Ψ_r , déterminées pour $\eta = 0.1$, est donnée dans l'annexe B.

Quant aux espèces, le tableau 3.17 montre que 9 espèces ont les fréquences inférieures à l'unité. Ce sont les espèces suivantes : HO_2 , H_2O_2 , CO_2 , CH_2 , C_2H_6 , C_2H_5 , C_2H_4 , C_2H_3 , C_2H_2 . Par rapport à $\eta = 0$, les fréquences des espèces carbonées ont diminué ce qui est raisonnable. Le résultat inattendu c'est la diminution des fréquences de HO_2 et de H_2O_2 ce qui veut dire que ces deux espèces sont plus importantes pour l'oxydation de CH_4 que pour le mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$.

Nous ne donnons pas de détails concernant les mécanismes locaux générés pour les mélanges $\eta = 0.95$, 0.2 et 0.5. L'annexe B présente leurs unions. Comme résumé, le tableau 3.18 récapitule selon η les nombres de réactions et d'espèces minimaux ($N_{r_{\min}}$ et $N_{s_{\min}}$), maximaux ($N_{r_{\max}}$ et $N_{s_{\max}}$), composant l'union des mécanismes locaux ($N_{r_{\cup}}$ et $N_{s_{\cup}}$) et leur intersection ($N_{r_{\cap}}$ et $N_{s_{\cap}}$). Les données dans ce tableau confirment que les mécanismes locaux se simplifient en terme de N_r et de N_s lorsque η augmente. En comparant les tailles des unions en fonction de η , nous pouvons constater qu'une diminution considérable de $N_{r_{\cup}}$ est obtenue seulement pour $\eta = 0.5$.

Tableau 3.18. Caractéristiques des unions des mécanismes locaux selon η .

η	$N_{r_{\min}}$	$N_{r_{\max}}$	$N_{r_{\cup}}$	$N_{r_{\cap}}$	$N_{s_{\min}}$	$N_{s_{\max}}$	$N_{s_{\cup}}$	$N_{s_{\cap}}$
0	23	49	72	6	16	21	21	14
0.05	17	50	73	6	14	21	21	12
0.1	19	47	72	6	14	21	21	12
0.2	19	41	71	5	13	21	21	11
0.5	13	36	55	5	13	21	21	11
0-0.5	13	50	80	1	13	21	21	10

Le mécanisme réduit final est formé par l'union de tous les mécanismes locaux obtenus pour cinq mélanges combustibles. La dernière ligne du tableau 3.18 donne les caractéristiques de cette union globale. Nous avons ainsi obtenu un mécanisme à 80 réactions parmi lesquelles une seule est présente dans tous les mécanismes locaux et 50 sont communes pour les unions selon η . Les 17 réactions les plus fréquentes dans les mécanismes locaux sont rassemblées dans le tableau 3.16. La seule réaction indispensable dans toutes les conditions est s-3.

Parmi les 21 espèces réactives, 11 espèces ne sont pas présentes dans tous les mécanismes locaux, leurs fréquences Ψ_r sont regroupées dans la dernière ligne du tableau 3.17. Les trois espèces les plus souvent éliminées sont H_2O_2 , C_2H_2 et C_2H_3 .

Notre méthode qui consiste à créer les unions des mécanismes locaux repose sur l'hypothèse qu'il n'y a pas d'interaction forte entre les mécanismes locaux. En d'autres termes, la restauration d'un nombre arbitraire de réactions éliminées dans un mécanisme local ne peut pas dégrader sensiblement sa précision. Nous avons confirmé cette hypothèse directement par des tests numériques. Le tableau 3.19 récapitule les erreurs maximales évaluées dans le domaine ϕ - P - T_{ini} pour les unions des mécanismes locaux selon η ainsi que pour l'union globale. Les unions comparées sont distinguées par le nombre de réactions $N_{r_{\cup}}$. Suite à une comparaison avec les erreurs admissibles, données au début de cette section, nous pouvons conclure que les unions établies pour $\eta = 0.05$, 0.1 et 0.2 ont donné des erreurs supérieures à l'erreur plafond pour le délai d'autoinflammation ($\delta^* t_{\text{inf}} = 2\%$). Les conditions dans lesquelles l'erreur plafond est dépassée sont restreintes en totalité par : $\phi \leq 0.5$,

$T_{ini} \leq 1200$ K et $P \leq 200$ kPa. Le dépassement de l'erreur plafond pour le profil de température ($\Delta_{max}^* T = 20$ K) n'est pas significatif. En revanche, l'union globale a donné des erreurs bien au-dessous de leurs plafonds.

Tableau 3.19. Erreurs maximales données par les unions des mécanismes locaux.

η	$N_{r\cup}$	δt_{inf} , %	ΔT_{eq} , K	$\Delta_{max} T$, K	δM_{eq} , %	$\delta_{max} M$, %
0	72	1.1	1.7	16	0.4	0.7
	80	0.7	0.5	15	0.1	0.3
0.05	73	2.8	2.3	22	0.3	0.5
	80	1.2	0.7	12	0.1	0.4
0.1	72	4.1	0.9	15	0.1	0.3
	80	1.4	0.9	14	0.1	0.2
0.2	71	3.5	1.2	14	0.1	0.2
	80	0.9	1.3	15	0.1	0.2
0.5	55	1.3	9.7	20	0.4	0.6
	80	1.1	0.8	17	0.0	0.1

Les réactions éliminées du mécanisme sont marquées dans le tableau B.1 de l'annexe B. Aux 80 réactions restantes, nous avons attribué une nouvelle numérotation avec le préfixe « r- ».

Nous pouvons ainsi conclure que la méthode d'élimination de réactions a donné un résultat satisfaisant en terme de la précision du mécanisme réduit par rapport à son mécanisme de référence. Nous avons réduit le nombre de réactions de 123 à 80 ce qui correspond à un taux de réduction de 35 %.

3.5.2.5. Application de l'approche EQS

Pour repérer les espèces susceptibles d'être considérée en EQS, nous les avons triées selon leurs fractions massiques maximales $Y_{s,max}$. Les valeurs $Y_{s,max}$ ont été recherchées tout au long du processus d'oxydation pour chaque point de la grille paramétrique. Les maximums globaux $Y_{s,Max}$ ont été déterminés pour l'ensemble de $Y_{s,max}$ dans le domaine ϕ - P - T_{ini} pour chaque η . La figure 3.26 montre les évolutions de $Y_{s,Max}$ en fonction de η pour les espèces HO_2 , H_2O_2 , HCO , CH_3O , CH_2 , C_2H_5 et C_2H_3 . Les autres espèces ont $Y_{s,Max}$ qui dépassent largement le seuil de 10^{-3} . Les espèces HO_2 , H_2O_2 , HCO et CH_2 ont $Y_{s,Max}$ les plus importants dans la plage de η .

Pour les critères K_s'' , les maximums globaux $K_{s,Max}''$ ont été évalués de la même manière. Les évolutions de $K_{s,Max}''$ en fonction de η pour les mêmes espèces sont présentées sur la figure 3.27. Les espèces HO_2 , H_2O_2 , HCO et CH_2 sont aussi distinguées par $K_{s,Max}''$ relativement importants. Pour HO_2 , ce critère atteint $8 \cdot 10^{-4}$ à $\eta = 0.5$.

Quant au couplage entre les sept espèces considérées, HO_2 est couplé avec H_2O_2 , HCO , CH_3O et C_2H_5 , HCO est à son tour couplé avec H_2O_2 et CH_2 .

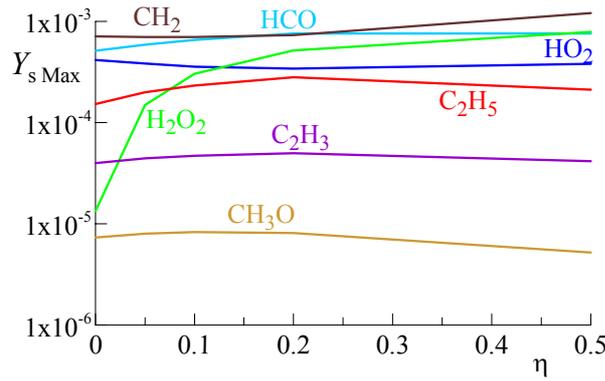


Figure 3.26. Maximums globaux des fractions massiques d'espèces en fonction de η .

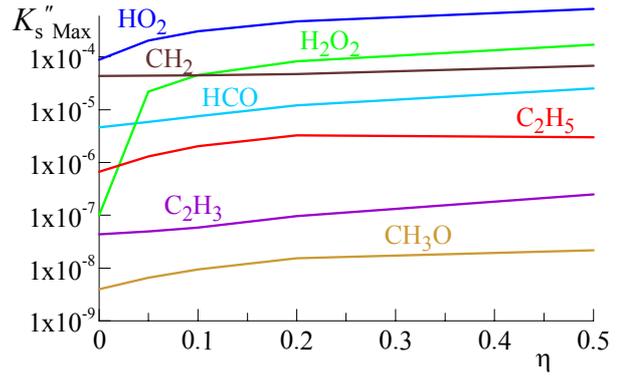


Figure 3.27. Maximums globaux des critères EQS d'espèces en fonction de η .

Ces trois considérations nous permettent de choisir les espèces H_2O_2 , CH_3O , CH_2 , C_2H_5 et C_2H_3 en tant qu'espèces EQS. En supposant que les taux nets de production de ces espèces W_s sont égaux à zéro, nous pouvons exprimer leurs concentrations par les formules suivantes :

$$C_{\text{H}_2\text{O}_2} = [(-\omega_{\text{br-15}}C_{\text{H}_2} - \omega_{\text{br-17}}C_{\text{H}_2\text{O}} + \omega_{\text{fr-18}}C_{\text{HO}_2} + \omega_{\text{fr-28}}C_{\text{CH}_4} + \omega_{\text{fr-49}}C_{\text{CH}_2\text{O}}) C_{\text{HO}_2} + (\omega_{\text{fr-16}}C_{\text{OH}} - \omega_{\text{br-19}}C_{\text{H}_2\text{O}}) C_{\text{OH}}] / [(\omega_{\text{fr-15}} + \omega_{\text{fr-19}}) C_{\text{H}} - \omega_{\text{br-16}} + \omega_{\text{fr-17}}C_{\text{OH}} - \omega_{\text{br-18}}C_{\text{O}_2} - \omega_{\text{br-28}}C_{\text{CH}_3} - \omega_{\text{br-49}}C_{\text{HCO}}] \quad (3.49)$$

$$C_{\text{CH}_3\text{O}} = [(-\omega_{\text{br-30}}C_{\text{H}}C_{\text{M}_r-30} - \omega_{\text{br-34}}C_{\text{HO}_2} - \omega_{\text{br-35}}C_{\text{CH}_4}) C_{\text{CH}_2\text{O}} + (\omega_{\text{fr-31}}C_{\text{HO}_2} + \omega_{\text{fr-32}}C_{\text{O}_2} - \omega_{\text{br-36}}C_{\text{CO}_2}) C_{\text{CH}_3}] / [\omega_{\text{fr-30}}C_{\text{M}_r-30} + \omega_{\text{fr-34}}C_{\text{O}_2} + \omega_{\text{fr-35}}C_{\text{CH}_3} + \omega_{\text{fr-36}}C_{\text{CO}} - \omega_{\text{br-31}}C_{\text{OH}} - \omega_{\text{br-32}}C_{\text{O}}] \quad (3.50)$$

$$C_{\text{C}_2\text{H}_5} = [(-\omega_{\text{br-62}}C_{\text{CH}_2\text{O}} + \omega_{\text{fr-64}}C_{\text{CH}_3}) C_{\text{CH}_3} + (\omega_{\text{fr-63}}C_{\text{H}} - \omega_{\text{br-65}}C_{\text{HO}_2}) C_{\text{C}_2\text{H}_4} + (-\omega_{\text{br-68}} + \omega_{\text{fr-67}}C_{\text{O}} + \omega_{\text{fr-69}}C_{\text{H}} + \omega_{\text{fr-71}}C_{\text{OH}} + \omega_{\text{fr-72}}C_{\text{CH}_3}) C_{\text{C}_2\text{H}_6}] / [\omega_{\text{fr-62}}C_{\text{O}} - \omega_{\text{br-63}} + (-\omega_{\text{br-64}} + \omega_{\text{fr-68}}) C_{\text{H}} + \omega_{\text{fr-65}}C_{\text{O}_2} + (\omega_{\text{fr-66}} - \omega_{\text{br-67}}) C_{\text{OH}} - \omega_{\text{br-69}}C_{\text{H}_2} - \omega_{\text{br-71}}C_{\text{H}_2\text{O}} - \omega_{\text{br-72}}C_{\text{CH}_4}] \quad (3.51)$$

$$C_{\text{CH}_2} = [\omega_{\text{fr-50}}C_{\text{CH}_3}C_{\text{M}_r-50} + (-\omega_{\text{br-51}}C_{\text{CH}_2\text{O}} + \omega_{\text{fr-52}}C_{\text{CH}_3} - \omega_{\text{br-59}}C_{\text{C}_2\text{H}_4}) C_{\text{H}} + (-\omega_{\text{br-53}}C_{\text{CO}} - \omega_{\text{br-56}}C_{\text{CO}_2}) C_{\text{H}}^2 + (-\omega_{\text{br-57}}C_{\text{CH}_2\text{O}} + \omega_{\text{fr-61}}C_{\text{C}_2\text{H}_4} + \omega_{\text{fr-73}}C_{\text{C}_2\text{H}_2}) C_{\text{O}} + (-\omega_{\text{br-54}}C_{\text{CO}} - \omega_{\text{br-55}}C_{\text{CO}_2}) C_{\text{H}_2} - \omega_{\text{br-58}}C_{\text{CH}_2\text{O}}C_{\text{CO}}] / [-\omega_{\text{br-50}}C_{\text{H}}C_{\text{M}_r-50} - \omega_{\text{br-52}}C_{\text{H}_2} - \omega_{\text{br-73}}C_{\text{CO}} + \omega_{\text{fr-51}}C_{\text{OH}} + (\omega_{\text{fr-53}} + \omega_{\text{fr-54}})C_{\text{O}} + (\omega_{\text{fr-55}} + \omega_{\text{fr-56}} + \omega_{\text{fr-57}}) C_{\text{O}_2} + \omega_{\text{fr-58}}C_{\text{CO}_2} + \omega_{\text{fr-59}}C_{\text{CH}_3}] \quad (3.52)$$

$$C_{\text{C}_2\text{H}_3} = [(\omega_{\text{fr-75}}C_{\text{H}} - \omega_{\text{br-76}}C_{\text{H}_2}) C_{\text{C}_2\text{H}_2} + (\omega_{\text{fr-77}}C_{\text{H}} + \omega_{\text{fr-78}}C_{\text{OH}} + \omega_{\text{fr-80}}C_{\text{CH}_3}) C_{\text{C}_2\text{H}_4} - \omega_{\text{br-79}}C_{\text{CH}_2\text{O}}C_{\text{HCO}}] / [-\omega_{\text{br-75}} + \omega_{\text{fr-76}}C_{\text{H}} - \omega_{\text{br-77}}C_{\text{H}_2} - \omega_{\text{br-78}}C_{\text{H}_2\text{O}} + \omega_{\text{fr-79}}C_{\text{O}_2} - \omega_{\text{br-80}}C_{\text{CH}_4}] \quad (3.53)$$

Afin de valider l'approche EQS, nous avons effectué des tests directs en appliquant cette approche à chaque espèce séparément et finalement aux cinq espèces dans leur ensemble. Les solutions obtenues ont été comparées à celles données par le mécanisme à 80 réactions. Ces tests ont confirmé la validité de l'approche EQS pour CH_3O , CH_2 , C_2H_5 et C_2H_3 sur toute la grille paramétrique. La mise de H_2O_2 en EQS raccourcit le délai d'autoinflammation dans certaines conditions mais n'altère pas les profils de T et de M . L'erreur δt_{inf} peut être importante dans la zone suivante de la grille : $\eta > 0.05$, $P > 200$ kPa et $T_{\text{ini}} < 1200$ K. La figure 3.28 montre l'évolution de δt_{inf} en fonction de P pour différentes T_{ini} et ϕ à $\eta = 0.1$ et à $\eta = 0.5$. D'après nos tests, δt_{inf} croît lorsque η et P augmentent et lorsque

T_{ini} diminue. Si nous considérons $\delta t_{inf} = 10\%$ comme erreur admissible, les conditions limitant l'approche EQS pour H_2O_2 à $T_{ini} = 1000$ K sont les suivantes : $\eta = 0.05$ et $P = 600$ kPa, $\eta = 0.1$ et $P = 300$ kPa, $\eta = 0.5$ et $P = 200$ kPa.

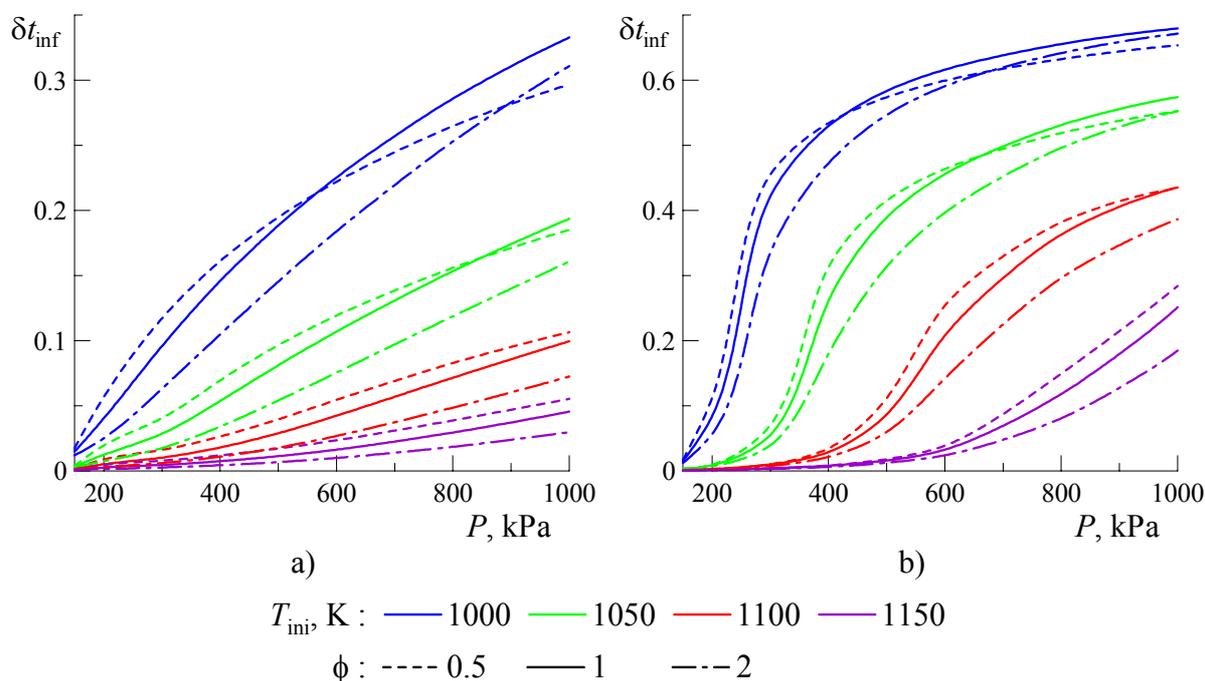


Figure 3.28. Erreur sur le délai d'autoinflammation due à l'approche EQS pour H_2O_2 :
a) $\eta = 0.1$; b) $\eta = 0.5$.

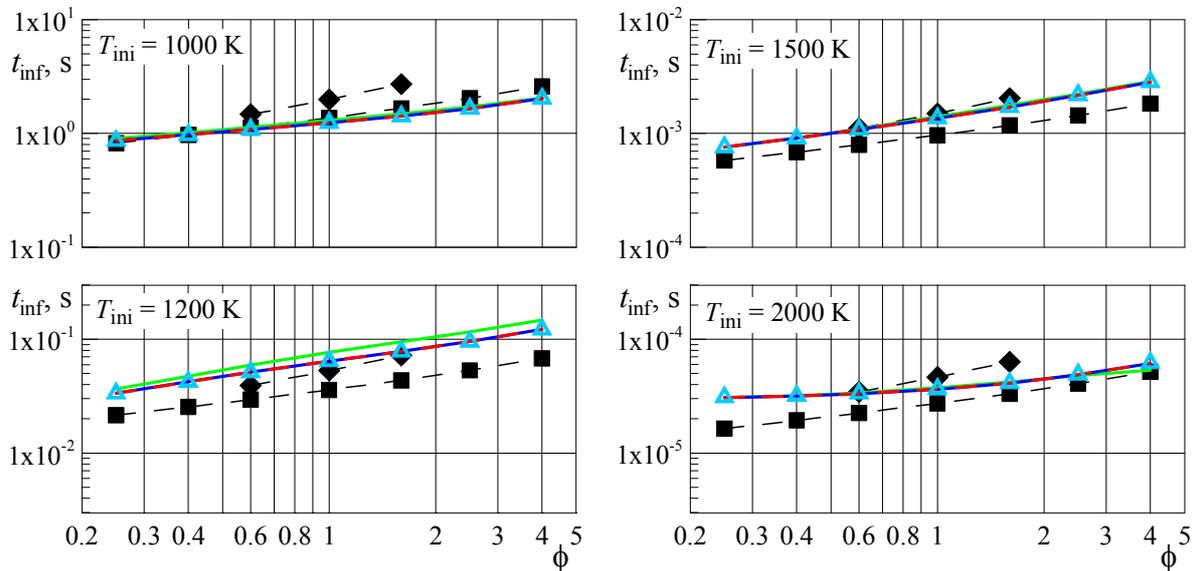
Il faut remarquer que le critère K_s'' n'a pas permis de repérer les conditions pour lesquelles δt_{inf} devient important. Le champ de $K_{s,max}''$ suit qualitativement le champ de δt_{inf} mais quantitativement $K_{s,max}''$ ne peut pas être relié à δt_{inf} . Par exemple, dans les conditions $\eta = 0.1$, $\phi = 1$ et $T_{ini} = 1000$ K, $K_{s,max}''$ varie de $1.2 \cdot 10^{-5}$ à $1.9 \cdot 10^{-5}$ lorsque P croît de 200 kPa à 1000 kPa. Si l'on augmente η jusqu'à 0.5, K_s'' varie entre $9 \cdot 10^{-5}$ et $1.6 \cdot 10^{-4}$ pour le même intervalle de P .

3.5.2.6. Validation des mécanismes réduits

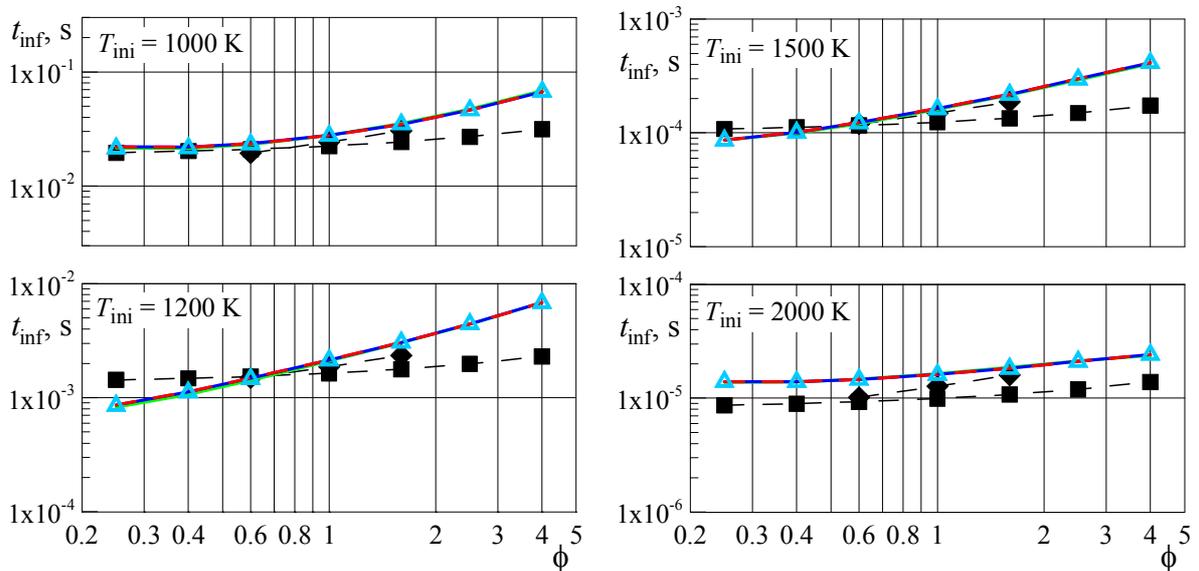
Nous avons testé les mécanismes issus des trois étapes de la réduction : 123 réactions, 80 réactions, 80 réactions et 5 espèces en EQS. Les simulations ont été effectuées avec l'approche de masse volumique constante. Dans le cas d'oxydation de CH_4-H_2 dans de l'air pur, les résultats de tests sont présentés ici pour les conditions suivantes : $\eta = 0$ et 0.1, $P_{ini} = 100$ kPa, $T_{ini} = 1000-2000$ K. D'autres tests, réalisés dans des conditions différentes en terme de η et de P_{ini} , ont donné des résultats similaires, sauf la zone où l'approche EQS n'est pas valide pour H_2O_2 .

Les mécanismes réduits ont été testés par rapport au mécanisme LCSR détaillé et aux corrélations empiriques sur le délai d'autoinflammation (3.28) et (3.29). La figure 3.29 montre l'évolution de t_{inf} en fonction de ϕ pour des niveaux différents de T_{ini} . En comparaison au mécanisme détaillé, la réduction et les modifications apportées n'ont pas influencé sensiblement les prédictions de t_{inf} sauf à $\eta = 0$ et à $T_{ini} = 1200$ K où les modifications ont amélioré l'accord avec les corrélations. Les trois mécanismes réduits ont donné des prédictions identiques donc la réduction n'a pas dégradé la performance du mécanisme.

Des tests plus détaillés ont été effectués en comparant les profils temporels de température générés par les mécanismes réduits. Ces profils sont tracés sur la figure 3.30 pour plusieurs valeurs de ϕ et pour plusieurs niveaux de T_{ini} . Les trois familles de profils sont en parfait accord dans toutes les conditions. Cela confirme la validité de la technique de réduction et des critères adoptés.



a)



b)

Corrélations : ■ présent travail ◆ Cheng et Oppenheim (1984)

LCSR : — détaillé — réduit 123 r. - - réduit 80 r. ▲ réduit 80 r. + EQS

Figure 3.29. Délai d'autoinflammation en fonction de ϕ prédit par le mécanisme LCSR détaillé et par les mécanismes réduits pour : $\eta = 0$ (a) et $\eta = 0.1$ (b), $P_{ini} = 100$ kPa, T_{ini} variable.

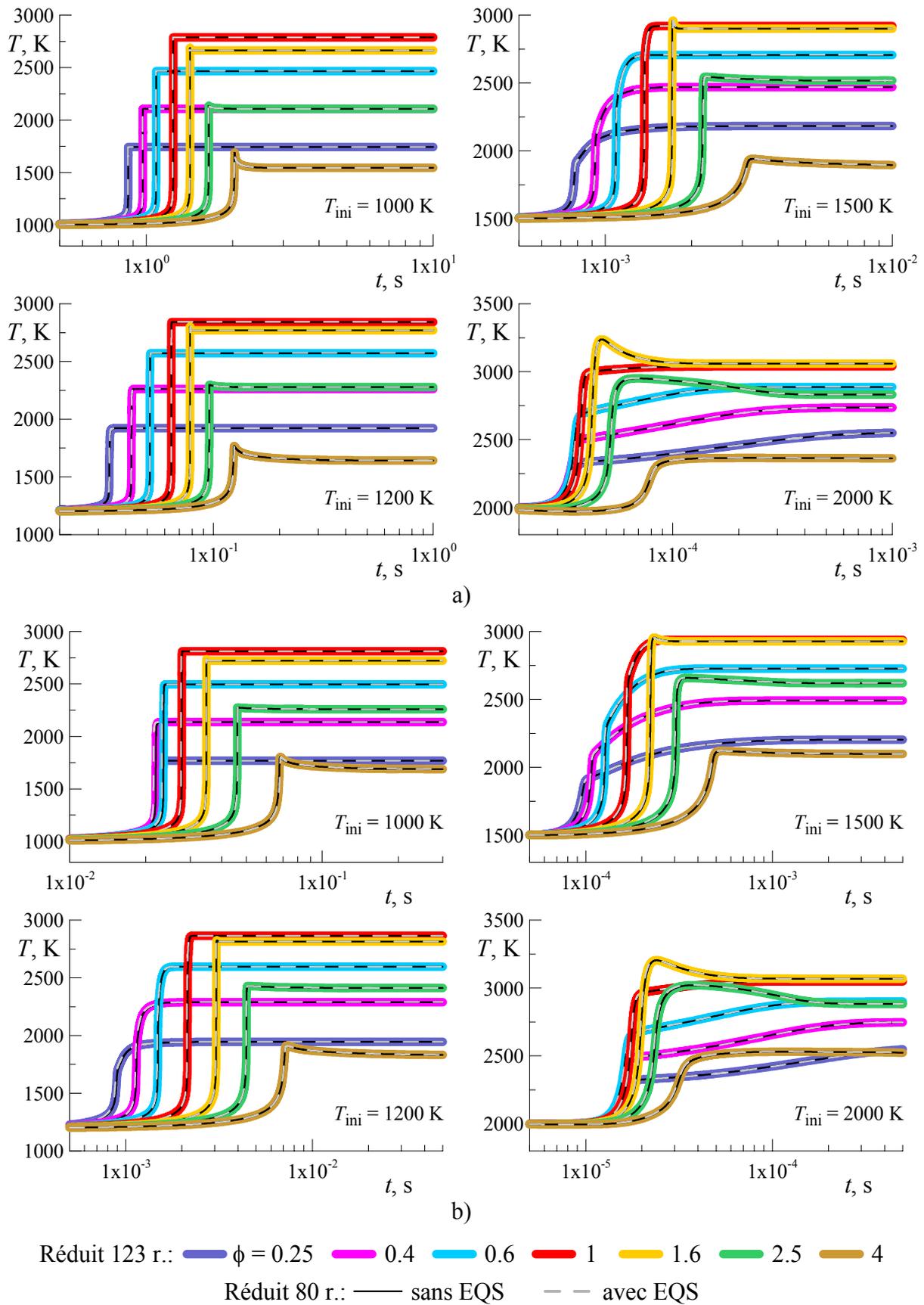


Figure 3.30. Profils temporels de température générés par les mécanismes réduits pour : $\eta = 0$ (a) et $\eta = 0.1$ (b), $P_{ini} = 100$ kPa, ϕ et T_{ini} variables.

Les mécanismes réduits ont été également validés dans le cas d'autoinflammation de H_2 pur dans de l'air vicié par H_2O . Ces tests justifient le choix concernant les efficacités de 3^e corps adoptées pour la réaction $H + O_2 + M \Leftrightarrow HO_2 + M$. Les délais d'autoinflammation prédits par les simulations sont comparés aux résultats expérimentaux de Wang et al. (2003) sur la figure 3.31. L'accord avec l'expérience a été nettement amélioré pour $X_{H_2O} = 0.15$. Les prédictions données par le mécanisme à 123 réactions (figure 3.31(a)) et par le mécanisme à 80 réactions sans EQS (figure 3.31(b)) sont complètement conformes. La figure 3.31(b) montre la diminution de t_{inf} due à l'approche EQS pour H_2O_2 . Nous pouvons constater que les conditions limitant l'applicabilité de l'approche EQS dépendent du niveau de viciation par H_2O .

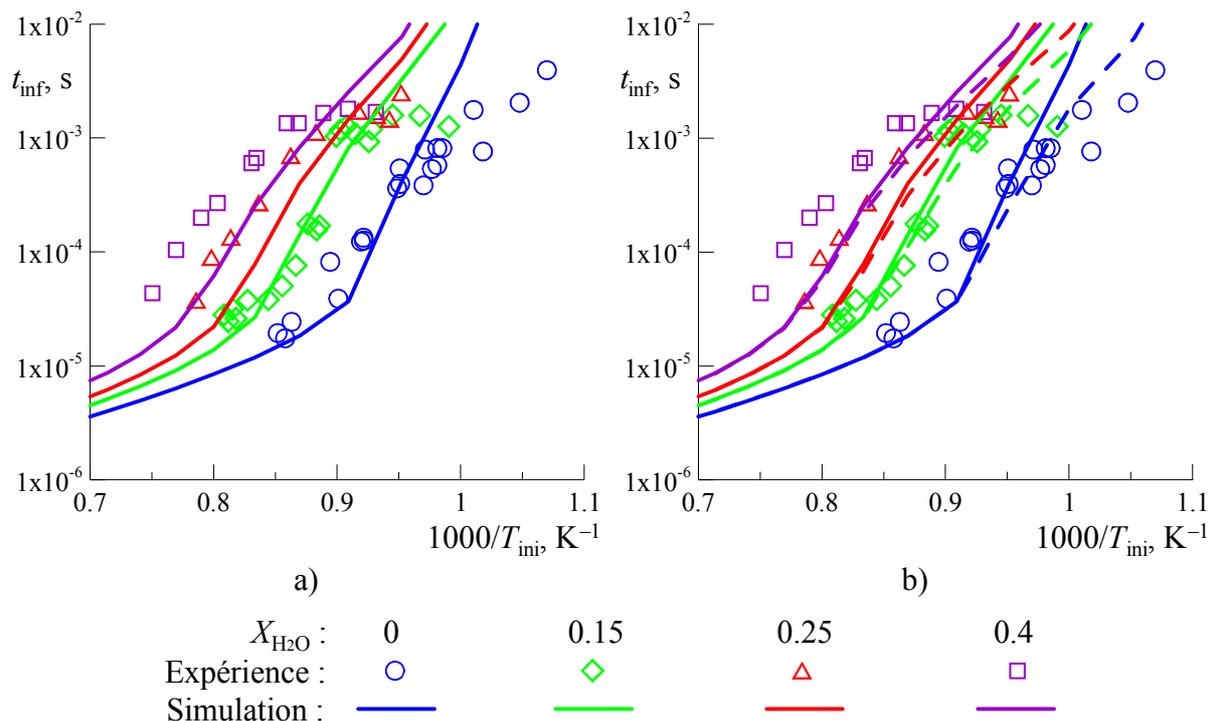


Figure 3.31. Effet de la viciation d'air par H_2O sur le délai d'autoinflammation de H_2 . Comparaison de l'expérience de Wang et al. (2003) et de simulations avec les mécanismes réduits : a) 123 r. ; b) 80 r., sans EQS – courbes continues, avec EQS – courbes en pointillés.

Pour conclure, nous avons effectué une réduction du mécanisme LCSR et évalué les performances du mécanisme réduit à toutes les étapes de la réduction. Le mécanisme réduit final prédit correctement le délai d'autoinflammation et les profils des quantités macroscopiques dans un grand domaine de conditions. Il faut pourtant utiliser l'approche EQS pour H_2O_2 avec précaution dans les conditions d'une basse température et d'une haute pression. Nos tests ont montré que le mécanisme réduit à 80 réactions est valable pour H_2 pur même si ce cas n'a pas été considéré lors de la réduction.

3.5.3. Réduction du mécanisme GRI-Mech v.3.0

Pour réduire le mécanisme GRI-Mech v.3.0 nous avons utilisé la même méthode et la même grille paramétrique que pour la réduction du mécanisme LCSR (voir la section 3.5.2). Les effets observés sont généralement analogues à ceux correspondants à la réduction du mécanisme LCSR. Les sections suivantes présentent les résultats essentiels de la réduction en faisant des parallèles avec la réduction du mécanisme LCSR.

3.5.3.1. Minimisation du nombre d'espèces réactives

Le mécanisme GRI-Mech v.3.0 complet, composé de 52 espèces réactives et de 323 réactions (53 espèces et 325 réactions avec Ar), est considéré comme mécanisme de référence. Après l'élimination des espèces azotées et des espèces C_3 , il nous reste 32 espèces réactives et 203 réactions. L'effet de cette troncature est illustré sur la figure 3.32 par les distributions des erreurs ΔT_{eq} et $\Delta_{max}T$ dans le plan ϕ - T_{ini} pour $\eta = 0$ et pour $P = 100$ kPa. ΔT_{eq} et $\Delta_{max}T$ ont le même maximum de 28 K. Cet effet est dû à l'élimination des espèces azotées. L'élimination des C_3 n'a pas eu de conséquences significatives.

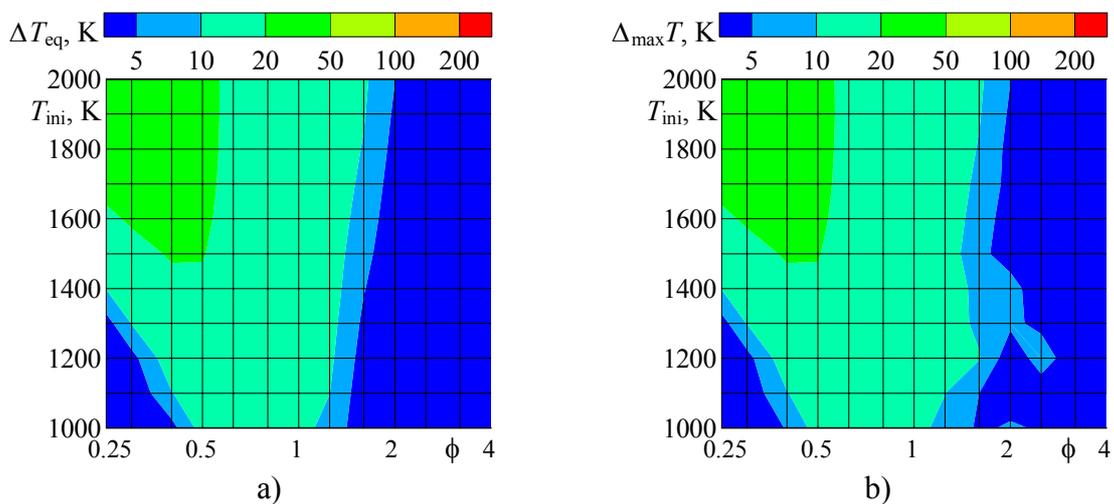


Figure 3.32. Champs d'erreurs pour le mécanisme sans les espèces azotées et sans les espèces C_3 : a) ΔT_{eq} , b) $\Delta_{max}T$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 100$ kPa.

Suite à une élimination progressive, nous sommes arrivés à réduire le nombre d'espèces réactives jusqu'à 22 ce qui a donné un mécanisme à 121 réactions. Le tableau 3.20 récapitule les erreurs maximales dans des plans ϕ - T_{ini} pour quelques valeurs fixes de η et de P . Les tendances observées sont les mêmes que dans le cas du mécanisme LCSR : pour $\eta = 0$, la croissance de P diminue les erreurs sur t_{inf} et sur M mais augmente les erreurs sur T ; l'augmentations de η diminue globalement les erreurs si P est constante. Par rapport au mécanisme LCSR à 21 espèces (tableau 3.14), les erreurs sont globalement plus faibles à l'exception de δt_{inf} qui devient importante dans une zone très limitée autour de $\phi = 4$ et de $T_{ini} = 2000$ K.

Tableau 3.20. Erreurs dues à la réduction du mécanisme GRI-Mech v.3.0 jusqu'à 22 espèces.

η	P , kPa	δt_{inf} , %	ΔT_{eq} , K	$\Delta_{\text{max}}T$, K	δM_{eq} , %	$\delta_{\text{max}}M$, %
0	10	35	37	102	6	9
0	100	41	43	116	7	9
0	1000	20	76	124	6	8
0.05	100	22	45	95	7	7
0.1	100	8	46	69	6	7
0.2	100	5	43	69	5	6
0.5	100	2	29	70	0.3	3

Les évolutions des erreurs δt_{inf} , ΔT_{eq} , $\Delta_{\text{max}}T$, δM_{eq} et $\delta_{\text{max}}M$ dans un plan ϕ - T_{ini} , correspondant à $\eta = 0$ et à $P = 100$ kPa, sont présentées sur la figure 3.33. Globalement, l'accord entre les mécanismes complet et réduit est satisfaisant. Suite à la réduction, les erreurs augmentent dans la zone $\phi > 2.5$ -3. S'agissant du délai d'autoinflammation, l'erreur est supérieure à 5 % pour $\phi > 2$ à $T_{\text{ini}} < 1100$ K et à $T_{\text{ini}} > 1600$ K (figure 3.33(a)). La différence de la température d'équilibre est inférieure à 50 K partout (figure 3.33(b)). L'écart maximal le long du profil de T est supérieur à 50 K pour $\phi > 2$ (figure 3.33(c)). Quant à la masse molaire du mélange, sa différence à l'état d'équilibre dépasse 1 % lorsque $\phi > 2.5$ et lorsque $T_{\text{ini}} < 1600$ K (figure 3.33(d)). Le profil de M a un écart maximal supérieur à 5 % pour $\phi > 2.5$ (figure 3.33(e)).

Les 22 espèces réactives restant dans le mécanisme sont :

- réactifs : CH₄, H₂, O₂
- produits finaux : CO₂, H₂O
- groupe H-O : H, O, OH, HO₂, H₂O₂
- groupe C-H : CH₃, CH₂, CH₂^(s), C₂H₆, C₂H₅, C₂H₄, C₂H₃, C₂H₂
- groupe C-H-O : CH₃O, CH₂O, HCO, CO

Le mécanisme LCSR réduit comporte les mêmes espèces excepté le radical singulier CH₂^(s). Cette espèce n'a pas de grande importance dans une zone particulière mais elle permet d'améliorer les qualités du mécanisme réduit du point de vue global. Pour $\eta = 0$ par exemple, l'élimination de CH₂^(s) augmente principalement δt_{inf} (le maximum de 41 % à 50 % et la moyenne de 3 % à 6 %) et $\Delta_{\text{max}}T$ (le maximum de 123 K à 144 K et la moyenne 40 K à 50 K).

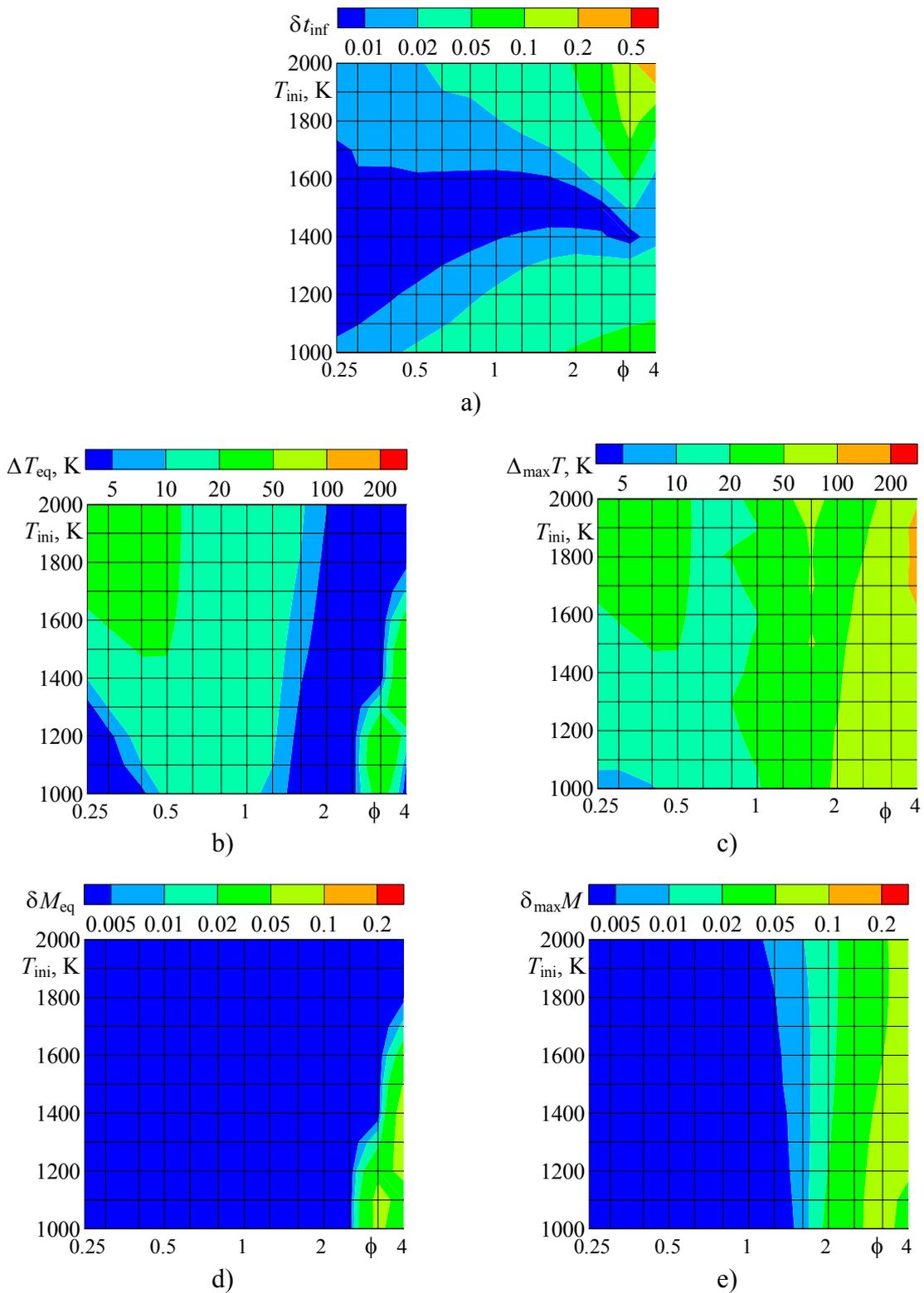


Figure 3.33. Champs d'erreurs pour le mécanisme à 22 espèces : a) δt_{inf} , b) ΔT_{eq} , c) $\Delta_{max} T$, d) δM_{eq} , e) $\delta_{max} M$. Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 100$ kPa.

3.5.3.2. Minimisation du nombre de réactions

Le mécanisme à 22 espèces et à 121 réactions a été pris comme référence pour minimiser le nombre de réactions. Ce mécanisme est présenté dans l'annexe C. La numérotation attribuée aux réactions est distinguée par le préfixe « s- ». Les valeurs plafond choisies pour les erreurs de réduction sont les suivantes :

$$\delta^* t_{\text{inf}} = 2 \%, \Delta^* T_{\text{eq}} = 10 \text{ K}, \delta^* M_{\text{eq}} = 0.5 \%, \Delta^*_{\text{max}} T = \Delta^*_{\text{moy}} T = 20 \text{ K}, \delta^*_{\text{max}} M = \delta^*_{\text{moy}} M = 1 \%$$

Pour l'oxydation de CH_4 pur ($\eta = 0$), la figure 3.34 montre l'évaluation du nombre de réactions N_r dans le plan ϕ - T_{ini} pour $\eta = 0$ et pour trois pressions : 50 kPa, 100 kPa et 200 kPa. Les jeux contenant plus de 45 réactions correspondent aux conditions $\phi = 0.5$ -2. Les jeux de réactions les plus simples, composés de moins de 35 réactions, sont obtenus pour $\phi < 0.5$ et pour $T_{\text{ini}} > 1600$ -1800 K. En comparaison avec le mécanisme LCSR (figure 3.22), la zone où N_r est le plus élevé correspond à des températures plus grandes (1200-1400 K au lieu de 1000-1200 K).

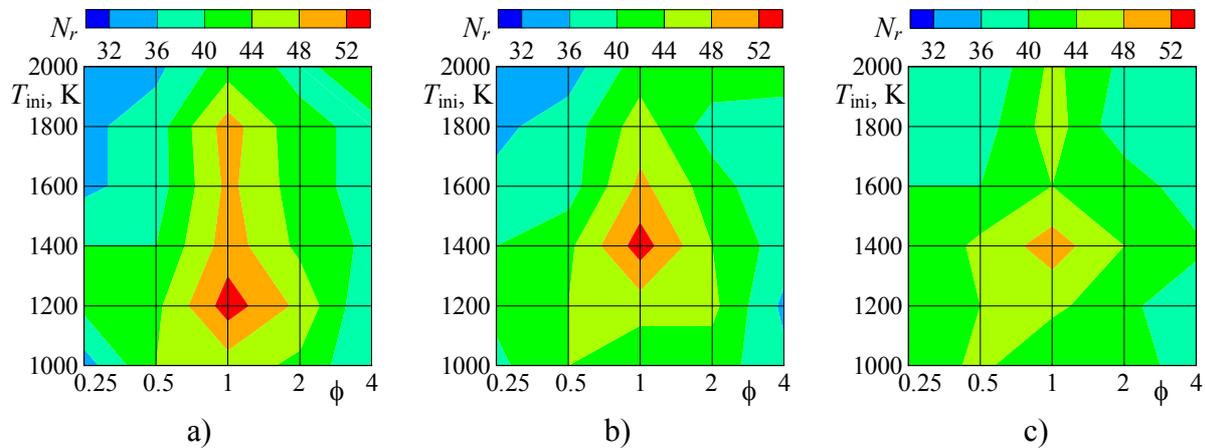


Figure 3.34. Évaluation du nombre de réactions dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

La figure 3.35 présente la répartition du nombre d'espèces N_s pour les mêmes plans que sur la figure précédente. Le nombre d'espèces diminue principalement dans la zone $\phi \leq 1$.

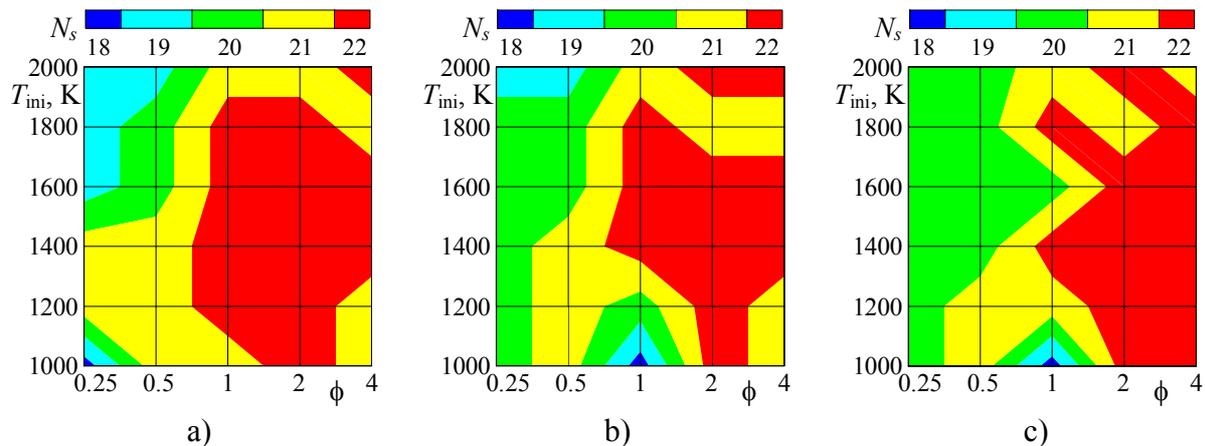


Figure 3.35. Évaluation du nombre d'espèces dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

En comparant les figures 3.34 et 3.35, nous pouvons constater que les zones dans lesquelles N_s est le plus élevé correspondent aux conditions riches, ce qui n'est pas le cas pour les champs de N_r . Les espèces le plus souvent éliminées sont C_2H_2 et C_2H_3 ($\phi < 1$).

Parmi tous les jeux locaux, le jeu minimal a 33 réactions et le maximal 55. Le nombre minimal d'espèces est de 18. L'union de tous les jeux de réactions locaux pour $\eta = 0$ a 83 réactions et leur intersection a seulement 8 réactions. Comme dans le cas du mécanisme LCSR, la cohérence entre les jeux de réactions locaux est faible.

Les réactions les plus fréquemment utilisées dans les mécanismes locaux sont regroupées dans le tableau 3.21. Leurs fréquences Ψ_r sont données dans la colonne « $\eta = 0$ ». Ψ_r est supérieure à 0.75 pour 27 réactions et 8 réactions sont incluses dans tous les mécanismes locaux. Une liste de toutes les réactions avec leurs valeurs de Ψ_r est donnée dans l'annexe C.

Tableau 3.21. Réactions les plus fréquentes dans les mécanismes locaux selon η .

N ^o	Réaction	Ψ_r^*		
		$\eta = 0$	$\eta = 0.1$	$\eta = 0-0.5$
s-3	$O + H_2 \Leftrightarrow H + OH$	0.843	0.986	0.962
s-9	$O + CH_3 \Leftrightarrow H + CH_2O$	0.852	0.910	0.902
s-10	$O + CH_4 \Leftrightarrow OH + CH_3$	0.981	0.871	0.830
s-21	$O_2 + CH_2O \Leftrightarrow HO_2 + HCO$	0.919	0.000	0.236
s-25	$H + O_2 + N_2 \Leftrightarrow HO_2 + N_2$	0.652	0.752	0.718
s-26	$H + O_2 \Leftrightarrow O + OH$	1	1	1
s-33	$H + HO_2 \Leftrightarrow O_2 + H_2$	0.614	0.933	0.858
s-38	$H + CH_3 (+M) \Leftrightarrow CH_4 (+M)$	0.914	0.971	0.942
s-39	$H + CH_4 \Leftrightarrow CH_3 + H_2$	1	0.990	0.987
s-42	$H + CH_2O (+M) \Leftrightarrow CH_3O (+M)$	1	0.995	0.833
s-43	$H + CH_2O \Leftrightarrow HCO + H_2$	0.952	0.981	0.954
s-50	$H + C_2H_4 (+M) \Leftrightarrow C_2H_5 (+M)$	0.848	0.743	0.642
s-56	$OH + H_2 \Leftrightarrow H + H_2O$	0.890	1	0.978
s-57	$OH + OH (+M) \Leftrightarrow H_2O_2 (+M)$	0.914	0.690	0.704
s-65	$OH + CH_3 \Leftrightarrow CH_2^{(s)} + H_2O$	0.843	0.919	0.814
s-66	$OH + CH_4 \Leftrightarrow CH_3 + H_2O$	1	1	0.975
s-69	$OH + CH_2O \Leftrightarrow HCO + H_2O$	0.838	0.367	0.393
s-78	$HO_2 + CH_3 \Leftrightarrow O_2 + CH_4$	0.952	0.305	0.423
s-79	$HO_2 + CH_3 \Leftrightarrow OH + CH_3O$	1	0.995	0.838
s-87	$CH_2^{(s)} + N_2 \Leftrightarrow CH_2 + N_2$	0.810	0.838	0.717
s-98	$CH_3 + O_2 \Leftrightarrow O + CH_3O$	1	0.800	0.646
s-99	$CH_3 + O_2 \Leftrightarrow OH + CH_2O$	0.962	0.762	0.597
s-101	$CH_3 + CH_3 (+M) \Leftrightarrow C_2H_6 (+M)$	0.876	0.786	0.693
s-102	$CH_3 + CH_3 \Leftrightarrow H + C_2H_5$	0.952	0.776	0.716
s-104	$CH_3 + CH_2O \Leftrightarrow HCO + CH_4$	0.881	0.471	0.403
s-108	$HCO + M \Leftrightarrow H + CO + M$	0.976	0.924	0.842
s-109	$HCO + O_2 \Leftrightarrow HO_2 + CO$	1	1	0.932
s-110	$CH_3O + O_2 \Leftrightarrow HO_2 + CH_2O$	1	0.929	0.710
s-114	$O + CH_3 \Rightarrow H + H_2 + CO$	0.657	0.824	0.814
s-117	$CH_2 + O_2 \Rightarrow H + H + CO_2$	0.881	0.929	0.732

* Les cellules grisées marquent les réactions qui n'appartiennent pas à la sélection.

Quant aux espèces, le tableau 3.22 présente les fréquences Ψ_s de 13 espèces parmi lesquelles 6 ont une fréquence Ψ_s inférieure à l'unité. En comparaison avec le mécanisme LCSR, le rôle des espèces H_2 et CO_2 est plus important tant qu'elles sont utilisées dans tous les mécanismes locaux.

Tableau 3.22. Fréquences d'espèces Ψ_s selon η .

η	H_2O_2	CH_2	$CH_2^{(s)}$	CO	CO_2	HCO	CH_2O	CH_3O	C_2H_2	C_2H_3	C_2H_4	C_2H_5	C_2H_6
0	0.938	0.948	0.905	1	1	1	1	1	0.586	0.719	1	1	0.876
0.1	0.705	0.981	0.962	1	0.981	1	1	1	0.586	0.657	0.867	0.895	0.786
0-0.5	0.725	0.868	0.894	0.999	0.908	0.984	0.984	0.849	0.522	0.584	0.760	0.781	0.693

L'ajout de H_2 dans le combustible simplifie les mécanismes locaux. Pour $\eta = 0.1$, la figure 3.36 montre l'évaluation du nombre de réactions N_r dans le plan $\phi-T_{ini}$ pour trois pressions : 50 kPa, 100 kPa et 200 kPa. Les jeux contenant plus de 45 réactions correspondent à une richesse proche de l'unité. Les jeux de réactions les plus simples, composés de moins de 35 réactions, sont principalement obtenus pour des mélanges pauvres $\phi < 0.5$.

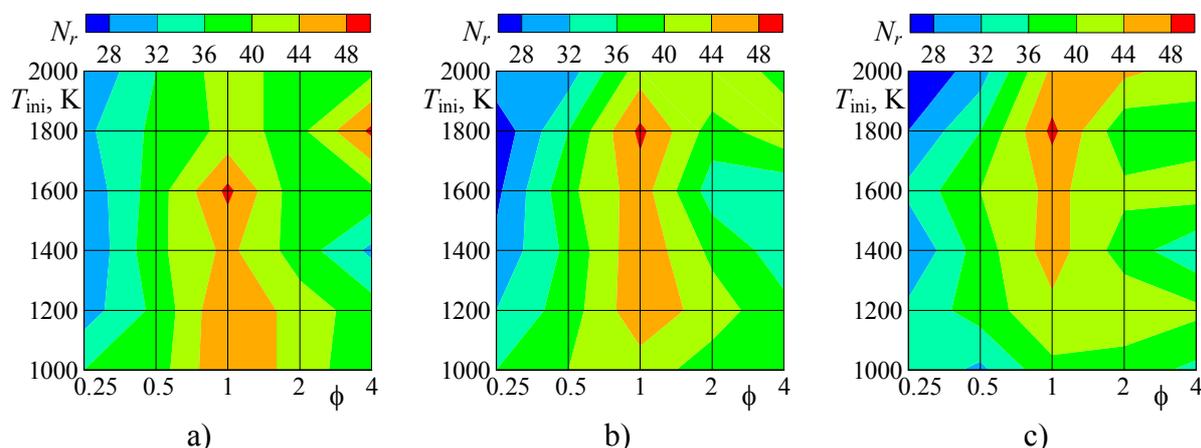


Figure 3.36. Évaluation du nombre de réactions dans le plan $\phi-T_{ini}$. Conditions fixes : $\eta = 0.1$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

La diminution locale du nombre d'espèces est plus marquée que dans le cas de CH_4 pur. La figure 3.37 présente la répartition du nombre d'espèces N_s pour les mêmes plans que sur la figure précédente. Le nombre d'espèces diminue dans la zone pauvre $\phi < 0.5$. Les espèces les plus souvent éliminées sont H_2O_2 ($\phi < 0.5$, $\phi > 1$ et $P \leq 500$ kPa), C_2H_2 et C_2H_3 ($\phi < 0.5-1$).

Malgré une simplification relative des mécanismes locaux (la taille varie entre 24 réactions et 49 réactions et le nombre d'espèces varie entre 16 et 22), leur cohérence est plus faible par rapport au cas de CH_4 pur. L'union de tous les jeux de réactions locaux pour $\eta = 0.1$ contient 87 réactions et leur intersection a seulement 4 réactions. Cela est aussi confirmé par les données sur Ψ_r présentées dans la colonne « $\eta = 0.1$ » du tableau 3.21. Vingt-quatre réactions ont un niveau de Ψ_r supérieur à 0.75 et 4 réactions sont incluses dans tous les mécanismes locaux. Une liste de toutes les valeurs Ψ_r déterminées pour $\eta = 0.1$ est donnée dans l'annexe C.

Quant aux espèces, le tableau 3.22 montre que 9 espèces ont des fréquences inférieures à l'unité. Par rapport à $\eta = 0$, les fréquences des espèces carbonées, à l'exception de CH_2 et de $CH_2^{(s)}$, ont diminué ainsi que la fréquence de H_2O_2 . Nous avons observé des

tendances analogues pour le mécanisme de LCSR mais il se trouve que les espèces HO_2 , H_2O_2 , CH_2 et $\text{CH}_2^{(s)}$ sont relativement plus importantes dans le mécanisme GRI-Mech v.3.0.

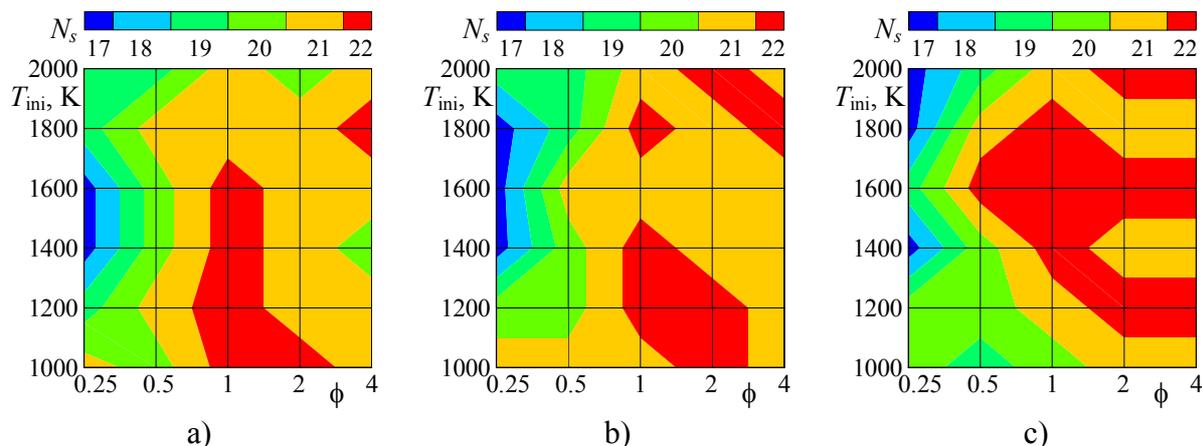


Figure 3.37. Évaluation du nombre d'espèces dans le plan ϕ - T_{ini} . Conditions fixes : $\eta = 0.1$ et $P = 50$ kPa (a) ou $P = 100$ kPa (b) ou $P = 200$ kPa (c).

Pour les mélanges $\eta = 0.95, 0.2$ et 0.5 , l'annexe C présente les unions des mécanismes locaux. Comme résumé, le tableau 3.23 récapitule selon η les nombres de réactions et d'espèces minimaux ($N_{r_{\text{min}}}$ et $N_{s_{\text{min}}}$), maximaux ($N_{r_{\text{max}}}$ et $N_{s_{\text{max}}}$), composant l'union des mécanismes locaux ($N_{r_{\cup}}$ et $N_{s_{\cup}}$) et leur intersection ($N_{r_{\cap}}$ et $N_{s_{\cap}}$). Les données dans ce tableau confirment que les mécanismes locaux se simplifient en terme de N_r et de N_s lorsque η augmente. En comparant les tailles des unions en fonction de η , nous pouvons constater qu'il n'y a pas de diminution considérable de $N_{r_{\cup}}$ même pour des valeurs importantes de η .

Tableau 3.23. Caractéristiques des unions des mécanismes locaux selon η .

η	$N_{r_{\text{min}}}$	$N_{r_{\text{max}}}$	$N_{r_{\cup}}$	$N_{r_{\cap}}$	$N_{s_{\text{min}}}$	$N_{s_{\text{max}}}$	$N_{s_{\cup}}$	$N_{s_{\cap}}$
0	33	55	83	8	18	22	22	16
0.05	28	54	84	8	18	22	22	13
0.1	24	49	87	4	16	22	22	13
0.2	18	43	81	5	14	22	22	12
0.5	13	38	73	4	11	21	22	9
0-0.5	13	55	93	1	11	22	22	9

Le mécanisme réduit final est formé par l'union de tous les mécanismes locaux obtenus pour cinq mélanges combustibles. La dernière ligne du tableau 3.23 donne les caractéristiques de cette union globale. Nous avons ainsi obtenu un mécanisme à 93 réactions parmi lesquelles une seule réaction est présente dans tous les mécanismes locaux et 64 réactions sont communes pour les unions selon η . Les 16 réactions les plus fréquentes dans les mécanismes locaux sont résumées dans le tableau 3.21. La seule réaction indispensable dans toutes les conditions est s-26.

Parmi les 22 espèces réactives, 13 espèces ne sont pas présentes dans tous les mécanismes locaux, leurs fréquences Ψ_r sont regroupées dans la dernière ligne du tableau 3.22. Les quatre espèces les plus souvent éliminées sont C_2H_2 , C_2H_3 , C_2H_6 et H_2O_2 selon la croissance de Ψ_r .

Afin d'évaluer les unions des mécanismes locaux, le tableau 3.24 récapitule les erreurs maximales déterminées dans le domaine ϕ - P - T_{ini} pour les unions des mécanismes locaux

selon η ainsi que pour l'union globale. Les unions comparées sont distinguées par le nombre de réactions N_r . Suite à une comparaison avec les erreurs admissibles, nous pouvons conclure que les critères de réduction ont été respectés à l'exception d'un léger dépassement de δ^*t_{inf} donné par les unions pour $\eta = 0.05, 0.1$ et 0.5 .

Tableau 3.24. Erreurs maximales données par les unions des mécanismes locaux.

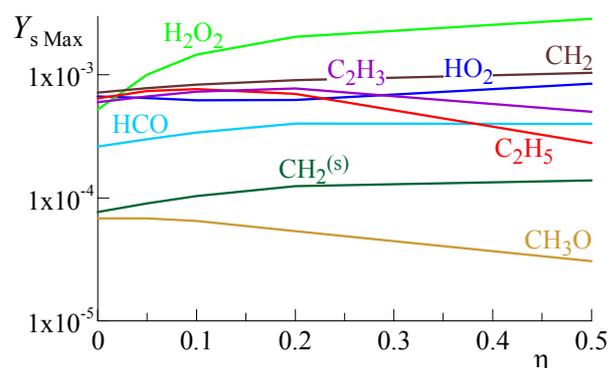
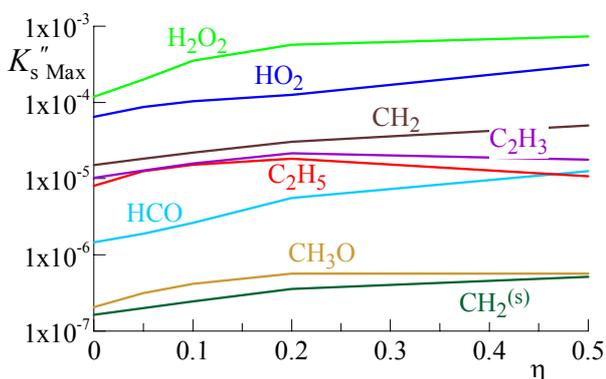
η	N_r	$\delta t_{inf}, \%$	$\Delta T_{eq}, K$	$\Delta_{max}T, K$	$\delta M_{eq}, \%$	$\delta_{max}M, \%$
0	83	1.4	0.4	18	0.0	0.6
	93	0.9	0.1	12	0.0	0.3
0.05	84	2.2	3.7	14	0.2	0.4
	93	1.1	0.2	15	0.0	0.2
0.1	87	2.2	3.8	17	0.2	0.3
	93	1.6	0.2	18	0.0	0.3
0.2	81	1.8	0.2	20	0.0	0.2
	93	1.6	0.2	20	0.0	0.1
0.5	73	2.5	0.8	18	0.0	0.4
	93	1.6	0.0	14	0.0	0.1

Les réactions éliminées du mécanisme sont marquées dans le tableau C.1 de l'annexe C. Nous avons attribué une nouvelle numérotation avec le préfixe « r- » aux 93 réactions restantes.

Nous pouvons ainsi conclure que la méthode d'élimination de réactions a donné un résultat satisfaisant en terme de précision du mécanisme réduit par rapport à son mécanisme de référence. Nous avons pourtant obtenu un taux de réduction plus faible (23 % contre 35 %) et un nombre d'espèces plus grand (22 contre 21) que pour le mécanisme LCSR.

3.5.3.3. Application de l'approche EQS

Pour repérer les espèces susceptibles d'être considérée en EQS, nous les avons triées selon leurs fractions massiques maximales $Y_{s,Max}$. La figure 3.38 montre les évolutions de $Y_{s,Max}$ en fonction de η pour les espèces HO_2 , H_2O_2 , HCO , CH_3O , CH_2 , $CH_2^{(s)}$, C_2H_5 et C_2H_3 .

Figure 3.38. Maximums globaux des fractions massiques d'espèces en fonction de η .Figure 3.39. Maximums globaux des critères EQS d'espèces en fonction de η .

Par rapport au mécanisme LCSR, les $Y_{s,Max}$ sont plus élevés sauf HCO . Les fractions maximales de CH_3O et de C_2H_3 sont plus grandes d'un ordre de grandeur et celles de H_2O_2 et

de C_2H_5 sont quelques fois plus importantes. En particulier, la fraction maximale de H_2O_2 dépasse 10^{-3} à $\eta = 0.05$ et atteint $3 \cdot 10^{-3}$ à $\eta = 0.5$.

Les évolutions du critère $K_s''_{Max}$ en fonction de η pour les mêmes espèces sont présentées sur la figure 3.39. Les niveaux de $K_s''_{Max}$ sont généralement plus grands que dans le cas du mécanisme LCSR. Pour H_2O_2 , ce critère est très important : il est supérieur au seuil de 10^{-4} sur toute la plage de η et s'élève jusqu'à $7 \cdot 10^{-4}$ à $\eta = 0.5$.

Quant au couplage entre les sept espèces considérées, HO_2 est couplé avec les autres espèces sauf CH_2 et $CH_2^{(s)}$, HCO est à son tour couplé avec H_2O_2 , CH_2 et C_2H_3 , CH_2 est couplé avec $CH_2^{(s)}$. Nous avons finalement choisi les espèces H_2O_2 , CH_3O , CH_2 , $CH_2^{(s)}$, C_2H_5 et C_2H_3 en tant qu'espèces en EQS.

Les formules suivantes expriment les concentrations de ces espèces en supposant que leurs taux nets de production W_s sont égaux à zéro.

$$C_{H_2O_2} = [(-\omega_{br-23}C_{CH_2} - (\omega_{br-41} + \omega_{br-42})C_{H_2O} + \omega_{fr-58}C_{CH_2O} - \omega_{br-73}C_{CH_4})C_{HO_2} + (\omega_{fr-53} + \omega_{fr-54})C_{HO_2}^2 - \omega_{br-24}C_{H_2O}C_{OH} + \omega_{fr-38}C_{OH}^2] / [(\omega_{fr-23} + \omega_{fr-24})C_H + (\omega_{fr-41} + \omega_{fr-42})C_{OH} + \omega_{fr-73}C_{CH_3} - \omega_{br-38} - (\omega_{br-53} + \omega_{br-54})C_{O_2} - \omega_{br-58}C_{HCO}] \quad (3.54)$$

$$C_{CH_3O} = [(\omega_{fr-28}C_H - \omega_{br-30}C_{H_2} - \omega_{br-83}C_{HO_2})C_{CH_2O} + (-\omega_{br-31}C_{OH} + \omega_{fr-56}C_{HO_2} + \omega_{fr-71}C_{O_2})C_{CH_3}] / [-\omega_{br-28} + (\omega_{fr-30} + \omega_{fr-31})C_H - \omega_{br-56}C_{OH} - \omega_{br-71}C_{O_2} + \omega_{fr-83}C_{O_2}] \quad (3.55)$$

$$C_{C_2H_5} = [(\omega_{fr-10}C_{O_2} + \omega_{fr-36}C_H + \omega_{fr-52}C_{OH} + \omega_{fr-79}C_{CH_3})C_{C_2H_6} + (\omega_{fr-34}C_H - \omega_{br-86}C_{HO_2})C_{C_2H_4} + \omega_{fr-75}C_{CH_3}^2] / [-\omega_{br-10}C_{OH} - \omega_{br-34} - \omega_{br-36}C_{H_2} - \omega_{br-52}C_{H_2O} - \omega_{br-75}C_H - \omega_{br-79}C_{CH_4} + \omega_{fr-86}C_{O_2}] \quad (3.56)$$

$$C_{C_2H_3} = [(\omega_{fr-32}C_H - \omega_{br-33}C_{H_2} - \omega_{br-93}C_{HO_2})C_{C_2H_2} + (\omega_{fr-35}C_H + \omega_{fr-51}C_{OH} + \omega_{fr-78}C_{CH_3})C_{C_2H_4} - \omega_{br-84}C_{HCO}C_{CH_2O}] / [-\omega_{br-32} + \omega_{fr-33}C_H - \omega_{br-35}C_{H_2} - \omega_{br-51}C_{H_2O} - \omega_{br-78}C_{CH_4} + (\omega_{fr-84} + \omega_{fr-93})C_{O_2}] \quad (3.57)$$

Les concentrations de CH_2 et de $CH_2^{(s)}$ sont reliées par le système d'équations :

$$a_1 C_{CH_2}^2 + b_1 C_{CH_2} + c_1 C_{CH_2^{(s)}} = d_1 \quad (3.58)$$

$$b_2 C_{CH_2} + c_2 C_{CH_2^{(s)}} = d_2 \quad (3.59)$$

avec

$$a_1 = 2\omega_{fr-61}$$

$$b_1 = \omega_{fr-3}C_{O_2} - \omega_{br-8}C_{CO} + \omega_{fr-43}C_{OH} - \omega_{br-44}C_{H_2O} + (\omega_{fr-59} + \omega_{fr-90} + \omega_{fr-91})C_{O_2} + \omega_{fr-60}C_{H_2} + \omega_{fr-62}C_{CH_3} + \omega_{fr-63}C_{CH_4} - \omega_{br-64}C_{N_2} - \omega_{br-68}C_{H_2O}$$

$$c_1 = -\omega_{fr-64}C_{N_2} - \omega_{fr-68}C_{H_2O}$$

$$d_1 = -(\omega_{br-3}C_{HCO} + \omega_{br-43}C_{CH_2O} + \omega_{br-60}C_{CH_3} + \omega_{br-62}C_{C_2H_4})C_H + (\omega_{fr-8}C_{O_2} - 2\omega_{br-61}C_{H_2})C_{C_2H_2} + \omega_{fr-44}C_{OH}C_{CH_3} - \omega_{br-63}C_{CH_3}^2 - \omega_{br-91}C_{O_2}C_{CH_2O}$$

$$b_2 = \omega_{br-64}C_{N_2} + \omega_{br-68}C_{H_2O}$$

$$c_2 = (-\omega_{br-45} + \omega_{fr-92})C_{H_2O} + (\omega_{fr-65} + \omega_{fr-66})C_{O_2} + \omega_{fr-67}C_{H_2} + \omega_{fr-69}C_{CH_4} + \omega_{fr-70}C_{CO_2} + \omega_{fr-64}C_{N_2} + \omega_{fr-68}C_{H_2O}$$

$$d_2 = (\omega_{fr-45}C_{OH} - \omega_{br-67}C_H)C_{CH_3} - \omega_{br-69}C_{CH_3}^2 - (\omega_{br-65}C_H C_{OH} + \omega_{br-66}C_{H_2O} + \omega_{br-70}C_{CH_2O})C_{CO}$$

Une solution efficace de ce système consiste à faire une première approche en résolvant sa partie linéaire et à effectuer ensuite deux itérations newtoniennes successives.

L'approche EQS a été validée à l'aide de tests directs en l'appliquant à chaque espèce séparément et finalement aux cinq espèces. Les solutions obtenues ont été comparées à celles données par le mécanisme à 93 réactions. Ces tests ont confirmé que l'approche EQS est valide sur toute la grille paramétrique pour les espèces sélectionnées sauf H_2O_2 .

La mise de H_2O_2 en EQS raccourcit le délai d'autoinflammation à une température inférieure à 1200-1300 K lorsque la pression est élevée. Par rapport au mécanisme LCSR, l'approche EQS pour H_2O_2 a une zone de validité plus restreinte. La figure 3.40 montre l'évolution de δt_{inf} en fonction de P pour différentes T_{ini} et ϕ à $\eta = 0.1$. À $T_{\text{ini}} = 1000$ K, le délai d'autoinflammation est perturbé considérablement lorsque $P > 100$ kPa. Sur la figure 3.41, nous avons tracé l'évolution de la pression limite en fonction de η pour différentes valeurs de ϕ et de T_{ini} . Ces limites correspondent à $\delta t_{\text{inf}} = 10\%$. Il faut remarquer qu'à $\eta = 0$, la limite de P est supérieure à 1000 kPa pour $T_{\text{ini}} \geq 1000$ K.

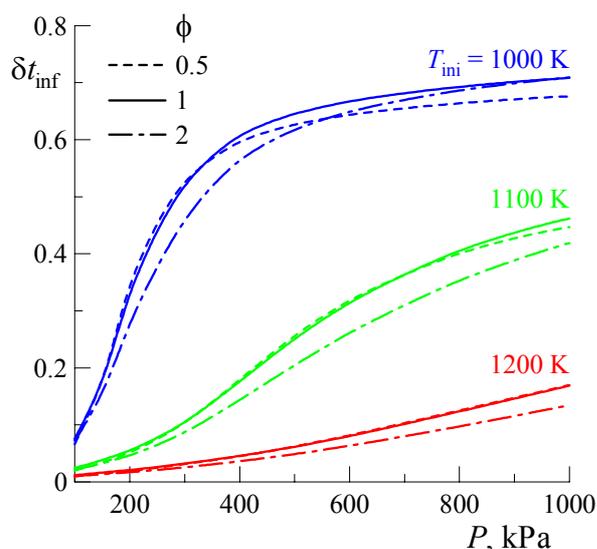


Figure 3.40. Erreur due à l'approche EQS pour H_2O_2 ($\eta = 0.1$).

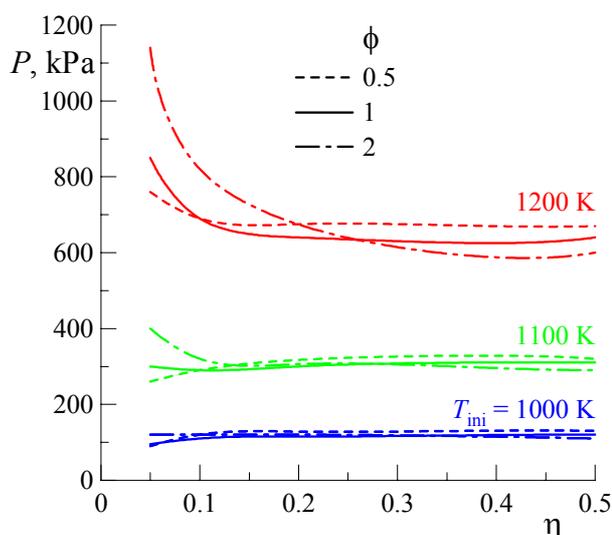


Figure 3.41. Limites de validité de l'approche EQS pour H_2O_2 ($\delta t_{\text{inf}} = 10\%$)

3.5.3.4. Version modifiée du mécanisme réduit

Une version modifiée du mécanisme réduit à 93 réactions a été proposée afin d'ajuster ces prédictions du délai d'autoinflammation de H_2 pur près de la limite d'explosion et dans le cas de viciation par H_2O . Les modifications concernent premièrement les constantes de vitesse des réactions dont la forme générale est $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$. Dans le mécanisme GRI-Mech v.3.0, les paramètres d'Arrhenius de ces réactions varient selon l'espèce catalytique. Il faut remarquer que les constantes de vitesse de ces réactions sont particulièrement élevées par rapport à d'autres mécanismes. Le tableau 3.25 récapitule les modifications apportées aux facteurs pré-exponentiels des constantes de vitesse selon le 3^e corps. Les facteurs A sont donnés pour le sens direct des réactions. Leurs valeurs sont exprimées en $\text{cm}^6/(\text{mol}^2 \cdot \text{s})$.

Ces modifications ont diminué le taux de dégagement de chaleur et donc altéré le profil de température durant la phase de combustion. Pour corriger cet impact, nous avons ajusté la constante de vitesse de la réaction $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$ en multipliant son facteur pré-exponentiel par 10/7. Nous avons aussi augmenté l'efficacité catalytique de H_2O

de 3.65 à 5.11 afin de respecter un facteur de 2 d'augmentation du taux de réaction avec ce 3^e corps.

Tableau 3.25. Modification des constantes de vitesse de $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$.

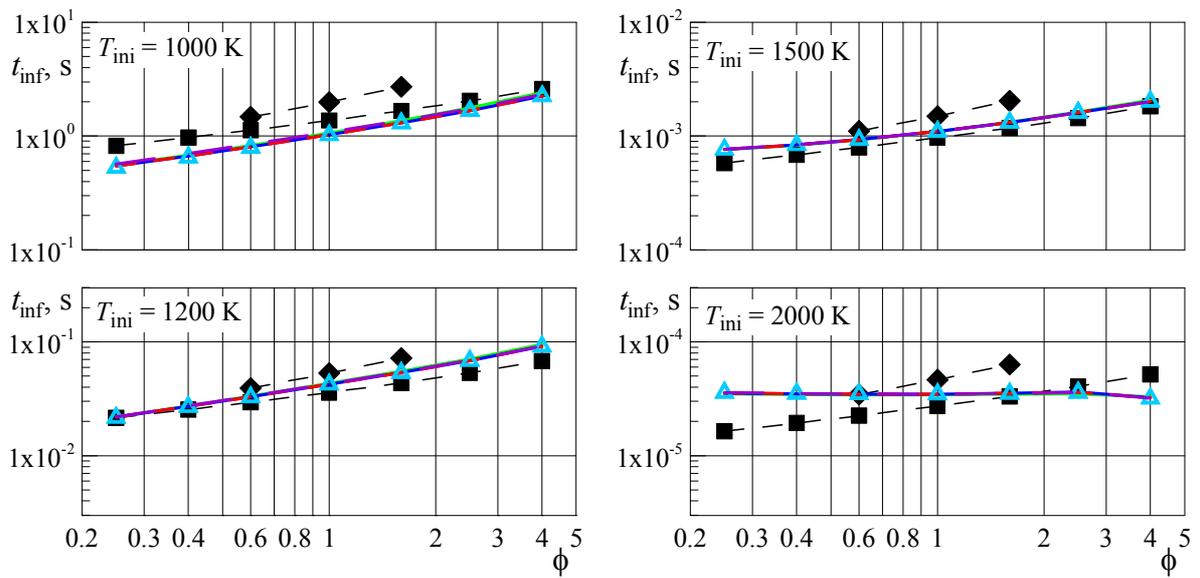
M	Sauf O ₂ , N ₂ et H ₂ O	O ₂	N ₂	H ₂ O
A original	$2.800 \cdot 10^{+18}$	$2.080 \cdot 10^{+19}$	$2.600 \cdot 10^{+19}$	$1.126 \cdot 10^{+19}$
A modifié	$1.960 \cdot 10^{+18}$	$1.456 \cdot 10^{+19}$	$1.820 \cdot 10^{+19}$	$0.563 \cdot 10^{+19}$
Facteur	0.7	0.7	0.7	0.5

3.5.3.5. Validation des mécanismes réduits

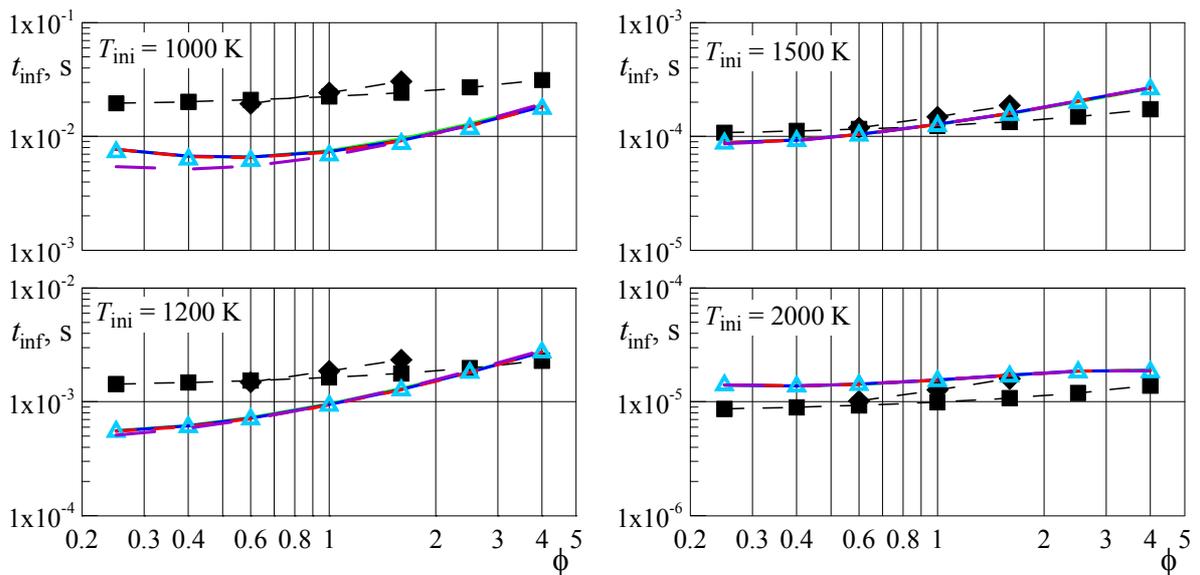
Nous avons testé les mécanismes issus des trois étapes de la réduction : 121 réactions, 93 réactions, 93 réactions et 6 espèces en EQS. Les simulations ont été effectuées avec l'approche de masse volumique constante. Dans le cas d'oxydation de CH₄-H₂ dans de l'air pur, les résultats de tests sont présentés ici pour les conditions suivantes : $\eta = 0$ et 0.1, $P_{\text{ini}} = 100$ kPa, $T_{\text{ini}} = 1000$ -2000 K. D'autres tests, réalisés dans des conditions différentes en terme de η et de P_{ini} , ont donné des résultats similaires sauf la zone où l'approche EQS n'est pas valide pour H₂O₂.

Les mécanismes réduits ont été testés par rapport au mécanisme GRI-Mech v.3.0 détaillé et aux corrélations empiriques sur le délai d'autoinflammation (3.28) et (3.29). La figure 3.42 montre l'évolution de t_{inf} en fonction de ϕ pour des niveaux différents de T_{ini} . Sur cette figure, nous avons aussi présenté les résultats donnés par la version modifiée du mécanisme à 93 réactions. Globalement, la réduction et les modifications apportées n'ont pas influencé sensiblement les prédictions de t_{inf} . Les modifications ont diminué t_{inf} de façon considérable pour les conditions suivantes : $\eta > 0$, $\phi < 1$, $T_{\text{ini}} < 1200$ K.

Des tests plus détaillés ont été effectués en comparant les profils temporels de température générés par le mécanisme détaillé et le mécanisme à 93 réactions sans et avec l'approche EQS. Ces profils sont tracés sur la figure 3.43 pour plusieurs valeurs de ϕ et pour plusieurs niveaux de T_{ini} . Les profils générés par les mécanismes détaillé et réduit (sans EQS) sont en bon accord pour la totalité des conditions. Les profils générés par le mécanisme réduit sans et avec l'approche EQS sont pratiquement coïncidents à l'exception des conditions $\eta = 0.1$ et $T_{\text{ini}} = 1000$ K dans lesquelles l'approche EQS pour H₂O₂ a causé une diminution de t_{inf} sans altérer la forme des profils.



a)



b)

Corrélations : ■ présent travail ◆ Cheng et Oppenheim (1984)
 GRI-Mech v.3.0 : — détaillé — réduit 121 r. - - réduit 93 r.
 - - - réduit 93 r., modifié ▲ réduit 93 r. + EQS

Figure 3.42. Délai d’autoinflammation en fonction de ϕ prédit par le mécanisme GRI-Mech v.3.0 détaillé et par les mécanismes réduits pour : $\eta = 0$ (a) et $\eta = 0.1$ (b), $P_{ini} = 100$ kPa, T_{ini} variable.

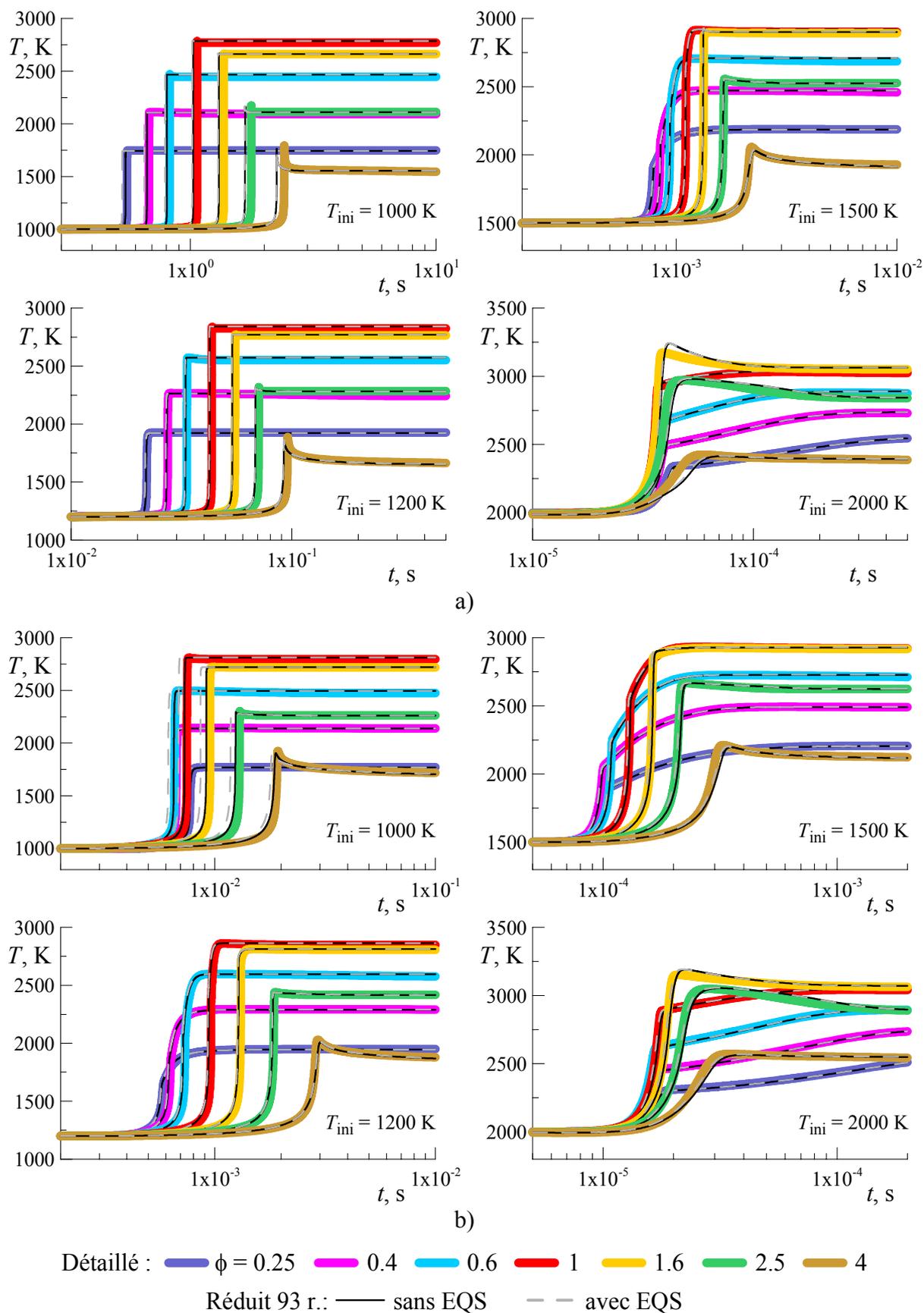


Figure 3.43. Profils temporels de température générés par les mécanismes détaillé et réduits pour : $\eta = 0$ (a) et $\eta = 0.1$ (b), $P_{ini} = 100$ kPa, ϕ et T_{ini} variables.

L'effet des modifications du mécanisme sur le profil de température a été vérifié dans le cas de H_2 pur. La figure 3.44 montre les profils temporels de température calculés avec le mécanisme détaillé et avec les deux versions du mécanisme réduit à 93 réactions. Les simulations ont été réalisées pour le mélange stœchiométrique à $P_{ini} = 100$ kPa. Les profils donnés par le mécanisme réduit sans les modifications sont conformes à ceux donnés par le mécanisme détaillé. À $T_{ini} = 1000$ K, les modifications ont causé une baisse du délai d'autoinflammation sans altérer la forme du profil. À $T_{ini} = 1200$ K, les trois profils sont coïncidents.

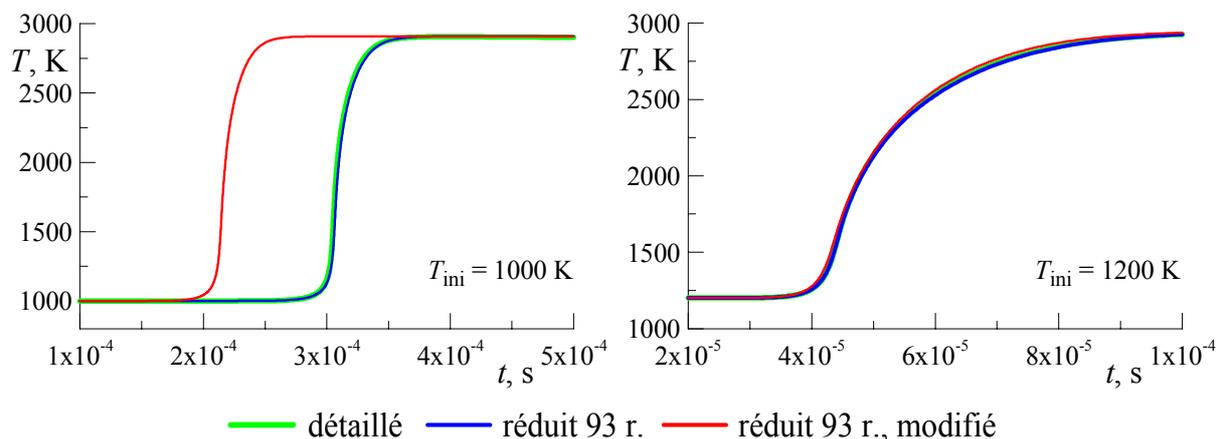


Figure 3.44. Effet des modifications sur les profils temporels de température pour :
 $\eta = 1$, $\phi = 1$, $P_{ini} = 100$ kPa, T_{ini} variables.

Les mécanismes réduits à 93 réactions ont été également validés dans le cas d'autoinflammation de H_2 pur dans de l'air vicié par H_2O . Ces tests mettent en évidence l'effet positif des modifications proposées. Les délais d'autoinflammation prédits par les simulations sont comparés avec les résultats expérimentaux de Wang et al. (2003) sur la figure 3.45. Sans les modifications ni l'approche EQS, les prédictions données par le mécanisme réduit sont conformes à celles données par le mécanisme détaillé (comparer les figures 3.15(a) et 3.45(a)). Grâce aux modifications, l'accord avec l'expérience a été amélioré pour $X_{H_2O} = 0$ et 0.15 (figure 3.45(b)). L'approche EQS a causé une diminution progressive de t_{inf} à partir d'une certaine température qui dépend de la fraction de H_2O . Les mêmes observations concernant l'approche EQS ont été faites pour le mécanisme LCSR.

En conclusion, nous avons effectué une réduction du mécanisme GRI-Mech v.3.0 et évalué les performances du mécanisme réduit à toutes les étapes de la réduction. Le mécanisme réduit final prédit le délai d'autoinflammation et les profils de quantités macroscopiques conformément au mécanisme détaillé dans un grand domaine de conditions. Nous avons indiqué les conditions limitant l'utilisation de l'approche EQS pour H_2O_2 . Nos tests ont montré que le mécanisme réduit à 93 réactions est valable pour H_2 pur même si ce cas n'a pas été considéré lors de la réduction. Nous avons proposé les modifications permettant d'améliorer l'accord avec les résultats de Wang et al. (2003) en espérant que leur effet sera également positif pour l'autoinflammation du mélange CH_4-H_2 dans de l'air vicié.

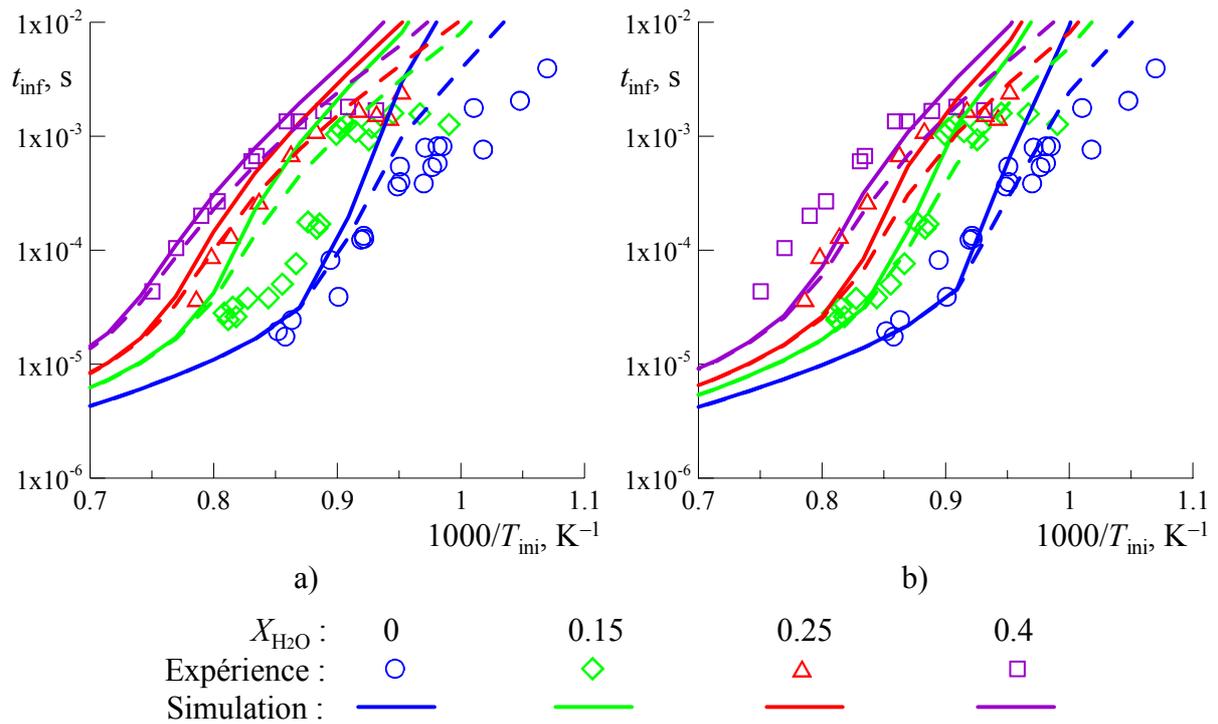


Figure 3.45. Effet de la viciation d'air par H_2O sur le délai d'autoinflammation de H_2 . Comparaison de l'expérience de Wang et al. (2003) et de simulations avec le mécanisme réduit à 93 réactions : a) original ; b) modifié. Sans EQS – courbes continues, avec EQS – courbes en pointillés.

3.5.4. Réduction de mécanismes d'oxydation de l'hydrogène dans de l'air vicié

Dans le but d'étudier l'effet de la viciation d'air sur la combustion supersonique, nous devons avoir un mécanisme cinétique qui intègre un sous-mécanisme d'oxydation de l'azote. L'inclusion d'un tel sous-mécanisme dans le mécanisme réduit pour le combustible $\text{CH}_4\text{-H}_2$ n'est pas envisageable car cela rend le modèle chimique trop grand, même pour l'approche bidimensionnelle. Nous pouvons néanmoins appliquer un mécanisme réduit avec des espèces azotées à la simulation de combustion de H_2 pur. Cela nous permet d'examiner les effets causés par la viciation et de proposer éventuellement des mesures pour en tenir compte en simulant la combustion du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$.

3.5.4.1. Conditions de réduction

Pour la réduction, nous avons choisi le mécanisme de Mueller et al. (1999a,b) et le mécanisme GRI-Mech v.3.0. Leur validation pour l'autoinflammation de H_2 a été présentée dans les sections 3.4.6-3.4.8.

La réduction a été effectuée à l'aide de la procédure automatique en éliminant d'abord les espèces redondantes et ensuite les réactions sans importance. Les simulations ont été faites selon l'approche de pression constante. Dans tous les cas, le mécanisme détaillé a été utilisé comme mécanisme de référence. Les valeurs plafond imposées sur les erreurs de réduction sont les suivantes :

$$\delta^* t_{\text{inf}} = 2 \%, \Delta^* T_{\text{eq}} = 10 \text{ K}, \delta^* M_{\text{eq}} = 0.5 \%, \Delta^*_{\text{max}} T = \Delta^*_{\text{moy}} T = 20 \text{ K}, \delta^*_{\text{max}} M = \delta^*_{\text{moy}} M = 1 \%$$

Les poids attribués aux scores des erreurs sont égaux à 1. L'approche EQS n'a pas été appliquée.

Le domaine de validité correspond à des conditions particulières qu'on trouve dans une chambre de combustion supersonique testée sur le banc d'essai LAERTE à l'ONERA. Cette restriction est adoptée car nous ne cherchons pas à obtenir un mécanisme généralisé. Une description détaillée des conditions d'essai est donnée dans le chapitre 4. La grille paramétrique spécifiée pour la réduction est la suivante :

$$\phi : 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1.6, 3.2$$

$$P, \text{ kPa} : 100$$

$$T_{\text{ini}}, \text{ K} : 900, 950, 1000, 1050, 1100, 1200, 1500$$

La composition de l'air vicié a été déterminée théoriquement car elle n'a jamais été mesurée en détail. En outre, elle varie à travers la section d'entrée parce que l'écoulement n'est pas absolument uniforme. Pour évaluer la composition moyenne, nous avons d'abord déterminé la composition d'équilibre chimique dans le réchauffeur à flamme à partir des conditions suivantes : pression de 710 kPa, température de 1840 K, fractions molaires d'espèces $X_{\text{O}_2} = 0.21$, $X_{\text{N}_2} = 0.62$, $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.17$. Ensuite, un calcul cinétique a été effectué à l'aide du code SENKIN suivant un profil temporel de masse volumique. Ce profil temporel correspond à une ligne de courant dans la tuyère supersonique en amont de la chambre de combustion. L'écoulement dans la tuyère a été préalablement simulé par le code MSD selon l'approche axisymétrique. Les détails sur cette dernière simulation sont rapportés dans le chapitre 4. Ainsi déterminée, la composition de l'air vicié en entrée de la chambre de combustion est : $X_{\text{O}_2} = 0.2092$, $X_{\text{N}_2} = 0.6168$, $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.1698$, $X_{\text{NO}} = 4.2 \cdot 10^{-3}$, $X_{\text{NO}_2} = 5.5 \cdot 10^{-5}$. La composition est spécifiée pour les espèces stables car l'approche de mélange homogène avec le combustible n'est pas applicable aux radicaux dont la concentration peut varier considérablement durant la phase de mélange.

3.5.4.2. Version réduite du mécanisme de Mueller

Avant de réduire le mécanisme de Mueller, nous avons mis à jour la constante de vitesse de la réaction $\text{NO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{HONO} + \text{H}$ selon Mueller et al. (2000) et rajouté les réactions $\text{N} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{O}$, $\text{N} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}$ et $\text{N} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$ afin de décrire la formation thermique de NO. Les paramètres d'Arrhenius des trois dernières réactions ont été tirés du mécanisme GRI-Mech v.3.0.

Suite à la réduction, le nombre d'espèces réactives a diminué de 24 à 13 et le nombre de réactions est passé de 119 à 23. Les espèces réactives restant dans le mécanisme sont les suivantes : H_2 , O_2 , OH , H_2O , H , O , HO_2 , N_2 , N , NO , NO_2 , HNO , HONO . Le sous-mécanisme associé aux espèces azotées est représenté par 6 espèces et 11 réactions, ce qui correspond à la moitié du mécanisme réduit. Le mécanisme réduit est donné dans l'annexe D.

3.5.4.3. Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0

Tant que le combustible est représenté par H_2 pur, le mécanisme GRI-Mech v.3.0 a été tronqué en éliminant les espèces carbonées et les réactions auxquelles ces espèces participent. Cette troncature a donné un mécanisme composé de 18 espèces réactives et de 69 réactions.

Après la réduction automatique, nous avons obtenu un mécanisme à 15 espèces réactives et à 32 réactions. Les espèces réactives restant dans le mécanisme sont les suivantes : H_2 , O_2 , OH , H_2O , H , O , HO_2 , H_2O_2 , N_2 , N , NO , NO_2 , N_2O , NH , HNO . Le sous-mécanisme associé aux espèces azotées est représenté par 7 espèces et 13 réactions. Le mécanisme réduit est donné dans l'annexe E. Nous avons attribué le nom « GRI-Red H_2 » à ce mécanisme afin de ne pas le confondre avec le mécanisme réduit élaboré pour le combustible $\text{CH}_4\text{-H}_2$.

Par rapport au mécanisme de Mueller réduit, les espèces additionnelles sont H_2O_2 , N_2O et NH . En revanche, l'espèce HONO n'est pas présente car elle n'existe pas dans le mécanisme détaillé. Comme nous l'avons déjà remarqué concernant le cas de combustible $\text{CH}_4\text{-H}_2$, l'espèce H_2O_2 a une importance particulière dans le mécanisme GRI-Mech v.3.0.

3.6. Validation de mécanismes réduits avec un modèle du réacteur à diffusion

Les mécanismes réduits que nous avons obtenus pour les combustibles CH₄-H₂ et H₂ pur ont été testés dans les conditions d'un milieu réactif homogène. Cette approche ne garantit pas *a priori* de bonne description du processus d'oxydation lorsqu'il se passe dans un milieu non homogène où le facteur de diffusion est important. Comme nous avons pour dessein d'appliquer nos mécanismes réduits au problème de combustion supersonique de diffusion, nous devons les tester dans des conditions semblables à celles d'un jet réactif.

La validation des mécanismes réduits consiste à comparer des résultats de simulation obtenus avec ces mécanismes et avec leurs mécanismes de référence. Ces derniers sont trop grands pour être implantés dans un code Navier-Stokes et appliqués à des simulations d'un jet réactif bidimensionnel. En revanche, leur application à un problème unidimensionnel est réalisable.

3.6.1. Modèle du réacteur à diffusion et conditions de simulation

Le modèle numérique d'un milieu non homogène que nous avons développé et utilisé pour nos études est appelé « le réacteur à diffusion ». Une schématisation de ce modèle est présentée sur la figure 3.46. Le réacteur à diffusion représente un volume unidimensionnel de taille constante. À l'instant initial $t = 0$, il est rempli de deux réactifs séparés (dans notre cas, ce sont un combustible froid et un oxydant chaud) de sorte que leurs états sont homogènes. Il existe donc une discontinuité initiale entre les deux états. Aux instants suivants $t > 0$, une zone de diffusion se développe entre les deux réactifs dans laquelle ils peuvent réagir.

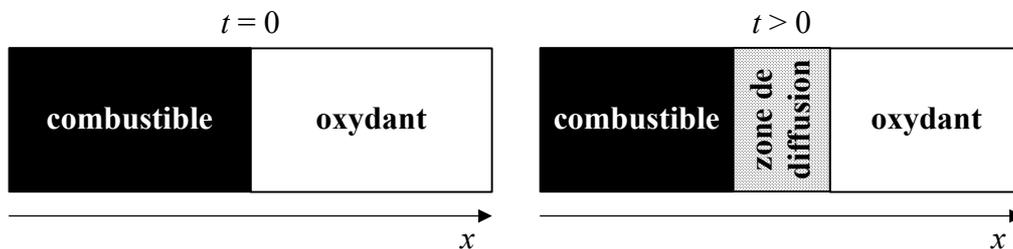


Figure 3.46. Schéma du réacteur à diffusion.

La description mathématique de ce réacteur idéalisé est donnée par les équations de bilan du fluide compressible visqueux :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + A^{-1} \frac{\partial \rho u A}{\partial x} = 0 \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + A^{-1} \frac{\partial (\rho u^2 + P + \tau) A}{\partial x} = \frac{P}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + A^{-1} \frac{\partial (\rho u h_t + u \tau + q) A}{\partial x} = 0 \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + A^{-1} \frac{\partial (\rho u Y_s + J_s) A}{\partial x} = W_s \quad (3.63)$$

A est l'aire de section du réacteur qui peut varier en fonction de la coordonnée x . e_t et h_t sont respectivement l'énergie interne totale et l'enthalpie totale. Les termes visqueux τ , q et J_s sont définis comme :

$$\tau = -\frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.64)$$

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_s h_s J_s \quad (3.65)$$

$$J_s = -\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x} \quad (3.66)$$

Les propriétés du transport diffusif sont déterminées par des valeurs constantes de μ , de Pr et de Le_s . Nous avons adopté cette dernière approche afin d'avoir un modèle de diffusion conforme à celui adopté pour le transport turbulent.

Le système d'équations (3.60)-(3.63) est discrétisé selon la méthode des volumes finis. Les flux convectifs sont approchés par un schéma décentré en amont et les flux visqueux sont calculés selon un schéma centré. Les deux schémas sont d'ordre deux. L'intégration temporelle est effectuée selon un schéma mixte d'ordre deux : une approche explicite de Runge-Kutta est appliquée à tous les termes sauf les termes sources chimiques, ces derniers sont traités par une approche semi-implicite de Crank-Nicolson. Le schéma d'intégration à deux étapes est exprimé par les équations suivantes :

$$\frac{\mathbf{U}_{n+1/2} - \mathbf{U}_n}{\Delta t/2} + L_1(\mathbf{U}_n) + \frac{L_2(\mathbf{U}_n) + L_2(\mathbf{U}_{n+1/2})}{2} = 0 \quad (3.67)$$

$$\frac{\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n}{\Delta t} + L_1(\mathbf{U}_{n+1/2}) + \frac{L_2(\mathbf{U}_n) + 2L_2(\mathbf{U}_{n+1/2}) + L_2(\mathbf{U}_{n+1})}{4} = 0 \quad (3.68)$$

\mathbf{U} est le vecteur des variables conservatives. L_1 et L_2 sont respectivement les opérateurs regroupant les termes traités selon les schémas de Runge-Kutta et de Crank-Nicolson. n est le numéro du pas de temps. Δt est le pas de temps dont la taille est limitée par le critère CFL et par le rapport Y_{sn+1}/Y_{sn} évalués explicitement. Nos tests ont montré qu'une intégration stable est assurée par les conditions suivantes : $CFL < 0.6$ et $0.25 < Y_{sn+1}/Y_{sn} < 4$.

Le modèle numérique du réacteur à diffusion a été réalisé sur la base d'un code que nous avons précédemment développé pour la simulation d'une flamme laminaire non stationnaire [Chelin et al. (2005)]. Ce code utilise l'interface CHEMKIN pour le mécanisme cinétique chimique.

La configuration choisie pour les simulations est illustrée sur la figure 3.47. Elle représente un réacteur cylindrique infiniment long. La figure montre un secteur de sa section transversale. La coordonnée x correspond au rayon de la section. La zone autour de l'axe est rempli de combustible et la périphérie est occupée par l'oxydant.

La paroi du réacteur se trouve à $x = 50$ mm. À $t = 0$, les deux réactifs sont séparés à $x = 3$ mm. Le maillage a été construit avec un pas uniforme de 0.1 mm entre l'axe et $x = 10$ mm et avec un pas variable jusqu'à une taille de 2 mm sur le reste du domaine de calcul.

Les propriétés du transport diffusif sont les suivantes : $\mu = 0.1$ Pa·s, $Pr = 0.7$, $Le_s = 1$. La viscosité μ a été choisie approximativement de sorte que l'épaisseur de la zone de diffusion ressemble à celle estimée par une simulation Navier-Stokes du jet réactif dans la chambre LAERTE au moment d'autoinflammation.

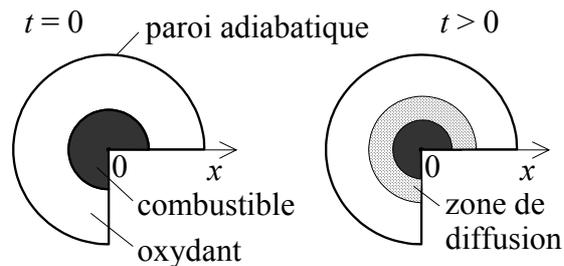


Figure 3.47. Schéma du réacteur à diffusion cylindrique.

Les conditions initiales correspondent aux conditions statiques à l'entrée de la chambre de combustion LAERTE : pression de 84 kPa, température du combustible de 165 K, température de l'oxydant de 1145 K. Les trois cas suivants ont été considérés pour la composition de l'oxydant : air pur, air vicié avec et sans les espèces azotées. La composition de l'air vicié a été déterminée selon la méthode décrite dans la section 3.5.4.1. Pour évaluer la composition de l'air vicié sans les espèces azotées, nous les avons exclues des mécanismes testés.

3.6.2. Autoinflammation de l'hydrogène prédite par le mécanisme de Mueller

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus avec les versions détaillée et réduite du mécanisme de Mueller (voir la section 3.5.4.2). Le tableau 3.26 rassemble les compositions massiques initiales prédites par les mécanismes détaillé et réduit pour l'air vicié avec et sans les espèces azotées. Les espèces qui ne figurent pas dans le tableau ont des fractions massiques inférieures à 10^{-6} . En comparant les fractions massiques d'espèces données par les deux mécanismes, nous pouvons constater qu'elles sont très proches même si la composition n'a pas été suivie en détail par la procédure de réduction. La présence des espèces azotées n'a pas altéré la fraction du radical OH mais elle a baissé la fraction de HO_2 d'un facteur de 2.6. Les fractions de O et de H_2O_2 ont aussi diminué à cause des espèces azotées.

Le tableau 3.26 présente également les données sur les compositions d'équilibre chimique dans les conditions statiques. Leur comparaison avec les résultats des calculs cinétiques permet de conclure que les fractions des radicaux et de NO_x sont plus élevées de quelques ordres de grandeur que leurs fractions dans l'état d'équilibre. La détente d'air dans la tuyère supersonique est ainsi trop rapide pour que les radicaux puissent se recombinaisonner.

Tableau 3.26. Compositions massiques de l'oxydant avec et sans les espèces azotées.

Méca- nisme	O ₂	N ₂	H ₂ O	OH	O	HO ₂	H ₂ O ₂	NO	NO ₂	HONO
Détaillé	0.2440	0.6385	0.1123	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-6}$	$3.5 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$9.8 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$
Réduit	0.2440	0.6385	0.1123	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-6}$	—	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$9.4 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-5}$
Équil.	0.2467	0.6407	0.1124	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-9}$	$1.1 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$4.2 \cdot 10^{-6}$	$1.6 \cdot 10^{-8}$
Détaillé	0.2467	0.6408	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$6.6 \cdot 10^{-6}$	$4.2 \cdot 10^{-6}$	—	—	—
Réduit	0.2467	0.6408	0.1123	$1.6 \cdot 10^{-4}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$	$6.1 \cdot 10^{-6}$	—	—	—	—
Équil.	0.2468	0.6408	0.1124	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-9}$	$1.1 \cdot 10^{-8}$	$1.4 \cdot 10^{-9}$			

À partir de l'état initial, les simulations ont été effectuées en tenant compte des espèces azotées pour toutes les compositions de l'oxydant. Nos essais numériques ont montré

que seules les espèces azotées primaires (présentes dans l'oxydant à l'instant initial) sont importantes. Les espèces azotées secondaires (formées par la combustion) n'ont aucun impact significatif sur les résultats.

À titre d'exemple, la figure 3.48 illustre les résultats de simulation avec le mécanisme détaillé pour l'air vicié contenant les espèces azotées. Les champs colorés montrent les évolutions temporelles des distributions de T et de Y_{OH} le long de x . Les contours en pointillés correspondent à des niveaux constants de ϕ . Dans le champ de T (figure 3.48(a)), nous pouvons observer le développement de la zone de diffusion avant l'autoinflammation (les contours de T et de ϕ sont alignés). L'inflammation est marquée par l'apparition d'une zone chaude (zone de combustion). Dans la zone de combustion, le maximum de T suit le contour stœchiométrique ($\phi = 1$). Le champ de Y_{OH} (figure 3.48(b)) montre que la formation de OH commence dans la couche pauvre (ϕ entre 0.1 et 0.5) où le mélange est plus chaud, puis le maximum de OH se déplace vers $\phi = 1$ suivant le maximum de T . Dans la suite, nous allons analyser des évolutions temporelles de la température qui correspond au maximum instantané de la fraction de OH, $Y_{OH\ max}$.

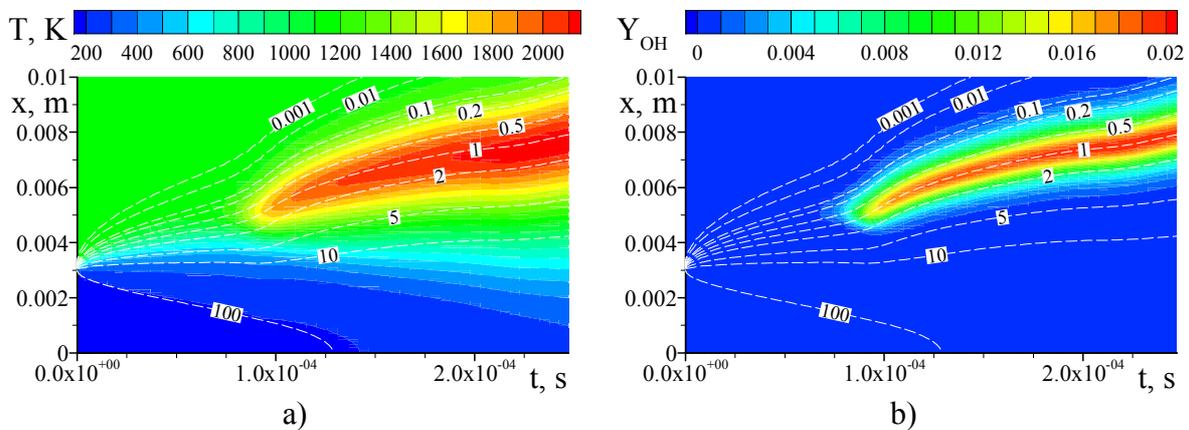


Figure 3.48. Évolutions temporelles des distributions de température (a) et de fraction massique de OH (b). Les isolignes en pointillés correspondent à la richesse.

Les résultats donnés par les mécanismes détaillé et réduit sont comparés sur les figures 3.49 et 3.50. La figure 3.49 présente les évolutions temporelles de T suivant $Y_{OH\ max}$ pour les trois compositions de l'oxydant. Le délai d'autoinflammation obtenu pour l'air pur est presque trois fois plus grand que le délai pour l'air vicié. Les délais sont identiques pour l'air vicié avec et sans les espèces azotées. Les résultats donnés par les mécanismes détaillé et réduit coïncident.

La figure 3.50 montre les évolutions temporelles du maximum de Y_{HO_2} correspondant aux mêmes simulations. Dans le cas d'air vicié, nous pouvons voir que la présence de NO_x a diminué la production de HO_2 . En revanche, nous n'avons pas trouvé d'effet notable de NO_x sur les radicaux H, O et OH. Cette analyse confirme aussi que le mécanisme réduit donne des résultats corrects sur les fractions des espèces radicalaires.

Nous pouvons ainsi conclure que :

- les mécanismes détaillé et réduit sont en bon accord dans tous les trois cas ;
- la viciation a raccourci le délai d'autoinflammation donc l'effet promoteur des radicaux actifs est beaucoup plus fort que l'effet inhibiteur de H_2O ;
- la prise en compte des espèces azotées n'a pas influencé l'autoinflammation dans ces conditions particulières.

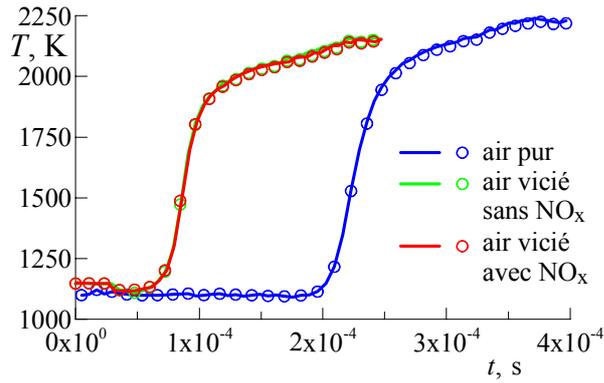


Figure 3.49. Température suivant $Y_{OH_{max}}$ en fonction du temps. Traits – mécanisme détaillé, points – mécanisme réduit.

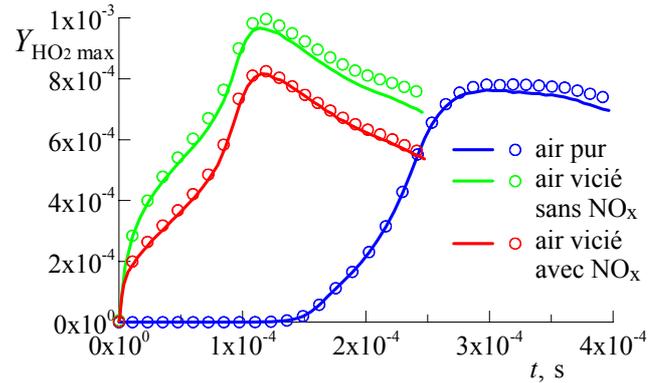


Figure 3.50. Fraction maximale de HO_2 en fonction du temps. Traits – mécanisme détaillé, points – mécanisme réduit.

3.6.3. Autoinflammation de l'hydrogène prédite par le mécanisme GRI-Mech v.3.0

Nous présentons ici les résultats obtenus avec GRI-Mech v.3.0 et GRI-Red H_2 (voir la section 3.5.4.3). Le tableau 3.27 récapitule les données initiales sur les fractions massiques d'espèces prédites par les mécanismes détaillé et réduit pour l'air vicié avec et sans les espèces azotées. Les prédictions des deux mécanismes sont très proches en terme de composition. La présence des espèces azotées a augmenté la fraction du radical OH et baissé les fractions de O et de HO_2 . Par rapport au mécanisme de Mueller, la fraction de HO_2 est beaucoup plus élevée et plus fortement impactée par NO_x .

Tableau 3.27. Compositions massiques de l'oxydant avec et sans les espèces azotées.

Mécanisme	O_2	N_2	H_2O	OH	O	HO_2	H_2O_2	NO	NO_2
GRI-Mech v.3.0	0.2442	0.6386	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$9.3 \cdot 10^{-5}$
GRI-Red H_2	0.2442	0.6387	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$9.2 \cdot 10^{-5}$
GRI-Mech v.3.0	0.2467	0.6408	0.1124	$1.3 \cdot 10^{-4}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$	–	–
GRI-Red H_2	0.2467	0.6408	0.1124	$1.3 \cdot 10^{-4}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$	–	–

À partir de l'état initial, les simulations ont été effectuées en tenant compte des espèces azotées pour toutes les compositions de l'oxydant. Les résultats donnés par GRI-Mech v.3.0 et GRI-Red H_2 sont comparés sur les figures 3.51 et 3.52. La figure 3.51 présente les évolutions temporelles de T suivant $Y_{OH_{max}}$ pour les trois compositions de l'oxydant. Par rapport aux résultats obtenus avec le mécanisme de Mueller, le délai d'autoinflammation a augmenté dans tous les cas. L'augmentation relative du délai est la plus forte pour l'air vicié sans NO_x . Cette fois-ci, l'effet promoteur de NO_x est considérable. Les résultats donnés par les mécanismes détaillé et réduit coïncident.

La figure 3.52 montre les évolutions temporelles du maximum de Y_H . Pour l'air vicié, la croissance de $Y_{H_{max}}$ en temps est plus lente sans NO_x ce qui explique le délai plus long. Cette analyse confirme aussi que le mécanisme réduit donne des résultats corrects sur les fractions des espèces radicalaires.

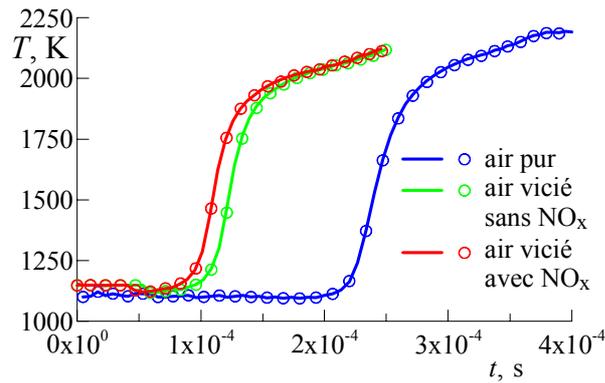


Figure 3.51. Température suivant $Y_{OH\ max}$ en fonction du temps. Traits – GRI-Mech v.3.0, points – GRI-Red H_2 .

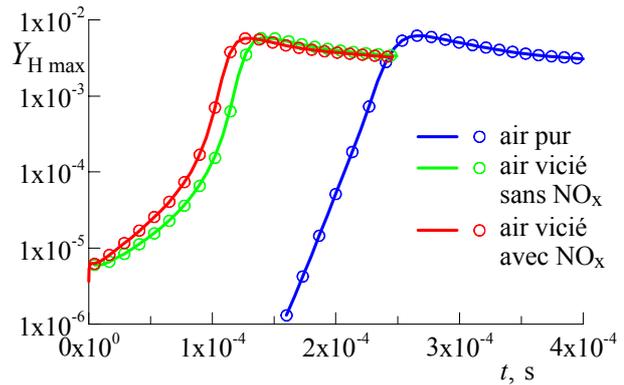


Figure 3.52. Fraction massique maximale de H en fonction du temps. Traits – GRI-Mech v.3.0, points – GRI-Red H_2 .

Nous avons vérifié que la différence du délai avec et sans NO_x est due à l'importance de la réaction $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ surtout avec H_2O en tant que 3^e corps. Pour l'air vicié sans NO_x , il suffit d'abaisser de 25 % la constante de vitesse de la réaction $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$ pour obtenir le même effet qu'avec NO_x . Sur la figure 3.53, nous montrons l'imitation de l'effet de NO_x pour l'air vicié sans NO_x par la modification du taux de la réaction $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$. Les courbes de température pour l'air vicié avec et sans NO_x sont en bon accord après cette modification.

La sensibilité des résultats au taux de $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ nous a suggéré l'idée d'appliquer les modifications que nous avons implantées dans le mécanisme réduit pour le combustible CH_4-H_2 (voir la section 3.5.3.4). Dans les mécanismes GRI-Mech v.3.0 et GRI-Red H_2 , nous avons modifié les constantes de vitesse des réactions $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ et $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$. Les compositions initiales de l'air vicié, calculées après ces modifications, sont résumées dans le tableau 3.28. Nous pouvons constater que les fractions massiques des radicaux OH, O et H_2O_2 ont augmenté et que la fraction de HO_2 a diminué par rapport aux données du tableau 3.27.

Tableau 3.28. Compositions massiques de l'oxydant pour les mécanismes modifiés.

Mécanisme	O_2	N_2	H_2O	OH	O	HO_2	H_2O_2	NO	NO_2
GRI-Mech v.3.0	0.2442	0.6386	0.1124	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$2.9 \cdot 10^{-6}$	$3.2 \cdot 10^{-6}$	$4.6 \cdot 10^{-3}$	$8.1 \cdot 10^{-5}$
GRI-Red H_2	0.2442	0.6387	0.1124	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$2.9 \cdot 10^{-6}$	$3.8 \cdot 10^{-6}$	$4.6 \cdot 10^{-3}$	$8.1 \cdot 10^{-5}$
GRI-Mech v.3.0	0.2467	0.6408	0.1123	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$9.0 \cdot 10^{-6}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	–	–
GRI-Red H_2	0.2467	0.6408	0.1123	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$8.9 \cdot 10^{-6}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	–	–

La figure 3.54 présente les évolutions temporelles de T suivant $Y_{OH\ max}$ pour les mécanismes modifiés. Suite aux modifications, les délais d'autoinflammation ont diminué dans tous les cas. Pour l'air vicié, le délai n'est plus sensible à la présence de NO_x . Cela indique que l'effet promoteur de NO_x se manifeste quand la contribution de la réaction $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ à la consommation du radical H est importante. Les courbes de température sont très proches de celles obtenues avec le mécanisme de Mueller. L'accord entre GRI-Mech v.3.0 et GRI-Red H_2 n'a pas été altéré par les modifications.

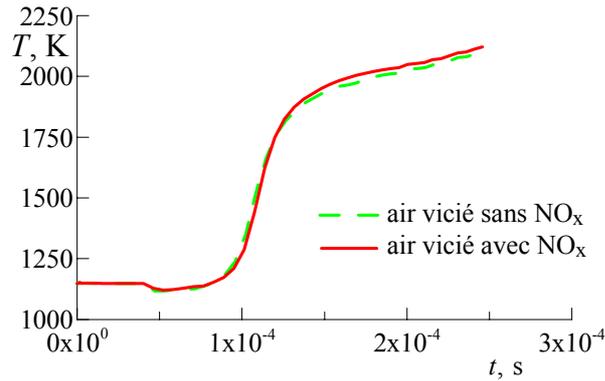


Figure 3.53. Imitation de l'effet de NO_x pour l'air vicié sans NO_x par une diminution du taux de $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$.

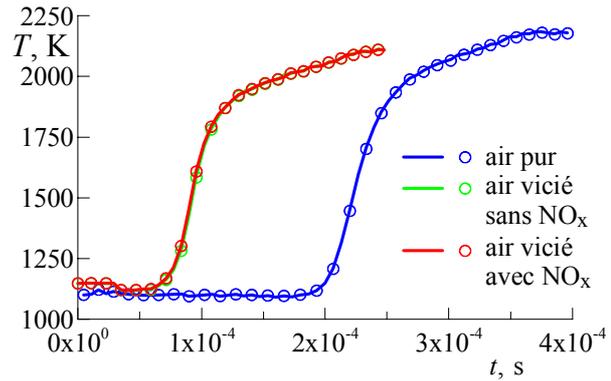


Figure 3.54. Température suivant $Y_{\text{OH max}}$ en fonction du temps pour les mécanismes modifiés. Traits – GRI-Mech v.3.0, points – GRI-Red H_2 .

La présente analyse nous permet de conclure que :

- les mécanismes détaillé et réduit sont en bon accord dans tous les cas considérés ;
- les résultats donnés par GRI-Mech v.3.0 sont sensibles à NO_x à cause de l'importance de la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$;
- dans ces conditions particulières, l'effet de NO_x dans l'air vicié peut être imité par une diminution de 25 % de la constante de vitesse de $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$.

3.6.4. Autoinflammation de $\text{CH}_4\text{-H}_2$ prédite par le mécanisme GRI-Mech v.3.0

Le mécanisme réduit pour le mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$, constitué de 93 réactions entre 22 espèces (voir la section 3.5.3.2) a été testé pour trois compositions du combustible : $\eta = 0.275, 0.51, 1$. Ce choix a été fait selon les conditions des expériences avec la chambre de combustion LAERTE. L'air vicié a été considéré comme oxydant. Les espèces azotées ont été prises en compte par le mécanisme détaillé. Pour le mécanisme réduit, seule l'imitation de l'effet de NO_x est possible.

Les résultats de simulation pour les différents combustibles sont présentés sur la figure 3.55 sous la forme de l'évolution temporelle de T suivant $Y_{\text{OH max}}$. Le laps de temps simulé peut être relié à la longueur de la chambre de combustion en sachant que la vitesse moyenne d'air en entrée est proche de 1400 m/s et que la vitesse du jet de combustible est même plus élevée. Compte tenu de la longueur de la chambre, le temps de séjour total est inférieur à $6 \cdot 10^{-4}$ s.

Les courbes de température pour l'air vicié sans NO_x (figure 3.55(a)) montrent que l'accord entre les mécanismes détaillé et réduit est bon sauf le cas $\eta = 0.275$. Ce décalage s'explique par le fait que le mécanisme réduit n'est pas conçu pour l'air vicié. En tout cas, le délai d'autoinflammation semble trop important pour que le combustible s'enflamme dans la chambre.

La prise en compte de NO_x a diminué les délais prédits par le mécanisme détaillé. Afin de reproduire cet effet avec le mécanisme réduit, nous avons abaissé la constante de vitesse de la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ de 13 %. Les courbes de température pour l'air vicié contenant NO_x sont tracées sur la figure 3.55(b). L'imitation de l'effet de NO_x avec le mécanisme réduit a donné un bon accord avec le mécanisme détaillé pour les trois combustibles. Il faut remarquer que cette approche est valable dans ces conditions particulières. Elle doit être revalidée pour d'autres applications.

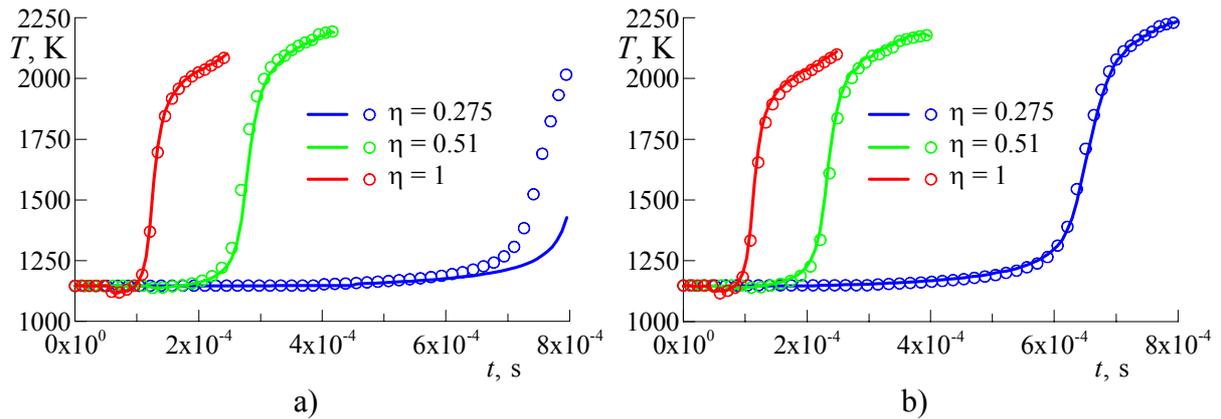


Figure 3.55. Température suivant $Y_{OH\ max}$ en fonction du temps pour les différents combustibles et pour l'air vicié sans NO_x (a) et avec NO_x (b). Traits – mécanisme détaillé, points – mécanisme réduit.

Des simulations ont été effectuées également avec les versions modifiées des mécanismes détaillé et réduit. Les modifications concernent les réactions $H + O_2 + M \Leftrightarrow HO_2 + M$ et $H + OH + M \Leftrightarrow H_2O + M$ (voir la section 3.5.3.4). Les évolutions temporelles de T suivant $Y_{OH\ max}$, calculées avec les mécanismes modifiés pour l'air vicié avec NO_x , sont montrées sur la figure 3.56. Suite aux modifications, les délais d'autoinflammation sont raccourcis davantage et ils ne dépendent pas de la présence de NO_x comme dans le cas de H_2 pur (voir la section 3.6.3.).

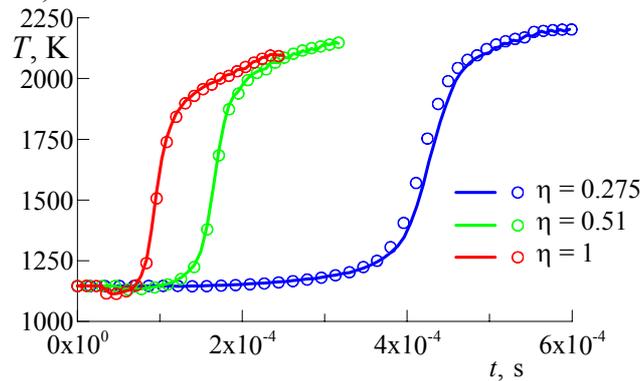


Figure 3.56. Température suivant $Y_{OH\ max}$ en fonction du temps évaluée avec les mécanismes modifiés pour les différents combustibles et pour l'air vicié avec NO_x . Traits – mécanisme détaillé, points – mécanisme réduit.

Conclusions :

- la viciation d'air peut perturber la prédiction du délai d'autoinflammation par le mécanisme réduit mais, malgré la viciation, l'accord entre les mécanismes détaillé et réduit est bon pour $\eta = 0.51$ et 1 ;
- le délai d'autoinflammation du mélange CH_4-H_2 est sensible à la présence de NO_x en raison de l'importance de la réaction $H + O_2 + M \Leftrightarrow HO_2 + M$;
- en appliquant le mécanisme réduit dans ces conditions particulières, l'effet de NO_x peut être imité par une diminution de 13 % de la constante de vitesse de $H + O_2 + H_2O \Leftrightarrow HO_2 + H_2O$.

3.6.5. Autoinflammation de $\text{CH}_4\text{-H}_2$ prédite par le mécanisme LCSR réduit

Les mécanismes réduits comportant 123 réactions et 80 réactions entre 21 espèces (voir les sections 3.5.2.3 et 3.5.2.4) ont été testés pour trois compositions du combustible : $\eta = 0.275, 0.51, 1$. L'air vicié a été considéré comme oxydant. Afin d'évaluer l'effet des espèces azotées, nous avons rajouté un sous-mécanisme d'oxydation de N_2 au mécanisme à 123 réactions. Cela nous a donné un mécanisme à 43 espèces réactives et à 300 réactions.

Le tableau 3.29 rassemble les compositions massiques initiales de l'air vicié. Les résultats sont similaires à ceux donnés par les mécanismes de Mueller (tableau 3.26) et GRI-Mech v.3.0 (tableaux 3.27 et 3.28). Les fractions d'espèces sont pratiquement identiques pour les mécanismes à 123 réactions et à 93 réactions.

Tableau 3.29. Compositions massiques de l'air vicié.

Mécanisme	O_2	N_2	H_2O	OH	O	HO_2	H_2O_2	NO	NO_2
123 réac.+ NO_x	0.2440	0.6385	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.4 \cdot 10^{-5}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$	$9.8 \cdot 10^{-6}$	$4.9 \cdot 10^{-3}$	$6.6 \cdot 10^{-5}$
123 réactions	0.2467	0.6408	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.8 \cdot 10^{-5}$	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$		
80 réactions	0.2467	0.6408	0.1124	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.8 \cdot 10^{-5}$	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$		

Les résultats de simulation pour les différents combustibles sont représentés par les évolutions temporelles de T suivant $Y_{\text{OH}_{\text{max}}}$ sur la figure 3.57. En comparant les résultats obtenus pour l'air vicié sans NO_x (figure 3.57(a)) et avec NO_x (figure 3.57(b)), nous pouvons constater que l'effet des espèces azotées n'est pas important dans ces conditions particulières. Pour $\eta = 0.51$ et 1, le délai d'autoinflammation est proche du délai donné par le mécanisme GRI-Mech v.3.0 modifié (figure 3.56). En revanche, le délai est beaucoup plus long pour $\eta = 0.275$.

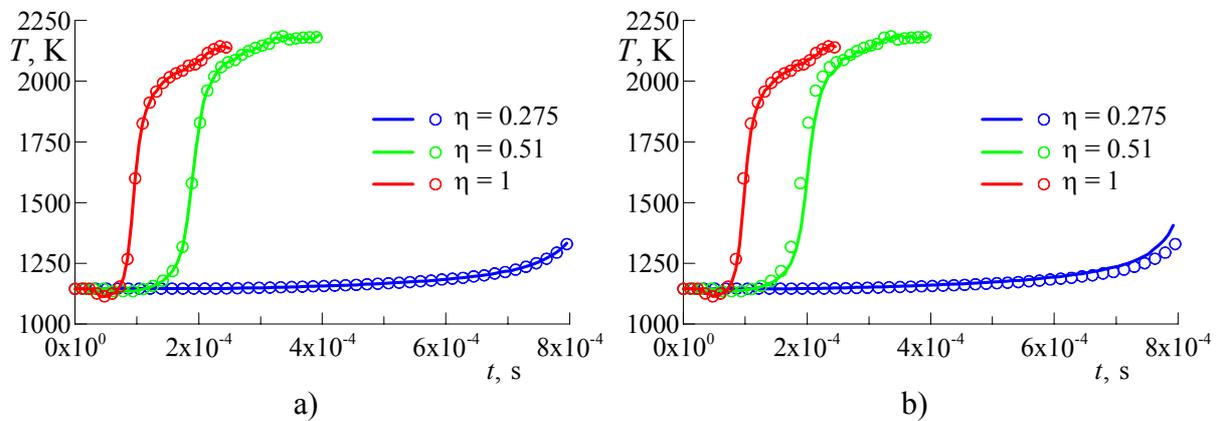


Figure 3.57. Température suivant $Y_{\text{OH}_{\text{max}}}$ en fonction du temps pour les différents combustibles et pour l'air vicié sans NO_x (a) et avec NO_x (b).

Traits – 123 réactions, points – 80 réactions.

Conclusions :

- les mécanismes à 123 réactions et à 93 réactions sont en bon accord ;
- le délai d'autoinflammation n'est pas sensible à la présence de NO_x dans ces conditions particulières.

3.7. Conclusions

Nos études relatives au modèle chimique se résument par les conclusions suivantes :

- 1) Nous avons rassemblé un grand nombre de données expérimentales sur le délai d'autoinflammation de l'hydrogène et du méthane dans le tube à choc. Sur la base des données pour H_2 , nous avons proposé une nouvelle corrélation pour le délai d'autoinflammation qui tient compte de l'effet de la richesse. Cette corrélation est valable dans un large domaine de conditions au-dessous de la limite d'explosion. Nous avons validé la corrélation de Krishnan et Ravikumar (1981) sur les données pour CH_4 . Une nouvelle corrélation pour l'autoinflammation du mélange CH_4-H_2 a été créée à partir des corrélations pour les deux combustibles purs. Cette corrélation a été validée sur des données disponibles sur le délai d'autoinflammation du mélange CH_4-H_2 .
- 2) Nous avons testé un grand nombre de mécanismes cinétiques détaillés, squelettiques, réduits et globaux dans un large domaine de conditions en terme de composition du mélange combustible, de pression et de température. Nous avons trouvé que la description cinétique de l'autoinflammation de CH_4 et de CH_4-H_2 n'est pas établie jusqu'à présent même au niveau le plus détaillé. Nous avons démontré que les mécanismes squelettiques représentent une approche adéquate par rapport aux mécanismes détaillés. Les mécanismes simples, globaux et semi-globaux, n'ont pas d'intérêt pratique vu leur précision très faible et leur domaine de validité très restreint. En outre, nous avons évalué la capacité de plusieurs mécanismes à prédire le délai d'autoinflammation de H_2 en mélange avec de l'air pur et avec de l'air vicié par la vapeur d'eau et par l'oxyde nitrique. Nous avons prouvé que les mécanismes simples, basés sur la description cinétique du mécanisme en chaîne, ne sont pas applicables dans les conditions au-dessus de la limite d'explosion et qu'ils ne permettent pas d'évaluer l'effet de viciation par H_2O .
- 3) Nous avons proposé une nouvelle méthode de réduction de mécanismes cinétiques basée sur l'évaluation de l'importance de réactions pour le problème d'autoinflammation et sur l'élimination de réactions et d'espèces redondantes. Cette méthode permet d'assurer la cohérence entre le mécanisme réduit et le mécanisme de référence concernant la prédiction du délai d'autoinflammation et des profils temporels de paramètres macroscopiques tels que la température et la masse molaire du mélange. Cette nouvelle méthode a été réalisée sous forme d'un code de calcul et appliquée ensuite à la réduction de plusieurs mécanismes cinétiques.
- 4) Nous avons élaboré deux mécanismes réduits applicables au problème d'autoinflammation de CH_4-H_2 avec de l'air pur dans les conditions suivantes : $\eta = 0-0.5$, $\phi = 0.25-4$, $P = 10-1000$ kPa, $T_{ini} = 1000-2000$ K. Ils décrivent correctement les profils temporels de température et de masse molaire du mélange réactif. Un mécanisme réduit, obtenu à partir du mécanisme LCSR pour le gaz naturel, est constitué de 21 espèces réactives et de 80 réactions. L'autre mécanisme réduit, basé sur le mécanisme GRI-Mech v.3.0, comporte 22 espèces réactives et 93 réactions. En appliquant l'approche de l'état quasi-stationnaire, il est possible de diminuer le nombre d'espèces transportées jusqu'à 16. Nous avons identifié les conditions dans lesquelles l'approche EQS est valide pour chaque espèce concernée. Les mécanismes réduits ont été validés dans les conditions d'autoinflammation du mélange CH_4-H_2 dans de l'air pur et de H_2 dans de l'air vicié par H_2O . Des modifications ont été proposées concernant la réaction $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ afin d'améliorer la capacité des mécanismes à prédire l'effet de H_2O sur le délai d'autoinflammation.
- 5) Deux autres mécanismes réduits ont été créés pour l'autoinflammation de H_2 en mélange avec de l'air vicié dans les conditions correspondant à l'entrée de la chambre de

combustion LAERTE. Les deux mécanismes incluent des espèces azotées. Un mécanisme réduit, obtenu à partir du mécanisme de Mueller [Mueller et al. (1999a,b)], contient 13 espèces et 23 réactions parmi lesquelles 6 espèces et 11 réactions représentent le sous-mécanisme NO_x . L'autre mécanisme réduit, dérivé de GRI-Mech v.3.0, est composé de 15 espèces et 32 réactions dont 7 espèces et 13 réactions constituent le sous-mécanisme NO_x .

- 6) Nous avons proposé un modèle unidimensionnel nommé « le réacteur à diffusion » qui permet de simuler l'autoinflammation durant une diffusion entre le combustible et l'oxydant qui sont séparés à l'instant initial. Ce réacteur modèle a été réalisé sous forme d'un code de calcul avec l'interface CHEMKIN pour le mécanisme cinétique.
- 7) Grâce au modèle de réacteur à diffusion, nous avons validé les mécanismes réduits par rapport à leurs mécanismes détaillés parents dans les conditions semblables à celles dans la chambre de combustion LAERTE pour l'air pur et vicié. Les mécanismes réduits ont montré un bon accord avec les mécanismes détaillés respectifs. Nous avons par ailleurs étudié l'effet de la viciation sur le délai d'autoinflammation. Nous avons mis en évidence un effet promoteur fort dû aux radicaux actifs qui n'arrivent pas à se recombinaison complètement à cause d'une détente rapide d'air dans la tuyère supersonique. Nous avons démontré que, dans ces conditions particulières, l'influence des espèces azotées est significative tant que la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \Leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$ a une contribution importante à la consommation du radical H. L'effet des espèces azotées peut être imité par une diminution du taux de la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$.

Chapitre 4.

Simulation de combustion supersonique dans une chambre de combustion expérimentale

Dans les chapitres précédents, nous avons présenté le modèle de turbulence et les modèles de cinétique chimique destinés à la simulation de la combustion supersonique de l'hydrogène et du mélange méthane-hydrogène. Le chapitre présent est consacré à l'application de ces modèles à un cas particulier de combustion supersonique dans une maquette de chambre de combustion. Dans ce chapitre, nous allons aborder plusieurs aspects méthodologiques liés à la simulation numérique et montrer les performances des modèles concernés.

4.1. Synthèse bibliographique

4.1.1. Études expérimentales de la combustion supersonique

De nombreuses publications sur la combustion supersonique ont été issues de travaux expérimentaux et numériques [Billig (1993), Curran (2001)]. Cependant, la majorité des études a été consacrée, soit à la détermination de performances de concepts particuliers du moteur ou de la chambre de combustion, soit à la résolution de problèmes techniques tels que la stabilité du processus interne, l'optimisation des moyens d'injection ou de la géométrie du canal. Pour la validation de codes et de modèles numériques, la plupart des publications ne représentent pas d'intérêt pratique pour les raisons suivantes :

- manque d'informations documentées et précises sur la géométrie de la chambre et sur les conditions expérimentales (entrée, paroi, sortie) ;
- résultats peu détaillés et insuffisamment représentatifs (beaucoup de quantités inconnues, mesures très locales) ;
- configurations relativement complexes empêchant d'effectuer des études paramétriques dont le besoin est imposé par les facteurs précédents.

La nécessité d'étudier l'aspect fondamental de la combustion supersonique et de valider les outils de simulation a motivé quelques travaux expérimentaux dont les objectifs étaient d'explorer le plus complètement possible quelques cas de combustion supersonique de configuration simple. Les résultats d'études devenues classiques ont été publiés par Cohen et Guile (1969), par Burrows et Kurkov (1973) et par Evans et al. (1978). Les trois études concernent la combustion supersonique de l'hydrogène dans de l'air vicié.

Le développement de moyens de mesures optiques a permis d'effectuer plus récemment des études détaillées de la combustion supersonique. Nous considérons ici quatre cas particulièrement bien documentés.

Brûleur supersonique de la NASA

La combustion d'un jet sonique d'hydrogène dans un écoulement supersonique libre d'air vicié a été étudiée sur un dispositif expérimental connu comme brûleur supersonique du Centre de recherche Langley de la NASA. Le brûleur a une configuration axisymétrique avec un injecteur central de 2.36 mm de diamètre et avec une tuyère annulaire de 17.78 mm de

diamètre. L'écoulement d'air vicié, éjecté directement dans l'atmosphère, est caractérisé par les conditions suivantes : nombre de Mach de 2, vitesse de 1420 m/s, température statique de 1250 K, température totale moyenne de 1750 K. En se mélangeant avec de l'air chaud, l'hydrogène s'enflamme spontanément à une distance de 25 diamètres de l'injecteur.

Jarrett et al. (1988) ont publié des profils de température moyenne et de concentration moyenne de N_2 et de O_2 mesurés par la méthode CARS (*Coherent Anti-Stokes Raman Scattering*) ainsi que des profils de vitesse moyenne obtenus par LDA (*Laser Doppler Anemometry*). Cheng et al. (1994) ont rapporté des profils radiaux pour les valeurs moyennes et pour les écarts-types de la température et des fractions molaires des espèces O_2 , H_2 , H_2O , N_2 et OH. Les mesures ont été effectuées par la technique de diffusion Raman spontanée à l'exception du radical OH pour lequel on a utilisé la méthode LIF (*Laser-Induced Fluorescence*). Dancey (1996) a présenté des profils radiaux de vitesse axiale moyenne et de son écart-type obtenus par la méthode LDA.

Ce cas représente une configuration simple essentiellement bidimensionnelle et relativement compacte. Les résultats très détaillés caractérisent les conditions moyennes et fluctuantes. En revanche, la géométrie interne du brûleur et les conditions en amont ne sont pas complètement définies dans les publications. Les problèmes particulièrement importants sont liés aux spécifications du champ de température totale de l'air vicié et de l'échange de chaleur entre ce dernier et l'hydrogène à travers la paroi de l'injecteur.

Chambre de combustion LAERTE de l'ONERA

Une maquette de chambre de combustion supersonique a été testée sur le banc d'essai LAERTE à l'ONERA [Collin et al. (1997)]. La chambre de combustion est composée d'un canal de section carrée puis rectangulaire et d'un injecteur coaxial. L'entrée du canal est connectée directement à une soufflerie qui crée un écoulement supersonique d'air vicié. L'injecteur est représenté par une tuyère qui émet un jet rond supersonique le long de l'axe du canal. La géométrie de la chambre et les conditions expérimentales sont décrites en détail plus loin.

La température moyenne et son écart-type, mesurés par la technique CARS dans plusieurs sections transversales, ont été rapportés par Magre et al. (1998) ainsi que Magre et Bouchardy (2000). Weisgerber et al. (2001) ont publié des profils de vitesse longitudinale moyenne mesurés par la méthode LDA ainsi que des champs moyens et des champs d'écart-type des composantes de vitesse obtenus grâce à la technique PIV (*Particle Image Velocimetry*). Des champs instantanés et moyen de concentration du radical OH ont été caractérisés à l'aide de la technique LIF [Bresson et al. (2001a,b)]. Les publications présentent également des distributions de pression pariétale le long de la chambre. Ces résultats expérimentaux correspondent à la combustion de l'hydrogène. George et al. (2005) ont récemment publié quelques résultats relatifs à la combustion supersonique du mélange méthane-hydrogène et de l'éthylène.

Ce cas a une géométrie simple qui peut être éventuellement représentée par une configuration axisymétrique. Les résultats expérimentaux sont assez détaillés. Pourtant, les champs de température totale et de turbulence n'ont pas été suffisamment bien explorés à l'entrée de la chambre. En outre, très peu d'information est disponible sur l'état thermique des parois du canal et du corps de l'injecteur.

Chambre de combustion du DLR

Une étude de l'écoulement dans une maquette de chambre de combustion a été réalisée par l'institut DLR en Allemagne. La chambre est formée par un canal rectangulaire composé d'un tronçon de section constante et d'un tronçon divergent. La hauteur de la section d'entrée est de 45 mm. Un mât de section triangulaire (32 mm × 6 mm) est installé

horizontalement à mi-hauteur de la section d'entrée. Quinze injecteurs soniques de 1 mm de diamètre sont alignés sur la surface arrière du mât qui sert à créer des tourbillons pour accrocher la flamme. L'écoulement d'air vicié à l'entrée de la chambre est caractérisé par les conditions suivantes : nombre de Mach de 2, vitesse de 730 m/s, pression statique de 100 kPa, température statique de 340 K, température totale de 600 K. Dans ces conditions, le combustible ne peut pas s'enflammer spontanément.

Les résultats expérimentaux ont été publiés par Waidmann et al. (1995) et par Oevermann (2000). L'écoulement dans la chambre a été étudié avec et sans la combustion de l'hydrogène. Les publications ont présenté des images strioscopiques de l'écoulement derrière le mât. On a mesuré les distributions de pression pariétale le long du canal. Les techniques PIV et LDA ont permis d'obtenir des champs de vitesse et des profils longitudinaux et transversaux de vitesse moyenne et de son écart-type. La méthode CARS a donné des profils transversaux de température moyenne. La structure de la zone de mélange a été visualisée par la technique de diffusion Rayleigh dans un plan longitudinal. Les mesures de l'émission spontanée et de la fluorescence (LIF) du radical OH ont caractérisé la zone de réaction.

La configuration de la chambre de combustion peut être globalement vue comme bidimensionnelle. Pourtant, la représentation tridimensionnelle des injecteurs peut être importante pour simuler la stabilisation de la flamme. Les conditions d'entrée ne sont pas spécifiées en détail. Les conditions amont de turbulence n'ont pas été rapportées.

Chambre de combustion SCHOLAR de la NASA

Une chambre expérimentale de combustion supersonique nommée SCHOLAR a été testée au Centre de recherche Langley de la NASA. La chambre est constituée de quelques tronçons de section rectangulaire variable. La section d'entrée a une hauteur de 39 mm et une largeur de 88 mm. Un injecteur supersonique est intégré dans une paroi. Un jet supersonique d'hydrogène de 7.6 mm de diamètre est injecté à 30° par rapport à l'écoulement d'air. Les conditions dans l'écoulement d'air vicié sont les suivantes : nombre de Mach de 2, vitesse de 1400 m/s, pression statique de 100 kPa, température statique de 1200 K, température totale de 1830 K. Le jet d'hydrogène est caractérisé par les conditions suivantes : nombre de Mach de 2.5, pression statique de 203 kPa, température totale de 300 K. L'hydrogène s'enflamme spontanément dans la couche de mélange autour du jet.

Cutler et al. (2002) ont publié les résultats expérimentaux représentés par des distributions de pression et de flux de chaleur pariétaux le long du canal et par des champs de température dans plusieurs sections transversales. Les champs de température moyenne et de son écart-type ont été mesurés par la méthode CARS. Rodriguez et Cutler (2003) ont rapporté des profils de pression Pitot dans la section d'entrée de la chambre.

Ce cas a une configuration essentiellement tridimensionnelle. À l'exception des profils de pression Pitot, les conditions d'entrée n'ont pas été spécifiées en détail. Les incertitudes relatives au profil de température au voisinage des parois peuvent entraîner des difficultés pour la simulation de l'autoinflammation.

D'après les publications, nous pouvons constater que les techniques de mesures appliquées sont similaires bien que la quantité d'information varie selon les possibilités d'accès optique. Dans tous les cas, il existe un manque de caractérisation détaillée des conditions en amont pour la température totale et pour la turbulence. L'expérience LAERTE est la seule qui a donné des résultats sur la combustion du mélange CH₄-H₂.

4.1.2. Simulations numériques de la combustion supersonique

Le nombre de publications sur la simulation numérique de la combustion supersonique est très grand. Il est inutile de toutes les mentionner. Nous nous intéressons essentiellement aux travaux consacrés à la simulation des essais expérimentaux que nous avons considérés dans la section précédente car ces travaux représentent la voie la plus rigoureuse de valider l'approche numérique.

Des simulations des expériences de Burrows et Kurkov et de Beach [Evans et al. (1978)] ont été effectuées par Eklund et al. (1990), par Ebrahimi (1995) et par Engblom et al. (2005) en utilisant des modèles chimiques simples et l'approche quasi-laminaire pour calculer les termes de production chimique. Eklund et al. ont également présenté des résultats de simulation sur l'expérience de Jarrett et al. (1988).

Evans et Schexnayder (1979) ont appliqué le modèle $k-\varepsilon$ avec une correction de compressibilité, une cinétique chimique détaillée et un modèle de non mélange à la simulation des expériences de Cohen et Guile, de Burrows et Kurkov et de Beach. Le modèle de non mélange (*unmixedness* en anglais) a été proposé par Spiegler et al. (1976). Evans et Schexnayder ont comparé deux modèles chimiques d'oxydation de l'hydrogène : un mécanisme simple à 8 réactions entre 6 espèces et un mécanisme détaillé à 25 réactions entre 12 espèces y compris quelques espèces azotées. La prise en compte de la cinétique détaillée et de l'effet de non mélange a amélioré la qualité de la simulation.

L'expérience de Beach [Evans et al. (1978)] a été simulée en appliquant l'approche de la fonction de densité de probabilité (PDF) présumée [Baurle et al. (1995), Gerlinger et al. (2001)] et transportée [Baurle et al. (1995), Möbus et al. (2003)] pour la température et pour les fractions massiques des espèces. Le même mécanisme chimique simple (7 réactions entre 6 espèces) a été utilisé. Les deux modèles de PDF testés par Baurle et al. ont donné des résultats différents sans apporter une performance complètement satisfaisante. Gerlinger et al. ont comparé les résultats donnés par PDF présumée et par l'approche quasi-laminaire. Les deux approches ont montré des performances très similaires. Möbus et al. ont mis en évidence une qualité supérieure de la modélisation de PDF liée par la méthode de Monte Carlo. En outre, ils ont démontré que l'approche quasi-laminaire sous-estime la largeur de la zone de réaction et surestime la fraction maximale de H_2O .

Les expériences sur le brûleur supersonique de la NASA ont inspiré beaucoup de simulations numériques. Jarrett et al. (1988) ont présenté des résultats de simulation avec un modèle algébrique de viscosité turbulente et avec le mécanisme cinétique global de Rogers et Chinitz (1983). L'ajustement du modèle de la viscosité turbulente a permis d'obtenir un bon accord avec l'ensemble des résultats expérimentaux.

Baurle et ses collaborateurs [Baurle et al. (1994a,b), Baurle et al. (1995), Baurle et Girimaji (2003)] ont développé un modèle de PDF multi-variable présumée et l'ont validé à partir de l'expérience sur le brûleur de la NASA. L'analyse de ces publications nous permet d'observer l'évolution du modèle de PDF et de comparer les performances des modèles de turbulence à une et à deux équations ainsi que des modèles chimiques simplifié (7 réactions entre 6 espèces) et détaillé (18 réactions entre 8 espèces) extraits du mécanisme de Jachimowski (1988). Nous pouvons constater que les différences dues au modèle de turbulence et au modèle chimique sont relativement faibles par rapport aux écarts entre les résultats numériques et expérimentaux.

L'expérience sur le brûleur de la NASA a été simulée par Möbus et ses collaborateurs [Möbus et al. (2001), Möbus et al. (2003)] en modélisant le transport de PDF des quantités scalaires (composition chimique et enthalpie) et de PDF liée des scalaires, de la vitesse et de la fréquence turbulente par la méthode de Monte Carlo. Le modèle chimique (7 réactions entre 6 espèces) a été tiré de la publication de Baurle et al. (1994a). Les résultats de ces

simulations ont été comparés à ceux obtenus avec l'approche quasi-laminaire. Des comparaisons de profils calculés et mesurés ont montré une meilleure qualité des résultats issus de la modélisation de PDF liée. L'approche quasi-laminaire a systématiquement surestimé les pics de la température et des fractions de OH et de H₂O.

Concernant l'ensemble des résultats de simulation relatifs à l'expérience sur le brûleur de la NASA, nous pouvons constater qu'aucune méthode n'a donné d'accord complètement satisfaisant pour toutes les données expérimentales. Les désaccords sont probablement dus à la spécification approchée des conditions en amont et aux modèles appliqués. Les publications ne donnent pas de comparaison des profils de fraction de H₂ pour une raison inconnue.

La combustion supersonique dans la chambre de combustion LAERTE a été simulée par Gaffié et al. (2001) à l'aide du code MSD. Plusieurs modèles de combustion turbulente intégrés dans le code ont été testés. Le mécanisme cinétique simple (7 réactions entre 6 espèces) publié par Eklund et al. (1990) a été utilisé avec deux approches pour l'interaction turbulence-chimie : la correction (1.52) pour la solution RANS, le modèle probabiliste eulerien-lagrangien (PEUL) pour la solution mixte RANS-particules stochastiques.

L'approche quasi-laminaire pour le modèle chimique représenté par deux mécanismes cinétiques [Eklund et al. (1990), Davidenko et al. (2002)] a été appliquée par Quintilla et al. (2005) pour simuler l'expérience LAERTE avec le code CEDRE (ONERA). Les effets relatifs au combustible (H₂ et CH₄-H₂), au modèle chimique, aux conditions aux limites (température totale de l'air vicié, température des parois) et au traitement numérique (configurations 2D et 3D, résolution spatiale, modèle de paroi) ont été étudiés.

Notre contribution à la simulation de combustion supersonique de H₂ et du mélange CH₄-H₂ dans la chambre LAERTE est représentée par les publications suivantes : Davidenko et al. (2002), Davidenko et al. (2003), Davidenko et al. (2004), Davidenko et al. (2005a,b,c).

L'ensemble des simulations de l'expérience LAERTE montre que la solution est sensible aux modèles numériques et aux conditions imposées sur les frontières du domaine de calcul. Il est possible d'obtenir un accord global satisfaisant avec les résultats expérimentaux. En revanche, les détails observés dans l'expérience ne sont pas toujours bien reproduits par le calcul.

L'expérience sur la chambre de combustion DLR a été simulée par Oevermann (2000) en utilisant l'approche bidimensionnelle pour la géométrie et le modèle de flammelettes pour la combustion. La simulation de l'écoulement non réactif a donné un bon accord avec l'expérience. Avec la combustion, la qualité de la simulation est moins satisfaisante.

Génin et al. (2003) ont modélisé les écoulements réactif et non réactif dans la chambre DLR par la méthode LES (*Large Eddy Simulation*). Les simulations ont été effectuées en trois dimensions avec un modèle sous-maille pour la combustion et avec le modèle chimique global de Rogers et Chinitz (1983). Les résultats LES ont été comparés aux données expérimentales et aux résultats numériques d'Oevermann. Les deux calculs sont similaires pour le cas non réactif. La qualité des résultats LES pour l'écoulement réactif est nettement meilleure mais n'est pas encore absolument satisfaisante.

Pour l'expérience sur la chambre SCHOLAR, des résultats de simulation ont été publiés par Drummond et al. (2002) et par Rodriguez et Cutler (2003). Les simulations ont utilisé l'approche quasi-laminaire et le même mécanisme cinétique (18 réactions entre 8 espèces). Rodriguez et Cutler ont réalisé une étude paramétrique afin d'étudier l'effet du maillage, du modèle de turbulence, des nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents et des conditions turbulentes en amont. Les résultats de simulation et d'expérience sur la distribution de pression pariétale et sur les champs transversaux de température ont été comparés. Rodriguez et Cutler ont conclu que la solution était sensible aux facteurs variés et qu'ils

n'avaient pas réussi à accorder simultanément les résultats sur le délai d'autoinflammation, sur la distribution de pression et sur la pénétration du jet avec l'expérience.

D'après la présente étude bibliographique, nous pouvons conclure que même les cas simples et bien étudiés ne sont pas faciles à simuler. Les désaccords entre le calcul et l'expérience ne proviennent pas seulement des défauts des modèles mais aussi des incertitudes relatives aux conditions expérimentales. Dans la suite, nous allons présenter les résultats de notre étude numérique sur la chambre de combustion LAERTE car c'est la seule expérience permettant de tester notre modèle chimique pour le mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$.

4.2. Présentation de l'expérience LAERTE

4.2.1. Banc d'essai LAERTE à l'ONERA

Le banc d'essai LAERTE a été créé par l'ONERA pour mener des études « des phénomènes d'aérothermochimie, caractéristiques du mélange réactif turbulent entre des écoulements supersoniques d'hydrogène et d'air » [Collin et al. (1997)]. Les composants principaux du banc d'essai sont la soufflerie et la chambre de combustion supersoniques. D'autres installations sont représentées par les systèmes d'alimentation, de préchauffage de fluides alimentés, d'échappement, de contrôle-commande, de mesures, *etc.*

La soufflerie supersonique est constituée d'un réchauffeur à air et d'une tuyère supersonique. Le réchauffeur a un foyer métallique réfractaire composé d'un long tube avec un diamètre interne de 100 mm. Il est alimenté en air, en oxygène et en hydrogène. L'air passant au foyer peut être préchauffé jusqu'à 850 K par des échangeurs de chaleur. Cela permet de diminuer le taux de viciation d'air par les produits de combustion. À l'entrée du foyer, on mélange de l'air et de l'oxygène. On brûle de l'hydrogène dans de l'air suroxygéné afin d'obtenir une température génératrice limitée à 2000 K.

La tuyère supersonique est conçue pour accélérer l'écoulement jusqu'à un nombre de Mach de 2. L'entrée de la tuyère est raccordée à la sortie du réchauffeur par un adaptateur. La tuyère et l'adaptateur sont refroidis avec de l'eau.

La chambre de combustion est connectée directement à la sortie de la tuyère. Elle a un canal modulable permettant de modifier sa forme. Les parois de la chambre sont métalliques et non refroidies, elles fonctionnent en puits thermique. Cela limite la durée d'une rafale à quelques dizaines de secondes. Les parois sont munies de hublots en silice fondue donnant l'accès dans le canal aux moyens de mesures optiques. Le canal de la chambre s'ouvre dans une conduite d'échappement fermée.

L'injection de gaz (hydrogène, hélium ou azote) est possible le long ou à travers l'écoulement d'air. Pour l'injection longitudinale, on installe un injecteur au bout d'un corps cylindrique passant par la tuyère. Le fluide injecté peut être préchauffé jusqu'à une température de 500 K à l'aide d'un échangeur de chaleur.

4.2.2. Géométrie de la soufflerie supersonique et de la chambre de combustion

Nous présentons ici un montage particulier de la chambre de combustion que nous prenons plus loin pour la simulation numérique. Le schéma du dispositif expérimental et ses dimensions principales sont donnés sur la figure 4.1.

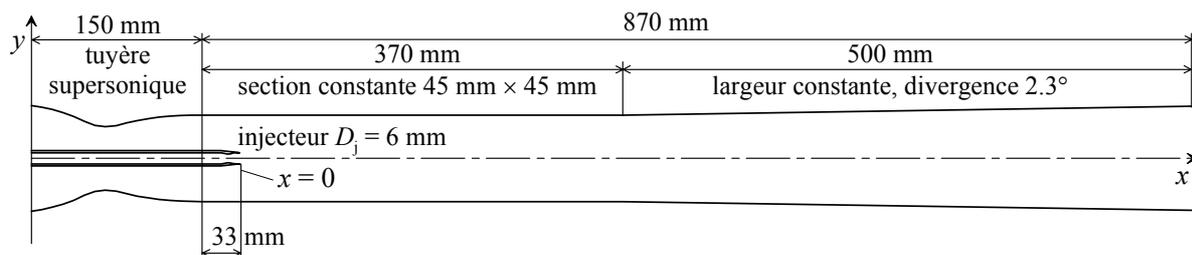


Figure 4.1. Schéma du dispositif expérimental LAERTE.

La tuyère supersonique a un canal de section rectangulaire variable formé par deux parois profilées symétriques et par deux parois latérales planes. Un tube métallique refroidi est installé le long de l'axe de la tuyère. Il sert de conduite et de support pour un injecteur monté sur son extrémité. Dans la suite, nous appelons ce tube le corps central. Les profils de la tuyère et du corps central sont tracés sur la figure 4.2. La ligne en pointillés correspond au profil axisymétrique équivalent en terme de l'aire de section. Cette dernière géométrie correspond à une des approches que nous avons utilisées pour nos simulations. Les dimensions principales sont les suivantes :

- longueur de 150 mm ;
- largeur constante de la tuyère de 45 mm ;
- hauteurs de sections : 67 mm à l'entrée, 24.1 mm au col, 45 mm à la sortie ;
- diamètres du corps central : interne de 6 mm, externe de 10 mm.

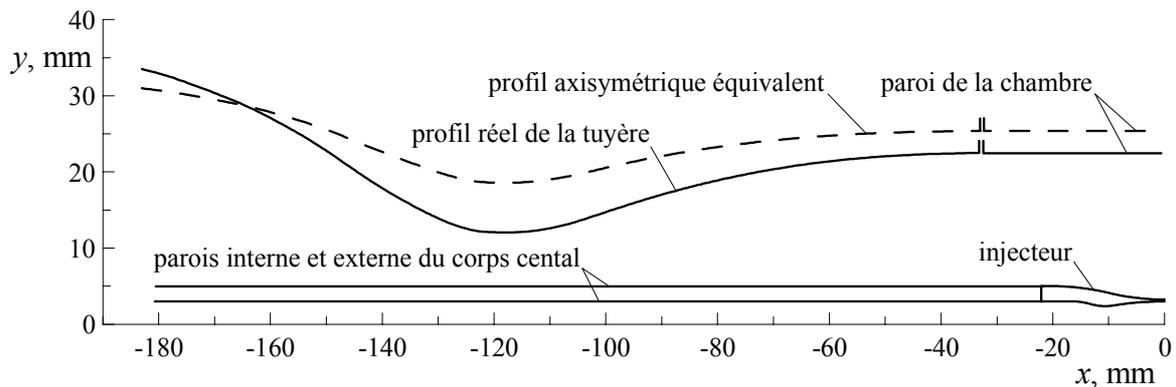


Figure 4.2. Contours pariétaux de la tuyère supersonique et du corps central.

L'injecteur métallique non refroidi a une forme de tuyère de Laval axisymétrique. Son diamètre externe diminue suivant un profil lisse afin de former un bord de fuite mince sans incidence. Les contours des parois de l'injecteur sont montrés sur la figure 4.3. Voici les dimensions de l'injecteur :

- longueur de 22 mm ;
- diamètres internes : 6 mm à l'entrée, 4.77 mm au col, 6 mm à la sortie ;
- diamètres externes : maximal de 10 mm, minimal de 6.5 mm ;
- épaisseur du bord de fuite de 0.25 mm.

La sortie de l'injecteur sert de repère à la coordonnée longitudinale. Le plan de sortie est avancé de 33 mm dans la chambre de combustion (figure 4.1).

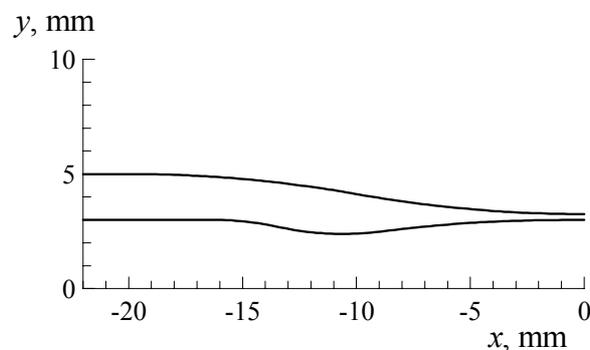


Figure 4.3. Contours des parois de l'injecteur.

Le canal de la chambre a une largeur constante. Il est composé d'un tronçon de section carrée et d'un tronçon divergent de section rectangulaire. Les dimensions principales du canal

de la chambre sont présentées sur la figure 4.1. La section de sortie de la chambre a une hauteur de 65.1 mm.

4.2.3. Conditions expérimentales

Les conditions expérimentales décrites dans les sous-sections suivantes représentent les cas simulés numériquement. Nous considérons ici les conditions caractérisées par l'expérience. D'autres conditions nécessaires pour la simulation seront spécifiées plus loin.

4.2.3.1. Conditions dans l'écoulement d'air vicié

À l'entrée de la chambre de combustion, les caractéristiques de l'écoulement d'air vicié sont les suivantes :

- débit massique de 0.65 kg/s ;
- pression totale de 710-720 kPa ;
- température totale de 1800-1850 K ;
- fraction molaire de O₂ de 21 % ;
- nombre de Mach de 2 ;
- pression statique de 82 kPa.

Le débit d'air vicié est composé des débits mesurés de trois fluides : 0.55 kg/s d'air, 0.1 kg/s de O₂, 8 g/s de H₂. L'air est alimenté à une température de 850 K et les autres fluides ont une température normale.

La pression totale est mesurée sur la paroi du foyer cylindrique près de sa sortie. Selon nos estimations, la section du foyer est assez grande pour que la pression totale et la pression statique soient pratiquement identiques.

La température et la composition de l'air vicié ne sont pas mesurées directement. Suivant l'approche thermodynamique idéale, la température totale à la sortie du réchauffeur est proche de 1850 K. La valeur estimée de la température totale a été confirmée par des mesures de température à $x = 10$ mm [Weisgerber et al. (2001)]. Selon Collin et al. (1997), la fraction moyenne de O₂ dans l'air vicié est maintenue avec une précision de ± 0.5 %.

Le nombre de Mach correspond à la spécification de conception de la tuyère. Collin et al. (1997) ont rapporté un profil de nombre de Mach obtenu à partir des mesures de la pression Pitot dans la section de sortie. À l'extérieur de la couche limite, le nombre de Mach varie entre 1.9 et 2.25.

La pression statique est mesurée sur la paroi près de la sortie de la tuyère supersonique.

4.2.3.2. Conditions d'injection

Les conditions d'injection sont les suivantes :

- débit massique de H₂ de 6.2 g/s ;
- débit massique du mélange CH₄-H₂ suivant sa composition :
8.1 g/s à $\eta = 0.506$, 10.2 g/s à $\eta = 0.275$;
- débit massique de N₂ de 27 g/s ;
- température totale de 300 K ;
- nombre de Mach de 2.

Le débit massique varie selon le gaz injecté pour que la pression statique à la sortie de l'injecteur soit proche de celle dans l'écoulement d'air vicié. Le débit de combustible est

mesuré. Le débit de N_2 remplaçant le combustible est estimé à partir de la pression d'injection.

La pression et la température totale d'injection sont mesurées en amont du corps central. Ces caractéristiques sont influencées par des pertes de charge et de chaleur dans un canal refroidi du corps central. Dans le cas considéré, les pertes de chaleur ne sont pas importantes car le fluide injecté a une température normale. Selon Magre et al. (1998) et Magre et Bouchardy (2000), la pression totale d'injection est de 680 kPa.

Le nombre de Mach est spécifié selon la conception de l'injecteur. Ce chiffre a été confirmé par des mesures de la pression Pitot près de l'axe du jet [Collin et al. (1997)].

4.2.3.3. Conditions pariétales thermiques

L'état thermique des parois du dispositif expérimental est globalement non stationnaire. Au début de chaque essai, le réchauffeur et la chambre sont préchauffés par l'écoulement d'air chaud. Durant cette phase, l'injecteur est protégé par l'injection de N_2 . Après l'obtention d'une température stable dans le réchauffeur, on passe à l'injection du combustible qui peut durer jusqu'à 15 s.

Les conditions thermiques des parois de la tuyère supersonique et du corps central sont inconnues. La température des parois de la chambre a été mesurée localement par des thermocouples. Pendant la période de combustion, la variation de la température peut être caractérisée comme il suit :

- 460-540 K à l'entrée de la chambre ;
- 950-1000 K à la fin du tronçon de section constante ;
- 750-1050 K près de la sortie de la chambre.

4.2.4. Données expérimentales disponibles

Les distributions de la pression pariétale le long de la chambre ont été mesurées sur les parois inférieure et supérieure de la chambre. Ces mesures sont les plus courantes. Pour le combustible CH_4-H_2 , seules les distributions de pression sont actuellement disponibles. Une comparaison des distributions correspondant à l'injection de N_2 et du combustible permet de repérer le début de la zone de combustion.

Les mesures optiques ont été réalisées dans le plan vertical passant par l'axe de la chambre. La méthode CARS a donné des mesures ponctuelles de la température statique dans plusieurs sections qui se trouvent entre $x = 10$ mm ($1.7 D_j$) et $x = 642$ mm ($107 D_j$).

Grâce à la technique LIF, les champs instantanés et moyen de concentration de OH ont été obtenus entre $x = 156$ mm ($26 D_j$) et $x = 258$ mm ($43 D_j$). Quelques images instantanées sont disponibles pour la zone située entre $x = 36$ mm ($6 D_j$) et $x = 90$ mm ($15 D_j$).

Une image du champ moyen d'émission spontanée de OH a été enregistrée pour la zone entre $x = 150$ mm ($25 D_j$) et $x = 240$ mm ($40 D_j$).

Les mesures de vitesse ont été faites par les méthodes LDA et PIV. La méthode LDA a donné des mesures ponctuelles de la vitesse longitudinale dans les sections suivantes : $x = 10$ mm ($1.7 D_j$), 210 mm ($35 D_j$) et 288 mm ($48 D_j$). La technique PIV a permis d'obtenir trois champs de composantes longitudinale et transversale de vitesse dans les zones suivantes : 20 mm $< x < 63$ mm ($3.3 < x/D_j < 10.5$), 180 mm $< x < 220$ mm ($30 < x/D_j < 36.7$), 261 mm $< x < 301$ mm ($43.5 < x/D_j < 50.2$).

L'ONERA a mis à notre disposition les résultats de mesures mentionnés ci-dessus.

4.3. Étude numérique de la combustion supersonique de l'hydrogène

4.3.1. Méthodologie et conditions générales de l'étude

Les résultats expérimentaux disponibles donnent une vue détaillée sur le processus de combustion supersonique mais ils ne sont pas suffisants pour définir complètement les conditions pour la simulation numérique. Nous avons par ailleurs plusieurs modèles dont les paramètres nécessitent parfois un ajustement. Par conséquent, une étude paramétrique est nécessaire pour valider le choix des conditions aux limites et des paramètres de modèles numériques.

L'approche tridimensionnelle (3D) est trop compliquée pour que de nombreuses simulations puissent être effectuées. En outre, les ressources informatiques disponibles ne permettent de réaliser une simulation 3D qu'avec un modèle chimique léger. Nous devons donc simplifier le problème afin d'étudier tous ses aspects.

La géométrie réelle de la chambre est 3D, en même temps, elle ressemble à une configuration symétrique par rapport à l'axe du canal. Une simplification importante est possible si l'on remplace la géométrie 3D par une forme bidimensionnelle axisymétrique (2DA) équivalente en terme d'aire de section. Cette modification ne concerne que la forme du canal car l'injecteur est axisymétrique.

L'acceptation de la configuration 2DA offre la possibilité de réaliser une étude paramétrique des facteurs suivants :

- conditions à l'entrée de la chambre ;
- conditions thermiques pariétales ;
- adaptation du maillage ;
- modèle chimique ;
- modèle de turbulence.

Cette étude paramétrique doit se terminer par la mise au point des conditions de simulation. Finalement, quelques calculs 3D sont possibles pour étudier les effets 3D.

Les sous-sections suivantes présentent les conditions générales de l'étude. Pour chaque cas particulier nous précisons plus loin les conditions spécifiques de simulation. Le choix de modèles et de conditions évolue le long de la présentation.

4.3.1.1. Modèles numériques

Plusieurs options ont été considérées pour le modèle de turbulence. Nous testons les trois approches que nous avons appliquées aux simulations de jets compressibles non réactifs (voir la section 2.4). Nous rappelons ici leurs désignations :

ST – modèle $k-\varepsilon$ standard sans les corrections

DC – avec la correction de Sarkar (dissipation compressible)

DCPL – avec la correction de Sarkar et avec la correction de Pope limitée

Les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents varient entre 0.7 et 0.9 et restent toujours égaux ($Le_T = 1$). Nous avons donc abandonné la condition $Sc_T = 1$ utilisée dans la version d'origine du code MSD.

Les modèles chimiques appliqués sont représentés par :

- mécanismes cinétiques simplifiés Eklund, Baurle et ONERA (annexe A) ;
- mécanisme détaillé Mueller sans les espèces azotées [Mueller et al. (1999a)] ;
- mécanisme détaillé LCSR sans les espèces carbonées (réactions 1-21 dans l'annexe B) ;

- mécanismes réduits Mueller (annexe D) et GRI-Red H₂ (annexe E) avec et sans les espèces azotées.

Les routines du code MSD relatives au modèle chimique ont été modifiées pour traiter les efficacités variables du 3^e corps. Les constantes de vitesse des réactions dépendantes de la pression ont été approchées par la loi d'Arrhenius à une pression de 100 kPa. Cette approximation est valide car la pression dans la chambre varie autour de ce niveau.

Dans nos simulations, N₂ est thermodynamiquement considérée comme une espèce composée de 98.3 % d'azote et de 1.7 % d'argon selon les proportions de ces deux gaz dans l'air standard. Pour le modèle chimique, N₂ est présentée comme 100 % d'azote.

L'approche quasi-laminaire est utilisée en supposant qu'il n'y a pas de couplage entre la turbulence et la chimie. Malgré certains défauts mentionnés dans la section 4.1.2, cette approche est largement exploitée pour simuler la combustion supersonique. D'après notre étude bibliographique, les modèles d'interaction turbulence-chimie n'assurent pas un rapport acceptable entre la qualité de résultats et le coût de calcul supplémentaire. Nous verrons plus loin que les incertitudes relatives aux conditions de simulation ne permettent pas de vérifier si un éventuel désaccord entre la simulation et l'expérience est vraiment dû à l'approche quasi-laminaire.

Afin de mettre en évidence certains effets, nous devons évaluer les caractéristiques intégrales du processus interne de la chambre. Des caractéristiques importantes sont le rendement de mélange et le rendement de combustion. Le rendement de mélange η_{mix} estime la fraction du combustible qui peut brûler complètement dans une section définie par la coordonnée x . Il est déterminé selon la formule suivante :

$$\eta_{\text{mix}} \equiv \frac{G_{\text{c mix}}}{G_{\text{c}}} = \frac{\iint_{S_x} \frac{Y_{\text{c}}}{\max(\phi, 1)} \bar{\rho} \tilde{u} \, dA_x}{\iint_{S_x} Y_{\text{c}} \bar{\rho} \tilde{u} \, dA_x} \quad (4.1)$$

G_{c} est le débit intégral du combustible passant par la section. $G_{\text{c mix}}$ est le débit du combustible mélangé. S_x est la surface de la section. A_x est l'aire de surface normale à la direction x . Y_{c} est la fraction du combustible restitué à partir de la composition locale du mélange réactif. Le rapport $Y_{\text{c}} / \max(\phi, 1)$ est la fraction locale du combustible qui peut brûler complètement. En sachant que toutes les espèces ont la même diffusivité (nombres de Lewis laminaire et turbulent égaux à 1) et en supposant que l'oxydation éventuelle de N₂ est négligeable, nous pouvons estimer Y_{c} et ϕ par les relations suivantes :

$$Y_{\text{c}} = 1 - \tilde{Y}_{\text{N}_2} / Y_{\text{N}_2 \text{e}} \quad (4.2)$$

$$\phi = \frac{Y_{\text{c}}}{f_{\text{st}} \tilde{Y}_{\text{N}_2} / Y_{\text{N}_2 \text{e}}} \quad (4.3)$$

$Y_{\text{N}_2 \text{e}}$ est la fraction massique moyenne de N₂ dans l'air vicié. Le rapport $\tilde{Y}_{\text{N}_2} / Y_{\text{N}_2 \text{e}}$ estime la fraction de l'air restitué à partir de la composition locale du mélange réactif. f_{st} est le rapport stœchiométrique massique du combustible et de l'air vicié.

L'avancement intégral de l'oxydation du combustible peut être représenté par le rendement de consommation du combustible η_{c} et par le rendement de formation des produits de combustion η_{p} définis comme :

$$\eta_c \equiv 1 - \frac{G_{H_2}}{G_{c\text{mix}}} = 1 - \frac{\iint_{S_x} \tilde{Y}_{H_2} \bar{\rho} \tilde{u} dA_x}{G_{c\text{mix}}} \quad (4.4)$$

$$\eta_p \equiv \frac{G_p}{G_{p\text{mix}}} = \frac{\iint_{S_x} Y_p \bar{\rho} \tilde{u} dA_x}{G_{c\text{mix}} (1 + 1/f_{st})} \quad (4.5)$$

G_{H_2} est le débit intégral de l'espèce H_2 . G_p et Y_p sont le débit intégral et la fraction massique locale des produits de combustion. $G_{p\text{mix}}$ est le débit des produits de combustion qu'on pourrait obtenir si l'on brûlait tout le combustible mélangé. La quantité Y_p mesure la fraction de H_2O générée par l'oxydation du combustible de la façon suivante :

$$Y_p = \tilde{Y}_{H_2O} - Y_{H_2Oe} \tilde{Y}_{N_2} / Y_{N_2e} \quad (4.6)$$

Y_{H_2Oe} est la fraction massique moyenne de H_2O dans l'air vicié.

Selon les définitions, η_c correspond à la fraction du combustible mélangé qui a été consommée par les réactions chimiques et η_p exprime la fraction du combustible mélangé dont l'oxydation a créé le produit final. Les estimations supérieure η_{comb} et inférieure η_{prod} pour le rendement de combustion sont :

$$\eta_{\text{comb}} = \eta_{\text{mix}} \eta_c, \quad \eta_{\text{prod}} = \eta_{\text{mix}} \eta_p \quad (4.7)$$

L'effet thermique de la combustion peut être mesuré par la variation longitudinale de la température totale moyenne pondérée par le débit massique. Dans une section donnée, la température totale moyenne est déterminée selon la formule suivante :

$$T_{t\text{moy}} = \frac{\iint_{S_x} \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{T}_t dA_x}{\iint_{S_x} \bar{\rho} \tilde{u} dA_x} \quad (4.8)$$

$T_{t\text{moy}}$ est également sensible à l'échange de chaleur sur les parois et à l'effet thermique des réactions chimiques. Le début de la croissance de $T_{t\text{moy}}$ localise l'autoinflammation.

4.3.1.2. Conditions thermiques pariétales

La température des parois de la tuyère supersonique et du corps central est inconnue. Le fait que ces parois soient refroidies permet de supposer que leur température est proche de 400 K. Cette supposition est confirmée par les mesures de la température de la paroi à l'entrée de la chambre (voir la section 4.2.3.3).

Deux approches ont été admises pour étudier l'effet des conditions pariétales sur le processus interne de la chambre. La première approche, plus réaliste, consiste à imposer une température constante de 400 K à la paroi de la tuyère et une distribution de température à la paroi de la chambre. Cette distribution est spécifiée comme une fonction linéaire par morceau $T_w(x)$ définie par les points suivants :

- $T_w = 500$ K à $x = -33$ mm (entrée de la chambre) ;
- $T_w = 1000$ K à $x = 337$ mm (sortie du tronçon de section constante) ;
- $T_w = 900$ K à $x = 837$ mm (sortie de la chambre).

La deuxième approche représente la limite physique de température correspondant aux conditions adiabatiques sur toutes les parois.

Comme nous verrons plus loin, la température du corps central $T_{w\text{cc}}$ est un des facteurs les plus importants pour la distance d'autoinflammation. Afin d'étudier son influence, nous prenons plusieurs valeurs de $T_{w\text{cc}}$ comprises entre 400 K et la température de paroi adiabatique. La température de l'injecteur est supposée égale à $T_{w\text{cc}}$. Nous avons vérifié que sa longueur est assez petite pour considérer que l'effet de la différence de température est négligeable même si cette différence était extrême. La paroi interne du corps central et de l'injecteur est toujours supposée adiabatique, donc il n'y pas d'échange thermique entre les écoulements d'air vicié et de combustible avant l'injection.

4.3.1.3. Conditions d'entrée de l'air vicié

Nous avons séparé les calculs de la tuyère et de la chambre de combustion pour faciliter l'étude paramétrique. La frontière séparant les deux zones de calcul est placée en amont de la courbure du profil externe de l'injecteur à $x = -20.3$ mm. Les conditions sur cette frontière sont déterminées à partir du calcul de la tuyère. Le domaine de la tuyère couvre la zone entre $x = -183$ mm et $x = 0$. Nous avons écarté la sortie du domaine de la tuyère de la section $x = -20.3$ mm afin d'éviter toute perturbation de la couche limite par les conditions imposées à la sortie.

Des conditions d'écoulement stationnaire et uniforme sont imposées à l'entrée de la tuyère ($x = -183$ mm). Les conditions génératrices ont été évaluées selon les trois hypothèses suivantes :

- 1) Conditions idéales correspondant à l'équilibre chimique sans pertes thermiques. La température génératrice T_{te} est de 1850 K.
- 2) Conditions idéales en terme de qualité de combustion mais avec pertes de chaleur dans le réchauffeur. $T_{te} = 1800$ K.
- 3) Équilibre chimique sans pertes thermiques mais avec un mélange plus riche représentant le cas d'une concentration de combustible élevée dans la zone centrale du canal. $T_{te} = 1920$ K, ce qui permet d'atteindre la température statique mesurée expérimentalement dans l'écoulement supersonique.

Pour les deux premiers cas, nous avons calculé la composition d'équilibre chimique à partir des débits massiques suivants : $G_{\text{air}} = 0.542$ kg/s, $G_{\text{O}_2} = 0.100$ kg/s et $G_{\text{H}_2} = 0.008$ kg/s. Cette répartition des débits vérifie les conditions : $G_e = 0.65$ kg/s, $T_{te} = 1850$ K et $X_{\text{O}_2e} = 0.21$. Pour le troisième cas, les proportions massiques d'air et de O_2 correspondent à l'expérience ($G_{\text{air}}/G_{\text{O}_2} = 5.5$) et la quantité de H_2 a été ajustée conformément à la température totale imposée.

Tableau 4.1. Conditions imposées à l'entrée de la tuyère supersonique.

T_t K	P_t kPa	ρU kg/(s·m ²)	Y_{O_2}	Y_{N_2}	$Y_{\text{H}_2\text{O}}$	Y_{OH}	Y_{O}	Y_{NO}	Y_{NO_2}	f_{st}
1850	-	221.4	0.2465	0.6408	0.1122	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	-	-	0.0311
			0.2439	0.6385	0.1122	$4.4 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-3}$	$4.3 \cdot 10^{-5}$	0.0308
1800	-	221.4	0.2466	0.6408	0.1123	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	-	-	0.0311
1920	710	-	0.2361	0.6414	0.1218	$6.9 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$	-	-	0.0298

Dans les deux premiers cas, le flux massique imposé correspond à un débit intégral de 0.65 kg/s. Pour le troisième cas, nous avons spécifié la pression génératrice expérimentale. Les conditions turbulentes identiques sont définies par un taux de turbulence $\tau_{Te} = 5\%$ et par une échelle turbulente $l_e = 1$ mm. Le tableau 4.1 récapitule les conditions d'entrée selon les

trois hypothèses adoptées. Pour le premier cas, deux différentes compositions sont spécifiées, dont la deuxième est prévue pour les modèles chimiques avec NO_x .

Nous considérons ici les simulations de la tuyère suivant la configuration 2DA. Les simulations 3D sont présentées plus loin. Le maillage 2DA construit dans la tuyère a une densité élevée. Il est composé de 138 cellules dans la direction longitudinale et de 328 cellules dans la direction transversale. La taille transversale des cellules alignées sur les parois est ≤ 0.025 mm. Cela nous permet de manipuler librement le maillage dans la chambre sans dégrader la qualité des profils interpolés à partir de la solution pour la tuyère.

Toutes les simulations de la tuyère ont été faites avec l'approche ST pour le modèle de turbulence en prenant $Pr_T = Sc_T = 0.9$. Des simulations spécifiques ont été effectuées pour chaque modèle chimique.

Les résultats de simulation sont présentés sous forme de profils radiaux dans la section de sortie physique de la tuyère ($x = -33$ mm). Sur la figure 4.4, nous comparons les profils radiaux de nombre de Mach M et de température totale T_t pour les conditions suivantes : la température génératrice est de 1800 K ou de 1850 K, parois de la tuyère et du corps central sont, soit à une température fixe de 400 K, soit adiabatiques. Nous pouvons constater que les conditions pariétales très différentes n'ont pas d'effet significatif sur les conditions au milieu de l'écoulement. L'épaisseur de la couche limite est proche de 2-2.5 mm sur les deux parois.

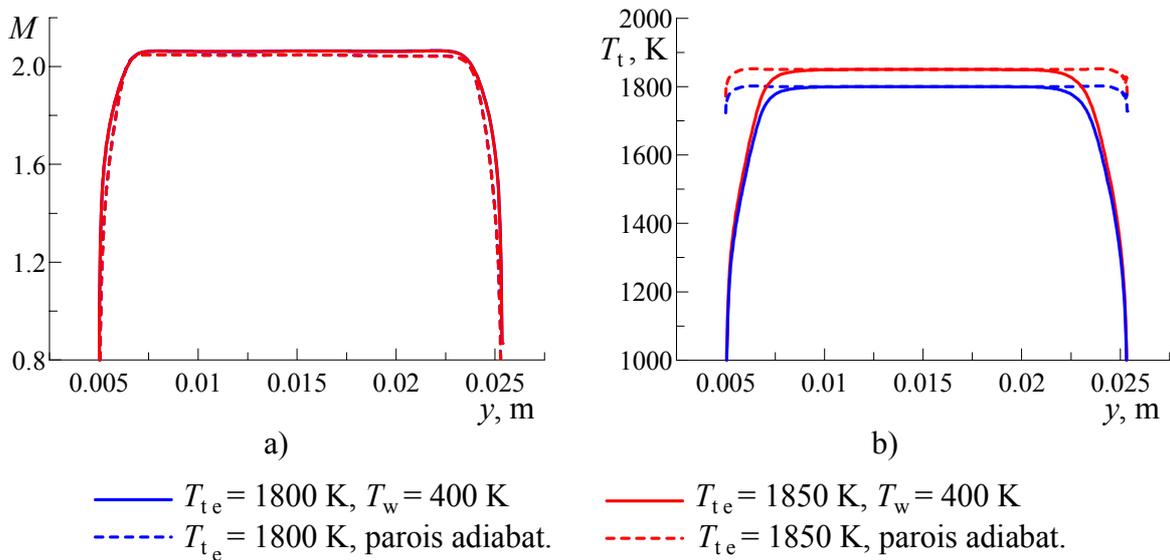


Figure 4.4. Profils radiaux de nombre de Mach (a) et de température totale (b) à $x = -33$ mm.

La figure 4.5 montre l'effet de la température du corps central T_{wcc} sur les profils radiaux de T_t et de T à la sortie de la tuyère pour $T_{te} = 1850$ K et pour une température de 400 K sur la paroi de la tuyère. Les extrémités gauches des courbes n'atteignent pas le niveau spécifié pour T_{wcc} car elles correspondent aux conditions au centre de la première cellule du maillage. L'allure des profils est déterminée par la différence des températures de l'écoulement et de la paroi. À $T_{wcc} = 1000$ K, le profil de T est pratiquement homogène.

Le tableau 4.2 rassemble les conditions à la sortie de la tuyère évaluées à partir des simulations pour les différentes conditions pariétales identifiées par T_w ainsi que pour les différentes températures génératrices T_{te} . La pression génératrice P_{te} correspond à un débit intégral de 0.65 kg/s sauf le cas $T_{te} = 1920$ K car la valeur de P_{te} a été imposée. P_{te} et T_{te} peuvent être vues comme les conditions d'arrêt dans le cœur de l'écoulement à la sortie de la tuyère. T_{tmoy} est calculée selon (4.8), P_{tmoy} et Y_{smoy} sont estimées de façon similaire. Les conditions statiques moyennes vérifient les conditions d'arrêt et le débit intégral. Les caractéristiques des pertes intégrales de la température totale $T_{tmoy} - T_{te}$ et de la pression

totale $P_{t\text{ moy}}/P_{te}$ sont données séparément pour les parties subsonique et supersonique de la tuyère. Globalement, $T_{t\text{ moy}}$ est réduite de 60 K lorsque la paroi est refroidie. Les pertes de $P_{t\text{ moy}}$ sont d'environ 5 % indépendamment des conditions pariétales. Le nombre de Mach M_{moy} n'est pas sensible aux variations de T_{te} et de T_w . Pour le débit imposé, le meilleur accord avec les pressions expérimentales dans le réchauffeur comme à la sortie de la tuyère est obtenu pour $T_{te} = 1800$ K et $T_w = 400$ K.

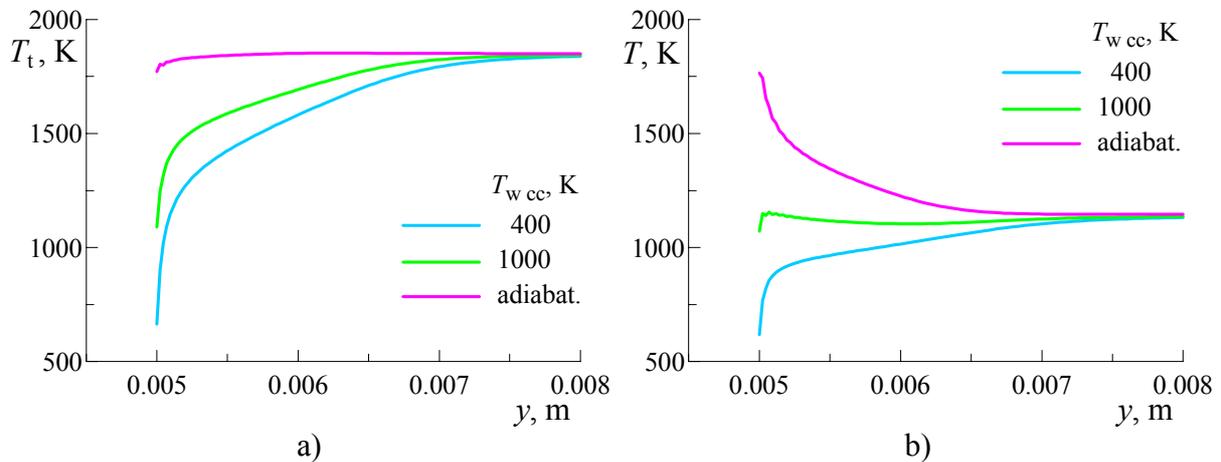


Figure 4.5. Profils radiaux de températures totale (a) et statique (b) au voisinage du corps central à $x = -33$ mm pour $T_{te} = 1850$ K.

Tableau 4.2. Conditions à la sortie de la tuyère supersonique.

T_w , K	400			adiabatique	
T_{te} , K	1800	1850	1920	1800	1850
P_{te} , kPa	720	730	710 (imposée)	729	739
$T_{t\text{ moy}} - T_{te}$, K	$-30^* - 27^{**}$	$-32 - 28$	$-34 - 29$	0	0
$P_{t\text{ moy}}/P_{te}$	$0.994^* \cdot 0.956^{**} = 0.950$			$0.994 \cdot 0.959 = 0.953$	
T_{moy} , K	1073	1106	1162	1114	1148
P_{moy} , kPa	81.7	83.0	81.6	83.4	84.8
M_{moy}	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04
U_{moy} , m/s	1339	1357	1390	1362	1381

* Partie subsonique de la tuyère

** Partie supersonique de la tuyère

4.3.1.4. Conditions d'injection

Le calcul du canal subsonique de l'injecteur est effectué séparément du calcul de la chambre de combustion. La frontière commune pour les deux domaines de simulation est placée au col sonique de l'injecteur ($x = -10.4$ mm). Le domaine du canal de l'injecteur s'étend de $x = -183$ mm jusqu'à $x = 0$. Le rapport de la longueur et du diamètre du canal subsonique est ainsi d'environ 29.

Pour l'injection de H_2 pur, les conditions suivantes sont imposées à l'entrée du canal :

- débit massique $\rho_j U_j = 219.3$ kg/(s·m²) ;
- température totale $T_{ij} = 300$ K ;
- taux de turbulence $\tau_{Tj} = 5$ % ;
- échelle de turbulence $l_j = 1$ mm.

La valeur spécifiée pour $\rho_j U_j$ correspond à un débit intégral G_j de 6.2 g/s.

Le maillage 2DA dans le canal de l'injecteur est construit suivant les mêmes principes que le maillage dans la tuyère. Il a 140 cellules dans la direction longitudinale et 61 cellules dans la direction transversale. La taille transversale des cellules alignées sur la paroi est ≤ 0.025 mm.

La simulation a été réalisée avec l'approche ST pour le modèle de turbulence. Les conditions au col sonique ($x = -10.4$ mm) issues du calcul sont caractérisées par les quantités moyennes suivantes : $M_{\text{moy}} = 0.93$, $U_{\text{moy}} = 1129$ m/s, $P_{t\text{ moy}} = 566$ kPa, $P_{\text{ moy}} = 323$ kPa, $T_{\text{ moy}} = 255$ K. Par rapport à la pression totale à l'entrée du domaine $P_{tj} = 594$ kPa, les pertes de charge sont d'environ 5 %. Si nous considérons la pression mesurée qui vaut 680 kPa, les pertes sont proches de 17 %. Cela signifie que la pression mesurée n'est pas une caractéristique précise des conditions d'injection.

4.3.1.5. Configuration axisymétrique de la chambre

La zone de calcul 2DA de la chambre de combustion est schématisée sur la figure 4.6. Elle représente une demi-section longitudinale de la chambre. Trois domaines principaux sont :

- D1 – partie supersonique de l'injecteur
- D2 – canal de la chambre autour de l'injecteur
- D3 – canal de la chambre en aval de l'injecteur

Pour un calcul parallèle sur quatre processeurs, D3 est divisé en quatre sous-domaines dont le premier est groupé avec D1 et D2.

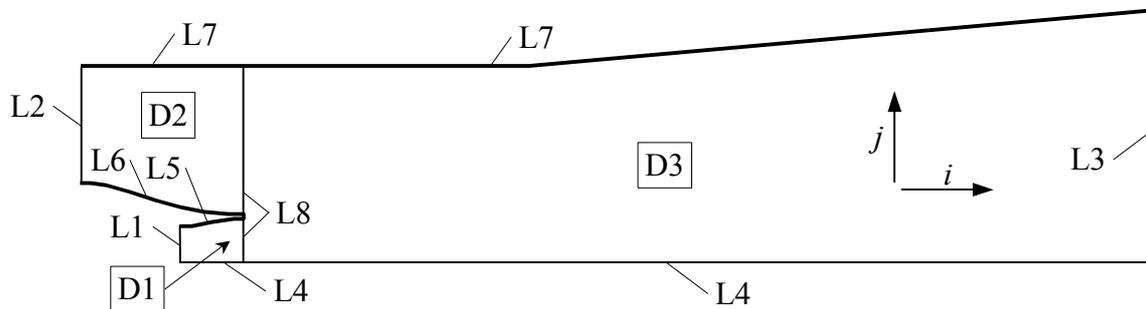


Figure 4.6. Zone de calcul 2DA de la chambre de combustion.

Les frontières des domaines sont les suivantes :

- L1 – entrée du fluide injecté ($x = -10.4$ mm)
- L2 – entrée de l'air vicié ($x = -20.3$ mm)
- L3 – sortie de la chambre ($x = 837$ mm)
- L4 – axe de la chambre
- L5 – paroi interne de l'injecteur
- L6 – paroi externe de l'injecteur
- L7 – paroi du canal de la chambre
- L8 – frontière multidomaines ($x = 0$)

Les conditions aux frontières sont spécifiées dans les sections précédentes sauf la sortie à laquelle nous avons imposé une pression constante de 80 kPa. Comme les maillages du canal de l'injecteur et de la tuyère supersonique ne sont pas raccordés exactement avec les maillages de D1 et D2, les conditions imposées aux frontières L1 et L2 sont approchées à partir des solutions respectives dans les sections d'entrée.

Le maillage de base est relativement grossier. Il est resserré près des parois et dans la couche cisailée du jet. Un fragment du maillage autour de l'injecteur est illustré sur la figure 4.7. Le tableau 4.3 récapitule les informations principales sur le maillage telles que les dimensions (N_i , N_j) et les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}$, $\Delta_{j\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}$, $\Delta_{j\max}$). D'autres maillages utilisés pour les simulations de la chambre sont présentés plus loin.

Tableau 4.3. Caractéristiques du maillage 2DA de base

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
D1	42	15	630	0.1	0.39	0.08	0.35
D2	51	82	4182	0.1	0.8	0.09	0.34
D3	375	100	37500	0.1	4.0	0.08	0.35

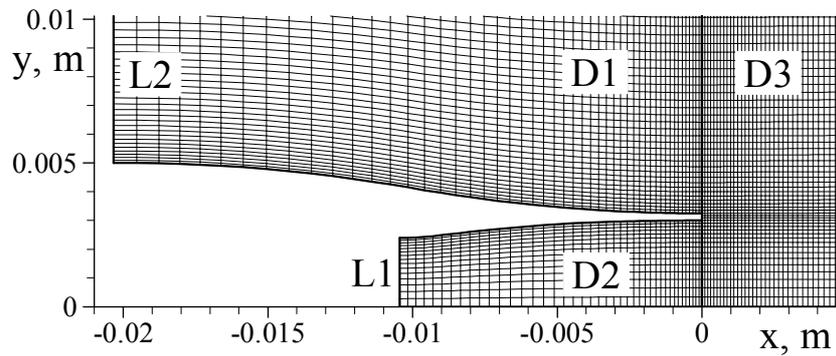


Figure 4.7. Maillage 2DA de base autour de l'injecteur.

4.3.2. Effet des conditions aux limites sur la solution

Cette section présente les résultats de simulation pour différentes conditions à l'entrée de l'air vicié et sur les parois de la chambre. Les simulations ont été effectuées avec les modèles suivants :

- modèle de turbulence : approche ST, $Sc_T = 0.9$;
- modèle chimique : mécanisme cinétique ONERA.

Afin de systématiser notre analyse, nous considérons deux groupes de résultats de simulations correspondant aux conditions :

- $T_{te} = 1800$ K, 1850 K et 1920 K avec $T_{wcc} = 1000$ K ;
- $T_{te} = 1850$ K avec $T_{wcc} = 400$ K, 1000 K et paroi adiabatique du corps central.

Toutes ces simulations ont été effectuées avec la même distribution de température sur la paroi du canal. Un cas spécifique a été simulé pour $T_{te} = 1850$ K en imposant les conditions adiabatiques sur les parois du canal et du corps central.

Considérons d'abord l'état de l'écoulement à proximité du plan d'injection. Les figures 4.8 et 4.9 montrent les profils radiaux de vitesse et de température statique. Les profils calculés et mesurés sont comparés dans la section $x = 10$ mm à l'exception des données PIV pour lesquelles $x = 24$ mm. Dans le jet, la vitesse calculée est considérablement plus grande que la vitesse mesurée. Ce désaccord n'est pas spécifique à la section considérée. Nous avons vérifié qu'il existe un excès de vitesse calculée de 250-300 m/s par rapport aux données PIV sur l'axe du jet dans l'intervalle $20 \text{ mm} < x < 63 \text{ mm}$. Un meilleur accord est obtenu entre la simulation et l'expérience pour la vitesse de l'écoulement d'air. La différence observée est probablement due au glissement des particules d'ensemencement dans l'écoulement expérimental [Weisgerber (2001)].

L'effet de T_{te} est illustré sur la figure 4.8. Lorsque T_{te} augmente, la vitesse de l'écoulement d'air croît et l'allure de son profil s'éloigne des résultats expérimentaux. Les profils de T montrent au contraire que la température mesurée est supérieure à celle calculée dans l'écoulement d'air. Le meilleur accord avec l'expérience est donné par la simulation pour $T_{te} = 1920$ K. En outre, nous pouvons constater une asymétrie du profil mesuré.

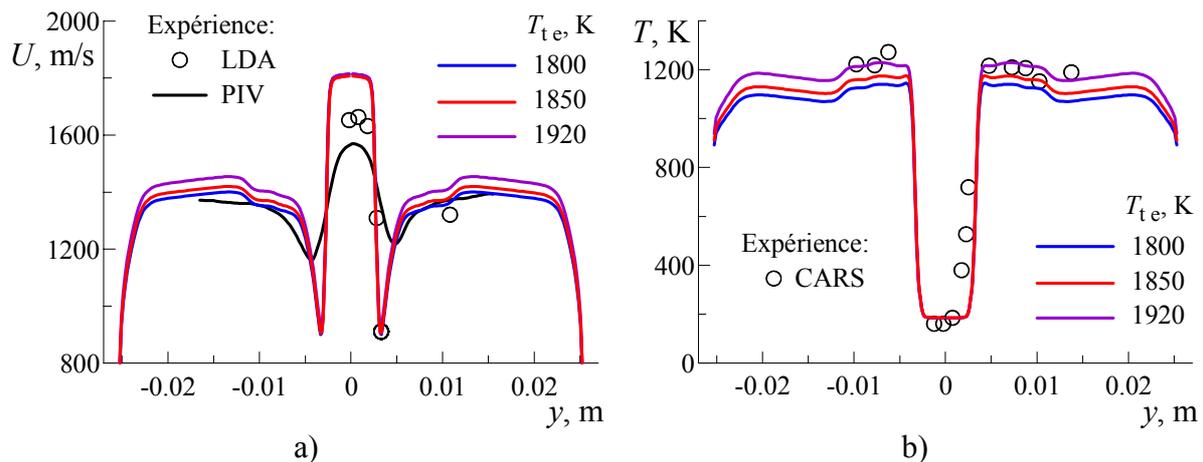


Figure 4.8. Profils radiaux de vitesse (a) et de température statique (b) à $x = 10$ mm (24 mm pour PIV). Simulation pour $T_{wcc} = 1000$ K.

L'effet dû aux conditions thermiques pariétales est présenté sur la figure 4.9. Le profil de vitesse est pratiquement insensible à la variation des conditions pariétales. Le profil de température est influencé dans le sillage autour du jet et dans la couche limite sur la paroi du canal sans changements visibles au milieu de l'écoulement. Lorsque la paroi du corps central

est adiabatique, une certaine cohérence du profil de température avec les points expérimentaux est observée du côté inférieur du sillage.

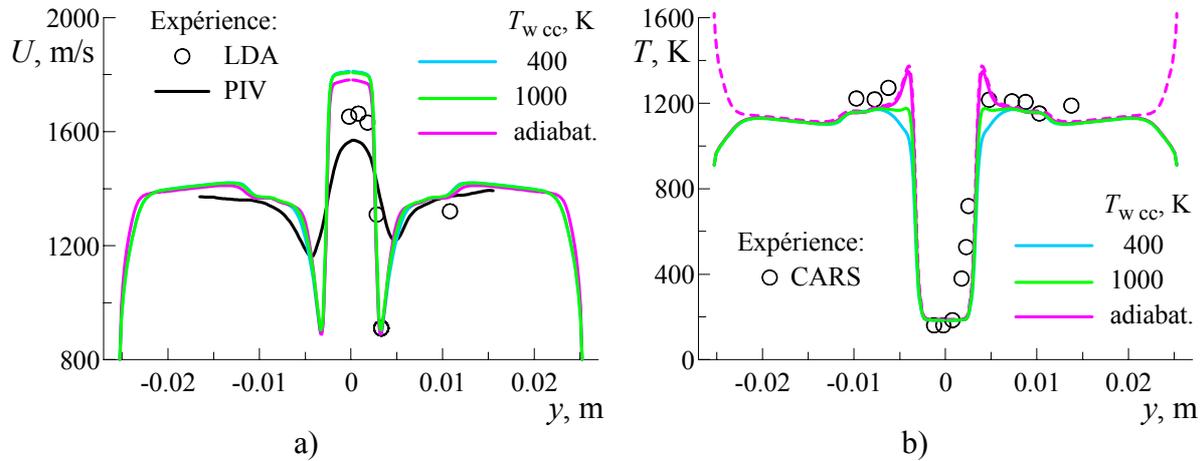


Figure 4.9. Profils radiaux de vitesse (a) et de température statique (b) à $x = 10$ mm (24 mm pour PIV). Simulation pour $T_{te} = 1850$ K. Le profil en pointillés correspond à la paroi adiabatique du canal.

D'après la comparaison des profils de température statique issus du calcul et de l'expérience, nous pouvons proposer deux hypothèses à condition qu'il n'y ait pas d'erreur importante dans les mesures de température :

- 1) Le profil de température totale à la sortie du réchauffeur n'est pas uniforme avec un maximum dans la zone centrale. La température de cette zone est supérieure à la température idéale donc la non-uniformité du profil n'est pas uniquement due aux pertes thermiques mais probablement à l'enrichissement de la zone centrale en produits de combustion.
- 2) La paroi du corps central a apparemment une température supérieure à 400 K ce qui est confirmé par la forme du profil mesuré de température aux bords du jet. Les données expérimentales ne sont pas suffisamment détaillées pour remonter à la température pariétale à partir de la comparaison des profils.

Considérons maintenant les résultats permettant d'analyser le processus interne de la chambre. Les distributions de pression pariétale P_w le long de la chambre ont été mesurées sur les parois inférieure et supérieure du canal. Elles sont présentées sur la figure 4.10(a) avec les résultats de simulations pour T_{te} variable. La pression est normalisée par la pression génératrice de l'air vicié P_{te} . Le calcul reproduit les fluctuations de pression dans le premier tiers du canal et l'allure globale des distributions. La pression croît dans le tronçon de section constante puis diminue dans le tronçon divergent. Les distributions expérimentales sont fortement perturbées dans ce dernier tronçon. En outre, elles ne sont plus cohérentes. Cela signifie que l'écoulement est asymétrique, ce qui est confirmé par d'autres résultats expérimentaux, ou que la forme du canal n'est pas parfaite. Les distributions calculées sont sensibles à T_{te} : plus T_{te} est grande, plus les pics sont hauts au début et plus la pression est basse à la fin.

Les évolutions du rendement de combustion η_{prod} le long de la chambre pour T_{te} variable sont tracées sur la figure 4.10(b). Elles montrent de différentes distances d'autoinflammation pour les trois cas. Une croissance initiale rapide de η_{prod} correspond à l'inflammation progressive du prémélange formé sur cette distance. Ensuite, la croissance de η_{prod} est limitée par le taux de mélange. La courbe pour $T_{te} = 1920$ K s'écarte des deux autres, ceci n'est pas dû au taux de mélange mais à la différence des richesses globales : $\phi = 0.34$

pour cette courbe et $\phi = 0.31$ pour les deux autres. La seule explication de la diminution de la pression finale est la réduction du rapport du dégagement de chaleur et de l'enthalpie totale de l'écoulement d'air lorsque T_{te} augmente.

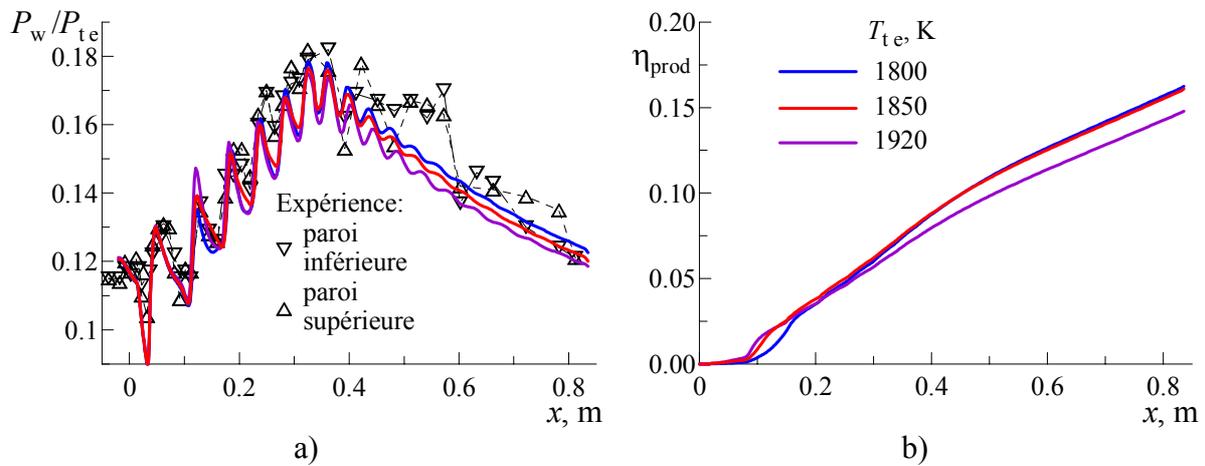


Figure 4.10. Distributions longitudinales de pression pariétale (a) et de rendement de combustion (b). Simulation pour $T_{wcc} = 1000$ K.

Les distributions de pression pariétale et de rendement de combustion pour T_{wcc} variable sont montrées sur la figure 4.11. Nous constatons également qu'une autoinflammation plus rapide donne une pression finale plus basse. Cette fois-ci, la pression finale est impactée par le taux de mélange qui limite la croissance de η_{prod} . Nous pouvons aussi apprécier l'effet des conditions thermiques sur la paroi du canal en comparant les deux courbes correspondant au cas avec la paroi adiabatique du corps central. Nous pouvons supposer que la pression finale est définie par la chaleur sensible de l'écoulement. Il s'ensuit que les pertes de chaleur sur la paroi du canal peuvent atteindre 15 % du dégagement intégral de chaleur.

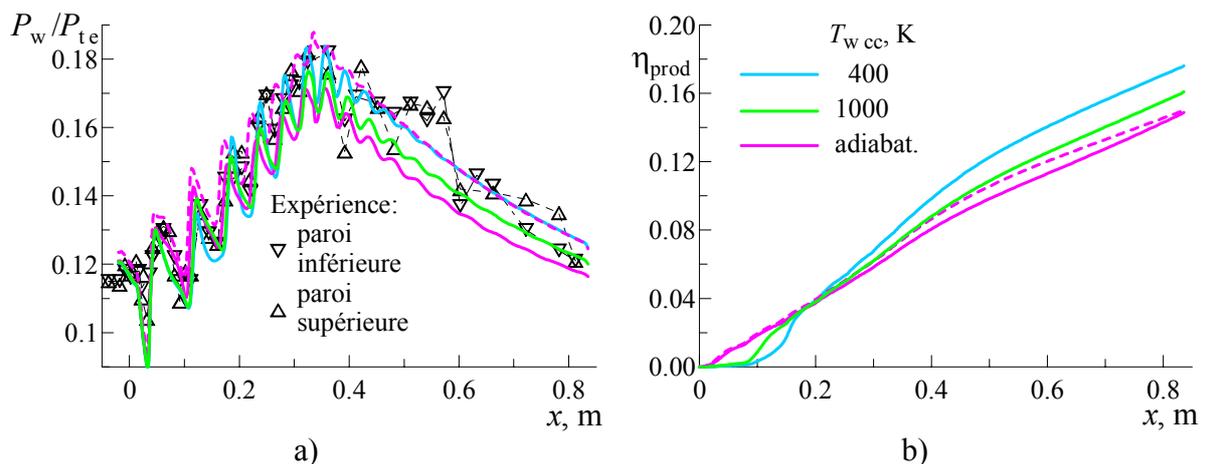


Figure 4.11. Distributions longitudinales de pression pariétale (a) et de rendement de combustion (b). Simulation pour $T_{te} = 1850$ K. Le profil en pointillés correspond à la paroi adiabatique du canal.

L'analyse des courbes sur les figures 4.10 et 4.11 permet de conclure que la variation de T_{wcc} a un effet plus fort sur la distance d'autoinflammation que T_{te} . Nous présentons ci-dessous une analyse plus détaillée des cas limites : paroi du corps central « froide » ($T_{wcc} = 400$ K) et adiabatique.

La structure du champ de pression statique dans le tronçon de section constante est illustrée sur la figure 4.12 pour les deux cas sélectionnés. La pression statique est normalisée par P_{te} . Les contours en pointillés marquent les conditions stœchiométriques. Nous pouvons premièrement constater que les courbures externes de l'injecteur sont à l'origine des perturbations sensibles : une onde de détente suivie par un choc oblique. Ces perturbations sont visibles sur les profils de vitesse et de température ainsi que sur les distributions de pression. Deuxièmement, les trains de chocs diffèrent au fur et à mesure de leur développement. Le premier cas représente un train plus étendu et plus intense. Au voisinage de l'axe, les chocs obliques se transforment en chocs droits de plus en plus importants.

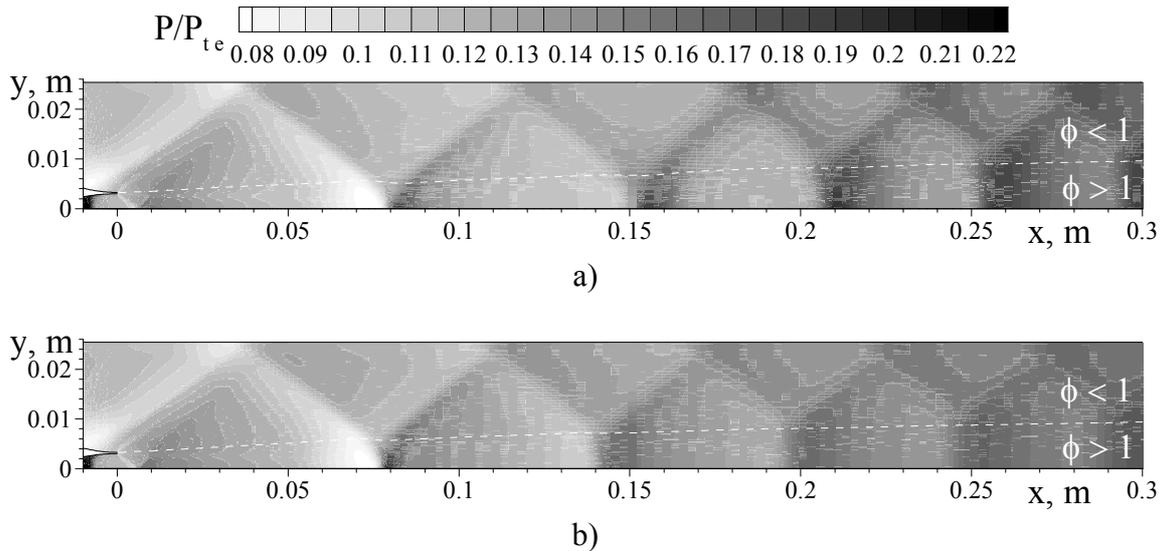


Figure 4.12. Champ de pression statique dans le tronçon de section constante pour $T_{te} = 1850$ K, $T_{w_{cc}} = 400$ K (a) et adiabatique (b). Le contour en pointillés indique la stœchiométrie.

La zone de réaction se distingue par une concentration élevée des radicaux actifs comme par exemple OH. Les champs de concentration de OH sont présentés sur la figure 4.13. Pour la zone colorée, le seuil est de 0.01 mol/m^3 sachant que la concentration moyenne de OH dans l'air vicié est proche de 0.003 mol/m^3 . En comparant les figures 4.12 et 4.13, nous pouvons constater que la variation de C_{OH} est liée au train de choc. Chaque réflexion du choc sur l'axe augmente localement la pression et la température ce qui accélère la réaction chimique. Le maximum de C_{OH} suit la ligne stœchiométrique dans la zone de combustion.

Les champs de fraction massique de H_2O sont présentés sur la figure 4.14. La réaction chimique commence à générer H_2O lorsque le radical OH apparaît en quantité appréciable (les zones colorées sur la figure 4.13). Cependant, le mélange s'enflamme plus loin. Pour les deux cas illustrés, l'autoinflammation a lieu respectivement à $x \approx 150$ mm et à $x \approx 40$ mm. Pour le cas intermédiaire ($T_{w_{cc}} = 1000$ K), l'autoinflammation est repérée à $x \approx 100$ mm.

Les résultats expérimentaux ne permettent malheureusement pas de localiser l'autoinflammation. Les images LIF montrent que, dans la zone $36 \text{ mm} \leq x \leq 90 \text{ mm}$, il y a quelques poches d'inflammation sans stabilisation de la flamme. En revanche dans la zone $156 \text{ mm} \leq x \leq 258 \text{ mm}$, la combustion est déjà bien établie. Nous pouvons donc conclure que, dans l'expérience, l'autoinflammation est localisée entre les deux zones d'observation. En outre, cela confirme que les cas étudiés représentent les limites pour les conditions d'autoinflammation.

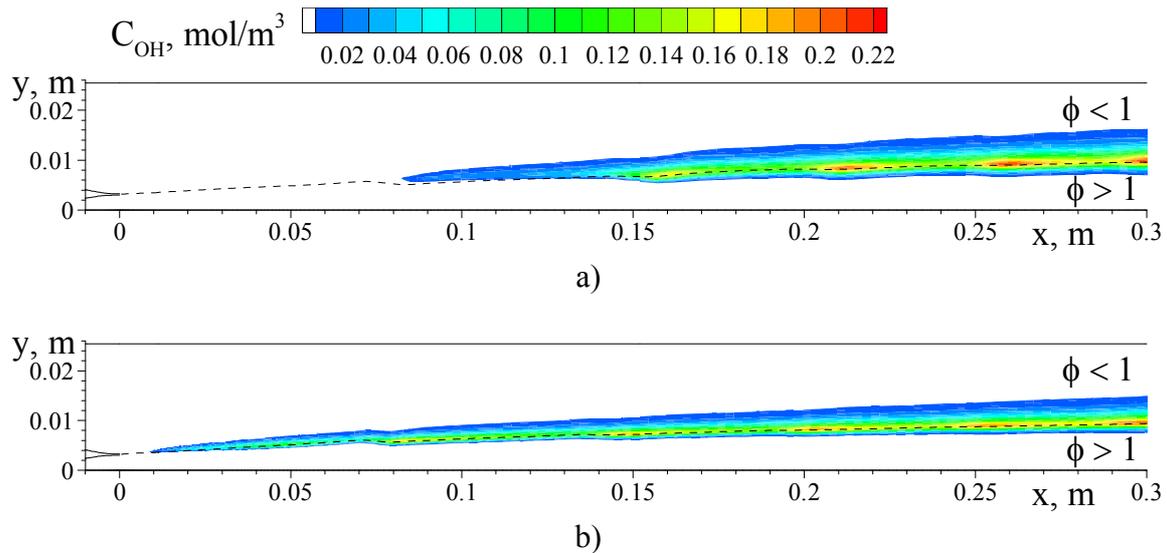


Figure 4.13. Champ de concentration de OH dans le tronçon de section constante pour $T_{te} = 1850$ K, $T_{wcc} = 400$ K (a) ou adiabatique (b). Le contour en pointillés indique la stœchiométrie.

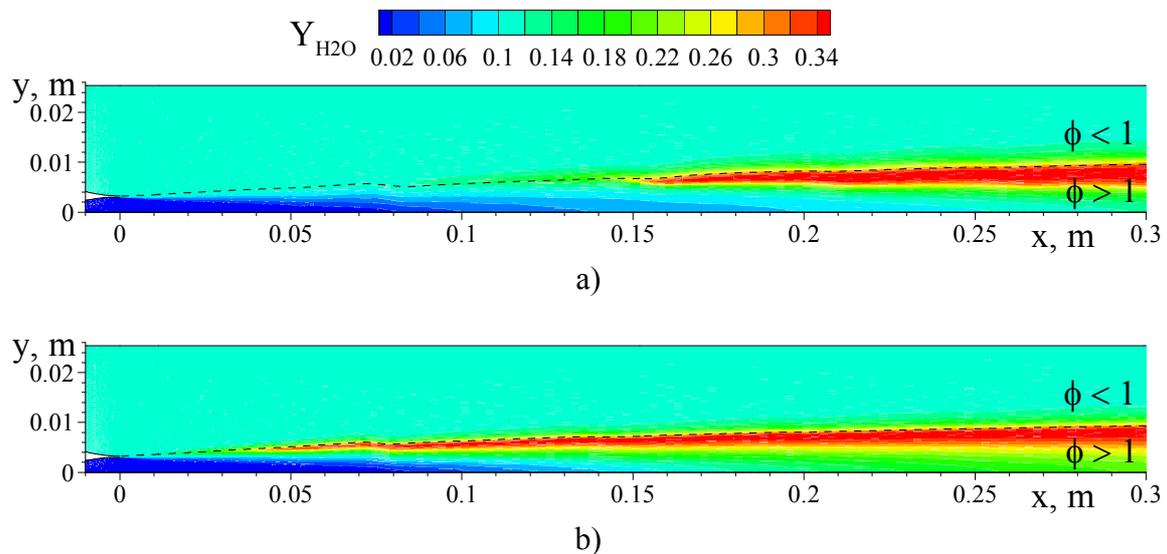


Figure 4.14. Champ de fraction massique de H_2O dans le tronçon de section constante pour $T_{te} = 1850$ K, $T_{wcc} = 400$ K (a) ou adiabatique (b). Le contour en pointillés indique la stœchiométrie.

La figure 4.15 montre les champs de température totale sur lesquels on distingue les zones suivantes : la couche de mélange, les couches limites et la zone de combustion. Cette dernière est marquée par une croissance de T_t jusqu'à 2700 K. Le maximum de T_t suit la ligne stœchiométrique. Pourtant comme la figure 4.14 l'indique, le maximum de Y_{H_2O} se trouve dans le mélange riche ($\phi > 1$). Ce décalage s'explique premièrement par une diminution de T_t du mélange frais lorsque ϕ augmente et deuxièmement par une recombinaison incomplète (la concentration de OH est maximale à $\phi = 1$). En comparant les deux champs de T_t , nous constatons que la zone chaude est plus mince lorsque le mélange s'enflamme plus rapidement. Cela signifie que l'échauffement réduit le taux de mélange.

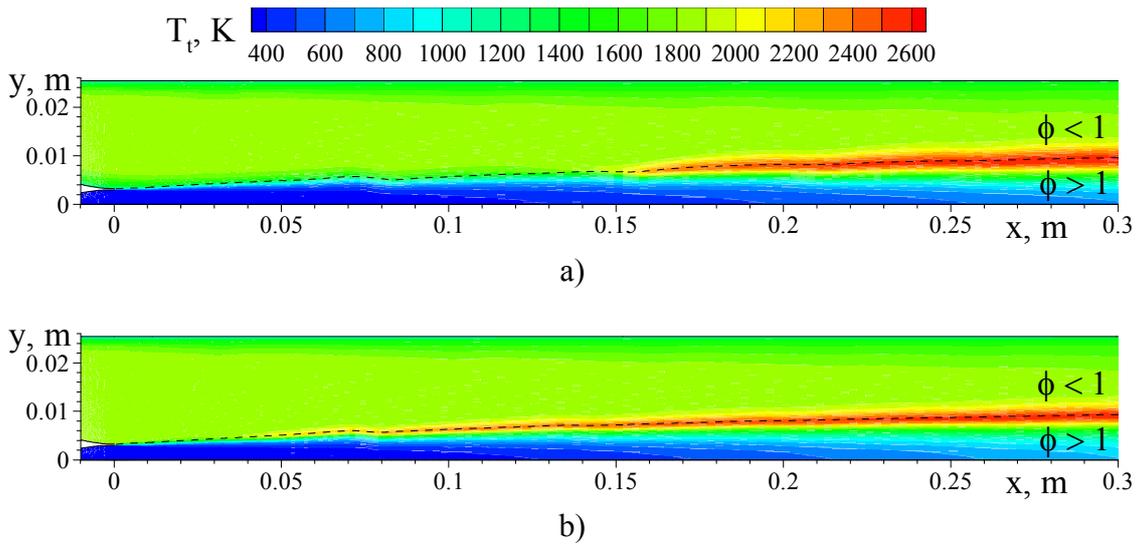


Figure 4.15. Champ de température totale dans le tronçon de section constante pour $T_{te} = 1850$ K, $T_{wcc} = 400$ K (a) ou adiabatique (b). Le contour en pointillés indique la stœchiométrie.

Dans la zone de combustion, la température statique est naturellement la plus élevée. La croissance de température décélère l'écoulement et réduit davantage le nombre de Mach. Cela explique pourquoi les chocs obliques ne parviennent pas à traverser la zone de combustion (*cf.* les figures 4.12 et 4.15).

4.3.3. Effet du maillage et son adaptation

Pour étudier l'effet du maillage sur la solution, nous avons construit un maillage 2DA deux fois plus dense que celui de base. Par la suite, nous l'appelons « le maillage 2DA fin ». Ses caractéristiques principales sont rassemblées dans le tableau 4.4.

Tableau 4.4. Caractéristiques du maillage 2DA fin.

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm
D1	84	30	2520	0.05	0.2	0.04	0.17
D2	102	164	16728	0.05	0.4	0.05	0.17
D3	750	199	149250	0.05	2.0	0.05	0.17

Comme nous le verrons plus loin, la solution dépend du maillage employé. Pourtant, la taille du maillage fin est trop élevée pour construire un maillage 3D sur sa base. Nous devons donc trouver un moyen d'adapter le maillage de base à la solution pour que sa taille soit acceptable. La méthode d'adaptation que nous avons utilisée repose sur une analyse *a posteriori* de la solution obtenue sur le maillage de base.

L'adaptation consiste à réduire localement la taille des mailles dans les zones où les conditions varient rapidement. Elle est effectuée suivant les deux directions du maillage. Plusieurs critères ont été mis en jeu afin de contrôler l'adaptation. Les critères sont basés sur les différences des quantités sélectionnées : \bar{P} , \tilde{T} , \tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{Y}_s , k , l . En présentant la méthode d'adaptation, nous utilisons une notation générale q pour chacune de ces quantités. La méthode est la même pour les deux directions du maillage. Il suffit donc de la décrire selon la direction i .

La variation de q est localement mesurée par la différence $q'_i = q_i - q_{i-1}$ ainsi que la variation de q' est mesurée par $q''_i = q'_{i+1} - q'_i$. Les différences adimensionnées respectives sont :

$$Q'_i = q'_i / (q_{\max} - q_{\min}) \quad (4.9)$$

$$Q''_i = q''_i / (q'_{\max} - q'_{\min}) \quad (4.10)$$

Les indices « min » et « max » désignent les valeurs maximale et minimale pour l'ensemble des domaines de calcul.

Lors de l'adaptation du maillage les limitations suivantes sont imposées :

- 1) Les limites inférieure $\Delta_{i\min}$ et supérieure $\Delta_{i\max}$ sur le pas de maillage ont la plus grande priorité : $\Delta_{i\min} \leq \Delta_i \leq \Delta_{i\max}$.
- 2) La seconde priorité est attribuée aux limites sur les différences adimensionnées : $Q'_{\min} \leq |Q'_i| \leq Q'_{\max}$, $Q''_{\min} \leq |Q''_i| \leq Q''_{\max}$
L'imposition des limites inférieures permet d'éviter à une diminution excessive du pas de maillage par la limitation suivante lorsque Q'_i ou Q''_i s'approchent du zéro.
- 3) Les variations relatives des quantités sont limitées par les facteurs r et r' , supérieurs à l'unité : $q_{i-1}/r \leq q_i \leq q_{i-1} \cdot r$, $q'_{i-1}/r' \leq q'_i \leq q'_{i-1} \cdot r'$.

La limitation de q' et de q'' permet d'adapter le maillage en respectant les dérivées spatiales première et seconde des quantités sélectionnées.

Pour mesurer le rapport des pas de maillage après et avant l'adaptation, nous introduisons la notion du coefficient de déformation $\delta_i = \Delta_{ia}/\Delta_i$ (Δ_{ia} est le pas adapté).

Selon les limitations imposées le coefficient de déformation est déterminé par :

$$\delta_i = \max \{ \min[\Delta_{i\text{Max}}/\Delta_i, \delta_{i1}, \delta_{i2}, \delta_{i1'}, \delta_{i2'}], \Delta_{i\text{Min}}/\Delta_i \} \quad (4.11)$$

avec

$$\delta_{i1} = Q'_{\text{Min}} / |Q'_i| \quad \text{si } q_i \cdot q_{i-1} \leq 0 \quad (4.12)$$

$$\delta_{i1} = \max \{ [1/2(|Q'_i - |Q'_i||) \cdot (1/r - 1) + 1/2(|Q'_i + |Q'_i||) \cdot (r - 1)] \cdot |Q'_{i-1}|, Q'_{\text{Min}} \} / |Q'_i|$$

si $q_i \cdot q_{i-1} > 0$

$$\delta_{i2} = Q'_{\text{Max}} / |Q'_i| \quad (4.13)$$

$$\delta_{i1'} = Q''_{\text{Min}} / |Q''_i| \quad \text{si } q'_i \cdot q'_{i-1} \leq 0 \quad (4.14)$$

$$\delta_{i1'} = \max \{ [1/2(|Q''_i - |Q''_i||) \cdot (1/r' - 1) + 1/2(|Q''_i + |Q''_i||) \cdot (r' - 1)] \cdot |Q''_{i-1}|, Q''_{\text{Min}} \} / |Q''_i|$$

si $q'_i \cdot q'_{i-1} > 0$

$$\delta_{i2'} = Q''_{\text{Max}} / |Q''_i| \quad (4.15)$$

où

$$|Q'_i| = (|q_i| - |q_{i-1}|) / (q_{\text{max}} - q_{\text{min}}) \quad (4.16)$$

$$|Q''_i| = (|q'_{i+1}| - |q'_i|) / (q'_{\text{max}} - q'_{\text{min}}) \quad (4.17)$$

Dans le cas de la chambre LAERTE, les limiteurs sur le pas de maillage sont les suivants : $\Delta_{i\text{Min}} = 0.1$ mm, $\Delta_{i\text{Max}} = 4$ mm, $\Delta_{j\text{Min}} = 0.1$ mm, $\Delta_{j\text{Max}} = 1$ mm. Les autres limiteurs sont présentés dans le tableau 4.5 selon les quantités sélectionnées. La variation relative de \tilde{v} n'est pas limitée car cette quantité peut prendre des valeurs positives comme négatives. Les autres quantités, y inclus \tilde{u} , sont normalement supérieures à 0. Pour \bar{P} , \tilde{T} , \tilde{u} et \tilde{Y}_s , les limiteurs ont été évalués à partir des simulations 1D d'un écoulement réactif de prémélange

Tableau 4.5. Limiteurs pour l'adaptation du maillage.

q	Q'_{Min}	Q'_{Max}	r	Q''_{Min}	Q''_{Max}	r'
$\bar{P}, \tilde{T}, \tilde{u}, k, l$	0.01	0.1	1.5	0.05	0.2	2
\tilde{v}	0.05	0.05	∞	0.05	0.2	2
$\tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}}, \tilde{Y}_{\text{O}_2}, \tilde{Y}_{\text{H}_2}$	0.01	0.1	1.5	0.05	0.2	2
$\tilde{Y}_{\text{OH}}, \tilde{Y}_{\text{H}}, \tilde{Y}_{\text{O}}$	10^{-8}	0.1	1.5	0.05	0.2	2

Le coefficients δ_i et δ_j ont été déterminés à partir de la solution pour $T_{\text{te}} = 1850$ K et $T_{\text{wcc}} = 400$ K qui a été présentée dans la section précédente. Leurs champs sont illustrés sur la figure 4.16. La variation de δ_i est conditionnée par le train de chocs alors que celle de δ_j s'adapte aux processus de mélange et d'oxydation. La partie majeure du maillage n'implique pas de diminution de la taille des mailles.

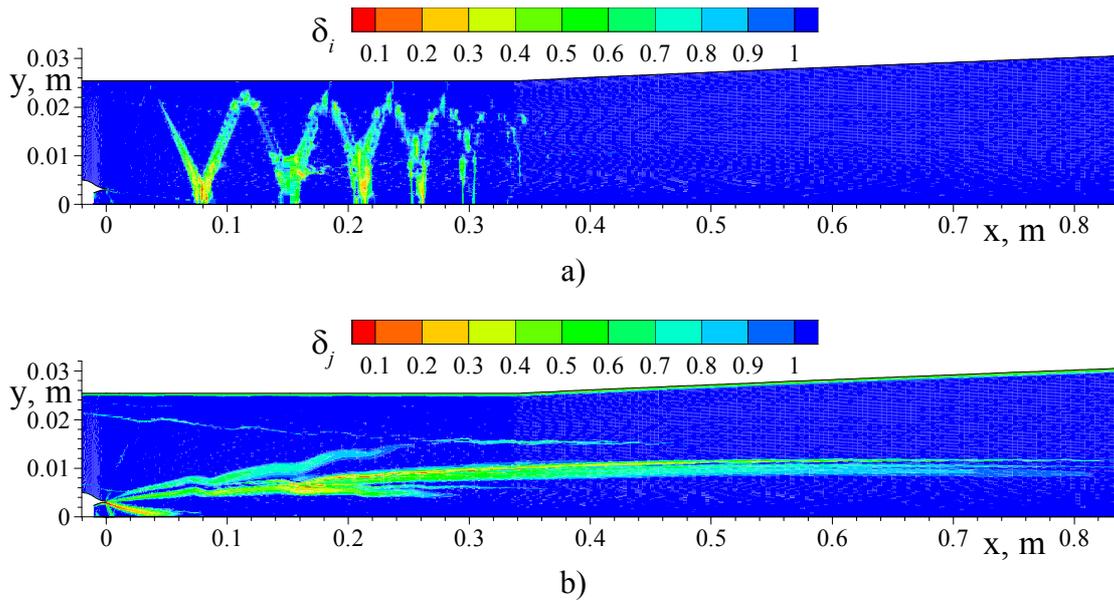
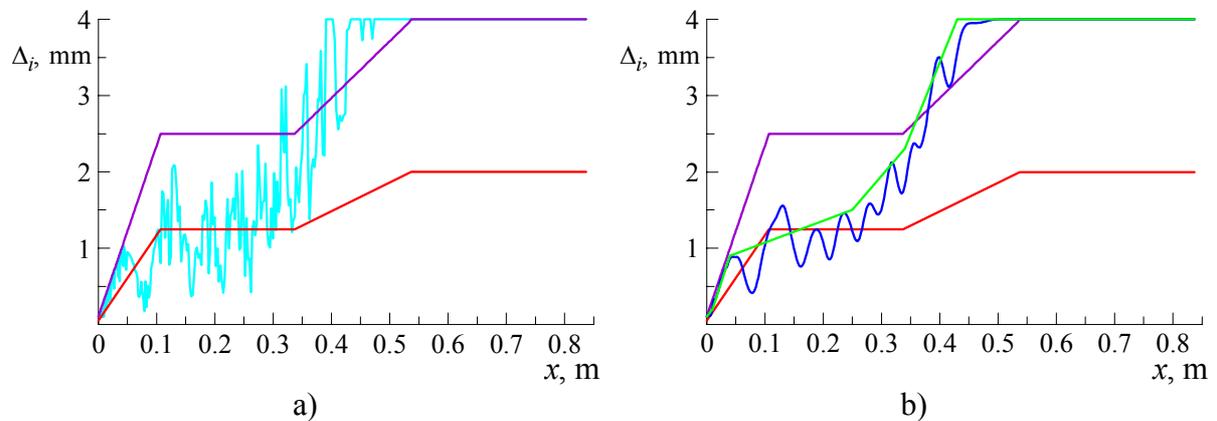


Figure 4.16. Coefficients de déformation suivant les directions i (a) et j (b).

L'application des coefficients δ_i et δ_j au maillage de base n'est pas directe car leurs distributions sont fortement bruitées, sinon le maillage peut être très déformé. Pour construire le maillage adapté, nous imposons la condition que le pas longitudinal Δ_i est uniforme dans chaque section. Par conséquent, la distribution de Δ_i est formée à partir des valeurs minimales de δ_i dans les sections. La figure 4.17(a) montre les distributions de Δ_i pour les maillages de base et fin ainsi que la distribution adaptée brute. À partir de cette dernière, nous construisons une distribution lissée et une simplifiée qui sont tracées sur la figure 4.17(b).



Maillage: — de base — fin — adapté brut — adapté lissé — adapté simplifié

Figure 4.17. Distributions de pas longitudinal des maillages de base, fin et adapté : a) résultat brut de l'adaptation ; b) résultat post-traité.

Afin de déterminer les distributions du pas transversal Δ_j , nous avons sélectionné plusieurs sections définies par les coordonnées x suivantes (exprimées en mm) : 0, 7.9, 15.7, 28.4, 40.4, 79.1, 119.5, 159.5, 239.5, 319.5, 399.5, 498.7, 641, 837. Dans le tronçon de section constante, certaines sections correspondent aux endroits où les chocs réfléchissent sur la paroi et sur l'axe. La figure 4.18 présente les distributions de Δ_j du maillage de base et les distributions adaptées pour les sections $x = 79.1$ mm et 319.5 mm. Les distributions adaptées brutes sont très irrégulières. Pour construire un maillage structuré, nous devons assurer qu'il a

le même nombre de pas transversaux dans toutes les sections. Après plusieurs essais, nous avons fixé le nombre de pas $N_j = 130$ ainsi que les limites $\Delta_{j\text{Min}} = 0.1$ mm et $\Delta_{j\text{Max}} = 0.3$ mm. Les distributions adaptées finales ont été calculées en faisant varier le rapport des tailles des mailles voisines afin de respecter les distributions brutes et les limitations imposées.

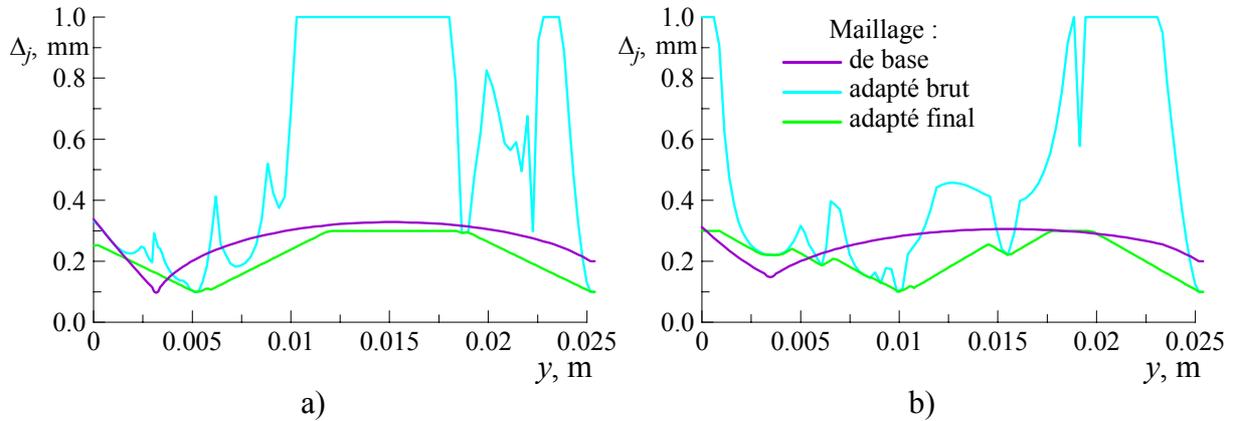


Figure 4.18. Distributions de pas transversal des maillages de base et adapté :
a) $x = 79.1$ mm ; b) $x = 319.5$ mm.

Le résultat de l'adaptation de Δ_j est illustré sur la figure 4.19. Les lignes longitudinales sont montrées une sur cinq pour qu'elles soient bien distinguables. Les lignes transversales correspondent aux sections sélectionnées pour l'adaptation de Δ_j . Suite à l'adaptation, le pas transversal est rétréci dans la zone de mélange et de réaction ainsi que près de la paroi du canal.

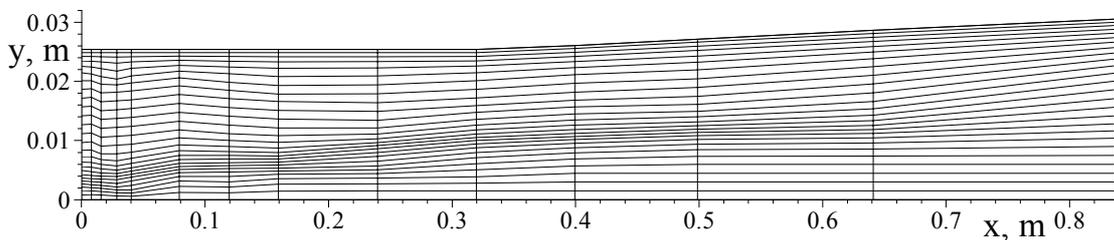


Figure 4.19. Structure du maillage adapté.

Selon les distributions lissée et simplifiée de Δ_i , nous avons créé deux versions du maillage adapté dont les informations principales sont regroupées dans le tableau 4.6. Ces deux versions ne diffèrent que dans D3. La caractéristique la plus importante est le nombre de cellules, qui est approximativement deux fois plus grand que celui du maillage de base (tableau 4.3) mais aussi deux fois plus petit que celui du maillage fin (tableau 4.4).

Tableau 4.6. Caractéristiques du maillage 2DA adapté.

Domaine	N_i	N_j	$N_i \times N_j$	$\Delta_{i\text{min}}$, mm	$\Delta_{i\text{max}}$, mm	$\Delta_{j\text{min}}$, mm	$\Delta_{j\text{max}}$, mm
D1	42	23	966	0.1	0.4	0.08	0.17
D2	104	51	5304	0.1	0.8	0.1	0.3
D3 (lissé)	566	130	73580	0.1	4.0	0.08	0.3
D3 (simplifié)	494	130	64220	0.1	4.0	0.08	0.3

Les résultats de simulation présentés ci-dessous correspondent aux conditions suivantes :

- modèle de turbulence : approche ST, $Sc_T = 0.9$;
- modèle chimique : mécanisme cinétique ONERA ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K ;
- parois : $T_{wcc} = 400$ K, profil de température pour le canal.

L'influence du maillage sur la solution est mise en évidence sur la figure 4.20. La différence des solutions obtenues sur les maillages de base et fin est marquée par l'augmentation considérable de pression dans le tronçon divergent. Les solutions sur les maillages fin et adaptés sont pratiquement coïncidentes. La différence de pression est due au rendement de combustion comme la figure 4.20(b) le montre. Après avoir examiné les distributions de η_{mix} et de η_p , nous pouvons affirmer que c'est finalement le rendement du mélange η_{mix} qui dépend du maillage et qui limite le dégagement de chaleur. Nous pouvons conclure que l'adaptation du maillage a un effet cumulatif sur la solution : la densité du maillage est principalement augmentée dans le premier tronçon du canal tandis que la solution a surtout changé dans le tronçon divergent.

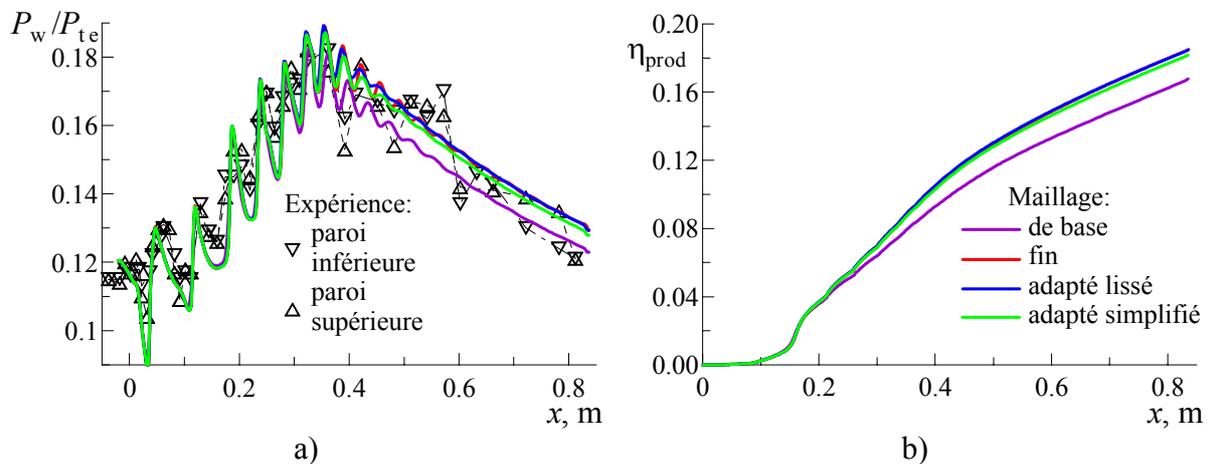


Figure 4.20. Distributions longitudinales de pression pariétale (a) et de rendement de combustion (b) pour les maillages de base, fin et adapté.

La présente analyse a montré l'intérêt de l'adaptation du maillage car nous avons réussi à obtenir la même solution que sur le maillage fin avec un nombre de cellules deux fois plus petit. Cependant, nous voyons qu'un maillage structuré n'est pas facile à adapter sans augmenter sa taille de manière importante. Pour la suite de cette étude, nous allons retenir le maillage adapté avec la distribution simplifiée de Δ_i .

4.3.4. Effet du modèle de turbulence

Les effets dus aux corrections de Sarkar et de Pope ainsi qu'au nombre de Schmidt turbulent Sc_T sont considérés dans la présente section. La correction de Pope est appliquée avec le limiteur $\chi_{lim} = 0.143$. Afin de séparer les effets sur les processus de mélange et de combustion, nous analysons les cas non réactif et réactif. Dans le premier cas, le modèle chimique n'est pas utilisé.

Les simulations ont été effectuées dans les conditions suivantes :

- modèle de turbulence : approches ST, DC et DCPL, $Sc_T = 0.7, 0.8$ et 0.9 ;
- modèle chimique : mécanisme cinétique ONERA ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K, profil de température pour le canal.

Les résultats de simulations non réactives sont présentés sur la figure 4.21 pour les approches ST, DC et DCPL appliquées avec le même nombre de Schmidt $Sc_T = 0.9$. L'approche ST a donné le taux de mélange le plus grand ce qui est confirmé par la distribution axiale de Y_{H_2} et par l'évolution du rendement de mélange η_{mix} . L'approche DC a sensiblement retardé le mélange. Les distributions obtenues avec DCPL commencent par suivre celles de DC, mais peu après le cœur potentiel du jet, la correction de Pope accélère le mélange et les distributions rejoignent celles de ST. Il s'avère que les effets des deux corrections s'annulent progressivement vers la sortie de la chambre.

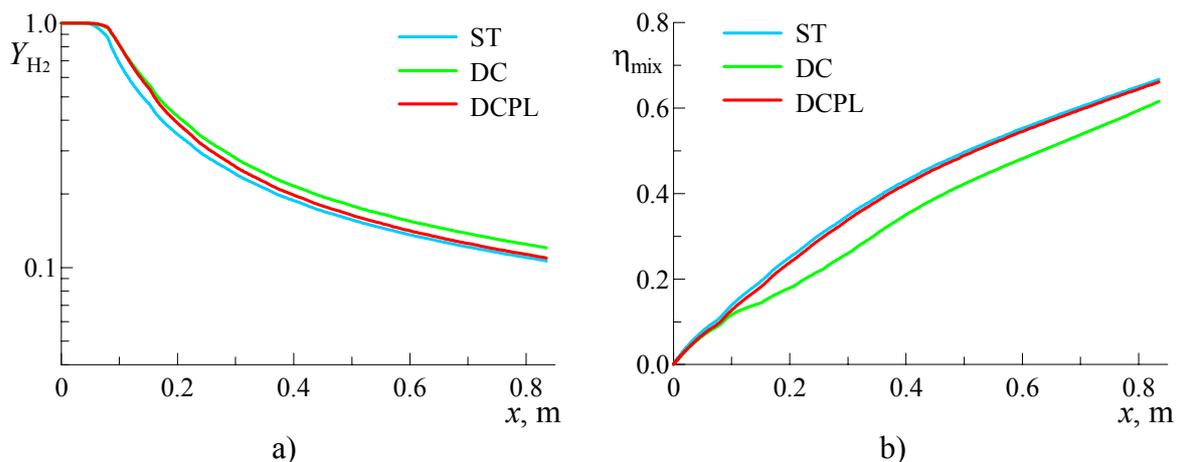


Figure 4.21. Cas non réactif, $Sc_T = 0.9$. Distributions longitudinales de fraction massique de H_2 sur l'axe (a) et de rendement de mélange (b).

L'effet de Sc_T est analysé en considérant les résultats des simulations non réactives avec l'approche DCPL. La figure 4.22 montre comment la diminution de Sc_T accélère le mélange. Lorsque Sc_T varie de 0.9 à 0.7, la valeur finale de η_{mix} croît de 0.66 jusqu'à 0.75 ce qui correspond à une augmentation de 13 %.

Les résultats de simulations réactives pour les trois approches avec le même nombre de Schmidt $Sc_T = 0.9$ sont illustrés sur la figure 4.23. L'effet des corrections est globalement analogue aux cas non réactifs. Pourtant, la mise en jeu de la combustion a changé l'allure des distributions de Y_{H_2} et de η_{mix} . Nous avons vérifié que la zone de combustion se stabilise autour du jet à $x \approx 100$ mm. À partir de cette distance, les pentes absolues des distributions diminuent. La combustion réduit donc le taux de mélange. Pourtant, le mélange est encore accéléré au début du tronçon divergent. L'effet intégral de la combustion sur η_{mix} dépend de l'approche. En comparant les valeurs finales de η_{mix} pour les cas non réactif et réactif, nous

constatons que : avec ST, η_{mix} accroît de 0.67 à 0.69, avec DC, η_{mix} reste proche de 0.62, avec DCPL, η_{mix} augmente le plus fort de 0.66 à 0.72. L'effet de réaccélération du mélange peut être expliqué par la croissance du gradient de Y_{H_2} due à la consommation du combustible dans la zone de combustion.

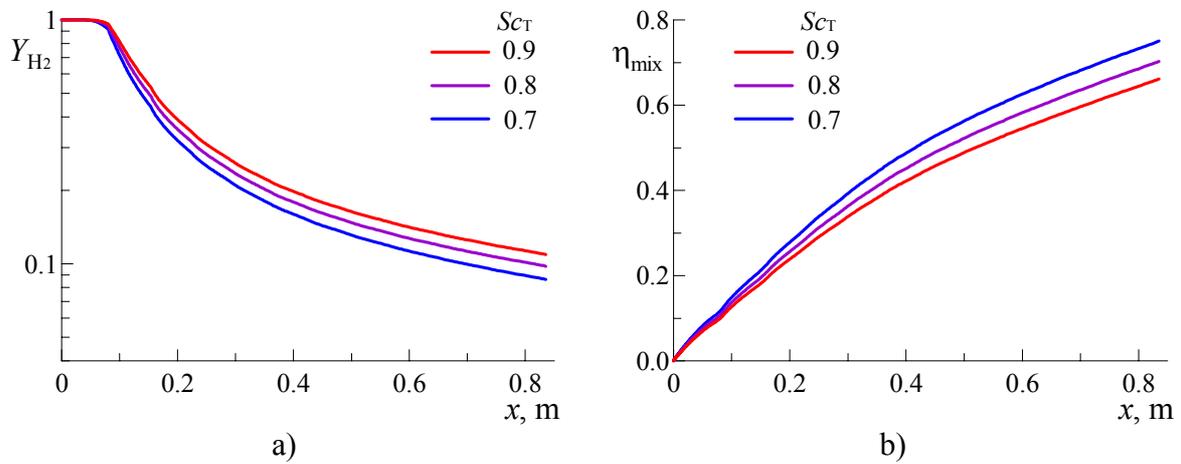


Figure 4.22. Cas non réactif, DCPL. Distributions longitudinales de fraction massique de H_2 sur l'axe (a) et de rendement de mélange (b).

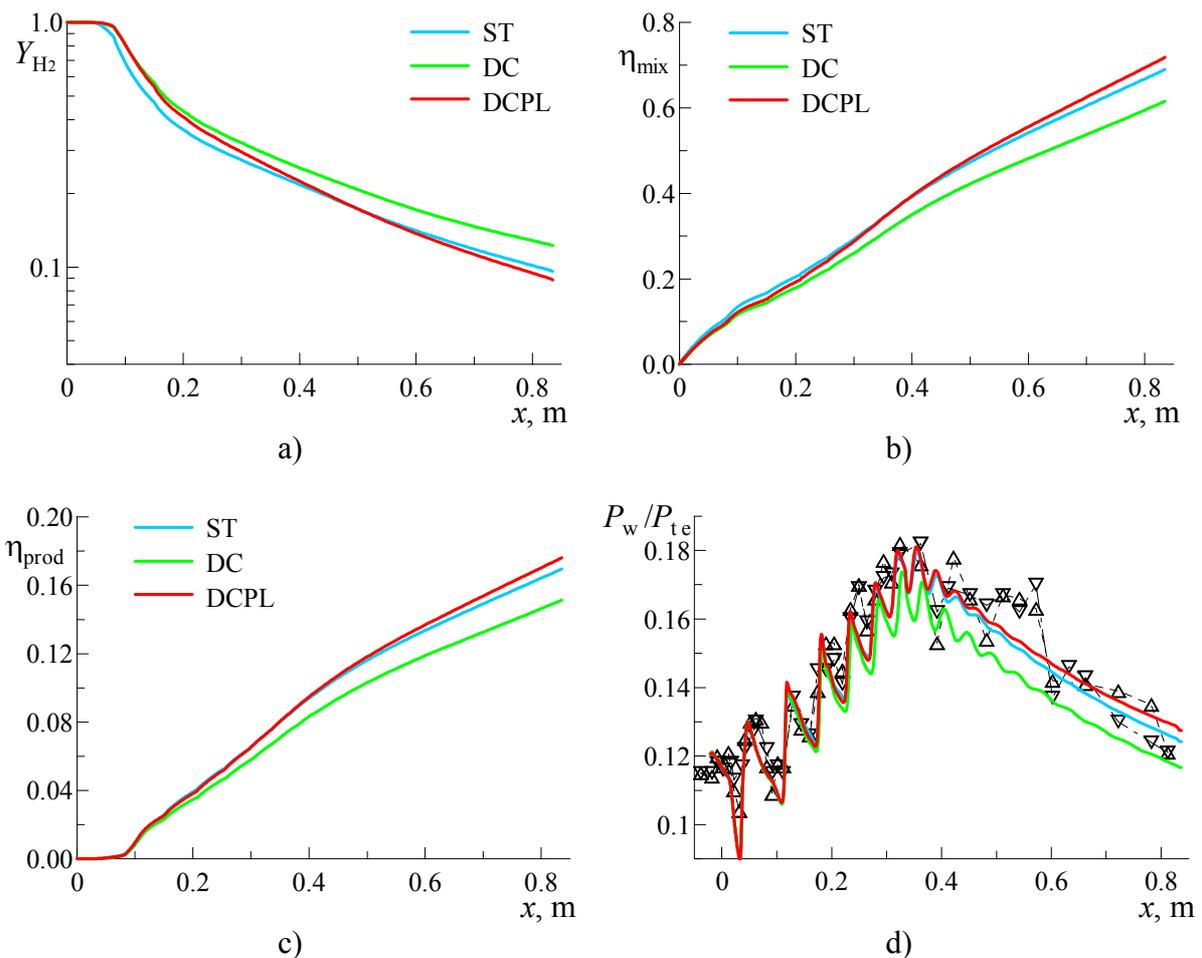


Figure 4.23. Cas réactif, $Sc_T = 0.9$. Distributions longitudinales : a) fraction massique de H_2 sur l'axe, b) rendement de mélange, c) rendement de combustion, d) pression pariétale.

Les corrections du modèle de turbulence n'ont pas d'influence sur la distance d'autoinflammation. Cela est confirmé par les distributions de rendement de combustion η_{prod} (figure 4.23(c)). Après l'autoinflammation, les variations de η_{prod} sont proportionnelles à celles de η_{mix} donc le dégagement de chaleur est limité par le mélange.

Finalement, les distributions de pression pariétale issues des trois simulations sont comparées aux résultats expérimentaux (figure 4.23(d)). La réduction du dégagement de chaleur, due à l'approche DC, conduit à une diminution importante de la pression dans le tronçon divergent. Les distributions de pression obtenues avec les approches ST et DCPL coïncident pratiquement.

Dans le cas réactif, l'effet de Sc_T est analysé pour l'approche DCPL. Les résultats obtenus avec les trois valeurs de Sc_T sont comparés sur la figure 4.24. La diminution de Sc_T accélère le mélange et intensifie la combustion. L'effet de Sc_T sur η_{mix} est plus fort que dans le cas non réactif. La même variation de Sc_T de 0.9 à 0.7, augmente la valeur finale de η_{mix} de 0.72 jusqu'à 0.87, ce qui correspond à 21 % contre 13 % dans le cas non réactif.

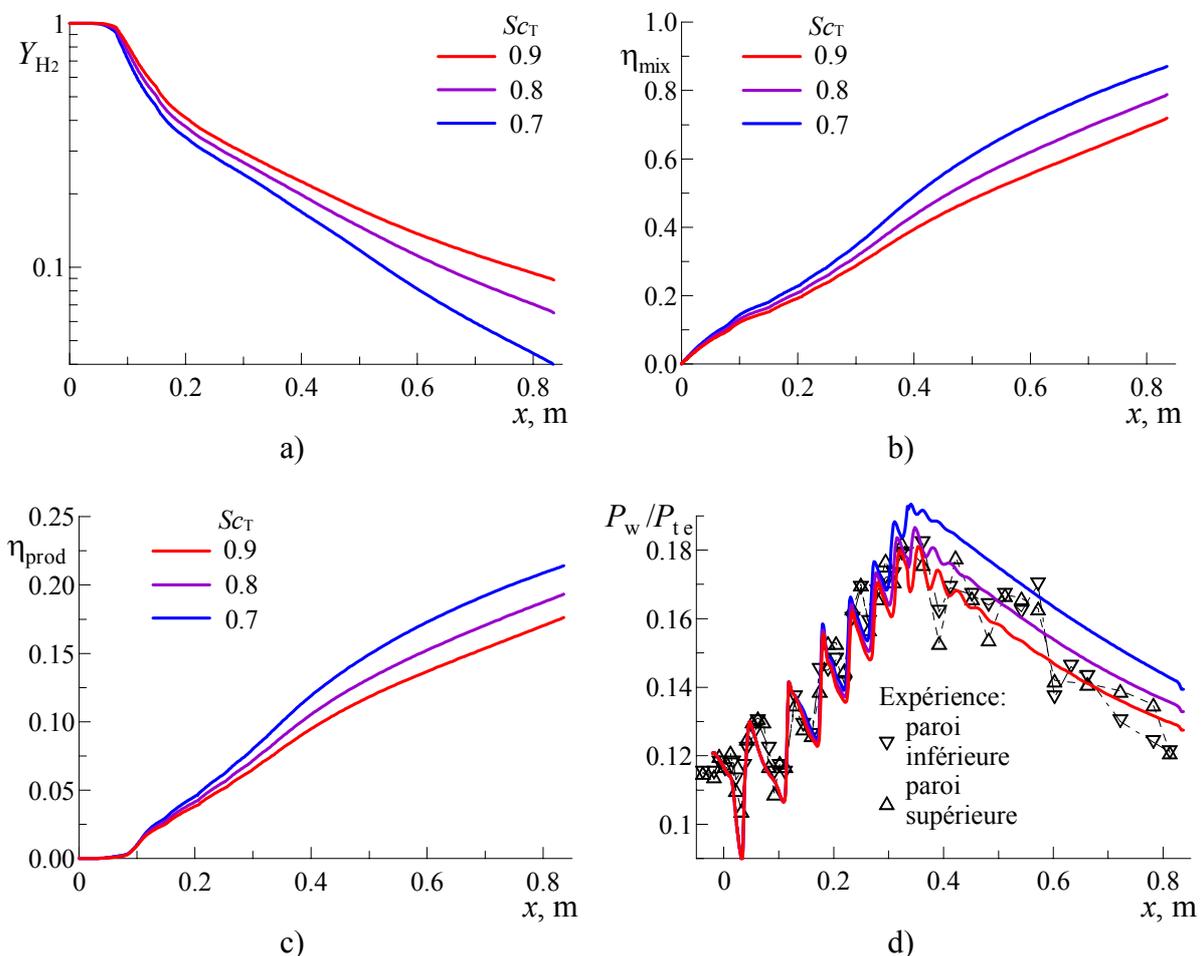


Figure 4.24. Cas réactif, DCPL. Distributions longitudinales : a) fraction massique de H_2 sur l'axe, b) rendement de mélange, c) rendement de combustion, d) pression pariétale.

Puisque le mélange est incomplet dans la chambre ($\eta_{\text{mix}} < 1$), le taux de mélange est un facteur limitant pour le rendement de combustion. Les distributions de η_{prod} sur la figure 4.24(c) montrent que la distance d'autoinflammation ne dépend pas de Sc_T . Le processus d'inflammation est donc entièrement contrôlé par la cinétique chimique. Après l'inflammation, l'évolution de η_{prod} est proportionnelle à η_{mix} . Cela confirme que la

combustion est limitée par le taux de mélange et que le taux d'oxydation n'est plus le facteur limitant.

La comparaison des distributions de P_w calculées et mesurées sur la figure 4.24(d) permet de conclure que la plage acceptable de Sc_T est de 0.8 à 0.9. Sc_T inférieur à 0.8 donne une pression trop élevée par rapport à l'expérience.

4.3.5. Effet du modèle chimique

Dans cette section, nous analysons l'influence du modèle cinétique chimique sur la solution. La présente analyse est basée sur les simulations dont les conditions sont les suivantes :

- modèle de turbulence : approche DCPL, $Sc_T = 0.8$;
- modèles chimiques : mécanismes simplifiés Eklund, Baurle et ONERA, mécanismes détaillés Mueller et LCSR, mécanismes réduits Mueller et GRI-Red H₂ sans les espèces azotées ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K, profil de température pour le canal.

Les résultats obtenus avec les trois mécanismes simplifiés et avec le mécanisme détaillé Mueller sont comparés sur la figure 4.25. Les distributions de pression pariétale (figure 4.25(a)) montrent que le mécanisme Eklund a donné un niveau de pression largement inférieur par rapport à l'expérience. En revanche, les résultats des autres mécanismes comparés sont conformes à l'expérience.

Les raisons pour lesquelles la pression calculée diffère sont mises en évidence par les distributions présentées sur les graphiques (b)-(f) de la figure 4.25. Premièrement, les évolutions du rendement de mélange η_{mix} sont différentes (figure 4.25(b)). Pour le calcul avec le mécanisme Eklund, la valeur finale de η_{mix} est la plus basse. Pour les mécanismes Mueller et ONERA, les distributions de η_{mix} sont identiques. Le modèle chimique ne peut directement pas influencer le taux de mélange. C'est en effet la distance d'autoinflammation, le taux de consommation de H₂ et le taux de dégagement de chaleur qui dépendent du modèle et qui font l'impact sur le taux de mélange.

Le rendement de consommation du combustible η_c (figure 4.25(c)) varie selon les mécanismes dans le tronçon de section constante. Les ruptures de pente permettent de localiser l'inflammation à $x \approx 90$ mm, ce pour tous les mécanismes. Dans le tronçon divergent, η_c est proche de l'unité. Cela signifie que le combustible mélangé est entièrement consommé par le processus chimique.

Les mécanismes prédisent différemment le taux de formation de H₂O. Cette différence est mesurée par le rendement de formation du produit η_p (figure 4.25(d)). Le niveau final de η_p le plus bas est donné par le mécanisme Eklund. Cela est dû à l'efficacité de H₂O en tant que 3^e corps dans la réaction $H + OH + M \Leftrightarrow H_2O + M$. Dans le mécanisme Eklund, H₂O a une efficacité catalytique égale à l'unité, tandis que dans les autres mécanismes, cette efficacité s'élève jusqu'à 12-16. Le mécanisme Mueller a prédit le niveau de η_p le plus grand grâce aux voies réactionnelles par l'intermédiaire de HO₂.

L'effet limiteur de η_p est illustré par les distributions de la température totale maximale dans la section transversale (figure 4.25(e)). Dans la zone de combustion, le plafond de $T_{t\max}$ dépend du bilan local du taux de dégagement de chaleur et du taux de sa dissipation par diffusion. La variation de $T_{t\max}$ due au mécanisme cinétique est supérieure à 350 K.

Finalement, l'effet intégral du mélange (η_{mix}) est de la cinétique chimique (η_p) sur le dégagement de chaleur est mis en évidence par les distributions de la température totale moyenne (figure 4.25(f)). Nous pouvons conclure que la différence des distributions obtenues avec les mécanismes Mueller et ONERA provient du taux de production de H₂O. Les deux solutions sont néanmoins proches l'une de l'autre. Pour les mécanismes Eklund et Baurle, le dégagement intégral de chaleur est davantage réduit par un taux de mélange moins élevé.

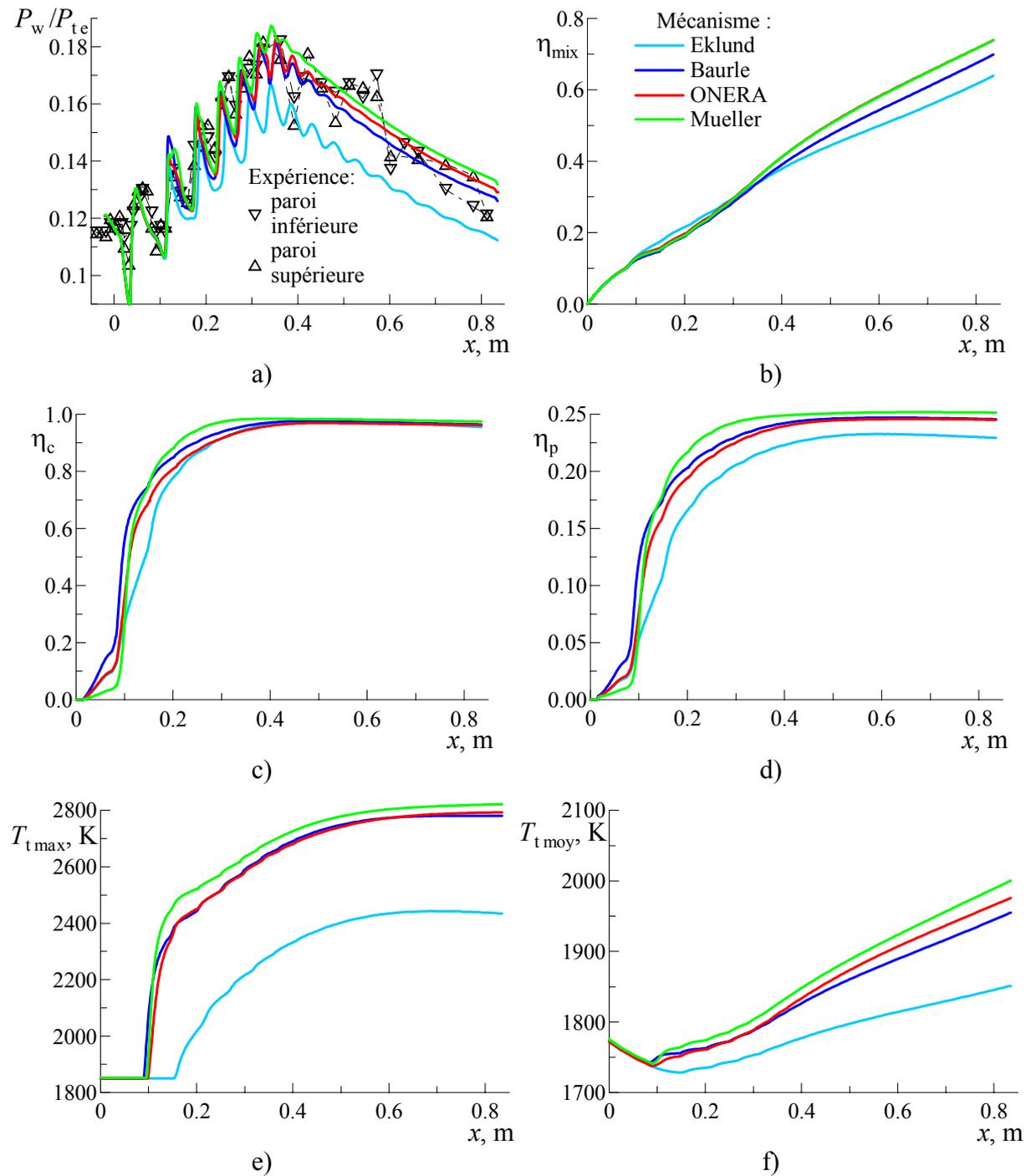


Figure 4.25. Mécanismes simplifiés vis-à-vis du mécanisme détaillé de Mueller. Distributions longitudinales : a) pression pariétale, b) rendement de mélange, c) rendement de consommation de H₂, d) rendement de formation de H₂O, e) température totale maximale, e) température totale moyenne.

Des résultats analogues sont présentés sur la figure 4.26 permettant de comparer les mécanismes détaillés Mueller et LCSR et les mécanismes réduits Mueller et GRI-Red H₂. À partir de l'ensemble des résultats, nous pouvons constater que :

- 1) Les versions détaillée et réduite du mécanisme Mueller ont donné des solutions identiques. Ce fait confirme la validité de notre méthode de réduction (voir la section 3.5.4).

- 2) Les solutions obtenues avec les mécanismes Mueller et LCSR sont pratiquement équivalentes.
- 3) Le mécanisme GRI-Red H₂ a donné une distance d'autoinflammation plus grande, proche de 150 mm, et un plafond plus bas de température totale maximale. Pourtant, ce mécanisme a prédit le même dégagement intégral de chaleur que les autres.

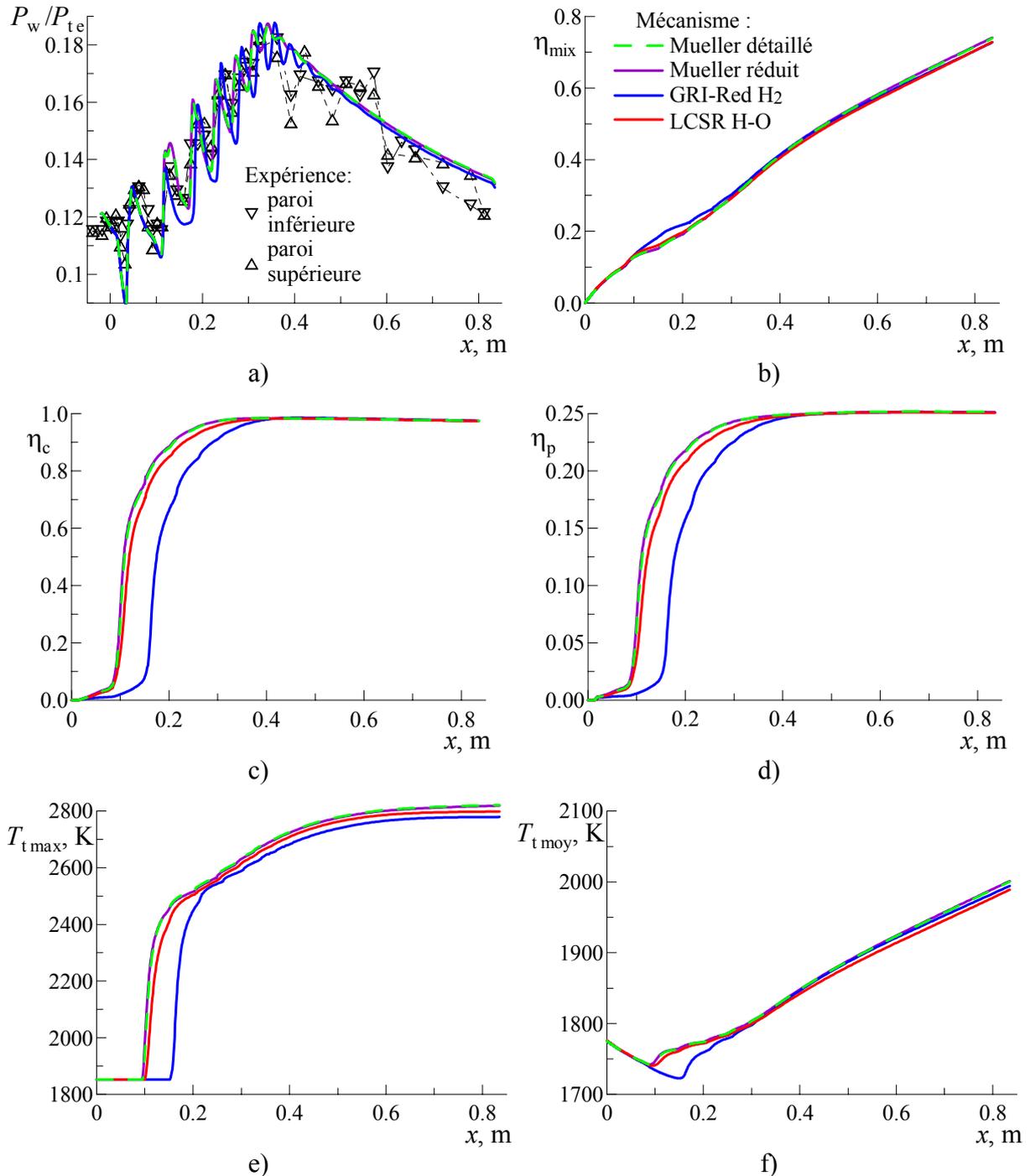


Figure 4.26. Mécanismes détaillés (Mueller, LCSR) et réduits (Mueller, GRI-Red H₂).
 Distributions longitudinales : a) pression pariétale, b) rendement de mélange,
 c) rendement de consommation de H₂, d) rendement de formation de H₂O,
 e) température totale maximale, e) température totale moyenne.

Nous terminons cette section par quelques réflexions concernant la méthode de localisation de l'autoinflammation à partir de distributions de pression pariétale. Cette méthode est couramment exploitée dans l'expérience. Elle consiste à comparer des distributions mesurées sans et avec combustion et repérer leur séparation. Dans l'expérience, le mode sans combustion est obtenue en injectant de l'azote. Le calcul peut simuler l'injection de N_2 mais également l'injection de H_2 sans combustion en désactivant le modèle chimique.

Les distributions de pression expérimentales et calculées sont comparées sur la figure 4.27. Les simulations réactives ont été effectuées avec les mécanismes Mueller réduit et GRI-Red H_2 pour le mode avec combustion. Les résultats de simulations non réactives sont présentés pour l'injection de N_2 et de H_2 . L'injection de N_2 perturbe l'écoulement plus fort que celle de H_2 . Cette observation est confirmée par les résultats expérimentaux et numériques. Les distributions mesurées commencent à se séparer à $x \approx 190$ mm. Les distributions obtenues avec le mécanisme de Mueller divergent visiblement à $x \approx 120$ mm alors que l'autoinflammation a lieu à $x \approx 90$ mm. Avec GRI-Red H_2 , les deux distributions relatives à l'injection de H_2 se séparent à $x = 140-150$ mm dès l'inflammation. Pourtant par rapport à la courbe calculée pour l'injection de N_2 , la séparation commence à $x \approx 185$ mm. Cette analyse ne permet pas de valider le modèle chimique en raison des incertitudes sur la température totale de l'air vicié et sur la température du corps central. Néanmoins, nous pouvons en tirer une estimation de l'erreur expérimentale qui peut atteindre 30-40 mm sans tenir compte de la distance entre les points de mesure.

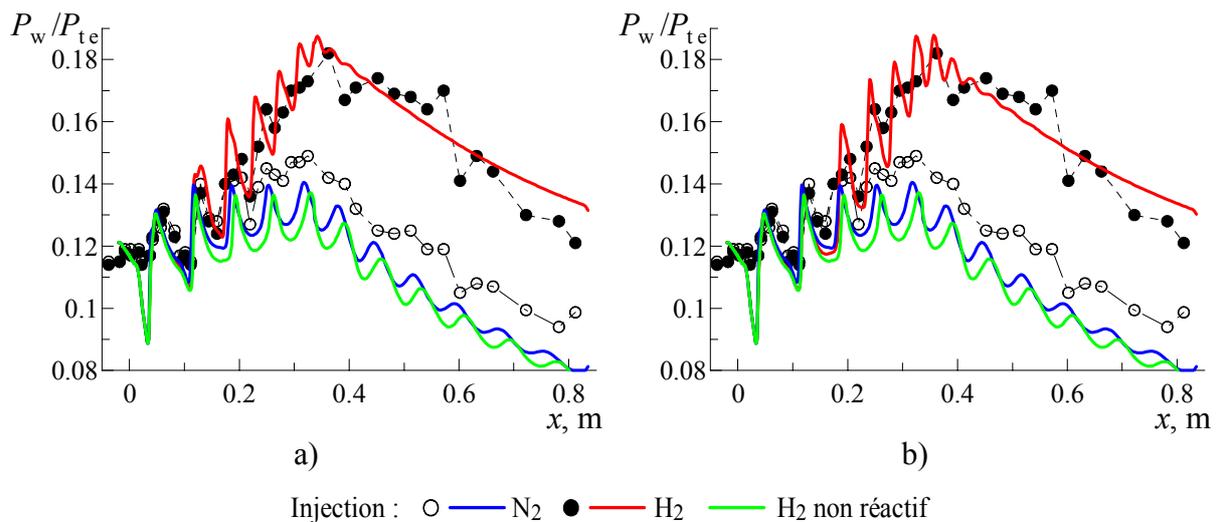


Figure 4.27. Distributions de pression pariétale sans et avec combustion. Simulations avec les mécanismes : a) Mueller réduit, b) GRI-Red H_2 .

4.3.6. Effet de la viciation par préchauffage d'air

Cette section présente les résultats de simulation permettant de mettre en évidence l'effet de viciation de l'écoulement d'air par H₂O et radicaux actifs ainsi que par NO_x. Trois compositions d'air vicié sont considérées :

- 1) La « viciation thermodynamique » représente une approche sans les radicaux ni H₂O chimiquement active. Pourtant, H₂O est prise en compte thermodynamiquement en créant une espèce composite dont la composition massique est : 0.8361 d'azote, 0.1493 de vapeur d'eau et 0.0146 d'argon. Pour le modèle chimique, cette espèce est présentée comme 100 % d'azote. Le mélange gazeux est constitué de 0.2468 de O₂ et de 0.7532 d'espèce composite en masse. Il est donc similaire à l'air vicié en terme de fraction de O₂ et de propriétés physiques.
- 2) La « viciation sans NO_x » correspond à la viciation par H₂O et radicaux actifs. Ce cas a été déjà considéré dans les sections précédentes.
- 3) La « viciation avec NO_x » inclut H₂O, les radicaux actifs et NO_x. Pour ce cas, la composition de l'air vicié est spécifiée dans le tableau 4.1.

Les autres conditions appliquées aux simulations sont les suivantes :

- modèle de turbulence : approche DCPL, $Sc_T = 0.8$;
- modèles chimiques : mécanismes réduits Mueller et GRI-Red H₂ en deux versions avec et sans les espèces azotées ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K, profil de température pour le canal.

Le cas de viciation thermodynamique a été simulé avec les mécanismes sans les espèces azotées. Dans le cas de viciation sans NO_x, nous avons utilisé les deux versions des mécanismes cinétiques. L'application du modèle avec les espèces azotées permet de tester l'importance des oxydes d'azote secondaires formés dans la zone de combustion. Dans ces conditions, les simulations ont été réalisées en imposant les mêmes conditions à la sortie de la tuyère que pour les simulations sans les espèces azotées.

Les résultats obtenus avec le mécanisme Mueller sont montrés sur la figure 4.28. Sans les radicaux ni H₂O chimiquement active dans l'air vicié, la croissance de la pression est fortement retardée et son amplitude est réduite (figure 4.28(a)). Le premier facteur est dû à la distance d'autoinflammation qui est deux fois et demi plus grande (figure 4.28(b, d)). Le deuxième s'explique par un rendement de mélange plus faible dans le tronçon divergent (figure 4.28(c, d)). Le plafond de la température totale maximale est également plus bas à cause d'un taux de production de H₂O moins intense (figure 4.28(b)). Une des raisons pour la diminution de la production de H₂O est une concentration plus basse de H₂O chimiquement active ce qui ralentit les réactions de recombinaison.

En comparant les courbes pour la viciation sans NO_x, nous pouvons constater que les NO_x secondaires n'ont aucune importance. À partir des résultats pour la viciation avec NO_x, il s'avère également que les simulations ne sont pas sensibles aux NO_x primaires déjà présents dans l'air vicié.

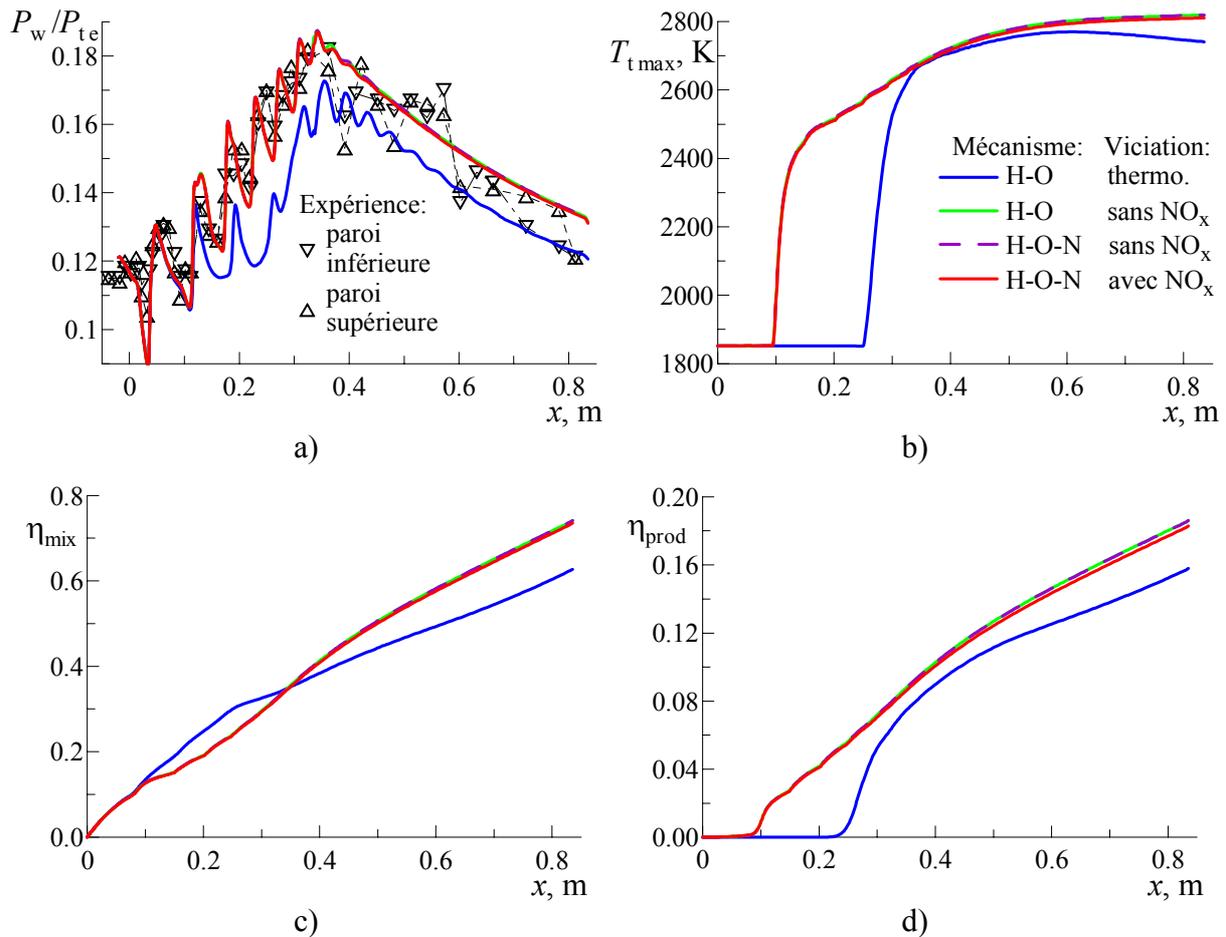


Figure 4.28. Mécanisme Mueller réduit. Distributions longitudinales : a) pression pariétale, b) température totale maximale, c) rendement de mélange, d) rendement de combustion.

Les résultats de simulations avec GRI-Red H_2 sont présentés sur la figure 4.29. Concernant ces simulations, nous pouvons remarquer que l'effet des radicaux et de H_2O est similaire à celui prédit par le mécanisme Mueller. Cet effet sur la distance d'autoinflammation est relativement moins fort (figure 4.29(b, d)). L'influence des NO_x secondaires est négligeable. En revanche, la distance d'autoinflammation est sensible aux NO_x primaires. Elle est raccourcie d'environ 20 mm par l'effet promoteur de NO_x .

Dans la section 3.6.3, nous avons étudié les effets de viciation sur l'autoinflammation à l'aide du modèle du réacteur à diffusion. Entre autres, nous avons réussi à imiter l'effet promoteur de NO_x par une diminution de 25 % de la constante de vitesse de la réaction $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$ dans le mécanisme GRI-Mech v.3.0. Pour vérifier si cette approche est applicable à la simulation de la chambre de combustion, nous avons modifié la version de GRI-Red H_2 sans les espèces azotées et effectué un calcul dans les conditions de viciation sans NO_x . Les distributions de pression pariétale et de température totale maximale issues de cette simulation sont présentées sur la figure 4.30 en comparaison aux distributions respectives obtenues pour la viciation avec NO_x . L'accord, très bon, permet de conclure que la prise en compte d'un effet éventuel de la viciation par NO_x ne nécessite pas d'application d'un modèle cinétique intégrant des espèces azotées. Le seul inconvénient est le besoin d'ajuster la constante de vitesse de la réaction $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$ selon les conditions de simulation. Cet ajustement peut être réalisé à l'aide du modèle du réacteur à diffusion.

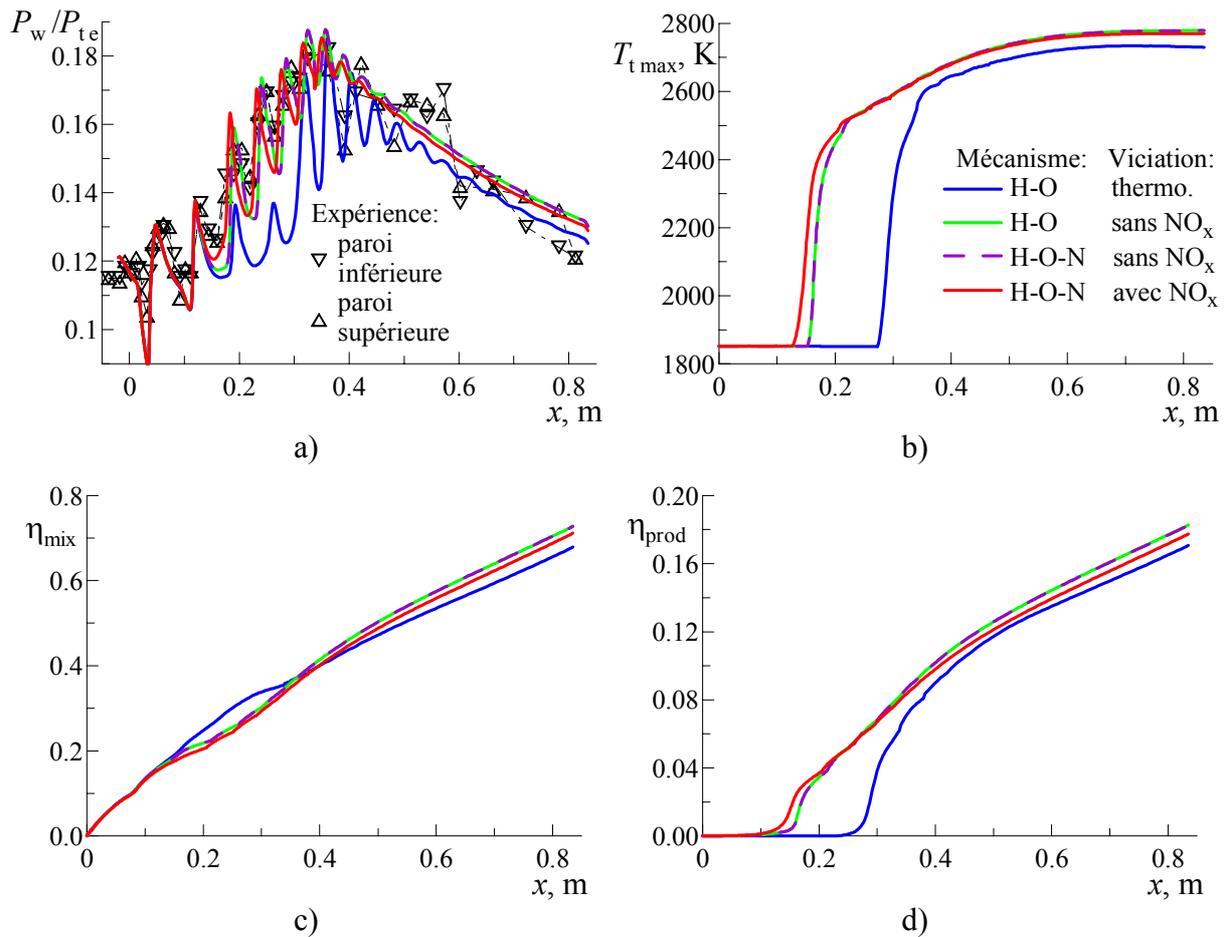


Figure 4.29. Mécanisme GRI-Red H₂. Distributions longitudinales : a) pression pariétale, b) température totale maximale, c) rendement de mélange, d) rendement de combustion.

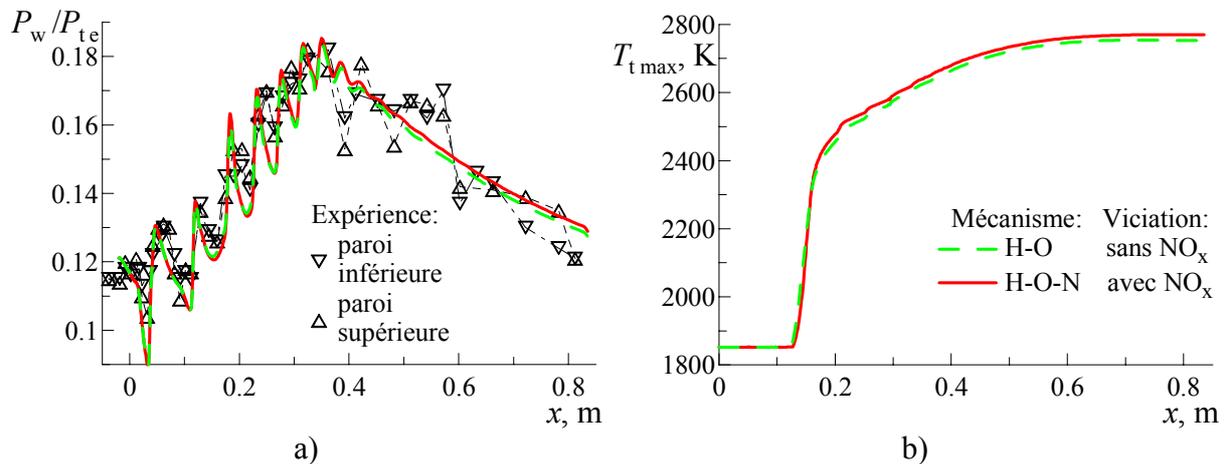


Figure 4.30. Mécanisme GRI-Red H₂. Imitation de l'effet de NO_x pour l'air vicié sans NO_x. Distributions longitudinales : a) pression pariétale, b) température totale maximale

Nous voyons que les conclusions concernant l'autoinflammation de H₂ dans le réacteur à diffusion ont été complètement confirmées par les simulations de la chambre de combustion. Cela prouve l'utilité du modèle du réacteur à diffusion pour la validation de mécanismes cinétiques.

4.3.7. Effets tridimensionnels et validation des résultats de simulation

Cette section termine l'étude de combustion supersonique de H_2 par la présentation de simulations 3D de la chambre de combustion LAERTE. L'étude paramétrique que nous avons effectuée avec l'approche 2DA nous a permis de définir les conditions de simulation d'une manière justifiée. En comparant les solutions 2DA et 3D, nous pouvons mettre en évidence les effets relatifs à la configuration réaliste de la chambre. Nous essayons également de valider les résultats de simulation sur l'ensemble des résultats expérimentaux disponibles.

4.3.7.1. Domaines de calcul

La différence majeure entre les deux approches concerne la géométrie 3D qui nécessite un découpage spécifique de la zone de calcul pour que le maillage structuré soit bien adapté à la forme des domaines. Pour la simulation 3D, nous avons accepté les mêmes principes que pour la simulation 2DA, à savoir : la tuyère supersonique est calculée séparément puis les conditions simulées sont transmises à l'entrée de la chambre. Cette séparation a été nécessaire pour que le calcul soit faisable avec les ressources informatiques disponibles.

La tuyère supersonique et la chambre ont des formes symétriques par rapport aux plans vertical et horizontal. Il est donc possible de simuler un quart de la géométrie complète en imposant les conditions de symétrie aux frontières correspondant aux deux plans. La figure 4.31 montre les domaines de calcul relatifs à la tuyère et à la chambre de combustion. Par rapport à la configuration 2DA, il nous a fallu découper le volume des zones de calcul en plusieurs domaines longitudinaux. Les domaines sont organisés de la façon suivante :

- D1 et D2 représentent la partie supersonique de l'injecteur ;
- D3-D6 forment la tuyère et la partie de la chambre en amont du plan d'injection ;
- D7-D11 correspondent à la partie de la chambre en aval du plan d'injection.

La notation des frontières reste la même que pour la configuration 2DA (voir la figure 4.6). Les positions axiales des frontières L1, L2 et L3 ont été également préservées. Les origines des coordonnées y et z se trouvent sur l'axe de la chambre.

Dans les plans de symétrie de la chambre, le maillage est construit à partir du maillage adapté 2DA. Les maillages de la tuyère et de la chambre sont conformes. La figure 4.32 montre le maillage dans trois sections transversales correspondant au plan d'injection (a), à la sortie du tronçon de section constante (b) et à la sortie de la chambre (c). Les tableaux 4.7 et 4.8 récapitulent les informations principales sur les deux maillages telles que les dimensions (N_i, N_j, N_k) et les pas les plus petits ($\Delta_{i\min}, \Delta_{j\min}, \Delta_{k\min}$) et les plus grands ($\Delta_{i\max}, \Delta_{j\max}, \Delta_{k\max}$). Le nombre total de cellules dans la tuyère est d'environ $1.08 \cdot 10^6$ et celui dans la chambre est proche de $4.41 \cdot 10^6$.

Pour faire des calculs en parallèle, les maillages ont été divisés en plusieurs tranches par des sections transversales suivant le nombre de processeurs. L'écoulement dans la tuyère a été simulé sur huit processeurs et celui de la chambre sur seize.

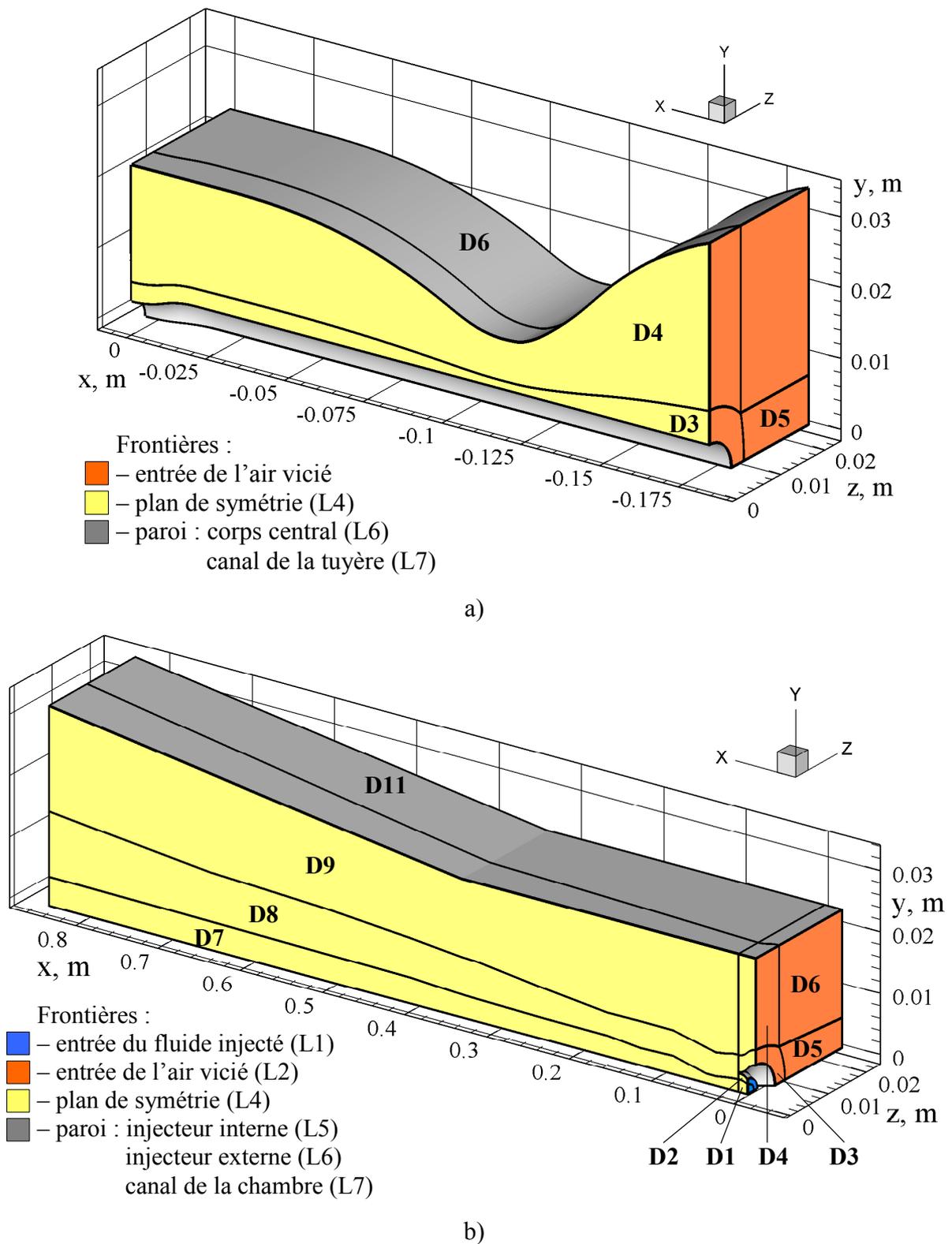


Figure 4.31. Découpage en domaines 3D de la tuyère (a) et de la chambre (b).

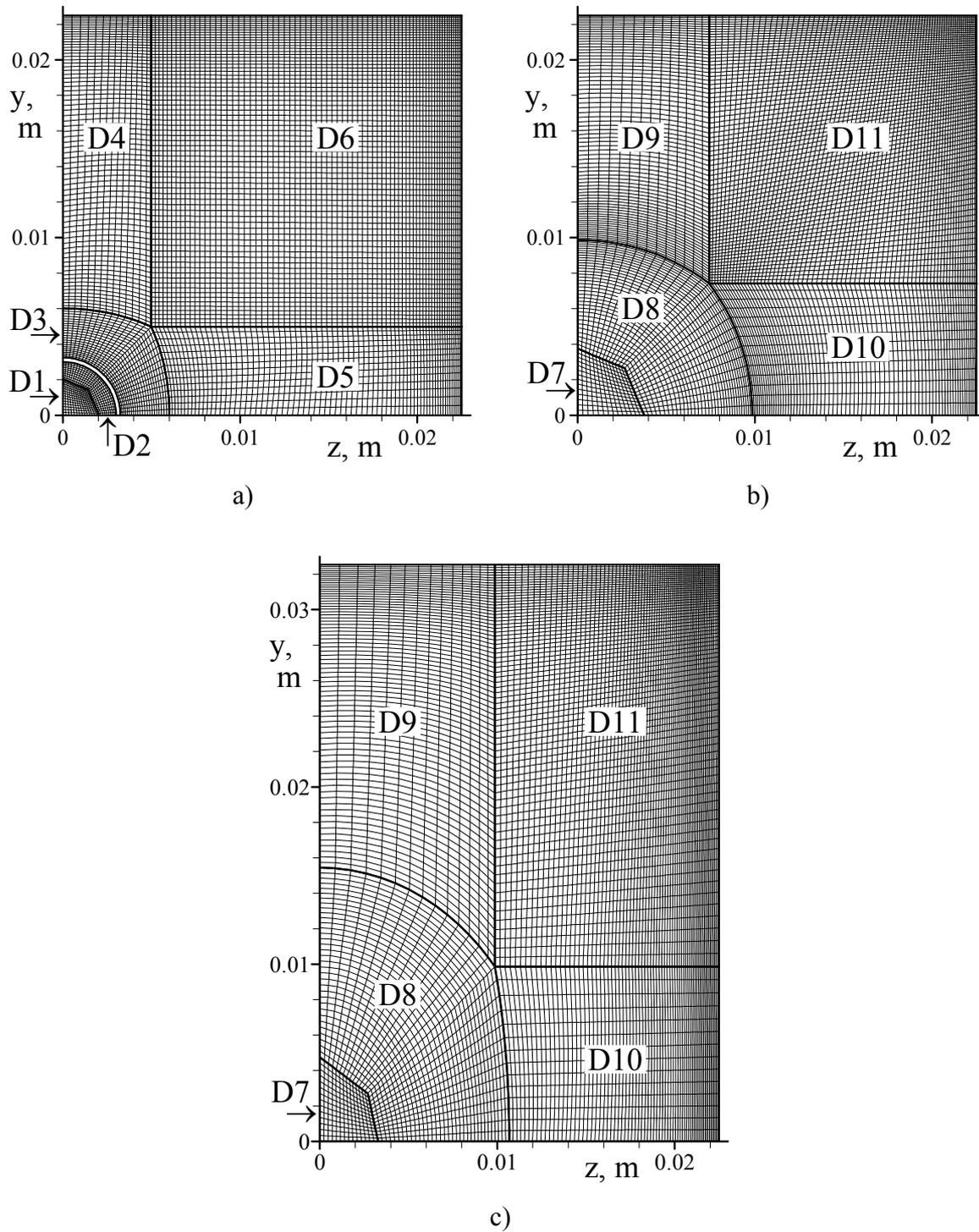


Figure 4.32. Maillage 3D dans les sections : a) $x = 0$, b) $x = 337 \text{ mm}$, c) $x = 837 \text{ mm}$.

Tableau 4.7. Caractéristiques du maillage 3D de la tuyère.

Dom.	N_i	N_j	N_k	$N_i \times N_j \times N_k$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm	$\Delta_{k\min}$, mm	$\Delta_{k\max}$, mm
D3	138	28	22	85008	0.1	3.5	0.18	0.62	0.026	0.32
D4	138	72	14	139104	0.1	3.6	0.025	0.48	0.19	0.91
D5	138	14	72	139104	0.1	3.6	0.15	0.62	0.1	0.34
D6	138	72	72	715392	0.1	3.6	0.028	0.48	0.1	0.34

Tableau 4.8. Caractéristiques du maillage 3D de la chambre de combustion.

Dom.	N_i	N_j	N_k	$N_i \times N_j \times N_k$	$\Delta_{i\min}$, mm	$\Delta_{i\max}$, mm	$\Delta_{j\min}$, mm	$\Delta_{j\max}$, mm	$\Delta_{k\min}$, mm	$\Delta_{k\max}$, mm
D1	42	14	14	8232	0.1	0.39	0.083	0.17	0.083	0.17
D2	42	28	9	10584	0.1	0.39	0.083	0.17	0.08	0.14
D3	34	28	22	20944	0.1	0.84	0.18	0.49	0.1	0.21
D4	34	72	14	34272	0.1	0.84	0.1	0.35	0.23	0.64
D5	34	14	72	34272	0.1	0.84	0.21	0.55	0.1	0.34
D6	34	72	72	176256	0.1	0.84	0.1	0.35	0.1	0.34
D7	494	14	14	96824	0.1	4.0	0.08	0.34	0.08	0.32
D8	494	28	34	470288	0.1	4.0	0.08	0.89	0.08	0.39
D9	494	72	14	497952	0.1	4.0	0.09	0.52	0.23	1.12
D10	494	14	72	497952	0.1	4.0	0.21	0.89	0.08	0.36
D11	494	72	72	2560896	0.1	4.0	0.1	0.75	0.08	0.4

4.3.7.2. Simulation de la tuyère

Pour la simulation de la tuyère, nous avons choisi les modèles et les conditions suivants :

- modèle de turbulence : approche ST, $Sc_T = 0.9$;
- modèles chimiques : mécanisme cinétique ONERA ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K, température du canal de 400 K.

Le choix concernant le modèle de turbulence convient le mieux à la simulation de la couche limite. Le mécanisme cinétique ONERA a montré une performance satisfaisante par rapport aux mécanismes détaillés dans les simulations 2DA. Pour les températures, nous avons choisi des valeurs intermédiaires dans le domaine étudié de conditions. L'ensemble des conditions semble bien validé par la comparaison des distributions de pression pariétale données par l'expérience et le calcul dans la chambre.

Les résultats de simulation sont présentés sur la figure 4.33 par les champs de nombre de Mach et de pression statique à la sortie de la tuyère ($x = -33$ mm). La pression est normalisée par la pression génératrice P_{te} . Le champ de M est relativement homogène à l'extérieur de la couche limite. La variation de la pression statique dans la section est de 10 %. Les non uniformités observées sont dues à la présence du corps central car la géométrie de la tuyère n'est spécifiquement pas conçue pour sa forme.

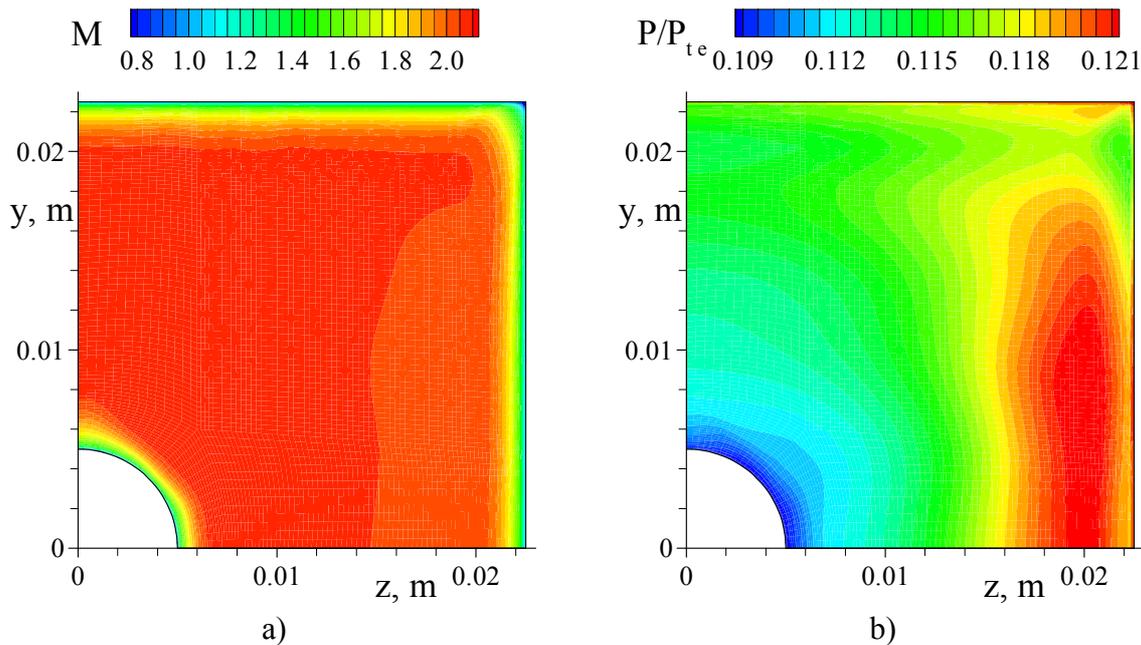


Figure 4.33. Champs de nombre de Mach (a) et de pression statique (b) à $x = -33$ mm.

Les profils transversaux de nombre de Mach et de température totale à $x = -33$ mm sont tracés sur la figure 4.34. Les profils, issus de la simulation 3D dans les plans de symétrie vertical ($z = 0$) et horizontal ($y = 0$), sont comparés avec ceux donnés par la simulation 2DA pour les mêmes conditions. Les conditions au cœur de l'écoulement sont en bon accord. Dans le plan vertical, l'épaisseur de la couche limite sur le corps central est presque deux fois plus grande. Dans le plan horizontal, les profils de cette couche limite coïncident dans les simulations 3D et 2DA.

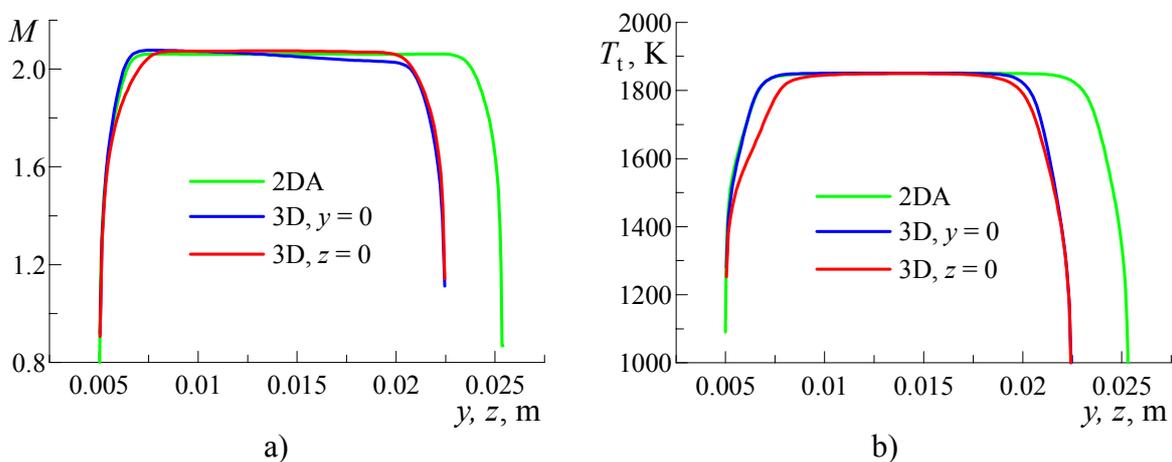


Figure 4.34. Profils transversaux de nombre de Mach (a) et de température totale (b) à la sortie de la tuyère ($x = -33$ mm). Comparaison des résultats 2DA et 3D.

Pour caractériser l'écoulement à la sortie de la tuyère, nous présentons la pression génératrice et les conditions moyennes dans le tableau 4.9. Les chiffres sont donnés pour les simulations 2DA et 3D. Le calcul 3D a prédit des pertes plus grandes en terme de température et de pression totales. Cette augmentation des pertes est une conséquence de l'accroissement de la surface pariétale. Les autres conditions moyennes sont en très bon accord pour les deux configurations.

Tableau 4.9. Conditions à la sortie de la tuyère supersonique.

Configuration	2DA	3D
P_{te} , kPa	731	730
$T_{t moy} - T_{te}$, K	$-29^* - 26^{**} = 55$	$-36^* - 29^{**} = 65$
$P_{t moy}/P_{te}$	$0.994^* \cdot 0.956^{**} = 0.950$	$0.993^* \cdot 0.951^{**} = 0.944$
T_{moy} , K	1109	1105
P_{moy} , kPa	83.2	83.2
M_{moy}	2.04	2.04
U_{moy} , m/s	1359	1353

*Partie subsonique de la tuyère

**Partie supersonique de la tuyère

4.3.7.3. Simulation de la chambre de combustion

Pour la simulation de la chambre de combustion, nous avons utilisé les modèles et les conditions suivants :

- modèle de turbulence : approche DCPL, $Sc_T = 0.8$;
- modèles chimiques : mécanisme cinétique ONERA ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K, profil de température pour le canal.

Concernant le modèle de turbulence, le choix est fait à partir des résultats de simulations 2DA ainsi que de l'étude de jets turbulents compressibles (chapitre 2). Les conditions dans la section du col de l'injecteur sont tirées de la simulation axisymétrique. Les autres conditions sont prédéterminées par la simulation de la tuyère.

Les champs de pression statique dans le tronçon de section constante sont illustrés sur la figure 4.35 pour les cas 2DA et 3D. Le dernier est représenté par les deux plans de symétrie afin de pouvoir apprécier la cohérence des ondes. En comparant les champs 2DA et 3D, nous constatons que le train de chocs 3D est moins régulier et par conséquent moins intense. Les irrégularités sont engendrées par les réflexions du premier choc conique sur les parois planes du canal. Malgré des non-uniformités des champs de nombre de Mach et de pression statique à la sortie de la tuyère, les structures du train de chocs dans les plans de symétrie sont très similaires.

Les distributions de pression pariétale le long de la chambre sont tracées sur la figure 4.36. Les résultats de simulation pour les deux configurations sont comparés aux données expérimentales. Pour la simulation 3D, nous avons montré les distributions sur les deux parois le long de leurs axes de symétrie. Globalement, les deux simulations sont en bon accord avec l'expérience. En observant les détails, nous pouvons conclure que l'approche 3D n'a pas amélioré considérablement la qualité des résultats vis-à-vis des distributions mesurées.

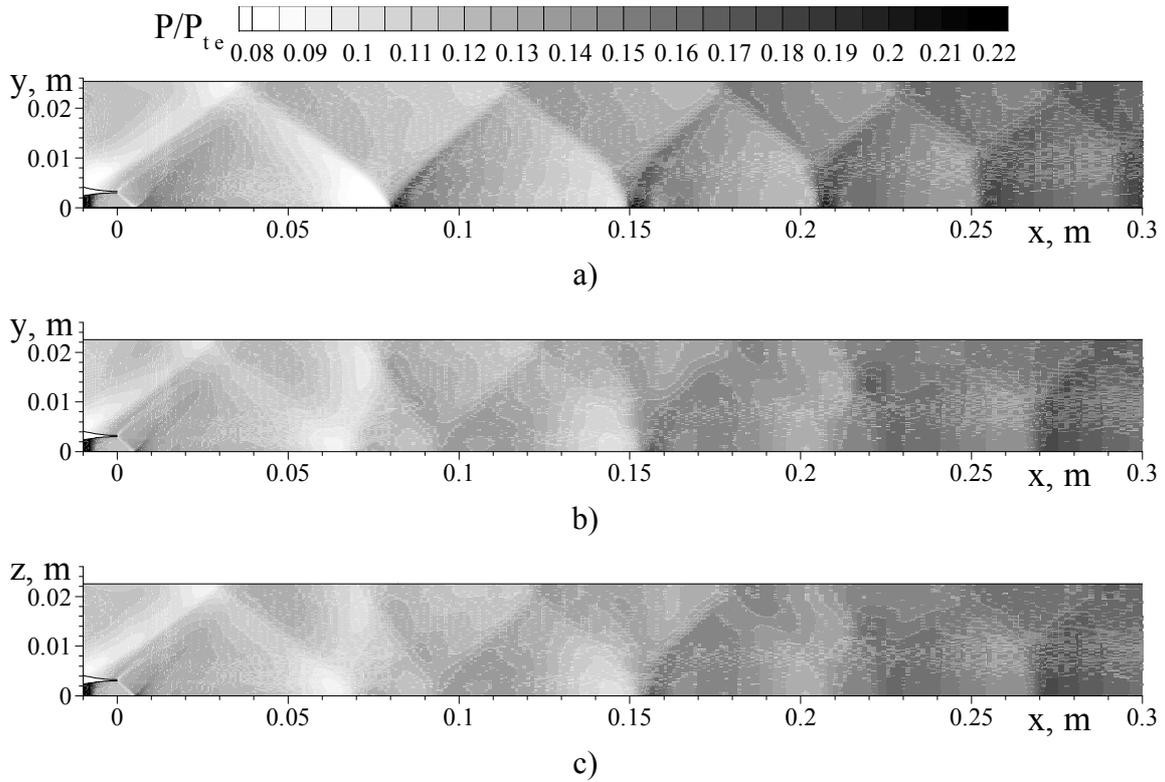


Figure 4.35. Champs de pression statique dans le tronçon de section constante :
 a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$, c) 3D, plan $y = 0$.

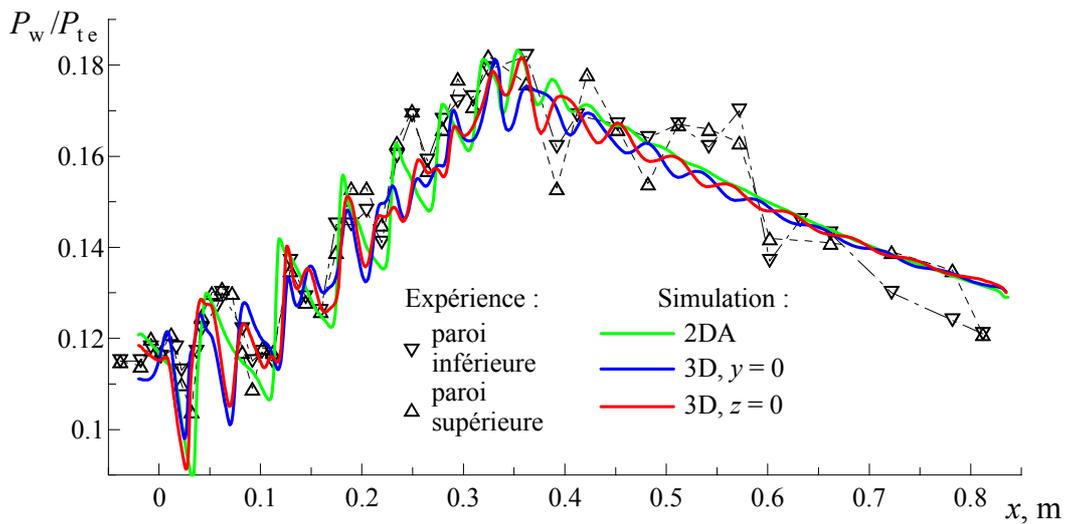


Figure 4.36. Distributions longitudinales de pression pariétale. Comparaison des résultats de simulations 2DA et 3D avec l'expérience.

Les champs de nombre de Mach sont montrés sur la figure 4.37 pour les deux configurations simulées. La simulation 3D est représentée par les deux plans de symétrie et par plusieurs sections transversales. À partir des champs 2DA et 3D, nous constatons qu'ils sont similaires. Il existe une zone transsonique au milieu du canal. La décélération de l'écoulement dans cette zone est plus forte dans le cas 2DA à cause du train de chocs plus intenses. Vers la sortie du tronçon divergent, l'écoulement est complètement supersonique. Dans les sections, on observe le développement des non-uniformités autour du jet à partir de $x = 200$ mm, puisque l'écoulement est gêné par l'expansion des gaz dans la zone de combustion et par la croissance de la couche limite sur les parois.

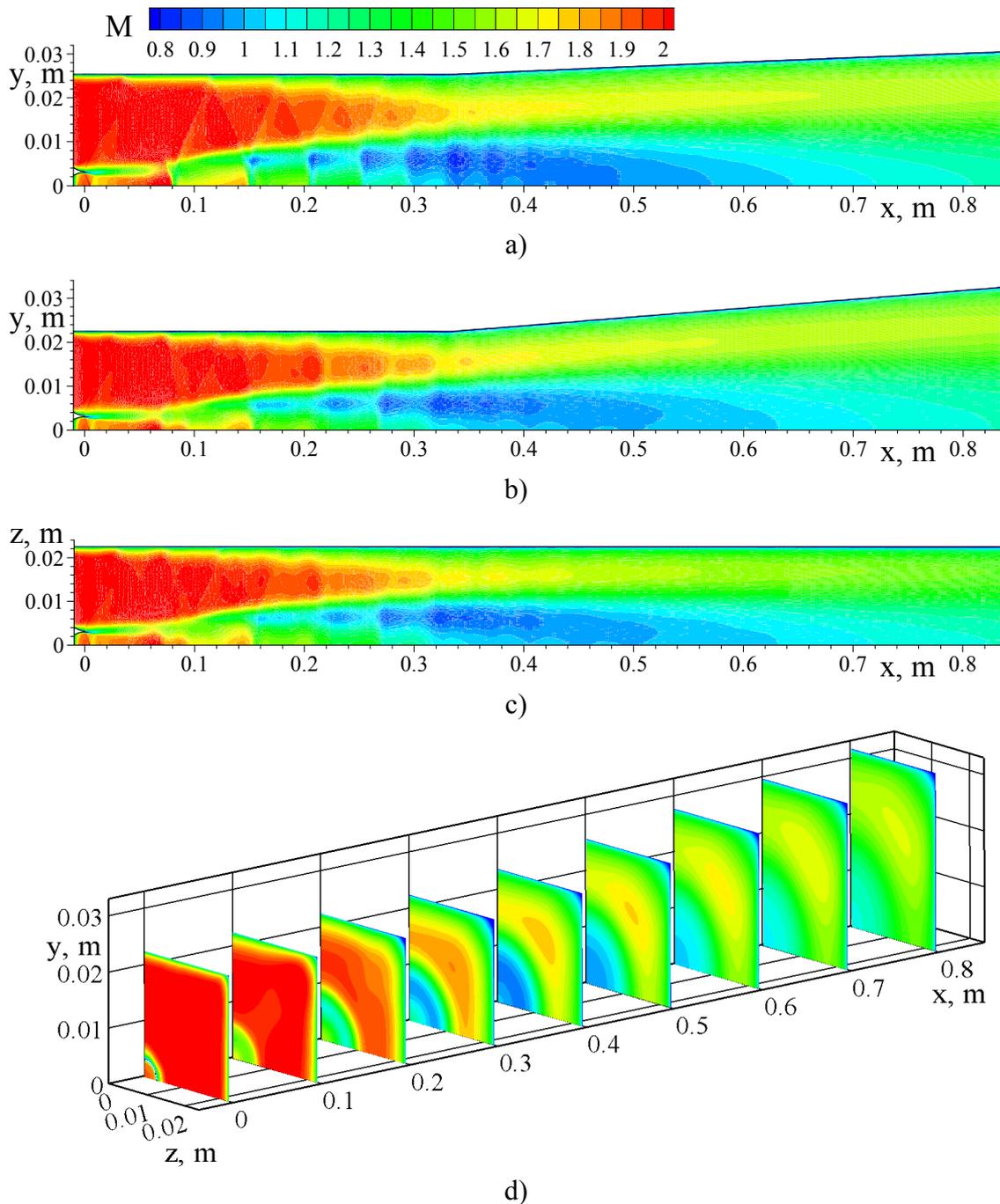


Figure 4.37. Champs de nombre de Mach : a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$, c) 3D, plan $y = 0$, d) sections transversales.

La zone de combustion est illustrée sur la figure 4.38 par les champs de température totale. Elle commence à partir de $x \approx 100$ mm et son développement en espace est similaire dans les deux cas. Les coupes de la zone de combustion simulée en 3D ont un aspect circulaire dans le tronçon de section constante, puis elles prennent une forme elliptique suivant l'évolution de la hauteur de section dans le tronçon divergent. Dans la section de sortie, le maximum de T_t n'est pas atteint sur l'axe du canal ce qui signifie que la combustion est incomplète.

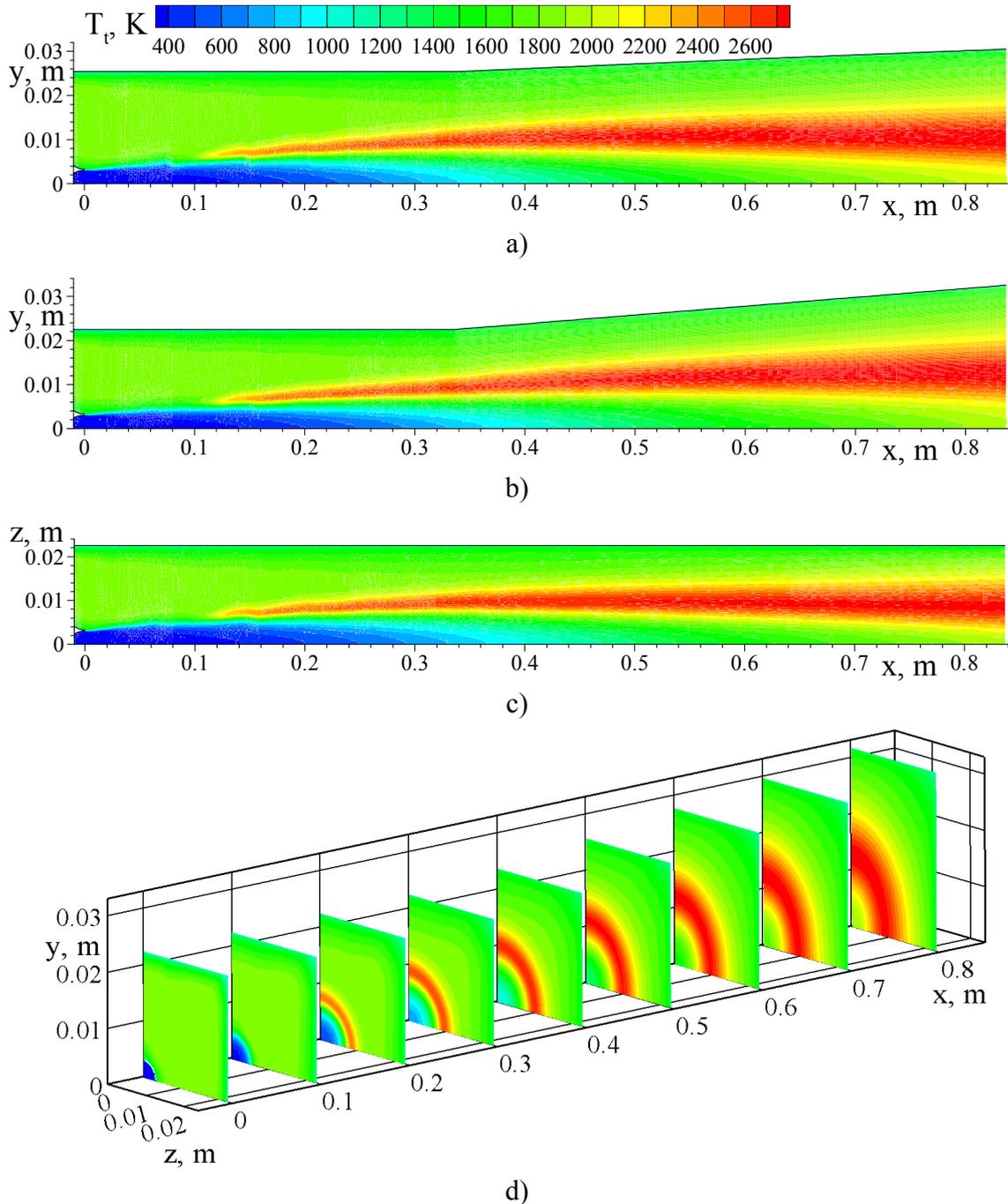


Figure 4.38. Champs de température totale : a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$, c) 3D, plan $y = 0$, d) sections transversales.

Le champ de vitesse est présenté sur la figure 4.39. Le cœur dynamique du jet s'étend jusqu'à environ 80 mm. Plus loin, il est perturbé par les réflexions des chocs. Le maximum de vitesse est observé sur l'axe sur une distance de 200-250 mm. Cette distance est plus grande dans le cas 3D parce que les chocs sont moins intenses.

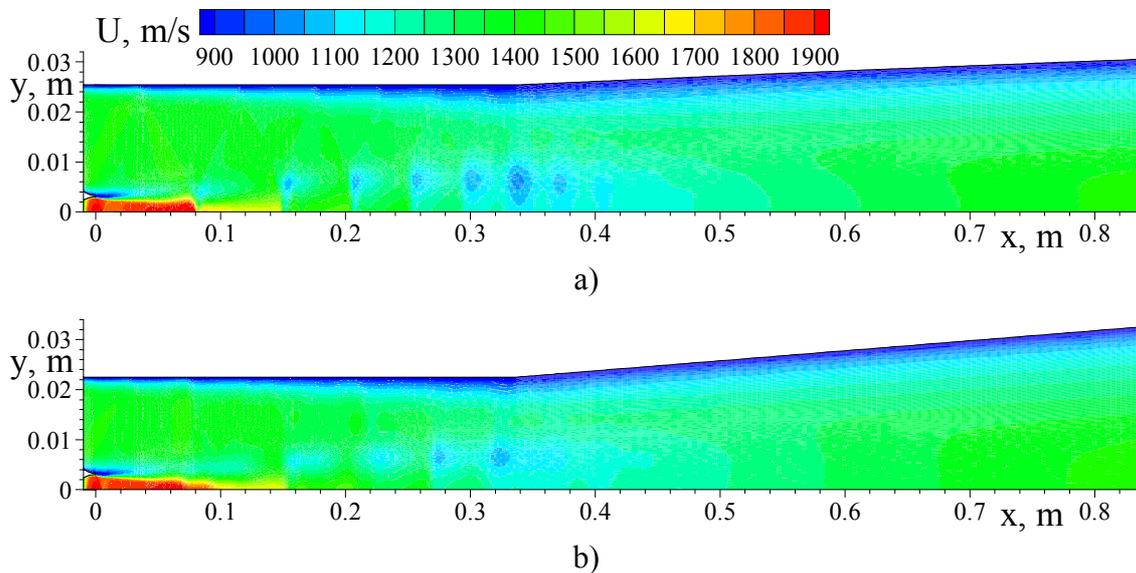


Figure 4.39. Champ de vitesse : a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$.

Les évolutions de la vitesse sur l'axe sont tracées sur la figure 4.40 pour les deux simulations en comparaison avec les résultats de mesures par LDA et PIV. De fortes chutes de vitesse dans le cas 2DA marquent les réflexions des chocs sur l'axe. La comparaison des résultats 2DA et 3D permet d'apprécier la différence des trains de chocs en terme d'intensité. Les fluctuations de vitesse sont cohérentes jusqu'à $x = 200$ mm. Ensuite dans le cas 2DA, les réflexions sont plus fréquentes car l'écoulement est décéléré davantage par les chocs intenses. La vitesse mesurée est systématiquement plus faible de 200-250 m/s. Pourtant, les tendances tirées des données PIV et des résultats de calcul sont similaires.

Une comparaison plus détaillée avec les résultats expérimentaux est présentée sur les figures 4.41, 4.42 et 4.43 pour les profils transversaux. À $x = 10$ mm (figure 4.41), les profils calculés sont en bon accord entre eux ainsi qu'avec les données expérimentales dans l'écoulement d'air vicié.

Sur la figure 4.42, nous avons tracé une multitude de profils calculés appartenant à l'intervalle de $x = 200$ mm à $x = 220$ mm. Les résultats de simulation sont comparés aux profils mesurés à $x = 210$ mm. Comme la variation de la vitesse est importante dans cet intervalle, nous pouvons vérifier que le désaccord n'est pas dû à un décalage éventuel entre les chocs dans l'expérience et dans la simulation. Pour le cas 2DA (figure 4.42(a)), on observe une réflexion de choc sur l'axe. Dans la zone centrale, la vitesse calculée varie autour des données expérimentales. Pour le cas 3D (figure 4.42(b)), la variation de vitesse est moins prononcée. La vitesse calculée reste supérieure aux résultats de mesures près de l'axe. Les données LDA marquent un minimum de vitesse très important entre $y = 5$ mm et $y = 10$ mm ce qui n'est pas confirmé par les mesures PIV et les simulations. Le profil PIV montre que l'axe du jet est décalé vers la paroi supérieure.

Dans l'intervalle de $x = 280$ mm à $x = 300$ mm (figure 4.43), les données LDA et PIV sont en désaccord dans la zone centrale. La vitesse mesurée par LDA est beaucoup plus basse. Les résultats des deux simulations sont plus ou moins en accord avec les données PIV. En revanche, ils sont loin des données LDV près de l'axe. Le profil issu de la simulation 2DA à $x = 300$ mm est le plus proche du profil LDV.

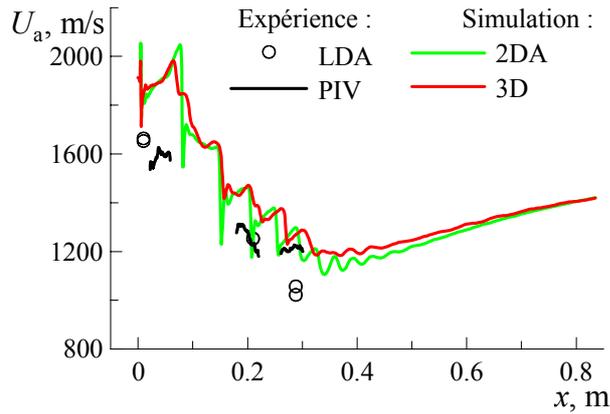


Figure 4.40. Profils longitudinaux de vitesse sur l'axe.

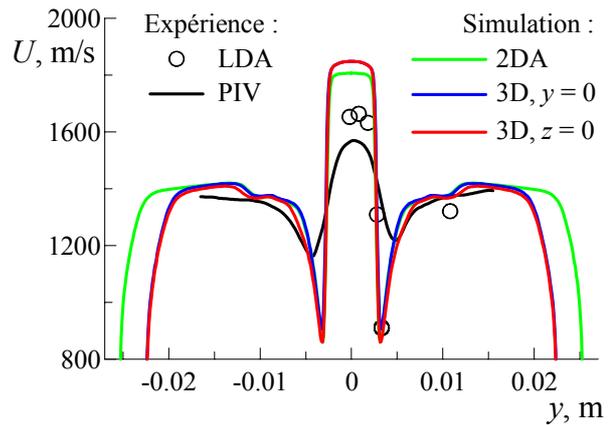


Figure 4.41. Profils transversaux de vitesse à $x = 10$ mm (24 mm pour PIV).

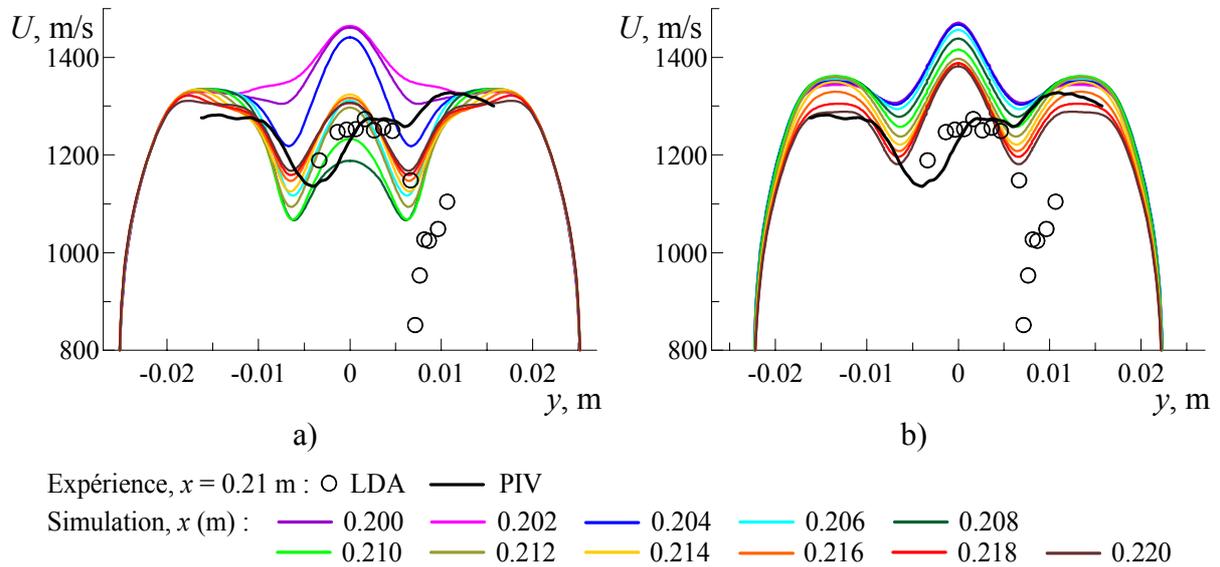


Figure 4.42. Profils transversaux de vitesse entre $x = 200$ mm et 220 mm : a) 2DA, b) et 3D.

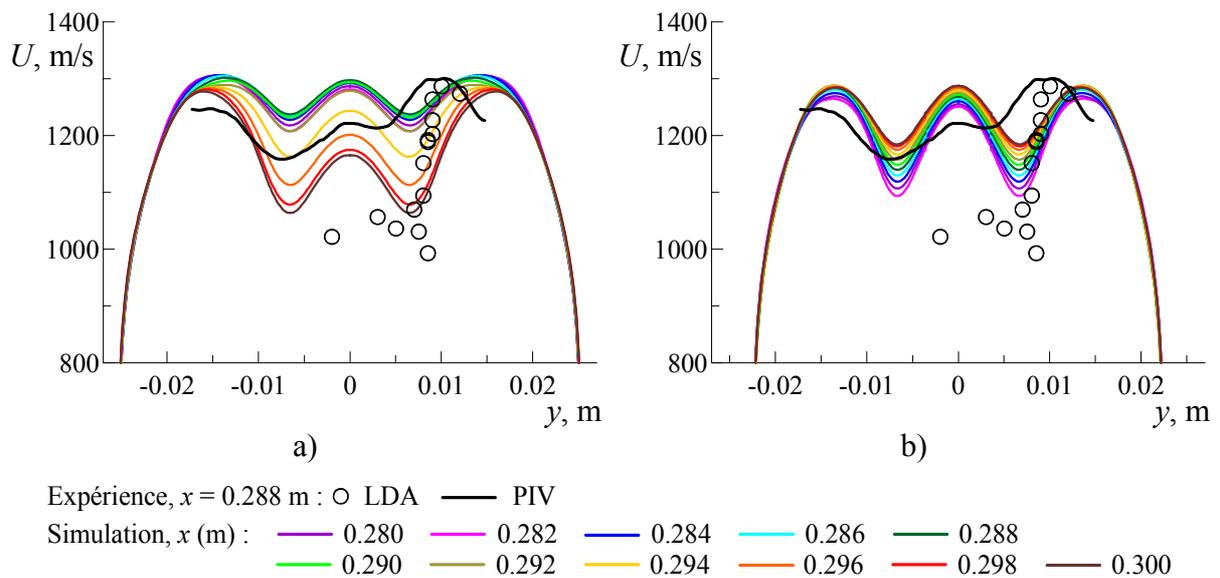


Figure 4.43. Profils transversaux de vitesse entre $x = 280$ mm et 300 mm : a) 2DA, b) et 3D.

Les champs de température statique sont présentés sur la figure 4.44. Le minimum de température dans la section reste sur l'axe jusqu'à une distance d'environ 500 mm. Selon la direction transversale, la variation de température la plus importante est observée entre l'axe et la zone de combustion. L'envergure de cette variation est délimitée sur la figure 4.45 par les distributions longitudinales de température statique sur l'axe et de température statique maximale dans la section. Nous avons montré l'ensemble des données CARS sur ce graphique afin de démontrer les tendances générales de l'évolution de température le long de la chambre. Les distributions respectives, correspondant aux simulations 2DA et 3D, s'accordent bien. Elles encadrent les points expérimentaux. Cette comparaison ne permet pas de valider la distance d'autoinflammation prédite par les simulations car les sections de mesures ne sont pas assez nombreuses.

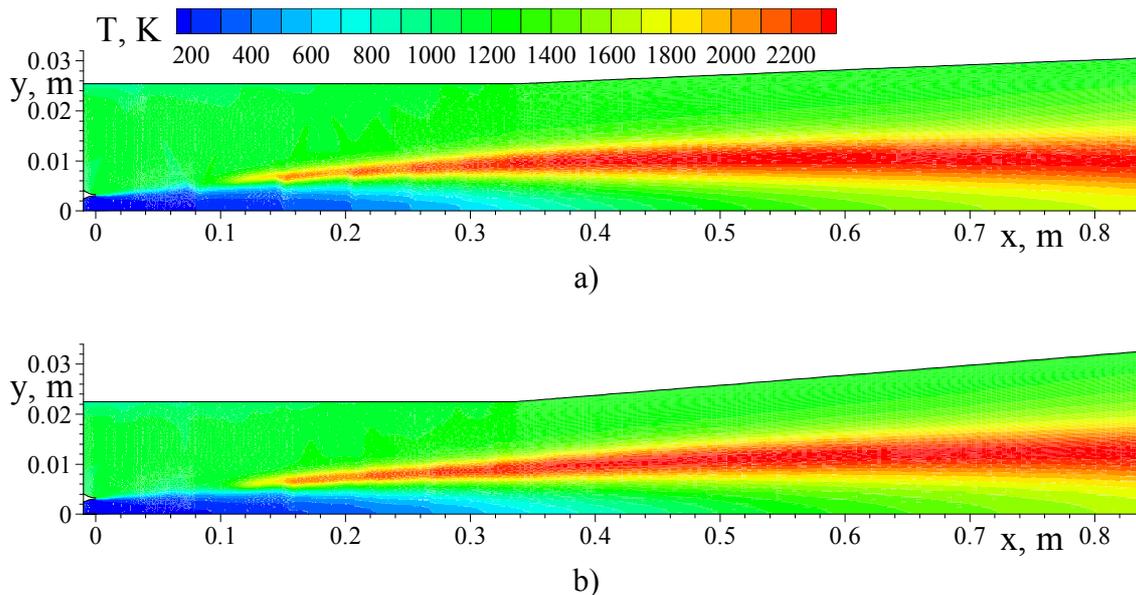


Figure 4.44. Champ de température statique : a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$.

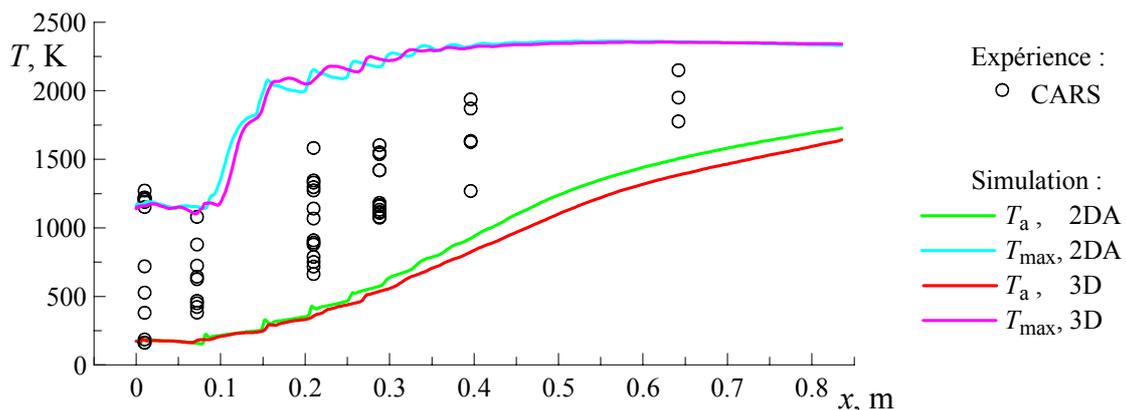


Figure 4.45. Distributions longitudinales de température statique sur l'axe et de température statique maximale dans la section. Les points représentent l'ensemble des données expérimentales dans chaque section.

Les profils calculés et mesurés de température statique sont comparés sur la figure 4.46 pour toutes les sections de mesures. Les profils prédits par les deux simulations sont proches les uns des autres. En ce qui concerne la comparaison avec les données expérimentales, l'accord est satisfaisant dans les deux premières sections ($x = 10$ mm et 72 mm) qui se trouvent en amont de la zone de combustion. Dans les sections suivantes, les

profils montrent des pics de température correspondant à la zone de combustion. Les maximums de température sont surestimés par les simulations. En même temps, la température sur l'axe est sous-estimée dans les sections $x = 210$ mm et 288 mm.

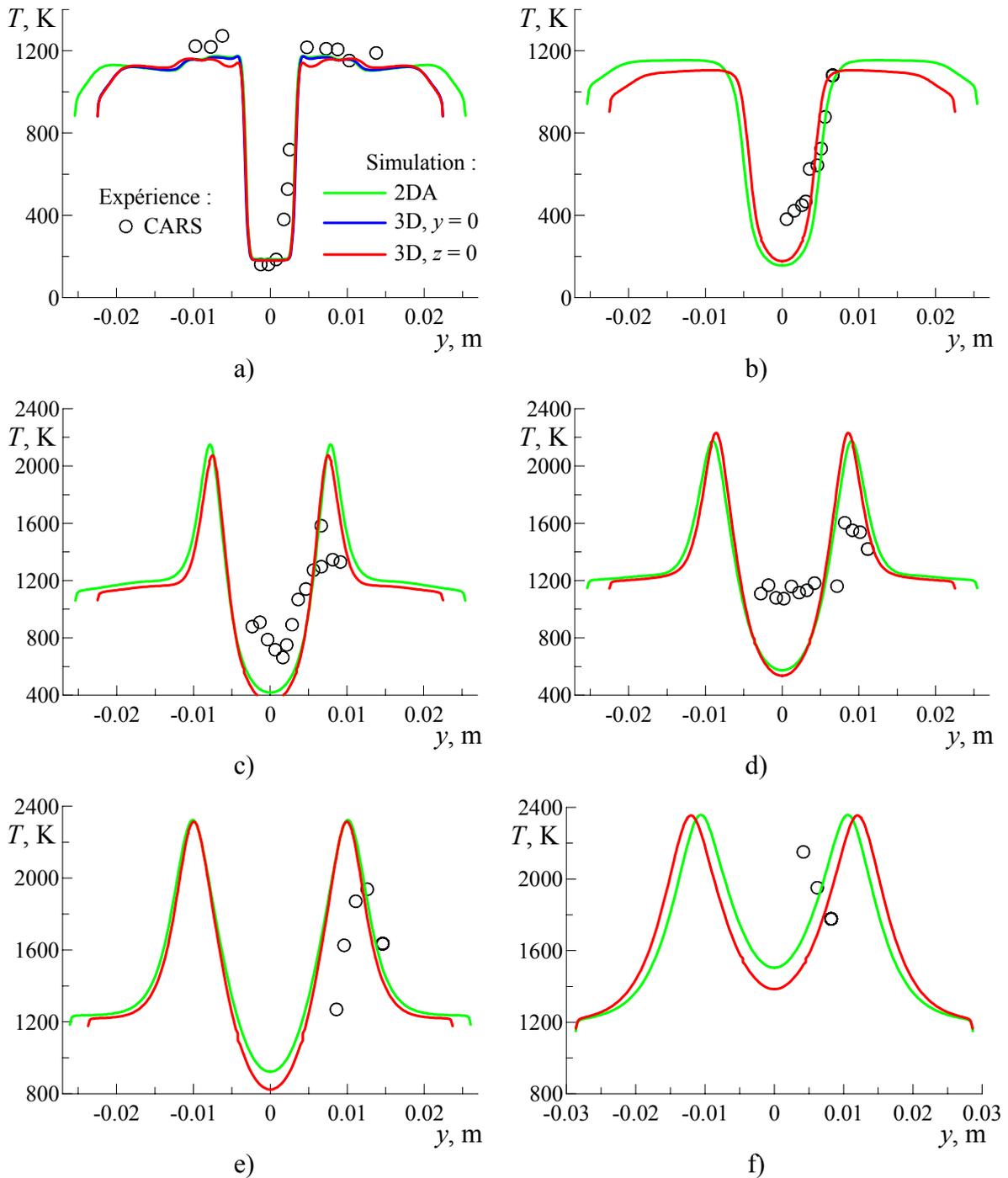


Figure 4.46. Profils transversaux de température statique : a) $x = 10$ mm, b) $x = 72$ mm, c) $x = 210$ mm, d) $x = 288$ mm, e) $x = 396$ mm, f) $x = 642$ mm.

Les champs de concentration du radical OH sont illustrés sur la figure 4.47 pour les deux simulations. Les résultats s'accordent bien, tant qualitativement que quantitativement. L'origine de l'inflammation est prédite à $x \approx 90$ mm par la simulation 2DA et à $x \approx 100$ mm par la simulation 3D. Dans la zone de combustion, les pics de concentration marquant le passage des chocs à travers la couche réactive sont visiblement plus importants d'après la simulation 2DA.

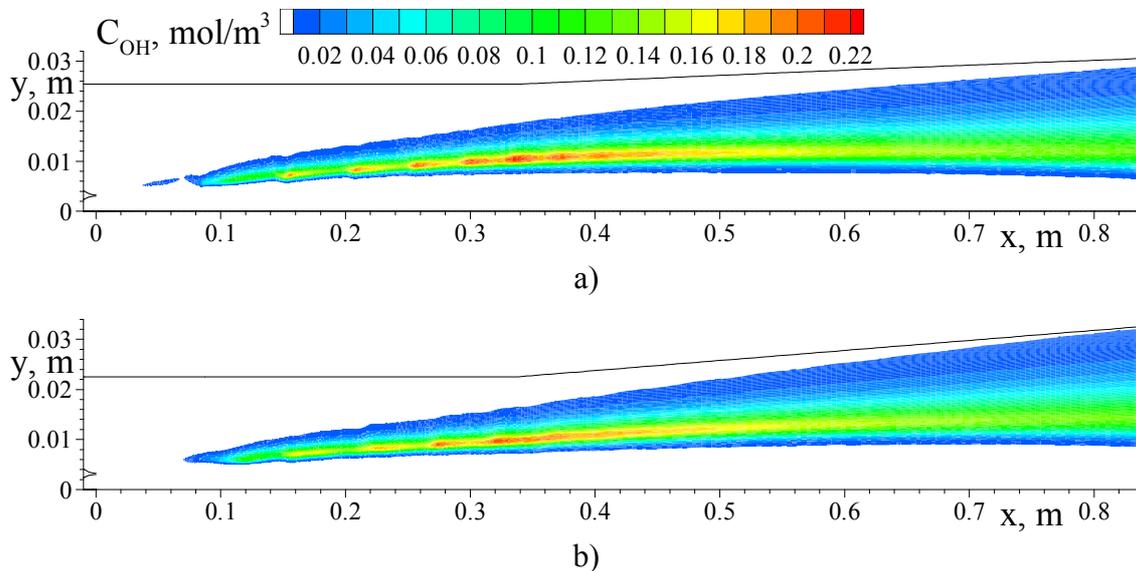


Figure 4.47. Champ de concentration de OH : a) 2DA, b) 3D, plan $z = 0$.

Afin de comparer les concentrations de OH calculées et mesurées, nous avons tracé ses profils sur la figure 4.48 pour la section $x = 210$ mm. Le profil expérimental donné par LIF montre que la distance entre les pics ainsi que leur amplitude sont plus petites que celles prédites par les simulations. La distance entre les pics est la même pour les deux configurations simulées. L'amplitude donnée par la simulation 3D est plus petite par rapport aux résultats 2DA mais elle est encore très grande comparée aux données expérimentales. Le calcul surestime la concentration de quatre à cinq fois.

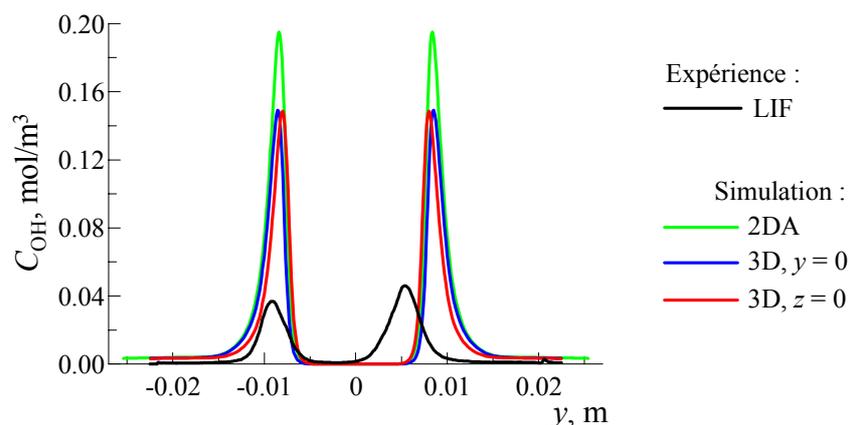


Figure 4.48. Profils transversaux de concentration de OH à $x = 210$ mm.

Les champs de fractions massiques de O_2 et H_2O , issus de la simulation 3D, sont donnés sur la figure 4.49 pour le plan vertical de symétrie. Des contours de richesse constante sont superposés sur ces champs. Le champ de Y_{O_2} (figure 4.49(a)) montre la pénétration de O_2 dans le jet en amont de la zone de combustion. Plus loin, O_2 n'arrive pas à traverser la zone de

combustion car il est complètement consommé par les réactions. Malgré une richesse très élevée et une température relativement basse (cf. la figure 4.44) autour de l'axe, O_2 prémélangé est également consommé à l'intérieur du jet. H_2O est formée dans une large zone en terme de richesse. Le maximum de Y_{H_2O} correspond à une richesse proche de 2. A partir des contours de ϕ , nous pouvons constater que le mélange n'est pas complet à la sortie de la chambre.

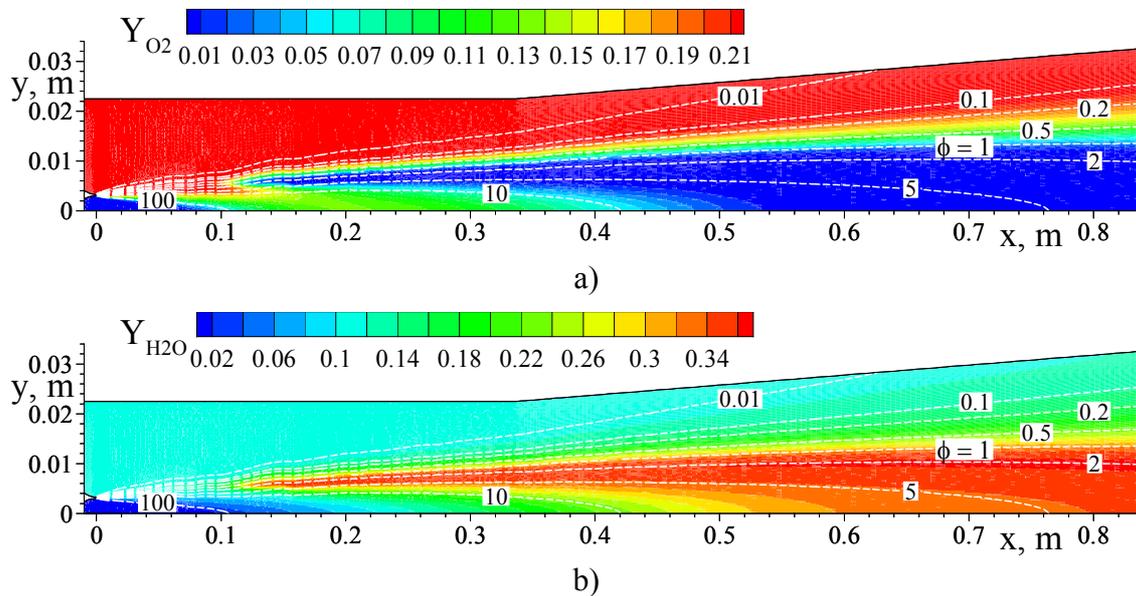


Figure 4.49. Champs de fractions massiques de O_2 (a) et de H_2O (b) issus de la simulation 3D. Les isolignes en pointillés correspondent à la richesse.

Pour évaluer l'efficacité du processus interne de la chambre de combustion, nous avons présenté les distributions de rendement de mélange et de rendement de combustion sur la figure 4.50. Les simulations 2DA et 3D ont donné des résultats proches pour les deux critères.

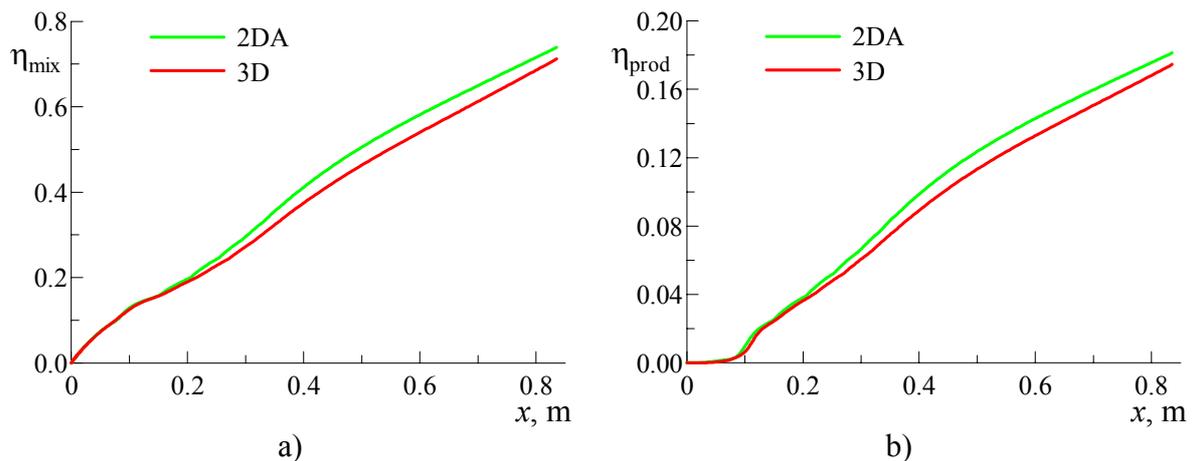


Figure 4.50. Distributions longitudinales de rendement de mélange (a) et de rendement de combustion (b).

4.3.8. Conclusions

D'après l'étude de combustion de H_2 dans la chambre LARTE, nous pouvons en tirer les conclusions suivantes :

- 1) Une large étude paramétrique a permis de mettre en évidence les effets relatifs aux conditions aux limites, aux modèles numériques et au maillage ainsi que les effets 3D. À partir des résultats de cette étude, nous avons établi les conditions de simulation qui donnent un accord raisonnable avec les résultats expérimentaux. Nous avons formulé et appliqué plusieurs critères qui permettent d'expliquer l'influence de certains facteurs sur la performance intégrale de la chambre.
- 2) Nous avons étudié les effets de la température totale de l'air vicié sur la solution. Indirectement par une comparaison de profils de température statique, nous avons trouvé que la température totale au cœur de l'écoulement est vraisemblablement supérieure à 1850 K. Cela veut dire que la zone centrale à la sortie du réchauffeur est enrichie en produits de combustion. La distance d'autoinflammation et la distribution de pression dans la chambre sont sensibles à la variation de T_{te} . Pourtant, il n'en est rien du rendement de combustion.
- 3) Les conditions pariétales sont importantes pour la simulation. La température du corps central a un effet très fort sur la distance d'autoinflammation ainsi que sur le rendement de mélange et, par conséquent, sur le rendement de combustion. Une inflammation rapide n'est pas forcément favorable pour le rendement de combustion. Les conditions sur les parois du canal influencent le processus interne car les pertes de chaleur font une contribution importante au bilan thermique qui vaut 15 % du dégagement intégral de chaleur.
- 4) La solution numérique est sensible au maillage. Cette sensibilité se traduit par une augmentation du rendement de mélange lorsque le maillage est plus fin. Nous avons proposé et appliqué une méthode d'adaptation de maillage basée sur une analyse *a posteriori*. Elle nous a permis d'obtenir une solution compatible à celle pour le maillage fin en réduisant le nombre de cellules par un facteur supérieur à deux.
- 5) En ce qui concerne le modèle de turbulence, nous avons démontré que la correction de Sarkar réduit considérablement le rendement de mélange dans la chambre. En revanche, la correction de Pope compense cet effet de façon que la solution est proche de celle donnée par le modèle standard. Le nombre de Schmidt turbulent est important pour le mélange. Dans les conditions particulières de la chambre LAERTE, la plage acceptable de Sc_T est de 0.8 à 0.9. Nous avons mis en évidence que les aspects étudiés n'ont pas d'influence sur la distance d'autoinflammation mais ils sont importants pour le rendement de combustion puisqu'il est essentiellement limité par le rendement de mélange. L'effet de la combustion sur le taux de mélange n'est pas monotone. D'abord, elle ralentit le mélange, puis le taux de mélange peut s'élever jusqu'à ce que le rendement de combustion final augmente.
- 6) Côté modèle chimique, nous avons confirmé l'applicabilité du modèle simplifié ONERA et validé les mécanismes réduits Mueller et GRI-Red H_2 dans les conditions de la chambre LAERTE. Nous avons démontré que l'efficacité catalytique de H_2O dans la réaction de recombinaison $H + OH + M \Leftrightarrow H_2O + M$ est très importante pour la production de H_2O et donc pour le rendement de combustion. Le taux de dégagement de chaleur agit sur le mélange. Un dégagement de chaleur lent peut réduire le rendement de mélange. En comparant les solutions de l'écoulement réactif et non réactif, nous avons estimé que la localisation de l'autoinflammation à partir des distributions de pression pariétale a une précision de 30-40 mm.

- 7) L'application des mécanismes réduits Mueller et GRI-Red H₂ nous a permis d'étudier l'effet de viciation d'air par H₂O et radicaux actifs ainsi que par NO_x. Les radicaux actifs ont un effet promoteur très important. La prédiction de l'effet de viciation par NO_x dépend du mécanisme cinétique. La solution obtenue avec GRI-Red H₂ est sensible aux NO_x primaires. Cependant, l'effet promoteur de NO_x peut être imité par une diminution de la constante de vitesse de la réaction $H + O_2 + H_2O \leftrightarrow HO_2 + H_2O$. Les simulations ont montré que la prise en compte des NO_x secondaires n'a aucune influence sur la solution.
- 8) Nous avons prouvé que l'approche 2DA représente une bonne approximation pour la chambre de combustion. Les résultats 3D n'ont pas de qualité supérieure en terme d'accord avec l'expérience. À partir de la comparaison des résultats 2DA et 3D aux données expérimentales, nous pouvons affirmer que la différence entre les deux simulations n'est pas supérieure au désaccord entre les simulations et l'expérience. Vu certaines particularités relatives à l'expérience, comme par exemple le décalage du jet par rapport à l'axe, nous pouvons admettre qu'aucune configuration simulée ne correspond à la réalité. En raison des complexités supplémentaires associées à l'approche 3D, elle n'a pas de vrai intérêt pour la présente configuration de la chambre.
- 9) Certains désaccords entre la simulation et l'expérience sont probablement dus à l'approche quasi-laminaire qui tend à surestimer les maximums de température et de concentrations des radicaux [Möbus et al. (2003)].

4.4. Étude numérique de la combustion supersonique du mélange méthane-hydrogène

Une étude expérimentale sur la combustion supersonique du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ a été effectuée récemment par l'ONERA sur le banc d'essai LAERTE. Dans la présente section, nous essayons d'appliquer les modèles chimiques obtenus à partir des mécanismes LCSR et GRI-Mech v.3.0 (voir le chapitre 3) à la simulation de combustion supersonique. Ces simulations ont pour objectif la validation des modèles chimiques dans les conditions de la chambre LAERTE. Nous devons remarquer que les données expérimentales ne sont pas encore autorisées pour la publication. Pour cette raison, nous ne donnons pas l'échelle sur les graphiques contenant ces données.

4.4.1. Conditions de simulation

Le choix des conditions de simulation repose sur l'étude précédente de combustion de H_2 . Nous considérons l'approche 2DA dont la validité a été confirmée dans la section précédente. Voici le récapitulatif des modèles et des conditions de simulation :

- modèle de turbulence : approche DCPL, $Sc_T = 0.8$;
- modèles chimiques : mécanismes réduits LCSR et GRI-Mech v.3.0 ;
- air vicié : $T_{te} = 1850$ K et 1920 K, $P_{te} = 710$ kPa ;
- parois : $T_{wcc} = 1000$ K ou corps central adiabatique, profil de température pour le canal ;
- maillage fin.

Les mécanismes réduits ont directement été implantés dans le code MSD afin d'optimiser leur performance et de minimiser le coût de calcul. Le mécanisme réduit GRI-Mech v.3.0 est représenté par deux versions : constantes de vitesse d'origine et modifiées (voir la section 3.5.3.4). Afin de tenir compte de l'effet promoteur de NO_x dans l'air vicié, la constante de vitesse de la réaction $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ a été abaissée de 13 % dans la version d'origine de GRI-Mech v.3.0 (voir la section 3.6.4).

Plus loin, nous verrons que le mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ s'enflamme difficilement dans les conditions correspondantes à $T_{te} = 1850$ K. Pour cette raison, nous avons essayé $T_{te} = 1920$ K. La pression génératrice P_{te} est fixe pour les deux températures.

Le maillage fin est choisi car la distance d'autoinflammation varie beaucoup en fonction de la composition du combustible. Le maillage adapté n'est pas applicable lorsque cette distance est importante car son pas longitudinal est grossier dans le tronçon divergent.

4.4.2. Résultats de simulation

Dans la campagne d'essais avec $\text{CH}_4\text{-H}_2$, certaines expériences ont été faites en injectant du H_2 pur. Nous commençons la présentation des résultats par ce cas. Ceci nous permet d'éclaircir certains aspects relatifs à l'expérience. Les figures 4.51 et 4.52 montrent les distributions de pression pariétale et de température totale maximale issues des simulations avec les trois mécanismes cinétiques. Les simulations sont effectuées pour $T_{te} = 1850$ K (figure 4.51) et 1920 K (figure 4.52). La paroi du corps central a une température fixe $T_{wcc} = 1000$ K. Les distributions de pression sont comparées aux résultats expérimentaux obtenus pour les modes avec et sans combustion. Concernant ces résultats, nous pouvons constater que l'allure des distributions expérimentales a changé par rapport aux expériences précédentes : des pics de pression sont apparus près de la sortie du tronçon de section constante, la pression monte dans la première moitié du tronçon divergent, puis elle diminue

rapidement jusqu'au même niveau que dans les expériences précédentes. Ces observations suggèrent que la géométrie du canal a été modifiée. Une hypothèse plausible consiste à supposer que les parois du tronçon divergent, souffrant des contraintes thermiques, se déforment au cours de l'expérience. Leur forme devient convexe ce qui donne une divergence variable le long du dernier tronçon : elle est plus petite dans la première moitié puis plus grande. La géométrie du tronçon de section constante semble intacte.

À partir des résultats de simulation, nous pouvons conclure que la variation de T_{te} n'a influencé que la distance d'autoinflammation prédite par la simulation avec GRI-Mech v.3.0 d'origine (*cf* les figures 4.51(b) et 4.52(b)). La version modifiée de GRI-Mech v.3.0 et le mécanisme LCSR ont donné des distances d'autoinflammation identiques. Le dégagement intégral de chaleur est le même dans les trois simulations.

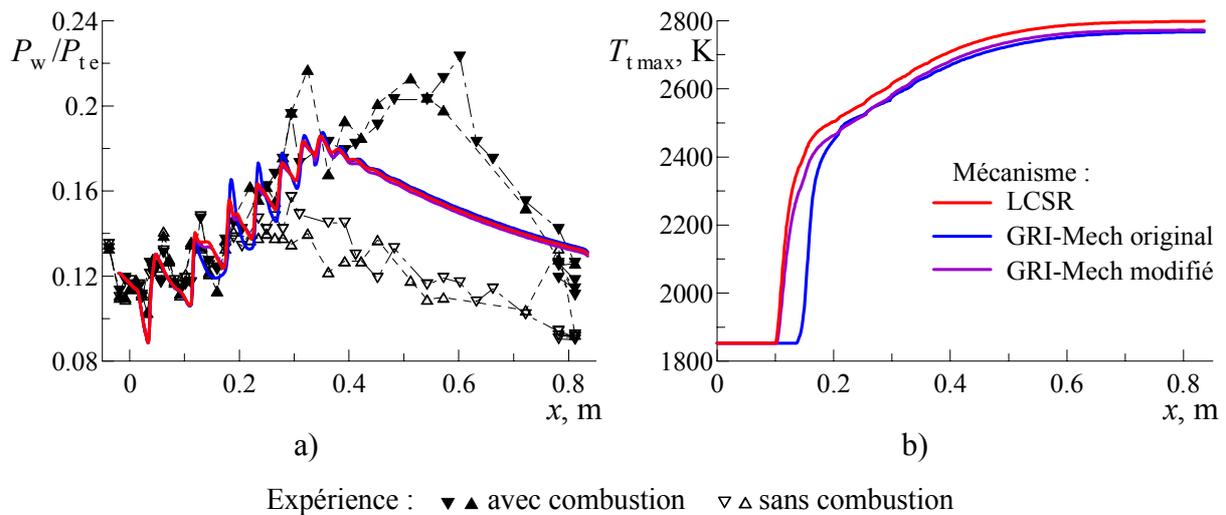


Figure 4.51. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 1$ (H_2 pur). Conditions de simulation : $T_{te} = 1850$ K, $T_{wcc} = 1000$ K.

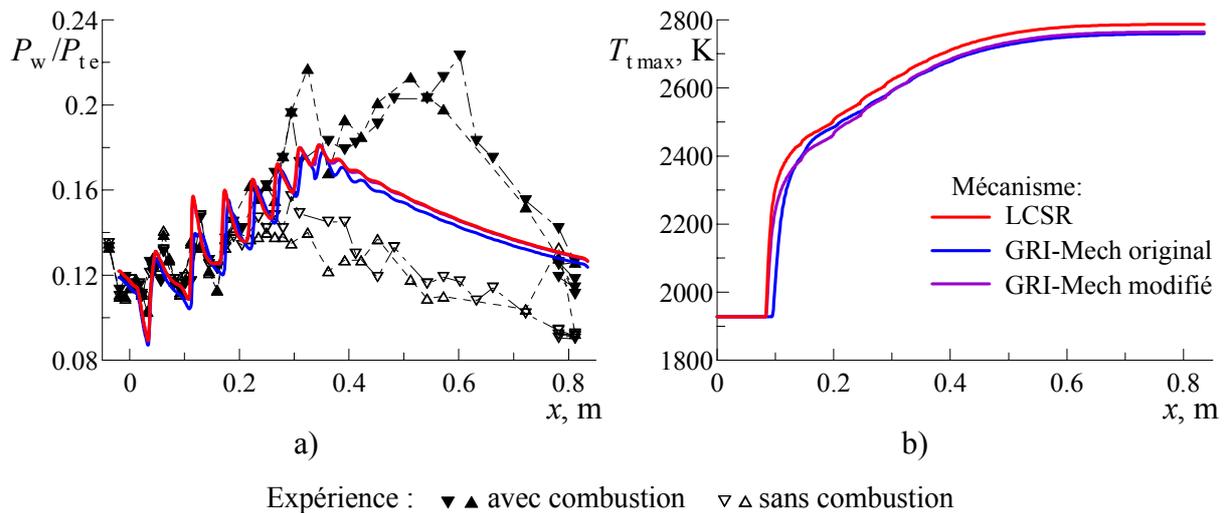


Figure 4.52. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 1$ (H_2 pur). Conditions de simulation : $T_{te} = 1920$ K, $T_{wcc} = 1000$ K.

Pour le mélange CH_4-H_2 , les conditions de simulation correspondent à trois cas :

- $T_{te} = 1850$ K et la paroi adiabatique du corps central ;
- $T_{te} = 1920$ K et la paroi adiabatique du corps central ;
- $T_{te} = 1920$ K et $T_{wcc} = 1000$ K.

Pour le mélange contenant 50.6 % de H₂ en masse ($\eta = 0.506$), les résultats relatifs aux trois cas sont présentés sur les figures 4.53, 4.54 et 4.55. Les distributions de pression calculées et mesurées sont cohérentes dans le tronçon de section constante indépendamment des conditions. Pourtant, la distance d'autoinflammation varie de 40 mm (figure 4.54(b)) jusqu'à 180 mm (figure 4.55(b)). Dans l'expérience, les distributions correspondant aux modes avec et sans combustion se séparent à $x \approx 200$ mm. Les simulations avec GRI-Mech v.3.0 d'origine ont systématiquement donné les distances d'autoinflammation les plus élevées.

Les résultats pour le mélange contenant 27.5 % de H₂ ($\eta = 0.275$) sont illustrés sur les figures 4.56, 4.57 et 4.58. Dans le premier cas, GRI-Mech v.3.0 modifié est le seul modèle qui donne l'autoinflammation. La combustion commence dans le tronçon divergent. Pour les deux autres cas, l'inflammation est prédite par les trois mécanismes cinétiques. Cependant, la distance d'autoinflammation obtenue avec GRI-Mech v.3.0 modifié est plus courte de 30% par rapport aux autres résultats. Le mécanisme LCSR a donné les distances les plus longues. D'après les distributions expérimentales, nous pouvons estimer que la combustion commence à $x \approx 250$ mm. Les simulations avec GRI-Mech v.3.0 modifié sont en accord avec cette estimation (figures 4.57(b) et 4.58(b)). Le calcul donne pourtant une croissance de pression relativement faible. Cela veut dire que, dans l'expérience, les perturbations initiales sont sensiblement plus fortes.

4.4.3. Conclusions

À partir de l'ensemble des résultats sur la combustion du mélange CH₄-H₂, nous pouvons résumer que :

- 1) Les incertitudes relatives aux conditions expérimentales (géométrie de la chambre, température totale de l'air vicié, température du corps central) ne permettent pas de sélectionner le meilleur modèle cinétique. Néanmoins, nous avons réussi à obtenir des résultats cohérents avec l'expérience et de mettre en évidence la sensibilité de la solution au modèle chimique et aux conditions aux limites.
- 2) Lorsque la fraction de H₂ est prépondérante ($\eta = 0.506$ et 1) les prédictions d'autoinflammation sont conditionnées par le sous-mécanisme d'oxydation de H₂. En revanche pour $\eta = 0.275$, nous constatons que l'influence de la cinétique d'oxydation de CH₄ est bien prononcée. C'est pour cela que le modèle LCSR prédit les distances d'autoinflammation plus grandes par rapport aux modèles GRI-Mech v.3.0.
- 3) Les simulations pour $\eta = 0.506$ et 1 ont montré que la distance d'autoinflammation dépend principalement de la température du corps central et qu'elle est moins sensible aux variations de la température de l'air vicié. Cela signifie qu'avant l'inflammation, le processus chimique se passe dans le sillage autour du jet. À $\eta = 0.275$, c'est la température de l'air vicié qui devient plus importante pour l'autoinflammation.
- 4) Les publications antérieures [Davidenko et al. (2002), Davidenko et al. (2004), Davidenko et al. (2005a,c)] ont présenté des résultats de simulations obtenus avec la première version du mécanisme réduit LCSR. Cette version n'est pas capable de prendre en compte l'effet inhibiteur de H₂O qui opère par la réaction $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$. Les résultats les plus récents montrent des distances d'autoinflammation considérablement plus grandes. Par conséquent, le rôle de H₂O est très important dans le processus chimique relatif à l'autoinflammation du mélange CH₄-H₂ dans de l'air vicié.

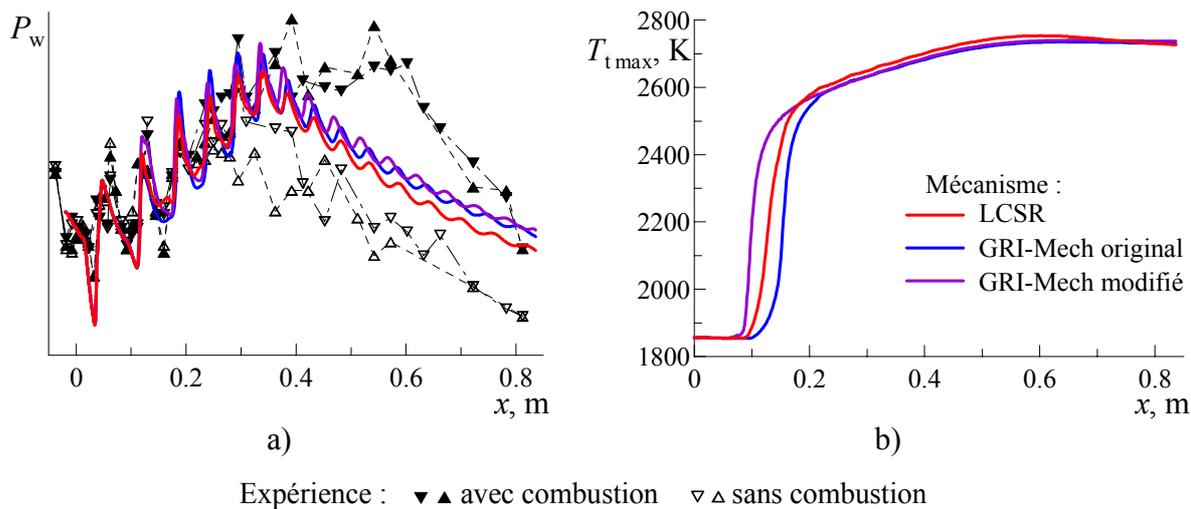


Figure 4.53. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.506$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1850$ K, corps central adiabatique.

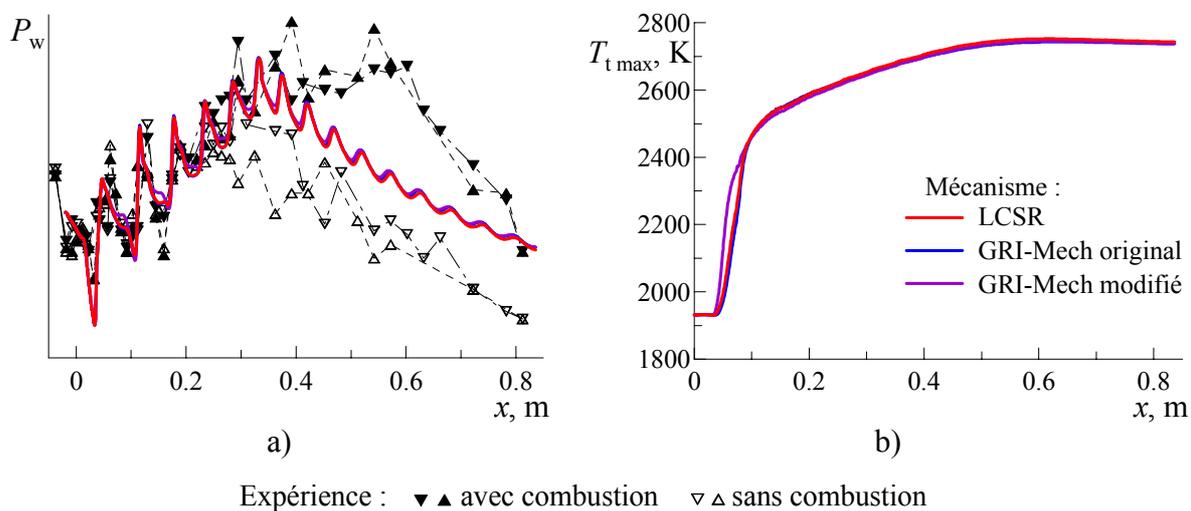


Figure 4.54. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.506$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1920$ K, corps central adiabatique.

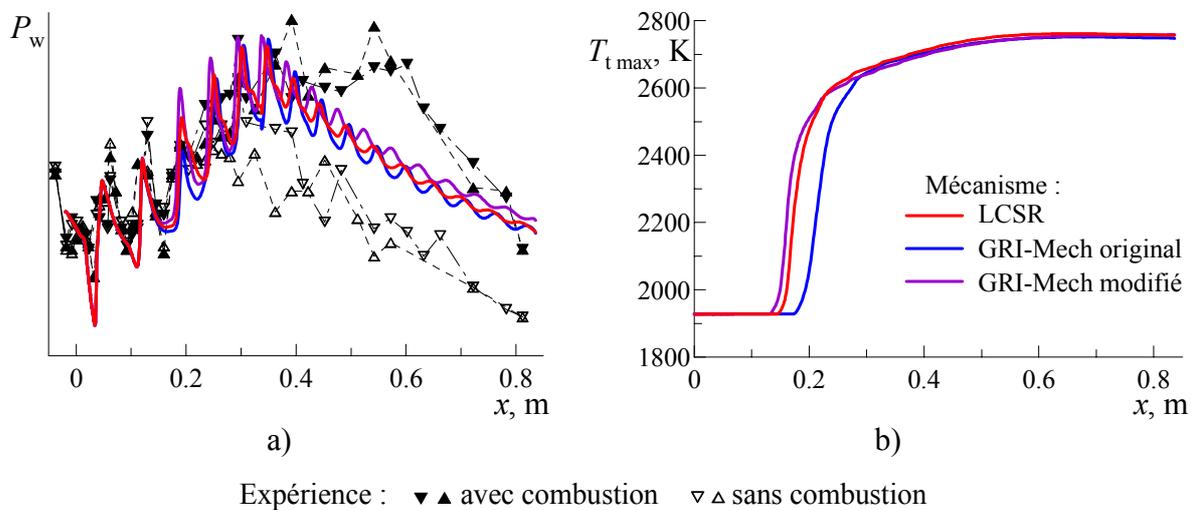


Figure 4.55. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.506$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1920$ K, $T_{wcc} = 1000$ K.

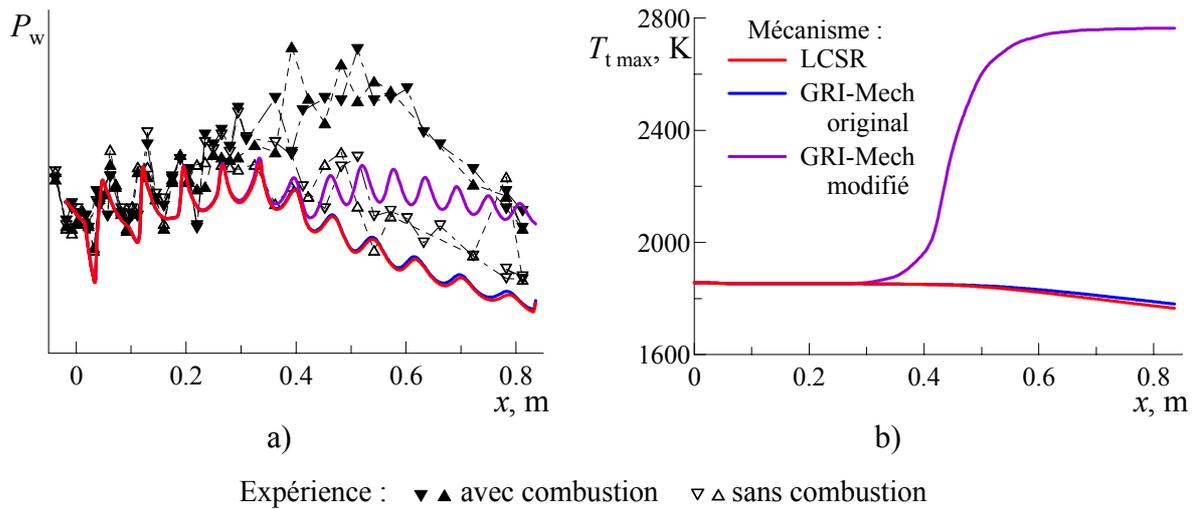


Figure 4.56. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.275$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1850$ K, corps central adiabatique.

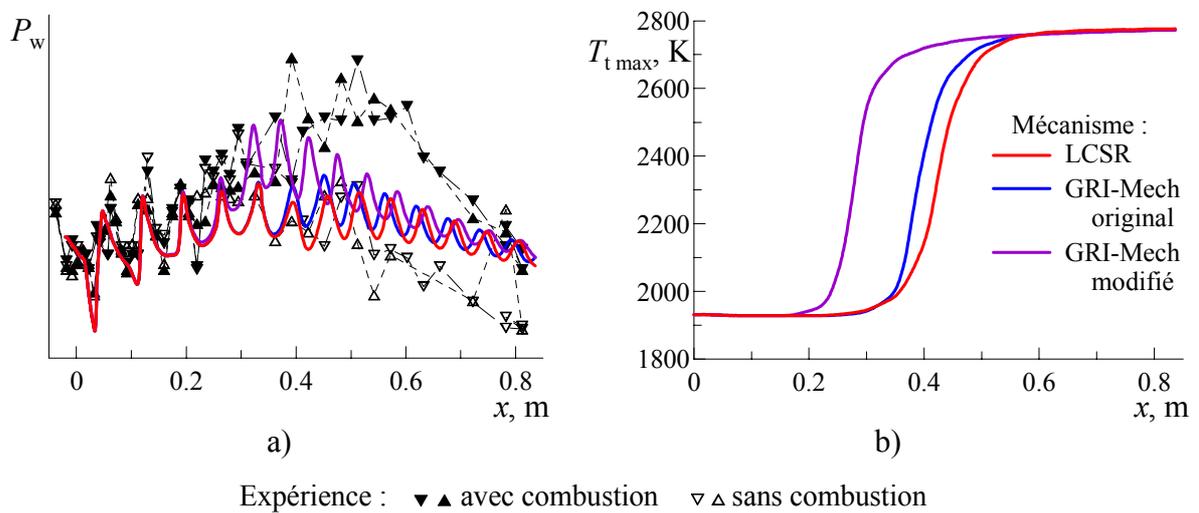


Figure 4.57. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.275$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1920$ K, corps central adiabatique.

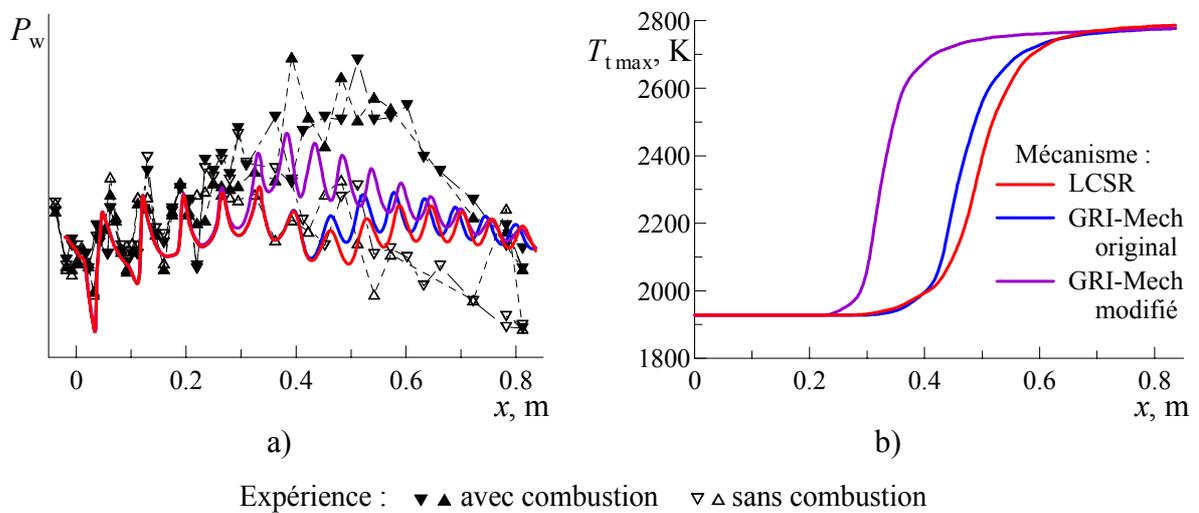


Figure 4.58. Distributions de pression pariétale (a) et de température totale maximale (b). Combustible : $\eta = 0.275$. Conditions de simulation : $T_{te} = 1920$ K, $T_{wcc} = 1000$ K.

4.5. Conclusions sur la simulation de la chambre LAERTE

Nos études de combustion supersonique de H_2 et du mélange CH_4-H_2 dans la chambre LAERTE se résument par les conclusions suivantes :

- 1) La combustion supersonique reste encore un phénomène assez complexe pour une analyse détaillée, même si la configuration expérimentale est simple. Elle est influencée par plusieurs facteurs dont la caractérisation précise par les moyens expérimentaux est souvent difficile, voire impossible. Il s'agit des conditions moyennes et fluctuantes dans les écoulements d'oxydant et de combustible ainsi que des conditions pariétales. Même l'évolution de la géométrie du dispositif expérimental n'est pas parfaitement maîtrisable. Pour une étude rigoureuse, il ne suffit pas de connaître uniquement les conditions macroscopiques telles que la vitesse, la température et la pression, mais aussi la composition chimique de l'air vicié y compris les radicaux et NO_x .
- 2) Les incertitudes sur les conditions expérimentales et le manque de mesures détaillées dans la zone d'autoinflammation rendent difficile la validation de l'approche numérique. Parmi les facteurs d'incertitude, la température totale de l'air vicié et la température du corps central sont les plus importants. Notre étude permet de supposer que la température totale au cœur de l'écoulement est proche de 1900 K. Pourtant, cette supposition doit être confirmée par l'expérience.
- 3) Plusieurs modèles chimiques ont été appliqués aux simulations de combustion de H_2 et du mélange CH_4-H_2 dans la chambre LAERTE. En considérant les estimations de la distance d'autoinflammation et les résultats sur le délai d'autoinflammation dans le modèle du réacteur de diffusion, nous pouvons constater qu'il existe une forte analogie entre les deux approches. Cela permet de proposer le modèle du réacteur de diffusion comme un outil d'essai pour les mécanismes cinétiques avant de les appliquer aux simulations RANS beaucoup plus coûteuses.

Conclusions générales et perspectives

Nous avons accompli une étude qui porte sur le développement d'outils de simulation numérique de la combustion supersonique, notamment sur les modèles de turbulence et de cinétique chimique. Les résultats de cette étude se résument par les conclusions suivantes :

- 1) Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ a été amélioré par l'intégration de la correction de compressibilité de Sarkar et de la correction de l'anomalie jet rond/jet plan de Pope. Pour la correction de Pope, nous avons proposé une limitation qui assure une prédiction précise de l'épanouissement du jet rond et une stabilité numérique du modèle corrigé. Nous avons validé le modèle de turbulence amélioré à partir de résultats expérimentaux sur des couches de mélange planes compressibles et sur des jets ronds compressibles. En outre, un post-traitement de données DNS sur une couche de mélange turbulente non isotherme bi-espèces a permis de valider l'hypothèse concernant l'égalité des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents. Nos simulations ont mis en évidence l'importance de ces deux paramètres du modèle de transport turbulent.
- 2) Une nouvelle méthode de réduction de mécanismes cinétiques chimiques a été proposée. Sur la base de cette méthode, un outil de réduction automatique a été créé et appliqué au développement de modèles chimiques réduits. Pour le système réactif $\text{CH}_4\text{-H}_2\text{-air}$, deux modèles ont été obtenus à partir des mécanismes détaillés LCSR et GRI-Mech v.3.0 pour un large domaine de conditions en terme de composition, de pression et de température. La validation des modèles réduits a été réalisée en utilisant une nouvelle corrélation sur le délai d'autoinflammation. Nous avons établi cette corrélation sur une large base de données expérimentales. Deux modèles réduits ont été élaborés à partir des mécanismes de Mueller et GRI-Mech v.3.0 pour l'oxydation de H_2 dans de l'air vicié par des produits de combustion. Tous les mécanismes réduits ont été validés dans les conditions d'un milieu non homogène représenté par le modèle du réacteur à diffusion. Nous avons proposé le concept de ce modèle et nous l'avons réalisé sous la forme d'un outil informatique.
- 3) Les améliorations du modèle de turbulence et les nouveaux modèles chimiques réduits ont été intégrés dans le code de calcul MSD. À l'aide de ce code, une étude numérique a été effectuée sur la combustion supersonique de H_2 et du mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2$ dans la chambre expérimentale LAERTE. L'aspect méthodologique de cette étude concerne la validation des modèles numériques, le choix des conditions aux limites, l'adaptation du maillage, la comparaison des configurations bi- et tridimensionnelles. Grâce à cette étude, nous avons mis en évidence les effets dus aux facteurs étudiés. Un accord raisonnable a été obtenu entre les résultats expérimentaux et numériques.
- 4) De façon générale, la combustion supersonique est un phénomène complexe mettant en jeu plusieurs processus physico-chimiques. Étant donné les incertitudes des conditions expérimentales ainsi que les libertés relatives au choix de modèles numériques et à l'ajustement de leurs paramètres, il est difficile, voire impossible de mettre au point un modèle sur la base d'une expérience particulière. Chaque modèle numérique doit être validé séparément sur des données représentatives. Tant que notre connaissance du processus interne d'une chambre de combustion supersonique n'est pas complète, les simulations de cas test expérimentaux peuvent servir seulement à la validation de l'ensemble des modèles et de la méthodologie numérique.

En ce qui concerne les perspectives, il existe au moins deux problèmes importants dont la résolution est très demandée :

- 1) Les hydrocarbures usuels impliquent des mécanismes chimiques très complexes dont la réduction classique est très coûteuse en terme de temps et de ressources humaines. En outre, même les modèles réduits restent assez grands [Luche et al. (2004)] pour que leur application habituelle aux calculs multidimensionnels soit prohibitive. Cela implique la nécessité d'une méthode de tabulation pour les termes sources chimiques. Les méthodes de tabulation les plus connues sont ILDM (*Intrinsic Low-Dimensional Manifolds*) [Maas et Pope (1992)], ISAT (*In Situ Adaptive Tabulation*) [Pope (1997)], FGM (*Flamelet-Generated Manifolds*) [van Oijen et al. (2001)] et FPI (*Flame Prolongation of ILDM*) [Gicquel et al. (2000)]. À partir des méthodes existantes, il faut chercher des moyens pour optimiser l'application de modèles cinétiques à la simulation de combustion supersonique. Il s'agit de minimiser le coût de calcul dû au modèle chimique et de réduire le nombre d'espèces chimiques transportées.
- 2) L'interaction turbulence-chimie est un facteur qui doit être pris en compte par un modèle supplémentaire. Il existe toute une gamme de modèles de simples fermetures algébriques jusqu'à ceux basés sur la modélisation mixte RANS-particules stochastiques. Dans un premier temps, il faut établir une base pour la validation de modèles d'interaction. Des données de simulations directes offrant une connaissance parfaite du phénomène d'interaction peuvent constituer cette base. Des exemples de validation de modèles d'interaction à partir de données DNS ont été présentés par Chakraborty et al. (2000) et par Hilbert et al. (2002). L'élément clef pour l'obtention de données DNS est le code de calcul développé par Ludivine Gougeon (thèse en cours) et Ivan Fedion au sein de LCSR [Gougeon et al. (2005), Gougeon et Fedion (2005)]. Une étude sur la simulation directe de couches de mélange réactives est déjà prévue en 2006.

Références bibliographiques

- Antonia R. A., Bilger R. W. (1973)
An experimental investigation of an axisymmetric jet in a co-flowing air stream, *J. Fluid Mech.*, Vol. 61, Part 4, p. 805-822.
- Asaba T., Gardiner W. C. Jr, Stubbeman R. F. (1965)
Shock-tube study of the hydrogen-oxygen reaction, *10th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p.295-302.
- Baurle R. A., Alexopoulos G. A., Hassan H. A. (1994a)
Assumed joint probability density function approach for supersonic turbulent combustion, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 10, No. 4, p. 473-484.
- Baurle R. A., Alexopoulos G. A., Hassan H. A. (1994a)
Modeling of supersonic turbulent combustion using assumed probability density functions, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 10, No. 6, p. 777-786.
- Baurle R. A., Hsu A. T., Hassan H. A. (1995)
Assumed and evolution probability density functions in supersonic turbulent combustion calculations, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 11, No. 6, p. 1132-1138.
- Baurle R. A., Girimaji S. S. (2003)
Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations, *Combustion and Flame*, Vol. 134, p. 131-148.
- Beam R., Warming R. (1978)
An Implicit Factored Scheme for the Compressible Navier-Stokes Equations, *AIAA Journal*, Vol. 16, No. 4, p. 393-402.
- Belles F. E., Lauver M. R. (1965)
Effects of concentration and of vibrational relaxation on the induction period of the H₂-O₂ reaction, *10th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p.285-293.
- Bhattacharjee B., Schwer D. A., Barton P. I., Green W. H., Jr. (2003)
Optimally-reduced kinetic models: reaction elimination in large-scale kinetic mechanisms, *Combustion and Flame*, Vol. 135, p. 191-208.
- Billig F. S. (1993)
Research on supersonic combustion, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 9, No. 4, p. 499-514.
- Bogdanoff D. W. (1983)
Compressibility effects in turbulent shear layers, *AIAA Journal*, Vol. 21, No. 6, p. 926-927.
- Borghi R. (1988)
Turbulent combustion modeling, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 14, p. 245-292.
- Borisov A. A., Dragalova E. V., Lissiansky V. V., Skachkov G. I., Zamansky V.M. (1983)
Kinetics and mechanism of methane oxidation at high temperature, *Oxidation Communications* Vol. 4, p. 45.

- Borisov A. A., Knorre V. G., Kudryashova E. L., Skachkov G. I., Troshin K. Y. (1998)
On temperature measurements in the induction period of ignition of homogeneous gas mixtures in a static admittance apparatus, *Chemical Physics Reports*, Vol. 17, No. 7, p. 1323-1331.
- Bouchez M., Kergaravat Y., Saucereau D., Penanhoat O., Patrone F. Scherrer D. (1998)
Scramjet combustor design in French PREPHA program - Final status in 1998, AIAA-1998-1534, 8th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Norfolk, VA, 27-30 April.
- Bouchez M., Falempin F., Levine V., Avrashkov V., Davidenko D. (2001)
French-Russian partnership on hypersonic wide-range ramjets, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 6, p. 1177-1183.
- Bouchez M., Levine V., Avrashkov V. (2003)
French-Russian cooperation on dual-mode ramjet: Significant step passed for technology and combustion processes mastering, AIAA-2003-7004, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, VA, 15-19 December.
- Brabbs T. A., Robertson T. F. (1987)
The carbon dioxide chaperon efficiency for the reaction $H+O_2+M \rightarrow HO_2+M$ from ignition delay times behind reflected shock waves, NASA TM-100125.
- Bresson A., Grish F., Magre Ph. (2001a)
Imagerie de fluorescence induite par laser de OH et thermométrie DRASC dans une couche de mélange supersonique réactive, 37^e Colloque d'Aérodynamique Appliquée « Aérodynamique et Propulsion des véhicules à grande vitesse », Arcachon, France, 28-30 mars.
- Bresson A., Bouchardy P., Magre Ph., Grisch F. (2001b)
OH/acetone PLIF and CARS thermometry in a supersonic reactive layer, AIAA 2001-1759, 10th AIAA/NAL/NASDA/ISAS International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Kyoto, Japan, 24-27 April.
- Burrows M. C., Kurkov A. P. (1973)
Analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in a vitiated air stream, TM X-2828, NASA.
- Candel S. (1990)
Mécanique des fluides, Dunod Université, Bordas, Paris.
- Capp S. P., Hussein H. J., George W. K. (1990)
Velocity measurements in a high Reynolds number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet, Technical Report No. 123, Turbulence Research Laboratory, University of Buffalo, SUNY.
- Chaineray G., Vuillot F., Scherrer D. (2003)
MSD 3.1 Notice d'utilisation, ONERA.
- Chakraborty D., Paul P. J., Mukunda H. S. (2000)
Evaluation of combustion models for high speed H₂/air confined mixing layer using DNS data, *Combustion and Flame*, Vol. 121, p. 195-209.
- Chelin P., Camy-Peyret C., Pina V., Alkhoury P., Davidenko D. (2005)
Emission spectroscopy of hot water vapor from H₂-air deflagrative combustion in a closed cylinder, *Combustion and Flame*, Vol. 140, p. 319-331.

- Chen J.-Y., Kollmann W. (1990)
Chemical models for pdf modeling of hydrogen-air nonpremixed turbulent flames, *Combustion and Flame*, Vol. 79, p. 75-99.
- Chen J.-Y. (1997)
Development of reduced mechanisms for numerical modelling of turbulent combustion, *Workshop "Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics"*, CERMICS-ENPC Cite Descartes - Champus sur Marne, France, 2 September.
- Cheng R. K., Oppenheim A. K. (1984)
Autoignition of methane-hydrogen mixtures, *Combustion and Flame*, Vol. 58, p. 125-139.
- Cheng T. S., Wehrmeyer J. A., Pitz R. W., Jarrett O., Jr., Northam G. B. (1994)
Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame, *Combustion and Flame*, Vol. 99, p. 157-173.
- Chidambaram N., Dash S. M., Kenzakowski D. C. (2001)
Scalar variance transport in the turbulence modeling of propulsive jets, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 1, p. 79-84.
- Cohen L. S., Guile R. N. (1969)
Investigation of the mixing and combustion of turbulent compressible free jets, CR-1473, NASA.
- Colket M. B., Spadaccini L. J. (2001)
Scramjet fuels autoignition study, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 2, p. 315-323.
- Collin G., Dessornes O., Magre Ph. (1997)
Installations d'essais pour les recherches fondamentales en combustion, *AGARD Conference on Future Aerospace Technology in the Service of the Alliance*, Paris, 14-16 April.
- Cottrell D. C. (1996)
Investigation of compressible two-stream planar mixing layers, M.S. Thesis, Purdue University, School of Mechanical Engineering, West Lafayette, IN.
- Cottrell D. C., Plesniak M. W. (2001)
Sensitivity of mixed subsonic-supersonic turbulent mixing layers, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 4, p. 823-835.
- Curran E. T. (2001)
Scramjet engines: The first forty years, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 6, p. 1138-1148.
- Curtet R. (1957)
Contribution à l'étude théorique des jets de révolution, *Extrait des comptes rendus des séances de l'Académie des Sciences*, Tome 244, p. 1450-1453.
- Cutler A. D., Carty A. A., Doerner S. E., Diskin G. S., Drummond J. P. (1999)
Supersonic coaxial jet experiment for CFD code validation, AIAA-99-3588, *30th AIAA Fluid Dynamics Conference*, Norfolk, VA, 28 June – 1 July.
- Cutler A. D., White J. A. (2001)
An experimental and CFD study of a supersonic coaxial jet, AIAA-2001-0143, *39th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 8-11 January.

- Cutler A. D., Danehy P. M., Springer R. R., DeLoach R., Capriotti D. P. (2002)
CARS thermometry in a supersonic combustor for CFD code validation, AIAA-2002-0743, *40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 14-17 January.
- Dagaut P. (2002)
On the kinetics of hydrocarbon oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 4, p. 2079–2094.
- Dagaut P., Nicolle A. (2005)
Experimental and detailed kinetic modeling study of hydrogen-enriched natural gas blend oxidation over extended temperature and equivalence ratio ranges, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, p. 2631–2638.
- Dancey C. L. (1996)
The turbulent flow field downstream of an axisymmetric Mach 2 supersonic burner: LDA measurements, AIAA 96-3073, *32nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Lake Buena Vista, FL, 1-3 July.
- Dash S. M., Sinha N., Kenzakowski D. C. (1992)
The critical role of turbulence modeling in the prediction of supersonic jet structure for acoustic applications, DLR/AIAA 92-02-106, *14th AeroAcoustics Conference*, Aachen, Germany, 11-14 May.
- Dash S. M., Kenzakowski D. C., Lee R. A., Sinha N., (1995)
Simulation of hot laboratory jets – modeling advances and data comparisons, CEAS/AIAA-95-072, *First Joint CEAS/AIAA Aeroacoustics Conference*, Munich, Germany, 12-15 June.
- Dash S. M., Kenzakowski D. C. (1996)
Future directions in turbulence modeling for jet flow simulation, AIAA 96-1775, *2nd AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, Penn State, PA, 6-8 May.
- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Gaffié D. (2002)
Kinetic mechanism validation and numerical simulation of supersonic combustion of methane-hydrogen fuel, AIAA-2002-5207, *11th AIAA/AAAF International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Orléans, France, 29 September-4 October.
- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Magre P. (2003)
Numerical simulation of hydrogen supersonic combustion and validation of computational approach, AIAA-2003-7033, *12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Norfolk, VA, 15-19 December.
- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Gaffié D. (2004)
Numerical simulations of supersonic combustion of methane-hydrogen fuel in an experimental combustion chamber, *Parallel Computational Fluid Dynamics – Advanced Numerical Methods, Software and Applications*, B. Chetverushkin, A. Ecer, J. Periaux, N. Satofuka, P. Fox, (Eds.), Elsevier B.V., p. 529-536.
- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Magre P. (2005a)
Ignition and combustion of hydrogen and methane in a model supersonic combustion chamber, *Proceedings of the European Combustion Meeting, ECM2005*, Louvain-la-Neuve, Belgium, 3-6 April.
- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Magre P. (2005b)
Numerical modeling of inert and reacting compressible turbulent jets, AIAA-2005-3237, *13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Capua, Italy, 16-20 May.

- Davidenko D. M., Gökalp I., Dufour E., Magre P. (2005c)
Numerical simulation of supersonic combustion with CH₄-H₂ fuel, *European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, Moscow, Russia, 4-7 July.
- Del Álamo G., Williams F. A., Sánchez A. L. (2004)
Hydrogen-oxygen induction times above crossover temperatures, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 176, p. 1599-1626.
- Drummond J. P., Diskin G. S., Cutler A. D. (2002)
Fuel-air mixing and combustion in scramjets, AIAA-2002-3878, 38th *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Indianapolis, IN, 7-10 July.
- Dufour E., Bouchez M. (2001)
Computational analysis of a kerosene-fuelled scramjet, AIAA-2001-1817, 10th *AIAA/NAL/NASDA/ISAS International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Kyoto, Japan, 24-27 April.
- Dutton J. C. (1997)
Compressible turbulent free shear layers, *Turbulence in Compressible Flows*, AGARD Report 819, p. (2-1)-(2-42).
- Ebrahimi H. (1995)
CFD validation and evaluation for reacting flows, part III, AIAA 95-0735, 33rd *AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 9-12 January.
- Eggers J. M. (1966)
Velocity profiles and eddy viscosity distributions downstream of a Mach 2.22 nozzle exhausting to quiescent air, NASA TN D-3601.
- Eggers J. M. (1971)
Turbulent mixing of coaxial compressible hydrogen-air jets, NASA TN D-6487.
- Egolfopoulos F. N., Dimotakis P. E. (1998)
Non-premixed hydrocarbon ignition at high strain rates, 27th *Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 641-648.
- Eklund D. R., Drummond J. P., Hassan H. A. (1990)
Calculation of supersonic turbulent reacting coaxial jets, *AIAA Journal*, Vol. 28, No. 9, p. 1633-1641.
- Engblom W. A., Frate F. C., Nelson C. C. (2005)
Progress in validation of Wind-US for ramjet/scramjet combustion, AIAA-2005-1000, 43rd *AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 10-13 January.
- Evans J. S., Schexnayder C. J., Jr., Beach H. L., Jr., (1978)
Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows, TP-1169, NASA.
- Evans J. S., Schexnayder C. J., Jr. (1979)
Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames, *AIAA Journal*, Vol. 18, No. 2, p. 188-193.
- Falempin F., Scherrer D., Laruelle G., Rostand Ph., Fratacci G., Schultz J. L. (1998)
French hypersonic propulsion program PREPHA – Results, lessons & perspectives, AIAA 98-1565, 8th *AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Norfolk, VA, 27-30 April.

- Falempin F., Bouchez M., Serre L., Bruno C., Hendrick P. (2005)
Air-breathing propulsion for future space launchers proposal for a minimum R&T program on for Europe, AIAA-2005-3362, 13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Capua, Italy, 16-20 May.
- Falempin F., Serre L. (2005)
LEA flight test program – Status in 2005, *European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, Moscow, Russia, 4-7 July.
- Favre A. (1965)
Équations des gaz turbulents compressibles, *Journal de Mécanique*, Vol. 4, No. 3, p. 361-390.
- Frenklach M., Bornside D. E. (1984)
Shock-initiated ignition in methane-propane mixtures, *Combustion and Flame*, Vol. 56, p. 1-27.
- Frenklach M., Wang H., Rabinowitz M. J. (1992)
Optimization and analysis of large chemical kinetic mechanisms using the solution mapping method – combustion of methane, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 18, p. 47-73.
- Frousakis C. E., Boulouchos K. (2000)
Analysis and reduction of the CH₄-air mechanism at lean conditions, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 159, p. 281-303.
- Gaffié D., Wepler U., Magre Ph., Koschel W., Novelli Ph. (2001)
Numerical investigation of supersonic reacting hydrogen jets in a hot air coflow, AIAA-2001-1864, 10th AIAA/NAL/NASDA/ISAS International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Kyoto, Japan, 24-27 April.
- Gardiner W. C., Jr. (1984)
Introduction to combustion modeling, *Combustion Chemistry*, W. C. Gardiner, Jr. (Ed.), Springer-Verlag, New York.
- Génin F., Chernyavsky B., Menon S. (2003)
Large eddy simulation of scramjet combustion using a subgrid mixing/combustion model, AIAA-2003-7035, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Norfolk, VA, 15-19 December.
- George E., Magre Ph., Sabel'nikov V. (2005)
Self-ignition of hydrogen-hydrocarbons mixtures in a hot supersonic confined coflow of air, AIAA-2005-3393, 13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Capua, Italy, 16-20 May.
- Gerlinger P., Möbus H., Brüggemann D. (2001)
An implicit multigrid method for turbulent combustion, *Journal of Computational Physics*, Vol. 167, p. 247-276.
- Gicquel O., Darabiha N., Thévenin D. (2000)
Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 28, p. 1901-1908.
- Gilbert R. G., Luther K., Troe J. (1983)
Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. II. Weak collision rate constants, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, Vol. 87, p. 169-177.

- Goebel S. G., Dutton J. C., Krier H., Renie J. P. (1990)
Mean and turbulent velocity measurements of supersonic mixing layers, *Experiments in Fluids*, Vol. 8, p. 263-272.
- Goebel S. G., Dutton J. C. (1991)
Experimental study of compressible turbulent mixing layers, *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 4, p. 538-546.
- Gougeon L., Fedioun I., Gökalp I. (2005)
Direct numerical simulation of premixed or diffusion hydrogen/air flames, *Proceedings of the European Combustion Meeting, ECM2005*, Louvain-la-Neuve, Belgium, 3-6 April.
- Gougeon L., Fedioun I. (2005)
DNS/MILES of reacting air/H₂ diffusion jets, *DLES6*, Poitiers, France, 12-14 September.
- Griffiths J. F. (1995)
Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 21, p. 25-107.
- Gruber M. R., Messersmith N. L., Dutton J. C. (1993)
Three-dimensional velocity field in a compressible mixing layer, *AIAA Journal*, Vol. 31, No. 11, p. 2061-2067.
- Halter F., Chauveau C., Djebaïli-Chaumeix N., Gökalp I. (2005a)
Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane-hydrogen-air mixtures, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, p. 2631-2638.
- Halter F., Cohé C., Chauveau C., Gökalp I. (2005b)
Characterization of the effects of hydrogen addition in lean premixed methane/air turbulent flames at high pressure, *Proceedings of the European Combustion Meeting, ECM2005*, Louvain-la-Neuve, Belgium, 3-6 April.
- Han B., Sung C. J., Nishioka M. (2004)
Effects of vitiated air on hydrogen ignition in a supersonic laminar mixing layer, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 176, No. 3, p. 305-330.
- Harten A. (1984)
On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes, *Journal of Numerical Analysis*, Vol. 21, p. 1-23.
- Hewson J. C., Bollig M. (1996)
Reduced mechanisms for NO_x emissions from hydrocarbon diffusion flames, *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 2171-2179.
- Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., Tanaka H., Inami K. (1999)
Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation, *Combustion and Flame*, Vol. 118, p. 340-358.
- Hilbert R., Tap F., Veynante D., Thévenin D. (2002)
A new modeling approach for the autoignition of a non-premixed turbulent flame using DNS, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 29, p. 2079-2085.
- Huang J., Hill P. G., Bushe W. K., Munshi S. R. (2004)
Shock-tube study of methane ignition under engine-relevant conditions: experiments and modeling, *Combustion and Flame*, Vol. 136, p. 25-42.

- Hughes K. J., Turányi T., Clague A. R., Pilling M. J. (2001)
Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane, *Int. J. Chem. Kinet.*, Vol. 33, No. 9, p. 513-538.
- Jachimowski C. J., Houghton W. M. (1971)
Shock-tube study of the initiation process in the hydrogen-oxygen reaction, *Combustion and Flame*, Vol. 17, p. 25-30.
- Jachimowski C. J. (1988)
An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion, NASA Technical Paper 2791.
- Jackson T. L., Grosch C. E. (1990)
Absolute/convective instabilities and the convective Mach number in a compressible mixing layer, *Physics of Fluids A*, Vol. 2, No. 6, p. 949-954.
- Jarrett O., Jr., Cutler A. D., Antcliff R. R., Chitsomboon T., Dancey C. L., Wang J. A. (1988)
Measurements of temperature, density, and velocity in supersonic reacting flow for CFD code validation, *25th JANAF Combustion Meeting*, CPIA Publication 498, Vol. 1, p. 357-364.
- Jiang B., Ingram D., Causon D., Saunders R. (1995)
A global simulation method for obtaining reduced reaction mechanisms for use in reactive blast flows, *Shock Waves*, Vol. 5, p. 81-88.
- Ju Y., Niioka T. (1994)
Reduced kinetic mechanism of ignition for nonpremixed hydrogen-air in a supersonic mixing layer, *Combustion and Flame*, Vol. 99, p. 240-246.
- Julien J.-R. (1997)
Accélération de la convergence vers une solution stationnaire des calculs en aérothermique, Thèse de l'Université Blaise Pascal, France.
- Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A. (1989)
CHEMKIN-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics, Report SAND89-8009, Sandia National Laboratories, Livermore, California.
- Konnov A. A. (2004)
Refinement of the kinetic mechanism of hydrogen combustion, *Khimicheskaya Fizika*, Vol. 23, No. 8, p. 5-18.
- Kozusko F., Lasseigne D. G., Grosch C. E., Jackson T. L. (1996)
The stability of compressible mixing layers in binary gases, *Physics of Fluids*, Vol. 8, No. 7, p. 1954-1963.
- Krishnan K. S., Ravikumar R. (1981)
Ignition delay of methane in reflected shock waves, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 24, p. 239-245.
- Kundu K. P., Penko P. F., Yang S.-L. (1998)
Reduced reaction mechanisms for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels, AIAA-98-0803, *36th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 12-15 January.
- Lakshmanan B., Abdol-Hamid K. S. (1994)
Investigation of supersonic jet plumes using an improved two-equation turbulence model, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 10, No. 5, p. 736-741.

- Lamoureux N., Paillard C.-E., Vaslier V. (2002)
Low hydrocarbon mixtures ignition delay times investigation behind shock waves, *Shock Waves*, Vol. 11, p. 309-322.
- Lardjane N. (2002)
Étude théorique et numérique des écoulements cisailés libres à masse volumique fortement variable, Thèse, Université d'Orléans, France.
- Lauder B. E., Sharma B. I. (1974)
Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc, *Letters in Heat and Mass Transfer*, Vol. 1, No. 2, p. 131-138.
- Law C. K. (1993)
A compilation of experimental data on laminar burning velocities, in *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, N. Peters, B. Rogg (Eds.), Series "Lecture Notes in Physics", m15, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, p. 15-26.
- Law C. K., Sung C. J., Wang H. (2000)
On the development of detailed and reduced mechanisms for combustion modeling, AIAA-2000-0860, 38th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, 10-13 January.
- Lepage V. (2000)
Élaboration d'une méthode de réduction de schémas cinétiques détaillées. Application aux mécanismes de combustion du gaz naturel et du n-décane, Thèse, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), France.
- Lewis M. J. (2001)
Significance of fuel selection for hypersonic vehicle range, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 6, p. 1214-1221.
- Li S. C., Williams F. A. (2002)
Reaction mechanisms for methane ignition, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 124, p. 471-480.
- Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F. L. (2004)
An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion, *Int. J. Chem. Kinet.*, Vol. 36, p. 566-575.
- Libby P. A., Williams F. A. (1980)
Fundamental aspects, *Turbulent Reacting Flows*, Topics in Applied Physics, Vol. 44, P. A. Libby, F. A. Williams (Eds.), Springer-Verlag, Berlin.
- Libby P. A., Williams F. A. (1994)
Fundamental aspects and a review, *Turbulent Reacting Flows*, P. A. Libby, F. A. Williams (Eds.), Academic press, London.
- Lifshitz A., Scheller K., Burcat A., Skinner G. B. (1971)
Shock-tube investigation of ignition in methane-oxygen-argon mixtures, *Combustion and Flame*, Vol. 16, p. 311-321.
- Lindemann F. (1922)
Trans. Faraday Soc., Vol. 17, p. 598.
- Lissianski V. V., Gardiner W. C., Zamansky V. M. (1995)
A generalized intermediate approach to combustion chemistry: application to methane ignition and flame propagation, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 110, p. 169-183.

- Lissianski V. V., Zamansky V. M., Gardiner W. C. Jr. (2000)
Combustion Chemistry Modelling, in *Gas-Phase Combustion Chemistry*, W. C. Gardiner Jr. (Ed.), Springer-Verlag, New-York, p. 1-123.
- Løvås T., Amnéus P., Mauss F., Mastorakos E. (2002)
Comparison of automatic reduction procedures for ignition chemistry, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 29, p. 1387-1393.
- Luche J., Reuillon M., Boettner J.-C., Cathonnet M. (2004)
Reduction of large detailed kinetic mechanisms: application to kerosene/air combustion, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 176, p. 1935-1963.
- Lutz A. E., Kee R. J., Miller J. A. (1988)
SENKIN: A Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis, Report SAND87-8248, Sandia National Laboratories, Livermore, California.
- Lutz A. E., Rupley F. M., Kee R. J., Reynolds W. C. (1998)
EQUIL: A CHEMKIN implementation of STANJAN for computing chemical equilibria, Reaction Design, Inc., San Diego, California.
- Maas U., Pope S. B. (1992)
Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space, *Combustion and Flame*, Vol. 88, p. 239-264.
- Magre Ph., Collin G., Pin O., Badie J.-M., Olalde G., Clément M. (1998)
Temperature measurements by CARS and intrusive probe in an air-hydrogen supersonic combustion, AIAA Paper 98-1621, 8th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Norfolk, VA, 27-30 April.
- Magre Ph., Bouchardy P. (2000)
Nitrogen and hydrogen coherent anti-Stokes Raman scattering thermometry in a supersonic reactive mixing layer, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 28, p. 697-703.
- Marshall L. A., Bahm C., Corpening G. P., Sherrill R. (2005)
Overview with results and lessons learned of the X-43A Mach 10 flight, AIAA-2005-3336, 13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Capua, Italy, 16-20 May.
- Massias A., Diamantis D., Mastorakos E., Goussis D. A. (1999)
An algorithm for the construction of global reduced mechanisms with CSP data, *Combustion and Flame*, Vol. 117, p. 685-708.
- McGuirk J. J., Rodi W. (1979)
The calculation of three-dimensional turbulent free jets, 1st Symposium on Turbulent Shear Flows, F. Durst, B. E. Launder, F. W. Schmidt, J. W. Whitelaw (Eds.), p. 71-83.
- Miyama H., Takeyama T. (1964)
Kinetics of hydrogen-oxygen reaction in shock waves, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 41, No. 8, p.2287-2290.
- Möbus H., Gerlinger P., Brüggemann D. (2001)
Comparison of Eulerian and Lagrangian Monte Carlo PDF methods for turbulent diffusion flames, *Combustion and Flame*, Vol. 124, p. 519-534.
- Möbus H., Gelniger P., Brüggemann D. (2003)
Scalar and joint scalar-velocity-frequency Monte Carlo PDF simulation of supersonic combustion, *Combustion and Flame*, Vol. 132, p. 3-24.

- Morgans R. C., Dally B. B., Nathan G. J., Lanspeary P. V., Fletcher D. F. (1999)
Application of the revised Wilcox (1998) $k-\omega$ turbulence model to a jet in co-flow, *Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australia, 6-8 December, p. 479-484.
- Morse A. P. (1977)
Axisymmetric turbulent shear flows with and without swirl, Ph.D. thesis, London University, England.
- Mueller M. A., Kim T. J., Yetter R. A., Dryer F. L. (1999a)
Flow reactor studies and kinetic modeling of the H_2/O_2 reaction, *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 31, p. 113-125.
- Mueller M. A., Yetter R. A., Dryer F. L. (1999b)
Flow reactor studies and kinetic modeling of the $H_2/O_2/NO_x$ and $CO/H_2O/O_2/NO_x$ reactions, *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 31, p. 705-724.
- Mueller M. A., Gatto J. L., Yetter R. A., Dryer F. L. (2000)
Hydrogen/nitrogen dioxide kinetics: derived rate data for the reaction $H_2 + NO_2 = HONO + H$ at 833 K, *Combustion and Flame*, Vol. 120, p. 589-594.
- Mulholland J. A., Sarofim A. F., Beér J. M. (1992)
On the derivation of global ignition kinetics from a detailed mechanism for simple hydrocarbon oxidation, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 87, p. 139-156.
- Novelli Ph., Koschel W. (2001)
Progress of the JAPHAR cooperation between ONERA and DLR on hypersonic airbreathing propulsion, AIAA-2001-1870, *10th AIAA/NAL/NASDA/ISAS International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Kyoto, Japan, 24-27 April.
- Ó Conaire M., Curran H. J., Simmie J. M., Pitz W. J., Westbrook C. K. (2004)
A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation, *Int. J. Chem. Kinet.*, Vol. 36, p. 603-622.
- Oevermann M. (2000)
Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a SCRAMJET using flamelet modeling, *Aerosp. Sci. Technol.*, Vol. 4, p. 463-480.
- Pagé J. (1998)
Contribution à l'étude des jets turbulents axisymétriques à masse volumique variable, Thèse, Université d'Orléans, France.
- Paillard C., Dupré G. (1991)
Étude des délais d'inflammation de mélanges hydrogène/air et des constantes de vitesse de réaction par la méthode du tube à choc, *1^{er} Colloque du Programme de Recherches Concertées "Combustion dans les superstorecteurs"*, CNRS-Aérospatiale-INRIA-ONERA-SEP-SNECMA, Paris, 21-22 octobre.
- Panchapakesan N. R., Lumley J. L. (1993)
Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. Part 1. Air jet, *J. Fluid Mech.*, Vol. 246, p. 197-223.
- Pao S. P., Abdol-Hamid K. S. (1996)
Numerical simulation of jet aerodynamics using the three-dimensional Navier-Stokes code PAB3D, NASA Technical Paper 3596.
- Papamoschou D. (1991)
Structure of the compressible turbulent shear layer, *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 5, p. 680-681.

- Peters N. (1991)
Reducing mechanisms, in *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, M. D. Smooke (Ed.), Series "Lecture Notes in Physics", 384, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, p. 48-67.
- Peters N., Rogg B. (Eds.) (1993)
Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, Series "Lecture Notes in Physics", m15, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Petersen E. L., Röhrig M., Davidson D. F., Hanson R. K., Bowman C. T. (1996)
High-pressure methane oxidation behind reflected shock waves, *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 799-806.
- Petersen E. L., Davidson D. F., Hanson R. K. (1999a)
Kinetics modeling of shock-induced ignition in low-dilution CH₄/O₂ mixtures at high pressures and intermediate temperatures, *Combustion and Flame*, Vol. 117, p. 272-290.
- Petersen E. L., Davidson D. F., Hanson R. K. (1999b)
Ignition delay times of ram accelerator CH₄/O₂/diluent mixtures, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 15, No. 1, p. 82-91.
- Petersen E. L., Hanson R. K. (1999)
Reduced kinetics mechanisms for ram accelerator combustion, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 15, No. 4, p. 591-600.
- Petersen E. L., Hanson R. K. (2001)
Nonideal effects behind reflected shock waves in a high-pressure shock tube, *Shock Waves*, Vol. 10, p. 405-420.
- Petersen E. L., Hall J. M., de Vries J., Amadio A. R., Smith S. D., Crofton M. W. (2005)
Acceleration of shock-induced ignition in CH₄/air and CO/air mixtures using hydrogen addition, *20th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, 31 July – 5 August, Montreal, Canada.
- Pope S. B. (1978)
An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly, *AIAA Journal*, Vol. 16, No. 3, p. 279-281.
- Pope S. B. (1997)
Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation, *Combust. Theory Modelling*, Vol. 1, p. 41-63.
- Pui N. K., Gartshore I. S. (1979)
Measurements of the growth rate and structure in plane turbulent mixing layers, *J. Fluid Mech.*, Vol. 91, Part 1, p. 111-130.
- Quintilla V., Magre Ph., Scherrer D., Destors P.-E., Dufour E. (2005)
Experimental and numerical investigation of supersonic reacting hydrogen/methane jets in hot air co-flows, AIAA-2005-3301, *13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, Capua, Italy, 16-20 May.
- Revel J., Boettner J. C., Cathonnet M., Bachman J. C. (1994)
Derivation of a global chemical kinetic mechanism for methane ignition and combustion, *Journal de Chimie Physique*, Vol. 91, p. 365-382.
- Reynolds W. C. (1986)
The element potential method for chemical equilibrium analysis: Implementation in the interactive program STANJAN, Stanford University, California.

Rodi W. (1972)

The prediction of free turbulent boundary layers by use of a two-equation model of turbulence, Ph.D. thesis, London University, England.

Rodriguez C. G., Cutler A. D. (2003)

CFD analysis of the SCHOLAR scramjet model, AIAA-2003-7039, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Norfolk, VA, 15-19 December.

Rogers R. C., Chinitz W. (1983)

Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations, *AIAA Journal*, Vol. 21, No. 4, p. 586-592.

Sánchez A. L., Iglesias I., Liñán A. (1998)

An asymptotic analysis of chain-branching ignition in the laminar wake of a splitter plate separating streams of hydrogen and oxygen, *Combust. Theory Modeling*, Vol. 2, p. 259-271.

Sander T., Lyubar A., Sattelmayer T., Shafranovsky E. A. (2004)

Influence of the burnout in vitiators on ignition limits in scramjet combustors, *AIAA Journal*, Vol. 42, No. 2, p. 319-325.

Sarkar S., Lakshmanan B. (1991)

Application of a Reynolds stress turbulence model to the compressible shear layer, *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 5, p. 743-749.

Sarkar S. (1992)

The pressure-dilatation correlation in compressible flows, *Physics of Fluids A*, Vol. 4, No. 12, p. 2674-2682.

Schefer R. W., Wicksall D. M., Agrawal A. K. (2002)

Combustion of hydrogen-enriched methane in a lean premixed swirl-stabilized burner, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 29, p. 843-851.

Schott G. L., Kinsey J. L. (1958)

Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen-oxygen reaction, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 29, No. 5, p.1177-1182.

Seery D. J., Bowman C. T. (1970)

An experimental and analytical study of methane oxidation behind shock waves, *Combustion and Flame*, Vol. 14, p. 37-48.

Serre L., Falempin F. (2003)

PROMETHEE: The French military hypersonic propulsion program, AIAA-2003-6950, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, VA, 15-19 December.

Serre L. (2005)

ONERA potential for scramjet ground testing up to Mach 12, AIAA-2005-3330, 13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Capua, Italy, 16-20 May.

Seshadri K., Bai X. S., Pitsch H., Peters N. (1998)

Asymptotic analysis of the structure of moderately rich methane-air flames, *Combustion and Flame*, Vol. 113, p. 589-602.

Simmie J. M. (2003)

Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 29, p. 599-634.

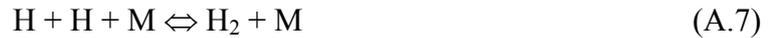
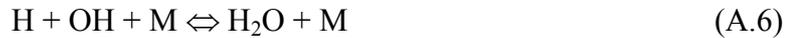
- Skinner G. B., Ringrose G. H. (1965)
Shock-tube experiments on inhibition of the hydrogen-oxygen reaction, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 43, No. 11, p. 4129-4133.
- Slack M., Grillo A. (1977)
Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen dioxide, NASA CR-2896.
- Smooke M. D. (Ed.) (1991)
Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames, Series "Lecture Notes in Physics", 384, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Spadaccini L. J., Colket M. B. (1994)
Ignition delay characteristics of methane fuels, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 20, p. 431-460.
- Spiegler E., Wolfshtein M., Manheimer-Timmat Y. (1976)
A model of unmixedness for turbulent reacting flows, *Acta Astronautica*, Vol. 3, p. 265-280.
- Stewart P. H., Smith G. P., Golden D. M. (1989)
The pressure and temperature dependence of methane decomposition, *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol. 21, p. 923-945.
- Ströhle J., Myhrvold T. (2005)
An analysis of detailed reaction mechanisms for lean hydrogen combustion at elevated pressures, *Proceedings of the European Combustion Meeting*, ECM2005, Louvain-la-Neuve, Belgium, 3-6 April.
- Sung C. J., Li B., Law C. K., Wang H. (1998)
Structure and sooting limits in counterflow methane/air and propane/air diffusion flames from 1 to 5 atmospheres, *27th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 1523-1530.
- Sung C. J., Li J. G., Yu G., Law C. K. (1999)
Chemical kinetics and self-ignition in a model supersonic hydrogen-air combustor, *AIAA Journal*, Vol. 37, No. 2, p. 208-214.
- Tam C. K. W., Ganesan A. (2004)
Modified k - ϵ turbulence model for calculating hot jet mean flows and noise, *AIAA Journal*, Vol. 42, No. 1, p. 26-34.
- Tan Y., Dagaut P., Cathonnet M., Boettner J.-C. (1994a)
Acetylene oxidation in a JSR from 1 to 10 atm and comprehensive kinetic modeling, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 102, p. 21-55.
- Tan Y., Dagaut P., Cathonnet M., Boettner J.-C. (1994b)
Oxidation and ignition of methane-propane and methane-ethane-propane mixtures: experiments and modeling, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 103, p. 133-151.
- Tan Y., Dagaut P., Cathonnet M., Boettner J.-C., Bachman J. S., Carlier P. (1994c)
Natural gas and blends oxidation and ignition: experiments and modeling, *25th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 1563-1569.
- Tan Y., Dagaut P., Cathonnet M., Boettner J.-C. (1995)
Pyrolysis, oxidation and ignition of C_1 and C_2 hydrocarbons: experiments and modeling, *J. Chim. Phys.*, Vol. 92, p. 726-746.

- Tan Y., Fotache C. G., Law C. K. (1999)
Effects of NO on the ignition of hydrogen and hydrocarbons by heated counterflow air, *Combustion and Flame*, Vol. 119, p. 346-355.
- Thies A. T., Tam C. K. W. (1996)
Computation of turbulent axisymmetric and nonaxisymmetric jet flows using the k - ϵ model, *AIAA Journal*, Vol. 34, No. 2, p. 309-316.
- Tomlin A. S., Turányi T., Pilling M. J. (1997)
Mathematical tools of the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms, in *Low-temperature combustion and autoignition*, M. J. Pilling and G. Hancock (Eds.), *Comprehensive chemical kinetics*, Vol. 35, Elsevier, Amsterdam, p. 293-437.
- Treviño C., Méndez F. (1992)
Reduced kinetic mechanism for methane ignition, *24th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, p. 121-127.
- Turns S. R. (1996)
An introduction to combustion: concepts and applications, *Mechanical Engineering Series*, McGraw-Hill, International Editions, Singapore.
- Turpin G., Troyes J. (2000)
Validation of a two-equation turbulence model for axisymmetric reacting and non-reacting flows, AIAA-2000-3463, *36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Huntsville, AL, 16-19 July.
- Vachon M. J., Grindle T. J., John C. W. St., Dowdell D. B. (2005)
X-43A fluid and environmental systems: ground and flight operation and lessons learned, AIAA-2005-3337, *13th AIAA/CIRA International Space Planes and Hypersonics Systems and Technologies*, Capua, Italy, 16-20 May.
- Vajda S., Valko P., Turányi T. (1985)
Principal component analysis of kinetic models, *Int. J. Chem. Kinet.*, Vol. 17, p. 55-81.
- Van Leer B. (1979)
Towards the ultimate conservative difference scheme V: A second order sequel to Godunov's method, *Journal of Computational Physics*, Vol. 32, p. 101-136.
- Van Oijen J. A., Lammers F. A., de Goey L. P. H. (2001)
Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds, *Combustion and Flame*, Vol. 127, p. 2124-2134.
- Voisin D. (1997)
Cinétique chimique d'oxydation d'hydrocarbures et obtention d'un modèle pour la combustion du kérosène, Thèse, Université d'Orléans, France.
- Waidmann W., Alff F., Böhm M., Brummund U., Clauß W., Oswald M. (1995)
Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber, *Space Technol.*, Vol. 15, No. 6, p. 421-429.
- Wang H., Frenklach M. (1991)
Detailed reduction of reaction mechanisms for flame modeling, *Combustion and Flame*, Vol. 87, p. 365-370.
- Wang B. L., Olivier H., Grönig H. (2003)
Ignition of shock-heated H₂-air-steam mixtures, *Combustion and Flame*, Vol. 133, p. 93-106.

- Weisgerber H., Martinuzzi R., Brummund U., Magre Ph. (2001)
Mesures de vitesse par PIV dans une combustion supersonique hydrogène-air à Mach 2, 37^e Colloque d'Aérodynamique Appliquée « Aérodynamique et Propulsion des véhicules à grande vitesse », Arcachon, France, 28-30 mars.
- Westbrook C. K., Dryer F. L. (1981)
Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 27, p. 31-43.
- White D. R., Moore G. E. (1965)
Structure of gaseous detonation. IV. Induction zone studies in H₂-O₂ and CO-O₂ mixtures, 10th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 785-795.
- White D. R. (1967)
Density induction times in very lean mixtures of D₂, H₂, C₂H₂, and C₂H₄, with O₂, 11th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 147-154.
- Wilcox D. C. (1998)
Turbulence Modeling for CFD, 2nd ed., DCW Industries, Inc.
- Wynanski I., Fiedler H. (1969)
Some measurements in the self-preserving jet, *J. Fluid Mech.*, Vol. 38, p. 577-612.
- Xiao X., Edwards J. R., Hassan H. A., Cutler A. D. (2005)
Variable turbulent Schmidt number formulation for scramjet applications, AIAA-2005-1099, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, NV, 10-13 January.
- Yuan T., Wang C., Yu C.-L., Frenklach M., Rabinowitz M. J. (1991)
Determination of the rate coefficient for the reaction H+O₂ → OH+O by a shock-tube/laser absorption/detailed modeling study, *J. Phys. Chem.*, Vol. 95, p. 1258-1265.
- Yungster S., Rabinowitz M. J. (1994)
Computation of shock-induced combustion using a detailed methane-air mechanism, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 10, No. 5, p. 609-617.
- Zamansky V. M., Borisov A. A. (1992)
Promotion of high-temperature self-ignition, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 18, p. 297-325.
- Zeman O. (1990)
Dilatational dissipation: the concept and application in modeling compressible mixing layers, *Physics of Fluids A*, Vol. 2, No. 2, p. 178-188.

Annexe A. Mécanismes simplifiés pour l'autoinflammation de H₂ dans de l'air pur

Les mécanismes présentés ci-dessous sont composés de 6 espèces réactives H₂, O₂, H₂O, H, O, OH et de 7 réactions :



Le tableau A.1 regroupe les paramètres d'Arrhenius des constantes de vitesse correspondant aux mécanismes publiés par Eklund et al. (1990) et par Baurle et Girimaji (2003) ainsi qu'au mécanisme de l'ONERA. Les constantes de vitesse sont spécifiées pour les sens direct (« f ») et inverse (« b ») des réactions. Les unités de mesure pour le facteur pré-exponentiel A sont mol·s·cm³. L'énergie d'activation, présentée sous la forme E/R_u , est mesurée en K. Les facteurs d'efficacité du 3^e corps dans les réactions (A.6) et (A.7) sont donnés dans le tableau A.2.

Tableau A.1. Paramètres d'Arrhenius des réactions directes et inverses.

Réac- tion	Eklund			Baurle			ONERA		
	A	b	E/R_u	A	b	E/R_u	A	b	E/R_u
1f	$1.700 \cdot 10^{13}$	0.0	24233	$1.700 \cdot 10^{13}$	0.0	24157	$1.700 \cdot 10^{13}$	0.0	24044
1b	$2.421 \cdot 10^{10}$	0.377	14656	$2.421 \cdot 10^{10}$	0.377	14580	$4.032 \cdot 10^{10}$	0.317	14554
1f	$1.420 \cdot 10^{14}$	0.0	8254	$1.200 \cdot 10^{17}$	-0.91	8311	$1.987 \cdot 10^{14}$	0.0	8456
1b	$3.181 \cdot 10^{11}$	0.421	-430	$2.688 \cdot 10^{14}$	-0.489	-374	$8.930 \cdot 10^{11}$	0.338	-118
1f	$3.160 \cdot 10^7$	1.8	1525	$2.200 \cdot 10^{13}$	0.0	2592	$1.024 \cdot 10^8$	1.6	1660
1b	$1.330 \cdot 10^9$	1.529	9459	$9.257 \cdot 10^{14}$	-0.271	10526	$7.964 \cdot 10^8$	1.528	9300
1f	$2.070 \cdot 10^{14}$	0.0	6920	$5.060 \cdot 10^4$	2.67	3166	$5.119 \cdot 10^4$	2.67	3163
1b	$1.320 \cdot 10^{14}$	-0.044	6028	$3.227 \cdot 10^4$	2.626	2273	$2.701 \cdot 10^4$	2.649	2240
1f	$5.500 \cdot 10^{13}$	0.0	3523	$6.300 \cdot 10^{12}$	0.0	549	$1.506 \cdot 10^9$	1.14	50
1b	$3.658 \cdot 10^{15}$	-0.228	12351	$4.191 \cdot 10^{14}$	-0.228	9377	$2.220 \cdot 10^{10}$	1.089	8613
1f	$2.210 \cdot 10^{22}$	-2.0	0	$2.210 \cdot 10^{22}$	-2.0	0	$2.212 \cdot 10^{22}$	-2.0	0
1b	$1.729 \cdot 10^{24}$	-2.182	60286	$1.729 \cdot 10^{24}$	-2.182	60286	$8.936 \cdot 10^{22}$	-1.835	59743
1f	$6.530 \cdot 10^{17}$	-1.0	0	$7.300 \cdot 10^{17}$	-1.0	0	$9.791 \cdot 10^{16}$	-0.6	0
1b	$1.221 \cdot 10^{18}$	-0.912	52353	$1.365 \cdot 10^{18}$	-0.912	52353	$5.086 \cdot 10^{16}$	-0.362	52105

Tableau A.2. Efficacité du 3^e corps dans les réactions de dissociation-recombinaison.

Espèce	Eklund	Baurle	ONERA
H ₂	1	2.5	2.5
H ₂ O	1	16	12
Autres	1	1	1

Annexe B.

Version réduite du mécanisme LCSR pour l'autoinflammation de CH₄-H₂ dans de l'air pur

Le mécanisme donné dans la présente annexe a été obtenu à partir du mécanisme de LCSR établi par Voisin (1997). La procédure de réduction par élimination d'espèces et les modifications suivantes sont décrites dans la section 3.5.2. Ce mécanisme est composé de 21 espèces réactives et de 123 réactions.

Le mécanisme ci-dessous a un format compatible avec la bibliothèque CHEMKIN. Les constantes de vitesse des réactions sont spécifiées par trois paramètres de la loi d'Arrhenius A , b et E/R_u . Les unités de mesure pour le facteur préexponentiel A sont mol-s-cm³. L'énergie d'activation, présentée sous la forme E/R_u , est mesurée en K.

Pour les réactions unimoléculaires, les paramètres d'Arrhenius suivant la formule chimique correspondent à la constante de vitesse K_∞ ($P \rightarrow \infty$). Les paramètres d'Arrhenius pour K_0 ($P \rightarrow 0$) sont identifiés par le mot-clef « LOW ».

Pour les réactions bimoléculaires, les paramètres d'Arrhenius suivant la formule chimique correspondent à la constante de vitesse K_0 . Les paramètres d'Arrhenius pour K_∞ sont identifiés par le mot-clef « HIGH ». Les approximations des constantes de vitesse des réactions bimoléculaires pour une pression de 100 kPa sont données à la fin de l'annexe.

Le mot-clef « SRI » précède les quatre paramètres a , b , c , d de l'approximation SRI.

Les réactions avec le 3^e corps M sont suivies d'une liste spécifiant les efficacités catalytiques d'espèces. Pour les espèces qui ne figurent pas dans la liste, l'efficacité catalytique est égale à 1.

Les tableaux B.1 et B.2 donnent les informations sur les unions des mécanismes réduits locaux selon la composition du combustible exprimée par le paramètre η . Les numéros des réactions composant le mécanisme réduit à 80 réactions sont indiqués dans le tableau B.1.

Mécanisme sous le format CHEMKIN

```

ELEMENTS
C H O N
END
SPECIES
H      H2      O      O2      OH      HO2      H2O      H2O2      CO      CO2
CH4    CH3      CH2O    CH3O    HCO     CH2      C2H6      C2H5      C2H4    C2H3
C2H2    N2
END
REACTIONS      MOLES      KELVINS
!      1
O+H+M = OH+M      6.20000E+16      -0.6000      0.0
  H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/
!      2
O+H2 = OH+H      3.87000E+04      2.7000      3150.1
!      3
H+O2 = OH+O      1.90000E+14      0.0000      8460.1
!      4
2H+M = H2+M      7.31000E+17      -1.0000      0.0
  H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/
!      5
H+OH+M = H2O+M      2.21000E+22      -2.0000      0.0
  H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/
!      6
H2+OH = H2O+H      2.16100E+08      1.5100      1726.0
!      7

```

Annexe B

H2O+O = 2OH	1.50000E+10	1.1400	8685.5
!	8		
2O+M = O2+M	1.14000E+17	-1.0000	0.0
H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/			
!	9		
H2+O2 = 2OH	1.70000E+13	0.0000	24043.7
!	10		
HO2+O = OH+O2	1.81000E+13	0.0000	-201.3
!	11		
H+O2+M = HO2+M	8.00000E+17	-0.8000	0.0
H2O/10/ CO/1.9/ CO2/3.8/			
!	12		
H+HO2 = H2+O2	4.28000E+13	0.0000	710.0
!	13		
H+HO2 = 2OH	1.69000E+14	0.0000	439.8
!	14		
HO2+OH = H2O+O2	2.89000E+13	0.0000	-250.1
!	15		
H+HO2 = H2O+O	3.01000E+13	0.0000	866.0
!	16		
H2O2+H = HO2+H2	1.70000E+12	0.0000	1887.1
!	17		
2OH (+M) = H2O2 (+M)	2.85850E+15	-1.0348	17.7
	LOW /3.07880E+19	-0.8056	55.6/
SRI /-4.0848E-01 5.6277E+01 -9.1801E+04 1.0001E+00 0.0000E+00/			
H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/			
!	18		
H2O2+OH = HO2+H2O	5.80000E+14	0.0000	4809.2
!	19		
2HO2 = H2O2+O2	4.07500E+02	3.3210	995.9
!	20		
H2O2+H = H2O+OH	1.00000E+13	0.0000	1806.5
!	21		
H2O2+O = HO2+OH	2.80000E+13	0.0000	3220.6
!	22		
CO+O+M = CO2+M	6.16000E+14	0.0000	1509.7
H2/2.5/ H2O/12/ CH4/2/ CO/1.9/ CO2/3.8/ C2H6/3/			
!	23		
CO+O2 = CO2+O	2.53000E+12	0.0000	24003.4
!	24		
CO+OH = CO2+H	4.40000E+06	1.5000	-372.4
!	25		
CO+HO2 = CO2+OH	1.50000E+14	0.0000	11901.1
!	26		
CH4+O = CH3+OH	1.62000E+06	2.3000	3569.8
!	27		
CH3+H (+M) = CH4 (+M)	8.01180E+13	-0.1736	-1605.8
	LOW /9.60150E+25	-2.8898	-2525.8/
SRI /4.6909E-01 -5.3771E+02 2.0000E+01 1.1766E+00 0.0000E+00/			
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
!	28		
CH4+H = CH3+H2	2.25000E+04	3.0000	4406.5
!	29		
CH4+OH = CH3+H2O	1.60000E+06	2.1000	1238.9
!	30		
CH4+O2 = CH3+HO2	4.04000E+13	0.0000	28639.6
!	31		
CH4+HO2 = CH3+H2O2	1.12200E+13	0.0000	12399.8
!	32		
CH3+O = CH2O+H	8.43000E+13	0.0000	0.0
!	33		
CH3O+M = CH2O+H+M	4.88000E+15	0.0000	11459.8
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
!	34		
CH3+OH (+M) = CH3O (+M)	6.62930E+13	-0.4814	7386.5
	HIGH /1.87200E-05	4.2044	5469.3/
SRI /5.3637E-01 -6.1972E+02 1.4483E+02 7.5228E-01 0.0000E+00/			
!	35		

Annexe B

CH3+HO2 = CH3O+OH	5.00000E+12	0.0000	0.0
! 36			
CH3+O2 = CH3O+O	1.32000E+14	0.0000	15800.0
! 37			
CH3+O2 = CH2O+OH	6.10000E+11	0.0000	7375.1
! 38			
CH3O+O2 = CH2O+HO2	2.34900E+10	0.0000	899.8
! 39			
CH3+OH(+M) = CH2O+H2(+M)	9.44090E+07	1.2854	4297.1
	HIGH /8.86670E+11	-1.2903	7214.3/
	SRI /-9.7510E-01	7.5547E+01	1.0238E+05 1.0000E+00 0.0000E+00/
! 40			
CH3+CH3O = CH4+CH2O	2.40900E+13	0.0000	0.0
! 41			
CH3O+OH = CH2O+H2O	1.00000E+13	0.0000	0.0
! 42			
CH3O+O = CH2O+OH	1.30000E+13	0.0000	0.0
! 43			
CH3O+H = CH2O+H2	2.00000E+13	0.0000	0.0
! 44			
CH3O+CO = CH3+CO2	1.56600E+13	0.0000	5940.0
! 45			
CH3O+HO2 = CH2O+H2O2	3.00000E+11	0.0000	0.0
! 46			
HCO+O = CO+OH	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 47			
HCO+O = CO2+H	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 48			
CH2O+O = HCO+OH	1.80700E+13	0.0000	1553.9
! 49			
CH2O+O2 = HCO+HO2	2.04000E+13	0.0000	19625.5
! 50			
CH2O+M = HCO+H+M	1.26000E+16	0.0000	39199.1
H2/1/ H2O/1/ CH4/1/ CO/1/ CO2/1/ C2H6/1/			
! 51			
HCO+H = CO+H2	7.22400E+13	0.0000	0.0
! 52			
CH2O+H = HCO+H2	1.26000E+08	1.6200	1092.0
! 53			
HCO+OH = CO+H2O	1.00000E+14	0.0000	0.0
! 54			
CH2O+OH = HCO+H2O	1.71600E+09	1.1800	-224.9
! 55			
HCO+CH3 = CO+CH4	1.20000E+14	0.0000	0.0
! 56			
CH2O+CH3 = HCO+CH4	4.09000E+12	0.0000	4449.9
! 57			
HCO+M = H+CO+M	1.85000E+17	-1.0000	8554.7
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
! 58			
HCO+O2 = CO+HO2	4.72300E+12	0.0000	125.8
! 59			
CH2O+HO2 = HCO+H2O2	4.00000E+12	0.0000	5870.0
! 60			
HCO+HO2 = CO2+OH+H	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 61			
2HCO = CH2O+CO	1.80000E+13	0.0000	0.0
! 62			
2HCO = H2+2CO	3.00000E+12	0.0000	0.0
! 63			
CH3+M = CH2+H+M	1.90000E+16	0.0000	46094.1
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
! 64			
CH2+OH = CH2O+H	2.50000E+13	0.0000	0.0
! 65			
CH2+O2 = HCO+OH	4.30000E+10	0.0000	-251.6
! 66			
CH3+H = CH2+H2	7.00000E+13	0.0000	7598.6

Annexe B

!	67			
	CH4+CH2 = 2CH3	4.30000E+12	0.0000	5051.3
!	68			
	CH2+O2 = CO+H2O	1.87000E+10	0.0000	-503.2
!	69			
	CH2+O = CO+2H	5.00000E+13	0.0000	0.0
!	70			
	CH2+O = CO+H2	6.00000E+13	0.0000	0.0
!	71			
	CH2+O2 = CO2+H2	3.45000E+11	0.0000	503.2
!	72			
	CH2+O2 = CO2+2H	1.60000E+12	0.0000	503.2
!	73			
	CH2+O2 = CO+OH+H	8.64000E+10	0.0000	-251.6
!	74			
	CH2+O2 = CH2O+O	5.00000E+13	0.0000	4529.0
!	75			
	CH2+CO2 = CH2O+CO	1.10000E+11	0.0000	503.2
!	76			
	CH2+CH3 = C2H4+H	4.00000E+13	0.0000	0.0
!	77			
	C2H4+O = CH3+HCO	1.20000E+08	1.4400	266.7
!	78			
	C2H4+O => CH2+HCO+H	1.60000E+08	1.4400	266.7
!	79			
	C2H5+O = CH2O+CH3	4.23800E+13	0.0000	0.0
!	80			
	C2H4+H(+M) = C2H5(+M)	1.95810E+24	-3.2858	3860.2
		LOW /5.74570E+28	-3.4405	2609.9/
		SRI /1.2299E-02 -2.5122E+03	9.1904E+02	1.5947E+00 0.0000E+00/
		H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/		
!	81			
	2CH3 = C2H5+H	3.01100E+13	0.0000	6800.0
!	82			
	C2H5+O2(+M) = C2H4+HO2(+M)	2.39260E+29	-5.4883	5294.3
		HIGH /5.51430E+13	-1.7298	5116.9/
		SRI /7.1611E-03 -3.6486E+03	1.5068E+05	8.2449E-01 0.0000E+00/
!	83			
	CH3O+C2H4 = CH2O+C2H5	1.20000E+11	0.0000	3522.5
!	84			
	C2H5+OH = C2H4+H2O	2.40900E+13	0.0000	0.0
!	85			
	C2H5+OH => CH3+CH2O+H	2.40900E+13	0.0000	0.0
!	86			
	C2H5+O = C2H4+OH	3.04600E+13	0.0000	0.0
!	87			
	C2H5+H = C2H4+H2	1.25000E+14	0.0000	4025.7
!	88			
	C2H5+CH3 = C2H4+CH4	1.14400E+12	0.0000	0.0
!	89			
	C2H5+HO2 = C2H4+H2O2	3.00000E+11	0.0000	0.0
!	90			
	C2H6+O = C2H5+OH	9.99000E+08	1.5000	2920.2
!	91			
	H+C2H5(+M) = C2H6(+M)	1.20870E+27	-3.6476	3300.7
		LOW /8.46960E+23	-1.8989	-4502.3/
		SRI /-1.7768E+00 4.5085E+02	-1.7413E+03	1.0025E+00 0.0000E+00/
		H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/		
!	92			
	C2H6+H = C2H5+H2	5.25000E+14	0.0000	6441.2
!	93			
	2CH3(+M) = C2H6(+M)	1.02920E+23	-2.9543	1821.3
		LOW /2.56440E+44	-7.7174	6652.1/
		SRI /-1.0568E+01 3.2165E+03	-1.5983E+03	7.2013E-01 0.0000E+00/
		H2/1/ H2O/3/ CH4/1/ CO/1/ CO2/1.5/ C2H6/1.5/		
!	94			
	C2H6+OH = C2H5+H2O	5.11000E+06	2.0600	429.7
!	95			

Annexe B

C2H6+CH3 = C2H5+CH4	7.53600E+00	3.7270	4973.3
! 96			
HCO+C2H6 = CH2O+C2H5	4.70000E+04	2.7200	9176.2
! 97			
CH2+C2H6 = CH3+C2H5	6.50000E+12	0.0000	3980.9
! 98			
CH3O+C2H5 = CH2O+C2H6	2.41000E+13	0.0000	0.0
! 99			
C2H6+O2 = C2H5+HO2	1.00000E+13	0.0000	25664.1
! 100			
2C2H5 = C2H4+C2H6	1.40000E+12	0.0000	0.0
! 101			
C2H6+HO2 = C2H5+H2O2	1.21000E+12	0.0000	8856.6
! 102			
C2H2+O = CH2+CO	1.98000E+04	2.6000	330.1
! 103			
2CH2 = C2H2+H2	3.20000E+13	0.0000	0.0
! 104			
C2H4+M = C2H2+H2+M	3.00000E+17	0.0000	39929.7
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
! 105			
2CH2 = C2H2+2H	4.00000E+13	0.0000	0.0
! 106			
C2H2+H(+M) = C2H3(+M)	6.89550E+12	-0.0390	1301.0
	LOW /2.18160E+19	-0.4699	1354.4/
SRI /1.0462E+00 1.4831E+03	1.0881E+03	1.3917E+00	0.0000E+00/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
! 107			
C2H4+M = C2H3+H+M	2.97000E+17	0.0000	48590.1
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/2/ CO2/3/ C2H6/3/			
! 108			
C2H3+H = C2H2+H2	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 109			
C2H4+H = C2H3+H2	3.36000E-07	6.0000	851.4
! 110			
C2H3+OH = C2H2+H2O	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 111			
C2H4+OH = C2H3+H2O	2.02400E+13	0.0000	2987.1
! 112			
C2H3+O2(+M) = CH2O+HCO(+M)	2.07060E+24	-3.5515	2422.6
	HIGH /6.12780E+17	-2.7409	2832.0/
SRI /3.9622E-02 -1.8462E+03	2.5073E+03	1.0131E+00	0.0000E+00/
! 113			
C2H4+CH3 = C2H3+CH4	4.15400E+12	0.0000	5599.8
! 114			
CH3O+C2H3 = CH2O+C2H4	2.41000E+13	0.0000	0.0
! 115			
C2H4+O2 = C2H3+HO2	4.00000E+13	0.0000	30947.8
! 116			
2C2H4 = C2H5+C2H3	5.00000E+14	0.0000	32557.6
! 117			
C2H3+HO2 => CH3+CO+OH	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 118			
C2H3+O = CH3+CO	1.50000E+13	0.0000	0.0
! 119			
C2H3+CH3 = C2H2+CH4	3.91000E+11	0.0000	0.0
! 120			
C2H3+C2H6 = C2H4+C2H5	1.50000E+13	0.0000	5032.2
! 121			
C2H3+HCO = C2H4+CO	9.03400E+13	0.0000	0.0
! 122			
C2H3+CH2O = C2H4+HCO	5.42000E+03	2.8100	2949.9
! 123			
2C2H3 = C2H2+C2H4	1.08400E+13	0.0000	0.0
END			

Approximations des constantes de vitesse des réactions bimoléculaires pour 100 kPa.

! 34				
CH3+OH = CH3O+H	5.74000E+12	-0.2300	7010.3	
! 39				
CH3+OH = CH2O+H2	3.19000E+12	-0.5300	5439.8	
! 82				
C2H5+O2 = C2H4+HO2	3.00000E+20	-2.8600	3402.2	
! 112				
C2H3+O2 = CH2O+HCO	1.85300E+23	-3.2900	1958.5	

Tableau B.1. Fréquences des réactions dans les unions des mécanismes réduits locaux selon η .

123 r.	80 r.	Formule de réaction	η					
			0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
			Ψ_r^*					
s-1	r-1	O+H+M=OH+M	0.076	0.105	0.152	0.252	0.390	0.195
s-2	r-2	O+H ₂ =OH+H	0.900	0.995	0.995	1.000	1.000	0.978
s-3	r-3	H+O ₂ =OH+O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
s-4	r-4	2H+M=H ₂ +M	0.043	0.076	0.110	0.162	0.452	0.169
s-5	r-5	H+OH+M=H ₂ O+M	0.590	0.590	0.629	0.681	0.752	0.648
s-6	r-6	H ₂ +OH=H ₂ O+H	0.881	1.000	1.000	1.000	1.000	0.976
s-7	r-7	H ₂ O+O=2OH	0.133	0.057	0.038	0.014	0.000	0.048
s-8		2O+M=O ₂ +M	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-9	r-8	H ₂ +O ₂ =2OH	0.010	0.881	0.967	0.990	1.000	0.770
s-10	r-9	HO ₂ +O=OH+O ₂	0.081	0.148	0.100	0.119	0.048	0.099
s-11	r-10	H+O ₂ +M=HO ₂ +M	0.676	0.724	0.729	0.719	0.733	0.716
s-12	r-11	H+HO ₂ =H ₂ +O ₂	0.124	0.505	0.648	0.681	0.686	0.529
s-13	r-12	H+HO ₂ =2OH	0.700	0.862	0.910	0.876	0.681	0.806
s-14	r-13	HO ₂ +OH=H ₂ O+O ₂	0.371	0.352	0.310	0.219	0.100	0.270
s-15	r-14	H+HO ₂ =H ₂ O+O	0.000	0.019	0.010	0.000	0.038	0.013
s-16	r-15	H ₂ O ₂ +H=HO ₂ +H ₂	0.000	0.029	0.038	0.048	0.048	0.033
s-17	r-16	2OH(+M)=H ₂ O ₂ (+M)	0.590	0.457	0.343	0.343	0.557	0.458
s-18	r-17	H ₂ O ₂ +OH=HO ₂ +H ₂ O	0.171	0.200	0.219	0.271	0.533	0.279
s-19	r-18	2HO ₂ =H ₂ O ₂ +O ₂	0.433	0.229	0.129	0.067	0.048	0.181
s-20	r-19	H ₂ O ₂ +H=H ₂ O+OH	0.000	0.000	0.000	0.010	0.014	0.005
s-21		H ₂ O ₂ +O=HO ₂ +OH	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-22	r-20	CO+O+M=CO ₂ +M	0.290	0.271	0.214	0.110	0.000	0.177
s-23		CO+O ₂ =CO ₂ +O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-24	r-21	CO+OH=CO ₂ +H	0.776	0.733	0.686	0.686	0.610	0.698
s-25	r-22	CO+HO ₂ =CO ₂ +OH	0.148	0.000	0.000	0.000	0.000	0.030
s-26	r-23	CH ₄ +O=CH ₃ +OH	0.976	0.967	0.943	0.743	0.410	0.808
s-27	r-24	CH ₃ +H(+M)=CH ₄ (+M)	0.890	0.943	0.924	0.895	0.771	0.885
s-28	r-25	CH ₄ +H=CH ₃ +H ₂	0.995	1.000	1.000	1.000	0.990	0.997
s-29	r-26	CH ₄ +OH=CH ₃ +H ₂ O	0.962	0.976	1.000	0.981	0.729	0.930
s-30	r-27	CH ₄ +O ₂ =CH ₃ +HO ₂	0.705	0.138	0.081	0.005	0.000	0.186
s-31	r-28	CH ₄ +HO ₂ =CH ₃ +H ₂ O ₂	0.476	0.233	0.133	0.081	0.048	0.194
s-32	r-29	CH ₃ +O=CH ₂ O+H	0.929	0.971	0.976	1.000	1.000	0.975
s-33	r-30	CH ₃ O+M=CH ₂ O+H+M	1.000	1.000	1.000	0.957	0.181	0.828
s-34		CH ₃ +OH(+M)=CH ₃ O+H(+M)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-35	r-31	CH ₃ +HO ₂ =CH ₃ O+OH	0.838	0.700	0.557	0.329	0.114	0.508
s-36	r-32	CH ₃ +O ₂ =CH ₃ O+O	1.000	1.000	0.971	0.829	0.110	0.782
s-37	r-33	CH ₃ +O ₂ =CH ₂ O+OH	0.938	0.967	0.886	0.557	0.033	0.676
s-38	r-34	CH ₃ O+O ₂ =CH ₂ O+HO ₂	0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
s-39		CH ₃ +OH(+M)=CH ₂ O+H ₂ (+M)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-40	r-35	CH ₃ +CH ₃ O=CH ₄ +CH ₂ O	0.005	0.019	0.014	0.000	0.000	0.008
s-41		CH ₃ O+OH=CH ₂ O+H ₂ O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-42		CH ₃ O+O=CH ₂ O+OH	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-43		CH ₃ O+H=CH ₂ O+H ₂	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-44	r-36	CH ₃ O+CO=CH ₃ +CO ₂	0.038	0.033	0.033	0.024	0.000	0.026
s-45		CH ₃ O+HO ₂ =CH ₂ O+H ₂ O ₂	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Tableau B.1. (suite)

123 r.	80 r.	Formule de réaction	η					
			0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
			Ψ_r^*					
s-46	r-37	HCO+O=CO+OH	0.000	0.000	0.000	0.005	0.000	0.001
s-47	r-38	HCO+O=CO ₂ +H	0.010	0.010	0.010	0.019	0.019	0.014
s-48	r-39	CH ₂ O+O=HCO+OH	0.290	0.257	0.200	0.119	0.014	0.176
s-49	r-40	CH ₂ O+O ₂ =HCO+HO ₂	0.548	0.033	0.000	0.000	0.000	0.116
s-50		CH ₂ O+M=HCO+H+M	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-51	r-41	HCO+H=CO+H ₂	0.314	0.376	0.443	0.595	0.714	0.488
s-52	r-42	CH ₂ O+H=HCO+H ₂	0.681	0.886	0.933	0.914	0.910	0.865
s-53	r-43	HCO+OH=CO+H ₂ O	0.500	0.529	0.543	0.562	0.390	0.505
s-54	r-44	CH ₂ O+OH=HCO+H ₂ O	0.710	0.390	0.295	0.300	0.138	0.367
s-55	r-45	HCO+CH ₃ =CO+CH ₄	0.867	0.852	0.814	0.648	0.295	0.695
s-56	r-46	CH ₂ O+CH ₃ =HCO+CH ₄	0.733	0.510	0.271	0.005	0.000	0.304
s-57	r-47	HCO+M=H+CO+M	1.000	1.000	1.000	0.995	0.871	0.973
s-58	r-48	HCO+O ₂ =CO+HO ₂	1.000	0.986	0.933	0.814	0.543	0.855
s-59	r-49	CH ₂ O+HO ₂ =HCO+H ₂ O ₂	0.419	0.229	0.138	0.029	0.000	0.163
s-60		HCO+HO ₂ =CO ₂ +OH+H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-61		2HCO=CH ₂ O+CO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-62		2HCO=H ₂ +2CO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-63	r-50	CH ₃ +M=CH ₂ +H+M	0.048	0.038	0.043	0.043	0.062	0.047
s-64	r-51	CH ₂ +OH=CH ₂ O+H	0.000	0.014	0.043	0.143	0.071	0.054
s-65		CH ₂ +O ₂ =HCO+OH	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-66	r-52	CH ₃ +H=CH ₂ +H ₂	0.248	0.271	0.281	0.219	0.276	0.259
s-67		CH ₄ +CH ₂ =2CH ₃	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-68		CH ₂ +O ₂ =CO+H ₂ O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-69	r-53	CH ₂ +O=CO+ ₂ H	0.100	0.095	0.114	0.090	0.000	0.080
s-70	r-54	CH ₂ +O=CO+H ₂	0.438	0.371	0.348	0.257	0.071	0.297
s-71	r-55	CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +H ₂	0.005	0.005	0.000	0.000	0.000	0.002
s-72	r-56	CH ₂ +O ₂ =CO ₂ +2H	0.038	0.086	0.038	0.043	0.000	0.041
s-73		CH ₂ +O ₂ =CO+OH+H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-74	r-57	CH ₂ +O ₂ =CH ₂ O+O	0.652	0.733	0.633	0.324	0.129	0.494
s-75	r-58	CH ₂ +CO ₂ =CH ₂ O+CO	0.019	0.019	0.019	0.019	0.010	0.017
s-76	r-59	CH ₂ +CH ₃ =C ₂ H ₄ +H	0.171	0.167	0.162	0.114	0.219	0.167
s-77	r-60	C ₂ H ₄ +O=CH ₃ +HCO	0.224	0.343	0.319	0.195	0.000	0.216
s-78	r-61	C ₂ H ₄ +O=>CH ₂ +HCO+H	0.543	0.638	0.548	0.290	0.000	0.404
s-79	r-62	C ₂ H ₅ +O=CH ₂ O+CH ₃	0.000	0.000	0.000	0.005	0.000	0.001
s-80	r-63	C ₂ H ₄ +H(+M)=C ₂ H ₅ (+M)	1.000	0.990	0.943	0.833	0.376	0.828
s-81	r-64	2CH ₃ =C ₂ H ₅ +H	0.871	0.881	0.852	0.795	0.433	0.766
s-82	r-65	C ₂ H ₅ +O ₂ (+M)=C ₂ H ₄ +HO ₂ (+M)	0.162	0.138	0.067	0.095	0.000	0.092
s-83		CH ₃ O+C ₂ H ₄ =CH ₂ O+C ₂ H ₅	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-84		C ₂ H ₅ +OH=C ₂ H ₄ +H ₂ O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-85	r-66	C ₂ H ₅ +OH=>CH ₃ +CH ₂ O+H	0.000	0.000	0.005	0.005	0.000	0.002
s-86		C ₂ H ₅ +O=C ₂ H ₄ +OH	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-87		C ₂ H ₅ +H=C ₂ H ₄ +H ₂	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-88		C ₂ H ₅ +CH ₃ =C ₂ H ₄ +CH ₄	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-89		C ₂ H ₅ +HO ₂ =C ₂ H ₄ +H ₂ O ₂	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-90	r-67	C ₂ H ₆ +O=C ₂ H ₅ +OH	0.043	0.205	0.081	0.014	0.000	0.069
s-91	r-68	H+C ₂ H ₅ (+M)=C ₂ H ₆ (+M)	0.157	0.229	0.238	0.338	0.186	0.230

Tableau B.1. (suite)

123 r.	80 r.	Formule de réaction	η					
			0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
			Ψ_r^*					
s-92	r-69	$C_2H_6+H=C_2H_5+H_2$	0.276	0.367	0.543	0.638	0.357	0.436
s-93	r-70	$2CH_3(+M)=C_2H_6(+M)$	0.900	0.886	0.833	0.724	0.395	0.748
s-94	r-71	$C_2H_6+OH=C_2H_5+H_2O$	0.495	0.433	0.224	0.219	0.024	0.279
s-95	r-72	$C_2H_6+CH_3=C_2H_5+CH_4$	0.552	0.414	0.167	0.010	0.000	0.229
s-96		$HCO+C_2H_6=CH_2O+C_2H_5$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-97		$CH_2+C_2H_6=CH_3+C_2H_5$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-98		$CH_3O+C_2H_5=CH_2O+C_2H_6$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-99		$C_2H_6+O_2=C_2H_5+HO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-100		$2C_2H_5=C_2H_4+C_2H_6$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-101		$C_2H_6+HO_2=C_2H_5+H_2O_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-102	r-73	$C_2H_2+O=CH_2+CO$	0.790	0.681	0.657	0.614	0.305	0.609
s-103		$2CH_2=C_2H_2+H_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-104	r-74	$C_2H_4+M=C_2H_2+H_2+M$	0.033	0.005	0.005	0.000	0.000	0.009
s-105		$2CH_2=C_2H_2+2H$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-106	r-75	$C_2H_2+H(+M)=C_2H_3(+M)$	0.790	0.681	0.657	0.619	0.305	0.610
s-107		$C_2H_4+M=C_2H_3+H+M$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-108	r-76	$C_2H_3+H=C_2H_2+H_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.029	0.006
s-109	r-77	$C_2H_4+H=C_2H_3+H_2$	0.633	0.652	0.662	0.624	0.348	0.584
s-110		$C_2H_3+OH=C_2H_2+H_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-111	r-78	$C_2H_4+OH=C_2H_3+H_2O$	0.262	0.129	0.029	0.000	0.000	0.084
s-112	r-79	$C_2H_3+O_2(+M)=CH_2O+HCO(+M)$	0.371	0.310	0.190	0.076	0.000	0.189
s-113	r-80	$C_2H_4+CH_3=C_2H_3+CH_4$	0.367	0.224	0.095	0.005	0.000	0.138
s-114		$CH_3O+C_2H_3=CH_2O+C_2H_4$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-115		$C_2H_4+O_2=C_2H_3+HO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-116		$2C_2H_4=C_2H_5+C_2H_3$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-117		$C_2H_3+HO_2=>CH_3+CO+OH$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-118		$C_2H_3+O=CH_3+CO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-119		$C_2H_3+CH_3=C_2H_2+CH_4$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-120		$C_2H_3+C_2H_6=C_2H_4+C_2H_5$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-121		$C_2H_3+HCO=C_2H_4+CO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-122		$C_2H_3+CH_2O=C_2H_4+HCO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-123		$2C_2H_3=C_2H_2+C_2H_4$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
		Nombre total	72	73	72	71	55	80
		Réactions communes	6	6	6	5	5	1

* Les cellules sont colorées selon les valeurs de Ψ_r : rose – $\Psi_r \geq 0.75$, jaune – $0.25 \leq \Psi_r < 0.75$, gris – $\Psi_r = 0$ (réaction éliminée par la réduction).

Tableau B.2. Fréquences des espèces dans les unions des mécanismes réduits locaux selon η .

N ^o	Espèce	η					
		0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
		$\Psi_s^{\#}$					
1	H	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
2	H ₂	0.995	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999
3	O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
4	O ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
5	OH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
6	HO ₂	1.000	0.990	0.971	0.948	0.924	0.967
7	H ₂ O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
8	H ₂ O ₂	0.590	0.457	0.343	0.343	0.557	0.458
9	CO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
10	CO ₂	0.824	0.748	0.690	0.695	0.610	0.713
11	CH ₄	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
12	CH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
13	CH ₂ O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
14	CH ₃ O	1.000	1.000	1.000	0.981	0.214	0.839
15	HCO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
16	CH ₂	0.948	0.910	0.857	0.743	0.329	0.757
17	C ₂ H ₆	0.900	0.886	0.833	0.724	0.395	0.748
18	C ₂ H ₅	1.000	0.990	0.948	0.843	0.476	0.851
19	C ₂ H ₄	1.000	0.990	0.948	0.833	0.424	0.839
20	C ₂ H ₃	0.900	0.771	0.690	0.624	0.348	0.667
21	C ₂ H ₂	0.790	0.681	0.657	0.619	0.305	0.610
Nombre total		21	21	21	21	21	21
Espèces communes		14	12	12	11	11	10

[#] Les cellules sont colorées selon les valeurs de Ψ_s : rose – $\Psi_s = 1$, jaune – $0.75 \leq \Psi_s < 1$.

Annexe C.

Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0 pour l'autoinflammation de CH₄-H₂ dans de l'air pur

Le mécanisme donné dans la présente annexe a été obtenu à partir du mécanisme GRI-Mech v.3.0. La procédure de réduction par élimination d'espèces est décrite dans la section 3.5.3. Ce mécanisme est composé de 22 espèces réactives et de 121 réactions.

Le mécanisme ci-dessous a un format compatible avec la bibliothèque CHEMKIN. Les constantes de vitesse des réactions sont spécifiées par trois paramètres de la loi d'Arrhenius A , b et E/R_u . Les unités de mesure pour le facteur pré-exponentiel A sont mol-s-cm³. L'énergie d'activation, présentée sous la forme E/R_u , est mesurée en K.

Pour les réactions unimoléculaires, les paramètres d'Arrhenius suivant la formule chimique correspondent à la constante de vitesse K_∞ ($P \rightarrow \infty$). Les paramètres d'Arrhenius pour K_0 ($P \rightarrow 0$) sont identifiés par le mot-clef « LOW ».

Le mot-clef « TROE » précède les quatre paramètres α , T^{***} , T^* , T^{**} de l'approximation Troe.

Les réactions avec le 3^e corps M sont suivies d'une liste spécifiant les efficacités catalytiques d'espèces. Pour les espèces qui ne figurent pas dans la liste, l'efficacité catalytique est égale à 1.

Les tableaux C.1 et C.2 donnent les informations sur les unions des mécanismes réduits locaux selon la composition du combustible exprimée par le paramètre η . Les numéros des réactions composant le mécanisme réduit à 93 réactions sont indiqués dans le tableau C.1.

Mécanisme sous le format CHEMKIN

```

ELEMENTS
C H O N
END
SPECIES
H2      H          O          O2      OH       H2O      HO2      H2O2     CH2      CH2 (S)
CH3     CH4         CO          CO2     HCO      CH2O     CH3O     C2H2     C2H3     C2H4
C2H5    C2H6        N2
END
REACTIONS      MOLES      KELVINS
!      1
2O+M = O2+M          1.20000E+17  -1.0000      0.0
  H2/2.4/ H2O/15.4/ CH4/2/ CO/1.75/ CO2/3.6/ C2H6/3/
!      2
O+H+M = OH+M          5.00000E+17  -1.0000      0.0
  H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      3
O+H2 = H+OH          3.87000E+04   2.7000      3150.1
!      4
O+HO2 = OH+O2        2.00000E+13   0.0000      0.0
!      5
O+H2O2 = OH+HO2      9.63000E+06   2.0000      2012.9
!      6
O+CH2 = H+HCO          8.00000E+13   0.0000      0.0
!      7
O+CH2 (S) = H2+CO      1.50000E+13   0.0000      0.0
!      8
O+CH2 (S) = H+HCO      1.50000E+13   0.0000      0.0
!      9
O+CH3 = H+CH2O        5.06000E+13   0.0000      0.0
!     10

```

Annexe C

O+CH4 = OH+CH3	1.02000E+09	1.5000	4327.7
! 11			
O+CO (+M) = CO2 (+M)	1.80000E+10	0.0000	1200.2
	LOW /6.02000E+14	0.0000	1509.7/
H2/2/ O2/6/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/3.5/ C2H6/3/			
! 12			
O+HCO = OH+CO	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 13			
O+HCO = H+CO2	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 14			
O+CH2O = OH+HCO	3.90000E+13	0.0000	1781.4
! 15			
O+CH3O = OH+CH2O	1.00000E+13	0.0000	0.0
! 16			
O+C2H2 = CO+CH2	6.94000E+06	2.0000	956.1
! 17			
O+C2H4 = CH3+HCO	1.25000E+07	1.8300	110.7
! 18			
O+C2H5 = CH3+CH2O	2.24000E+13	0.0000	0.0
! 19			
O+C2H6 = OH+C2H5	8.98000E+07	1.9200	2863.3
! 20			
O2+CO = O+CO2	2.50000E+12	0.0000	24053.8
! 21			
O2+CH2O = HO2+HCO	1.00000E+14	0.0000	20128.7
! 22			
H+O2+M = HO2+M	2.80000E+18	-0.8600	0.0
O2/0/ H2O/0/ CO/0.75/ CO2/1.5/ C2H6/1.5/ N2/0/			
! 23			
H+2O2 = HO2+O2	2.08000E+19	-1.2400	0.0
! 24			
H+O2+H2O = HO2+H2O	1.12600E+19	-0.7600	0.0
! 25			
H+O2+N2 = HO2+N2	2.60000E+19	-1.2400	0.0
! 26			
H+O2 = O+OH	2.65000E+16	-0.6707	8575.3
! 27			
2H+M = H2+M	1.00000E+18	-1.0000	0.0
H2/0/ H2O/0/ CH4/2/ CO2/0/ C2H6/3/			
! 28			
2H+H2 = 2H2	9.00000E+16	-0.6000	0.0
! 29			
2H+H2O = H2+H2O	6.00000E+19	-1.2500	0.0
! 30			
2H+CO2 = H2+CO2	5.50000E+20	-2.0000	0.0
! 31			
H+OH+M = H2O+M	2.20000E+22	-2.0000	0.0
H2/0.73/ H2O/3.65/ CH4/2/ C2H6/3/			
! 32			
H+HO2 = O+H2O	3.97000E+12	0.0000	337.7
! 33			
H+HO2 = O2+H2	4.48000E+13	0.0000	537.4
! 34			
H+HO2 = 2OH	8.40000E+13	0.0000	319.5
! 35			
H+H2O2 = HO2+H2	1.21000E+07	2.0000	2616.7
! 36			
H+H2O2 = OH+H2O	1.00000E+13	0.0000	1811.6
! 37			
H+CH2 (+M) = CH3 (+M)	6.00000E+14	0.0000	0.0
	LOW /1.04000E+26	-2.7600	805.1/
	TROE /5.6200E-01	9.1000E+01	5.8360E+03
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/			8.5520E+03/
! 38			
H+CH3 (+M) = CH4 (+M)	1.39000E+16	-0.5340	269.7
	LOW /2.62000E+33	-4.7600	1227.8/
	TROE /7.8300E-01	7.4000E+01	2.9410E+03
H2/2/ H2O/6/ CH4/3/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/			6.9640E+03/

Annexe C

```

!      39
H+CH4 = CH3+H2                6.60000E+08   1.6200   5454.9
!      40
H+HCO(+M) = CH2O(+M)          1.09000E+12   0.4800  -130.8
                                LOW /2.47000E+24  -2.5700   213.9/
                                TROE /7.8240E-01  2.7100E+02  2.7550E+03  6.5700E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      41
H+HCO = H2+CO                  7.34000E+13   0.0000   0.0
!      42
H+CH2O(+M) = CH3O(+M)         5.40000E+11   0.4540  1308.4
                                LOW /2.20000E+30  -4.8000   2797.9/
                                TROE /7.5800E-01  9.4000E+01  1.5550E+03  4.2000E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      43
H+CH2O = HCO+H2                5.74000E+07   1.9000  1379.8
!      44
H+CH3O = H2+CH2O               2.00000E+13   0.0000   0.0
!      45
H+CH3O = OH+CH3                1.50000E+12   0.5000  -55.4
!      46
H+CH3O = CH2(S)+H2O            2.62000E+14  -0.2300   538.4
!      47
H+C2H2(+M) = C2H3(+M)          5.60000E+12   0.0000  1207.7
                                LOW /3.80000E+40  -7.2700   3633.2/
                                TROE /7.5070E-01  9.8500E+01  1.3020E+03  4.1670E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      48
H+C2H3(+M) = C2H4(+M)          6.08000E+12   0.2700  140.9
                                LOW /1.40000E+30  -3.8600   1670.7/
                                TROE /7.8200E-01  2.0750E+02  2.6630E+03  6.0950E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      49
H+C2H3 = H2+C2H2                3.00000E+13   0.0000   0.0
!      50
H+C2H4(+M) = C2H5(+M)          5.40000E+11   0.4540   915.9
                                LOW /6.00000E+41  -7.6200   3507.4/
                                TROE /9.7530E-01  2.1000E+02  9.8400E+02  4.3740E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      51
H+C2H4 = C2H3+H2                1.32500E+06   2.5300  6159.4
!      52
H+C2H5(+M) = C2H6(+M)          5.21000E+17  -0.9900   795.1
                                LOW /1.99000E+41  -7.0800   3364.0/
                                TROE /8.4220E-01  1.2500E+02  2.2190E+03  6.8820E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      53
H+C2H5 = H2+C2H4                2.00000E+12   0.0000   0.0
!      54
H+C2H6 = C2H5+H2                1.15000E+08   1.9000  3789.2
!      55
H2+CO(+M) = CH2O(+M)           4.30000E+07   1.5000  40056.0
                                LOW /5.07000E+27  -3.4200  42446.3/
                                TROE /9.3200E-01  1.9700E+02  1.5400E+03  1.0300E+04/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      56
OH+H2 = H+H2O                  2.16000E+08   1.5100  1726.0
!      57
2OH(+M) = H2O2(+M)             7.40000E+13  -0.3700   0.0
                                LOW /2.30000E+18  -0.9000  -855.5/
                                TROE /7.3460E-01  9.4000E+01  1.7560E+03  5.1820E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/
!      58
2OH = O+H2O                    3.57000E+04   2.4000 -1061.8
!      59
OH+HO2 = O2+H2O                1.45000E+13   0.0000 -251.6
DUPLICATE
!      60

```

Annexe C

OH+H2O2 = HO2+H2O	2.00000E+12	0.0000	214.9
DUPLICATE			
! 61			
OH+H2O2 = HO2+H2O	1.70000E+18	0.0000	14799.6
DUPLICATE			
! 62			
OH+CH2 = H+CH2O	2.00000E+13	0.0000	0.0
! 63			
OH+CH2(S) = H+CH2O	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 64			
OH+CH3 = CH2+H2O	5.60000E+07	1.6000	2727.4
! 65			
OH+CH3 = CH2(S)+H2O	6.44000E+17	-1.3400	713.1
! 66			
OH+CH4 = CH3+H2O	1.00000E+08	1.6000	1570.0
! 67			
OH+CO = H+CO2	4.76000E+07	1.2280	35.2
! 68			
OH+HCO = H2O+CO	5.00000E+13	0.0000	0.0
! 69			
OH+CH2O = HCO+H2O	3.43000E+09	1.1800	-224.9
! 70			
OH+CH3O = H2O+CH2O	5.00000E+12	0.0000	0.0
! 71			
OH+C2H2 = CH3+CO	4.83000E-04	4.0000	-1006.4
! 72			
OH+C2H3 = H2O+C2H2	5.00000E+12	0.0000	0.0
! 73			
OH+C2H4 = C2H3+H2O	3.60000E+06	2.0000	1258.0
! 74			
OH+C2H6 = C2H5+H2O	3.54000E+06	2.1200	437.8
! 75			
2HO2 = O2+H2O2	1.30000E+11	0.0000	-820.2
DUPLICATE			
! 76			
2HO2 = O2+H2O2	4.20000E+14	0.0000	6038.6
DUPLICATE			
! 77			
HO2+CH2 = OH+CH2O	2.00000E+13	0.0000	0.0
! 78			
HO2+CH3 = O2+CH4	1.00000E+12	0.0000	0.0
! 79			
HO2+CH3 = OH+CH3O	3.78000E+13	0.0000	0.0
! 80			
HO2+CO = OH+CO2	1.50000E+14	0.0000	11875.9
! 81			
HO2+CH2O = HCO+H2O2	5.60000E+06	2.0000	6038.6
! 82			
CH2+O2 => OH+H+CO	5.00000E+12	0.0000	754.8
! 83			
CH2+H2 = H+CH3	5.00000E+05	2.0000	3638.3
! 84			
2CH2 = H2+C2H2	1.60000E+15	0.0000	6010.4
! 85			
CH2+CH3 = H+C2H4	4.00000E+13	0.0000	0.0
! 86			
CH2+CH4 = 2CH3	2.46000E+06	2.0000	4161.6
! 87			
CH2(S)+N2 = CH2+N2	1.50000E+13	0.0000	301.9
! 88			
CH2(S)+O2 = H+OH+CO	2.80000E+13	0.0000	0.0
! 89			
CH2(S)+O2 = CO+H2O	1.20000E+13	0.0000	0.0
! 90			
CH2(S)+H2 = CH3+H	7.00000E+13	0.0000	0.0
! 91			
CH2(S)+H2O = CH2+H2O	3.00000E+13	0.0000	0.0
! 92			

Annexe C

CH2 (S)+CH3 = H+C2H4	1.20000E+13	0.0000	-286.8
! 93			
CH2 (S)+CH4 = 2CH3	1.60000E+13	0.0000	-286.8
! 94			
CH2 (S)+CO = CH2+CO	9.00000E+12	0.0000	0.0
! 95			
CH2 (S)+CO2 = CH2+CO2	7.00000E+12	0.0000	0.0
! 96			
CH2 (S)+CO2 = CO+CH2O	1.40000E+13	0.0000	0.0
! 97			
CH2 (S)+C2H6 = CH3+C2H5	4.00000E+13	0.0000	-276.8
! 98			
CH3+O2 = O+CH3O	3.56000E+13	0.0000	15338.0
! 99			
CH3+O2 = OH+CH2O	2.31000E+12	0.0000	10222.8
! 100			
CH3+H2O2 = HO2+CH4	2.45000E+04	2.4700	2606.7
! 101			
2CH3 (+M) = C2H6 (+M)	6.77000E+16	-1.1800	329.1
	LOW /3.40000E+41	-7.0300	1389.9/
	TROE /6.1900E-01	7.3200E+01	1.1800E+03
			9.9990E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/			
! 102			
2CH3 = H+C2H5	6.84000E+12	0.1000	5334.1
! 103			
CH3+HCO = CH4+CO	2.64800E+13	0.0000	0.0
! 104			
CH3+CH2O = HCO+CH4	3.32000E+03	2.8100	2948.8
! 105			
CH3+C2H4 = C2H3+CH4	2.27000E+05	2.0000	4629.6
! 106			
CH3+C2H6 = C2H5+CH4	6.14000E+06	1.7400	5258.6
! 107			
HCO+H2O = H+CO+H2O	1.50000E+18	-1.0000	8554.7
! 108			
HCO+M = H+CO+M	1.87000E+17	-1.0000	8554.7
H2/2/ H2O/0/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/			
! 109			
HCO+O2 = HO2+CO	1.34500E+13	0.0000	201.3
! 110			
CH3O+O2 = HO2+CH2O	4.28000E-13	7.6000	-1776.4
! 111			
C2H3+O2 = HCO+CH2O	4.58000E+16	-1.3900	510.8
! 112			
C2H4 (+M) = H2+C2H2 (+M)	8.00000E+12	0.4400	43664.1
	LOW /1.58000E+51	-9.3000	49214.6/
	TROE /7.3450E-01	1.8000E+02	1.0350E+03
			5.4170E+03/
H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/ C2H6/3/			
! 113			
C2H5+O2 = HO2+C2H4	8.40000E+11	0.0000	1950.0
! 114			
O+CH3 => H+H2+CO	3.37000E+13	0.0000	0.0
! 115			
OH+HO2 = O2+H2O	5.00000E+15	0.0000	8720.7
DUPLICATE			
! 116			
OH+CH3 => H2+CH2O	8.00000E+09	0.5000	-883.1
! 117			
CH2+O2 => 2H+CO2	5.80000E+12	0.0000	754.8
! 118			
CH2+O2 = O+CH2O	2.40000E+12	0.0000	754.8
! 119			
2CH2 => 2H+C2H2	2.00000E+14	0.0000	5529.8
! 120			
CH2 (S)+H2O => H2+CH2O	6.82000E+10	0.2500	-470.5
! 121			
C2H3+O2 = HO2+C2H2	1.33700E+06	1.6100	-193.2
END			

Tableau C.1. Fréquences des réactions dans les unions des mécanismes réduits locaux selon η .

		η						
		0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5	
121 r.	93 r.	Formule de réaction	Ψ_r^*					
s-1		$2O+M=O_2+M$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-2		$O+H+M=OH+M$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-3	r-1	$O+H_2=H+OH$	0.843	0.981	0.986	1.000	1.000	0.962
s-4	r-2	$O+HO_2=OH+O_2$	0.062	0.143	0.152	0.114	0.100	0.114
s-5		$O+H_2O_2=OH+HO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-6	r-3	$O+CH_2=H+HCO$	0.095	0.105	0.095	0.071	0.033	0.080
s-7		$O+CH_2^{(s)}=H_2+CO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-8		$O+CH_2^{(s)}=H+HCO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-9	r-4	$O+CH_3=H+CH_2O$	0.852	0.900	0.910	0.957	0.890	0.902
s-10	r-5	$O+CH_4=OH+CH_3$	0.981	0.981	0.871	0.786	0.529	0.830
s-11	r-6	$O+CO(+M)=CO_2(+M)$	0.029	0.000	0.005	0.000	0.000	0.007
s-12		$O+HCO=OH+CO$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-13		$O+HCO=H+CO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-14	r-7	$O+CH_2O=OH+HCO$	0.314	0.405	0.243	0.081	0.005	0.210
s-15		$O+CH_3O=OH+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-16	r-8	$O+C_2H_2=CO+CH_2$	0.567	0.557	0.571	0.571	0.295	0.512
s-17	r-9	$O+C_2H_4=CH_3+HCO$	0.319	0.357	0.229	0.057	0.000	0.192
s-18		$O+C_2H_5=CH_3+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-19	r-10	$O+C_2H_6=OH+C_2H_5$	0.033	0.224	0.081	0.000	0.000	0.068
s-20		$O_2+CO=O+CO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-21	r-11	$O_2+CH_2O=HO_2+HCO$	0.919	0.262	0.000	0.000	0.000	0.236
s-22	r-12	$H+O_2+M=HO_2+M$	0.171	0.348	0.348	0.433	0.543	0.369
s-23	r-13	$H+2O_2=HO_2+O_2$	0.110	0.195	0.176	0.200	0.224	0.181
s-24	r-14	$H+O_2+H_2O=HO_2+H_2O$	0.590	0.667	0.695	0.671	0.700	0.665
s-25	r-15	$H+O_2+N_2=HO_2+N_2$	0.652	0.752	0.752	0.743	0.690	0.718
s-26	r-16	$H+O_2=O+OH$	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
s-27	r-17	$2H+M=H_2+M$	0.014	0.010	0.014	0.005	0.195	0.048
s-28	r-18	$2H+H_2=2H_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.100	0.020
s-29	r-19	$2H+H_2O=H_2+H_2O$	0.052	0.043	0.067	0.119	0.338	0.124
s-30		$2H+CO_2=H_2+CO_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-31	r-20	$H+OH+M=H_2O+M$	0.443	0.467	0.500	0.543	0.690	0.529
s-32		$H+HO_2=O+H_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-33	r-21	$H+HO_2=O_2+H_2$	0.614	0.752	0.933	0.990	1.000	0.858
s-34	r-22	$H+HO_2=2OH$	0.429	0.614	0.671	0.719	0.619	0.610
s-35	r-23	$H+H_2O_2=HO_2+H_2$	0.000	0.119	0.162	0.167	0.129	0.115
s-36	r-24	$H+H_2O_2=OH+H_2O$	0.000	0.000	0.010	0.010	0.014	0.007
s-37		$H+CH_2(+M)=CH_3(+M)$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-38	r-25	$H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$	0.914	0.981	0.971	0.971	0.871	0.942
s-39	r-26	$H+CH_4=CH_3+H_2$	1.000	1.000	0.990	1.000	0.943	0.987
s-40		$H+HCO(+M)=CH_2O(+M)$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-41	r-27	$H+HCO=H_2+CO$	0.224	0.276	0.371	0.424	0.438	0.347
s-42	r-28	$H+CH_2O(+M)=CH_3O(+M)$	1.000	1.000	0.995	0.895	0.276	0.833
s-43	r-29	$H+CH_2O=HCO+H_2$	0.952	0.995	0.981	0.948	0.895	0.954
s-44	r-30	$H+CH_3O=H_2+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.010	0.005	0.003
s-45	r-31	$H+CH_3O=OH+CH_3$	0.000	0.000	0.005	0.019	0.005	0.006

Tableau C.1. (suite)

121 r.	93 r.	Formule de réaction	η					
			0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
			Ψ_r^*					
s-46		$H+CH_3O=CH_2^{(s)}+H_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-47	r-32	$H+C_2H_2(+M)=C_2H_3(+M)$	0.586	0.548	0.548	0.429	0.248	0.472
s-48		$H+C_2H_3(+M)=C_2H_4(+M)$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-49	r-33	$H+C_2H_3=H_2+C_2H_2$	0.267	0.248	0.252	0.305	0.114	0.237
s-50	r-34	$H+C_2H_4(+M)=C_2H_5(+M)$	0.848	0.871	0.743	0.562	0.186	0.642
s-51	r-35	$H+C_2H_4=C_2H_3+H_2$	0.576	0.562	0.619	0.581	0.295	0.527
s-52		$H+C_2H_5(+M)=C_2H_6(+M)$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-53		$H+C_2H_5=H_2+C_2H_4$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-54	r-36	$H+C_2H_6=C_2H_5+H_2$	0.357	0.514	0.624	0.605	0.262	0.472
s-55		$H_2+CO(+M)=CH_2O(+M)$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-56	r-37	$OH+H_2=H+H_2O$	0.890	1.000	1.000	1.000	1.000	0.978
s-57	r-38	$2OH(+M)=H_2O_2(+M)$	0.914	0.767	0.690	0.590	0.557	0.704
s-58	r-39	$2OH=O+H_2O$	0.119	0.076	0.038	0.014	0.010	0.051
s-59	r-40	$OH+HO_2=O_2+H_2O$	0.286	0.357	0.281	0.190	0.100	0.243
s-60	r-41	$OH+H_2O_2=HO_2+H_2O$	0.000	0.005	0.000	0.010	0.010	0.005
s-61	r-42	$OH+H_2O_2=HO_2+H_2O$	0.562	0.505	0.548	0.481	0.490	0.517
s-62	r-43	$OH+CH_2=H+CH_2O$	0.010	0.019	0.029	0.071	0.005	0.027
s-63		$OH+CH_2^{(s)}=H+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-64	r-44	$OH+CH_3=CH_2+H_2O$	0.067	0.114	0.148	0.067	0.024	0.084
s-65	r-45	$OH+CH_3=CH_2^{(s)}+H_2O$	0.843	0.867	0.919	0.886	0.557	0.814
s-66	r-46	$OH+CH_4=CH_3+H_2O$	1.000	1.000	1.000	1.000	0.876	0.975
s-67	r-47	$OH+CO=H+CO_2$	0.738	0.695	0.681	0.633	0.600	0.669
s-68	r-48	$OH+HCO=H_2O+CO$	0.081	0.119	0.086	0.062	0.005	0.071
s-69	r-49	$OH+CH_2O=HCO+H_2O$	0.838	0.652	0.367	0.086	0.024	0.393
s-70		$OH+CH_3O=H_2O+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-71	r-50	$OH+C_2H_2=CH_3+CO$	0.143	0.124	0.119	0.095	0.024	0.101
s-72		$OH+C_2H_3=H_2O+C_2H_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-73	r-51	$OH+C_2H_4=C_2H_3+H_2O$	0.162	0.110	0.052	0.000	0.000	0.065
s-74	r-52	$OH+C_2H_6=C_2H_5+H_2O$	0.495	0.324	0.152	0.067	0.000	0.208
s-75	r-53	$2HO_2=O_2+H_2O_2$	0.071	0.067	0.057	0.052	0.071	0.064
s-76	r-54	$2HO_2=O_2+H_2O_2$	0.510	0.329	0.229	0.148	0.095	0.262
s-77		$HO_2+CH_2=OH+CH_2O$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-78	r-55	$HO_2+CH_3=O_2+CH_4$	0.952	0.776	0.305	0.076	0.005	0.423
s-79	r-56	$HO_2+CH_3=OH+CH_3O$	1.000	1.000	0.995	0.886	0.310	0.838
s-80	r-57	$HO_2+CO=OH+CO_2$	0.110	0.014	0.005	0.000	0.000	0.026
s-81	r-58	$HO_2+CH_2O=HCO+H_2O_2$	0.348	0.205	0.110	0.029	0.000	0.138
s-82	r-59	$CH_2+O_2=>OH+H+CO$	0.043	0.081	0.119	0.019	0.029	0.058
s-83	r-60	$CH_2+H_2=H+CH_3$	0.000	0.005	0.038	0.048	0.100	0.038
s-84	r-61	$2CH_2=H_2+C_2H_2$	0.133	0.110	0.110	0.090	0.005	0.090
s-85	r-62	$CH_2+CH_3=H+C_2H_4$	0.390	0.319	0.324	0.229	0.238	0.300
s-86	r-63	$CH_2+CH_4=2CH_3$	0.005	0.005	0.043	0.010	0.000	0.013
s-87	r-64	$CH_2^{(s)}+N_2=CH_2+N_2$	0.810	0.886	0.838	0.690	0.362	0.717
s-88	r-65	$CH_2^{(s)}+O_2=H+OH+CO$	0.200	0.395	0.381	0.376	0.319	0.334
s-89	r-66	$CH_2^{(s)}+O_2=CO+H_2O$	0.619	0.624	0.633	0.476	0.100	0.490
s-90	r-67	$CH_2^{(s)}+H_2=CH_3+H$	0.038	0.057	0.081	0.129	0.200	0.101
s-91	r-68	$CH_2^{(s)}+H_2O=CH_2+H_2O$	0.000	0.000	0.024	0.000	0.010	0.007

Tableau C.1. (suite)

			η					
			0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
121 r.	93 r.	Formule de réaction	Ψ_r^*					
s-92		$\text{CH}_2^{(s)} + \text{CH}_3 = \text{H} + \text{C}_2\text{H}_4$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-93	r-69	$\text{CH}_2^{(s)} + \text{CH}_4 = 2\text{CH}_3$	0.000	0.000	0.010	0.000	0.000	0.002
s-94		$\text{CH}_2^{(s)} + \text{CO} = \text{CH}_2 + \text{CO}$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-95		$\text{CH}_2^{(s)} + \text{CO}_2 = \text{CH}_2 + \text{CO}_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-96	r-70	$\text{CH}_2^{(s)} + \text{CO}_2 = \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$	0.086	0.052	0.043	0.010	0.000	0.038
s-97		$\text{CH}_2^{(s)} + \text{C}_2\text{H}_6 = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_5$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-98	r-71	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{O} + \text{CH}_3\text{O}$	1.000	0.881	0.800	0.510	0.038	0.646
s-99	r-72	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$	0.962	0.924	0.762	0.338	0.000	0.597
s-100	r-73	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CH}_4$	0.381	0.319	0.143	0.095	0.081	0.204
s-101	r-74	$2\text{CH}_3(+\text{M}) = \text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$	0.876	0.857	0.786	0.676	0.271	0.693
s-102	r-75	$2\text{CH}_3 = \text{H} + \text{C}_2\text{H}_5$	0.952	0.900	0.776	0.700	0.252	0.716
s-103	r-76	$\text{CH}_3 + \text{HCO} = \text{CH}_4 + \text{CO}$	0.371	0.367	0.319	0.143	0.000	0.240
s-104	r-77	$\text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{O} = \text{HCO} + \text{CH}_4$	0.881	0.643	0.471	0.019	0.000	0.403
s-105	r-78	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$	0.038	0.005	0.005	0.000	0.000	0.010
s-106	r-79	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$	0.233	0.067	0.000	0.000	0.000	0.060
s-107	r-80	$\text{HCO} + \text{H}_2\text{O} = \text{H} + \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	0.467	0.300	0.371	0.248	0.143	0.306
s-108	r-81	$\text{HCO} + \text{M} = \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	0.976	0.967	0.924	0.819	0.524	0.842
s-109	r-82	$\text{HCO} + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CO}$	1.000	1.000	1.000	0.995	0.667	0.932
s-110	r-83	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	1.000	1.000	0.929	0.533	0.086	0.710
s-111	r-84	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 = \text{HCO} + \text{CH}_2\text{O}$	0.500	0.467	0.395	0.210	0.000	0.314
s-112	r-85	$\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M}) = \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_2(+\text{M})$	0.000	0.000	0.014	0.000	0.000	0.003
s-113	r-86	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{C}_2\text{H}_4$	0.629	0.600	0.529	0.262	0.014	0.407
s-114	r-87	$\text{O} + \text{CH}_3 = \text{H} + \text{H}_2 + \text{CO}$	0.657	0.762	0.824	0.905	0.924	0.814
s-115	r-88	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	0.586	0.567	0.533	0.390	0.386	0.492
s-116	r-89	$\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{H}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	0.024	0.024	0.014	0.024	0.000	0.017
s-117	r-90	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H} + \text{CO}_2$	0.881	0.914	0.929	0.719	0.219	0.732
s-118	r-91	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 = \text{O} + \text{CH}_2\text{O}$	0.233	0.333	0.238	0.095	0.005	0.181
s-119		$\text{CH}_2 + \text{CH}_2 = 2\text{H} + \text{C}_2\text{H}_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
s-120	r-92	$\text{CH}_2^{(s)} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	0.005	0.000	0.000	0.010	0.005	0.004
s-121	r-93	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$	0.010	0.019	0.033	0.000	0.000	0.012
Nombre total			83	84	87	81	73	93
Réactions communes			8	8	4	5	4	1

* Les cellules sont colorées selon les valeurs de Ψ_r : rose – $\Psi_r \geq 0.75$, jaune – $0.25 \leq \Psi_r < 0.75$, gris – $\Psi_r = 0$ (réaction éliminée par la réduction).

Tableau C.2. Fréquences des espèces dans les unions des mécanismes réduits locaux selon η .

N ^o	Espèce	η					
		0	0.05	0.1	0.2	0.5	0-0.5
		$\Psi_s^{\#}$					
1	H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
2	H	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
3	O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
4	O ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
5	OH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
6	H ₂ O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
7	HO ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
8	H ₂ O ₂	0.938	0.795	0.705	0.619	0.567	0.725
9	CH ₂	0.948	0.981	0.981	0.914	0.514	0.868
10	CH ₂ ^(s)	0.905	0.943	0.962	0.952	0.710	0.894
11	CH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
12	CH ₄	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
13	CO	1.000	1.000	1.000	1.000	0.995	0.999
14	CO ₂	1.000	0.981	0.981	0.867	0.710	0.908
15	HCO	1.000	1.000	1.000	1.000	0.919	0.984
16	CH ₂ O	1.000	1.000	1.000	1.000	0.919	0.984
17	CH ₃ O	1.000	1.000	1.000	0.914	0.333	0.849
18	C ₂ H ₂	0.586	0.562	0.586	0.581	0.295	0.522
19	C ₂ H ₃	0.719	0.667	0.657	0.581	0.295	0.584
20	C ₂ H ₄	1.000	0.986	0.867	0.629	0.319	0.760
21	C ₂ H ₅	1.000	0.995	0.895	0.743	0.271	0.781
22	C ₂ H ₆	0.876	0.857	0.786	0.676	0.271	0.693
Nombre total		22	22	22	22	22	22
Espèces communes		16	13	13	12	9	9

[#] Les cellules sont colorées selon les valeurs de Ψ_s : rose – $\Psi_r = 1$, jaune – $0.75 \leq \Psi_r < 1$.

Annexe D.

Version réduite du mécanisme de Mueller pour l'autoinflammation de H₂ dans de l'air vicié

Le mécanisme donné dans la présente annexe a été obtenu à partir du mécanisme de Mueller et al. (1999a,b). Les conditions de réduction sont décrites dans la section 3.5.4. Ce mécanisme est composé de 13 espèces réactives et de 23 réactions.

Le mécanisme ci-dessous a un format compatible avec la bibliothèque CHEMKIN. Les constantes de vitesse des réactions sont spécifiées par trois paramètres de la loi d'Arrhenius A , b et E/R_u . Les unités de mesure pour le facteur pré-exponentiel A sont mol-s-cm³. L'énergie d'activation, présentée sous la forme E/R_u , est mesurée en K.

Pour les réactions unimoléculaires, les paramètres d'Arrhenius suivant la formule chimique correspondent à la constante de vitesse K_∞ ($P \rightarrow \infty$). Les paramètres d'Arrhenius pour K_0 ($P \rightarrow 0$) sont identifiés par le mot-clef « LOW ».

Le mot-clef « TROE » précède les quatre paramètres α , T^{***} , T^* , T^{**} de l'approximation Troe. Le mot-clef « SRI » précède les quatre paramètres a , b , c , d de l'approximation SRI.

Les réactions avec le 3^e corps M sont suivies d'une liste spécifiant les efficacités catalytiques d'espèces. Pour les espèces qui ne figurent pas dans la liste, l'efficacité catalytique est égale à 1.

Mécanisme sous le format CHEMKIN

```

ELEMENTS
H O N
END
SPECIES
H2      O2      OH      H2O      H      O      HO2
N      NO      NO2     HNO     HONO     N2
END
REACTIONS  MOLES  KELVINS
!      1
H+O2 = O+OH      1.91000E+14  0.0000  8272.9
!      2
O+H2 = H+OH      5.08000E+04  2.6700  3165.2
!      3
H2+OH = H2O+H    2.16000E+08  1.5100  1726.0
!      4
O+H2O = 2OH      2.97000E+06  2.0200  6743.1
!      5
H2+M = 2H+M      4.58000E+19  -1.4000  52525.8
  H2O/12/ H2/2.5/
!      6
O+H+M = OH+M     4.71000E+18  -1.0000  0.0
  H2O/12/ H2/2.5/
!      7
H+OH+M = H2O+M   2.21000E+22  -2.0000  0.0
  H2O/12/ H2/2.5/
!      8
H+O2 (+M) = HO2 (+M)  1.48000E+12  0.6000  0.0
  H2O/12/ H2/2.5/
                                LOW /3.50000E+16  -0.4100  -563.6/
                                TROE /5.00000E-01  2.0000E+01  1.0000E+20/
!      9
HO2+H = H2+O2    1.66000E+13  0.0000  412.6
!      10

```

Annexe D

HO2+H = 2OH			7.08000E+13	0.0000	151.0
!	11				
HO2+O = OH+O2			3.25000E+13	0.0000	0.0
!	12				
HO2+OH = H2O+O2			2.89000E+13	0.0000	-251.6
!	13				
N+NO = N2+O			2.70000E+13	0.0000	178.6
!	14				
N+O2 = NO+O			9.00000E+09	1.0000	3270.9
!	15				
N+OH = NO+H			3.36000E+13	0.0000	193.7
!	16				
NO+O(+M) = NO2(+M)			1.30000E+15	-0.7500	0.0
H2/2.5/ H2O/12/					
			LOW /4.72000E+24	-2.8700	780.0/
	SRI /2.6803E-01	1.4352E+03	4.1609E+03	1.0000E+00	0.0000E+00/
!	17				
NO+H(+M) = HNO(+M)			1.52000E+15	-0.4100	0.0
			LOW /3.00000E+19	-1.3200	369.9/
	SRI /8.2000E-01	0.0000E+00	2.0000E+01	1.0000E+00	0.0000E+00/
!	18				
NO+OH(+M) = HONO(+M)			1.99000E+12	-0.0500	-362.8
			LOW /5.08000E+23	-2.5100	-34.0/
	SRI /6.2000E-01	0.0000E+00	2.0000E+01	1.0000E+00	0.0000E+00/
!	19				
NO2+H2 = HONO+H			7.33000E+11	0.0000	14492.6
!	20				
NO2+O = O2+NO			1.05000E+14	-0.5200	0.0
!	21				
NO2+H = NO+OH			1.32000E+14	0.0000	182.2
!	22				
HO2+NO = NO2+OH			2.11000E+12	0.0000	-241.0
!	23				
HONO+OH = H2O+NO2			1.70000E+12	0.0000	-261.7
END					

Annexe E.

Version réduite du mécanisme GRI-Mech v.3.0 pour l'autoinflammation de H₂ dans de l'air vicié

Le mécanisme donné dans la présente annexe a été obtenu à partir du mécanisme GRI-Mech v.3.0. Les conditions de réduction sont décrites dans la section 3.5.4. Ce mécanisme est composé de 15 espèces réactives et de 32 réactions.

Le mécanisme ci-dessous a un format compatible avec la bibliothèque CHEMKIN. Les constantes de vitesse des réactions sont spécifiées par trois paramètres de la loi d'Arrhenius A , b et E/R_u . Les unités de mesure pour le facteur pré-exponentiel A sont mol-s-cm³. L'énergie d'activation, présentée sous la forme E/R_u , est mesurée en K.

Pour les réactions unimoléculaires, les paramètres d'Arrhenius suivant la formule chimique correspondent à la constante de vitesse K_∞ ($P \rightarrow \infty$). Les paramètres d'Arrhenius pour K_0 ($P \rightarrow 0$) sont identifiés par le mot-clef « LOW ».

Le mot-clef « TROE » précède les quatre paramètres α , T^{***} , T^* , T^{**} de l'approximation Troe.

Les réactions avec le 3^e corps M sont suivies d'une liste spécifiant les efficacités catalytiques d'espèces. Pour les espèces qui ne figurent pas dans la liste, l'efficacité catalytique est égale à 1.

Mécanisme sous le format CHEMKIN

```

ELEMENTS
O H N
END
SPECIES
H2      H      O      O2      OH      H2O      HO2      H2O2
N      NH      NO      NO2     N2O     HNO      N2
END
REACTIONS  MOLES  KELVINS
!      1
O+H2 = H+OH      3.87000E+04  2.7000  3150.1
!      2
O+HO2 = OH+O2    2.00000E+13  0.0000  0.0
!      3
H+O2+M = HO2+M   2.80000E+18  -0.8600  0.0
O2/0/ H2O/0/ N2/0/
!      4
H+2O2 = HO2+O2   2.08000E+19  -1.2400  0.0
!      5
H+O2+H2O = HO2+H2O  1.12600E+19  -0.7600  0.0
!      6
H+O2+N2 = HO2+N2  2.60000E+19  -1.2400  0.0
!      7
H+O2 = O+OH      2.65000E+16  -0.6707  8575.3
!      8
2H+M = H2+M      1.00000E+18  -1.0000  0.0
H2/0/ H2O/0/
!      9
2H+H2 = 2H2      9.00000E+16  -0.6000  0.0
!     10
2H+H2O = H2+H2O  6.00000E+19  -1.2500  0.0
!     11
H+OH+M = H2O+M   2.20000E+22  -2.0000  0.0
H2/0.73/ H2O/3.65/
!     12

```

Annexe E

H+HO2 = O2+H2	4.48000E+13	0.0000	537.4
! 13			
H+HO2 = 2OH	8.40000E+13	0.0000	319.5
! 14			
OH+H2 = H+H2O	2.16000E+08	1.5100	1726.0
! 15			
2OH (+M) = H2O2 (+M)	7.40000E+13	-0.3700	0.0
H2/2/ H2O/6/			
	LOW /2.30000E+18	-0.9000	-855.5/
TROE /7.3460E-01	9.4000E+01	1.7560E+03	5.1820E+03/
! 16			
2OH = O+H2O	3.57000E+04	2.4000	-1061.8
! 17			
OH+HO2 = O2+H2O	1.45000E+13	0.0000	-251.6
DUPLICATE			
! 18			
OH+H2O2 = HO2+H2O	1.70000E+18	0.0000	14799.6
! 19			
N+NO = N2+O	2.70000E+13	0.0000	178.6
! 20			
N+O2 = NO+O	9.00000E+09	1.0000	3270.9
! 21			
N+OH = NO+H	3.36000E+13	0.0000	193.7
! 22			
HO2+NO = NO2+OH	2.11000E+12	0.0000	-241.5
! 23			
NO+O+M = NO2+M	1.06000E+20	-1.4100	0.0
H2/2/ H2O/6/			
! 24			
NO2+O = NO+O2	3.90000E+12	0.0000	-120.8
! 25			
NO2+H = NO+OH	1.32000E+14	0.0000	181.2
! 26			
NH+H = N+H2	3.20000E+13	0.0000	166.1
! 27			
NH+H2O = HNO+H2	2.00000E+13	0.0000	6969.6
! 28			
NH+NO = N2O+H	3.65000E+14	-0.4500	0.0
! 29			
H+NO+M = HNO+M	4.48000E+19	-1.3200	372.4
H2/2/ H2O/6/			
! 30			
HNO+H = H2+NO	9.00000E+11	0.7200	332.1
! 31			
HNO+O2 = HO2+NO	1.00000E+13	0.0000	6541.8
! 32			
OH+HO2 = O2+H2O	5.00000E+15	0.0000	8720.7
DUPLICATE			
END			