



HAL
open science

Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides

Jean-François Izard

► **To cite this version:**

Jean-François Izard. Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides. Sciences de l'ingénieur [physics]. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2009. Français. NNT : . tel-00523520

HAL Id: tel-00523520

<https://theses.hal.science/tel-00523520>

Submitted on 5 Oct 2010

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.

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale : Sciences Pour l'Ingénieur et Aéronautique
Secteur de Recherche : Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Jean-François IZARD

Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides.

Directeurs de Thèse : **Arnaud MURA** et **Michel CHAMPION**

Soutenue le 24 Novembre 2009

devant la commission d'examen

- Jury -

M. R. BORGHI	Professeur émérite Ecole Centrale de Marseille, Examineur
M. M. CHAMPION	Directeur de Recherche CNRS Poitiers, Examineur
M. V. PERILLAT-AMEDE	Ingénieur expert Combustion, MBDA Chatillon, Examineur
M. L.F. FIGUEIRA DA SILVA	Professeur PUC Rio de Janeiro, Rapporteur
M. A. HADJADJ	Professeur INSA de Rouen, Rapporteur
M. N. MEYERS	Ingénieur expert Combustion, Snecma DMS Vernon, Examineur
M. A. MURA	Chargé de Recherche au CNRS, LCD, Poitiers

Ce travail n'aurait pas pu être accompli sans le soutien du CNES, du CNRS et de la Snecma
(Division Moteurs Spatiaux).

Remerciements

"La reconnaissance est la mémoire du coeur."

(Hans Christian Andersen)

Ce mémoire consacre trois années de thèse de doctorat. Il ne s'agit pas d'un travail isolé, mais du fruit de discussions et d'encouragements, d'épreuves et de succès. On en recueille trop facilement les lauriers une fois sur l'estrade, sans pouvoir jamais exprimer sa reconnaissance aux personnes dissimulées dans l'assistance et dont le regard discret mais bienveillant rassure. Je tiens ainsi à remercier tout particulièrement messieurs Arnaud Mura et Michel Champion, mes directeurs de thèse, pour la confiance qu'ils m'ont accordée, la connaissance d'un sujet aussi riche qu'ils ont su partager, et leurs qualités humaines. Je tiens aussi à remercier messieurs Nicolas Meyers et Didier Saucereau ainsi que l'ensemble des personnes de SNECMA Vernon avec qui j'ai pu travailler. Leur expertise et leurs remarques m'ont permis de mener à bien ce projet.

J'exprime ma profonde reconnaissance à messieurs Roland Borghi pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, Luis Fernando Figueira da Silva et Abdellah Hadjadj pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail et pour avoir supporté la tâche de rapporteur.

J'aimerais aussi remercier l'ensemble des personnes du laboratoire de combustion et de détonique pour leur accueil, les membres de l'équipe Combustion et Turbulence et tout particulièrement Vincent Robin, Ignace Befeno, et Cecile Losier. J'ai aussi eu de nombreuses interactions avec Guillaume Lehnasch qui a rejoint le laboratoire d'études aérodynamiques. Ses connaissances sur le sujet et sur les jets fortement sous-détendus m'ont aidé à mener des simulations numériques de qualité. Je remercie aussi Didier Chargy de la société INCKA pour son support informatique, ainsi que Jacques Nérault du laboratoire d'études thermiques.

Parce qu'ils sont généreux et indispensables au quotidien, je remercie les amis et futurs docteurs : Michael Arnoux, Nicolas Chauris, Thierry Jardin, Tony Ruiz, pour ne citer qu'eux.

J'aimerais aussi avoir une pensée pour mon frère Olivier, à qui je dédie ce mémoire... Au moment où j'en ai eu le plus besoin, j'ai pu compter sur vous tous : mes chers parents, ma chère Andrea, Jo, Jackie, Richard, Annette, Martine, Michel, Aurélien, May. Vous m'avez apporté toute votre affection et su me redonner force et courage pour comprendre que la vie est faite de tous ces moments, ces rencontres, dont il faut se souvenir et apprécier chaque seconde, car le meilleur reste à venir...A vous tous, merci.

Résumé

Le travail présenté dans ce mémoire est consacré à la combustion turbulente non-prémélangée dans des écoulements rapides, et éventuellement diphasiques. Pour ce type de conditions, il devient nécessaire, du point de vue de la modélisation, de tenir compte du couplage existant entre les effets de compressibilité, les processus de mélange turbulent et la cinétique chimique. Dans ces écoulements, la conversion de tout ou partie de l'énergie cinétique de l'écoulement sous forme d'enthalpie sensible va influencer le développement des réactions chimiques et peut contribuer notablement à la conversion des réactifs en produits de combustion ainsi qu'à la stabilisation des flammes. De plus, les échelles de temps caractéristiques du mélange turbulent et de la cinétique chimique sont susceptibles d'être du même ordre de grandeur et l'hypothèse de chimie infiniment rapide n'est pas toujours applicable. Dans cette étude, une approche basée sur l'évaluation de la PDF jointe de deux quantités scalaires est retenue : la première variable permet de quantifier la richesse locale du mélange, la seconde caractérise l'écart à l'état d'équilibre chimique. Une hypothèse de "chimie brusque" permet d'introduire une dépendance explicite entre ces deux variables pour s'en tenir à la seule détermination de la PDF de la variable de mélange. Cette approche est étendue au cas de la combustion supersonique en considérant de surcroît les variations d'enthalpie totale. Enfin, les fluctuations de composition induites par la vaporisation d'un des deux réactifs sont elles-aussi prises en compte. Le modèle complet est implanté dans un code de calcul Navier-Stokes tridimensionnel compressible et réactif. Dans le cadre de cette étude, la résolution est couplée à une méthode d'adaptation de maillage qui permet d'améliorer significativement la représentation des zones de mélange et des fortes discontinuités. L'approche proposée est ensuite validée en s'appuyant sur différentes géométries : jets co-courants supersoniques H₂-air vicié, jets fortement sous-détendus, chambre de combustion de type Scramjet. Enfin, le modèle est aussi employé pour effectuer un calcul de la configuration Mascotte de l'Onera dans un cas sous-critique. Les simulations numériques correspondantes conduisent à des résultats encourageants et ouvrent de nombreuses perspectives aussi bien quant à l'utilisation du modèle le cadre d'approches U-RANS ou LES que vis-à-vis de son extension à des conditions de combustion extrêmes (super-critiques).

Abstract

This work is dedicated to the study of non-premixed turbulent combustion in high-speed and two-phase flows. From a modeling point of view, it is of primary importance to take into consideration the coupling that exists for those configurations between the effects of compressibility, turbulent mixing, and chemistry. In supersonic reactive flows, the conversion of a portion of kinetic energy into heat or enthalpy is to influence significantly the early developments of chemical reactions and thus, lead to an increase of the chemical conversion of reactants into products of reaction, and contribute to the stabilisation process of the flame. Moreover, the value of the time scale representative of the turbulent mixing and the value of the chemical time scale are expected to be comparable, so that the fast chemistry assumption can be questioned. In this study, an approach based on the estimation of the joint PDF of two scalars, the first quantity describing the local composition of the mixture, and the second characterizing the progress of the reaction, is retained. The model relies on the sudden chemistry assumption, thus permitting a strong but clearly stated functional dependence between the two scalars introduced. As a result, the joint PDF of the two scalars can be simply expressed from the knowledge of the marginal mixture fraction PDF. This approach is extended to the description of supersonic combustion by considering the variations of total enthalpy. Finally, the fluctuations of composition induced by the evaporation of one of the two reactants are also taken into account. The full model is implemented into Computational Fluid Dynamics code, solving the three-dimensional compressible and reactive Navier-Stokes equations. In this work, the representation of the mixing layers and discontinuities is improved thanks to the use of a mesh adaptation strategy, coupled to the CFD code. The numerical and modeling approach is then validated against various configurations : coflowing H₂-vitiated air supersonic jets, highly underexpanded jets, and a Scramjet-like combustion chamber. Finally, the modeling framework is also extended to the simulation of the Mascotte configuration (ONERA) with sub-critical liquid oxygen. The results obtained on those configurations are in satisfactory agreement with both underlying physics and experimental data when available, and the numerical code and modeling strategy are shown to be viable tools for further developments and investigations within U-RANS or LES approaches, and for its extension to more extreme conditions (super-critical oxygen).

Table des matières

1	Introduction	17
1.1	Contexte et enjeux de l'étude	17
1.1.1	Les lanceurs spatiaux européens	17
1.1.2	La propulsion hypersonique aérobie	20
1.2	Description phénoménologique	23
1.2.1	Développement de la turbulence dans une couche de mélange	24
1.2.2	Stabilisation des flammes partiellement prémélangées	26
1.2.3	Structures des jets supersoniques sous-détendus	29
1.2.4	Flammes jets turbulentes diphasiques	32
1.3	Organisation du manuscrit	35
2	Equations de l'aérothermochimie	37
2.1	Equations instantanées	38
2.2	Discrétisation, filtrage, approche statistique	40
2.3	Traitement statistique pour les écoulements compressibles	42
2.4	Equations moyennées	45
2.4.1	Modélisation du flux turbulent de quantité de mouvement	46
2.4.2	Validité des fermetures en situation compressible	53
3	Etude de l'allumage spontané	55
3.1	Introduction	55
3.1.1	Théorie des collisions moléculaires et du complexe activé	56
3.1.2	Observations aux limites d'allumage	58
3.1.3	Auto-allumage dans les écoulements à haute vitesse	60
3.1.4	Conclusions	63
3.2	Etude paramétrique des délais d'auto-allumage	64
3.2.1	Schémas cinétiques détaillés	64
3.2.2	Etude paramétrique des délais d'allumage	66
3.2.3	Discussion	73

4	Modélisation de la combustion turbulente	75
4.1	Calcul des flammes turbulentes non-prémélangées	76
4.1.1	Approximation de Schwab-Zel'dovich pour une chimie infiniment rapide	76
4.1.2	Ecart à l'hypothèse de chimie infiniment rapide	78
4.2	Présentation du modèle MIL	79
4.2.1	Estimation de la PDF jointe	79
4.2.2	Trajectoire Lagrangienne dans l'espace des compositions	80
4.2.3	Echelles temporelles caractéristiques et domaine d'inflammation	82
4.2.4	Taux de production moyens	84
4.2.5	Validation préliminaire de l'hypothèse de chimie brusque	85
4.2.6	Etude préliminaire de la réponse du modèle	88
4.2.7	Conclusions	89
4.3	Extension du modèle à la combustion supersonique	89
4.3.1	Précédents travaux	90
4.3.2	Principe de la modélisation proposée	92
4.3.3	Echelle de temps chimique	92
4.3.4	Echelle temporelle caractéristique de la convection	95
4.3.5	Conclusion	96
4.4	Extension aux flammes turbulentes diphasiques	96
4.4.1	PDF de la fraction de mélange	97
4.4.2	Fermeture Lagrangienne	99
4.4.3	Temps de mélange en diphasique	100
4.4.4	Conclusions	102
5	Présentation de la méthode numérique	103
5.1	Présentation du problème de Riemann	104
5.1.1	Notions élémentaires pour la simulation des écoulements compressibles	104
5.1.2	Le problème de Riemann	105
5.2	Méthode numérique utilisée dans N3SNatur	107
5.2.1	Discrétisation spatiale : approche mixte éléments finis / volumes finis .	108
5.2.2	Calculs de flux décentrés : méthode de Godunov et schéma de Roe	110
5.2.3	Fonctions de limitation : ajout d'une propriété TVD	115
5.2.4	Interpolation spatiale de la convection	118
5.2.5	Discrétisation temporelle	119
5.3	Réadaptation de maillage <i>a posteriori</i>	122
5.3.1	Principe de la méthode	123
5.3.2	Maillage optimal	124
5.3.3	Optimisation du maillage	125

5.3.4	Mise en oeuvre	126
5.4	Module CEDILLE	129
5.4.1	Représentation Eulérienne Lagrangienne	129
5.4.2	Approche cinétique et modèle semi-fluide	131
5.4.3	Modèles physiques employés	133
5.4.4	Conclusions	138
6	Présentation des cas tests de simulation numérique	139
6.1	La flamme jet de Cheng	140
6.1.1	Description du cas test	140
6.1.2	Données et observations expérimentales	141
6.1.3	Domaine de calcul	143
6.1.4	Résultats qualitatifs : auto-allumage et décollement de flamme	144
6.1.5	Courbes quantitatives	146
6.1.6	Conclusions à l'issue de la simulation numérique	147
6.2	Modèle de Scramjet de Waidmann	148
6.2.1	Description du montage expérimental	148
6.2.2	Domaine de calcul et conditions aux limites	149
6.2.3	Résultats de la simulation numérique non-réactive	150
6.2.4	Résultats de la simulation numérique en réactif	155
6.3	Conclusion	159
7	Applications à la combustion dans les Moteurs Fusées	161
7.1	Jet réactif fortement sous-détendu	162
7.1.1	Description de la géométrie	162
7.1.2	Domaine de calcul	163
7.1.3	Résultats des simulations non réactives	164
7.1.4	Auto-allumage et flamme stabilisée	166
7.1.5	Vers le transitoire d'allumage réel	168
7.2	Cas MASCOTTE A10 : flamme diphasique subcritique	169
7.2.1	Approche Lagrangienne pour le cas A10	172
7.2.2	Simulation non-réactive	175
7.2.3	Simulation réactive	178
7.3	Conclusions	181
8	Conclusions et perspectives	183

A	Détail des schémas cinétiques	201
A.1	Schéma de Kee et al. associé à Mitchell et al.	202
A.2	Schémas de Jachimowski et al.	204
A.3	Schéma de Eklund et al.	207
A.4	Schéma de Westbrook et al. associé à celui de Mitchell et al.	209
B	Expression du taux de réaction d'auto-allumage	211
B.1	Premier cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^-$	212
B.2	Second cas : $\xi_{st} < \tilde{\xi}$	213
B.3	Troisième cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^+$	214
B.4	Quatrième cas : $\xi_{st} < \xi_{max}$	215
B.5	Dernier cas : $\xi_{st} \geq \xi_{max}$	216
C	Numerical Recipes	217
D	Equation de la variance de la fraction de mélange en diphasique	219
E	Evaporation d'une goutte en milieu dilué	223
E.1	Conservation de la masse	224
E.2	Conservation de l'énergie	225
E.3	Echauffement de la goutte	226
E.4	Nombre de transfert de masse B	227

Nomenclature

Lettres latines

a	: taux d'étirement de la flamme
a_c	: constante de modélisation
A	: coefficient pré-exponentiel de la loi d'Arrhénius
B_m	: paramètre de transfert de Spalding
c_i	: vitesse du son dans le milieu i
C_μ, C_D	: constante de modélisation
C_{MIX}	: constante de mélange
C_v	: capacité calorifique à volume constant
C_p	: capacité calorifique à pression constante
$C_{\varepsilon_1}, C_{\varepsilon_2}, C_{\varepsilon_3}$: constantes du modèle de turbulence
$d1, d2, d3$: diamètres des entrées 1, 2, et 3
d_{LOx}	: diamètre du jet d'oxygène liquide
D	: coefficient de diffusion
D_k	: coefficient de diffusion de l'espèce k
D_T	: coefficient de diffusion turbulente
Da	: nombre de Damköhler
D_{jk}	: effets de diffusion dans l'équation pour le tenseur de Reynolds.
e	: énergie interne du mélange
e_t	: énergie totale du mélange diminuée de l'enthalpie de formation des espèces.
E	: énergie totale du mélange.
E_a	: énergie d'activation
F_j	: résultante des forces volumiques
f'	: fluctuations de f autour de sa valeur moyenne au sens de Reynolds
f''	: fluctuations de f autour de sa valeur moyenne au sens de Favre
\overline{f}	: moyenne de Reynolds de la variable f
\tilde{f}	: moyenne de Favre de la variable f
h	: enthalpie statique
h_t	: enthalpie totale
H_{jk}	: terme de corrélation pour l'équation du tenseur de Reynolds
k	: énergie cinétique turbulente
k_B	: constante de Boltzmann
l_m	: longueur de mélange
l_T	: longueur caractéristique de la turbulence
L	: chaleur latente de changement d'état à pression constante

m	: masse totale du mélange
m_c	: nombre de Mach en amont du choc
\mathcal{M}_{H_2}	: masse moléculaire de H ₂
\mathcal{M}_{O_2}	: masse moléculaire de O ₂
\mathcal{M}	: masse moléculaire du mélange
Ma_c	: nombre de Mach convectif
M_T	: nombre de Mach turbulent
NPR	: rapport de pression caractérisant la nature d'un jet
N	: nombre total d'espèces considérées dans le mélange
n_{H_2}	: concentration moléculaire en H ₂
n_{O_2}	: concentration moléculaire en O ₂
p	: pression
$P(f > f^o)$: probabilité que f soit supérieure à f^o
$\tilde{P}(\xi)$: PDF de la fraction de mélange ξ
Pr_T	: nombre de Prandtl turbulent
P_{jk}	: terme de production dans l'équation pour le tenseur de Reynolds
P_k	: terme de production par les gradients moyens (equation pour k)
q_i	: flux d'énergie
Q_T	: critère de qualité du maillage
r_{st}	: rapport stoechiométrique
r_{H_2}	: rayon de la molécule de dioxygène
R	: constante des gaz parfaits
Re	: nombre de Reynolds
RM	: rapport de mélange
Sc	: nombre de Schmidt
Sc_T	: nombre de Schmidt turbulent
S_{ij}	: tenseur moyen des déformations
T	: température
T_0	: température du mélange frais
u	: vitesse du fluide
u_i	: composante i de la vitesse
u_1	: vitesse dans le premier courant
u_2	: vitesse dans le second courant
\vec{V}	: vecteur vitesse du fluide
V	: volume du système réactif
\mathcal{V}	: volume spécifique
W_k	: masse molaire de l'espèce k
x, y, z	: coordonnées

Y_k^{MAX}	: fraction massique maximale de l'espèce k
Y_k	: fraction massique de l'espèce k
Y_f	: fraction massique de combustible
Z	: nombre de Zel'dovich
\mathcal{Z}	: nombre de collisions possibles dans la théorie cinétique des gaz par unité de temps et de volume

Lettres grecques

α	: diffusivité thermique
δ_{ij}	: symbole de Kronecker
$\Delta\tau$: fluctuation du temps de mélange
ΔJ	: fluctuation de la position des sauts
$\rho\epsilon_{jk}$: terme de dissipation
γ	: rapport des capacités calorifiques
γ_i	: rapport des capacités calorifiques dans le courant de réactif i
λ	: conductivité thermique du mélange
κ	: constante de vitesse de réaction
μ	: viscosité
μ_T	: viscosité turbulente
ν_i	: coefficients stoechiométriques de la réaction pour l'espèce i
ν_{st}	: coefficient stoechiométrique massique
ν	: viscosité cinématique
ω	: taux de réaction chimique
ω_Y	: taux de réaction chimique pour Y
ω_v	: terme source d'évaporation en diphasique
ω_{AMA}	: tolérance définie pour la méthode de réadaptation AMA
ϕ	: richesse de mélange
ρ	: masse volumique du mélange
ρ_k	: masse volumique de l'espèce k
ρ_1	: masse volumique du premier courant de réactif
ρ_2	: masse volumique du second courant de réactif
$\dot{\rho}_k$: terme source de masse pour l'espèce k
$\sigma_T, \sigma_k, \sigma_\epsilon$: constante de modélisation dans l'équation de k
τ	: échelle de temps de mélange
τ_{chem}	: échelle de temps chimique
τ_β	: échelle de temps de diffusion ou de Batchelor
τ_T	: échelle de temps intégrale
τ_{ij}	: tenseur des contraintes visqueuses

ξ	: fraction de mélange
ξ_{st}	: fraction de mélange stoechiométrique
ξ_{J-}	: valeur de ξ d'inflammation des particules provenant du courant d'oxydant pur
ξ_{J+}	: valeur de ξ d'inflammation des particules provenant du courant de combustible pur
ε	: dissipation de l'énergie turbulente
ε_s	: dissipation solénoïdale
ε_c	: dissipation dilatationnelle due aux effets compressibles
ε_h	: dissipation dilatationnelle due à la chaleur de réaction
ε_{jk}	: dissipation dans l'équation du tenseur de Reynolds
Π_d	: Terme de pression-dilatation (equation pour k)
$ \Omega $: surface du domaine de calcul

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte et enjeux de l'étude

1.1.1 Les lanceurs spatiaux européens

Intégration des connaissances aux outils de conception.

La performance et la stabilité des lanceurs spatiaux à ergols liquides reposent très largement sur celles de leur système propulsif qui fonctionne dans des conditions extrêmes : injection d'ergols cryotechniques, pression de plusieurs MPa, température de combustion dépassant 3000K, vitesses d'écoulement supersoniques, ondes de choc... L'amélioration des performances des moteurs nécessite la compréhension détaillée des mécanismes physiques mis en jeu et de leurs interactions. Cet objectif est d'autant plus difficile à atteindre que ces mécanismes se trouvent à la croisée de plusieurs disciplines scientifiques : mécanique des fluides, transferts thermiques, cinétique chimique, etc.

L'accroissement du nombre de lanceurs sur le marché commercial et la concurrence qui s'en est suivie a aussi induit une forte pression sur le coût des lancements. Celle-ci s'exerce à la fois sur les coûts de développement des produits futurs mais aussi sur le coût de production des matériels existants, sans pour autant déroger aux exigences élevées de qualité et de fiabilité dont le maître d'oeuvre reste le garant. Parallèlement à ces exigences de réduction des coûts, l'évolution du marché des satellites a induit la nécessité d'accroître la réactivité des industriels pour adapter l'offre de lancement aux besoins des opérateurs. Ceci conduit d'une part à réduire drastiquement les délais de développement, schématiquement d'un ordre 2 entre le moteur Vulcain équipant l'étage principal d'Ariane 5 et le moteur Vinci, qui devrait équiper l'étage supérieur de la prochaine Ariane. Plus encore, la réactivité des industriels est sollicitée sur des projets de futurs moteurs utilisant de nouveaux cycles et de nouveaux types d'ergols avec, là encore, des cycles de développement réduits.

Dans ce contexte, les défis à relever sont multiples. En tant que maître d'oeuvre, l'industriel doit tout d'abord maintenir une vigilance technique sans faille sur les matériels existants,

défi d'autant plus relevé dans un contexte où des procédés et des solutions technologiques réductrices de coûts sont introduits en production. L'introduction sans risques de ces avancées n'est possible que grâce à un niveau élevé de connaissance du fonctionnement des matériels, et des méthodologies adaptées pour qualifier les modifications apportées. La maîtrise des coûts de développement passe à la fois par une optimisation des phases de conception (concevoir plus vite et moins cher) sans oublier que 80% des coûts récurrents d'un matériel sont choisis durant ces phases, et par une réduction réfléchie des coûts de validation (faire moins d'essais et maîtriser les risques). Ceci dépend largement du degré de maîtrise des technologies utilisées, aigu en combustion cryotechnique car les conditions extrêmes rencontrées dans les moteurs-fusées font que des démarches spécifiques doivent être développées et validées si l'on veut éviter de recourir systématiquement à une approche expérimentale. Enfin, la réduction des coûts passe bien souvent par le développement de nouvelles technologies, en rupture avec l'état de l'art antérieur. L'identification et la hiérarchisation de concepts en rupture technologique dépendent largement du degré de compréhension des phénomènes physiques impliqués.

Les difficultés à maîtriser tous ces phénomènes ont été particulièrement sensibles à l'occasion des anomalies en vol constatées en 1985 et 1986 avec le moteur HM7 d'Ariane 4. Ceci a conduit le CNES et la Snecma à engager depuis cette date des efforts importants dans la recherche sur la combustion dans les moteurs fusées : combustion supersonique et cryotechnique ont ainsi fait l'objet de nombreuses études et programmes de recherche qui ont visé à accroître les connaissances et les capacités prédictives des outils de conception. Un Groupement De Recherche (GDR) baptisé Combustion dans les moteurs fusées associant le CNES, la Snecma, le CNRS et l'ONERA a été formellement créé en 1993. Ses actions ont été axées sur des travaux théoriques et de modélisation ainsi que sur des expérimentations à échelle réduite ou utilisant des fluides de substitution. La mise en place progressive du banc d'essai MASCOTTE à l'ONERA a permis ensuite de conduire des travaux expérimentaux avec les ergols cryogéniques réels, à des pressions de plus en plus proches de celles rencontrées dans les chambres de combustion de moteurs fusées. L'objectif essentiel de ce GDR a été l'analyse des phénomènes importants dans la combustion LOx-GH₂ à pression élevée. Ces activités ont permis de réaliser des avancées importantes cruciales pour le développement du moteur Vinci qui équipera l'étage supérieur ESC-B de la future Ariane 5. Ce moteur repose sur plusieurs "premières" techniques pour lesquelles les tests en vol demeurent encore impossibles et nécessitent le recours aux simulations numériques.

Le moteur Vinci

D'une poussée de 180 kN, il utilise le cycle *expander*, cycle qui présente des avantages importants en terme de performance et de capacité de redémarrage par rapport au cycle à générateur de gaz classiquement employé sur les moteurs à turbo-pompes européens. La caractéristique principale du cycle *expander* est d'employer la puissance issue du refroidissement de la chambre de

combustion pour entrainer les turbines des turbo-pompes. Il n'y a donc pas de générateur de gaz. La connaissance précise de la puissance thermique transmise aux parois dans le foyer revêt donc un caractère critique dans la conception de ce type de moteur puisqu'elle influe directement sur le régime du moteur. De plus, ce cycle thermodynamique s'accommode mal de fissures dans le circuit de refroidissement puisque cela dérive directement de la puissance des turbines. Contrairement au cycle à générateur de gaz, il faut donc garantir dès la conception que la paroi de la chambre sera suffisamment refroidie pour éviter qu'une fissure ne puisse intervenir pendant la vie du moteur. De ce fait, la connaissance précise des densités de flux thermique sur toute la chambre de combustion est importante pour résoudre à la fois le problème de la puissance globale disponible pour le moteur et d'autre part pour dimensionner le circuit de refroidissement et garantir une durée de vie suffisante. En termes de thèmes de recherche, cet objectif industriel correspond à un besoin d'amélioration de la modélisation des échanges thermiques et des interactions flamme/parois. L'amélioration de la morphologie de la flamme était un objectif du GDR combustion et les essais MASCOTTE à 60 bar (qui est aussi la pression de combustion du moteur Vinci) ont donné des éléments extrêmement intéressants pour étalonner les outils de calculs.



FIGURE 1.1: Vue du moteur VINCI (SNECMA).

Ainsi, outre une poussée trois fois supérieure (180kN pour VINCI contre 65kN pour HM7B), le moteur Vinci représenté Fig.1.1, se distingue du moteur HM7B par une capacité de cinq ré-allumages en vols et une conception résolument orientée vers la réduction des coûts. Compte

tenu de la difficulté qu'a constitué la mise au point d'une séquence d'allumage fiable du moteur HM7B, il est clair que l'allumage et le ré-allumage en vol de ce moteur cryotechnique est un des challenges majeurs de son développement. L'allumeur, constitué des produits d'une combustion H₂/O₂ à Rapport de Mélange RM=6 injectés à une pression de plusieurs bars, est placé en position centrale sur la plaque d'injection. Il doit conduire à un échauffement suffisant du débit de la première couronne latérale d'hydrogène pour entraîner l'inflammation du mélange réactif en aval des injecteurs cryogéniques périphériques. Compte tenu de la pression extérieure et du séquentiel d'allumage, la pression visée dans la chambre de combustion est de quelques millibars. Ainsi, le jet formé par la torche d'allumage peut présenter durant les premières millisecondes une structure de jet sous-détendu. La simulation de la séquence d'allumage peut être très instructive pour orienter des choix de conception et pour établir une logique d'essais de mise au point.

1.1.2 La propulsion hypersonique aérobie

La combustion en milieu supersonique devrait aussi se révéler utile pour le développement de nouveaux véhicules évoluant à un nombre de Mach très élevé pour lesquels on a pu observer un regain d'intérêt ces dernières années. Plusieurs programmes peuvent être cités depuis PREPHA (Programme de Recherche sur la Propulsion Hypersonique Avancée) qui avait vu le jour en 1993 afin d'essayer au sol des moteurs de type superstatoréacteurs. Ce programme, initié par les ministères de la défense et de la recherche, marquait la volonté de relancer les études sur le lanceur du futur utilisant la combustion aérobie. Suite à ces travaux, le programme JAPHAR (Joint Airbreathing Propulsion for Hypersonic Application Research), initié en 1998 par l'ONERA et le DLR, a permis de poursuivre l'effort dans ce domaine et d'essayer une nouvelle configuration de stato-mixte, en tirant bénéfice des acquis du PREPHA. En 2001 a été lancé le programme PROMETHEE, réalisé en coopération avec MBDA, sous l'égide de la Direction Générale de l'Armement (DGA). Le but est de faire un essai en vol d'un démonstrateur équipé d'un stato-mixte¹. Dans le cadre de ce projet, un nouveau moteur est en cours de développement. En lieu et place de l'hydrogène gazeux utilisé jusqu'à ce jour, ce moteur brûlera un mélange hydrogène/méthane qui permet de réduire le volume des réservoirs embarqués, par rapport aux dimensions de ceux qui doivent être employés avec l'hydrogène pur.

Ainsi, les récentes percées sont susceptibles d'ouvrir la voie aux vols intercontinentaux hypersoniques offrant des lignes commerciales New-York - Tokyo de moins de deux heures, mais cela pourrait également signifier des missiles capables de frapper n'importe quel continent en quelques heures... Nul besoin d'expliquer plus en détail pourquoi ces programmes reçoivent une attention considérable, mais le développement de la technologie appropriée à ce genre de

1. concept de statoréacteur fonctionnant d'abord en combustion subsonique, puis en combustion supersonique, pour pouvoir évoluer dans un domaine de Mach très large (de 2 à 8).

moteurs utilisant l'air ambiant nécessite le recours à des outils numériques fiables capables de prédire l'écoulement aérodynamique, ainsi que le processus complexe de stabilisation de la combustion qui doit s'établir dans ces flux à haut débit. Ce besoin est fortement relayé par la difficulté à mener des campagnes d'expériences à grande échelle.



FIGURE 1.2: Vue d'un montage expérimental de test d'un moteur de type scramjet (Boeing).

Parmi les défis à surmonter, celui de l'efficacité de la combustion est fortement lié à la stabilité et à l'achèvement de la combustion dans les limites géométriques des dimensions du moteur [1, 2, 3]. La réalisation de la combustion est principalement déterminée par la nature turbulente de l'écoulement qui doit assurer un mélange suffisamment efficace des réactifs. Cela peut constituer un problème majeur, en particulier dans les couches de mélange supersoniques pour lesquelles il a été établi que le taux d'évasement et le développement diminuaient avec l'augmentation du nombre de Mach convectif [4, 5]. De nombreuses recherches ont été menées afin de trouver un système efficace de stabilisation de la flamme dans ces conditions. Parmi celles-ci, on peut citer celles en cours chez Boeing, dont le banc expérimental est représenté Fig.1.2 ou encore celles de Fujimori et al. [6] qui ont étudié la possibilité de l'utilisation des ondes de choc (inévitables créées par l'entrée d'air d'un Scramjet²) pour favoriser l'accrochage de la flamme.

En effet, celles-ci sont susceptibles de créer, en interagissant avec une zone subsonique, une intensification de la turbulence à grande échelle qui participe au mélange des réactifs. Le montage expérimental utilisé par Fujimori est reporté Fig.1.3. Des mesures par vélocimétrie laser et des visualisations par strioscopie, voir Fig.1.4, ont montré qu'une large zone de recirculation s'établissait dans le sillage d'un dièdre et que les dimensions de cette zone étaient susceptibles

2. Réacteur sans organe mobile, composé d'une entrée d'air, d'un diffuseur, d'une chambre de combustion et d'une tuyère. La compression résulte uniquement de la pression dynamique de l'air due à la grande vitesse, et l'écoulement interne reste supersonique. C'est un système propulsif efficace à partir de Mach 6 environ.

d'être modifiées par interaction avec des ondes de choc. Le temps de résidence est donc susceptible d'augmenter, participant ainsi à la stabilisation de la combustion.

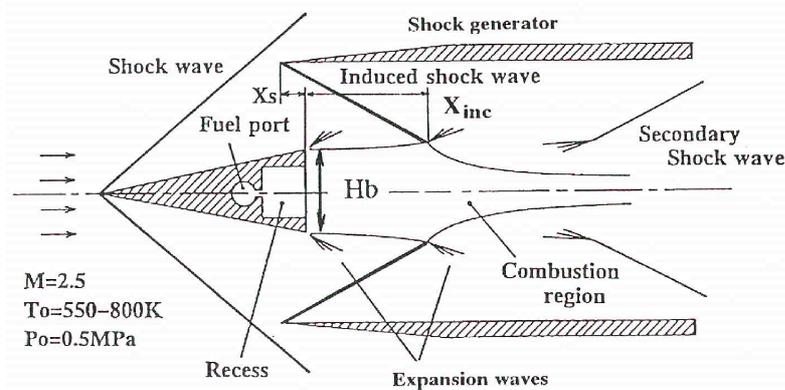


FIGURE 1.3: Montage expérimental employé par Fujimori et al.[6].

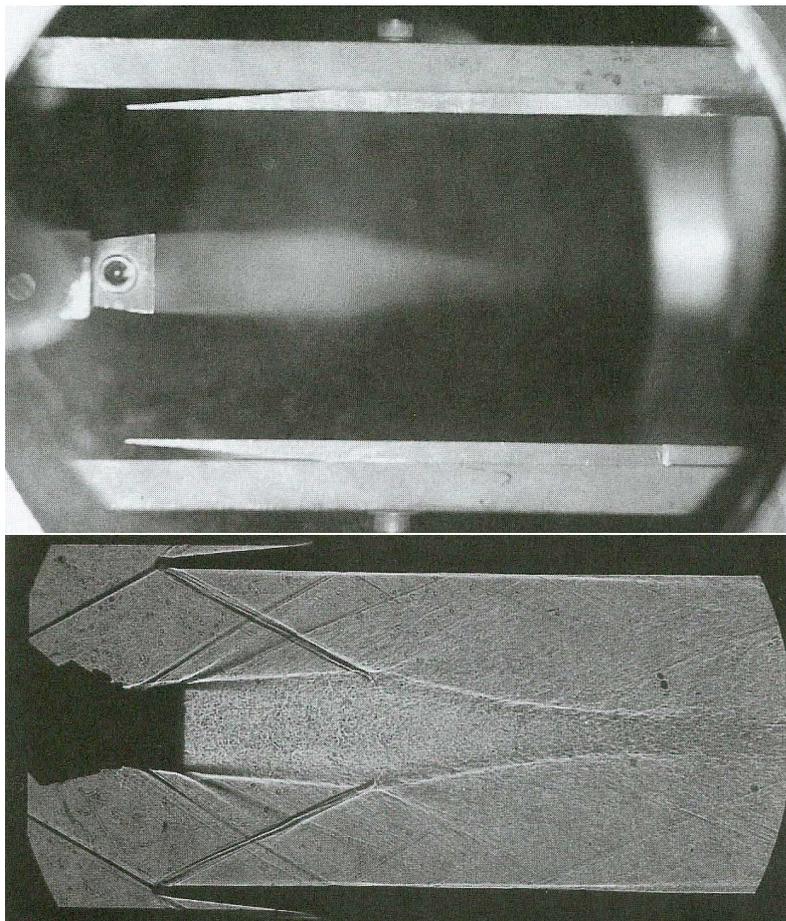


FIGURE 1.4: Photo et visualisation par strioscopie de l'écoulement réactif réalisé par Fujimori et al. [6].

Huh and Driscoll [7] ont, eux aussi, montré que les interactions des zones de mélange avec les ondes de choc peuvent contribuer à intensifier le mélange réducteur-oxydant de telle manière que la longueur d'une flamme non-prémélangée peut diminuer de 20 pourcents pour une position optimale des ondes de choc. Le mélange est amélioré en partie parce que l'écoulement "s'enroule" et induit des entrées d'air dans le courant de réducteur.

On retiendra, d'une manière générale, que les ondes de choc sont susceptibles d'influencer la structure de flamme car elles peuvent [6, 7] :

- rediriger l'écoulement d'air radialement (vers le centre du canal, par exemple, dans le cas du montage de Fujimori, i.e. le courant de carburant), augmentant ainsi le taux d'entraînement d'air,
- créer des zones tourbillonnaires, susceptibles d'améliorer le mélange,
- créer un gradient de pression à contre-courant, qui allonge les zones de recirculation ou crée des zones de séparation, modifiant la géométrie de la flamme,
- augmenter localement la pression et la température statiques, et, par conséquent, le taux de réaction.

Le développement d'une chambre de type Scramjet représente encore maintenant un défi important, à la fois d'un point de vue expérimental, où les tests de longue durée restent très difficiles, d'un point de vue de la modélisation de la combustion turbulente, et d'un point de vue purement numérique du fait de la présence d'ondes de chocs confinées se réfléchissant et interagissant avec la zone présumée de combustion. Une stratégie de calcul suffisamment robuste et précise est nécessaire à ce genre de simulations.

1.2 Description phénoménologique

Comme on a pu le voir, la compréhension des phénomènes liés à la combustion en écoulement rapide est au centre d'un grand nombre de problèmes industrielles et scientifiques liées à la mise au point des véhicules spatiaux de demain. Qu'il s'agisse d'étudier la combustion en aval d'injecteurs coaxiaux au sein de la chambre de combustion d'un lanceur spatial, ou d'étudier la combustion d'hydrogène injecté dans le courant supersonique d'air entrant la chambre d'un scramjet, la compréhension des processus de mélange et de combustion et de leur couplage est primordiale. Il ressort aussi de ce bref panorama le besoin de fournir des modèles de combustion aptes à représenter la combustion dans de telles conditions et facilement intégrables aux outils de conception numérique des industriels. Afin de mieux appréhender les besoins de modélisation, nous proposons dans ce chapitre une description qualitative de deux configurations relativement simples mais rassemblant les principales difficultés que nous allons rencontrer dans le cadre de cette étude. Il s'agit dans un premier temps de présenter le cas des flammes jets supersoniques à travers la description d'une couche de mélange s'établissant entre un courant supersonique d'oxydant et un courant supersonique de combustible présentant,

l'un par rapport à l'autre, un fort différentiel de vitesses. Ensuite, nous nous intéresserons aux structures complexes des jets sous-détendus que nous serons amenés à rencontrer lors de simulations numériques de configurations plus proches de celles rencontrées effectivement dans le cadre des moteurs fusées. Finalement, nous présenterons, de manière qualitative, l'ensemble des phénomènes identifiés dans le cas d'une flamme de diffusion turbulente en milieu diphasique dispersé.

1.2.1 Développement de la turbulence dans une couche de mélange

La structure globale de la couche de mélange turbulente formée par la jonction de deux écoulements plans est dictée par le processus d'enroulement des grosses structures cohérentes qui trouve son origine dans une instabilité mécanique de l'écoulement, l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. La description actuelle des couches cisailées turbulentes repose largement sur les travaux de Brown et Roshko [8]. Ces auteurs ont clairement identifié, grâce à des images obtenues par ombroscopie, que la couche de mélange présente une structure bien identifiée à grandes échelles. Bien que la formation de ces tourbillons entraîne du fluide d'un courant vers l'autre courant, c'est le mouvement turbulent tri-dimensionnel au sein de chaque tourbillon qui est le responsable du mélange des deux fluides à l'échelle microscopique.

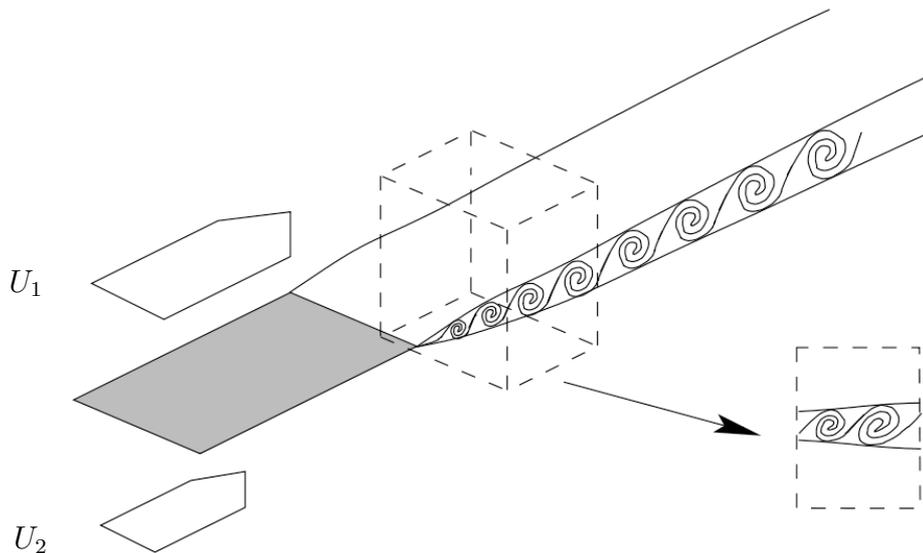


FIGURE 1.5: Couche de mélange turbulente formée par la jonction de deux écoulements plans.

Le développement des grosses structures tourbillonnaires est sensiblement différent dans une configuration de jet. Une visualisation par ombroscopie d'un tel écoulement, réalisée par

Landis et Shapiro [9], est reportée Fig.1.6. D'une manière très générale, on peut définir un jet comme un écoulement issu d'un espace confiné jaillissant dans un espace ouvert. Qu'il s'agisse d'un jet plan ou d'un jet axisymétrique, on peut définir, Fig.1.7, trois zones dans la structure du jet : une zone potentielle, une zone de transition et une zone développée ou de similitude. Le jet se développe, au départ, comme deux couches de mélange distinctes au sein desquelles se créent des structures tourbillonnaires qui s'épanouissent au fur et à mesure de leur convection pour, finalement, se rencontrer au niveau de l'axe de symétrie. Entre le plan de sortie de l'injecteur et la rencontre des deux couches de mélange se trouve le coeur potentiel, où le centre du jet n'est pas affecté par l'extérieur. L'écoulement forme alors des tourbillons dont la taille est maximale en fin de zone potentielle et qui vont commencer à interagir dans la zone de transition. L'interaction entre ces grosses structures provoque leur déformation et va les scinder en les étirant et en créant des structures de plus en plus petites selon le processus de cascade décrit par Kolmogorov [10]. La zone lointaine correspond ainsi à une zone tourbillonnaire développée où les structures secondaires perdent en intensité [11] et où les profils moyens de vitesse et de température tendent à devenir similaires. Notons que dans le cas du jet axisymétrique, l'apparition de structures hélicoidales tend à accélérer la formation de structures à plus petite échelle et se traduit par un épanouissement sensiblement plus faible comme constaté par Pope [12].

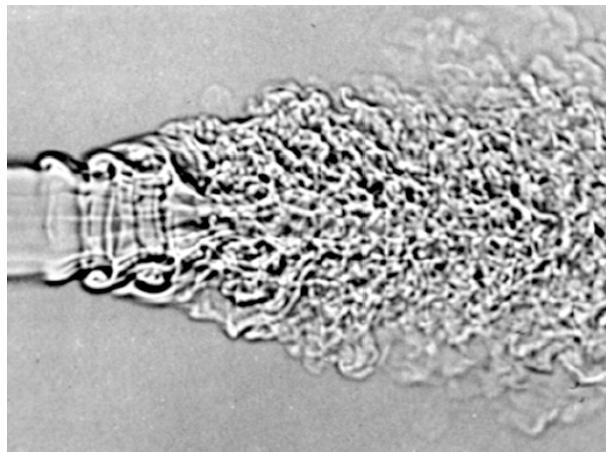


FIGURE 1.6: Instabilité d'un jet circulaire de CO₂ pénétrant dans l'air à $Re = 30000$. L'instabilité se développe à la périphérie du jet qui devient rapidement complètement turbulent. Visualisation par ombroscopie. Photo par F. Landis et A. Shapiro [9].

Les écoulements libres supersoniques turbulents présentent un couplage entre la turbulence et les effets de compressibilité qui modifie le mélange turbulent et qui doit nécessairement être pris en compte dans le cadre de la description de la flamme jet supersonique. A grande échelle, des visualisations réalisées par Chinzei et al. [13] et Papamoschou et Roshko [5] ont mis en évidence un allongement et une inclinaison des structures tourbillonnaires par entraînement se traduisant par une diminution de l'épanouissement des couches de mélange. Cet effet

à grande échelle induit par la compressibilité a aussi été observé par Lau [14] pour des jets axisymétriques. Bogdanoff [4] a suggéré en 1983 que la corrélation entre la diminution du taux dévasement de la couche de cisaillement et l'augmentation du nombre de Mach convectif Ma_c ³ était due à la diminution du taux maximal d'épanouissement des larges structures causées par les instabilités de Kelvin-Helmholtz. En revanche, il est plus délicat de conclure quant à l'effet de la compressibilité à grand nombre de Mach sur le mélange aux petites échelles. Certaines études menées par Dutton et al. [15] ou Clemens et al.[16] tendent à conclure à une efficacité accrue du mélange à petite échelle alors que d'autres indiquent le contraire [17].

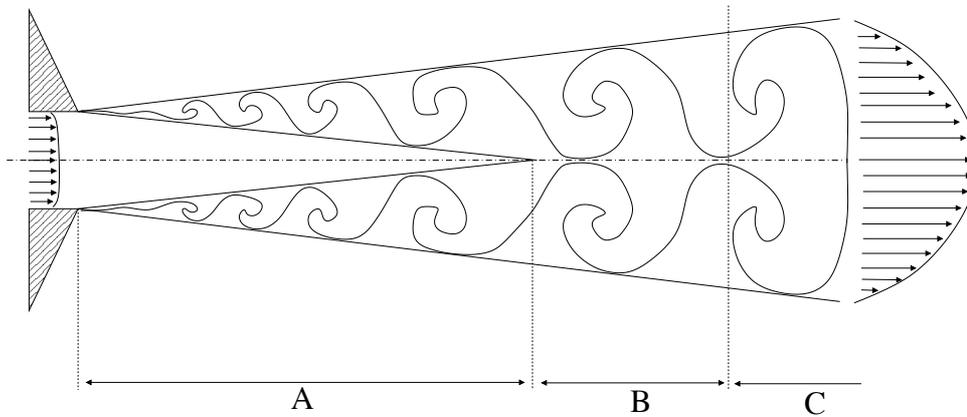


FIGURE 1.7: Structure globale du développement d'un jet libre. A : Zone potentielle, B : Zone de transition, C : Zone développée.

1.2.2 Stabilisation des flammes partiellement prémélangées

Flamme laminaire de diffusion

On réserve quelquefois le nom de flammes de diffusion à des flammes où la chimie est toujours très rapide par rapport aux processus physiques de convection et de diffusion. Le facteur limitant ce type de flamme qui met en jeu un réducteur et un oxydant initialement séparés est alors la diffusion des espèces réactives l'une vers l'autre. L'approximation de Burke et Schumann [18] représente la limite asymptotique pour laquelle la chimie est infiniment plus rapide que la mise en présence des réactifs. Dans cette limite, l'oxydant que l'on notera Ox, et le combustible que l'on notera F (pour *Fuel*), ne peuvent coexister et la flamme doit être considérée comme une interface infiniment mince, comme schématisé Fig.1.8.

3. $Ma_c = (U_1 - U_2) / (c_1 + c_2)$ pour une couche de mélange telle que celle représentée Fig.1.5.

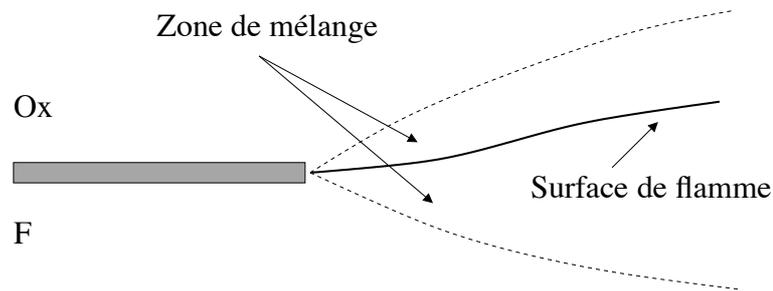


FIGURE 1.8: Structure de flamme de diffusion dans l'approximation de Burke-Schumann.

Si on note ξ la fraction de mélange caractérisant la richesse locale, la flamme se positionne alors sur l'iso-surface $\xi = \xi_{st}$ où ξ_{st} est la fraction de mélange correspondant à la stoechiométrie, c'est-à-dire une richesse unitaire. La température de flamme est alors celle des produits de combustion à l'état d'équilibre. Lorsque la vitesse d'injection des gaz augmente, la chimie est susceptible de ne plus être aussi rapide quand comparée au temps de mélange : la zone de réaction s'épaissit et les réactions chimiques peuvent aller jusqu'à s'éteindre à la base de la flamme, cette dernière se stabilisant plus en aval. On dit alors que la flamme est décrochée. La zone de réaction se mélange alors avec les zones de diffusion et à l'endroit où la flamme s'accroche, celle-ci est composée d'une flamme de diffusion entourée de deux flammes prémélangées, voir Fig.1.9. La progression exposée ici a été obtenue expérimentalement par Chung et Lee [19], et les photographies des flammes ainsi obtenues sont reportées Fig.1.10.

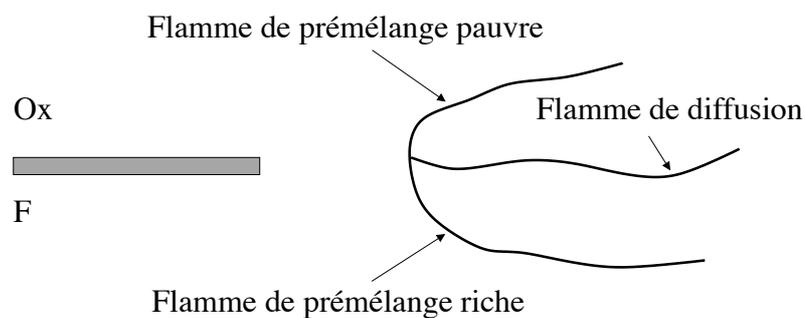


FIGURE 1.9: Structure dite de flamme triple.

Flamme de diffusion turbulente

Continuons notre progression en introduisant l'influence de la turbulence dans l'écoulement. Dans le cas subsonique, lorsque la turbulence n'est pas trop forte, la flamme de diffusion turbulente est alors constituée d'une longue flammelette plissée, étirée et comprimée continuellement par les remous et son épaisseur, finie, n'est pas constante. Les conséquences du développement

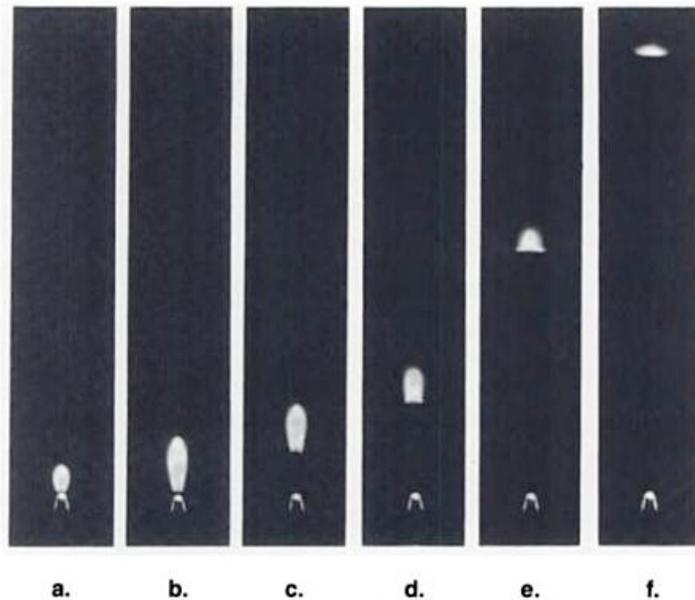


FIGURE 1.10: Flammes propane-air attachées (a)(b) et décrochées (c)-(f) obtenues par Chung et al.[19] pour des vitesses d'éjection du combustible croissantes.

de la turbulence sur les écoulements réactifs sont multiples. On a très tôt constaté que, si l'accrochage était réalisé, on pouvait augmenter la vitesse d'injection des gaz sans trop modifier la hauteur de la flamme de diffusion turbulente. La stabilisation de la flamme de diffusion turbulente peut alors être assurée jusqu'à un certain point par une structure de flamme triple. L'ensemble de cette structure se propage relativement aux gaz frais avec une vitesse fixée par la flamme de prémélange formant la tête de la structure. L'existence d'une solution stationnaire suppose un équilibre entre les conditions d'arrivée du mélange réactif et la vitesse de la flamme de prémélange turbulente dans ce cas. La prise en compte du transport de masse et de chaleur est aussi indispensable à la bonne description de la structure de la flamme de prémélange qui assure la propagation du système. Notons enfin que cette structure peut exister dans un écoulement où oxydant et combustible sont initialement à basse température.

Dans le cas supersonique, compte-tenu des vitesses mises en jeu, il est tout à fait improbable que les structures de type flamme triple jouent un rôle dans le processus de stabilisation de la flamme. L'existence d'une solution stationnaire pour l'écoulement réactif est cette fois conditionnée par l'existence d'une structure, triple, elle aussi, mais où la flamme prémélangée est remplacée par une zone de combustion prémélangée contrôlée par le temps d'induction des réactions chimiques élémentaires. La structure attendue est schématisée Fig.1.11.

Les travaux de Jackson et Hussaini [20] et de Grosch et Jackson [21] ont permis d'établir l'influence de l'échauffement visqueux entre deux courants de vitesses différentes sur le développement de la combustion dans des configurations à grand nombre de Mach et son influence

sur la longueur d'induction du processus chimique. D'autres études comme celles menées par René-Corail et al.[22], Morgenthaler et al.[23] ou bien encore He et al.[24], se sont attachées à détailler les conditions d'allumage et la structure de la combustion dans les couches de mélange supersoniques. Un résultat important concerne l'influence qu'exerce, dans le cas où la vitesse des deux écoulements est différente, la dissipation visqueuse sur la longueur d'induction. Si l'on augmente la vitesse d'un des deux écoulements, il existe une compétition entre i) l'allongement de la longueur d'induction dû à l'augmentation des effets convectifs, ii) la diminution de celle-ci due à la rapide décroissance de temps chimique sous l'effet de l'augmentation de température qui résulte du cisaillement entre les deux couches, et iii) les modifications dues aux transports transverses d'espèces et de chaleur. Les calculs effectués dans la référence [25] montrent qu'une augmentation progressive de la vitesse d'un des deux écoulements conduit tout d'abord à un rallongement de la longueur d'induction puis, lorsque la vitesse devient plus importante, à un raccourcissement de celle-ci. Les travaux de modélisation que nous présentons dans la suite de cet exposé ont aussi pour objet d'être capable de décrire une telle flamme jet, et les résultats de simulation numérique sur un cas test de flamme jet supersonique sont aussi présentés dans la suite.

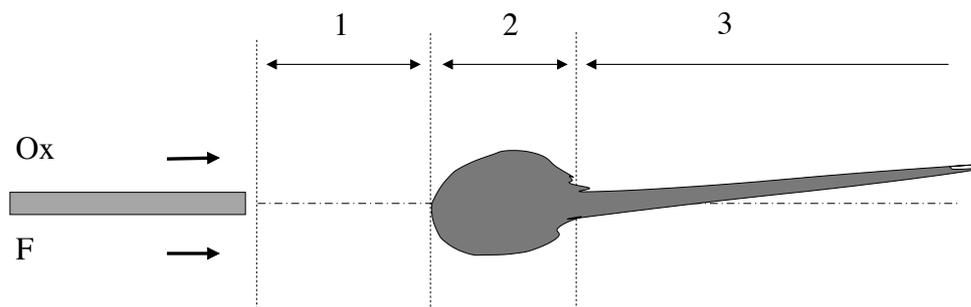


FIGURE 1.11: Couche de mélange réactive. 1 : Zone d'induction, 2 : Zone de combustion prémélangée, 3 : zone de combustion non-prémélangée.

1.2.3 Structures des jets supersoniques sous-détendus

Une visualisation d'un jet libre fortement sous-détendu constitué des produits d'une réaction hydrogène / oxygène est reportée Fig.1.12. Elle a été obtenue par Palmer et Hanson [26] grâce à une technique d'imagerie PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) sur le radical OH. Cette configuration de jet très fortement sous-détendu correspond typiquement à celle que l'on devrait obtenir dans les premiers instants du transitoire d'allumage du moteur Vinci. En effet, durant la phase transitoire d'allumage du moteur Vinci, la pression dans la chambre de combustion est amenée à passer de quelques millibar à une pression nominale de fonctionnement de l'ordre de 60 bar. Le jet sous-détendu constitué par le système d'allumage va connaître une évolution de sa structure globale de jet fortement sous-détendu vers une structure de jet faiblement sous-

détendu puis sur-détendu. Nous rappelons ici les caractéristiques particulières de ces jets.

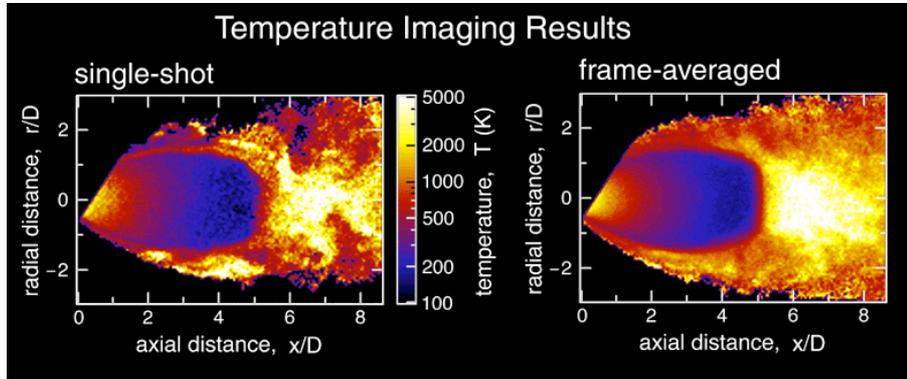


FIGURE 1.12: Visualisation d'un écoulement sous-détendu en sortie d'une préchambre de combustion obtenue par Palmer et Hanson [26].

Un jet sous-détendu peut être défini comme toute veine fluide à vitesse sonique ou supersonique qui se déplace dans un milieu fluide (en repos ou en mouvement) et dont la pression statique dans le plan de sortie de l'ajutage est plus élevée que la pression statique du milieu dans lequel elle se déplace. Le rapport de pressions correspondant, noté NPR ("Nozzle Pressure Ratio"), est le paramètre clé qui détermine la structure d'un jet sous-détendu. De nombreuses études ont été consacrées à l'étude de leur structure [27, 28, 29, 30]. Nous nous inspirons fortement de ces travaux pour rappeler ici la structure des jets fortement sous-détendus que nous sommes amenés à rencontrer dans notre étude, et qui est rappelée en Fig.1.14 et 1.15. On peut définir trois zones distinctes schématisées en Fig.1.13 : une première zone en champ proche, appelée aussi région quasi-potentielle, s'étend de la section du plan de l'ajutage jusqu'à la fin de la dernière cellule de choc identifiable. Cette première région est suivie d'une zone de transition où la couche de cisaillement atteint l'axe et où l'augmentation du mélange termine l'homogénéisation de la pression, elle-même suivie d'une zone lointaine ou zone tourbillonnaire où le jet reprend alors une structure de jet subsonique (si initialement sonique) ou supersonique parfaitement détendu avec une distribution de vitesse auto-similaire.

Au delà d'un NPR de 4.5, Dam et al. [31] observent la disparition complète de la seconde cellule de choc. Le choc incident est fortement courbé et on parle parfois de "bouteille de Mach". Au delà de NPR=7, l'évolution précise de l'ensemble de la structure de jet (au delà de la première cellule de choc) ne semble pas avoir été décrite en détails jusqu'à présent. On devrait cependant a priori pouvoir distinguer deux cas. Le premier pour lequel le disque de Mach bien que très large reste au sein de la zone dite potentielle. Dans ce cas, la zone subsonique devient suffisamment longue pour que la couche de cisaillement du disque de Mach interagisse en aval avec la couche de cisaillement externe qui se développe entre le jet et l'ambiant. Au delà de la première cellule, l'écoulement s'apparente alors à l'écoulement de deux jets annulaires

concentriques à masse volumique fortement variable, l'un subsonique, l'autre supersonique. L'écoulement en aval du choc réfléchi traverse alors un train de faisceaux d'ondes de Mach et subit successivement des détentes et des compressions.

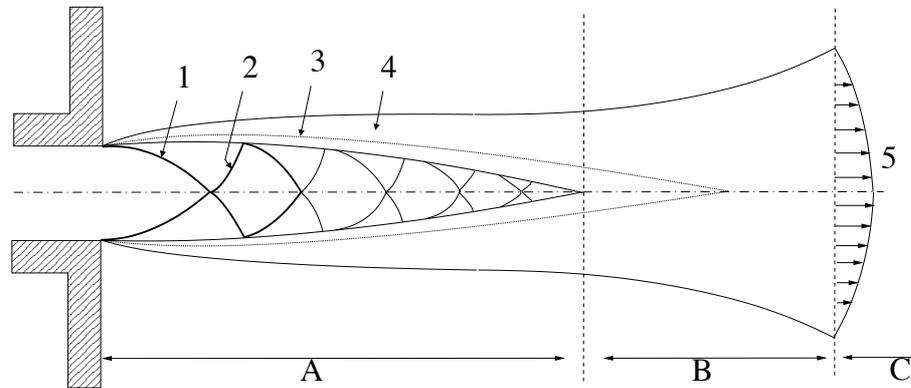


FIGURE 1.13: Structure globale d'un jet **faiblement sous-détendu**. A : zone quasi-potentielle, B : zone de transition, C : zone tourbillonnaire développée. 1 : choc incident, 2 : choc réfléchi, 3 : ligne isobare de la couche de cisaillement, 4 : couche de cisaillement du jet, 5 : Distribution de vitesse auto-similaire.

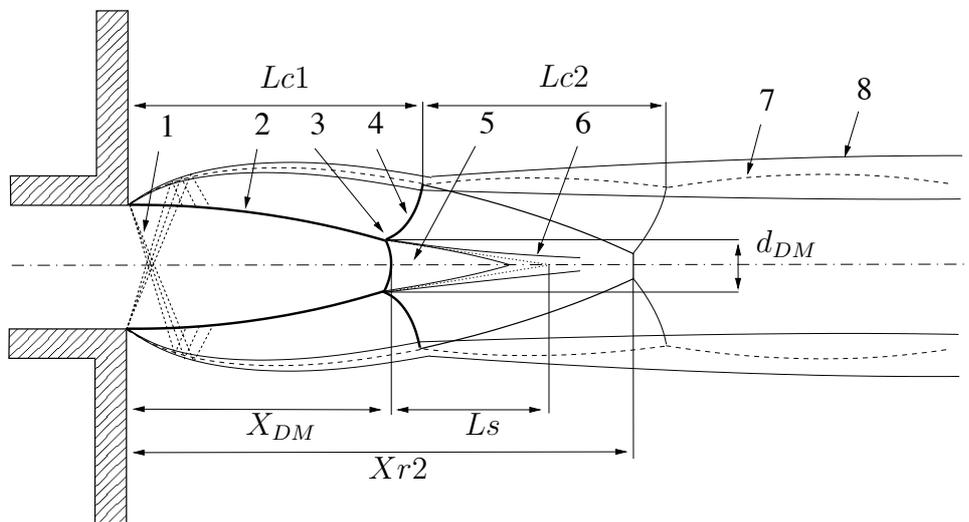


FIGURE 1.14: Structure globale d'un jet **modérément sous-détendu**. 1 : faisceau de détente, 2 : choc incident, 3 : point triple, 4 : choc réfléchi, 5 : poche subsonique, 6 : couche de mélange du disque de Mach, 7 : ligne isobare de la couche de cisaillement, 8 : couche de cisaillement du jet, $Lc1$: longueur moyenne de la première cellule de choc, $Lc2$: longueur moyenne de la seconde cellule de choc, Ls : longueur moyenne de la poche subsonique en aval du disque de Mach (DM), d_{DM} : diamètre moyen du disque de Mach, X_{DM} : position moyenne du disque de Mach.

Pour des NPR encore plus élevés ($\text{NPR} > 10$), le disque de Mach interagit directement avec la couche de cisaillement, déstabilisant complètement le jet en aval, voir Fig.1.15. Aucune structure de choc stationnaire ne devient *a priori* identifiable au delà du disque de Mach. Le choc incident et le disque de Mach deviennent très courbés et la zone subsonique s'allonge en aval du disque de Mach. La problématique dans cette zone proche en aval du disque de Mach est alors celle d'une couche de mélange supersonique à masse volumique fortement variable comprise entre une couche externe au repos et un noyau subsonique interne fortement comprimé. Cette couche de cisaillement est soumise à une chute de pression totale différente à travers le choc droit et le choc oblique, ce qui semble induire un mélange accru et une forte déflexion de la zone interne de la couche vers l'axe.

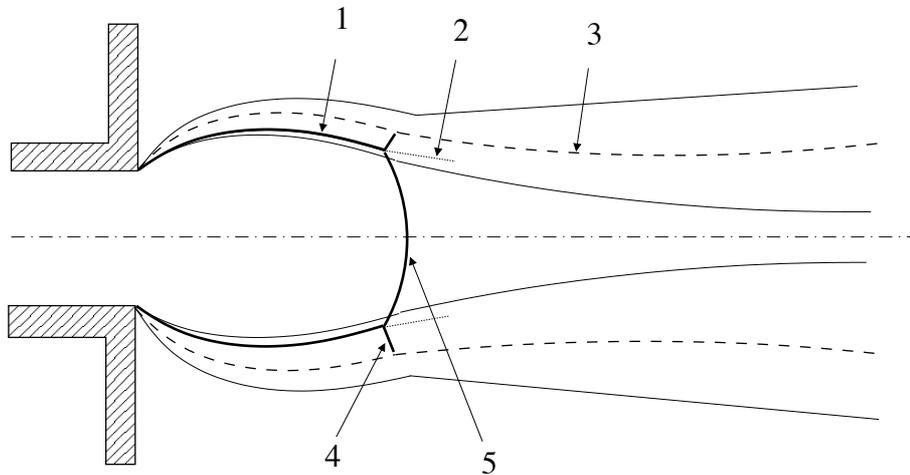


FIGURE 1.15: Structure globale d'un jet **fortement sous-détendu**. 1 : choc incident, 2 : couche de mélange du disque de Mach, 3 : ligne isobare de la couche de cisaillement, 4 : choc réfléchi, 5 : disque de Mach.

1.2.4 Flammes jets turbulents diphasiques

Des approches et des modèles physiques spécifiques doivent être développés et validés pour traiter les processus physiques très complexes mis en jeu dans un moteur fusée fonctionnant en H_2/O_2 . Bien souvent, leur compréhension reste limitée, faute de données expérimentales réalistes et les outils classiques de mécanique des fluides disponibles sont limités pour traiter des cas particuliers. Le principal objectif industriel vise l'amélioration des outils de calcul utilisés en conception des injecteurs de moteurs fusées et concerne la modélisation des processus physiques observés expérimentalement, et notamment :

- les processus d'allumage d'un foyer cryogénique,
- le développement et la structure globale d'une flamme cryogénique,
- la stabilisation de la flamme au culot d'un pitot LOx ,

- le processus d'atomisation primaire et secondaire en écoulement cisailé,
- le processus de mélange turbulent avec de forts gradients de densité (20 à 1000),
- les effets des propriétés des ergols (LOx, température critique 154,6K et pression critique 50,4 bar). A l'injection, la température LOx est inférieure à la valeur critique et la pression chambre est supérieure à la pression critique, ce qui signifie que l'oxygène suit une évolution transcritique. Existe-t-il des gouttes d'oxygène liquide, les effets dus à la tension de surface deviennent-ils tout à fait négligeables et quelles sont les différences essentielles entre les modes de combustion subcritique et de combustion supercritique ?
- la prise en compte de la turbulence en entrée LOx et GH2 et effets sur l'efficacité du mélange des ergols dans la chambre de combustion,
- les effets d'interaction flamme - paroi.

Dans le cas du futur moteur Vinci, le comportement des ergols est particulièrement difficile à décrire pendant le régime transitoire d'allumage. En effet, l'oxygène est injecté à une température inférieure à la température critique de la substance et la pression dans la chambre n'a pas encore atteint la pression de fonctionnement. Ainsi, l'oxygène pénètre dans la chambre de combustion sous forme liquide. Au cours de la phase d'allumage, le moteur va peu à peu atteindre son régime de fonctionnement nominal. L'interface du liquide avec le gaz ambiant va alors disparaître progressivement au cours de la transition de l'état liquide subcritique à l'état supercritique. Lors de cette transition, les propriétés du fluide sont radicalement modifiées. Nous nous intéresserons ici seulement au cas de la combustion subcritique. Cette étude s'inscrit dans le cadre de recherches portant sur les phases transitoires des moteurs cryotechniques puisque la combustion se déroule dans un premier temps en régime subcritique. La flamme obtenue dans de telles conditions a fait l'objet de nombreuses études [32, 33, 34, 35] en partie initiées par le GDR numéro 1075. Les études expérimentales ont été conduites en grande partie sur le banc d'essais pour la combustion cryotechnique MASCOTTE, développé à l'ONERA qui reproduit les conditions de fonctionnement des moteurs-fusées. Il s'agit d'un banc mono-injecteur et permet de s'intéresser aux différents processus physiques mis en jeu dans ces conditions et résumés Fig.1.16.

L'oxygène est injecté dans la chambre sous forme liquide à faible vitesse. Sous l'effet du cisaillement créé par le co-courant gazeux rapide, le jet liquide devient le siège d'instabilités qui conduisent à l'épluchage de celui-ci. Le différentiel de vitesse entre le jet d'oxygène liquide et l'anneau d'hydrogène gazeux est très important, ce qui conduit à une amplification très rapide des instabilités jusqu'au décrochage de fragments liquides significatifs. Le processus traduisant cette fragmentation initiale du jet est appelé atomisation primaire. On distingue dans la région dense de l'écoulement deux régions : le coeur liquide et le dard liquide. On désigne par "coeur liquide" ou encore "noyau potentiel" le volume conique constitué exclusivement de liquide, où la vitesse moyenne axiale est constante et égale à la vitesse d'injection du liquide. C'est à la surface de ce cône que se développe la formation de ligaments et autres éléments liquides.

Le dard liquide correspond à cette région constituée de paquets liquides de formes variées et d'inclusions gazeuses dont la présence est due au transfert de quantité de mouvement du gaz vers le liquide. La zone de dard liquide est donc une région de contact entre le liquide et le gaz où s'établit une couche de mélange fortement concentrée en liquide. En effet, le fort différentiel de vitesses existant entre le flux de H_2 et le flux de LOx tend à promouvoir un mélange turbulent rapide entre les différentes phases dès la sortie d'injecteur, dans la région où le coeur liquide est présent.

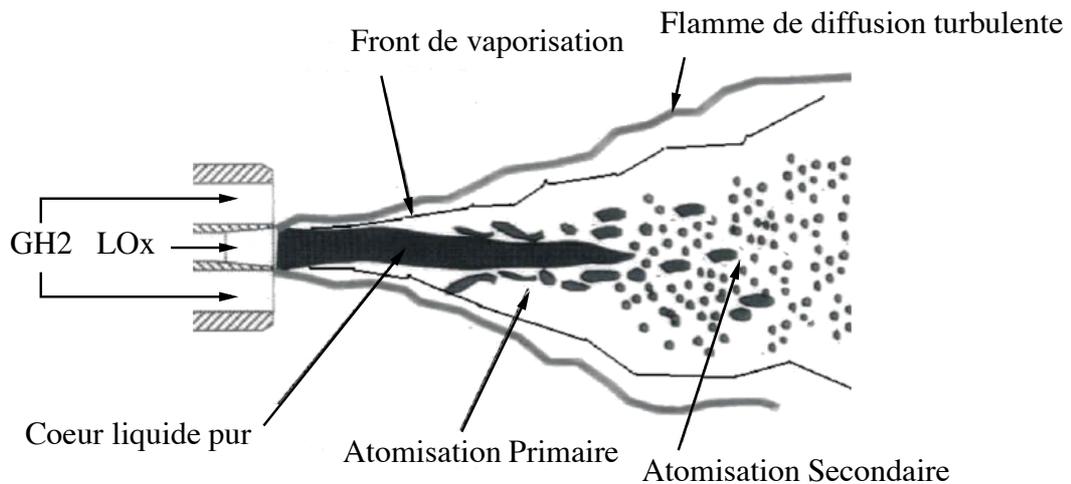


FIGURE 1.16: Description qualitative de la structure moyenne du spray.

Dans ces conditions, le phénomène d'atomisation primaire, à savoir l'ensemble des processus qui conduisent à la rupture initiale du jet liquide, tend à contrôler la longueur du coeur liquide. Les grosses structures liquides issues du processus d'atomisation primaire se propagent alors en aval de l'écoulement mais aussi transversalement et deviennent fortement instables. Elles se brisent suivant différents mécanismes en de fines gouttelettes qui conduisent à un brouillard dilué encore appelé spray. Ce phénomène est appelé "atomisation secondaire". Comme nous le verrons plus tard, l'atomisation secondaire est largement pilotée par la compétition entre les forces d'inertie tendant à éclater les paquets liquides et les forces capillaires contrant les effets des premières. Le nombre de Weber, exprimant le rapport de ces forces, est donc un paramètre crucial pour décrire la fragmentation secondaire qui conduit à un brouillard en évaporation dans un environnement fortement turbulent.

Les études expérimentales menées par le GDR numéro 1075 ont montré que l'oxy-flamme de diffusion dans ce type d'écoulement s'accroche très près de la sortie du pitot d'oxygène, mettant en évidence le fort couplage entre les différents phénomènes physiques ainsi qu'une atomisation très efficace. De cette observation, on peut déduire que la combustion s'instaure dans une zone très proche du dard liquide, où des ligaments de forme variées sont présents. Il est alors difficile de considérer une distribution de fragments liquides uniquement sphériques

dans cette zone. En général dans la littérature, voir par exemple Faeth et al. [36], le phénomène de combustion n'est pas pris en compte lors de l'étude du phénomène d'atomisation primaire, car on considère que les parties denses des sprays en combustion sont en général des portions froides de l'écoulement où les transferts de chaleur sont relativement faibles. Cependant, dans les moteurs fusées, il ne semble pas approprié de traiter de manière séparée les différents phénomènes intervenant dans la zone dense du jet, ceux-ci étant trop étroitement liés et des efforts ont été faits pour améliorer la description de la zone dense en présence de réactions chimiques [37, 38].

1.3 Organisation du manuscrit

Le second chapitre de ce mémoire est consacré à la présentation des équations fondamentales de l'aérothermochimie. Les grandeurs caractéristiques de l'évolution d'un système réactif dans le cadre de la mécanique des fluides y sont détaillées : les équations de bilan sont rappelées ainsi que les lois d'état à associer au milieu gazeux considéré. Il s'agit ensuite de représenter au mieux les écoulements gazeux réactifs turbulents selon une approche statistique. Nous insistons donc sur le sens moyen des équations, et les fermetures utilisées dans le cadre d'écoulements rapides compressibles. Puis, les modèles de turbulence basés sur l'hypothèse de viscosité turbulente et les équations sur lesquelles ils reposent sont introduites. Même si son amélioration n'est pas l'objet de la présente étude, le transport turbulent fait lui aussi l'objet d'une description détaillée.

Dans une troisième partie, nous présentons une étude sur l'allumage des mélanges hydrogène / oxygène. Nous dégageons tout d'abord des résultats de précédents travaux certaines propriétés de l'auto-allumage de tels mélanges, puis nous présentons les résultats de calculs de délais d'auto-allumage effectués avec plusieurs schémas cinétiques détaillés. Nous retenons, à l'issue des travaux présentés dans ce chapitre, un schéma cinétique pour la suite de notre étude.

Le coeur de l'exposé est constitué par le quatrième chapitre, dédié à la modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée. Le modèle reprend les bases du Modèle Intermittent Lagrangien introduit par Borghi et al.[39]. Nous détaillons précisément la modélisation des effets de compétition entre le processus de micromélange et la réaction chimique. L'hypothèse de l'équilibre chimique n'est plus valable pour les écoulements considérés et la considération des effets de chimie finie requièrent une attention particulière. Les effets d'inhomogénéité du mélange réactionnel sont aussi pris en compte. Comme nous venons de le voir dans le cas des flammes jet supersoniques, un effort supplémentaire doit être fourni pour représenter les effets de dissipation visqueuse pouvant conduire à l'allumage spontané du mélange réactif. Nous présentons ici une extension de l'approche Lagrangienne permettant de représenter le couplage entre la vitesse d'écoulement et la réaction chimique. Enfin, l'application du modèle de combustion à des écoulements diphasiques dispersés tels que ceux rencontrés dans le cas de

la flamme diphasique subcritique LOx/H₂ qui est initiée dans la phase transitoire d'allumage de moteurs cryotechniques requiert l'introduction de termes supplémentaires liés à l'évaporation des gouttelettes. Nous introduisons dans ce chapitre la fermeture Lagrangienne proposée pour ces termes par Borghi [40], déjà employée avec succès dans les travaux de Demoulin et Borghi [37].

Dans le cinquième chapitre, nous nous attachons à décrire l'outil numérique avec lequel cette étude a été menée. N3S-Natur est un logiciel de calcul qui résout les équations de Navier-Stokes, compressibles en 2 ou 3 dimensions d'espace sur des géométries fixes ou mobiles. Nous présenterons la méthode de discrétisation spatiale qui repose sur une formulation mixte volumes finis - éléments finis ainsi que la résolution d'un problème de Riemann approché par la méthode de Roe. Les capacités du code et du module de couplage diphasique sont aussi présentées. Il utilise des maillages non structurés composés de triangles et de quadrangle en 2D et de tétraèdres, hexaèdres, pyramides et prismes en 3D. Dans cette étude, le code est couplé à une méthode d'adaptation de maillage anisotropique décrite elle-aussi dans ce chapitre. Une fois présenté l'outil, nous décrirons les cas tests utilisés pour la validation du modèle de combustion turbulente dans le sixième chapitre. Les résultats obtenus sont discutés à la lumière des résultats expérimentaux disponibles.

Le septième chapitre est l'occasion de présenter des cas de calculs sur des applications plus pratiques. Il s'agit d'appliquer le modèle à la simulation de la flamme jet utilisée comme système d'allumage dans le moteur fusée Vinci. Des résultats de la simulation numérique du cas test MASCOTTE dans les conditions où l'oxygène est sous-critique sont aussi présentés.

Enfin, le dernier chapitre est l'occasion d'effectuer une synthèse des modèles utilisés et des résultats obtenus, cela nous permet de dégager quelques conclusions et perspectives pour l'approche considérée dans notre étude.

Chapitre 2

Equations de l'aérothermochime

Dans une première partie, nous présentons ici les équations de Navier-Stokes pour plusieurs espèces, ainsi que les hypothèses considérées pour la fermeture du système correspondant. L'établissement des équations fondamentales décrivant les lois de conservation des différentes grandeurs considérées nous place dans le cadre théorique de l'hypothèse de continuité. Cette hypothèse est satisfaite si le nombre de Knudsen K_n [41] qui est égal au rapport du libre parcours moyen des molécules sur la dimension caractéristique de la particule de fluide étudiée peut être considéré comme petit devant 1. Les volumes élémentaires sont alors suffisamment grands pour faire abstraction de la structure moléculaire discontinue et considérer que les propriétés du fluide y sont homogènes. Cette condition est toujours remplie en pratique dans les domaines classiques de la mécanique des fluides (sauf au sein d'une onde de choc).

Nous considérons alors un mélange gazeux composé de N espèces. Le fluide associé à chaque espèce est un milieu continu et nous pouvons y appliquer les lois de la Mécanique et de la Thermodynamique. L'hypothèse de milieu continu permet l'adoption d'un certain nombre de grandeurs qui définissent le fluide, ces quantités pouvant être liées aux espèces ou bien liées au mélange des N espèces. Dans ce dernier cas, le mouvement des molécules individuelles n'est pas pris en compte. Si celle-ci n'est pas respectée localement, les relations de Rankine-Hugoniot décrivent la conservation des variables aux discontinuités.

Dans le cadre de la mécanique des fluides classique, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et d'énergie totale constituent le système des équations de Navier-Stokes qui est le point de départ de toute étude. Les équations de conservation instantanées pour les quantités nécessaires à la description des écoulements réactifs sont rappelées dans une première partie. Dans une seconde partie, les équations instantanées sont moyennées pour obtenir un système d'équations pour la description du mouvement statistique de l'écoulement turbulent. L'application de cet opérateur de moyenne introduit de nouveaux termes de corrélation dont la fermeture dépend du modèle de turbulence retenu. Dans le cadre des écoulements réactifs ou compressibles, l'opérateur de Favre est généralement utilisé. Dans notre étude, la

turbulence sera représentée par le biais d'un modèle à deux équations que nous présentons par la suite, la première pour l'énergie cinétique de la turbulence, la seconde pour le taux de dissipation de cette énergie.

2.1 Equations instantanées

Si N est le nombre total d'espèces, le système que nous avons à résoudre sera constitué de $N + 4$ équations : $N - 1$ pour les espèces, 1 pour la masse totale, 3 pour le moment, et 1 pour l'énergie totale. Nous considérons alors comme variables indépendantes, la masse volumique $\rho_k = \rho Y_k$ de l'espèce k , avec $k \in [1, N - 1]$, la masse volumique $\rho = \sum_{k=1}^{k=N} \rho_k$ du mélange gazeux global, la quantité de mouvement $\rho \vec{V}$, et l'énergie totale E diminuée de l'enthalpie de formation des espèces.

Conservation de la masse :

L'équation de conservation de la masse pour chaque espèce k du mélange gazeux s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_k u_i^k) = \dot{\rho}_k, \quad k = 1, \dots, N - 1, \quad (2.1)$$

dans laquelle $u_i^k = u_i + V_i^k$, avec u_i la i -ième composante de la vitesse du mélange et V_i^k la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i . La contribution $\rho_k V_i^k$ est représentée à l'aide de la loi de Fick selon : $\rho V_i^k Y_k = \rho D_k \partial Y_k / \partial x_i$ où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k . L'équation s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \rho \omega_k, \quad k = 1, \dots, N - 1. \quad (2.2)$$

La somme sur toutes les espèces nous permet de retrouver l'équation classique de la conservation de masse totale :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (2.3)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

Une équation de conservation peut être écrite pour chaque espèce. En effectuant la somme sur toutes les espèces, nous retrouvons l'équation classique de transport de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \rho F_j, \quad j = 1, 2, 3, \quad (2.4)$$

où p est la pression, τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, et F_j est la résultante des forces volumiques.

Bilan d'énergie :

On définit l'énergie interne du mélange gazeux comme la somme des énergies internes de chaque espèce présente dans le mélange et de l'énergie cinétique associée aux phénomènes de diffusion moléculaire : $\rho e = \sum_{k=1}^{k=N} (\rho Y_k e_k + Y_k V_i^k V_i^k / 2)$. On obtient alors l'équation de transport suivante pour l'énergie totale du mélange $E = \rho e_t = \rho e + \rho u_i u_i / 2$:

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i E) = \rho u_i F_i + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij} u_j) - \frac{\partial}{\partial x_i} q_i. \quad (2.5)$$

Dans notre étude, les termes de rayonnement sont négligés dans l'expression du flux d'énergie q_i .

Relations complémentaires :

Les équations (2.2-2.5) pour le système $(\rho, \rho_k, \rho u_j, E = \rho e + \rho u_i u_i / 2)$ gouvernent l'évolution du milieu réactif dans l'espace et le temps selon les conditions initiales et limites fixées. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie décrivent la manière dont la densité ρ , la vitesse u , et l'énergie interne évoluent. Une telle description n'est complète que si les valeurs de la pression p , du flux de chaleur q et du tenseur des contraintes visqueuses τ sont connues. Les équations exprimant p, q , et τ en fonction de ρ, u et T sont données par les lois de comportement. Tout d'abord, on considère un fluide newtonien, c'est-à-dire que le tenseur des contraintes visqueuses suit la loi de Newton :

$$\tau_{ij} = \rho \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \rho \nu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij}. \quad (2.6)$$

Pour les gaz compressibles considérés ici, nous pouvons identifier la pression p à la pression thermodynamique et ainsi considérer que p est déterminée localement par une équation d'état en fonction de ρ et T . En faisant l'hypothèse d'un mélange de gaz parfaits, on écrit :

$$p = \rho \frac{RT}{\mathcal{M}} = \rho (\gamma - 1) C_v T, \quad (2.7)$$

avec $R=8,314$ J/(mole K) la constante universelle des gaz parfaits, et \mathcal{M} la masse moléculaire du mélange. γ représente le rapport des chaleurs spécifiques, et C_v est la capacité calorifique du mélange à volume constant. Enfin, dans l'équation (2.5), le flux d'énergie inclue deux contributions : (i) un terme de diffusion de chaleur que l'on exprime grâce à la loi de Fourier $-\lambda \nabla T$ où λ représente la conductivité thermique du mélange et (ii) un second terme associé à la diffusion des espèces d'enthalpies différentes, qui est représenté en utilisant la loi de Fick.

Les équations de Navier-Stokes constituent presque toujours le point de départ des simulations numériques de l'écoulement de fluide. Ces équations, écrites depuis plus d'un siècle, ne peuvent être résolues analytiquement que dans le cas d'écoulements extrêmement simples du

fait de leur caractère non-linéaire. Diverses approches numériques peuvent être envisagées et sont, pour la grande majorité d'entre elles, basées sur des méthodes d'éléments ou de volumes finis. Il faut donc discrétiser la résolution des équations, c'est-à-dire passer d'un espace continu, l'espace physique, à un espace discontinu en temps et en espace.

2.2 Discrétisation, filtrage, approche statistique

La discrétisation qui permet une approche numérique des solutions des équations, modifie les données du problème en ce sens que le passage d'une solution analytique continue à une solution numérique discrète introduit deux principales limitations :

- Les informations physiques n'existent que pour les points du maillage. La méthode de calcul est aveugle des changements pouvant intervenir entre les points du maillage. Les diverses méthodes se singularisent donc par la façon plus ou moins juste avec laquelle elles tentent d'approximer les phénomènes inter-nodaux.
- L'hypothèse, faite sur le comportement des variables entre les points nodaux introduit des erreurs de troncature. Quand elles sont contrôlées, ces erreurs permettent au mieux de caractériser la précision de la méthode (second ordre en espace et en temps, par exemple). Dans le cas contraire, elles s'amplifient et s'opposent à l'obtention d'une solution correcte.

La discrétisation a donc une propriété de filtrage. Du point de vue de la simulation des écoulements turbulents, les différentes approches peuvent principalement se regrouper en trois catégories :

- (i) Simulation Numérique Directe : les équations de Navier-Stokes sont résolues telles qu'elles se présentent sous leur forme instantanée. Ces simulations sont limitées à de très faibles valeurs du nombre de Reynolds pour des raisons de capacité des calculateurs.
- (ii) Simulation aux Grandes Echelles : dans le but de déplacer les limitations de la première approche, une hypothèse de comportement est utilisée pour les processus à petite échelle. D'après Kolmogorov, les grosses structures porteuses de la plus grande partie de l'énergie cinétique turbulente ne sont pas homogènes et isotropes, tandis que les petites structures qui dissipent l'énergie reçue des grosses structures sont plus proches de l'isotropie et ont un caractère plus universel. C'est pourquoi le calcul déterministe peut être restreint aux phénomènes à grandes échelles, tandis que les petites structures sont modélisées. C'est la technique de la modélisation de sous-maille couplée à la simulation des grandes structures. La solution des équations d'évolution ne correspond alors qu'aux phénomènes à grande échelle.
- (iii) Traitement statistique : aujourd'hui encore, seule une approche statistique reste susceptible de donner une évaluation pratique d'écoulements turbulents complexes tels que ceux envisagés dans les cadre de notre étude. Pour obtenir les caractéristiques moyennes

d'un écoulement turbulent, il faudrait, dans le cas d'une approche déterministe, effectuer une moyenne d'ensemble sur un certain nombre de réalisations obtenues par la résolution des équations exactes. Pour une approche statistique, au contraire, une moyenne temporelle sera faite sur les équations elles-mêmes, plutôt que sur leur solution. La solution ne transporte aucune information sur sa composante fluctuante. Mais les informations sur la turbulence sont portées par des variables propres telles que les contraintes de Reynolds. L'approche statistique peut être décrite à partir de la fonction densité de probabilité de la variable f . La probabilité que f soit comprise dans l'intervalle $[a, b]$ s'écrit :

$$P(a \leq f \leq b) = \int_a^b P(f)df.$$

Cette définition entraîne que la probabilité devient égale à 1 si les limites a et b sont respectivement rejetées à $-\infty$ et $+\infty$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(f)df = 1.$$

Ainsi, le moment d'ordre un de la fonction densité de probabilité donne la valeur moyenne de f :

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} fP(f)df.$$

Les variations possibles de $\langle f \rangle$ dans l'espace et le temps dépendront de celles de $P(f)$. Il est donc nécessaire de définir des intervalles bornés en espace et en temps pour déterminer ces moyennes. Ces intervalles doivent être d'une part suffisamment grands, quand comparés aux échelles de turbulence, et d'autre part, petits devant les variations macroscopiques de l'écoulement. On définit la moyenne temporelle comme :

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} f(t + \tau)d\tau,$$

où t_M est une valeur finie. Il faut donc que la durée t_M soit grande par rapport à la plus grande échelle de temps de la turbulence, de façon à ce que \bar{f} soit indépendante de t , origine de l'intervalle. Nous pouvons alors écrire les relations suivantes, vérifiées pour deux variables aléatoires f et g :

$$\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle \quad (2.8)$$

$$\langle f \cdot \langle g \rangle \rangle = \langle f \rangle \cdot \langle g \rangle \neq \langle f \cdot g \rangle \quad (2.9)$$

$$\left\langle \frac{df}{d\xi} \right\rangle = \frac{d}{d\xi} \langle f \rangle \quad (2.10)$$

La dernière relation est moins évidente à établir, mais elle sera néanmoins largement employée [42].

2.3 Traitement statistique pour les écoulements compressibles

Boussinesq et Reynolds ont défriché le domaine des écoulements incompressibles en moyennant, comme ci-dessus, les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Les quantités telles que la vitesse, la pression sont décomposées en une partie moyenne et une partie fluctuante. Cette méthode a été étendue aux écoulements compressibles. Les équations ainsi obtenues contiennent, comparativement à leurs instantanées, de nouveaux termes qui ont la forme de corrélations doubles de vitesse ou vitesse/masse volumique. Les corrélations vitesse/vitesse sont nommées contraintes de Reynolds et représentent l'échange de quantité de mouvement dû à l'agitation turbulente. Un premier aperçu peut être obtenu en examinant l'équation de conservation de la masse pour un écoulement à masse volumique variable. La décomposition des quantités ρ et u_i est effectuée comme suit :

$$\rho = \bar{\rho} + \rho',$$

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i.$$

En conséquence, on a : $\overline{\rho'}=0$ et $\overline{u'_i}=0$, d'où en moyennant :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho' u'_i}) = 0. \quad (2.11)$$

D'autres auteurs, tels Favre [43], établissent les équations pour des écoulements turbulents compressibles en moyennant le produit de la vitesse et de la masse volumique. Plus tard, Favre étendit ce principe à toutes les variables dépendantes, exceptées la masse volumique et la pression. Ce type de moyenne peut être formulé statistiquement comme une moyenne temporelle ordinaire, en introduisant la fonction densité de probabilité jointe pour les deux variables ρ et f , $P(\rho, f)$:

$$\tilde{P}(f) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \rho P(\rho, f) d\rho. \quad (2.12)$$

Ainsi, moyennes pondérées par la masse, variances et corrélations d'ordres supérieurs peuvent être définies en utilisant cette fonction densité de probabilité :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} = \int f \tilde{P}(f) df \quad \text{et} \quad \tilde{f'^2} = \frac{\overline{\rho f'^2}}{\bar{\rho}} = \int (f - \tilde{f})^2 \tilde{P}(f) df. \quad (2.13)$$

Deux types de moyennes sont donc envisageables :

- la moyenne statistique conventionnelle

$$f = \bar{f} + f',$$

$$\bar{f} = \frac{1}{t_M} \int f(t) dt \quad ; \quad \overline{f'} = 0. \quad (2.14)$$

– la moyenne pondérée au sens de Favre

$$f = \tilde{f} + f'' ,$$

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad ; \quad \overline{f''} \neq 0. \quad (2.15)$$

Les relations suivantes entre la moyenne conventionnelle et celle pondérée par la masse peuvent être établies :

$$\tilde{f} = \bar{f} + \frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} ,$$

$$\overline{\rho f''} = 0 ,$$

$$\overline{f''} = -\frac{\overline{\rho' f''}}{\bar{\rho}} = -\frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} ,$$

$$\widetilde{f_1'' f_2''} = \overline{f_1'' f_2''} - \frac{1}{\bar{\rho}^2} \overline{\rho' f_1'' \rho' f_2''} + \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\rho' f_1'' f_2''} .$$

En utilisant la moyenne pondérée pour la vitesse, l'équation de conservation de la masse devient :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0. \quad (2.16)$$

Celle-ci a une forme semblable à celle de l'équation instantanée. L'usage des moyennes pondérées permet non seulement de conserver une forme simple pour les termes convectifs des équations de transport, mais aussi d'arriver à des écritures analogues à celles obtenues pour les équations instantanées. On peut remarquer que la notion de ligne de courant est donc conservée avec ce formalisme. Lorsque la masse volumique est constante, les moyennes de Favre et de Reynolds sont donc équivalentes. Lorsque l'hypothèse $\rho = cste$ n'est pas valable, comme pour les flammes, les deux représentations sont toutes aussi physiques, simplement : $\bar{\rho} \tilde{u} = \overline{\rho u}$ représente la moyenne des quantités de mouvement par unité de volume alors que \bar{u} représente la moyenne des quantités de mouvement par unité de masse. Il faut aussi noter que la moyenne de Favre élimine les fluctuations de la masse volumique, mais n'enlève pas l'effet des fluctuations de celle-ci sur la turbulence. La formulation mathématique du problème est simplifiée mais la méthode des moyennes pondérées introduit deux inconvénients :

- (i) La différence entre les valeurs numériques et celles expérimentales due à l'utilisation des moyennes pondérées. La vitesse pondérée par la masse, par exemple, est bien adaptée aux comparaisons avec les mesures de fil chaud, tandis que l'Anémométrie Doppler Laser (ADL) est plus appropriée à la moyenne temporelle. Néanmoins, lorsque le nombre de Mach est inférieur à 5 et le taux de turbulence est modéré, Favre a montré que les écarts entre moyennes conventionnelles et moyennes pondérées restaient faibles [43].
- (ii) L'équation d'évolution du taux de dissipation de l'énergie turbulente ϵ a une forme plus complexe en moyenne pondérée qu'en moyenne conventionnelle. De ce fait, une modélisation globale de ϵ sera envisagée, nous aborderons cet aspect plus en détail dans la suite de notre exposé.

L'origine de l'opération de moyenne de Favre de manière à retirer les fluctuations de densité des équations de mouvement moyennées dans le temps repose sur l'analogie de Morkovin. Morkovin [44] démontra que les fluctuations turbulentes de densité et de température sont simplement reliées aux fluctuations de vitesse via $p'/p \ll 1$ et $T'/\tilde{T} \ll 1$ dans le cas où les fluctuations de température totale seraient négligeables, de telle manière que :

$$\rho'/\bar{\rho} \approx -T'/\tilde{T} \approx (\gamma - 1)\text{Ma}^2(u'/\bar{u}). \quad (2.17)$$

Bradshaw [45] estime que l'équation (2.17) reste valide pour des jets libres ne dépassant pas Mach 1.5. Barre et al.[46] mesura les fluctuations de température et de vitesse dans des couches de mélange supersoniques et valida l'hypothèse de Morkovin. Dans une étude publiée en 2006, Panda [47] a cherché à estimer la différence entre moyenne de Favre et moyenne de Reynolds pour la vitesse moyenne axiale et la composante axiale de l'énergie cinétique turbulente en mesurant expérimentalement les corrélations entre les fluctuations de densité et les fluctuations de la vitesse axiale dans un jet libre. Le deuxième but de cette étude était de valider l'hypothèse SRA (Strong Reynolds Analogy) de Morkovin dans les jets libres. Les définitions des moyennes au sens de Reynolds et au sens de Favre donnent :

$$\tilde{u} - \bar{u} = \overline{\rho'u'}/\bar{\rho}.$$

Par conséquent, la différence de la moyenne temporelle de la vitesse est dûe aux corrélations entre les fluctuations de densité et de vitesse. Une équation similaire peut être écrite pour les termes fluctuants :

$$u' - u'' = \overline{\rho'u'}/\bar{\rho}.$$

Enfin, considérons l'énergie cinétique qui met en jeu des produits de fluctuations. Par exemple, l'énergie cinétique au sens de Reynolds est $k=(\overline{u'u'} + \overline{v'v'} + \overline{w'w'})/2$. La composante axiale des fluctuations de l'énergie cinétique au sens de Favre s'écrit :

$$\widetilde{u''u''} = \overline{\rho u'' u''}/\bar{\rho} = \overline{(\bar{\rho} + \rho') u'' u''}/\bar{\rho} = \overline{u'' u''} + \overline{\rho' u'' u''}/\bar{\rho}. \quad (2.18)$$

Par conséquent, la différence entre les deux moyennes pour la composante axiale de l'énergie cinétique s'écrit :

$$\frac{1}{2} \left(\widetilde{u''u''} - \overline{u'u'} \right) = \frac{1}{2} \left[\overline{(\rho'u'u')}/\bar{\rho} - \left(\overline{\rho'u'}/\bar{\rho} \right)^2 \right]. \quad (2.19)$$

Cette équation montre qu'en plus des corrélations densité-vitesse, des corrélations carrées densité-vitesse ont une contribution significative dans cette différence. Les résultats obtenus par Panda confirment que la vitesse moyennée au sens de Favre n'est que très légèrement supérieure (<1%) à la vitesse moyennée au sens de Reynolds. L'opération de moyenne au sens de Favre produit aussi des niveaux plus bas d'énergie cinétique turbulente (<4%) que l'opération de moyenne au sens de Reynolds. A noter que ces résultats ne sont valables que pour des jets non chauffés présentant une température statique identique à celle du milieu ambiant... Sa validité pour des écoulements réactifs présentant de forts gradients de température reste à démontrer.

2.4 Equations moyennées

Dans ce travail consacré à des écoulements turbulents à masse volumique variable puisque réactifs (et éventuellement supersoniques), nous emploierons la moyenne au sens de Favre :

$$\rho = \bar{\rho} + \rho' \quad , \quad p = \bar{p} + p' \quad , \quad u_i = \tilde{u}_i + u_i'' \quad , \quad (2.20)$$

Equation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0, \quad (2.21)$$

Equation d'évolution de la fraction massique moyenne :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' Y_k''} \right) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k, \quad (2.22)$$

Equation bilan pour l'énergie moyenne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{E}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tilde{u}_i \left(\tilde{\tau}_{ij} + \overline{\tau_{ij}''} - \overline{\rho u_i'' u_j''} \right) + \overline{u_i'' \tilde{\tau}_{ij}} + \overline{u_i'' \tau_{ij}''} \right. \\ &\quad \left. - \overline{\rho u_i'' (u_j'' u_j'')/2} - \tilde{q}_i - \overline{q_i''} \right], \end{aligned} \quad (2.23)$$

Equation bilan pour la quantité de mouvement moyenne :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\tau_{ij}} - \overline{\rho u_j'' u_i''} \right). \quad (2.24)$$

Les quantités transportées sont donc des quantités moyennées au sens de Favre. Les équations moyennées au sens de Favre font apparaître un certain nombre de termes dont la détermination nécessite l'introduction de relations supplémentaires dites de fermeture. Parmi ces termes, on peut distinguer les corrélations entre les fluctuations des variables transportées et les fluctuations de vitesse qui expriment le transport des quantités correspondantes sous l'action de la turbulence :

- $\overline{\rho u_i'' Y_k''}$ est le flux turbulent de la fraction massique de l'espèce k . Ces flux sont généralement fermés par une hypothèse de gradient :

$$\overline{\rho u_i'' Y_k''} = -\frac{\mu_T}{\text{Sc}_{T_k}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}, \quad (2.25)$$

avec μ_t la viscosité turbulente, estimée à partir du modèle de turbulence, et Sc_{T_k} le nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce k .

- $\overline{\rho u_j'' u_i''}$ est le flux turbulent de quantité de mouvement.

2.4.1 Modélisation du flux turbulent de quantité de mouvement

On peut dériver directement une équation pour les tensions de Reynolds $-\overline{\rho u_j'' u_i''}$ et modéliser les différents termes qui apparaîtront dans cette équation, ou bien utiliser un modèle de fermeture directement pour ce terme. Différents niveaux de fermeture sont disponibles dans la littérature, de plus en plus complexes. Ils restent pour la plupart assez peu coûteux en ressources informatiques :

- **Modèles algébriques** : une équation algébrique est utilisée pour calculer une viscosité turbulente, souvent appelée viscosité tourbillonnaire. Le tenseur de contraintes de Reynolds est alors calculé en utilisant une relation liant ce tenseur aux gradients de vitesse et à la viscosité turbulente. C'est l'hypothèse dite de Boussinesq.
- **Modèles à une équation de transport** : une équation de transport est dérivée pour une quantité turbulente, généralement l'énergie cinétique de turbulence, et une deuxième quantité turbulente, généralement une longueur caractéristique de la turbulence, est obtenue par une expression algébrique. La viscosité turbulente est calculée selon l'hypothèse de Boussinesq.
- **Modèles à deux équations de transport** : deux équations de transport sont dérivées, généralement pour l'énergie cinétique de turbulence k et son taux de dissipation. D'autres couples peuvent également être envisagés. Le tenseur de Reynolds est alors obtenu au moyen d'une expression qui le relie aux gradients de vitesse et à la viscosité turbulente, obtenue grâce aux deux équations de transport.
- **Modèles de contraintes de Reynolds** : une équation de transport est dérivée directement pour le tenseur de Reynolds. Une équation supplémentaire (en général pour la dissipation) doit être utilisée pour déterminer la longueur caractéristique de la turbulence. L'équation pour les composantes du tenseur de Reynolds s'écrit simplement à partir des équations instantanées et de l'opérateur de moyenne :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho u_j'' u_k''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{u}_i \overline{\rho u_j'' u_k''} \right) = D_{jk} + P_{jk} + H_{jk} - \bar{\rho} \epsilon_{jk} \quad (2.26)$$

avec les termes suivants dans le second membre :

$$\begin{aligned}
 D_{jk} &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' u_k'' u_j''} - \overline{u_j'' \tau_{ki}} - \overline{u_k'' \tau_{ji}} \right) \\
 P_{jk} &= -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{u}_k - \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{u}_j \\
 H_{jk} &= -\overline{u_j''} \frac{\partial p}{\partial x_k} - \overline{u_k''} \frac{\partial p}{\partial x_j} \\
 \overline{\rho \epsilon}_{jk} &= \overline{\tau_{ki} u_j''} \frac{\partial}{\partial x_i} + \overline{\tau_{ji} u_k''} \frac{\partial}{\partial x_i}
 \end{aligned}$$

Le terme D_{jk} regroupe les différents effets de diffusion : diffusion laminaire et transport turbulent. P_{jk} est un terme de production. $\overline{\rho \epsilon}_{jk}$ est un terme de dissipation. H_{jk} est un terme de corrélation avec le gradient de pression.

Une fois de plus, des termes inconnus apparaissent dans l'équation pour les tensions de Reynolds. On peut continuer la démarche qui consiste à écrire des équations de transport pour les estimer. Le choix de l'ordre auquel on modélise les termes inconnus détermine la modélisation de la turbulence adoptée.

Approximation de Boussinesq : approche de viscosité turbulente

La similitude avec les équations laminares a permis de penser à des lois phénoménologiques semblables, mais avec des coefficients de "diffusion turbulente". C'est ce qui a été fait depuis l'analogie de Boussinesq qui consiste à considérer la contrainte turbulente comme étant localement proportionnelle à la déformation du champ moyen :

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho k} \delta_{ij}, \quad (2.27)$$

avec μ_t la viscosité turbulente, analogue de la viscosité μ pour les contraintes visqueuses. Il faut alors évaluer μ_t , parce que, contrairement à la viscosité moléculaire μ , qui dépend de la nature du fluide, μ_t dépend de l'écoulement.

Dans le cas d'écoulements cisailés (jets, couches de mélange) par exemple, le gradient transversal de la vitesse moyenne évolue lentement suivant la direction principale de l'écoulement et caractérise ainsi l'histoire du développement de l'écoulement cisailé. Cependant, il n'est pas tout à fait correct de faire dépendre $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ du taux de déformation moyen local et instantané : pour des taux de déformation importants, la turbulence est sensible à la déformation moyenne totale subie, et si celui-ci change brutalement (s'annule par exemple), la répercussion sur la turbulence n'est pas instantanée mais se fait avec un temps caractéristique k/ϵ . De plus une relation linéaire au tenseur des déformations n'est pas toujours suffisante. Notons que des lois de comportement non-linéaires ont aussi été proposées, cf [42, 48].

Modélisation algébrique : longueur de mélange de Prandtl

Des modèles algébriques ont également vu le jour reliant μ_t aux caractéristiques de l'écoulement moyen, comme le modèle de la longueur de mélange de Prandtl (1925). Pour les écoulements cisailés, on peut obtenir simplement les relations à utiliser en supposant la même échelle de temps pour les tourbillons énergétiques et le cisaillement :

$$\frac{\overline{\rho u''}}{l_T} \approx \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right| \quad \text{et} \quad \mu_T \approx u' \cdot l_T \quad \implies \mu_T = c_\mu \cdot l^2 \cdot \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right|, \quad (2.28)$$

l_T est donc une échelle de l'écoulement à prescrire. Ce modèle suppose un équilibre Production-Dissipation, mais on sait que la turbulence n'est pas produite et dissipée au même endroit, ce qui limite l'application de telles expressions. On peut toutefois se demander comment utiliser ces modèles dans des cas plus complexes, où l'échelle intégrale de turbulence n'est pas nécessairement reliée à une échelle caractéristique géométrique et où le gradient transversal de vitesse n'est pas prépondérant.

Modélisation de Prandtl-Kolmogorov : modèle à une équation

La généralisation de l'hypothèse de transport par gradient pour les écoulements où la divergence du champ de vitesse n'est pas nulle requiert l'écriture suivante du tenseur de Reynolds :

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} k \delta_{ij}, \quad (2.29)$$

La présence du dernier terme est rendue nécessaire pour que l'on retrouve bien $2k = \widetilde{u_i'' u_i''}$ en contractant la relation. μ_T doit dépendre de grandeurs caractéristiques de la turbulence. Kolmogorov en 1942 et Prandtl en 1945 suggèrent de baser l'échelle pour u' sur l'énergie cinétique de la turbulence en écrivant :

$$\mu_T = u' \cdot l_T \quad \implies \mu_T = c_{mu} \sqrt{k} \cdot l_T. \quad (2.30)$$

L'évaluation de μ_T nécessite ainsi la seule résolution d'une équation pour k , d'où le nom de modèle à une équation. Cette équation fait apparaître un nouveau terme ϵ qui est un terme dissipatif. Il s'agit de la dissipation d'énergie cinétique turbulente $\epsilon = \epsilon_s + \epsilon_c + \epsilon_h$ où ϵ_s est appelée dissipation solénoïdale, ϵ_c est appelée la dissipation dilatationnelle due aux effets de compressibilité, et ϵ_h la dissipation dilatationnelle due à la chaleur dégagée par la réaction, cf Zheng et Bray [49]. Le modèle à une équation proposé par Prandtl et Kolmogorov modélise directement le terme de dissipation solénoïdale selon :

$$\overline{\rho} \epsilon_s = \overline{\rho} C_D \frac{k^{3/2}}{l_T} \quad \text{avec} \quad C_D = 0,08. \quad (2.31)$$

La longueur caractéristique de l'écoulement l_T est quant à elle déterminée à partir de la longueur de mélange l_m propre à chaque géométrie :

$$l_T = l_m C_D^{1/4}. \quad (2.32)$$

Ainsi, la longueur l_T est spécifiée, une équation est résolue pour k mais ce genre de modèle reste trop lié au problème considéré. A noter aussi que Spalart et Allmaras [50, 51] ont proposé une fermeture pour μ_T qui est largement utilisée dans le domaine de l'aéronautique.

Modèle à deux équations : le modèle $k-\epsilon$

Ainsi, les modélisations précédemment évoquées ont conduit à proposer des équations qui régiraient k et l_T dans tout écoulement turbulent, même non homogène et non isotrope, pourvu que le nombre de Reynolds soit assez élevé. Cependant, si l_T est une grandeur caractéristique de la turbulence, accessible à l'expérience et représentative de la taille des structures énergétiques, elle n'est pas très utile pour représenter le transfert d'énergie des plus grosses structures vers les petites où l'énergie est dissipée. C'est pourquoi des équations ont été proposées pour k et ϵ . Le taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence ϵ a la dimension L^2T^{-3} et donc toute quantité pouvant être exprimée en fonction de k et l_T , il peut s'écrire :

$$\epsilon = C_D \frac{k^{3/2}}{l_T}, \quad (2.33)$$

où C_D est une constante habituellement prise égale à $0.09^{3/4}$. Concernant la viscosité turbulente, elle s'exprime par :

$$\mu_T = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}. \quad (2.34)$$

En principe, ces relations s'appliquent lorsque le nombre de Reynolds est grand et lorsque la turbulence est établie et en équilibre. En effet, l'idée de base est de relier les échelles des grandes structures à la dissipation moléculaire, c'est-à-dire qu'on suppose que le processus de transfert d'énergie des grandes structures vers les petites est établi et stationnaire.

Jones et Launder [52] ont ainsi proposé de résoudre une équation de transport pour k et ϵ . Ce modèle de turbulence est le plus utilisé de nos jours, mais le problème constitué par la modélisation de l'équation de ϵ ne reste que très partiellement résolu. L'équation de transport pour k se dérive simplement à partir des équations de Navier-Stokes : on construit les équations pour les tensions de Reynolds (Eq. 2.26) et on contracte sur les indices $i=j$ puisque $\overline{\rho k} = \overline{\rho u_k'' u_k''} / 2$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j k}) &= \overbrace{-\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}^{P_k} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overbrace{\left[\frac{\overline{u_i'' u_i'' u_j''}}{2} + \overline{p' u_i''} \delta_{ij} - \overline{\mu S_{ij} u_i''} \right]}^{D_k} \right] \\ &+ \underbrace{\overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}}}_{\Pi_d} - \underbrace{\overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}}_G - \underbrace{\overline{\mu S_{ij} \frac{\partial u_j''}{\partial x_j}}}_{\overline{\rho \epsilon}}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

avec $S_{ij} = (\partial \tilde{u}_i / \partial x_j + \partial \tilde{u}_j / \partial x_i) / 2$.

1. P_k est le terme de production par les gradients moyens. Il est fermé en ré-introduisant la fermeture étendue de Boussinesq, soit :

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \left[\mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho k} \right] \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.36)$$

En suivant l'hypothèse de Boussinesq, ce terme représente une transformation irréversible d'énergie cinétique moyenne en énergie cinétique de turbulence. La décomposition fait également apparaître le terme G , interaction entre le flux de masse turbulent et le gradient moyen de pression. Ce terme de production se réécrit comme :

$$G = -\overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = -\frac{1}{\overline{\rho}} \frac{\mu_T}{\sigma_T} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}, \quad (2.37)$$

où la constante σ_T doit être fixée entre 0,7 et 1 selon Bailly et Comte-Bellot [53].

Une autre modélisation proposée par Shyy et Krishnamurty [54] s'écrit :

$$G = \frac{2\mu_T}{\overline{M_T} - 1} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma \overline{p}} \right) \left[\left(\frac{\mu_T C_p}{\text{Pr}_T} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \overline{u_j \rho u_j'' u_i''} \right] \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}, \quad (2.38)$$

2. D_k est le terme de diffusion. On distingue un flux de diffusion turbulent, un flux de diffusion par les fluctuations de pression et un flux de diffusion moléculaire. L'ensemble est généralement modélisé sous la forme d'une loi de transport par gradient :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\frac{u_i'' u_i'' u_j''}{\rho}} + \overline{p' u_i''} \delta_{ij} - \overline{\mu S_{ij} u_i''} \right] = \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}, \quad (2.39)$$

où σ_k est analogue à $\text{Sc}_T / \text{Pr}_T$. On ne prend pas en compte explicitement la corrélation $\overline{p' u_j''}$ dans le transport de l'énergie cinétique turbulente. Ce terme est alors intégré dans les termes diffusifs, qui sont fermés par une approche gradient.

3. Π_d couramment dénommé pression-dilatation ou terme de pression dilatationnelle, représente un travail additionnel dû aux fluctuations simultanées de la pression et du volume des cellules fluides. Ce terme caractérise un échange réversible entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie interne du fluide. Il est associé à un terme puits de k lors d'une interaction choc-turbulence, cf Vandromme [55]. En combinant les équations pour l'entropie et les fluctuations de masse volumique, Zeman [56] propose en ne retenant que les termes dominants de modéliser ce terme en le reliant à la variance de la pression selon :

$$p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i} = -\frac{1}{2\gamma \overline{p}} \frac{d\overline{p'^2}}{dt}. \quad (2.40)$$

Cette variance de la pression est supposée décroître vers une valeur d'équilibre p_e pendant un temps caractéristique qu'il s'agit d'évaluer. Zeman propose de relier cette pression d'équilibre à la variance de la pression par un facteur fonction du nombre de Mach turbulent. La modélisation de Zeman pour la pression -dilatation donne finalement :

$$\Pi_d \equiv \overline{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}} = \begin{cases} -2 C_{\Pi_d} \bar{\rho} S_{ij}^* S_{ij}^* k^2 / \epsilon & \text{for } M_T > Ma_{Tc} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Dans l'expression précédente, $Ma_{Tc} = 0.1 \sqrt{(\gamma + 1)/2}$, et S_{ij}^* est défini par $S_{ij}^* = (2S_{ij} - \delta_{ij} \cdot S_{kk}/3)$ avec $S_{ij} = (\partial \tilde{u}_i / \partial x_j + \partial \tilde{u}_j / \partial x_i) / 2$.

4. Le terme de dissipation moléculaire $\bar{\rho}\epsilon$ s'écrit en moyenne de Favre :

$$\bar{\rho}\epsilon = \frac{1}{2} \mu \overline{\left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right)^2} - \frac{2}{3} \mu \overline{\left(\frac{\partial u''_k}{\partial x_k} \right)^2}. \quad (2.41)$$

La première contribution ϵ_s est appelée "dissipation solénoïdale", et la seconde ϵ_c purement compressible "dissipation dilatationnelle". Il est possible de déterminer une équation de transport exacte pour $\bar{\rho}\epsilon$, mais le formalisme de Favre rend la chose complexe. Il est préférable de postuler qu'à tout mécanisme dans le transport de k peut correspondre un mécanisme équivalent dans le transport de ϵ . Certains résultats de DNS tendent à montrer que l'influence de la compressibilité sur la partie solénoïdale reste négligeable, ce qui nous amène à envisager une équation pour ϵ_s ayant la même structure que celle pour k et à modéliser par ailleurs le taux de dissipation dilatationnelle. Le modèle k - ϵ reposant sur l'idée d'une turbulence en équilibre spectral, on peut relier ϵ à k par un temps de dissipation k/ϵ et écrire une équation "empirique" pour ϵ de la forme :

$$L(\epsilon) = \frac{\epsilon}{k} (\text{Prod}_\epsilon - \text{Dissip}_\epsilon), \quad (2.42)$$

où $L(\epsilon)$ regroupe les termes instationnaires, de convection, et de diffusion. Soit encore :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\epsilon_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j\epsilon_s) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\epsilon_1} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon_2} \bar{\rho} \frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon_3} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}. \quad (2.43)$$

L'ensemble des constantes usuelles est rappelé dans le tableau suivant :

C_μ	C_{ϵ_1}	C_{ϵ_2}	C_{ϵ_3}	σ_k	σ_ϵ	σ_T
0,09	1,44	1,92	-0,3733	1	1,3	0,7

TABLE 2.1: Constantes du modèle de turbulence

Concernant la modélisation de la dissipation dilatationnelle, Zeman fait l'hypothèse qu'à grand nombre de Mach turbulent, un champ initialement solénoïdal est profondément modifié

par l'apparition de "shocklets". L'hypothèse de l'existence d'une infinité de telles microstructures de chocs apparaissant au sein des tourbillons de l'écoulement est confortée par certains travaux de simulation numérique directe. En dissipant "anormalement" une partie de l'énergie cinétique k sur des temps caractéristiques très courts (de l'ordre de l'échelle de temps dissipative), elles vont directement affecter le taux de dissipation dilatationnelle ϵ_c sans modifier ϵ_s . Suivant cette hypothèse, l'idée est alors d'assimiler le saut de vitesse $\Delta U = u_1 - u_2$ ayant lieu à travers chaque micro-choc observable en DNS, à la variation des fluctuations de vitesse considérée dans l'approche RANS $\Delta u' = c_0 \sqrt{2/(\gamma + 1)} ((m_c^2 - 1)/m_c)$ où c_0 est la vitesse du son évaluée par rapport aux conditions génératrices et $m_c = U_1/c_0 \sqrt{(\gamma + 1)/2}$, le nombre de Mach en amont du choc. En considérant que la dissipation compressible intervient à faible nombre de Reynolds sur une échelle de longueur représentative de l'épaisseur λ du choc apparaissant dans le tourbillon d'échelle de longueur caractéristique L , on peut relier par ailleurs le saut de vitesse à la viscosité locale de l'écoulement. Le taux de dissipation dilatationnel apparaît ainsi comme une fraction de la dissipation solénoïdale :

$$\tilde{\epsilon}_c \propto \left(\frac{k^3}{L}\right) \frac{1}{M_T^3} \left(\frac{m_c^2 - 1}{m_c}\right)^3 \left(\frac{c_k}{c}\right)^3 \quad (2.44)$$

Zeman choisit alors de décrire la répartition des nombres de Mach amont aux chocs m par une fonction densité de probabilité, fonction du facteur d'aplatissement K (kurtosis) et du niveau des fluctuations de vitesse donné par M_T , et tendant progressivement vers une fonction gaussienne :

$$\frac{1}{M_T^4} \int_1^\infty \left(\frac{m_1^2 - 1}{m_1}\right)^3 p(m_1) dm_1 \quad (2.45)$$

où la pondération est donnée par :

$$F(M_T, K) = \frac{1}{M_T^4} \int_1^\infty \left(\frac{m_1^2 - 1}{m_1}\right)^3 p(m_1) dm_1 \quad (2.46)$$

On utilise classiquement une expression simplifiée de cette fraction de pondération intégrée numériquement en fonction du facteur d'aplatissement, simplement dépendante du nombre de Mach turbulent local :

$$\begin{cases} \epsilon_c = 0.75 F(M_T) \epsilon_s \\ F(M_T) = 1 - e^{-\left[\frac{M_T - M_{T_0}}{\sigma_0}\right]} & , M_T \geq M_{T_0} \\ F(M_T) = 0 & , M_T \leq M_{T_0} \\ M_{T_0} = 0.1 \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}} \\ \sigma_0 = 0.6 \end{cases}$$

2.4.2 Validité des fermetures en situation compressible

On trouve de nombreuses tentatives de modélisation dans la littérature, toutes proposant des améliorations aux modèles statistiques pour la description des écoulements turbulents compressibles. Force est de constater qu'il n'est pas possible de prédire précisément à la fois un écoulement libre et un écoulement confiné avec le même modèle. Néanmoins, il faut reconnaître que la validité des fermetures appliquées aux différents termes qui apparaissent dans les équations de transport turbulent est aussi difficile à évaluer faute de données pertinentes sur ces écoulements. La simulation numérique directe a permis d'augmenter la compréhension des phénomènes de turbulence compressible [57] et d'identifier d'éventuelles modifications à apporter aux fermetures compressibles que nous avons évoquées dans ce chapitre. En effet, le taux de dissipation solénoïdale a été fermé par extension de sa forme incompressible : outre l'extension densité variable, la forme ainsi obtenue diffère par la présence d'un terme de dilatation moyenne et un terme de production de dissipation. Des résultats de DNS pour une turbulence comprimée ont montré que l'omission d'un terme de dilatation moyenne a pour conséquence la mauvaise prédiction de la diminution de l'échelle de longueur intégrale en cas d'expansion isotrope et l'augmentation de celle-ci en cas de compression isotrope [58, 59]. Une modification apportée par Coleman et Mansour [60] permet aussi de prendre en compte les variations de la viscosité cinématique moyenne, même si leur approche ne fait que modifier le coefficient devant le terme de dilatation moyenne. De plus, l'équation de dissipation semble inappropriée dans la couche logarithmique d'un écoulement confiné, cf [61, 62].

La formulation compressible des équations moyennes de conservation et des équations de transport turbulent introduit plusieurs corrélations qui sont directement liées aux effets dilatationnels. Ces corrélations incluent le terme de dissipation dilatationnelle ϵ_c de pression-dilatation $\overline{\rho\Pi_d}$ et le flux de masse $\overline{u_i''}$. Les modélisations de Sarkar ou Zeman ont un effet significatif sur le taux d'épanouissement d'une couche de mélange compressible : l'inclusion de ces termes augmente l'épanouissement de la couche de mélange et les prédictions sont alors en excellent accord avec les résultats expérimentaux. Néanmoins, une étude menée par Vreman et al. [63] conclue que, bien que les corrections dilatationnelles améliorent les prédictions du taux d'épanouissement, les effets réels de la dilatation sont bien moins importants dans le champ de l'écoulement calculé. D'autres études ont également nuancé la qualité de prédiction des différentes fermetures, parfois même en montrant que l'interprétation à donner à ces termes était souvent bien éloignée de la réalité même si l'effet était capturé [64]. Enfin, il faut aussi remarquer que l'utilisation des relations de Boussinesq pour des écoulements avec forte compression ou expansion des gaz peut se révéler bien plus irréaliste que pour des écoulements incompressibles. C'est du moins ce qui a été constaté [64] pour des écoulements dûs à la propagation d'une flamme dans une chambre à volume constant, car il est possible alors de trouver $\overline{u_i''^2}$ négatif... Nous utiliserons donc le modèle de turbulence k - ϵ avec précaution.

Chapitre 3

Etude de l'allumage spontané

Dans le cadre de nos travaux, nous nous sommes tout particulièrement intéressés aux mélanges H₂/O₂ et H₂/Air. Ce couple présente certaines particularités du point de vue de la cinétique chimique qu'il est intéressant de rappeler quand on étudie l'auto-allumage de tels mélanges. Une bonne connaissance des principales propriétés de ces mélanges peut s'avérer utile pour la modélisation de la combustion turbulente dans les moteurs fusées ou les chambres de combustion de type Scramjet. Nous allons nous attacher dans ce chapitre à dégager les principaux résultats obtenus sur l'auto-allumage des mélanges H₂/Air afin de dégager quelques conclusions quant au choix d'un schéma cinétique détaillé, et la tabulation de délais d'auto-allumage.

3.1 Introduction

L'allumage et la stabilisation de la combustion dans les écoulements supersoniques sont contrôlés par différents types de couplage, où interviennent les effets de compressibilité, le mélange, la cinétique chimique ainsi que la turbulence. Les études [65] à [77] menées ces dix dernières années sur les mécanismes menant à l'établissement d'une flamme de diffusion à partir d'un noyau d'allumage tendent à montrer que l'augmentation de température ne serait pas toujours la cause de l'allumage mais plutôt qu'elle accompagnerait la multiplication des espèces intermédiaires, les radicaux, dans l'enchaînement des réactions qui mènent à la formation du produit final et au fort dégagement de chaleur. La non-linéarité qui caractérise la dépendance de ces réactions aux conditions ambiantes est d'ailleurs à l'origine de la forme classique en S des courbes (P,T) délimitant les domaines d'inflammabilité [66]. Or, les différents schémas détaillés proposés par les cinéticiens tendent à ne conserver que les réactions les plus significatives pour certaines conditions de pression et de température. La question est donc d'identifier ces réactions ainsi que leur dépendance aux conditions de pression et de température. Après quelques rappels des notions liées à la cinétique chimique, nous présenterons les différentes limites d'in-

flammabilité rencontrées et les mécanismes qui les caractérisent. Puis, nous étendrons notre analyse au cas des couches cisillées à haute vitesse afin de mieux comprendre les différents régimes d'allumage spontané possibles dans ce type de configurations, le rôle de la turbulence, et celui de la dissipation visqueuse. Enfin, à la lumière des différentes conclusions, une étude paramétrique de délais d'auto-allumage obtenus à l'aide du logiciel Senkin [78] nous permettra de conclure quant au choix du schéma détaillé le plus approprié pour tabuler ce délai pour les conditions rencontrées dans nos travaux.

3.1.1 Théorie des collisions moléculaires et du complexe activé

A l'échelle moléculaire, une réaction se produit lorsque deux molécules de réactifs entrent en collision l'une avec l'autre. La théorie des collisions est utile pour expliquer l'effet de la concentration sur la vitesse de réaction ainsi que l'influence forte de la température sur le taux de réaction chimique. Selon celle-ci, la vitesse de la réaction sera au plus, égale au nombre de collisions entre une molécule d'hydrogène et une molécule d'oxygène. D'après la théorie cinétique des gaz, ce nombre est :

$$Z_{H_2/O_2} = n_{H_2}n_{O_2}(r_{H_2} + r_{O_2})^2 \left[\frac{8\pi k_B T (\mathcal{M}_{H_2} + \mathcal{M}_{O_2})^2}{\mathcal{M}_{H_2}\mathcal{M}_{O_2}} \right]^{1/2}, \quad (3.1)$$

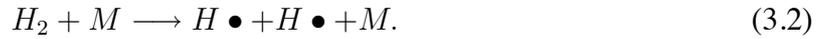
où n_{H_2} (respectivement n_{O_2}) est le nombre de molécules de H_2 (respectivement O_2) par unité de temps et de volume, soit sa concentration moléculaire (et non pas molaire), r_{H_2} (respectivement r_{O_2}) est le rayon de la molécule H_2 (respectivement O_2), \mathcal{M}_{H_2} (respectivement \mathcal{M}_{O_2}) est la masse moléculaire de H_2 (respectivement O_2), k_B est la constante de Boltzmann, et T la température.

Cependant, on constate que les vitesses réelles des réactions sont bien moins élevées que ne le prévoit cette relation théorique. La relative lenteur observée est une indication que les collisions entre les réactifs ne sont pas toutes efficaces et ne produisent pas toutes des réactions. Ainsi, l'orientation relative des molécules réactives peut jouer un rôle mais surtout, l'énergie lors de la collision doit être suffisamment élevée pour rompre les liaisons entre molécules de réactifs et pour former de nouvelles liaisons. C'est l'énergie d'activation que l'on retrouve dans la loi d'Arrhenius dans le terme $\exp(-E_a/RT)$.

Selon la théorie du complexe activé, les molécules initialement situées sur un minimum d'énergie potentielle, sont susceptibles de passer par un état transitoire, l'état dit de complexe activé, correspondant à un maximum local et préfigurant l'état final de faible énergie. Le franchissement de cette barrière de potentiel ne peut avoir lieu que si le système reçoit une énergie suffisante et au moins égale à la différence entre celle du complexe activé et celle de l'état initial.

Considérons ainsi la réaction de dissociation de la molécule H_2 en deux atomes H . Les deux H libérés possèdent une énergie au minimum égale à celle de la barrière de potentiel.

Cette énergie minimale nécessaire à son franchissement peut être produite par collision avec une autre molécule du milieu, H_2 ou autre, ou de façon plus générale, avec ce qu'on appelle un troisième corps noté M . La réaction de dissociation s'écrit :

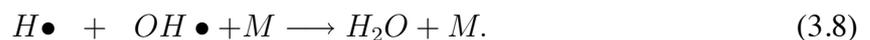


Si le troisième corps est un gaz, les vitesses de dissociation et de recombinaison croissent avec la concentration de celui-ci, donc avec la pression, mais pas indéfiniment. On finit par atteindre une pression pour laquelle les collisions deviennent beaucoup plus fréquentes que le passage proprement chimique du système initial au système final. Nous verrons par la suite que ce scénario peut expliquer les limites en pression du domaine d'inflammabilité et de détonabilité du couple H_2 - O_2 .

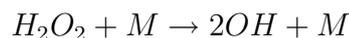
Les radicaux créés lors des collisions ont un rôle déterminant dans l'avancement de la réaction qui se produit par une succession de réactions en chaîne, lesquelles s'écrivent pour l'hydrogène :



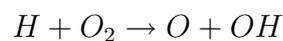
suivies des réactions de recombinaison des radicaux telles que :



Les mécanismes chimiques des réactions de combustion comprennent généralement un grand nombre d'étapes, dont les vitesses ne sont pas toutes connues avec précision. Les diverses études menées par les cinéticiens ont établi l'importance des réactions de branchement et de terminaison de H et O_2 pour la réalisation de la réaction globale. On définit ainsi la température de croisement comme la température à laquelle les vitesses de réactions de branchement et de terminaison de H et O_2 deviennent du même ordre de grandeur. Si la température est inférieure à la température de croisement T_c , la réaction



est prédominante. Elle est associée à une énergie d'activation importante de l'ordre de 45 kcal/mol et défavorise l'auto-allumage. Au dessus de T_c , la réponse du système est dominée par la réaction



qui, elle, possède une énergie d'activation faible, de l'ordre de 16 kcal/mol, et favorise l'auto-allumage. Le comportement de ces deux réactions autour de la température T_c explique la forme

en S du domaine d'inflammabilité dans un repère température-pression. Par analogie avec les trois limites d'explosion homogène, on parlera des trois régimes représentés Fig.3.1 comme la première, la seconde, et la troisième limite d'allumage et nous allons examiner les caractéristiques du phénomène d'inflammation pour chaque limite.

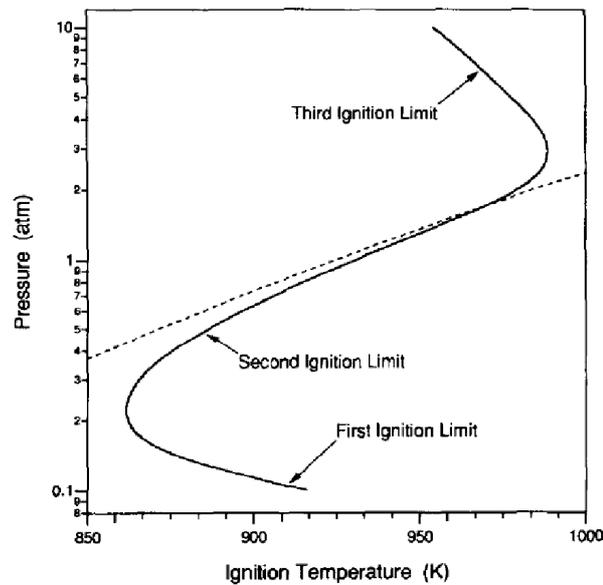


FIGURE 3.1: Exemple de domaine d'inflammation en S d'un mélange stoechiométrique H₂-air obtenu par Kreutz et al. [65] pour un courant d'air chaud (1000K) à contre-courant d'un mélange froid (500K) H₂-N₂ pour un taux d'étirement $a = 100s^{-1}$.

3.1.2 Observations aux limites d'allumage

Emballement cinétique, cause principale de l'auto-inflammation

Dans le cadre d'une étude asymptotique sur l'énergie d'activation, Liñan [66] a obtenu au moyen d'une cinétique à une étape de type Arrhénius la variation des propriétés d'une flamme quasi-1D, tel que le maximum de température, en réponse à la variation du nombre de Damköhler. La courbe classique dite de "courbe en S" obtenue par ces calculs reflète la non-linéarité des phénomènes d'allumage et d'extinction introduite par la dépendance exponentielle du taux de réaction à la température. Giovangigli et al.[67], Bruel et al.[68], Candel et al.[69] ou encore Balakrishnan et al.[70] ont aussi mis en évidence ces courbes en S avec des schémas cinétiques détaillés.

René-Corail [22] a réalisé une étude systématique de l'influence des paramètres physico-chimiques et aérodynamique de l'écoulement, sur les conditions d'allumage et la structure de la combustion dans les couches de mélange et les jets. Cette étude montre que pour des mélanges hydrogène-air, la zone de combustion présente une structure très particulière qui s'explique

à partir des spécificités de la cinétique chimique des réactions de l'hydrogène dans l'air et des propriétés de transport de ces deux réactifs. L'analyse asymptotique de Liñan montre qu'une petite perturbation de température affectant la branche froide fournit une "rétroaction thermique" suffisante pour entraîner l'apparition d'un point d'allumage. Un autre point de vue nous est donné par Kreutz et al.[65]. Ils ont étudié l'état du système juste avant le processus transitoire d'auto-inflammation et plus particulièrement le rôle du dégagement de chaleur dans l'initiation puis l'enchaînement des réactions. Les résultats qu'ils obtiennent montrent que le point d'allumage est essentiellement gouverné par la cinétique, en particulier la réaction intermédiaire $H + HO_2 \rightarrow 2OH$, et la compétition entre gain et perte de radicaux libres dans le volume où l'allumage a lieu. Une des raisons se trouve dans la taille extrêmement petite du noyau qui limite le dégagement de chaleur. De plus, ils observent que lorsque le dégagement de chaleur n'est pas significatif, le processus transitoire qui mène du point d'inflammation à la flamme de diffusion est susceptible de se dérouler avec une période d'induction durant laquelle le noyau de radicaux augmente selon des réactions intermédiaires isothermes, avant que l'augmentation de température ne s'ensuive. D'autres études (Sokolik [71], Lewis et von Elbe [72]) ont permis d'identifier les trois limites de l'auto-inflammation des mélanges $H_2 - O_2$ et les mécanismes qui les gouvernent, à des températures inférieures à 1000K. Nous présentons ici les principales conclusions quant aux mécanismes gouvernant ces trois limites.

Première limite d'allumage

La première limite d'allumage est définie sur la courbe en S comme la zone de basse pression où la température d'allumage augmente lorsque la pression diminue. On constate que le transport de masse joue un rôle très important dans la première limite d'allumage. En effet, pour ces pressions relativement faibles, les taux de réaction sont sensiblement diminués de telle manière que les pertes par diffusion des radicaux hydrogène du noyau deviennent significatives. Kreutz et al. [65] ont mené une étude détaillée de l'auto-inflammation d'un mélange $H_2 - N_2$ à contre-courant d'air pour des températures inférieures à 1000K et un taux d'étirement a égal à 100 s^{-1} . Les résultats qu'ils obtiennent montrent que le dégagement de chaleur peut être négligé jusqu'à ce que la concentration en radicaux devienne importante. Ce comportement est aussi observé par Nishioka et Law [73] pour une couche de mélange H_2 / Air supersonique laminaire. Une fois que la concentration en radicaux est devenue importante, le dégagement de chaleur doit être pris en compte : son influence sur les profils des radicaux devient alors significative.

Seconde limite d'allumage

Les résultats obtenus dans le cadre de la couche de mélange étudiée par Nishioka et al.[73] montrent que le dégagement de chaleur pour la seconde limite ne joue pas un rôle détermi-

nant dans le positionnement du point d'allumage, et que le noyau caractérisé par les pics de concentration en espèces "minoritaires" telles que H, O, OH, est bien localisé près du point de température maximale. Néanmoins, le dégagement de chaleur maximum est extrêmement faible en ce point, le caractère exothermique de la chimie étant insuffisant pour créer un "pic" de température. Ce n'est que lorsque la quantité de radical H a augmenté de deux ordres de grandeur par rapport au point d'inflammation que la température maximale devient supérieure à la température de l'air et que le dégagement de chaleur devient non négligeable.

Troisième limite d'allumage

La troisième limite d'allumage peut être définie comme le régime haute pression où la température d'allumage diminue avec l'augmentation de la pression. Comme dans le cas de la première limite d'allumage, le transport de masse y joue un rôle crucial car des radicaux sont formés par des réactions intermédiaires relativement lentes qui deviennent importantes à haute pression. En revanche, le dégagement de chaleur devient significatif et doit être pris en compte.

Il ressort de ces observations que, bien que les premiers instants de l'autoinflammation soient plus caractérisés par des variations fortes des concentrations en radicaux, la position du dégagement de chaleur maximal correspond localement au maximum de concentration en radicaux. Ainsi, si l'on considère un système fermé ou pseudo-fermé, l'accroissement du nombre des centres propagateurs que sont les radicaux libres peut conduire au bout d'un temps plus ou moins long, à l'emballement de ces réactions globalement exothermiques : la chaleur qu'elles produisent n'est pas entièrement évacuée et le critère pratique qui sera retenu pour caractériser cet emballement sera l'apparition après une phase de latence appelée période d'induction, d'un pic de température, associé à un pic de pression.

3.1.3 Auto-allumage dans les écoulements à haute vitesse

Supposons maintenant que l'auto-allumage se produise dans un certain volume de mélange [74], de manière similaire à un allumage commandé par une étincelle ou un laser. Dans quelles conditions le début de réaction chimique observé va-t-il donner lieu à la propagation d'une flamme ? Pendant un certain temps, la chaleur diffuse d'abord dans le milieu environnant par conduction thermique ; cette diffusion est aussi accompagnée d'une certaine dilatation de la zone chauffée, si elle l'est suffisamment. En même temps, dès que la température de la zone chauffée est suffisante, les réactions chimiques entre le combustible et le comburant démarrent. Il leur faut un certain temps pour élever suffisamment la température du milieu : si cette élévation de température est assez haute, et se fait assez vite par rapport à la diminution de température qui résulte de la diffusion vers l'extérieur, alors la zone d'allumage reste chaude, une

flamme s'établit et se propage vers le milieu environnant sous forme d'une déflagration. La quantité d'énergie nécessaire à l'allumage d'une flamme dans des conditions données est ordinairement très faible, de l'ordre de quelques millijoules, et l'on pourra en être surpris. Mais ceci est très facilement compréhensible lorsqu'on se souvient qu'une flamme, dans les conditions usuelles est très fine : environ 0,3 millimètres. S'il on peut établir dans le milieu une petite sphère de rayon 1mm, avec une température voisine de 2000 K, on est donc pratiquement assuré qu'une flamme va se propager. Mais il faut nuancer ce propos si l'on s'intéresse à des écoulements à haute vitesse turbulents, ou bien dans des conditions proches de l'extinction. La compétition qui peut s'établir entre l'évacuation des radicaux et de la chaleur sous l'effet de la vitesse ou de la turbulence et l'apport d'énergie dû à l'échauffement visqueux doit être pris en compte.

Influence de l'intensité de la turbulence sur l'auto-allumage

Dans de nombreuses applications, l'auto-allumage est obtenu en injectant un combustible relativement froid dans un écoulement d'air chaud. Par conséquent, la progression des réactions élémentaires et le mélange turbulent sont fortement liés et tous deux sont des processus importants durant la période d'induction. L'allumage étant un événement local, on peut généralement avancer le fait que la turbulence va faciliter la formation de poches relativement bien mélangées par rapport à une situation laminaire. Ceci a été confirmé par une étude de Mastorakos et al.[75] pour des intensités de turbulence relativement faibles. Im et al.[76] ont étudié par DNS l'allumage dans une couche de mélange turbulente entre de l'hydrogène et de l'air chaud pour plusieurs niveaux d'intensité de turbulence. Un certain nombre de résultats ressortent de cette étude.

- Premièrement, la position de l'auto-allumage est défini par le pic associé au taux de production en radicaux H : on observe que le noyau d'allumage est plutôt situé du côté de l'air chaud puis que celui-ci se déplace vers le combustible froid.
- Deuxièmement, alors que l'on observe un noyau unique pour de faibles intensités de la turbulence, plusieurs noyaux distincts s'établissent dans le cas d'une forte intensité de turbulence. On peut s'attendre à ce genre d'observations en considérant que le taux de dissipation scalaire varie fortement localement et que les positions des noyaux sont situés aux endroits de plus faible dissipation.
- Finalement, le résultat le plus remarquable concerne les délais d'auto-allumage : les variations en fonction du niveau de turbulence restent très limitées et les mécanismes physico-chimiques sont très proches dans les noyaux pour une turbulence faible comme pour une turbulence forte (pour les nombres de Reynolds et les fréquences de mélange étudiés il y a dix ans...).

Ces résultats renforcent l'idée que l'allumage est un phénomène local, et que la turbulence ne fait que créer des noyaux suffisamment bien-mélangés, qui vont être les lieux d'auto-allumage.

Influence de la vitesse et de la température d'injection

L'influence des autres paramètres tels que la vitesse ou la température d'injection des réactifs a, en revanche, une influence bien plus importante sur l'apparition de l'auto-allumage et la distance ou le délai qui le caractérise. Dans une analyse asymptotique, Im et al. [77] ont mis en évidence l'existence de quatre régimes d'auto-allumage distincts pour une couche de mélange entre deux courants parallèles en fonction du gradient de vitesse entre ces deux courants et de la température du courant d'air chaud. Ces quatre régimes, également mis en évidence par René-Corail [22], diffèrent par la nature de la source d'auto-allumage : échauffement visqueux ou transfert de chaleur depuis le courant d'air chaud, et par les réactions prédominantes. D'une manière générale, on remarque que pour une température donnée du courant d'air chaud, la longueur d'induction croît dans un premier temps avec l'augmentation de la vitesse de l'écoulement avant de diminuer si celle-ci augmente encore. On remarque aussi que la sensibilité à la température est plus importante dans le domaine des faibles températures : dans le cas d'une vitesse d'écoulement $u=600\text{m/s}$, six ordres de grandeur séparent les distances d'auto-allumage calculées pour $T=600\text{K}$ et $T=900\text{K}$ alors qu'un seul ordre de grandeur sépare les distances d'auto-allumage calculées pour $T=1000\text{K}$ et $T=1200\text{K}$. Cette sensibilité à la température diminue fortement avec l'augmentation de la vitesse : pour $u=4000\text{m/s}$, les distances d'auto-allumage sont toutes du même ordre de grandeur.

Nous illustrons cette tendance en reprenant quelques résultats obtenus pour une couche de mélange par Nishioka et Law [73]. Les résultats qu'ils obtiennent permettent de différencier la structure de la flamme stabilisée selon que l'auto-allumage se produit par transfert de chaleur "externe" du courant chaud vers le courant froid, ou par un mécanisme "interne" de création de chaleur par échauffement visqueux. Sur la Fig.3.2 sont représentées les distributions de température et de radicaux H dans le cas d'un allumage par transfert de chaleur. La vitesse du courant d'air chaud est modérée, $u=600\text{m/s}$ et ne permet pas une augmentation de température au delà de $T=1000\text{K}=T_{air}$ par échauffement visqueux. On voit que dans ce cas, la couche de mélange se développe dans la direction principale de l'écoulement sans augmentation de température, jusqu'à une certaine distance, à laquelle la température du côté de l'air chaud augmente rapidement et la flamme se développe. En ce qui concerne le radical H, sa concentration augmente exponentiellement le long de la surface de mélange du côté du courant d'air chaud. Comparons ces résultats avec ceux présentés Fig.3.3. Dans ce cas, la vitesse du courant d'air chaud est de 12000m/s et on peut tout de suite remarquer l'augmentation de température au-delà des 1000K du courant d'air chaud. Près de l'origine, la température est de 1200K , et la température maximum reste constante ($\sim 1259\text{K}$) jusqu'à une certaine distance pour laquelle la température

augmente très rapidement. Le maximum de température se décale vers le courant d'air chaud à mesure que la flamme se développe. La concentration en radicaux hydrogène croît de manière continue et exponentielle le long de la ligne T_{max} .

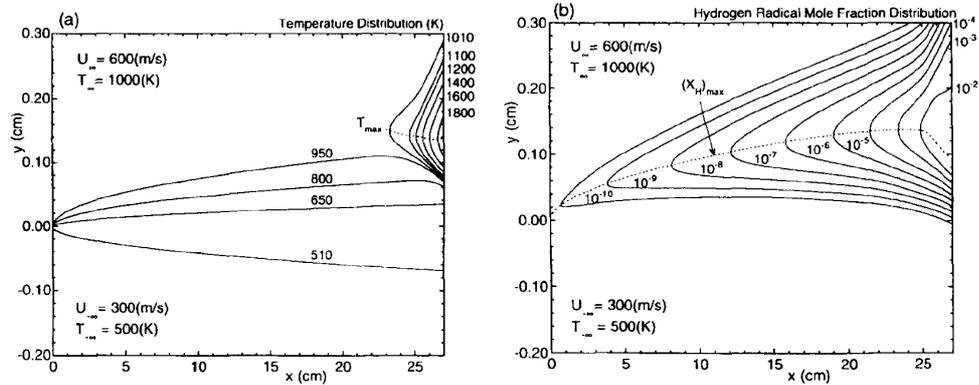


FIGURE 3.2: Isovaleurs de température a) et de concentration en radicaux hydrogène b) dans le cas d'un allumage induit par le courant d'air chaud. $p=1$ atm, $T_{air}=1000$ K, $u_{air}=600$ m/s [73].

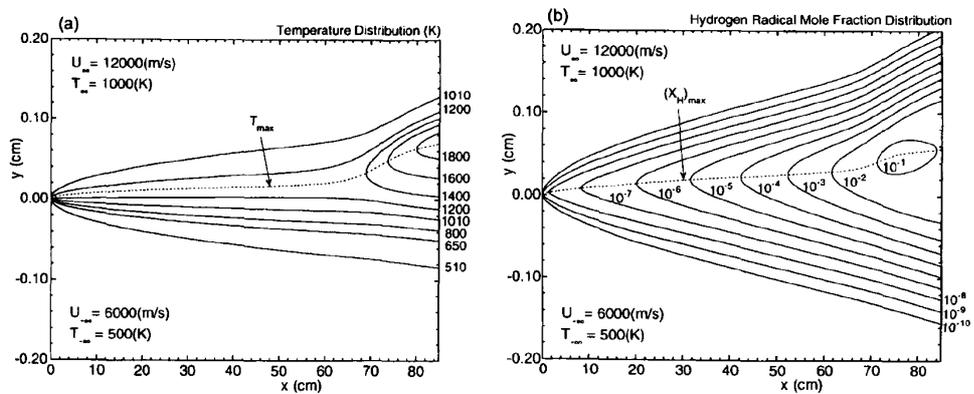


FIGURE 3.3: Isovaleurs de température a) et de concentration en radicaux hydrogène b) dans le cas d'un allumage induit par échauffement visqueux. $p=1$ atm, $T_{air}=1000$ K, $u_{air}=12000$ m/s [73].

3.1.4 Conclusions

Premièrement, nous avons pu mettre en évidence le caractère local du phénomène d'auto-allumage : le niveau de turbulence n'a d'influence que sur l'apparition de poches d'auto-allumage plus ou moins bien prémélangées et les profils de radicaux ou de température au sein d'une poche de mélange réactif semblent ne varier que faiblement avec l'intensité de la turbulence. Cela nous conforte dans l'idée que, du point de vue des applications, il n'est pas indispensable

de tenir compte du niveau de turbulence local pour rendre compte de la phénoménologie de l'auto-allumage. La tabulation de délais d'auto-allumage peut donc être réalisée en première approximation sans prendre en compte le niveau de turbulence du milieu.

Deuxièmement, la sensibilité à la température a été clairement identifiée pour la seconde limite d'inflammabilité. D'une part, il existe plusieurs ordres de grandeur entre les délais calculés pour $T=600\text{K}$ et $T=900\text{K}$ alors qu'un seul sépare ceux calculés pour $T=1000\text{K}$ et $T=1200\text{K}$. D'autre part, le phénomène d'auto-allumage dans les couches de mélange supersoniques est conditionné par la température de croisement. Il sera intéressant de comparer la réponse des schémas cinétiques détaillés disponibles autour de cette température et l'importance données aux deux réactions intermédiaires évoqués. Dans la suite, nous présentons des résultats de calculs 0-D de délais d'auto-allumage pour plusieurs schémas détaillés. C'est à partir de ces calculs que nous construisons une tabulation des délais d'auto-allumage en fonction de la température T , la pression p et la composition ξ .

3.2 Etude paramétrique des délais d'auto-allumage

3.2.1 Schémas cinétiques détaillés

Plusieurs schémas cinétiques ont été élaborés pour décrire la réaction d'oxydation de l'hydrogène. Les études qui ont conduit à l'élaboration de ces schémas ont été menées pour de l'oxygène pur ou de l'air, et pour des applications très variées allant de la combustion subsonique à la combustion hypersonique. Dans le cadre de nos travaux, nous sommes amenés à effectuer une tabulation de délais d'auto-allumage pour des conditions représentatives des moteurs fusées ou des chambres de combustion de type Scramjet pour lesquelles un schéma détaillé particulier n'est pas forcément adapté. Nous allons ici comparer les caractéristiques principales de quelques schémas disponibles que nous avons jugé pertinents pour ces applications (d'autres schémas sont aussi disponibles dans la littérature). Il s'agit des modèles suivants :

- Kee et al. [79] associé aux réactions avec l'azote du schéma de Mitchell et al. [80].
- Westbrook et al. [81] associé aux réactions avec l'azote du schéma de Mitchell et al. [80].
- Eklund et al. [82].
- Jachimowski et al. [83].
- Marathe et al. [84]

Le tableau 3.2.1 rappelle le nombre d'espèces et de réactions considérée dans chacun des schémas. Le détail de ces schémas est reporté en annexe. Une première comparaison des schémas peut être effectuée par des calculs d'équilibre chimique. La température d'équilibre est calculée en fonction de la fraction de mélange ξ pour les mélanges H_2/O_2 en présence d'azote N_2 . Ces calculs ont été menés avec le programme *EQUIL* [85] de la librairie *CHEMKIN*. Ce code, basé sur la minimisation de l'énergie libre du mélange réactionnel pour trouver l'état d'équi-

Schéma	Nombre d'espèces	Nombre de réactions
Kee/Mitchell	11	19+7
Westbrook/Mitchell	7	20+7
Eklund	7	7
Jachimowski (1988)	13	33
Jachimowski modifié (1995)	7	18
Marathe	3	1

TABLE 3.1: Nombre d'espèces et de réactions pour chaque schéma cinétique.

libre, nous permet d'obtenir la composition et la température du mélange considéré à l'équilibre chimique, pour des conditions de pression constante ou de volume constant. Le calcul de l'état d'équilibre est réalisé en tenant compte des espèces produites, des phénomènes de dissociation et de la présence de radicaux, qui contiennent une partie de l'énergie dégagée par les réactifs initiaux. Ainsi, toutes les espèces qui interviendront dans les schémas réactionnels sont prises en compte pour calculer ces équilibres. Nous avons utilisé ici des conditions de pression constante et d'enthalpie constante (adiabatique). Outre le schéma cinétique, nous avons fait varier plusieurs paramètres :

- la température initiale T_0 des gaz frais de 300K à 1200K
- la pression p du milieu de 0,2 bars à 1,6 bar
- la fraction de mélange ξ (i.e. la richesse du mélange oxydant-réducteur) de $\xi=0$ (Oxygène pur) à $\xi=1$ (H_2 pur).

Sur la Fig.3.4 est représentée la courbe de température d'équilibre obtenue en considérant des gaz frais ayant tous la même température. On y voit que la température d'équilibre ne varie que très peu d'un schéma à l'autre. Cela étant, nous avons pu mettre en évidence quelques différences entre un schéma global à une réaction comme celui de Marathe et un schéma cinétique détaillé, nous prendrons celui de Jachimowski par exemple. Pour les conditions qui nous intéressent, l'hydrogène à 300K est mélangé à de l'air vicié à une température comprise entre 600K et 1200K. Nous avons donc fait dépendre la température de ξ comme ceci :

$$T(\xi) = T_0 + \xi(T_1 - T_0) \text{ avec } T_0 = T(\xi = 0) \text{ et } T_1 = T(\xi = 1)$$

Les courbes de température sont reportées Fig.3.5 : nous obtenons une température de flamme pour des schémas détaillés entre 2500 et 2700K selon la pression. Il est intéressant de noter que le calcul effectué avec le schéma mono-réactionnel de Marathe [84] donne une température d'équilibre supérieure de 200 à 300K selon la pression.

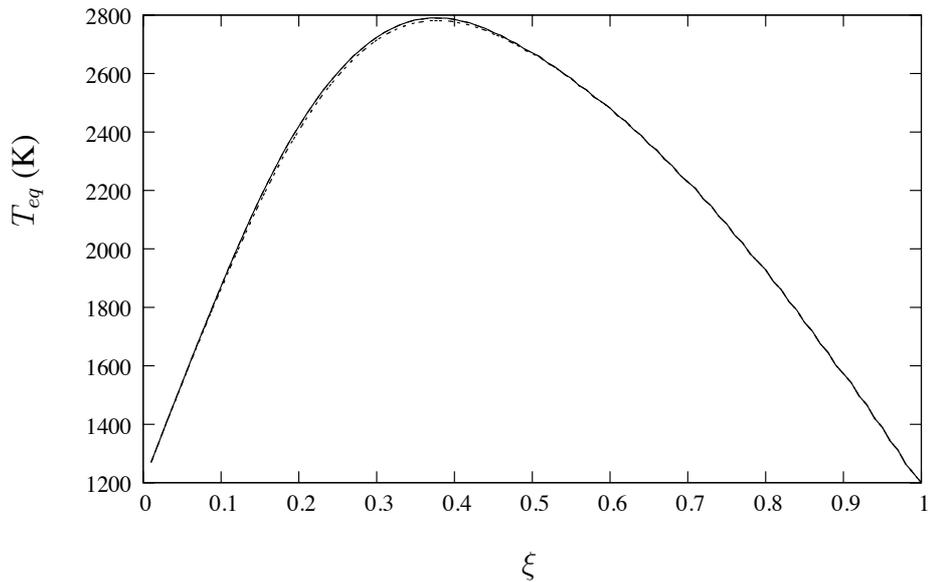


FIGURE 3.4: Représentation de la température d'équilibre pour les différents schémas cinétiques en fonction de la fraction de mélange ξ pour une pression atmosphérique et une température initiale des gaz frais de 1200K. Les courbes sont quasiment toutes confondues.

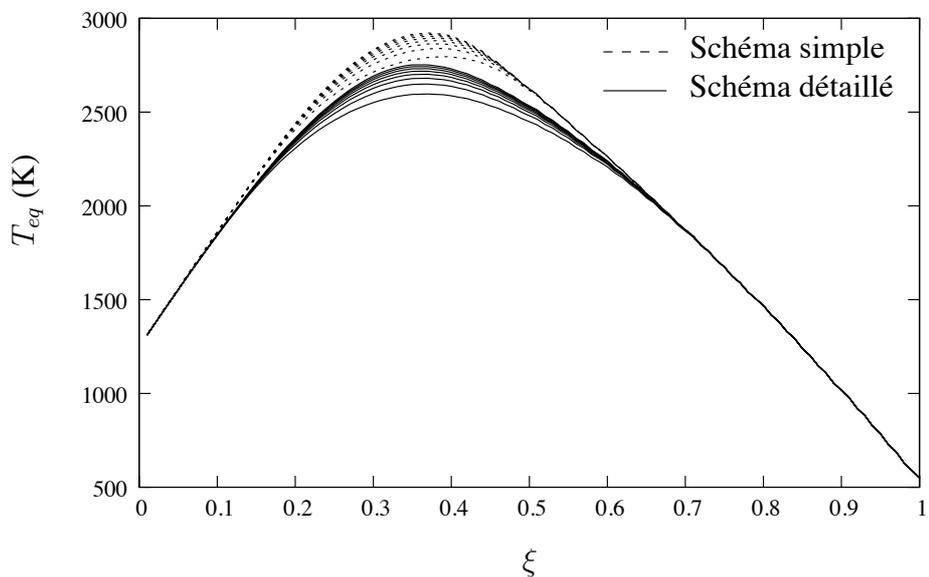


FIGURE 3.5: Comparaison entre schémas monoréactionnel et détaillé : le schéma monoréactionnel donne une température supérieure de 200 à 300K selon la pression.

3.2.2 Etude paramétrique des délais d'allumage

Intéressons nous maintenant au calcul de délais d'auto-allumage d'un mélange réactionnel. L'objectif est de dresser une cartographie des conditions de composition du mélange réaction-

nel, de pression et de température pour lesquelles l'auto-allumage est possible et d'évaluer l'échelle de temps caractéristique de cet allumage. Le programme *SENKIN* calcule le délai d'allumage comme le temps nécessaire à une augmentation de 400K de la température du mélange réactif, ce qui est suffisant pour rendre compte d'une non-linéarité dans l'augmentation de température significative d'une combustion du mélange. Nous détaillons maintenant la méthode numérique utilisée dans *SENKIN*.

Senkin : présentation du module

Senkin [79] est un programme développé pour la prédiction du comportement de la cinétique chimique au cours du temps d'un mélange gazeux dans une enceinte fermée. En plus de prédire l'historique des espèces et de la température, ce programme peut aussi permettre l'analyse de sensibilité aux paramètres des réactions élémentaires. Dans la plupart des modèles de combustion, la solution dépend fortement des conditions initiales et limites et d'un certain nombre de paramètres inhérents au modèle lui-même. Parmi les plusieurs possibilités proposées pour les conditions externes à imposer au "réacteur", nous avons retenu l'hypothèse d'un système adiabatique à pression constante, hypothèse qui s'applique bien aux problèmes d'auto-allumage : un mélange réactif de masse bien déterminée réagit dans un système adiabatique. Le mélange est ainsi libre de s'expandre, tout en conservant l'enthalpie du système.

La solution numérique est obtenue à l'aide de l'algorithme DASAC qui permet l'obtention de la solution associée aux équations différentielles gouvernant le système choisi. Les équations de conservation de la masse et de l'énergie sont décrites dans la suite. Le mélange réactif est considéré comme un système clos sans flux de masse aux frontières, de telle manière que la masse totale du mélange $m = \sum_{k=1}^N m_k$ reste constante : $dm/dt = 0$. m_k est la masse de l'espèce k et N est le nombre total d'espèces du mélange. Chaque espèce est produite ou détruite selon :

$$\frac{dm_k}{dt} = V\omega_k W_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.9)$$

avec t le temps, ω_k le taux de production molaire de l'espèce k par les réactions élémentaires, W_k la masse molaire de l'espèce k et V le volume du système, qui pourra donc varier dans le temps. Puisque la masse totale est constante, on peut écrire :

$$\frac{dY_k}{dt} = \mathcal{V}\omega_k W_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.10)$$

avec $Y_k = m_k/m$ la fraction massique de l'espèce k et $\mathcal{V} = V/m$ le volume spécifique.

Pour le cas qui nous intéresse, l'équation de conservation de l'énergie doit être dérivée à la lumière des hypothèses faites. La première loi de la thermodynamique pour un corps pur dans un système adiabatique s'écrit :

$$de + pdV = 0, \quad (3.11)$$

avec e l'énergie interne massique et p la pression. Cette relation est valable pour un mélange idéal de gaz, dont l'énergie interne est donnée par :

$$e = \sum_{k=1}^N e_k Y_k, \quad (3.12)$$

avec e_k l'énergie interne de l'espèce k . Si on dérive cette équation, on obtient :

$$de = \sum_{k=1}^N Y_k de_k + \sum_{k=1}^N e_k dY_k, \quad (3.13)$$

En faisant l'hypothèse de gaz calorifiquement parfaits, on peut écrire $de_k = C_{v,k} dT$ avec T la température du mélange, et $C_{v,k}$ la chaleur spécifique de l'espèce k évaluée à volume constant. Avec la définition de la chaleur spécifique du mélange $C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k}$ et en la dérivant par rapport au temps, l'équation pour l'énergie devient :

$$C_v \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^N e_k \frac{dY_k}{dt} + p \frac{dV}{dt} = 0. \quad (3.14)$$

On obtient finalement en substituant (3.9) dans (3.14) :

$$C_v \frac{dT}{dt} + p \frac{dV}{dt} + V \sum_{k=1}^N e_k \omega_k W_k = 0. \quad (3.15)$$

De plus, on utilise l'équation d'état pour calculer la pression :

$$p = \frac{\rho R T}{\bar{W}}, \quad (3.16)$$

avec R la constante universelle des gaz, \bar{W} la masse molaire moyenne du mélange, et ρ la densité. Dans le cas d'un système adiabatique à pression constante, la première loi de la thermodynamique est réduite à la condition que l'enthalpie est constante. La définition de l'enthalpie $h = e + pV$ se différencie comme suit :

$$dh = de + V dp + p dV. \quad (3.17)$$

La pression étant constante, le second terme $V dp$ est nul et donc $dh = 0$. L'enthalpie du mélange est :

$$h = \sum_{k=1}^N Y_k h_k, \quad (3.18)$$

avec h_k l'enthalpie spécifique de l'espèce k . Ainsi, l'équation de l'énergie interne devient :

$$C_p \frac{dT}{dt} + V \sum_{k=1}^N h_k \omega_k W_k = 0, \quad (3.19)$$

avec $C_p = \sum_{k=1}^N Y_k c_{p,k}$ la chaleur spécifique du mélange à pression constante. Ainsi, le système d'équations à résoudre pour le cas adiabatique à pression constante est constitué des équations pour l'énergie (3.19) et des N équations pour les fraction massiques des espèces en jeu (3.10).

Le taux de production ω_k de chaque espèce résulte de la compétition entre toutes les réactions chimiques faisant intervenir cette espèce. Chacune de ces équations provient de la loi d'action de masse, mise sous la forme d'une loi d'Arrhenius :

$$k_f = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (3.20)$$

avec E_a l'énergie d'activation, β le coefficient de température, et A le coefficient pré-exponentiel. Ces valeurs sont données par le schéma cinétique détaillé retenu. Les valeurs initiales de température, de pression, de composition sont données par l'utilisateur. Etant donné que les valeurs considérées sont des valeurs intensives, le problème reste indépendant de la quantité de matière introduite. Nous avons donc réalisé plusieurs tables de délais d'allumage en fonction :

- du schéma cinétique considéré.
- de la température du mélange réactionnel.
- de la pression initiale considérée.
- de la composition du mélange réactionnel.

Les courbes obtenues en fonction de la température et de la composition (pression fixée) et en fonction de la pression et de la composition (température fixée) sont reportées en annexe pour chaque schéma cinétique. Nous allons maintenant étudier l'influence de chaque paramètre sur le délais d'auto-allumage.

Influence de la composition

Pour étudier l'influence de la composition, nous nous plaçons à la pression et la température que nous rencontrons dans le cas d'une flamme jet supersonique dont la simulation numérique est présentée dans la suite de l'exposé. La pression est la pression atmosphérique et la température retenue est 1000K. On suppose un mélange hydrogène ($\xi=1$)/ air vicié ($\xi=0$) dont la composition varie avec ξ de la façon suivante :

$$Y_{N_2} = 0,544.(1 - \xi)$$

$$Y_{O_2} = 0,255.(1 - \xi)$$

$$Y_{H_2O} = 0,201.(1 - \xi)$$

$$Y_{H_2} = \xi$$

Les courbes obtenues pour $1/\tau_{ign}$ sont reportées sur la Fig.3.6. Pour chacun des schémas utilisés, il semble que l'allumage soit susceptible de se produire pour des compositions comprises entre $\xi=0.06$ et $\xi=0.89$. On obtient des courbes "en cloche" avec un maximum aux alentours

de la composition stoechiométrique $\xi_{st}=0,27$ mais le maximum de $1/\tau_{ign}$ n'est pas obtenu pour la même valeur de ξ , ce qui montre une première différence entre les différents schémas cinétiques.

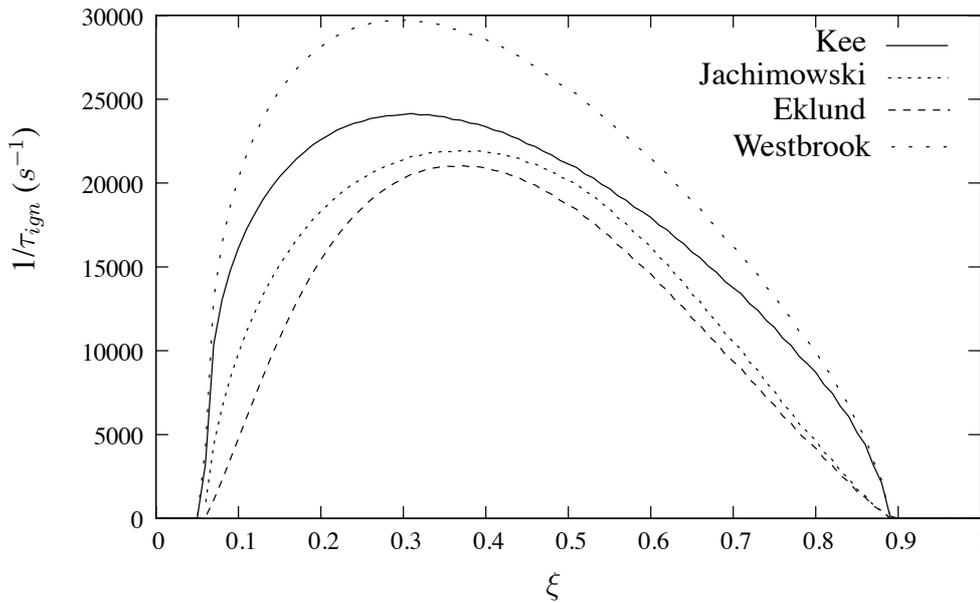


FIGURE 3.6: Influence du schéma cinétique détaillé retenu sur le délai d'allumage.

Influence de la température et de la pression

La courbe présentée Fig.3.7 montre l'influence de la température pour une composition donnée ($\xi=0.40$) et une pression atmosphérique. Ces courbes montrent une première partie correspondant aux températures supérieures à 1000K où les quatre schémas testés se comportent de manière similaire et donnent des délais d'allumage comparables. Puis, les schémas montrent des comportements totalement différents : trois schémas montrent une forte augmentation du délai d'allumage puis l'allumage n'est plus possible pour $T \leq 800K$ alors que le schéma d'Eklund montre une augmentation progressive jusqu'à 500K, température en-dessous de laquelle, l'allumage devient impossible. On retrouve bien le résultat exposé dans la première partie : les valeurs des délais d'auto-allumage sont du même ordre de grandeur pour des températures supérieures à 1000K, alors que quatre ordres de grandeur séparent les valeurs pour $T=1000K$ et $T=800K$. Les courbes reportées Fig.3.8 à 3.11 montrent l'influence simultanée de la température et de la pression pour une composition proche de la stoechiométrie. On remarque la différence de comportement notable qui existe entre les différents schémas cinétiques détaillés.

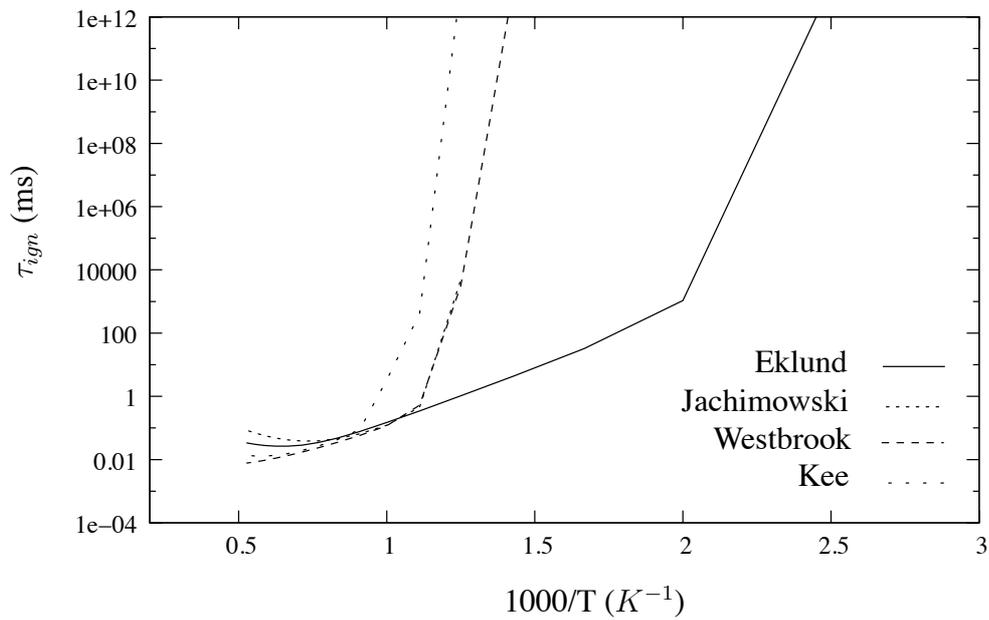


FIGURE 3.7: Représentation du délai d'allumage en fonction de l'inverse de la température pour une pression donnée de 1 bar et une fraction de mélange $\xi=0.4$.

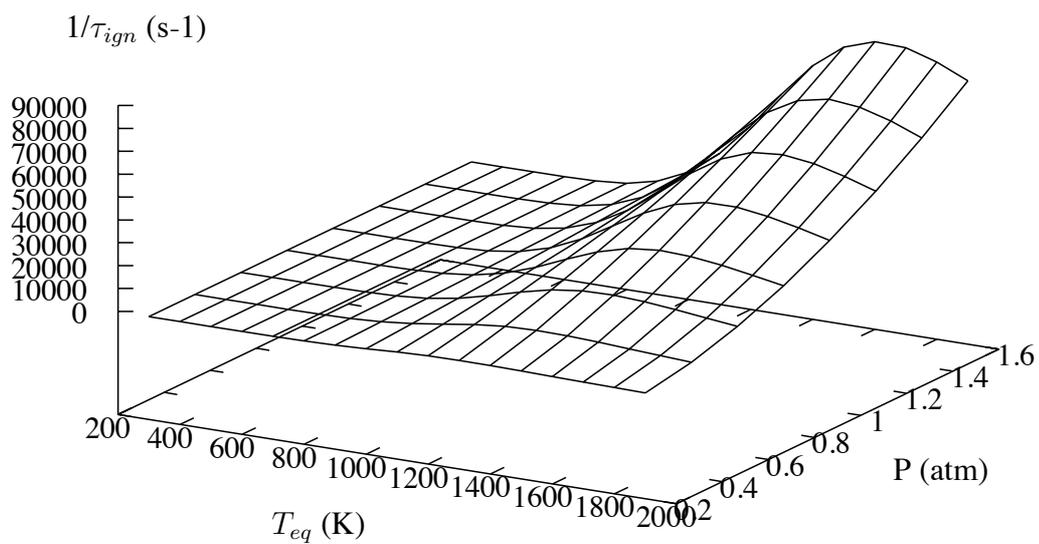


FIGURE 3.8: Représentation du délai d'allumage en fonction de la température et de la pression pour une composition $\xi=0.4$ pour le schéma d'Eklund.

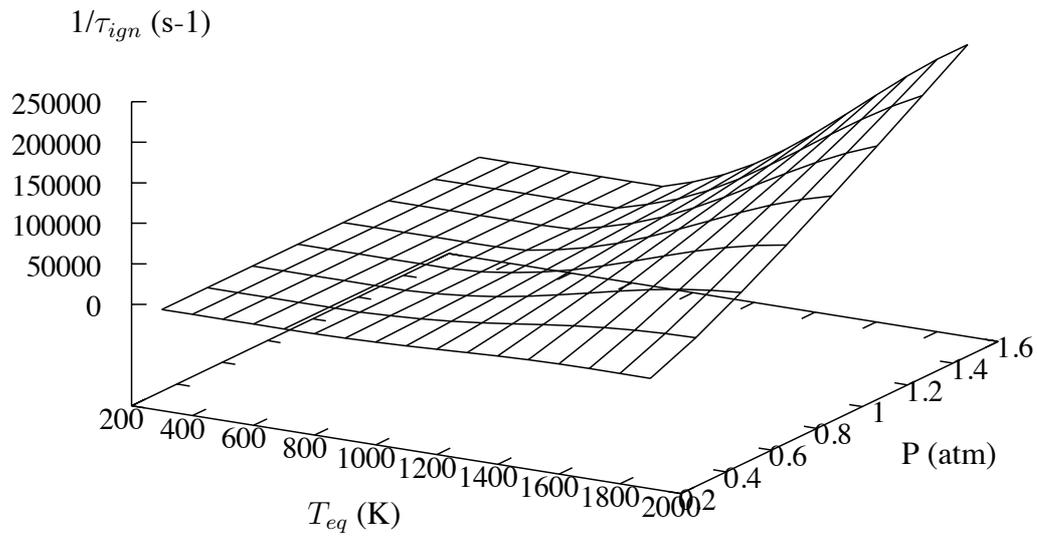


FIGURE 3.9: Représentation du délai d'allumage en fonction de la température et de la pression pour une composition $\xi=0.4$ pour le schéma de Westbrook.

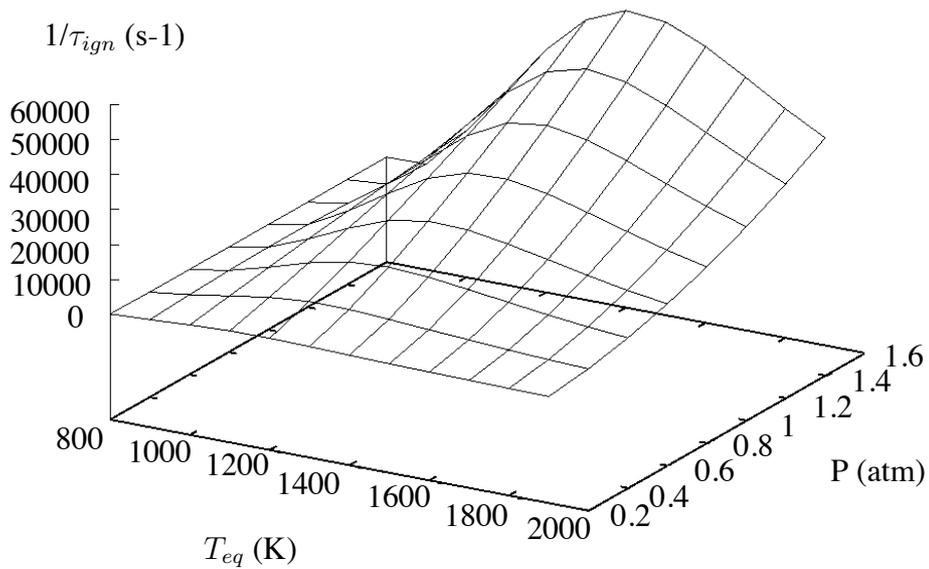


FIGURE 3.10: Représentation du délai d'allumage en fonction de la température et de la pression pour une composition $\xi=0.4$ pour le schéma de Jachimowski.

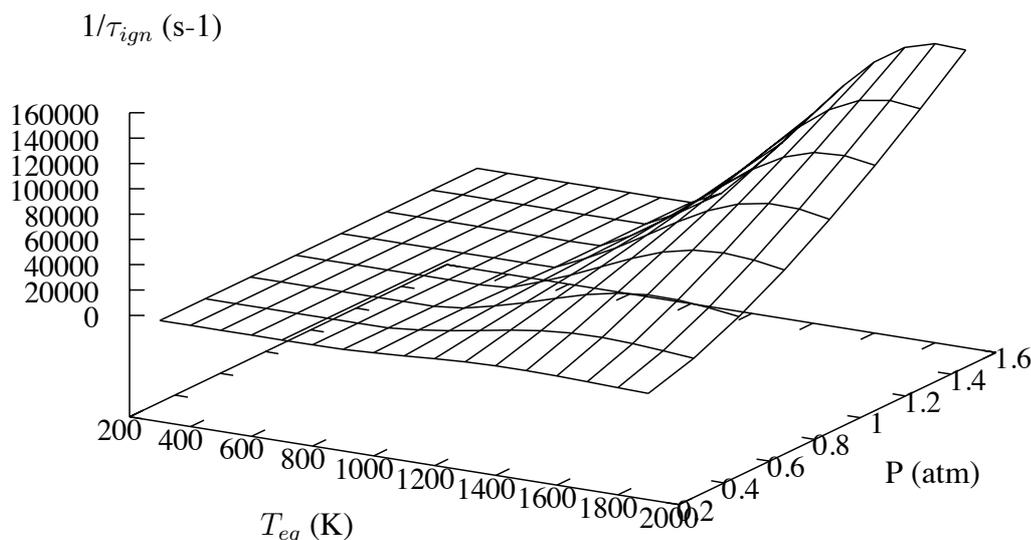


FIGURE 3.11: Représentation du délai d'allumage en fonction de la température et de la pression pour une composition $\xi=0.4$ pour le schéma de Kee.

3.2.3 Discussion

On peut résumer les propriétés de chacun des schémas dans le tableau suivant :

Schéma	$(1/\tau_{ign})_{max}$	P_{max} correspondante	T_{max} correspondante
Eklund	$9.E+04 \text{ s}^{-1}$	1.6 atm	1500 K
Westbrook	$2.5E+05 \text{ s}^{-1}$	1.6 atm	1800 K
Jachimowski	$6.0E+04 \text{ s}^{-1}$	1.6 atm	1300 K
Kee	$1.6E+05 \text{ s}^{-1}$	1.6 atm	1800 K

TABLE 3.2: Comparatif des propriétés des schémas cinétiques.

Tous les schémas possèdent un comportement similaire en pression : plus la pression augmente, plus le délai d'allumage diminue. Cependant, ils ne réagissent pas de la même manière en fonction de la température : entre 300 et 1800K, les schémas d'Eklund et de Jachimowski montrent un minimum de τ_{ign} pour une température intermédiaire ; les fréquences d'allumage pour les schémas de Westbrook et Kee sont, en revanche, des fonctions croissantes monotones de la température, même si le schéma de Kee semble dessiner un maximum de $(1/\tau_{ign})$ pour 1800K. Les valeurs maximales de τ_{ign} sont de l'ordre de la microseconde pour les schémas de Eklund et Jachimowski, les valeurs correspondante pour les schémas de Westbrook et Kee étant un ordre de grandeur au dessus. Enfin, le schéma d'Eklund semble permettre un auto-allumage

pour des températures trop faibles, il sera donc écarté pour la suite de notre étude. En conclusion, nous choisissons de conserver le schéma de Jachimowski.

Chapitre 4

Modélisation de la combustion turbulente

Afin de fermer les équations moyennes de conservation des espèces réactives, il faut maintenant s'intéresser au terme de production / consommation par la réaction chimique. L'estimation de ce terme n'est pas aisée : les fortes dépendances aux conditions de pression, de température mais aussi la non-linéarité de ce terme avec la composition requièrent un effort de modélisation conséquent qui constitue un des principaux objets de ce travail. Des approches différentes sont nécessaires selon que les réactifs sont initialement prémélangés ou non, selon la nature turbulente ou laminaire de l'écoulement, et selon les niveaux de vitesses considérés. Si une classification des régimes de combustion est possible pour les flammes turbulentes de prémélange : en comparant les longueurs et les temps caractéristiques de la turbulence à la longueur et au temps caractéristiques des flammes laminaires, on peut distinguer les flammes "plissées", les flammes "épaissies" et les flammes "plissées-épaissies" [86, 87, 88], il est *a priori* plus difficile de bâtir une classification similaire pour les flammes turbulentes non-prémélangées. Ces flammes sont principalement contrôlées par le mélange entre combustible et oxydant : les grandes structures de la turbulence permettent le brassage des réactifs initialement séparés puis le mélange à petite échelle ou micro-mélange est assuré par la diffusion moléculaire. C'est ce dernier qui permet la rencontre des molécules, et il est facile de comprendre qu'il est alors insuffisant d'observer les concentrations moyennes pour caractériser le mélange. Nous présentons dans cette partie la modélisation retenue pour décrire le cas des flammes turbulentes non-prémélangées à hautes vitesses. Il s'agit d'une approche Lagrangienne introduite par Borghi et ses collaborateurs [39] que nous étendons dans la deuxième partie aux écoulements rapides afin de rendre compte des possibilités d'auto-allumage induit par la dissipation visqueuse, puis dans une dernière partie aux écoulements liquide-gaz afin de rendre compte de la combustion diphasique du couple LOx/GH2 dans des conditions sous-critiques.

4.1 Calcul des flammes turbulentes non-prémélangées

La fraction massique moyenne \tilde{Y}_k de chaque espèce réactive k apparaissant dans le mélange réactionnel satisfait à l'équation bilan :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' Y_k''} \right) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N. \quad (4.1)$$

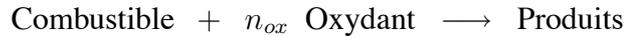
Cette équation nécessite la modélisation du taux moyen de réaction $\tilde{\omega}_k$. Or, on l'a vu dans les précédents chapitres, les schémas cinétiques détaillés peuvent faire intervenir des dizaines d'espèces et de nombreuses corrélations entre elles. La connaissance du taux de réaction moyen nécessite avant tout la connaissance de la PDF jointe de toutes ces variables :

$$\bar{\rho} \tilde{\omega}_k = \int \int \int \dots \int \rho \omega_k(Y_1, \dots, Y_n, T, \rho) P(Y_1, \dots, Y_n, T, \rho) dY_1 \dots dY_n dT d\rho. \quad (4.2)$$

La complexité de la modélisation est due, en premier lieu, à celle du schéma réactionnel, le nombre de réactifs considérés faisant augmenter les dépendances de la fonction densité de probabilité. Le premier travail à effectuer consiste donc à choisir une représentation des processus chimiques.

4.1.1 Approximation de Schwab-Zel'dovich pour une chimie infiniment rapide

Considérons le cas d'une cinétique globale représentée par une réaction unique irréversible s'opérant entre le combustible et l'oxydant :



Alors, $\omega_{ox} = -\kappa Y_{ox} Y_f = r_{st} \omega_f$ où κ est la constante de vitesse et r_{st} le rapport stoechiométrique massique de la réaction ($r_{st} = n_{ox} W_{ox} / W_f$). Si l'on fait l'hypothèse supplémentaire que la réaction est infiniment rapide, c'est-à-dire que κ tend vers l'infini, alors le produit $Y_{ox} Y_f$ tend vers 0 : si Y_{ox} n'est pas nulle, alors Y_f l'est et inversement, ou bien elles sont toutes les deux nulles. On considère alors la variable de Zel'dovich $Z^* = Y_{ox} - r_{st} Y_f$ avec l'hypothèse que le combustible et l'oxydant ont le même coefficient de diffusion. Puisque Z^* est une variable instantanée dans l'écoulement turbulent, si $P(Z^*, \rho)$ est connue en chaque point de l'écoulement, alors il est possible de calculer \tilde{Y}_{ox} et \tilde{Y}_f sans utiliser les équations moyennées pour les \tilde{Y}_k :

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{ox} &= \int_{Z^* > 0} Z^* \tilde{P}(Z^*) dZ^*, \\ \tilde{Y}_f &= -\frac{1}{r_{st}} \int_{Z^* < 0} Z^* \tilde{P}(Z^*) dZ^*, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}\tilde{P}(Z^*) &= \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{\rho} \rho P(Z^*, \rho) d\rho, \\ \bar{\rho} &= \int_{Z^*} \int_{\rho} \rho P(Z^*, \rho) dZ^* d\rho.\end{aligned}$$

On peut définir plusieurs autres variables, telles que Z^* , qui ne sont pas modifiées par la réaction chimique. On constate que toutes ces variables, ainsi que l'enthalpie h (si les pertes thermiques par rayonnement, l'énergie cinétique et les effets instationnaires de pression sont négligés) sont reliées linéairement à la fraction de mélange ξ selon :

$$\frac{h - h_{ox}}{h_f - h_{ox}} = \xi.$$

Avec cette définition, $\xi = 0$ dans le courant d'oxydant pur, et $\xi = 1$ dans le courant de combustible pur. Il s'ensuit que toutes les fractions massiques, Y_k , et la température, T , peuvent être exprimées en fonction de ξ seule : $Y_k^{eq}(\xi)$ et $T^{eq}(\xi)$. En considérant que les nombres de Lewis pour chaque espèce sont tous égaux à un :

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_{p_k} D_k} = 1 \quad \forall k, \quad (4.3)$$

l'équation de bilan de ξ est une simple équation de convection diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right). \quad (4.4)$$

Il est alors possible de calculer les fractions massiques moyennes, \tilde{Y}_k , et la température moyenne, \tilde{T} , sans utiliser les équations de bilan moyennées, mais en utilisant la densité de probabilité de ξ :

$$\begin{aligned}\tilde{Y}_k &= \int_{\xi} Y_k^{eq}(\xi) \tilde{P}(\xi) d\xi, \\ \tilde{T} &= \int_{\xi} T^{eq}(\xi) \tilde{P}(\xi) d\xi.\end{aligned}$$

Cette méthode a été notamment utilisée dans le cadre strict de l'hypothèse de chimie très rapide par Bilger et al.[89]. Le diagramme Fig.4.1 représente les droites de combustion pauvre et riche qui caractérisent l'équilibre chimique dans l'espace (ξ, Y_k) . La courbe de température est aussi schématisée : elle présente un maximum à la stoechiométrie, selon les hypothèses adoptées.

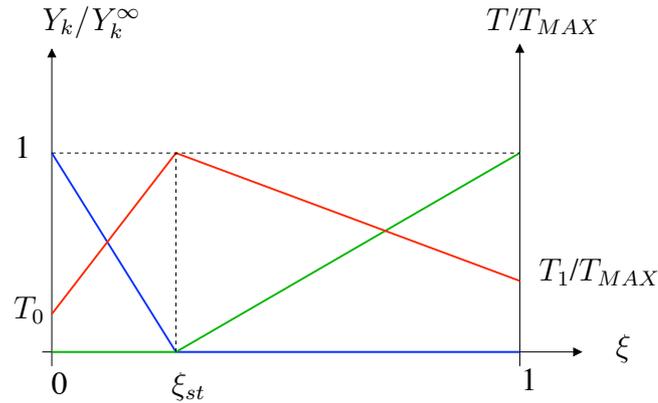


FIGURE 4.1: Composition et température dans l'hypothèse de chimie infiniment rapide.

4.1.2 Ecart à l'hypothèse de chimie infiniment rapide

Des résultats expérimentaux obtenus par Masri et al.[90] sont reportés Fig.4.2. Des mesures ponctuelles et simultanées de température, de concentration OH et de composition, ξ , ont été effectuées dans une flamme de diffusion turbulente entre un jet d'un mélange azote-éthane et un courant d'air. Chaque point est le résultat du signal recueilli comme effet d'un "pulse" laser envoyé sur un petit élément de flamme. Les cas a, b, et c correspondent à des valeurs croissantes de la vitesse de sortie du jet de combustible qui varie de $u_j = 10$ à $u_j = 100$ m/s.

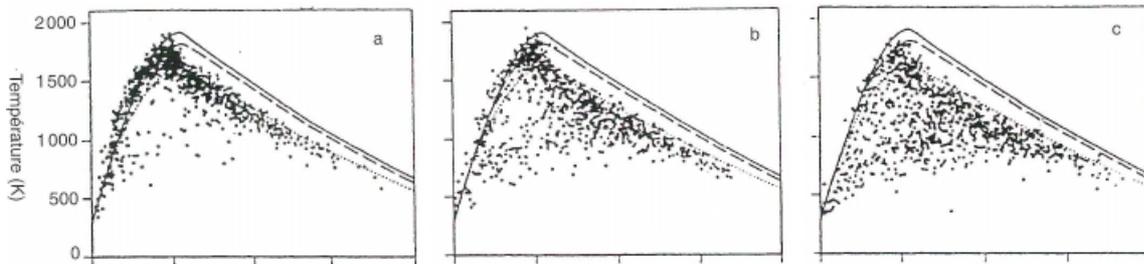


FIGURE 4.2: Mesures simultanées de température, de concentration en radical OH , et de composition réalisées par Masri et al.[90].

On peut clairement voir que les mesures s'éloignent de plus en plus de la situation d'équilibre chimique pour laquelle tous les points devraient être sur les courbes en trait plein. Ces résultats suggèrent que les effets de chimie finie doivent être pris en compte : une variable supplémentaire est donc nécessaire afin de rendre compte de l'avancement de la réaction. La considération de la fraction de mélange ξ seule ne suffit plus.

De plus, l'hypothèse de chimie infiniment rapide ne permet pas de représenter les problèmes d'accrochage ou de décollement d'une flamme de diffusion turbulente dans la zone proche de l'injecteur ou à la confluence de deux jets initialement séparés. Ce phénomène est couramment

observé dès que la vitesse ou la turbulence du jet augmentent et dès que la flamme n'est pas parfaitement accrochée, un prémélange partiel du combustible et de l'oxydant se produit. Plusieurs phénomènes peuvent aussi se produire lorsque la turbulence devient assez forte : la turbulence peut étirer la flammelette de telle façon que celle-ci s'éteigne localement, et les grandes structures peuvent aussi faire interagir des portions de flamme à grande échelle. Puisque l'étirement n'est pas permanent, la flammelette éteinte par étirement peut aussi se rallumer, le taux d'étirement étant susceptible de varier dans le temps, et on peut s'attendre à ce que ce rallumage se fasse par la propagation d'une flamme plus ou moins prémélangée.

Pour rendre compte de ces effets, l'hypothèse de chimie infiniment rapide doit être abandonnée. Il faut donc évaluer la PDF jointe de toutes les variables réactives considérées au début de ce chapitre. La résolution d'une équation pour la PDF jointe de toutes les variables est possible avec une méthode de type Monte Carlo et peut fournir une bonne description des phénomènes à condition qu'un modèle satisfaisant de micro-mélange soit utilisé. En fait, le problème majeur de cette méthode est qu'elle reste extrêmement coûteuse en temps de calcul. Le développement d'algorithmes de résolution parallélisés [91] permet néanmoins de s'affranchir progressivement de cette limitation. En fait, la connaissance d'un degré d'avancement unique en plus de la fraction de mélange peut s'avérer suffisante pour représenter l'état chimique même si les réactions ne sont pas infiniment rapides : il "suffit" alors de déterminer la PDF jointe de la fraction de mélange, ξ , et d'une variable supplémentaire indiquant l'avancement de la réaction, comme par exemple la fraction massique d'une espèce réactive telle que l'oxygène. Le problème est d'évaluer cette PDF $\tilde{P}(Y, \xi; \mathbf{x}, t)$ avec une représentation satisfaisante des phénomènes de micro-mélange influencés par les réactions chimiques. Une approche Lagrangienne peut alors s'avérer intéressante. Nous présentons dans la suite le modèle MIL qui est retenu pour la modélisation de la combustion. C'est un modèle Lagrangien dans l'espace des compositions basé sur la compétition entre le processus de micro-mélange et les effets de chimie finie. Les principales caractéristiques de ce modèle, initialement introduit dans les travaux de Borghi et Pourbaix [92] et Borghi et Gonzalez [39], sont présentées dans la suite.

4.2 Présentation du modèle MIL

4.2.1 Estimation de la PDF jointe

Le modèle Lagrangien MIL est basé sur une hypothèse de chimie brusque, c'est-à-dire que les réactions sont supposées avoir une haute énergie d'activation : ainsi les particules se mélangent avant de réagir brusquement et d'atteindre instantanément les conditions d'équilibre. Cette hypothèse de travail permet de rendre compte de la plus grande probabilité que les particules de fluide brûlent autour de la stoechiométrie et que les deux premières variables Y et ξ ne sont pas statistiquement indépendantes, en insistant sur le fait que les réactions chimiques

se produisent seulement dans une certaine gamme du rapport combustible/oxydant, pour lequel on peut entretenir la combustion. Ainsi, on introduit une relation $Y=Y^{\text{MIL}}(\xi)$. Il en résulte que la PDF jointe $\tilde{P}(Y, \xi; \mathbf{x}, t)$ s'écrit :

$$\tilde{P}(Y, \xi; \mathbf{x}, t) = \tilde{P}(\xi)P(Y|\xi; \mathbf{x}, t) = \tilde{P}(\xi)\delta(Y - Y^{\text{MIL}}(\xi)), \quad (4.5)$$

où la PDF conditionnelle de la variable réactive est fermée en considérant la trajectoire Lagrangienne des particules dans l'espace des compositions, $\delta(Y - Y^{\text{MIL}}(\xi))$, appelée trajectoire MIL que nous détaillons dans la suite.

Une fois déterminée cette trajectoire, il suffit d'estimer la PDF marginale, $\tilde{P}(\xi)$. Celle-ci est présumée par une fonction Beta. La forme de la PDF est entièrement déterminée à partir de la moyenne, $\tilde{\xi}$, et de la variance, $\tilde{\xi}''^2$, de la fraction de mélange. Ces quantités sont calculées grâce aux équations supplémentaires suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho}\tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\xi} - \tilde{\rho}\frac{\nu_T}{\text{Sc}_{\tilde{\xi}}}\frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) = 0, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho}\tilde{\xi}''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\xi}''^2 - \tilde{\rho}\frac{\nu_T}{\text{Sc}_{\tilde{\xi}''^2}}\frac{\partial\tilde{\xi}''^2}{\partial x_i} \right) = 2\tilde{\rho}\frac{\nu_T}{\text{Sc}_{\tilde{\xi}}}\frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i}\frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} - \tilde{\rho}\frac{\tilde{\xi}''^2}{\tau_{\tilde{\xi}}}, \quad (4.7)$$

où les termes de diffusion moléculaire sont négligés par rapport aux termes turbulents. Les termes de transport scalaire turbulent correspondant sont fermés en utilisant une viscosité turbulente tourbillonnaire, $\nu_T=C_{\mu}k^2/\epsilon$, avec $C_{\mu}=0.09$. Les nombres de Schmidt turbulents, $\text{Sc}_{\tilde{\xi}}$ et $\text{Sc}_{\tilde{\xi}''^2}$, sont pris égaux à la valeur usuelle de 0,7 [93]. Le taux de dissipation moyen de la variance du scalaire est modélisé en utilisant une loi de relaxation linéaire faisant apparaître l'échelle de temps, $\tau_{\tilde{\xi}}$, qui sera discutée par la suite. A noter que des formes plus complexes pourraient être considérées ici en utilisant l'approche généralisée de PDF partielle introduite par Mura et Borghi [94].

Nous continuons la présentation du modèle MIL par la construction de la trajectoire Lagrangienne MIL dans l'espace des compositions.

4.2.2 Trajectoire Lagrangienne dans l'espace des compositions

Les chemins Lagrangiens suivis par les particules sont approchés par les lignes brisées de la Figure 4.3. Sur cette trajectoire, tracée dans l'espace des compositions pour une composition moyenne fixée et une fréquence de mélange fixée, les particules ont d'abord besoin d'un temps fini pour se mélanger et atteindre des conditions dans lesquelles elles sont susceptibles de pouvoir s'enflammer, ici le domaine $[\xi_{J-}, \xi_{J+}]$. Les termes de micro-mélange scalaire sont représentés par le modèle classique d'Interaction par Echange avec la Moyenne IEM-LMSE [95, 96] au moyen des deux équations suivantes pour la fraction de mélange ξ et la variable

réactive Y :

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau_\xi} \quad \text{et} \quad \frac{dY}{dt} = \frac{\tilde{Y} - Y}{\tau_Y} + \omega_Y \quad (4.8)$$

où τ_ξ et τ_Y sont les échelles de temps de mélange de la fraction de mélange et de la fraction massique d'oxygène, respectivement. Le précédent jeu d'équations Lagrangiennes est équivalent à l'équation de transport de la PDF scalaire en utilisant la fermeture LMSE (Linear Mean Square Estimation) de Dopazo et O'Brien [97]. En principe, d'autres modèles de micro-mélange peuvent aussi être utilisés dans le cas de l'approche MIL.

Sur les droites de mélange, les termes sources chimiques peuvent être négligés par rapport aux termes de mélange et le système (4.8) conduit à :

$$\frac{dY}{dZ} = \frac{\tau_\xi}{\tau_Y} \frac{\tilde{Y} - Y}{\tilde{\xi} - \xi}. \quad (4.9)$$

Si l'on suppose que $\tau_\xi = \tau_Y = \tau$, cette équation peut être simplement intégrée pour obtenir les branches AM et BM, Fig.4.3. Cette hypothèse n'est pas très restrictive puisque, avant que la combustion n'intervienne, il n'existe pas de différence notable entre $\tau_\xi = \tilde{\xi}''^2 / \tilde{\epsilon}_Z$ et $\tau_Y = \tilde{Y}''^2 / \tilde{\epsilon}_Y$ puisqu'elles sont linéairement reliées. Les particules suivent donc la trajectoire IEM sans réaction significative (chemins AD et BF). Dans une zone proche de la stoechiométrie, les conditions sont rencontrées pour que l'inflammation ait lieu, et en suivant l'hypothèse d'une réaction brusque évoquée précédemment, elles atteignent instantanément la droite d'équilibre chimique (chemins DE et FG). Sur la trajectoire d'équilibre, on a soit $Y=0$ sur la branche correspondant aux mélanges riches, soit $Y=Y^{\text{MAX}}(\xi-\xi_{st})/(1-\xi_{st})$ sur la branche correspondant aux mélanges pauvres. Ceci correspond aux segments AC et BC, Fig.4.3.

En notant ξ_{J-} (respectivement ξ_{J+}) la valeur de ξ correspondant à l'inflammation des particules provenant du courant d'oxydant pur, c'est-à-dire le point A Fig.4.3 (respectivement du courant de combustible pur, point B), la trajectoire MIL qui en résulte est définie par :

$$Y^{\text{MIL}}(\xi) = \begin{cases} Y^{\text{MIX}}(\xi), & \text{si } \xi < \xi_{J-} \\ Y^{\text{EQU}}(\xi), & \text{si } \xi \in [\xi_{J-}; \xi_{J+}] \\ Y^{\text{MIX}}(\xi), & \text{si } \xi > \xi_{J+} \end{cases}, \quad (4.10)$$

où la trajectoire de mélange est donnée par les droites IEM-LMSE :

$$Y^{\text{MIX}}(\xi) = \begin{cases} Y^{\text{MAX}} - (Y^{\text{MAX}} - \tilde{Y}) \cdot \xi / \tilde{\xi}, & \text{si } \xi < \tilde{\xi} \\ \tilde{Y}(1 - \xi) / (1 - \tilde{\xi}), & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.11)$$

Pour la droite d'équilibre, elle est simplement estimée grâce à une approximation de chimie infiniment rapide à une étape ou une limite de Burke-Schumann classique [18] :

$$Y^{\text{EQU}}(\xi) = \begin{cases} Y^{\text{MAX}}(1 - \xi/\xi_{st}), & \text{si } \xi < \xi_{st} \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.12)$$

La considération du système d'équations (4.8) pour ξ et Y conduit à des réponses différentes suivant les valeurs des temps caractéristiques de mélange τ_ξ et τ_Y . Ces quantités peuvent être évaluées soit par une relation algébrique fonction de l'échelle de temps intégrale turbulente $\tau_T = k/\epsilon$, soit grâce à la résolution d'une équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen telle que celle proposée par Jones et Musong [98]. Force est de constater que la fermeture d'une telle équation de transport souffre toujours d'incertitudes. Des travaux supplémentaires restent nécessaires dans cette direction, et plus particulièrement lorsque des scalaires réactifs sont mis en jeu comme dans les travaux de Mura et Borghi [99], Mura et al. [100] ou encore de Swaminathan et Bray [101]. La "construction" de la trajectoire ayant été discutée, nous devons maintenant nous attacher à estimer la position des sauts.

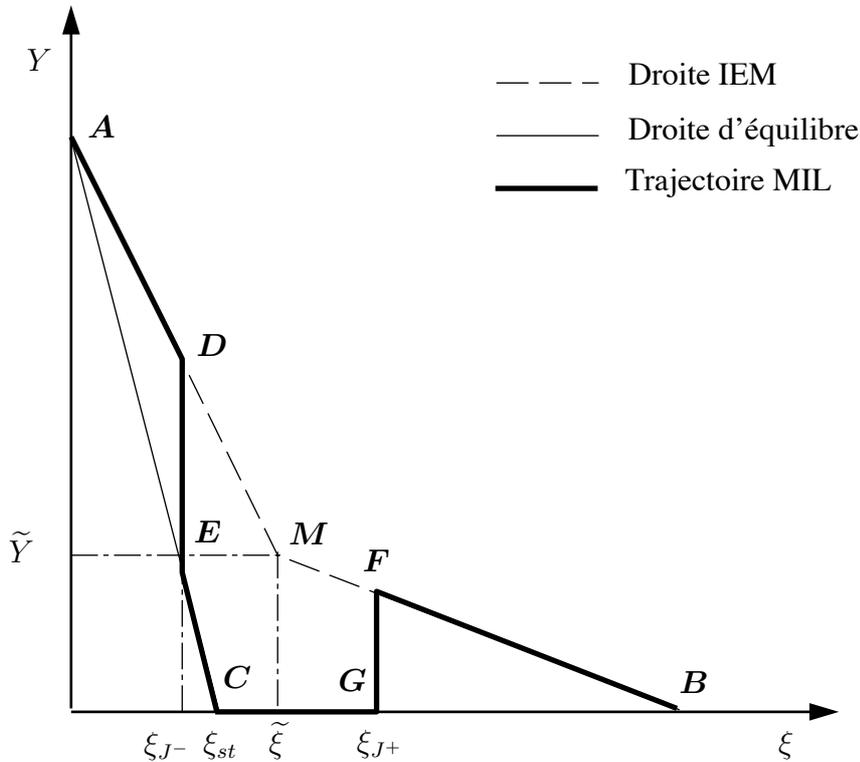


FIGURE 4.3: Représentation conventionnelle du modèle MIL (lignes épaisses) dans le plan des phases (Z, Y). Les droites d'équilibre (lignes pleines), et les droites de mélange (lignes pointillées) sont aussi représentées.

4.2.3 Echelles temporelles caractéristiques et domaine d'inflammation

La nature du couplage existant entre la turbulence et la cinétique chimique dépend des valeurs respectives de l'échelle de temps chimique fonction de la composition, $\tau_{chem}(\xi)$, et de l'échelle de temps de mélange τ . Si les temps caractéristiques de la turbulence, τ , caractérisés par la PDF des temps de mélange, \tilde{P}_τ , sont tous plus petits que τ_{chem} , le mélange ne peut pas

brûler et le taux moyen de réaction $\tilde{\omega}_Y$ est nul. Au contraire, s'ils sont tous plus grands que τ_{chem} , la limite d'équilibre chimique est retrouvée. Les valeurs de ξ pour lesquelles τ et τ_{chem} deviennent du même ordre, délimitent le domaine d'allumage. Si une telle égalité est rencontrée quand ξ varie, cela correspond à l'allumage des particules qui viennent soit de $\xi=0$, pour les mélanges pauvres, soit de $\xi=1$, pour les mélanges riches. Les valeurs correspondantes sont notées respectivement ξ_{J-} et ξ_{J+} . Par conséquent, le fort couplage entre le mélange et la réaction chimique est représenté par le biais des positions des sauts ξ_{J-} et ξ_{J+} , déterminés par la comparaison directe entre l'échelle de temps de mélange, τ , et celle de temps chimique τ_{chem} . La forme de la PDF \tilde{P}_τ doit donc être décrite. En fait, si l'on considère un écoulement turbulent réactif, τ est compris entre l'échelle de temps de diffusion τ_β , aussi appelée échelle de temps de Batchelor, et l'échelle de temps intégral du champ scalaire ξ . Malheureusement, la forme de la fonction de répartition elle-même est loin d'être totalement établie par la théorie ou l'expérimentation. Une telle fonction de densité de probabilité de l'échelle de temps a été envisagée par exemple par Bray et al.[102] ou par Obounou et al.[103]. Dans notre étude, la forme simple donnée par $\tilde{P}_\tau(\tau^*) = \delta(\tau - \tau^*)$, avec τ la valeur moyenne de l'échelle de temps de mélange, est utilisée par simple commodité. Premièrement, cela évite une intégration supplémentaire suivant la dimension du temps de mélange et, comme on l'a souligné auparavant, une telle intégration souffrira sans aucun doute des incertitudes concernant la forme possible de la PDF du temps de mélange. De plus, si l'on compare le temps de mélange au temps chimique de manière à déterminer la position des sauts, on peut voir que, compte tenu des formes obtenues pour les fonctions $\tau_{chem}(\xi)$, les variations possibles du temps de mélange ($\Delta\tau$) conduisent à des variations nettement plus petites de la position des sauts ($\Delta\xi_J$), voir Fig.4.4. Ceci est dû à l'évolution rapide du temps chimique (cohérente avec l'hypothèse de chimie brusque en fonction de ξ) en temps que fonction de la fraction de mélange autour des limites d'inflammabilité. Par conséquent, la forme de \tilde{P}_τ n'est pas aussi critique que nous aurions pu l'imaginer pour déterminer la position des sauts, même si le taux de mélange (moyen) doit être évalué quant à lui avec une précision suffisante étant donné qu'il pilote l'évolution des particules fluides. Ici, par soucis de simplicité, τ est supposé proportionnel à l'échelle de temps intégrale turbulente :

$$\tau = C_{MIX} \frac{k}{\epsilon}, \quad \text{avec } C_{MIX} = 0,5. \quad (4.13)$$

D'autres possibilités consistant à dériver une équation de transport pour le taux de dissipation scalaire moyen ont été proposées par ailleurs [104]-[110].

En ce qui concerne le temps d'allumage chimique, une estimation simple peut être obtenue à partir d'une loi d'Arrhénius globale, $\omega_Y(\xi, T_0)$, avec T_0 la température du mélange frais, puisque $\tau_{chem}(\xi) \propto 1/\omega_Y(\xi, T_0)$. Une telle approximation a déjà été utilisée avec succès par Gonzalez et Borghi [39]. Néanmoins, il est bien connu que les schémas cinétiques globaux simples ne donnent des résultats satisfaisants que pour des conditions proches de la stoechiométrie. En fait, la détermination du délai d'inflammation tirera bénéfice d'une description détaillée comme

effectuée par Obounou et al.[103], ou bien plus récemment par Mura et Demoulin [111]. En suivant ces lignes directrices, l'échelle de temps chimique τ_{chem} est évaluée pour différentes valeurs de la fraction de mélange comme suit :

$$1/\tau_{chem} = \int_{Y^b(\xi)}^{Y^u(\xi)} \omega_Y(\xi, Y, T_0) dY / [Y^b(\xi) - Y^u(\xi)]^2, \quad (4.14)$$

où la fraction massique d'oxygène a été considérée pour caractériser l'avancement de la réaction chimique de telle manière que Y correspond à la fraction massique d'oxygène dans le membre de droite de l'Equation (4.14). Les index u et b correspondent respectivement aux gaz frais et brûlés. L'évaluation du terme de droite est réalisée en utilisant la librairie de cinétique complexe *CHEMKIN2*.

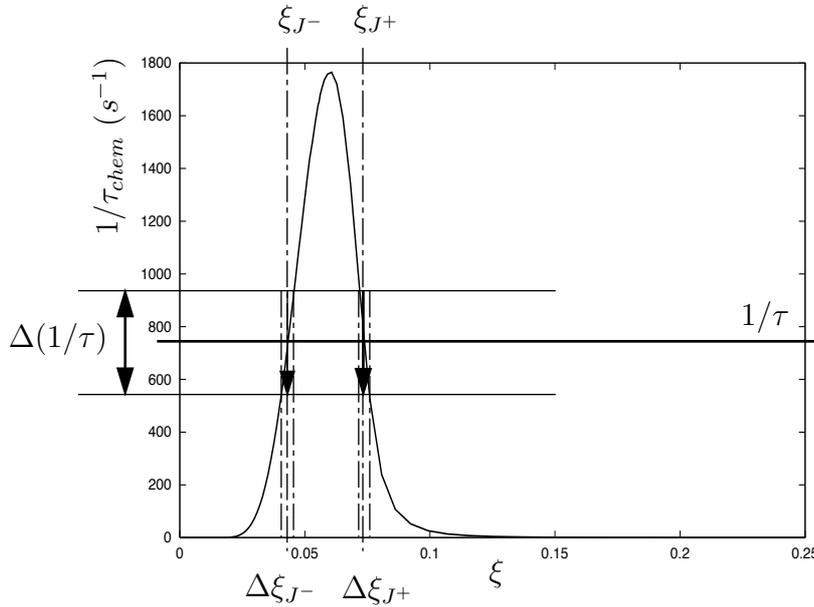


FIGURE 4.4: Inverse de l'échelle de temps chimique $1/\tau_{chem}$ défini par l'équation (4.14) pour un mélange CH₄-air à pression ambiante et $T_0 = 300K$ et positions des sauts pour une valeur donnée de la fréquence de mélange $1/\tau$.

4.2.4 Taux de production moyens

Finalement, le taux de consommation moyen pour chaque espèce s'écrit :

$$\overline{\rho\omega_{Y_i}} = \bar{\rho} \int_0^1 \tilde{P}(\xi) \omega_{Y_i}(\tau, \xi) d\xi. \quad (4.15)$$

En considérant une espèce réactive donnée Y , le système d'équations (4.8) conduit à l'expression suivante pour le taux de production chimique instantané :

$$\omega_Y = \frac{1}{\tau} \left[\frac{dY}{d\xi} (\tilde{\xi} - \xi) - (\tilde{Y} - Y) \right]. \quad (4.16)$$

Ce taux de production chimique dépend de la portion de la trajectoire considérée : mélange sur les segments AD et BF, saut DE et FG, et équilibre chimique sur les segments EC et GC.

- **Mélange** : sur les segments AD et BF, la particule fluide ne réagit pas, le taux de réaction donné par les équations (4.11) et (4.16) est, par conséquent, nul.
- **Saut** : la contribution des sauts DE et FG au taux de production doit aussi être considérée. A partir de l'équation (4.16), on peut écrire :

$$w_Y^{J-}(\tau, \xi) = \frac{(\tilde{\xi} - \xi_{J-})}{\tau} \left[\frac{\delta Y_{J-}}{\delta \xi_{J-}} - \frac{(\tilde{Y} - Y_{J-})}{(\tilde{\xi} - \xi_{J-})} \right], \quad (4.17)$$

$$w_Y^{J+}(\tau, \xi) = \frac{(\tilde{\xi} - \xi_{J+})}{\tau} \left[\frac{\delta Y_{J+}}{\delta \xi_{J+}} - \frac{(\tilde{Y} - Y_{J+})}{(\tilde{\xi} - \xi_{J+})} \right]. \quad (4.18)$$

- **Equilibre** : En utilisant l'hypothèse d'une étape unique, on peut montrer que :
 - sur le segment EC, l'équation (4.12) implique que $dY/d\xi = -Y^{\text{MAX}}/\xi_{st}$,

$$\omega_Y^{\text{EQU}}(\tau, \xi) = -\frac{\tilde{Y} \xi_{st} - Y^{\text{MAX}}(\xi_{st} - \tilde{\xi})}{\tau \xi_{st}}, \quad (4.19)$$

- sur le segment GC, étant donné que $Y = 0$ et $dY/d\xi = 0$,

$$\omega_Y^{\text{EQU}}(\tau, \xi) = -\frac{\tilde{Y}}{\tau}, \quad (4.20)$$

Le taux de réaction est la somme de trois contributions :

$$\omega_Y(\tau, \xi) = \underbrace{\omega_Y^{\text{MIX}}(\tau, \xi)}_{\text{Mélange}} + \underbrace{\omega_Y^{J-}(\tau, \xi) + \omega_Y^{J+}(\tau, \xi)}_{\text{Sauts } J- \text{ et } J+} + \underbrace{\omega_Y^{\text{EQU}}(\tau, \xi)}_{\text{Equilibre}} \quad (4.21)$$

Le taux moyen de production est donné par l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_Y &= \overline{\rho \omega_Y} / \bar{\rho} = \int_0^1 \tilde{P}(\xi) \omega_Y(\tau, \xi) d\xi \\ &= \tilde{\omega}_Y^{\text{MIX}} + \tilde{\omega}_Y^{J+} + \tilde{\omega}_Y^{J-} + \tilde{\omega}_Y^{\text{EQU}}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

La contribution $\tilde{\omega}_Y^{\text{EQU}}$ est obtenue par intégration de celles décrites au-dessus par les équations (4.19) et (4.20). Le taux de réaction $\tilde{\omega}_Y^{\text{MIX}}$ est nul.

4.2.5 Validation préliminaire de l'hypothèse de chimie brusque

Il est possible de mener une étude préliminaire visant à vérifier la validité de l'hypothèse de réaction "raide" sur laquelle repose le modèle MIL en considérant les résultats obtenus par la résolution directe de l'équation de transport de la PDF jointe du vecteur de composition scalaire, ϕ , associé aux fractions massiques d'espèces, Y_i , et à l'enthalpie. En utilisant la fermeture

IEM-LMSE pour les termes de micromélange d'après l'équation (4.8) et en considérant un réacteur homogène non parfaitement mélangé PaSR (Partially Stirred Reactor), représenté Fig.4.5, l'équation de transport de la PDF jointe notée $\tilde{P}(\boldsymbol{\psi}; t)$ ¹ s'écrit [112, 113, 114] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(\boldsymbol{\psi}; t) &= -\frac{\tilde{P}(\boldsymbol{\psi}; t) - \tilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi})}{\tau_{res}} - \sum_{i=1}^{i=N} \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left(\omega_{\phi_i}(\boldsymbol{\psi}) \tilde{P}(\boldsymbol{\psi}; t) \right) \\ &- \sum_{i=1}^{i=N} \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left(\frac{\tilde{\phi}_i - \psi_i}{\tau_{\phi_i}} \tilde{P}(\boldsymbol{\psi}; t) \right). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Dans l'équation précédente, N est la dimension du vecteur de composition, τ_{res} est l'échelle de temps de résidence dans le réacteur (appelé aussi âge du mélange) et τ_{ϕ_i} est l'échelle de temps de mélange associée au scalaire ϕ_i . Dans le cas présent, nous considérons que sa valeur est identique pour toutes les espèces, soit $\tau_{\phi_i} = \tau$. Enfin, $\tilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi})$ représente la PDF jointe à l'entrée du réacteur, et si on injecte dans le réacteur un courant d'oxydant et un courant de combustible, cette PDF est donnée par :

$$\tilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi}) = Y \delta(\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\phi}(\xi=0)) + (1 - Y) \delta(\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\phi}(\xi=1)) \quad (4.24)$$

où Y est la fraction massique entrante pour le courant d'oxydant, $\boldsymbol{\phi}(\xi=0)$ et $\boldsymbol{\phi}(\xi=1)$ représentent la composition dans le courant d'oxydant et le courant de combustible respectivement.

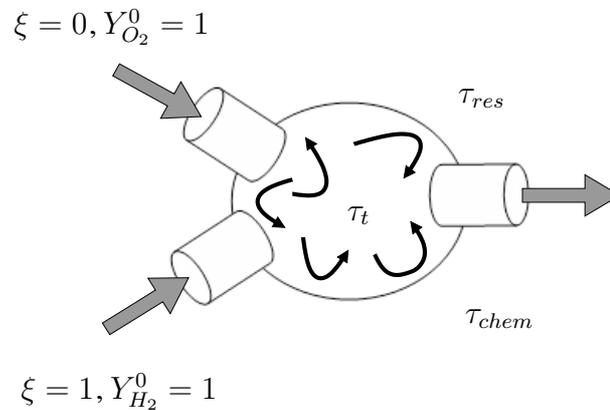


FIGURE 4.5: Schéma d'un réacteur homogène imparfaitement mélangé ou PaSR (Partially Stirred Reactor).

Des mélanges constitués des mêmes espèces chimiques, à savoir hydrogène, oxygène et azote ont aussi été étudiés récemment par Ren et Pope [115] dans le but d'évaluer les performances des modèles de micro-mélange dans un PaSR. Les résultats reportés Fig.4.6 correspondent aux solutions quasi-stationnaires de l'équation (4.23) obtenues avec deux descriptions chimiques distinctes dans les mêmes conditions que celles étudiées par Ren et Pope, c'est-à-dire

1. Le vecteur $\boldsymbol{\psi}$ représente l'espace échantillon associé au vecteur de composition aléatoire $\boldsymbol{\phi}$.

un rapport temps de séjour / temps de mélange τ/τ_{res} de l'ordre de 0,35. Les résultats obtenus montrent la pertinence de l'hypothèse de chimie brusque. En effet, même si elle n'est pas parfaitement représentative du comportement chimique complexe du système réactif, les résultats reportés Fig.4.6 confirment que le squelette MIL peut fournir une approximation satisfaisante de l'équation de transport modélisée pour la PDF scalaire donnée par l'équation (4.23).

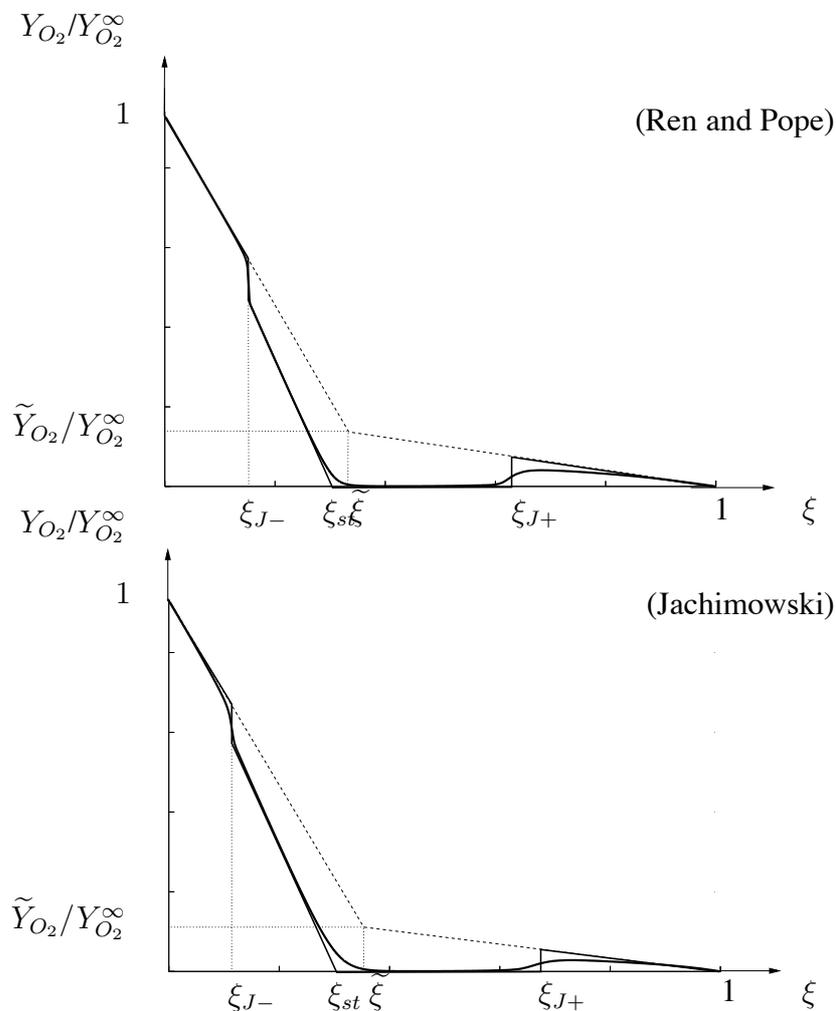


FIGURE 4.6: Hypothèse de chimie brusque : comparaison entre le squelette MIL et des simulations de réacteur homogène imparfaitement mélangé menées avec les schémas cinétiques détaillés utilisés par Ren et Pope [115] (en haut) et le schéma détaillé de Jachimowski [83] (en bas). Le modèle de mélange employé ici est le modèle IEM.

4.2.6 Etude préliminaire de la réponse du modèle

Nous obtenons les premiers résultats par le biais d'une "maquette"² permettant le calcul du taux de consommation moyen d'oxygène en fonction des paramètres locaux et en particulier : i) le progrès de la réaction chimique obtenu par le biais de \tilde{Y}_{O_2} , ii) la moyenne et iii) la variance de la fraction de mélange (qui définissent la PDF présumée locale de richesse) et enfin iv) le temps turbulent intégral τ_T qui indique l'intensité locale du mélange.

La table de délais chimiques ayant été préalablement chargée, le taux de consommation n'est fonction que de ces quatre paramètres, i.e., $\tilde{\omega}_{Y_{O_2}} = \tilde{\omega}_{Y_{O_2}}(\tilde{Y}_{O_2}; \tilde{\xi}; \tilde{\xi}''^2, \tau_T)$. On a étudié de façon paramétrique l'évolution de $\tilde{\omega}_{Y_{O_2}}$ en fonction de $\tilde{\xi}$ (les autres paramètres étant maintenus constants), $\tilde{\xi}''^2$ (les autres paramètres étant maintenus constants), et enfin de τ_T (les autres paramètres étant maintenus constants). Les valeurs constantes retenues dans chacun des cas ont été respectivement fixées à 0.1 pour la valeur moyenne de la fraction de mélange, à 0.005 pour sa variance, à 0.8 pour Y_{O_2} et enfin à 0.02 pour le temps turbulent. Elles sont représentatives d'une situation proche de la stoechiométrie pour une couche de mélange entre de l'oxygène pur et de l'hydrogène pur. Les résultats correspondants sont reportés Fig.4.7.

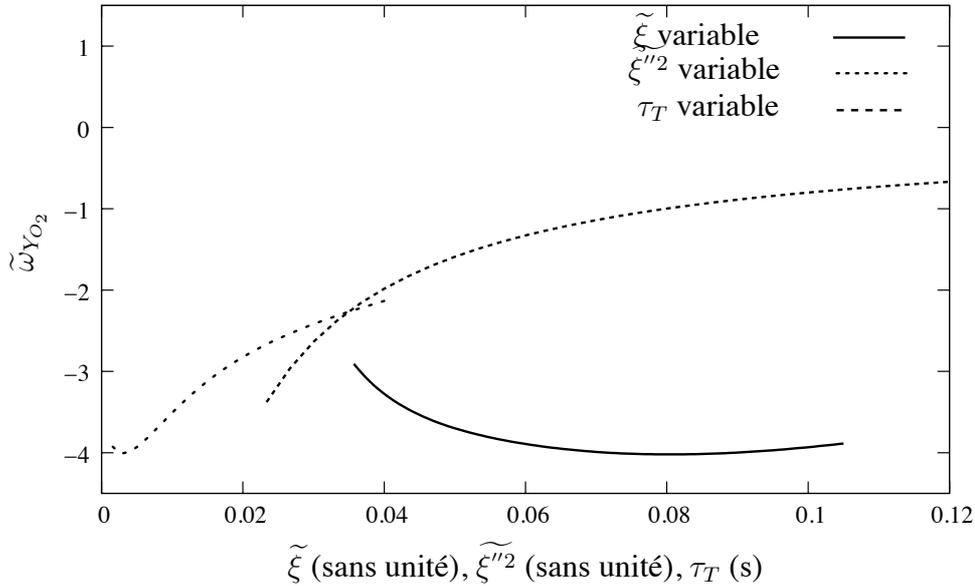


FIGURE 4.7: Evolution du taux moyen de consommation MIL pour la fraction massique moyenne en oxygène en $[Y_{O_2}].s^{-1}$

Comme attendu, la norme du taux de production change notablement lorsque la moyenne ou la variance de ξ varient. En effet, la position des sauts étant fixée par le rapport des échelles de

2. La maquette nous permet d'étudier la réponse du modèle indépendamment du code de calcul dans lequel il est implanté. On fournit au modèle les grandeurs habituellement calculées par le code, telles que \tilde{Y}_{O_2} , $\tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}''^2$ et τ_T et on récupère en sortie le taux de consommation $\tilde{\omega}_{Y_{O_2}}$ qui serait fourni au code de calcul.

temps de mélange et de temps chimique, le taux de consommation moyen augmente lorsque la probabilité conditionnelle d'être entre ξ_{J-} et ξ_{J+} augmente (équation 4.22). En ce qui concerne la sensibilité à τ_T , il faut tout d'abord noter qu'en toute rigueur, la variance de ξ et le temps turbulent n'évoluent pas de manière indépendante, puisque τ_T pilote le taux de dissipation des fluctuations scalaires, généralement représenté par un modèle de relaxation linéaire de la forme $\epsilon_\xi = C_\xi \cdot \widetilde{\xi}''^2 / \tau_T$. Néanmoins, si on effectue l'analyse en faisant abstraction de cette dépendance, les courbes reportées Fig.4.7 montrent que le taux de production diminue à mesure que τ_T augmente étant donné que les contributions $\widetilde{\omega}_Y^{\text{DIFF}}$ et $\widetilde{\omega}_Y^{\text{PREM}}$, proportionnelles à $1/\tau_T$, diminuent. Au contraire, lorsque le temps turbulent diminue, le taux de consommation augmente (équation 4.16) ; les valeurs les plus faibles de $1/\tau_T$ représentées ici ne sont pas suffisamment petites pour qu'une compétition chimie turbulence (i.e. une diminution de l'étendue du domaine $[\xi_{J-}; \xi_{J+}]$) puisse apparaître.

4.2.7 Conclusions

Finale­ment, à partir d'une représentation physique simple, le modèle de Borghi et Gonzalez [39] fournit un moyen efficace pour représenter la compétition entre le mélange des réactifs et la cinétique chimique pour des usages pratiques. Il permet de prendre en compte une cinétique détaillée par le biais d'une tabulation des délais chimiques en fonction de la composition (et, bien entendu, de la pression et de la température). La comparaison d'une échelle de mélange avec le délai chimique permet de représenter tout type de régime de combustion, depuis l'extinction globale de la flamme jusqu'à l'équilibre chimique, en passant par une chimie finie. De plus, l'évaluation du taux de réaction moyen prend en compte les éventuelles inhomogénéités du mélange.

Cependant, ce modèle ne permet pas de décrire les couplages qui existent pour les écoulements à haute vitesse entre les effets de compressibilité, le micro-mélange et les réactions chimiques exothermiques. Dans certaines situations, on observe en effet que le transfert de chaleur qui accompagne le phénomène de dissipation visqueuse joue un rôle de premier plan dans le développement des réactions chimiques et participe de la stabilisation des flammes. Ces spécificités de la combustion supersonique sont reliées à la conversion de l'énergie cinétique en chaleur et elles doivent donc être incluses dans un modèle de combustion supersonique. Nous allons maintenant présenter une extension du modèle MIL pour ce type de situation.

4.3 Extension du modèle à la combustion supersonique

Plusieurs études ont été menées afin d'inclure des effets propres à la combustion dans des écoulements rapides. La nature supersonique de l'écoulement nécessite l'adaptation à la fois du modèle de transport et du modèle de combustion. Dans ce qui suit, nous nous intéressons plus

particulièrement au second point.

4.3.1 Précédents travaux

Plusieurs modélisations reposant sur des modèles de flammelettes ont été proposées par le passé. Zheng et Bray [116] ont étendu aux écoulements supersoniques un modèle de flammelettes mis au point pour les écoulements subsoniques [117, 118]. Sabel’Nikov et al. [119] ont considéré eux une extension du modèle classique de flammelettes étirées qui tient compte des fluctuations du champ de vitesse. L’idée de base du modèle de flammelettes est de découpler en partie la chimie et la mécanique des fluides en considérant la flamme turbulente instantanée comme un ensemble de flammes laminares étirées. Pour les flammes subsoniques, les variations temporelles de pression sont négligées par rapport au dégagement de chaleur, les coefficients de diffusion de masse et de chaleur sont identiques pour toutes les espèces, et les pertes par rayonnement sont négligées. Sous ces hypothèses, les trois équations :

$$N \frac{d^2 Y_k}{d\xi^2} = \dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (4.25)$$

$$h = \sum_k h_k(T) Y_k = A_1 \xi + B_1, \quad \xi \in [0, 1], \quad (4.26)$$

$$p = \rho R T \sum_k Y_k / W_k, \quad (4.27)$$

où $h_k(T)$ est l’enthalpie massique de l’espèce k , N est le taux de dissipation scalaire $N=D(\nabla Z)^2$, ξ est la fraction de mélange, Y_k la fraction massique de l’espèce k , W_k la masse moléculaire, et $\dot{\omega}_k$ le taux de production molaire. La deuxième équation n’est correcte que si l’équation pour la fraction de mélange et celle pour l’enthalpie statique sont identiques. Le système d’équations précédent peut être résolu pour différentes valeurs imposées de N et une librairie de flammelettes est ainsi créée. Si la PDF jointe de ξ et N est connue, on peut alors accéder aux différents moments de la température et des compositions :

$$\langle T^n \rangle = \int \int T^n(\xi, N) P(\xi, N) d\xi dN, \quad (4.28)$$

$$\langle Y_k^m \rangle = \int \int Y_k^m(\xi, N) P(\xi, N) d\xi dN. \quad (4.29)$$

L’extension d’une telle formulation doit prendre en compte l’influence de l’énergie cinétique qui devient du même ordre de grandeur que le dégagement de chaleur et nécessite alors de considérer l’enthalpie totale en lieu et place de l’enthalpie statique :

$$h_t = \sum_k h_k(T) Y_k + u^2/2 = A_2 \xi + B_2, \quad (4.30)$$

ce qui a pour conséquence que la température et la composition sont fonctions de trois paramètres N , ξ et la vitesse u : $T=T(\xi, N, u)$ et $Y_k=Y_k(\xi, N, u)$, et que la PDF jointe de ces trois

paramètres doit être connue. En se basant sur une hypothèse de séparation d'échelles, on peut considérer que N est principalement dépendant des petites échelles de la turbulence, alors que ξ et u sont plus reliés aux grandes échelles de la turbulence. Alors, $P(\xi, N, u)$ s'écrit :

$$P(\xi, N, u) = P(\xi, u).P(N), \quad (4.31)$$

avec : $P(\xi, u) = P(\xi).P(u|\xi)$. La façon la plus simple d'estimer $P(\xi, u)$ est d'employer une fermeture dite CMC (Conditional Moment Closure) du premier ordre, ce qui correspond à négliger les fluctuations autour de la valeur moyenne conditionnelle, soit : $P(u|\xi) = \delta(u|\xi - \langle u|\xi \rangle)$. En première approximation, une relation linéaire est utilisée pour relier la valeur instantanée de u et celle de ξ :

$$\langle u|\xi \rangle = a_1 + b_1\xi, \quad (4.32)$$

Cette relation n'est théoriquement valable que dans le cas d'écoulement à pression constante et pour des nombres de Schmidt unitaires et, de plus, il faut que les conditions limites de l'écoulement soient identiques pour u et ξ , comme par exemple dans le cas de jets coaxiaux libres. Les coefficients a_1 et b_1 peuvent ainsi être considérés comme constants pour une différence de vitesse entre les deux entrées constante $\Delta u = u_{Fuel} - u_{Oxydant}$, alors : $a_1 = u_{Oxydant}$ et $b_1 = \Delta u / \Delta \xi$.

Cette dépendance linéaire simplifie énormément la librairie de flammelettes à trois paramètres en une librairie à deux paramètres, mais avec une dépendance supplémentaire à la vitesse. En résumé, la partie $\Delta T|_{\Delta u}(\xi)$ qui correspond à l'augmentation de température sous l'effet de la conversion de l'énergie cinétique en chaleur peut être exprimée comme :

$$\Delta T|_{\Delta u}(\xi) = \frac{(\Delta u)^2}{2C_p} \xi(1 - \xi). \quad (4.33)$$

On peut déduire facilement de cette expression que l'accroissement maximum de température dû aux effets dynamiques de compressibilité sera observé pour $\xi = 0.5$, et augmente avec la différence initiale de vitesses. Une autre conclusion du travail de Sabel'Nikov [119] est l'augmentation de la valeur maximale critique du taux de dissipation au delà de laquelle l'extinction de la flamme est observée.

Cette modélisation a été employée par Morgenthaler et al. [23, 120] pour des situations où le temps de mélange est plus grand que le temps chimique. Les résultats montrent que de par son influence sur la température locale de l'écoulement, l'utilisation d'une bibliothèque de flammelettes compressibles pourrait conduire à des modifications dans le déroulement de la cinétique et donc à des résultats très différents sur les concentrations relatives à certaines espèces chimiques, et que le mélange hydrogène-air ne semble pas être le meilleur candidat pour une étude de ce type : du fait de la faible masse moléculaire de l'hydrogène, la valeur de la composition stoechiométrique est faible et l'augmentation de température correspondante suivant (4.33) pas assez représentative pour ces jets.

De plus, lorsque les conditions de température et de pression sont telles que l'échelle de temps caractéristique du mélange devient plus petite ou comparable à l'échelle de temps caractéristique de la réaction chimique, un modèle de type flammelettes tel que celui présenté ici n'est plus applicable dès l'origine du calcul. Un modèle à PDF semble plus approprié au calcul de la combustion supersonique dans ces conditions. Eifler et Kollman [121] ont proposé d'utiliser une équation de transport pour la fonction densité de probabilité pour simuler la combustion dans un jet supersonique. Cependant, les méthodes basées sur le calcul de la PDF restent très coûteuses en ressources informatiques. Nous allons maintenant présenter une extension du modèle MIL pour la prise en compte des effets de combustion supersonique, mieux adaptée aux calculs de configurations industrielles.

4.3.2 Principe de la modélisation proposée

La conversion possible de l'énergie cinétique en énergie thermique qui est susceptible de se produire dans la zone de cisaillement entre deux courants présentant certaines conditions de température (statique) et de vitesse peut conduire -nous avons vu dans les chapitres précédents la forte sensibilité des termes sources chimiques à la température - à une auto-inflammation de poches partiellement prémélangées. Le principe de la modélisation proposée est de rendre compte de la compétition entre l'auto-allumage et le temps de séjour par la comparaison directe entre deux échelles temporelles caractéristiques de chaque phénomène. Nous avons ainsi à déterminer, d'une part, le délai d'autoinflammation dans les conditions locales de température de pression et de composition (influencées par l'échauffement) et, d'autre part, un temps caractéristique de la convection qu'on appelle plus classiquement temps de séjour ou bien encore l'âge de la particule. En réalité, il aurait fallu intégrer l'évolution correspondante depuis le courant d'oxydant pur (resp. réducteur pur) jusqu'à la composition locale ξ considérée. Pour des raisons de simplicité évidentes, nous n'avons pas réalisé cette intégration.

Nous allons maintenant établir que ces deux échelles temporelles peuvent être des fonctions de ξ . Dans l'esprit du modèle MIL précédemment exposé, nous introduisons de nouveaux sauts dans l'espace des compositions ξ_{igni}^- et ξ_{igni}^+ , qui délimitent un domaine d'auto-inflammation.

4.3.3 Echelle de temps chimique

L'hypothèse d'une énergie cinétique négligeable par rapport à l'enthalpie statique ne peut plus être employée pour des écoulements à grand nombre de Mach. En fait, Bray et al.[122] et Luo et Bray [123] suggèrent que, si on peut établir une relation linéaire entre l'enthalpie totale et la fraction de mélange, les méthodes de PDF présumée pour un scalaire conservatif utilisées dans des cas à faible nombre de Mach peuvent être étendues à la description de la combustion dans des écoulements rapides en considérant h_t , ce qui nous permet, dans notre effort de modélisation de tenir compte du terme $u^2/2$ et de son influence sur le délai d'auto-allumage

via le changement de conditions thermodynamiques. Une telle relation n'est valable que si les nombres de Lewis et de Prandtl sont unitaires et si les effets introduits par les variations temporelles de pression restent négligeables. En effet, l'équation instantanée pour l'enthalpie totale s'écrit, en l'absence de forces extérieures et en supposant $Le = 1$ pour toutes les espèces :

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(h + \frac{u_i^2}{2} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \alpha \frac{\partial h}{\partial x_i} + \rho u_j \tau_{ij} \right) + \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (4.34)$$

où α est la diffusivité thermique. En négligeant $\partial p / \partial t$, en considérant des nombres de Lewis et de Prandtl unitaires, et une direction privilégiée pour l'écoulement, c'est-à-dire $u \gg v, w$, l'approximation suivante :

$$\rho u_i \tau_{ij} = \mu \left(u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu u_j \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \approx \rho \alpha \frac{\partial u^2 / 2}{\partial x_i} \quad (4.35)$$

nous permet d'obtenir l'équation d'advection diffusion pour $h_t = h + u^2/2$. En utilisant ensuite le modèle d'Interaction par Echange avec la Moyenne, on obtient finalement :

$$\rho \frac{dh_t}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial h_t}{\partial x_i} \right) \approx \frac{1}{\tau} (\tilde{h}_t - h_t) \quad (4.36)$$

Les équations Lagrangiennes pour ξ et h_t sont donc semblables et on peut ainsi envisager une relation linéaire entre ces deux variables. Des résultats de DNS [123] sont reportés Fig.4.8 et confortent la validité d'une telle relation entre h_t et ξ .

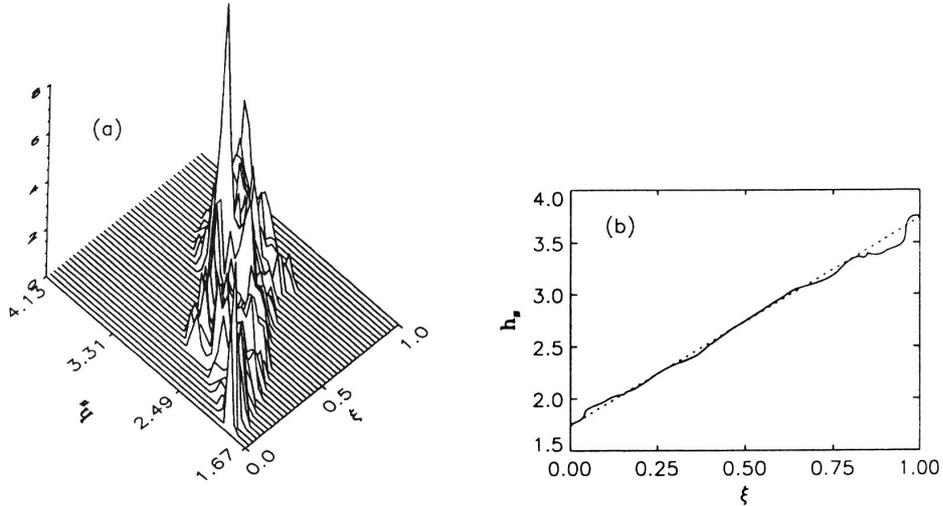


FIGURE 4.8: PDF jointe de l'enthalpie totale et de la fraction de mélange obtenue par DNS dans le cas d'une couche de mélange turbulente réactive supersonique présentant un nombre de Mach égal à 2,4 [123].

Nous considérons alors, pour un système à deux entrées, l'une étant l'oxydant pur ($\xi = 0$) et l'autre le réducteur pur ($\xi = 1$), les relations suivantes :

$$h_t = h_t(\xi) = \frac{\xi}{\tilde{\xi}}(\tilde{h}_t - h_{t_0}) + h_{t_0} \quad \text{si } \xi \in]0; \tilde{\xi}] \quad (4.37)$$

$$= \frac{1 - \xi}{1 - \tilde{\xi}}(\tilde{h}_t - h_{t_1}) + h_{t_1} \quad \text{si } \xi \in [\tilde{\xi}; 1[\quad (4.38)$$

On notera qu'en $\tilde{\xi} = 0$ et $\tilde{\xi} = 1$, la fonction n'est pas définie, mais ces deux cas limites se traitent facilement. En effet, si $\tilde{\xi} = 0$, nous sommes dans le courant d'oxydant pur, donc nous prendrons simplement l'enthalpie totale du courant d'oxydant pur. De même en $\tilde{\xi} = 1$, nous sommes dans le courant de réducteur pur et nous prendrons l'enthalpie totale du courant de réducteur pur.

De plus il faut remarquer que l'échauffement visqueux qui nous intéresse se situe dans la couche de mélange, donc pour des valeurs de $\tilde{\xi}$ différentes de 0 et 1. Ces relations nous permettent de construire Fig.4.9 l'enthalpie dans l'espace des compositions autour de la moyenne locale, en tenant compte d'éventuelles pertes de chaleur au niveau des parois.

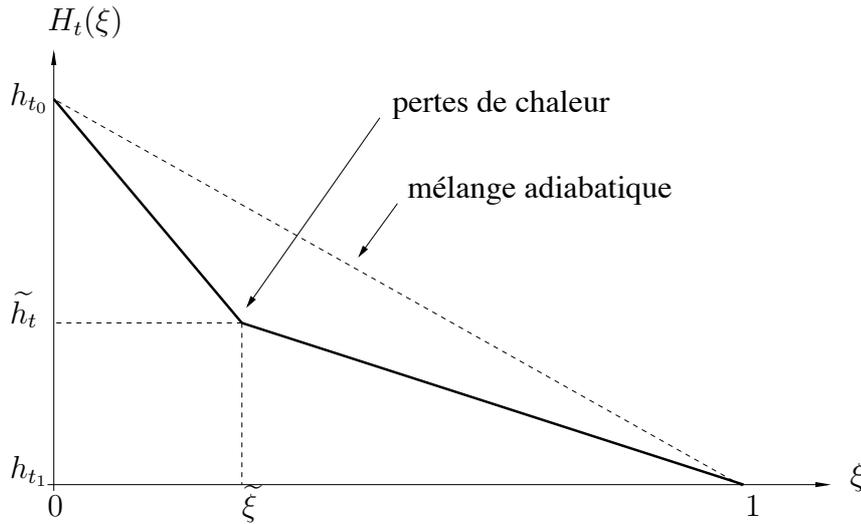


FIGURE 4.9: Trajectoires considérées pour l'enthalpie totale dans l'espace des compositions.

Un nouveau calcul de la température peut être envisagé et il devrait présenter des zones d'échauffement visqueux par comparaison avec la température statique calculée quant à elle à partir de l'enthalpie statique. En supposant tout d'abord que la pression est la pression moyenne du milieu considéré : $p = \bar{p}$, puis en supposant que l'hypothèse de Morkovin est vérifiée, c'est-à-dire qu'on peut négliger l'énergie des fluctuations devant l'énergie du mouvement moyen, alors la température statique peut être reliée à ξ de la façon suivante :

$$T_0 = \frac{h_t(\xi) - \tilde{u}_\alpha \cdot \tilde{u}_\alpha / 2}{\overline{C_p}} \quad (4.39)$$

avec $\overline{C_p}$ constant. Une fois la température statique obtenue, nous pouvons obtenir de la table de délais d'auto-allumage $\tau_{ign} = \tau_{ign}(p, T_0, \xi)$ avec $p = \overline{p}$ et $T_0 = T_0(\xi)$ obtenue par le biais de la relation (4.39). Nous avons donc obtenu une échelle de temps caractéristique de la chimie avec une dépendance additionnelle à la vitesse. Attachons-nous maintenant à établir une échelle de temps caractéristique de la convection.

4.3.4 Echelle temporelle caractéristique de la convection

Si l'on suit dans son mouvement une particule de fluide provenant d'un courant d'oxydant pur, i.e. $\xi=0$, celle-ci se déplace sur la droite de mélange pour atteindre la composition ξ au bout d'un temps noté τ_{conv} que nous allons évaluer.

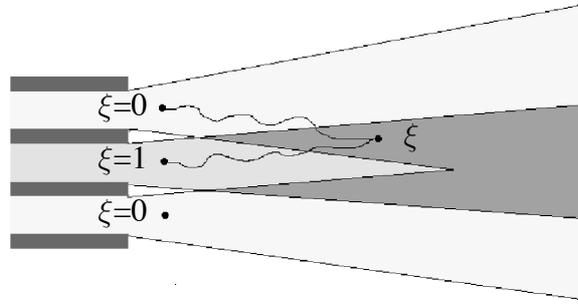


FIGURE 4.10: Illustration dans l'espace physique des trajectoires de particules fluides issues des courants d'oxydant ou de combustible pur vers la composition ξ .

En faisant l'hypothèse que la particule, durant tout ce trajet Lagrangien que nous reconstruisons, "voit" toujours la même composition moyenne, $\tilde{\xi}$, et se mélange avec elle en conservant un temps caractéristique d'interaction constant et égal à τ , les équations IEM pour la fraction de mélange ξ et la fraction massique Y s'écrivent :

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau} \quad \text{et} \quad \frac{dY}{dt} = \frac{\tilde{Y} - Y}{\tau}, \quad (4.40)$$

En considérant que τ est proportionnel au temps turbulent τ_T , on peut écrire :

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{C_\xi(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_T} \quad \text{ou encore} \quad \frac{dt}{\tau_T} = \frac{d\xi}{C_\xi(\tilde{\xi} - \xi)}. \quad (4.41)$$

Maintenant si l'on intègre cette équation entre $\xi^* = 0$ et $\xi^* = \xi$ pour le terme de droite, on obtiendra l'intégrale du terme de gauche entre 0 et τ_{conv} comme suit :

$$\int_0^{\tau_{conv}} \frac{dt}{\tau_T} = \frac{1}{C_\xi} \int_0^\xi \frac{d\xi^*}{\tilde{\xi} - \xi^*} \quad (4.42)$$

Deux cas doivent être distingués : le cas où $\xi < \tilde{\xi}$ et le cas où $\xi > \tilde{\xi}$, pour lequel on considère une particule de fluide issue du courant de réducteur pur, i.e. $\xi=1$, pour définir le temps de convection. On obtient alors :

$$\tau_{conv} = \frac{\tau_T}{C_\xi} \ln \left(1 + \frac{\xi}{\tilde{\xi} - \xi} \right) \quad \text{si } \xi < \tilde{\xi} \quad (4.43)$$

$$= \frac{\tau_T}{C_\xi} \ln \left(\frac{\tilde{\xi} - 1}{\tilde{\xi} - \xi} \right) \quad \text{si } \xi > \tilde{\xi} \quad (4.44)$$

Les deux expressions ne sont pas définies pour $\xi = \tilde{\xi}$ et la limite quand ξ tend vers $\tilde{\xi}$ est $+\infty$. Physiquement, cela traduirait le fait que l'on ne peut pas exactement obtenir la composition moyenne dans le milieu considéré et qu'il faudrait attendre un temps infini pour atteindre cette composition. Ce cas limite sera traité en considérant qu'on a $\tau_{conv}(\tilde{\xi}) = \tau_{conv}(0.999\tilde{\xi})$

4.3.5 Conclusion

La comparaison des deux échelles temporelles précédemment introduites, τ_{conv} et τ_{ign} nous permet donc de définir un domaine d'auto-inflammation indépendant de celui défini lors de la représentation de la compétition chimie-mélange. Le taux de réaction correspondant à l'auto-allumage est exprimé de la même manière que nous l'avons exposé plus haut, au paragraphe 4.2.4, comme le produit de la probabilité d'être situé au niveau du saut, le flux dans l'espace des compositions, et la hauteur du saut. Cette extension du modèle MIL ne demande que peu de calculs supplémentaires, et conserve tous les avantages de la proposition initiale.

4.4 Extension aux flammes turbulentes diphasiques

L'approche Lagrangienne que nous venons de présenter pour des flammes non prémélangées gazeuses peut être aisément étendue à la représentation des flammes turbulentes diphasiques dans des sprays suffisamment dilués. Cette extension a été proposée par Demoulin et Borghi [124], et nous allons brièvement en rappeler les principales caractéristiques. Il est en effet possible de dresser un parallèle entre la situation gazeuse et la situation d'un spray dilué : si l'on considère des gouttes d'oxygène portées par un milieu gazeux riche en combustible, le processus de micromélange entre le combustible pur et l'oxygène gazeux évaporé à la surface des gouttes peut encore être représenté dans l'espace des phases par des trajectoires Lagrangiennes le long de droites de mélange (IEM par exemple). Le formalisme précédemment introduit basé sur la connaissance de la fraction massique d'un des réactifs et de la fraction de mélange peut encore être employé. Néanmoins, quelques différences doivent être prises en compte. Premièrement, la composition à la surface des gouttes, ξ_S , est fixée par l'équilibre liquide-vapeur et peut être différente de la composition pure $\xi=0$ (cas d'un oxydant en évaporation) ou $\xi=1$ (cas d'un

combustible en évaporation). Cela a des conséquences sur la forme de la PDF de la fraction de mélange et son estimation. Deuxièmement, les équations instantanées pour la fraction massique de l'espèce s'évaporant et pour la fraction de mélange incluent désormais un terme source de masse dû à l'évaporation. Contrairement aux modèles les plus simples qui considèrent que l'espèce en évaporation est immédiatement diluée dans le gaz environnant, nous nous attachons à représenter le fait que sa concentration dans la phase gazeuse est susceptible d'être plus grande au voisinage des gouttes que loin de celles-ci et qu'alors, le milieu peut présenter localement des inhomogénéités de température et de richesse qui auront une conséquence directe sur le taux de réaction chimique. L'équation moyenne pour la variance de la fraction de mélange fait apparaître naturellement ces termes supplémentaires et nous présentons ici un modèle de fermeture pour ceux-ci introduit dans la référence [125]. Enfin, l'influence des gouttes sur l'échelle de temps de mélange utilisée dans notre approche doit être discutée.

4.4.1 PDF de la fraction de mélange

D'une manière générale, le changement d'état Liquide-Vapeur pour une température et une pression données est décrit par la formule de Clapeyron :

$$\frac{dp}{dT} = \frac{L}{T\Delta V}, \quad (4.45)$$

où L est la chaleur latente équivalente à la variation d'enthalpie de changement d'état à pression constante, et ΔV le changement de volume correspondant. Si un liquide peut exister dans un volume donné avec sa vapeur comme seul gaz, ce n'est en général pas le cas d'un liquide s'évaporant dans une atmosphère composée de plusieurs gaz. Lorsque l'on est en présence d'un mélange de gaz, la composition à l'interface ξ_S est celle d'un mélange fixé par les pressions partielles des différentes espèces en présence. Ainsi, la fraction massique du gaz correspondant à l'espèce liquide est inférieure à l'unité, et par conséquent, la valeur de la fraction de mélange à la surface n'est pas forcément $\xi_S=0$ ou $\xi_S=1$. Néanmoins, le cas $\xi_S=0$ (ou $\xi_S=1$) est possible : il correspond par exemple à l'évaporation d'oxygène (de combustible) dans un environnement dépourvu de combustible (d'oxygène).

La valeur ξ_S est ainsi définie seulement à la surface des gouttes et représente l'état initial des particules avant d'être mélangées. Cette valeur est propre à chaque goutte et représente aussi la nouvelle borne inférieure, dans le cas de gouttes d'oxygène, du domaine permis de composition. Quelques formes de PDF attendues dans le cas de spray sont reportées Fig.4.11. A un instant t et une position x donnés, selon que le taux d'évaporation est grand devant le temps de diffusion moléculaire, ou petit devant celui-ci, on aura respectivement de fortes fluctuations (cas de gauche) ou bien une PDF autour de la valeur moyenne $\tilde{\xi}$ (cas de droite).

Nous continuons de présumer la forme de la PDF de la fraction de mélange par une fonction Beta $\beta(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}''^2)$. La fraction de mélange est un scalaire passif qui n'est pas modifié par la réaction

chimique, mais l'évaporation d'une espèce réactive, que ce soit l'oxydant ou le combustible, va modifier sa valeur. La forme de la PDF doit naturellement intégrer les spécificités du cas diphasique par le biais des termes supplémentaires dûs à l'évaporation qui apparaissent dans les équations :

Equation d'évolution de la masse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \rho \omega_v, \quad (4.46)$$

Equation d'évolution de la fraction massique de gaz pour l'espèce se vaporisant.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i Y = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i} \right) + \rho \omega_v^Y, \quad (4.47)$$

Equation d'évolution de la fraction de mélange.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \xi + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i \xi = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) + \rho \omega_v^\xi. \quad (4.48)$$

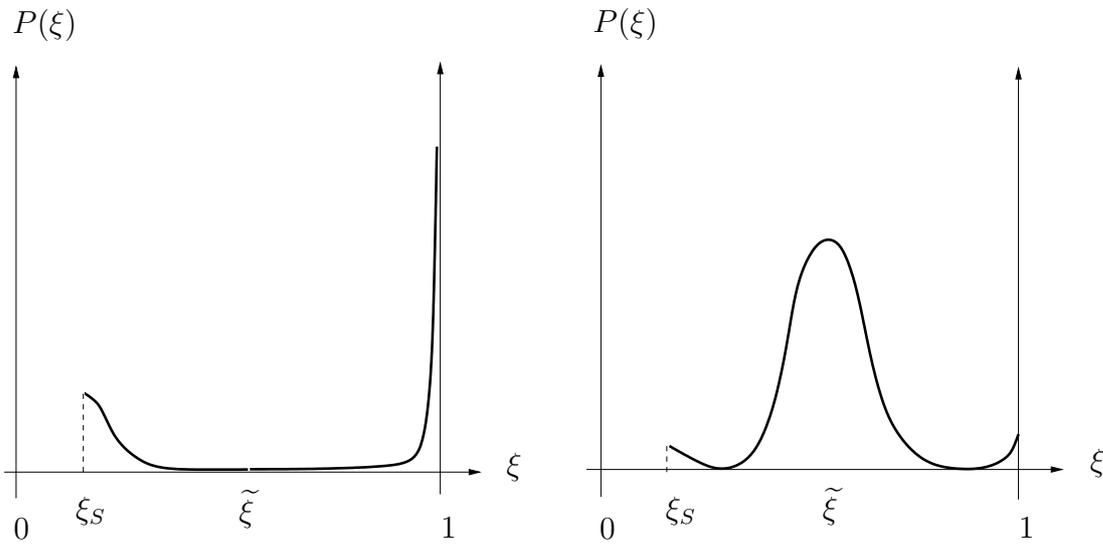


FIGURE 4.11: Formes attendues pour la PDF de la fraction de mélange pour un spray LOx-GH2.

Notons que dans tous les cas, le transfert de masse de la phase liquide vers la phase gazeuse se traduit par un terme source toujours positif pour l'espèce réactive : $\omega_v = \omega_v^Y = \omega_{vap}$. En revanche, selon que l'espèce évaporante est le réducteur ou l'oxydant, la fraction de mélange évolue différemment : si $Y = Y_{O_2}$, alors $\omega_v^Y = -\omega_v^\xi$, et inversement, si $Y = Y_F$, alors $\omega_v^Y = \omega_v^\xi$. C'est la raison pour laquelle nous adoptons les notations générales avant de simplifier les équations grâce aux relations précédentes. Les équations moyennées finales permettant de calculer

la fonction Beta s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\xi}}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}} - \overline{\rho} \frac{\nu_T}{Sc_{\tilde{\xi}}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) = \underbrace{\overline{\rho \tilde{\omega}_v^\xi}}_{T_1}, \quad (4.49)$$

et pour la variance de la fraction de mélange $\tilde{\xi}''^2$ (l'établissement de cette équation de transport est reporté en annexe) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\xi}''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}''^2} - \overline{\rho} \frac{\nu_T}{Sc_{\tilde{\xi}''^2}} \frac{\partial \tilde{\xi}''^2}{\partial x_i} \right) &= 2 \overline{\rho} \frac{\nu_T}{Sc_{\tilde{\xi}}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \frac{\tilde{\xi}''^2}{\tau_\xi} \\ &+ 2 \left(\underbrace{\overline{\rho \xi \omega_v^\xi}}_{T_2} - \overline{\rho \tilde{\xi} \omega_v^\xi} \right) - \underbrace{\overline{\rho \xi^2 \omega_v^\xi}}_{T_3} + \tilde{\xi}^2 \overline{\rho \omega_v^\xi} \end{aligned} \quad (4.50)$$

si le liquide évaporant est du réducteur, et :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\xi}''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}''^2} - \overline{\rho} \frac{\nu_T}{Sc_{\tilde{\xi}''^2}} \frac{\partial \tilde{\xi}''^2}{\partial x_i} \right) &= 2 \overline{\rho} \frac{\nu_T}{Sc_{\tilde{\xi}}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \frac{\tilde{\xi}''^2}{\tau_\xi} \\ &- 2 \left(\overline{\rho \xi \omega_v^\xi} - \overline{\rho \tilde{\xi} \omega_v^\xi} \right) - \overline{\rho \xi^2 \omega_v^\xi} + \tilde{\xi}^2 \overline{\rho \omega_v^\xi} \end{aligned} \quad (4.51)$$

si le liquide évaporant est de l'oxydant. La résolution des équations (4.49-4.52) permet donc de décrire l'effet de l'évaporation sur l'homogénéité du mélange. Elle nécessite cependant la fermeture des termes supplémentaires T_1 , T_2 , et T_3 .

4.4.2 Fermeture Lagrangienne

Le premier terme à modéliser est le terme source de masse évaporée. Ce terme d'échange de masse peut être facilement calculé pour une goutte isolée dans un environnement gazeux supposé infini, comme le suppose la théorie de Spalding [126]. Le calcul de ce terme est aisé et est rappelé en annexe. Nous arrivons au résultat suivant :

$$\dot{\omega}_{vap} = 2\pi \rho_s r_s Sh_c D \ln(1 + B_m) \quad \text{avec} \quad B_m = \frac{Y_{O_2}|_s - Y_{O_2}|_\infty}{1 - Y_{O_2}|_s} \quad (4.52)$$

où ρ_s est la densité à la surface de la goutte, r_s est le rayon de la goutte, et B_m le paramètre de transfert de Spalding. Cependant, il nous faut ajouter à cette description les interactions dues aux autres gouttes présentes dans le spray car, même si elles sont éloignées les unes des autres, nous ne pouvons plus parler de milieu infini. Une solution approchée à ce problème consiste à utiliser, à la place des valeurs correspondant aux conditions limites à l'infini, les

valeurs moyennes dans la cellule de calcul où se situe la goutte. Ceci est quasiment vrai si le milieu est assez dilué, c'est-à-dire si l'espacement des gouttes est très supérieur à leur rayon. En effet, la valeur de la concentration en vapeur diminue quand on s'éloigne de la surface dans la direction radiale. Ainsi, suffisamment loin de la goutte, la concentration de vapeur du milieu n'est presque plus influencée par la surface de la goutte. Nous pouvons garder la même méthode si le milieu n'est pas trop dilué en associant aux gouttes un certain volume, appelé sphère d'influence. Ainsi, à la frontière de ce volume, la composition est celle du gaz environnant, $\tilde{\xi}$, et à la surface de la goutte, la composition est fixée par les conditions d'équilibre liquide/vapeur. Dans ce cas, le fait de prendre les valeurs moyennes à la place des valeurs à l'infini correspond à un modèle de fermeture visant à prendre en compte une partie des effets dûs à l'interaction des gouttes entre elles. En effet, le taux de vaporisation croît avec l'augmentation de l'écart entre la fraction massique de vapeur à la surface et à l'infini. Aussi, puisque nous prenons la valeur moyenne, celle-ci étant plus grande que la valeur minimale possible à l'infini, cet écart diminue, entraînant une baisse du taux d'évaporation, ce qui va dans le même sens que l'effet produit par l'interaction des gouttes. Finalement, la variation de masse de chaque goutte est calculée séparément avec leur propre composition à l'interface et avec l'influence des gouttes voisines. De plus, on peut noter qu'en tout point de l'espace ne figurant pas sur l'interface liquide-gaz, le taux d'évaporation, $\dot{\omega}_{vap}$ est nul. Le terme source moyen est alors la somme de tous les petits débits de masse vaporisée \dot{m}^k provenant des particules stochastiques présentes à l'endroit considéré représenté par le volume V . Les termes T_1 , T_2 , et T_3 sont fermés grâce aux expressions suivantes [125] :

$$\overline{\rho\omega_{vap}} = \sum_{k=1}^{k=n_p} \frac{\dot{m}^k}{V} \quad (4.53)$$

$$\overline{\rho\xi\omega_{vap}} = \sum_{k=1}^{k=n_p} \frac{\xi_S^k \dot{m}^k}{V} \quad (4.54)$$

$$\overline{\rho\xi^2\omega_{vap}} = \sum_{k=1}^{k=n_p} \frac{(\xi_S^k)^2 \dot{m}^k}{V} \quad (4.55)$$

4.4.3 Temps de mélange en diphasique

Dans le cas d'une flamme LOx-GH2, la phase gazeuse du milieu diphasique est le siège de réactions chimiques de combustion des vapeurs d'oxygène et de l'hydrogène. Cette combustion se déroule dans un milieu turbulent, comportant des fluctuations de vitesse, de fraction massique et de température, susceptibles d'être affectées par la présence proche des gouttes. Lorsque la réaction est relativement rapide, comme dans le cas d'une flamme LOx/GH2, c'est le mélange turbulent qui va contrôler le taux de réaction moyen. Comme nous l'avons vu dans le cas gazeux,

l'échelle de temps de mélange est considérée proportionnelle à l'échelle de temps intégrale de la turbulence $\tau = C \cdot k / \epsilon$. La constante C est usuellement prise entre 0.5 et 1.5. Il n'est pas certain que cette hypothèse soit toujours valable dans le cas d'une flamme de diffusion dans un spray. En réalité, durant le processus de vaporisation, les gouttes créent des fluctuations de ξ avec une échelle de longueur correspondant à la distance inter-gouttes ou au diamètre du volume d'évaporation associé. Il est donc légitime de se questionner quant à la validité de la relation de proportionnalité retenue avec l'échelle de la turbulence.

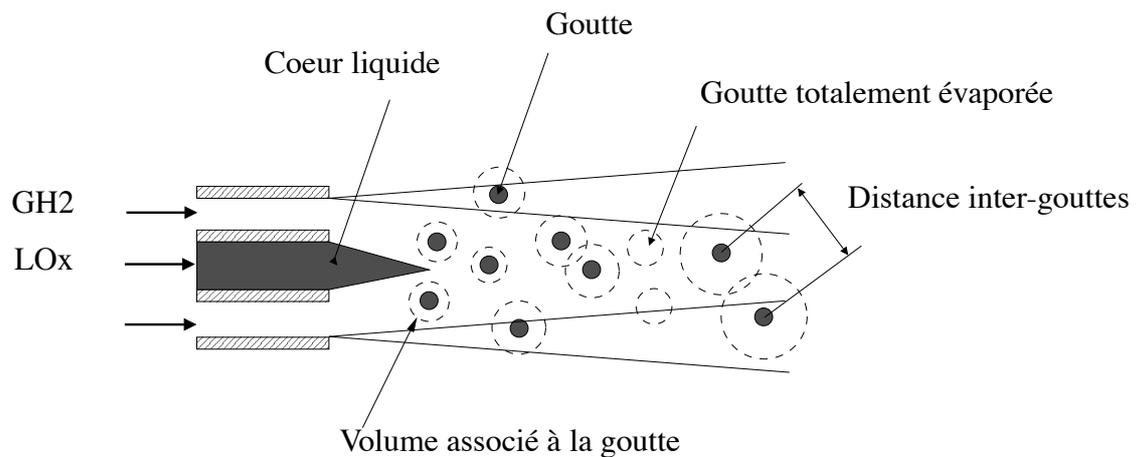


FIGURE 4.12: Représentation schématique des fluctuations de richesse locales au voisinage des gouttes dues à l'évaporation.

Pour une goutte isolée, nous pouvons définir une échelle de longueur caractéristique des fluctuations spatiales de la fraction de mélange ξ . Celle-ci est directement liée aux dimensions de la goutte et de sa sphère d'influence. Néanmoins, les fluctuations de ξ sont aussi fortement influencées par l'environnement de la goutte. Nous avons représenté quelques situations de gouttes Fig.4.12. Le premier facteur influençant les fluctuations de la fraction de mélange est la présence de gouttes au voisinage de la sphère d'influence, et éventuellement le "chevauchement" de deux zones d'influence. Une autre échelle de longueur peut être choisie comme la distance séparant deux gouttes isolées. Les fluctuations de ξ sont aussi fortement liées à la rapidité du phénomène d'évaporation et au coefficient de diffusion de l'espèce dans le gaz environnant. On peut facilement imaginer que si une grande partie des échelles de la turbulence sont plus petites que la distance inter-gouttes, alors la diffusion turbulente qui est celle au voisinage des gouttes est telle que l'évaporation des gouttes est améliorée de manière significative, ce qui modifie encore les termes de fluctuations fermés par l'approche Lagrangienne diphasique utilisée pour les termes T_2 et T_3 . Le cas limite est celui d'une goutte totalement évaporée (ou tout du moins avec un rayon tendant vers zéro) : on peut imaginer que la goutte a très peu d'influence sur la phase gazeuse et donc sur les fluctuations de vitesse du milieu environnant. Un travail de modélisation reste donc à effectuer sur ce point en identifiant l'influence de ces processus sur l'évolution du

taux de dissipation scalaire $\tilde{\xi}$ [127]. Notons tout de même qu'une partie de l'influence du spray est représentée par son action sur la turbulence et donc sur l'échelle intégrale τ_T .

4.4.4 Conclusions

La combustion diphasique pourrait *a priori* être traitée, pour des milieux peu denses en gouttes, comme la juxtaposition de flammes entourant des gouttes isolées. Néanmoins, ce régime n'est pas du tout général, et l'influence des gouttes, à la fois sur le champ de vapeur et sur le champ de turbulence participe à augmenter les fluctuations de composition. Ceci apparaît naturellement dans l'équation de la variance de la fraction de mélange qui est fermée par un traitement statistique permettant d'intégrer l'effet de la totalité du brouillard. Ainsi, la PDF de la fraction de mélange est déterminée et permet de traiter les inhomogénéités de richesse de la phase gazeuse, en tenant compte de l'influence supplémentaire de l'évaporation. La création de masse par évaporation modifie aussi la forme de la PDF qui est maintenant limitée dans l'espace des compositions par de nouvelles bornes : la composition limite de la phase porteuse gazeuse et la composition de la vapeur à l'interface liquide-vapeur. La représentation du processus de mélange moléculaire peut toujours être réalisée à l'aide des trajectoires IEM, mais la fréquence de mélange est susceptible de ne plus être seulement fonction de l'échelle de temps intégrale de la turbulence, mais aussi de paramètres géométriques intrinsèques au spray diphasique. Nous garderons à l'esprit les limitations de cette modélisation lors de la discussion des résultats de simulation numérique.

Chapitre 5

Présentation de la méthode numérique

Les méthodes de discrétisation d'ordre élevé sont souvent utilisées dans le cadre des écoulements compressibles, mais elles restent difficiles d'utilisation du fait de la nature hyperbolique des équations du mouvement et de la présence de solutions discontinues. C'est une des raisons pour lesquelles les méthodes précises au second ordre restent encore très populaires dans la majorité des applications. Une des difficultés majeures est, bien entendu, le traitement des fortes discontinuités, telles que les ondes de choc. De manière générale, les schémas numériques d'ordre plus élevé que l'unité engendrent des oscillations numériques parasites au voisinage des discontinuités. Les schémas reportés Fig.5.1 illustrent le comportement du schéma de Roe [128] qui donne une solution monotone mais où les discontinuités sont mal représentées et très étalées. Le deuxième graphe illustre la solution donnée par le schéma de Lax-Wendroff [129], plus précis mais très oscillant au voisinage de la discontinuité.

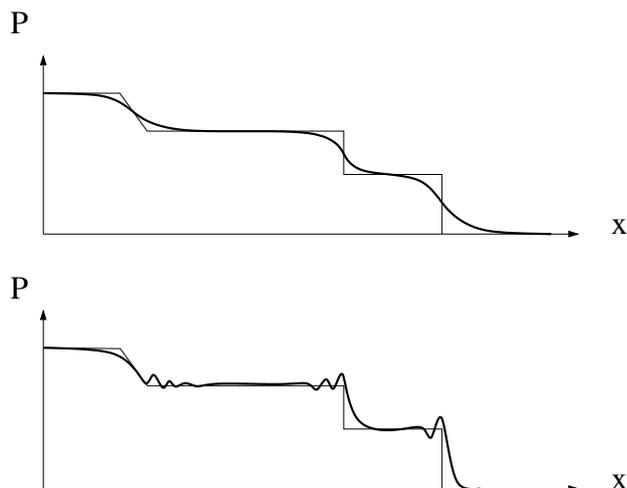


FIGURE 5.1: Représentation schématique du comportement des schémas de Roe et Lax-Wendroff au voisinage de discontinuités.

De plus, l'amplitude de ces oscillations ne décroît pas lorsque le maillage est raffiné ce qui,

pour le moins, est une nuisance importante dans les cas pratiques et conduit à l'apparition d'instabilités numériques dans les problèmes non linéaires en présence de discontinuités. Les schémas d'ordre 1 possèdent en général des propriétés de monotonie qui les rendent non oscillants (c'est toujours vrai dans le cas linéaire). Cependant, l'ordre 1 n'est pas suffisant pour effectuer une simulation de bonne qualité avec un maillage de taille raisonnable. Le développement de schémas d'ordre plus élevé possédant néanmoins un comportement non oscillant dans le calcul des discontinuités a été initié dans les années 1970, en particulier par Van Leer [130] avec les schémas "MUSCL" pour "Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws".

Un tel schéma est implanté dans le code de calcul N3SNatur [131] dont nous avons disposé pour nos simulations numériques. Le problème de Riemann étant le problème central, il est notre point de départ pour la présentation de la méthode numérique retenue dans N3SNatur. Dans la seconde moitié de ce chapitre, nous nous attachons à la description d'une méthode de réadaptation de maillage *a posteriori* développée par Dolejsi [132, 133]. Nous verrons comment cette méthode d'adaptation de maillage anisotropique permet de gagner en précision de calcul tout en conservant les ressources informatiques.

5.1 Présentation du problème de Riemann

Le problème de Riemann est central dans la construction des méthodes numériques adaptées à la résolution d'écoulements compressibles avec chocs. Avant de l'aborder, nous allons rappeler quelques notions utiles à la compréhension.

5.1.1 Notions élémentaires pour la simulation des écoulements compressibles

De manière générale, dans un écoulement compressible, nous rencontrons trois grands types d'ondes : des ondes simples, des ondes de choc, et des discontinuités de contact, les deux dernières étant des discontinuités à travers lesquelles les variables caractéristiques de l'écoulement présentent des sauts. On notera $[u]$ le saut d'une fonction u à travers une discontinuité. On peut caractériser les solutions faibles en utilisant le théorème suivant :

Une fonction $w(x, t)$ C^1 par morceaux et satisfaisant la condition initiale $w(x, 0) = w_0(x)$ est solution faible si et seulement si :

- w est solution classique dans les domaines où elle est de classe C^1 .
- w satisfait les relations de saut dites de Rankine-Hugoniot [134] : $[f(w)] = s[w]$ à travers les discontinuités, si s est la vitesse de la discontinuité.

Définition : On appellera une k -caractéristique les courbes définies par $dx/dt = \lambda^k(w)$ (ici, $k \in 1, 2, 3$: les 2-caractéristiques représentent les trajectoires des particules fluide).

Une onde de choc est une courbe dans l'espace (x, t) (en 1D) à travers laquelle toutes les variables sont discontinues, et subissent donc un saut qui obéit aux relations de saut de Rankine-Hugoniot. Si $w \in \mathbb{R}^m$, et que l'on fixe, par exemple, l'état à gauche, w_l , ceci nous donne un système de m équations pour $m + 1$ inconnues : les m composantes de l'état de droite et s la vitesse de la discontinuité. Le problème de déterminer l'ensemble des états à droite w_r qui peuvent être connectés à w_l par un choc admet donc m familles de solutions à un paramètre s_k . De plus, pour chaque famille de solutions, les inégalités suivantes dites **conditions de choc de Lax** [135] ou inégalités d'entropie :

$$\lambda_k(w_r) < s_k < \lambda_k(w_l),$$

doivent être vérifiées au travers d'un choc qui relie les états w_l et w_r . Une solution qui vérifie ces deux relations est alors appelé un **k -choc**. Les conditions de choc de Lax reviennent à dire qu'un choc admissible provient nécessairement de la rencontre de deux k -caractéristiques, et donc que c'est une compression. En effet, les chocs de détente, qui ne sont pas interdits par les relations de Rankine-Hugoniot, sont physiquement inadmissibles car ils induiraient une diminution d'entropie. Les conditions de choc interdisent donc ce genre de solution.

5.1.2 Le problème de Riemann

Le problème de Riemann est le problème aux valeurs initiales défini par les équations d'Euler dans le cas unidimensionnel, non visqueux :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = 0, \quad (5.1)$$

avec $w = (\rho, \rho u, \rho E)^T \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ le vecteur des variables conservées et $f(w) = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho E u + p u)^T$ la fonction flux. Ce système doit être complété par la donnée initiale suivante :

$$w(x, 0) = \begin{cases} w_l & x < 0 \\ w_r & x > 0 \end{cases}, \quad (5.2)$$

La matrice Jacobienne $A(w)$ associée au système possède trois valeurs propres réelles et distinctes $\lambda^1(w), \lambda^2(w), \lambda^3(w)$ et est diagonalisable (on dit que le système est strictement **hyperbolique**). A possède donc trois vecteurs propres à droite $r^1(w), r^2(w), r^3(w)$ (vecteurs colonnes) qui forment une base de \mathbb{R}^3 , et de même trois vecteurs propres à gauche $l^1(w), l^2(w), l^3(w)$ (vecteurs lignes). Les valeurs propres sont données par :

$$\lambda^1 = u - c, \lambda^2 = u, \lambda^3 = u + c,$$

avec c la vitesse du son définie par :

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}|_s = \frac{\gamma p}{\rho} = (\gamma - 1)(H - u^2/2).$$

Notons que ces valeurs propres, qui représentent **les vitesses de transport des informations à l'intérieur de l'écoulement** sont respectivement la vitesse du fluide, et la vitesse du son relativement à la vitesse du fluide dans les deux directions x et $-x$. Dans un écoulement incompressible, ces deux dernières vitesses ont "disparu", puisque la vitesse du son est infinie, et donc les informations correspondantes sont instantanément propagées à travers tout l'écoulement (ce qui explique notamment les difficultés que posent les approches compressibles explicites pour ce type d'écoulement). Lax a démontré le résultat suivant dans le cas général où $w \in \mathbb{R}^m$:

La solution du problème de Riemann vérifiant les conditions de choc est du type $w = w(x/t)$, formée d'au plus $m + 1$ états constants, reliés par une k -détente ou un k -choc si λ_k est vraiment non-linéaire, ou par une k -discontinuité de contact si λ_k est linéairement dégénérée.

Donc, dans le cas des équations d'Euler, on a $m = 3$, et la solution du problème de Riemann doit être construite comme **composée de 4 états séparés par des ondes**. Il faut donc commencer par identifier le type de chacune de ces ondes, puis calculer les états intermédiaires : le deuxième champ caractéristique est linéairement dégénéré, donc la 2-onde est toujours une discontinuité de contact. Nous restons donc avec 4 possibilités différentes représentées Fig.5.2 :

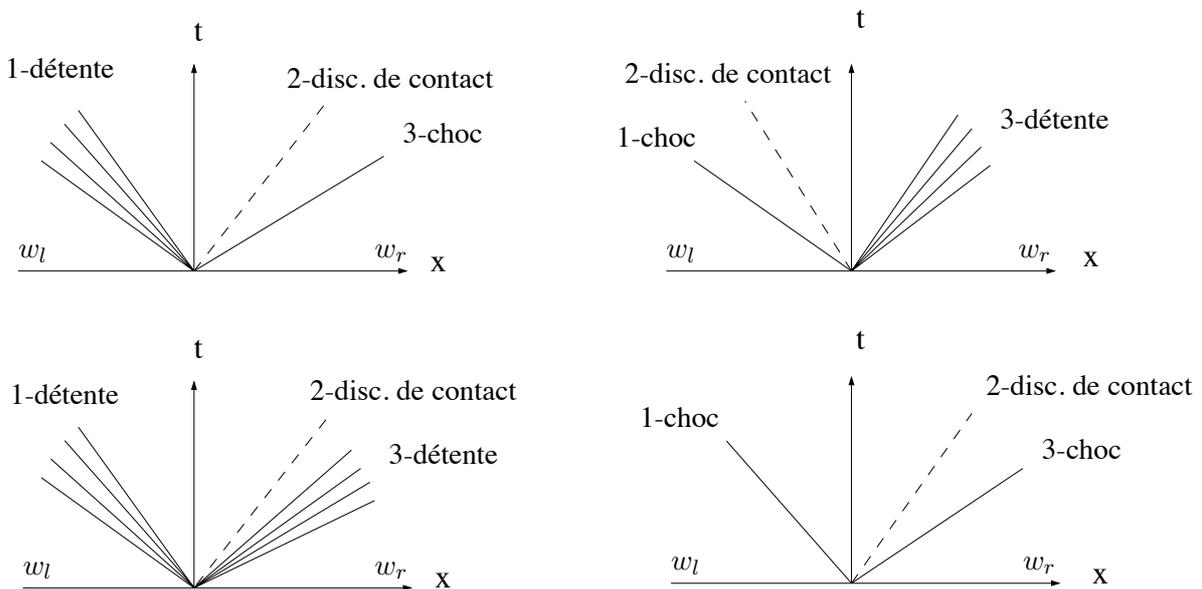


FIGURE 5.2: Les 4 configurations possibles de la solution de problème de Riemann : la 2-onde est toujours une discontinuité de contact.

Puisqu'à travers la discontinuité de contact, la pression et la vitesse sont continues, les états de part et d'autre diffèrent seulement par **un saut de masse volumique** et toutes les valeurs de ce saut sont admissibles. Dans tous les cas, l'étape suivante la détermination du type de solution consiste à calculer la pression, p , qui s'établit entre les deux ondes : ceci induit la résolution

d'une équation non linéaire en p , obtenue par identification des équations des courbes de 1-onde et de 3-onde à leur intersection (remarque : la discontinuité de contact n'est visible que sur le graphe d'évolution de la masse volumique.).

On pourra trouver, par exemple dans l'ouvrage de Hirsch [136], le détail de la résolution complète du problème de Riemann en une dimension d'espace. La résolution exacte étant trop coûteuse en temps de simulation, on ne résout généralement le problème de Riemann que de façon approchée (solveur d'Osher par exemple) ou bien on résout exactement une approximation linéaire du problème. Le problème de Riemann dans le cas des systèmes linéaires présente un intérêt particulier car il forme la base par exemple du schéma de Roe, qui est l'un des schémas les plus couramment utilisés, notamment dans le code de calcul N3SNatur. Dans le cas linéaire (i.e. $A = \text{cste}$), toutes les valeurs propres de A sont constantes et donc tous les champs sont linéairement dégénérés. La solution du problème de Riemann dans \mathbb{R}^m est ainsi construite comme $m + 1$ états constants séparés par des k -discontinuités de contact qui se propagent à la vitesse λ_k . Soient w_l et w_r les états initiaux, on peut écrire la décomposition des vecteurs propres r_k de la façon suivante :

$$w_r = \sum_{k=1}^m \alpha_k r_k, \quad w_l = \sum_{k=1}^m \beta_k r_k.$$

Le saut $w_r - w_l$ s'écrit alors :

$$w_r - w_l = \sum_{k=1}^m (\beta_k - \alpha_k) r_k.$$

Ainsi, à travers la p -ième discontinuité, on a un saut $[w] = (\beta_p - \alpha_p) r_p$. Ces sauts satisfont la relation de Rankine-Hugoniot puisque $[f(w)] = A[w] = \lambda_p (\beta_p - \alpha_p) r_p = \lambda_p [w]$. La solution générale du problème de Riemann dans le cas linéaire s'écrit alors :

$$w(x, t) = w_l + \sum_{\lambda_k < x/t} (\beta_k - \alpha_k) r_k = w_r - \sum_{\lambda_k \geq x/t} (\beta_k - \alpha_k) r_k.$$

La décomposition en ondes caractéristiques laisse finalement apparaître une solution pour laquelle l'état du fluide reste constant au niveau de l'interface pendant un certain temps. Si l'on considère que l'intervalle de temps d'intégration en temps est suffisamment petit, la reconstruction du flux numérique dans l'espace discret s'appuie sur cette caractéristique essentielle. Nous allons maintenant introduire les méthodes de discrétisation et de reconstruction de flux retenues dans le code N3SNatur.

5.2 Méthode numérique utilisée dans N3SNatur

La méthode numérique utilisée par le logiciel N3SNatur repose sur une formulation mixte volumes finis / éléments finis utilisant des fonctions de flux numériques décentrées. Les principes généraux de cette méthode sont les suivants :

- la résolution se fait sur des maillages non-structurés : ceci présente le double avantage de prendre en compte des géométries complexes et de pouvoir utiliser simplement des techniques de remaillage.
- la capture des discontinuités ne nécessite aucun réglage de viscosité artificielle comme c'est le cas avec d'autres méthodes. Le schéma numérique réalise naturellement une viscosité par décentrage des flux numériques permettant la capture de solutions discontinues sans oscillations. Par l'utilisation de la méthode MUSCL, on obtient des solutions monotones d'ordre 2 en espace. Enfin, le choix d'une formulation éléments finis pour le calcul des termes diffusifs s'avère mieux adapté et plus précis dans le cas de maillages non structurés.
- la discrétisation temporelle est implicite ou explicite, le cas implicite permettant l'utilisation de grands pas de temps et s'avérant très efficace pour la recherche d'une solution stationnaire ou pour s'affranchir d'une contrainte de pas de temps liée à la raideur d'un opérateur.

5.2.1 Discrétisation spatiale : approche mixte éléments finis / volumes finis

La résolution numérique du système d'équations conservatives est basée sur une approche mixte éléments finis / volumes finis, la propriété "mixte" signifiant que chaque opérateur est traité séparément en adoptant la méthode d'évaluation qui lui est le plus appropriée. Une approche "cell-vertex", représenté Fig.5.3, est employée pour construire à partir d'un maillage non structuré (triangles ou quadrangles en 2D, tétraèdres, hexaèdres, pyramides et prismes en 3D), des cellules ou volumes de contrôle de la manière suivante : la frontière Γ_i délimitant chaque cellule de contrôle C_i est construite en joignant chaque milieu M_{ij} des arêtes entre les noeuds i et j aux centres de gravité G_k des triangles T_k partageant le sommet i .

Considérons la forme conservative du système d'équations de Navier-Stokes qui décrit l'évolution spatiale et temporelle du vecteur des variables conservatives $\vec{U}=(\rho, \rho\vec{V}, \rho E)^T$. Pour toute fonction test $\Phi \in L^2(\Omega)$, le vecteur conservatif \vec{U} doit vérifier :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \vec{U} \Phi dV}_{\text{terme temporel}} + \underbrace{\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{F}(\vec{U}) \Phi dV}_{\text{terme de convection}} = \underbrace{\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{U}) \Phi dV}_{\text{terme de diffusion}} + \underbrace{\int_{\Omega} \vec{S} \Phi dV}_{\text{termes sources}} . \quad (5.3)$$

Les termes de variation temporelle et convectifs sont traités par la formulation volume finis (la formulation éléments finis sera également utilisée pour l'extension TVD à l'ordre 2...) tandis que les termes diffusifs et les termes sources sont évalués à l'aide d'une formulation éléments finis.

A un instant donné t , la solution peut ainsi être cherchée comme une fonction constante par

morceaux, $\vec{\mathcal{U}}_h(\mathbf{x})$, sur chacun des volumes de contrôle C_i . C'est la formulation volume finis :

$$\vec{\mathcal{U}}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_C} \vec{\mathcal{U}}_i \phi_i(\mathbf{x}). \quad (5.4)$$

Les fonctions tests ϕ_i sont naturellement choisies comme des fonctions caractéristiques du volume de contrôle :

$$\begin{cases} \phi_i(\mathbf{x}) = 1 \text{ si } \mathbf{x} \in C_i, \\ \phi_i(\mathbf{x}) = 0 \text{ si } \mathbf{x} \notin C_i. \end{cases} \quad (5.5)$$

La solution peut aussi être recherchée comme une fonction linéaire par morceaux sur chacun des n_T triangles. C'est la formulation éléments finis :

$$\vec{\mathcal{V}}_h(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n_T} \vec{N}_k(\mathbf{x}) \phi'_k(\mathbf{x}), \quad (5.6)$$

où $\phi'_k(\mathbf{x})$ est la fonction caractéristique du triangle T_k et \vec{N}_k est la fonction d'interpolation sur chaque triangle T_k .

L'équivalence des deux formulations impose que la valeur constante $\vec{\mathcal{U}}_i$ de l'approximation volumes-finis $\vec{\mathcal{U}}_h$ sur le volume fini C_i autour du noeud i soit égale à la moyenne intégrée de l'approximation éléments-finis $\vec{\mathcal{V}}_h$ sur l'ensemble de portions des éléments finis intersectant C_i :

$$\int_{C_i} \vec{\mathcal{U}}_i dV = \sum_k \int_{C_i} \vec{\mathcal{V}}_h dV. \quad (5.7)$$

En utilisant le théorème de Gauss pour récrire les intégrales des flux convectifs et l'identité de Green pour exprimer les flux diffusifs, la formulation mixte peut être exprimée pour chaque volume de contrôle C_i :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{C_i} \vec{\mathcal{U}}_h dV + \int_{\Gamma_i} \vec{F}(\vec{\mathcal{U}}_h) \cdot \vec{n}_i dS}_{\text{formulation volumes-finis}} = - \underbrace{\int_{C_i} \vec{D}(\vec{\mathcal{V}}_h) \vec{\nabla} N_i dS + \int_{C_i} \vec{S}(\vec{\mathcal{V}}_h) N_i dV}_{\text{formulation éléments-finis}}. \quad (5.8)$$

L'évaluation des différents termes de flux est détaillée dans la suite.

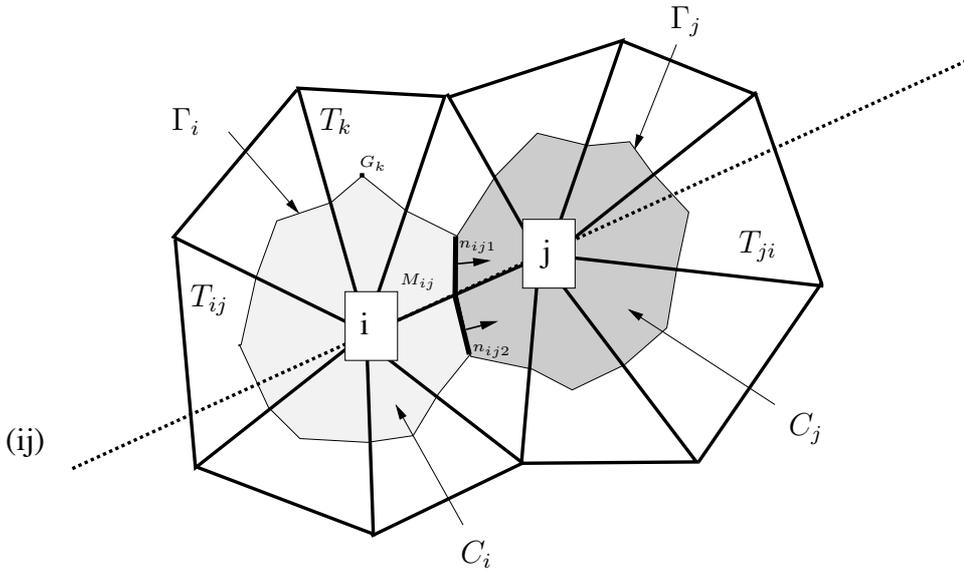


FIGURE 5.3: Schéma de construction des cellules de contrôle dans le cas 2D pour un maillage non structuré composé de triangles.

5.2.2 Calculs de flux décentrés : méthode de Godunov et schéma de Roe

Nous sommes amenés à calculer, pour chaque interface, la solution d'un problème de Riemann suivant la direction $\vec{\eta}_{ij}$ définie Fig.5.3. Dans N3SNatur, deux techniques différentes peuvent être employées. La première est celle reposant sur la méthode de Roe fondée sur la résolution exacte d'une approximation linéaire du problème de Riemann, tandis que la seconde est la méthode de Van Leer fondée sur une méthode de décomposition du flux numérique (flux splitting). Nous présentons ici la notion de décentrement utilisée dans la méthode de Roe pour l'évaluation des flux convectifs.

La notion de décentrement est liée à celle de sens de propagation de l'information, c'est-à-dire qu'on va chercher l'information dans la direction d'où elle vient. Pour construire un schéma décentré, il faut donc le faire relativement à l'orientation, positive ou négative, de chacune des courbes caractéristiques, ce qui suppose à priori une construction à partir du système sous forme non conservative :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + A(w) \cdot \frac{\partial w}{\partial x} = 0.$$

Sous cette forme, un schéma décentré "upwind" d'ordre 1 peut directement s'écrire en utilisant la décomposition $A = A^+ + A^-$:

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\delta t} + A_j^+ \frac{W_j^n - W_{j-1}^n}{\delta x} + A_j^- \frac{W_{j+1}^{n+1} - W_j^n}{\delta x} = 0. \quad (5.9)$$

Ce schéma correspond à la première tentative de Courant, Isaacson et Rees en 1952 [137]. Cependant, il n'est pas sous forme conservative dans le cas non linéaire, et donc inutilisable

pour le calcul des chocs. Plus tard, en 1959, Godunov [138] a proposé une approche, basée sur la généralisation du problème de Riemann. Cette approche très élégante est par construction conservative et incorpore la notion de décentrement de façon naturelle.

La première étape de cette méthode consiste à définir une fonction $\tilde{w}(x, t^n)$ constante par morceaux, telle que $\tilde{w}(x, t^n) = W_j^n$ dans chaque cellule $x \in]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$, soit :

$$\frac{1}{\delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{w}(x, t^n) dx = W_j^n.$$

Ceci définit une fonction discontinue sur les interfaces des cellules, donc une "séquence" de problèmes de Riemann que l'on sait résoudre, au moins tant qu'ils restent indépendants, c'est-à-dire tant qu'ils n'interagissent pas : la solution est constituée de $(p+1)$ états constants séparés par des ondes (choc, discontinuité de contact ou onde de détente, voir Figure 5.4). Si l'on définit W_j^n comme :

$$\frac{1}{\delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{w}(x, t^{n+1}) dx = W_j^{n+1},$$

c'est une simple juxtaposition des états à $t = t^{n+1}$. Cette étape est une étape de projection, que l'on peut effectuer beaucoup plus simplement.

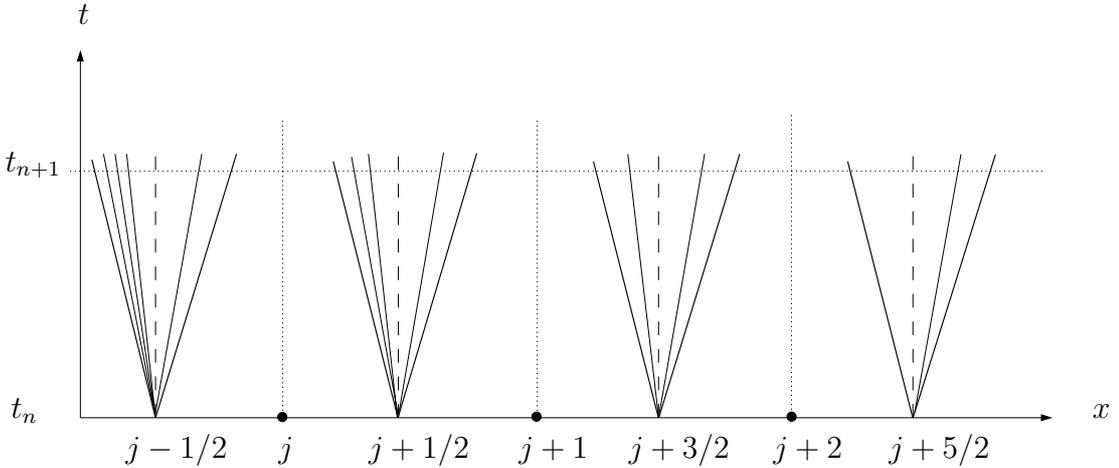


FIGURE 5.4: Juxtaposition des états de différentes cellules voisines.

Définissons $w_{j+1/2}^* = w^*(W_j^n, W_{j+1}^n)$ la solution *constante* du problème de Riemann sur l'interface $x_{j+1/2}$. L'intégration de la loi de conservation appliquée à $\tilde{w}(x, t^n)$ sur $x \in]x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$ $X[t^n, t^{n+1}]$ donne :

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{w}(x, t^{n+1}) dx = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{w}(x, t^n) dx - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\tilde{w}(x_{j+1/2}, t^n)) dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\tilde{w}(x_{j-1/2}, t^n)) dt.$$

Comme w^* est constante sur $[t^n, t^{n+1}]$, on a finalement :

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \frac{\delta t}{\delta x} (f(w_{j+1/2}^*) - f(w_{j-1/2}^*)) \quad (5.10)$$

Le flux numérique du schéma de Godunov est donc $F_{j+1/2}^G = f(w_{j+1/2}^*)$, et le schéma est évidemment sous forme conservative. Le schéma s'applique en trois étapes :

- reconstruction : définition de $\tilde{w}(x, t^n)$ à partir des W_j^n .
- résolution du problème de Riemann aux interfaces (évolution).
- calcul de W_j^{n+1} par l'Eq. (5.10) (projection).

Le terme de "projection" est justifié par le fait que l'on calcule une nouvelle valeur moyenne pour W^{n+1} dans chaque cellule, les détails de l'ancienne reconstruction sont perdus, et une nouvelle reconstruction sera effectuée à l'itération suivante.

Dans le cas linéaire (i.e. $A=cste$), on retrouve le schéma donné par l'Eq. (5.9), ce qui montre qu'il s'agit bien d'un schéma décentré upwind d'ordre 1. En effet, la solution du problème de Riemann s'écrit alors :

$$w_{j+1/2}^* = \sum_{\lambda_p > 0} \alpha_{j,p} r_p + \sum_{\lambda_p < 0} \alpha_{j+1,p} r_p,$$

et donc le flux du schéma est donné par :

$$\begin{aligned} F_{j+1/2}^G &= Aw_{j+1/2}^* = \sum_{\lambda_p > 0} \lambda_p \alpha_{j,p} r_p + \sum_{\lambda_p < 0} \lambda_p \alpha_{j+1,p} r_p \\ &= A^+ W_j^n + A^- W_{j+1}^n. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Une condition supplémentaire doit être respectée : il est nécessaire que les ondes ne franchissent pas les interfaces adjacentes, ce qui est réalisé, pour les équations d'Euler, par le biais de la condition de stabilité CFL habituelle :

$$\frac{\delta t}{\delta x} \cdot \max_j (|u_j^n| + c_j^n) \leq 1.$$

Du fait que l'on résout le problème de Riemann en sélectionnant la solution entropique, le schéma de Godunov est lui-même entropique. Il possède néanmoins l'inconvénient de nécessiter le calcul de la solution d'un problème de Riemann à chaque interface, ce qui est assez coûteux en temps de calcul (résolutions d'équations non linéaires) pour un schéma d'ordre 1. Comme on n'a besoin en réalité que de la valeur moyenne W_j^{n+1} de w sur chaque cellule, on peut envisager de simplifier cette étape en lui substituant la résolution d'un problème de Riemann approché : c'est le principe des "solveurs de Riemann approchés", catégorie à laquelle appartient notamment le schéma de Roe, tel qu'il est utilisé dans N3SNatur.

Il s'agit donc de remplacer le problème de Riemann exact par un problème approché, plus simple à résoudre (par exemple linéaire), qui doit lui aussi être autosemblable en x/t . Nous l'écrirons :

$$\frac{\partial \hat{w}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \hat{f}(\hat{w}) = 0,$$

avec la même donnée initiale, soit :

$$\hat{w}(x, t) = \begin{cases} w_l & x < 0, \\ w_r & x > 0. \end{cases} \quad (5.12)$$

On obtiendra ensuite le flux numérique du schéma à partir de la solution du problème de Riemann approché. Pour que le schéma reste consistant et conservatif, son flux numérique doit vérifier les mêmes relations intégrales que le flux exact. Nous allons construire ces relations intégrales sur un domaine $[M_1, M_2]$ autour de l'interface que nous supposons placée en $x = 0$ et un intervalle de temps $[0, \delta t]$. M_1 et M_2 doivent être telles que les deux vitesses d'onde extrêmes S_1 et S_2 soient incluses dans le domaine, Fig.5.5.

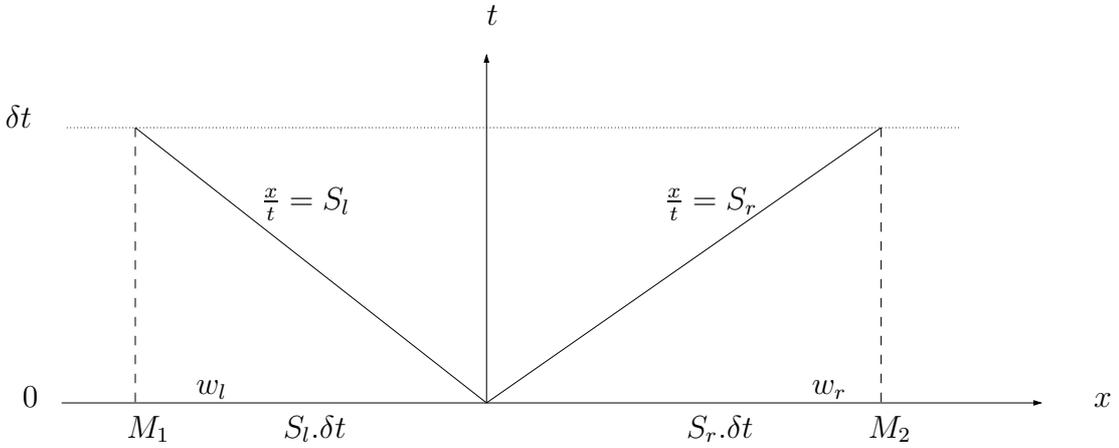


FIGURE 5.5: Construction des relations intégrales sur le domaine $M_1 M_2$.

La solution exacte vérifie :

$$\int_0^{\delta t} \int_{M_1}^0 \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(w) \right) dx dt = 0,$$

$$\int_0^{\delta t} \int_0^{M_2} \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(w) \right) dx dt = 0,$$

donc de la première équation, on obtient en notant $f(w(0, t)) = f(0)$ (et en se rappelant que c'est une constante) :

$$\int_{M_1}^0 w(x, \delta t) dx = \delta t (f(w_1) - f(0)) - w_l M_1,$$

et de même, on obtient :

$$\int_0^{M_2} w(x, \delta t) dx = -\delta t (f(w_r) - f(0)) + w_r M_2.$$

La solution approchée doit elle aussi vérifier ces relations, ce qui conduit à :

$$\int_{M_1}^0 \hat{w}(x, \delta t) dx = \delta t(\hat{f}(w_l) - \hat{f}(0)) - \hat{w}_l M_1 = \delta t(f(w_l) - f(0)) - w_l M_1,$$

d'où :

$$\hat{f}(w_l) - \hat{f}(0) = f(w_l) - f(0) \quad \text{et} \quad \hat{f}(w_r) - \hat{f}(0) = f(w_r) - f(0).$$

L'une ou l'autre de ces deux relations nous fournit le flux numérique sur l'interface $x_{j+1/2}$ du schéma basé sur le solveur de Riemann approché :

$$F_{j+1/2}^{GSA} = f(W_{j+1}^n) - \hat{f}(W_{j+1}^n) + \hat{f}(0) = f(W_j^n) - \hat{f}(W_j^n) + \hat{f}(0).$$

De plus, on en déduit la combinaison qui doit être vérifiée entre les flux f et \hat{f} :

$$\hat{f}(w_r) - \hat{f}(w_l) = f(w_r) - f(w_l).$$

Enfin, il reste à définir la fonction flux approchée \hat{f} , qui caractérise complètement le schéma. On prendra l'exemple du schéma de Roe. Le schéma de Roe est obtenu en choisissant pour solveur approché le problème localement linéarisé sur l'interface $j + 1/2$:

$$\frac{\partial \hat{w}}{\partial t} + \hat{A}(W_j^n, W_{j+1}^n) \frac{\partial \hat{w}}{\partial x} = 0, \quad (5.13)$$

\hat{A} est donc une matrice constante sur chaque interface, et on a vu dans ce cas que le problème de Riemann se résout facilement. \hat{A} est définie de telle sorte que les conditions suivantes soient vérifiées pour tout couple (U, V) :

- $\hat{A}(U, V)(V - U) = f(V) - f(U)$,
- \hat{A} est diagonalisable et a toutes ses valeurs propres réelles,
- $\hat{A}(U, V) \rightarrow f'(\bar{U})$ si $U, V \rightarrow \bar{U}$.

Remarquons que la première condition implique que si U et V sont connectés par un choc, la solution du problème de Riemann approché coïncide avec la solution exacte. La matrice de Roe pour les équations d'Euler 1D est construite en remarquant que les vecteurs w et f sont des fonctions quadratiques du vecteur $z = (z_1, z_2, z_3)^T = \sqrt{\rho}(1, u, H)^T$. En effet, on a :

$$w = \begin{pmatrix} z_1^2 \\ z_1 z_2 \\ (z_1 z_3)/\gamma + z_2^2(\gamma - 1)/2\gamma \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad f(w) = \begin{pmatrix} z_1 z_2 \\ z_1 z_3(\gamma - 1)/\gamma + z_2^2(\gamma - 1)/2\gamma \\ z_2 z_3 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

On peut donc appliquer l'identité suivante pour les fonctions quadratiques, valable pour une variation arbitraire $\delta a = a_{j+1} - a_j$, où l'on note \bar{a} la moyenne arithmétique $\bar{a} = (a_j + a_{j+1})/2$:

$$\delta(ab) = \bar{a} \cdot \delta b + \bar{b} \cdot \delta a,$$

aux variations δw et δf , ce qui donne $\delta w = \hat{B} \cdot \delta z$ et $\delta f = \hat{C} \cdot \delta z$ avec :

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 2\bar{z}_1 & 0 & 0 \\ \bar{z}_2 & \bar{z}_1 & 0 \\ \bar{z}_3/\gamma & \bar{z}_2(\gamma-1)/\gamma & \bar{z}_1/\gamma \end{pmatrix}, \text{ et } \hat{C} = \begin{pmatrix} \bar{z}_2 & \bar{z}_1 & 0 \\ \bar{z}_3(\gamma-1)/\gamma & \bar{z}_2(\gamma+1)/\gamma & \bar{z}_1(\gamma-1)/\gamma \\ 0 & \bar{z}_3 & \bar{z}_2 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

En combinant ces deux relations, on obtient la matrice de Roe $\hat{A} = \hat{C} \hat{B}^{-1}$. Le calcul complet aboutit à un résultat très remarquable : la matrice $\hat{A}_{j+1/2} = \hat{A}(W_j, W_{j+1})$ est identique au Jacobien local exprimé à partir des variables u et H si celles ci sont remplacées par une moyenne pondérée par la racine carrée du produit des masses volumiques, soit :

$$\hat{\rho}_{j+1/2} = \sqrt{\rho_j \rho_{j+1}}, \quad (5.16)$$

$$\hat{u}_{j+1/2} = \frac{u_{j+1} \sqrt{\rho_{j+1}} + u_j \sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j}}, \quad (5.17)$$

$$\hat{H}_{j+1/2} = \frac{H_{j+1} \sqrt{\rho_{j+1}} + H_j \sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j}}. \quad (5.18)$$

Ainsi, les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice de Roe sont ceux du problème de Riemann en remplaçant les variables locales par les moyennes définies ci-dessus. La vitesse du son est donnée par $\hat{c}^2 = (\gamma - 1)(\hat{H} - \hat{u}^2/2)$ et les valeurs propres sont $\hat{u} - \hat{c}$, \hat{u} , et $\hat{u} + \hat{c}$. Le flux du schéma peut encore s'écrire sous la forme équivalente :

$$F_{j+1/2}^{ROE} = \frac{1}{2}(f(W_j^n) + f(W_{j+1}^n)) - \frac{1}{2}|A_{j+1/2}|(W_{j+1}^n - W_j^n).$$

A noter que le schéma de Roe n'est pas entropique et doit donc être corrigé pour éviter la génération de "chocs de détente".

5.2.3 Fonctions de limitation : ajout d'une propriété TVD

Il existe différents choix possibles pour le calcul des gradients nodaux $(\vec{\nabla} \widetilde{W})_{ij}^C$ et $(\vec{\nabla} \widetilde{W})_{ji}^C$ auxquels on adjoint des fonctions de limitation pour garantir aux schémas des propriétés **TVD** (Total Variation Diminishing). La fonction de schéma TVD peut être définie comme suit :

Pour une fonction $u(x)$, on introduit la définition de la **variation totale** $TV(u)$:

$$TV(u) = \sup \sum_{j=1}^N |u(\xi_j) - u(\xi_{j-1})|,$$

où le *sup* est pris sur l'ensemble des subdivisions de la droite $-\infty < \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_N = \infty$. La solution exacte $w(x, t)$ de l'équation $\partial w / \partial t + \partial f(w) / \partial x = 0$ possède la propriété que sa variation totale est décroissante au cours du temps, c'est-à-dire qu'à tout instant t , on a :

$$TV(w(\cdot, t + \delta t)) \leq TV(w(\cdot, t)),$$

On dira qu'elle est à Variation Totale Décroissante. On va donc chercher à reproduire cette propriété dans la solution numérique. On définit la variation totale de la solution numérique W_j^n par :

$$TV(W_j^n) = \sum_j |W_{j+1}^n - W_j^n|.$$

et on cherche quelles sont les conditions que doit vérifier un schéma pour être TVD, c'est-à-dire pour que l'on ait $TV(W_j^{n+1}) \leq TV(W_j^n)$. Pour cela, on écrit le schéma sous forme incrémentale, c'est-à-dire sous la forme :

$$W_j^{n+1} = W_j^n - C_{j-1}(W_j^n - W_{j-1}^n) + D_j(W_{j+1}^n - W_j^n)$$

Il faut noter que la forme incrémentale n'est pas unique. On utilise alors le théorème de Harten [139] : pour que le schéma précédent soit TVD, les conditions suivantes sont suffisantes :

$$C_j \geq 0 \quad \forall j, \quad (5.19)$$

$$D_j \geq 0 \quad \forall j, \quad (5.20)$$

$$C_j + D_j \leq 1 \quad \forall j. \quad (5.21)$$

Le principe de la construction d'un schéma TVD est alors le suivant : en considérant qu'un schéma d'ordre 1 est monotone pour le calcul des discontinuités, on cherche à construire un schéma d'ordre 2 que l'on dégradera *localement* à l'ordre 1 de manière à interdire l'apparition d'oscillations. De façon équivalente, on peut partir d'un schéma d'ordre 1, auquel on ajoute une correction pour obtenir un schéma d'ordre 2, et on *limite* cette correction lorsqu'on est en présence de discontinuités. Soient donc deux schémas d'ordre l , $l \in 1, 2$, dont nous noterons le flux numérique $F_{j+1/2}^l$. Le flux du schéma TVD sera construit comme :

$$F_{j+1/2}^{TVD} = F_{j+1/2}^1 + \phi_j(F_{j+1/2}^2 - F_{j+1/2}^1).$$

La fonction ϕ est appelée le **limiteur**, elle doit être égale à 1 dans les zones régulières (de manière à retrouver le schéma d'ordre 2), tandis qu'elle vaudra 0 dans les zones où il y a des risques d'oscillations numériques. On choisit ϕ_j comme une fonction à un paramètre r_j , $\phi_j = \phi(r_j)$, r_j étant défini dans le cas $u > 0$ comme le rapport des gradients consécutifs :

$$r_j = \frac{W_j - W_{j-1}}{W_{j+1} - W_j},$$

et dans le cas $u < 0$:

$$r_j = \frac{W_{j+2} - W_{j+1}}{W_{j+1} - W_j}.$$

Le paramètre r_j est un indicateur de régularité locale de la solution. En effet, si la solution est localement régulière et en dehors des extrema, on a :

$$r_j = \frac{W_j - W_{j-1}}{W_{j+1} - W_j} = \frac{w_x - \delta x/2 w_{xx} + O(\delta x^2)}{w_x + \delta x/2 w_{xx} + O(\delta x^2)} = 1 - \delta x \frac{w_{xx}}{w_x} \Big|_j + O(\delta x^2).$$

Un schéma TVD est ainsi construit comme une pondération *a priori* non linéaire entre un schéma d'ordre 1 et un schéma d'ordre 2 . On appellera une méthode de ce type une méthode de limiteur de flux.

Les trois limiteurs les plus classiques sont :

- **Minmod** : c'est la borne inférieure du domaine. Il est défini par :

$$\phi_{mm}(r) = \minmod(1, r) = \max(0, \min(r, 1)),$$

la fonction minmod étant définie de manière générale par :

$$\minmod(a, b) = \begin{cases} 0 & \text{si } a.b \leq 0 \\ a & \text{si } |a| < |b| \text{ et } a.b > 0 \\ b & \text{si } |b| < |a| \text{ et } a.b > 0 \end{cases}$$

- **SuperBee** (voir Toro [140]) : c'est la borne supérieure du domaine, il est défini par :

$$\phi_{sb}(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)),$$

- **Van Leer** [141] : il est dérivable en $r = 1$ et défini par :

$$\phi_{vl}(r) = \frac{|r| + r}{1 + r}.$$

Les fonctions de limitation proposées dans N3SNatur sont les suivantes :

- **Minmod** :

$$\text{Lim}(a, b) = \text{MinMod}(a, b) \text{ avec :}$$

$$\text{MinMod}(a, b) = \frac{\text{sign}(a) + \text{sign}(b)}{2} \cdot \min(|a|, |b|),$$

- **Van Albada-Van Leer** :

$$\text{Lim}(a, b) = \frac{(a^2 + \varepsilon)b + (b^2 + \varepsilon)a}{a^2 + b^2 + 2\varepsilon} \text{ si } ab > 0,$$

où ε est un nombre positif.

Dans le cas général, on utilisera donc 2 paramètres r_j^+ et r_j^- , et on écrira le flux du schéma TVD de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{j+1/2}^{TVD} = F_{j+1/2}^1 - \phi(r_j) |a| \frac{1-|\nu|}{2} (W_{j+1}^n - W_j^n) \\ F_{j+1/2}^1 = \frac{1}{2} (f_{j+1}^n + f_j^n) - \frac{1}{2} |\nu| (W_{j+1} - W_j^n) \\ r_j = \begin{cases} r_j^+ = (W_j^n - W_{j-1}^n) / (W_{j+1}^n - W_j^n) & \text{si } a > 0 \\ r_j^- = (W_{j+2}^n - W_{j+1}^n) / (W_{j+1}^n - W_j^n) & \text{si } a < 0 \end{cases} \end{array} \right.$$

La condition de stabilité du schéma TVD est alors $0 \leq |\nu| \leq 1$. Le schéma TVD décrit ci-dessus donne des résultats assez différents suivant le limiteur utilisé :

- Le limiteur MinMod se montre assez diffusif.
- Le limiteur SuperBee a une nette tendance à accentuer les "angles".
- Le limiteur de Van Leer est un bon compromis entre les deux .

Limitations des schémas TVD : Si l'on donne en entrée un profil initial présentant un maximum régulier, on fait apparaître le défaut principal des schémas TVD, qui a tendance à s'accroître aux longs temps d'intégration : le "clipping" des extrema. En effet, un schéma TVD est d'ordre 2 dans les zones régulières *en dehors des extrema* ! Au voisinage des extrema, le flux d'ordre 1 est sélectionné par le limiteur du fait que r_j est nul, et le schéma est donc très diffusif localement. Ce problème est efficacement soigné ici grâce à l'emploi de schémas du type MUSCL qui préservent la monotonie, ce qui permet de relaxer les contraintes aux extrema.

5.2.4 Interpolation spatiale de la convection

Finalement, voici les choix disponibles dans la version de N3SNatur mise à notre disposition :

- 1. Le calcul est d'ordre 1 et on ne calcule pas de gradient.
- 2. On calcule un gradient constant par tétraèdre (gradient moyenné) et on applique une limitation du type MinMod par élément. Le calcul se fait pour chacune des directions spatiales, et on parle alors de limiteur multidimensionnel. Le calcul est donc d'ordre 1 dès que le gradient change de signe : le schéma ainsi construit est très robuste car il crée beaucoup de dissipation, mais la fonction de limitation n'est pas régulière, ce qui dans certains cas peut avoir une influence négative sur la convergence du schéma vers un état stationnaire.
- 3. Le gradient est ici calculé par la technique de l'élément amont / aval avec $\beta = 1/2$. On applique alors une fonction de limitation du type Van Albada - Van Leer (limiteur mono-dimensionnel). Le schéma ainsi construit est plus précis mais moins robuste que les précédents. Attention, certains segments ne possèdent pas de tétraèdre amont ou aval (cas des segments ayant un point frontière) : dans ce cas, le code calcule un gradient centré (correspondant au choix 4)
- 4. Le gradient est alors un gradient nodal calculé comme étant la moyenne pondérée par le volume des gradients calculés sur l'ensemble des tétraèdres contenant le noeud considéré. Aucune fonction de limitation n'est appliquée. Le schéma perd ses propriétés TVD en présence de forts gradients.
- 5. Ce choix est identique au choix 3 mais il n'emploie pas de limiteur. Il gagne donc en précision mais peut provoquer des oscillations au voisinage des discontinuités.
- 7. Ce dernier choix volontairement appelé 7 correspond à un schéma du type " $\beta - \gamma$ " et n'existe que pour les solveurs de Roe. Le coefficient β est pris égal à $1/3$. Le coefficient γ apporte une correction lors de l'assemblage des flux :

$$\phi_{ij} = \phi_{ij}^{Roe} - \frac{1}{2}\gamma|\tilde{A}|(W_j - W_i)$$

La valeur de γ est recalculée localement en fonction de l'état de Roe et vaut 1 ou 0,5.

Pour les calculs présentés par la suite, la solution stationnaire a été calculée d'abord au premier ordre (choix 1), puis la solution au second ordre avec le choix 3 ou 5 a été obtenue à partir de la solution convergée au premier ordre. En revanche, les solutions instationnaires ont été directement calculées au second ordre en temps et en espace avec le choix 3. Cette méthode s'est révélée suffisamment robuste, même dans les configurations assez raides telles que les flammes jet sous-détendues rencontrées dans notre étude, et un niveau de précision proche de celui obtenu avec le choix 5 ou 7. De plus, nous verrons dans ce chapitre que l'emploi d'un maillage non-structuré nous permet d'améliorer la discrétisation spatiale ainsi que le niveau de précision de la solution obtenue.

5.2.5 Discrétisation temporelle

Plusieurs méthodes de discrétisation temporelle sont disponibles dans *N3SNatur*. L'utilisateur peut choisir entre :

- un schéma explicite en temps. Les inconnues W sont prises à l'instant t^n pour former un schéma explicite en temps d'ordre 1.
- la méthode des pas fractionnaires. Elle consiste à résoudre d'abord les termes convectifs et diffusifs de l'équation sans termes sources puis, à partir de la variable scalaire actualisée, on ajoute les termes sources. La gestion des contributions hyperboliques et diffusives est ainsi découplée de la gestion des termes sources. La méthode d'intégration de ces derniers varie selon le modèle physique considéré.
- les méthodes de Runge-Kutta d'ordre 2 ou 4. Les schémas de Runge-Kutta s'écrivent sous la forme générale $w_{n+1} = w_n + (t_{n+1}-t_n)\Theta(w_n, \Delta t_n)$. La fonction $\Theta(w_n, \Delta t_n)$ est définie par les équations :

$$\begin{aligned} w_{n,i} &= w_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^q a_{ij} f_{n,j}, \\ f_{n,j} &= f(t_{n,j}, w_{n,j}), \\ t_{n,j} &= t_n + c_j \Delta t_n, \\ \Theta(w_n, \Delta t_n) &= \sum_{j=1}^q b_j f_{n,j}. \end{aligned}$$

Ainsi, la méthode de Runge-Kutta est entièrement définie dès que l'on connaît l'ordre de la méthode q , et les coefficients a_{ij} , b_j , et c_j . On retrouve la méthode d'Euler explicite en temps avec les coefficients $q = 1$, $a_{11} = 0$ et $b_1 = 1$. Le schéma explicite d'ordre 2, implanté dans *N3SNatur*, est défini par les coefficients $c_1 = 0$, $c_2 = 0.5$, $a_{11} = 0$, $a_{22} = 0.5$,

$a_{12} = a_{21} = 0$, $b_1 = 0$ et $b_2 = 1$ et s'écrit donc de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} w_{n,1} = w_n + 0 \\ t_{n,1} = t_n \\ w_{n,2} = w_n + \Delta t_n / 2 f(t_{n,1}, w_{n,1}) \\ t_{n,2} = t_n + \Delta t_n / 2 \\ \Theta = f(t_{n,2}, w_{n,2}) \\ w_{n+1} = w_n + \Delta t_n \Theta \end{array} \right. \quad (5.22)$$

Le schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 se définit de la même manière avec les coefficients suivants :

$c_1 = 0$	$a_{11} = 0$	$a_{12} = 0$	$a_{13} = 0$	$a_{14} = 0$
$c_2 = 0.5$	$a_{21} = 0.5$	$a_{22} = 0$	$a_{23} = 0$	$a_{24} = 0$
$c_3 = 0.5$	$a_{31} = 0$	$a_{32} = 0.5$	$a_{33} = 0$	$a_{34} = 0$
$c_4 = 1$	$a_{41} = 0$	$a_{42} = 0$	$a_{43} = 1$	$a_{44} = 0$
	$b_1 = 1/6$	$b_2 = 2/6$	$b_3 = 2/6$	$b_4 = 1/6$

- un schéma implicite en temps. L'utilisation d'un schéma implicite en temps permet de s'affranchir des critères de stabilité dûs au pas de temps et conduit à des méthodes de résolution plus efficaces, mais au prix d'algorithmes plus complexes. Les schémas implicites retenus dans *N3S-Natur* sont basés sur une approche implicite linéarisée découplée, c'est-à-dire utilisant deux solveurs séparés mais non indépendants pour avancer en temps successivement les variables fluides et les variables convectées par l'écoulement. Cette stratégie présente l'avantage de diminuer l'encombrement mémoire du code, mais oblige à certaines simplifications. Par exemple, les termes d'énergie turbulente qui apparaissent dans l'équation d'énergie ne sont pas pris en compte dans la matrice implicite et sont simplement évalués à l'instant t^n . Dans le cas d'un écoulement multi-espèces, cela revient à négliger les éventuelles variations temporelles de γ . Le schéma numérique implicite d'ordre 1 en espace s'écrit :

$$\begin{aligned} \nu_{C_i^{n+1}} W_i^{n+1} - \nu_{C_i^n} W_i^n &= - \sum (F_{ij}^{n+1})_{\text{Euler}} - \int \int_{\partial C_i} (F_B^{n+1})_{\text{Euler}} d\sigma \\ &- \sum \nu_{\text{Tetraèdre amont}}^n (F_i^{n+1})_{\text{visqueux}} \Delta t + (F_B^{n+1})_{\text{visqueux}}, \end{aligned}$$

et est construit par linéarisation du flux explicite. Les flux convectifs Euler sont donc linéarisés de la manière suivante :

$$\begin{aligned} F_{ij}^{n+1} &= F(W_i^n, W_j^n, \vec{\eta}_{ij}) + \left(\frac{\partial F(U, W_j^n, \vec{\eta}_{ij})}{\partial U} \right)_{U=W_i^n} (W_i^{n+1} - W_i^n) \\ &+ \left(\frac{\partial F(W_i^n, V, \vec{\eta}_{ij})}{\partial V} \right)_{V=W_j^n} (W_j^{n+1} - W_j^n). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Une démarche similaire conduit à la linéarisation des flux diffusifs. En revanche, l'utilisation d'un schéma implicite linéarisé pour les variables convectées telles que ρY ne permet pas de garantir le principe du maximum. C'est pourquoi on utilise un flux totalement implicite :

$$\left(F_{ij}^{\rho Y}\right)^{n+1} = \left(F_{ij}^{\rho}\right)^{n+1} \times \begin{cases} Y_i^{n+1} & \text{si } F_{ij}^{\rho} > \sigma_{ij} \rho_{ij}^{n+1} \\ Y_j^{n+1} & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.24)$$

où $\left(F_{ij}^{\rho}\right)^{n+1}$ est le flux implicite linéarisé relatif à la convection de la masse. La résolution du système linéaire se fait de manière itérative suivant un algorithme de Jacobi ou encore de Gauss-Seidel. La version disponible du code offre la possibilité de stocker la matrice implicite lors de la résolution du système linéaire, ce qui permet une réduction sensible du temps CPU (d'un facteur 10 en moyenne) mais nécessite en contre partie une place mémoire beaucoup plus importante (environ deux fois plus). Notons qu'un schéma implicite d'ordre 2 en temps est aussi disponible. Il repose sur la méthode de Gear ou méthode de correction du défaut : on utilise une méthode consistant à résoudre un système linéaire sur deux itérations. Nous ne discuterons pas plus de ces méthodes. Plus de détails peuvent être obtenus dans [131].

Calcul du pas de temps

Les schémas explicites sont soumis à des contraintes en termes de pas de temps. La condition limite sur le pas de temps doit exprimer le fait pour une certaine discrétisation spatiale, les ondes issues de chaque interface ne doivent atteindre les interfaces voisines. Sur chaque cellule, une distance maximale Δx_{max} est ainsi estimée (en considérant la plus petite extension des volumes de contrôle), ainsi que les vitesses d'ondes maximales c , desquelles un pas de temps maximal de référence Δt_{ref} , pour l'ensemble du domaine de calcul, est déterminé, soit :

$$\Delta t_{ref} = \Delta x_{max} / c.$$

Dans le cas de calcul avec prise en compte de flux diffusifs, à partir d'une étude de stabilité sur une équation linéaire de convection/diffusion ($u_t + cu_x = \mu u_{xx}$), un second pas de temps maximal Δt_{NS} est estimé selon :

$$\Delta t_{NS} = \frac{\Delta x_{max}^2}{c\Delta x_{max} + 2\mu}.$$

Le pas de temps de calcul Δt effectivement utilisé est alors choisi gal la plus petite de ces deux estimations. On utilise ainsi la notion de nombre de Courant-Friedrich-Lewy ou nombre de CFL :

$$CFL = \frac{\Delta t}{\Delta t_{NS}}.$$

Le nombre de CFL utilisé dans les calculs présentés dans la suite a été fixé entre 0.5 et 2.5, suivant la raideur du problème. La recherche de la solution stationnaire peut être accélérée par la méthode de pas de temps local. L'idée de la méthode du pas de temps local est la suivante : il s'agit d'attribuer à chaque noeud le plus grand pas de temps possible toléré par la méthode d'intégration. Nous avons adopté ce type de méthode à chaque fois que nous nous intéressions à la solution stationnaire uniquement. Dans le cas de l'étude d'une phase transitoire, une méthode à pas de temps constant et global a été utilisée. La notion de CFL met aussi en évidence le besoin d'un maillage suffisamment régulier et bien conçu. En effet, la raideur due à la présence de mailles aplaties n'est pas améliorée par le procédé de pas de temps local : la convergence est surtout dépendante du nombre de noeuds et peu des tailles respectives des mailles. Le recours à une méthode d'adaptation du maillage afin de réduire ou de limiter le nombre de cellules est d'autant plus justifié par ces considérations, puisqu'*a priori*, nous ne devrions pas perdre en temps de calcul ce que nous gagnons en précision. Nous allons maintenant introduire la méthode de ré-adaptation de maillage de Doleji que nous avons utilisée pour nos calculs.

5.3 Réadaptation de maillage *a posteriori*

Les schémas à capture de choc sont d'autant plus efficaces qu'ils sont combinés avec une stratégie de ré-adaptation de maillage pertinente. L'intérêt et les performances associés aux techniques classiques de remaillage ont déjà été bien illustrés dans le cas d'écoulements non-réactifs mais aussi réactifs, notamment dans la référence [142]. La simulation numérique d'écoulements complexes de par leur géométrie, la présence de structures compressibles, ou le besoin d'une représentation fine des gradients de concentration en espèces réactives nécessite souvent le recours à des méthodes d'adaptation du maillage afin d'obtenir un niveau de précision supérieur sans trop alourdir le coût informatique. Le but des méthodes adaptatives est de définir une discrétisation du domaine de calcul la plus efficace possible. Il existe un certain nombre de méthodes qui ont été développées dans ce sens au cours des dernières décennies. Un grand nombre d'entre elles sont basées sur une évaluation *a priori* ou *a posteriori* de l'erreur par rapport à la solution cherchée : en définissant un critère d'erreur tolérée, et en estimant directement cette erreur à partir des valeurs de la solution numérique calculée sur un maillage donné, les éléments pour lesquels la tolérance est dépassée sont raffinés pour obtenir un nouveau maillage. Cette approche est classique pour des méthodes d'éléments finis. Une revue des différentes techniques est aussi disponible dans la référence [132].

Le principe de la méthode AMA (Anisotropic Mesh Adaptation) développée par Dolejsi est un peu différente : celle-ci est basée sur l'erreur d'interpolation d'un polynôme d'interpolation par morceaux de la solution exacte sur le maillage triangulaire. Le critère d'adaptation du maillage vérifie le comportement de la dérivée seconde de la solution au problème considéré et non plus la solution elle-même. Ainsi, cette méthode présente l'avantage de pouvoir être ap-

pliquée sans aucune modification pour n'importe quelle valeur de condition limite et n'importe quelle méthode numérique. L'inconvénient en revanche est qu'on n'a aucun contrôle sur l'erreur de discrétisation de la solution numérique.

Nous nous attachons dans cette partie à présenter le principe de la méthode de manière simple, en rappelant les différents paramètres qui contrôlent la discrétisation du maillage final, et les principales opérations élémentaires employées. Les lecteurs désirant entrer plus en détail dans la formulation mathématique de la méthode pourront se référer aux travaux de Dolejsi [132, 133].

5.3.1 Principe de la méthode

Soit u la solution analytique au problème considéré, et u_h son approximation linéaire par morceaux. Notre but est de construire une grille de triangles \mathcal{T} pour un domaine physique Ω de telle manière que l'**erreur d'interpolation** :

$$e_I(x, y) \equiv |u(x, y) - u_h(x, y)|, \quad (x, y) \in \Omega \quad (5.25)$$

soit pour chaque couple $(x, y) \in \Omega$ plus petite qu'une tolérance donnée et que le nombre d'éléments de triangulation ne soit pas trop grand. Soit $u \in C^2(\Omega)$. Alors, en utilisant le développement des séries de Taylor au point $(x_0, y_0) \in \Omega$, on obtient :

$$\begin{aligned} u(x, y) &= u(x_0, y_0) + \frac{\partial u(x_0, y_0)}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial u(x_0, y_0)}{\partial y}(y - y_0) \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial y^2}(y - y_0)^2 \right] \\ &+ o(|x - x_0, y - y_0|^2) \quad (x, y) \in \Omega \end{aligned}$$

On définit aussi l'approximation linéaire de u dans un voisinage $\mathcal{U}(x_0, y_0) \subset \Omega$ de (x_0, y_0) par :

$$u_{h|\mathcal{U}(x_0, y_0)}(x, y) = u(x_0, y_0) + \frac{\partial u(x_0, y_0)}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial u(x_0, y_0)}{\partial y}(y - y_0), \quad (x, y) \in \mathcal{U}(x_0, y_0)$$

Alors, pour l'erreur d'interpolation dans $\mathcal{U}(x_0, y_0)$, on obtient en omettant les termes d'ordre négligeable devant $(|x - x_0, y - y_0|^2)$:

$$\begin{aligned} e_{I|\mathcal{U}(x_0, y_0)}(x, y) &= |u(x, y) - u_{h|\mathcal{U}(x_0, y_0)}(x, y)| \\ &\approx \frac{1}{2} \left| \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial y^2}(y - y_0)^2 \right| \end{aligned}$$

ce qui est valide pour $(x, y) \in \mathcal{U}(x_0, y_0)$. Si $\omega > 0$ est une tolérance donnée, il faut que $e_I(x, y) \leq \omega$. Cela nous donne :

$$\left| \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 u(x_0, y_0)}{\partial y^2}(y - y_0)^2 \right| \leq 2\omega$$

ce que l'on peut récrire comme :

$$(x - x_0, y - y_0) \begin{pmatrix} \partial^2 u / \partial x^2 & \partial^2 u / \partial x \partial y \\ \partial^2 u / \partial x \partial y & \partial^2 u / \partial y^2 \end{pmatrix} \Big|_{(x_0, y_0)} \begin{pmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{pmatrix} \leq 2\omega$$

Si une telle condition est remplie, alors la condition requise sera satisfaite :

$$e_I(x, y) = |u(x, y) - u_h(x, y)| \leq \omega \quad \forall (x, y) \in \Omega. \quad (5.26)$$

5.3.2 Maillage optimal

Soit M une matrice symétrique 2×2 définie positive et $v \in \mathbb{R}^2$. On définit **la norme** du vecteur v correspondant à la matrice M comme :

$$\|v\|_M \equiv (v M v^T)^{\frac{1}{2}}$$

Si $M = I$ la matrice identité, alors $\|v\|_M = |v|$, où $|v|$ est la norme Euclidienne de v . La matrice M peut être interprétée comme la **matrice d'erreur** et la norme $\|v\|_M$ comme une erreur de la solution sur le segment v .

Soit \mathcal{T} une triangulation du domaine de calcul Ω et $\partial\Omega$ sa frontière. Soit M_j une matrice symétrique 2×2 définie positive pour chaque noeud P_j . Alors, pour chaque segment S_k , on construit $\overline{M}_k = 1/2(M_{k_1} + M_{k_2})$ où P_{k_1} et P_{k_2} sont les points initial et final formant S_k , et M_{k_1} , M_{k_2} sont les matrices correspondantes. On dit que le maillage \mathcal{T} est **optimal** si la norme de S_k correspondant à \overline{M}_k est égale à $\sqrt{3}$ pour tout segment du maillage :

$$\|S_k\|_{\overline{M}_k} = \sqrt{3}$$

Cela signifie que l'erreur (considérée comme $\|\cdot\|_M$) pour tout segment de \mathcal{T} est la même, c'est-à-dire que l'erreur est uniformément répartie sur le maillage. La constante $\sqrt{3}$ provient du fait que la longueur du segment du triangle équilatéral inscrit dans un cercle unité est égale à $\sqrt{3}$. Il est facile de montrer que le maillage optimal existe seulement pour des cas particuliers, et que nous devons ainsi définir un paramètre supplémentaire, $Q_{\mathcal{T}}$, afin de quantifier la différence entre le maillage \mathcal{T} et le maillage optimal. On définit ainsi le **critère de qualité du triangle** T_n par :

$$q_{T_n} = \sum_{l=1}^{l=3} \left(\|v_{nl}\|_{\overline{M}_{nl}} - \sqrt{3} \right)^2, \quad (5.27)$$

où $\|v_{nl}\|_{\overline{M}_{nl}}$, $l = 1, 2, 3$ sont les normes des côtés du triangle T_n . On définit le **paramètre de qualité global** du maillage \mathcal{T} par :

$$Q_{\mathcal{T}} = \frac{1}{n_{elem}} \sum_{T_n \in \mathcal{T}} q_{T_n}. \quad (5.28)$$

Il est clair que le critère $Q_{\mathcal{T}}$ est toujours positif et que le maillage \mathcal{T} est optimal quand $Q_{\mathcal{T}} = 0$. Nous construirons donc un maillage pour lequel le paramètre de qualité sera minimal.

5.3.3 Optimisation du maillage

Supposons un maillage \mathcal{T} avec les matrices M_j définies précédemment. Le maillage contient deux types de noeuds : les noeuds (I) intérieurs au domaine et les noeuds (B) situés sur la frontière. Un segment II rejoint donc deux noeuds intérieurs et les autres combinaisons sont explicites. Nous voulons trouver un nouveau maillage \mathcal{T}_{new} tel que $Q_{\mathcal{T}_{new}}$ soit minimal. Pour obtenir un tel maillage, un processus itératif est employé : chaque itération consiste en un certain nombre d'opérations élémentaires locales représentées Fig.5.6 :

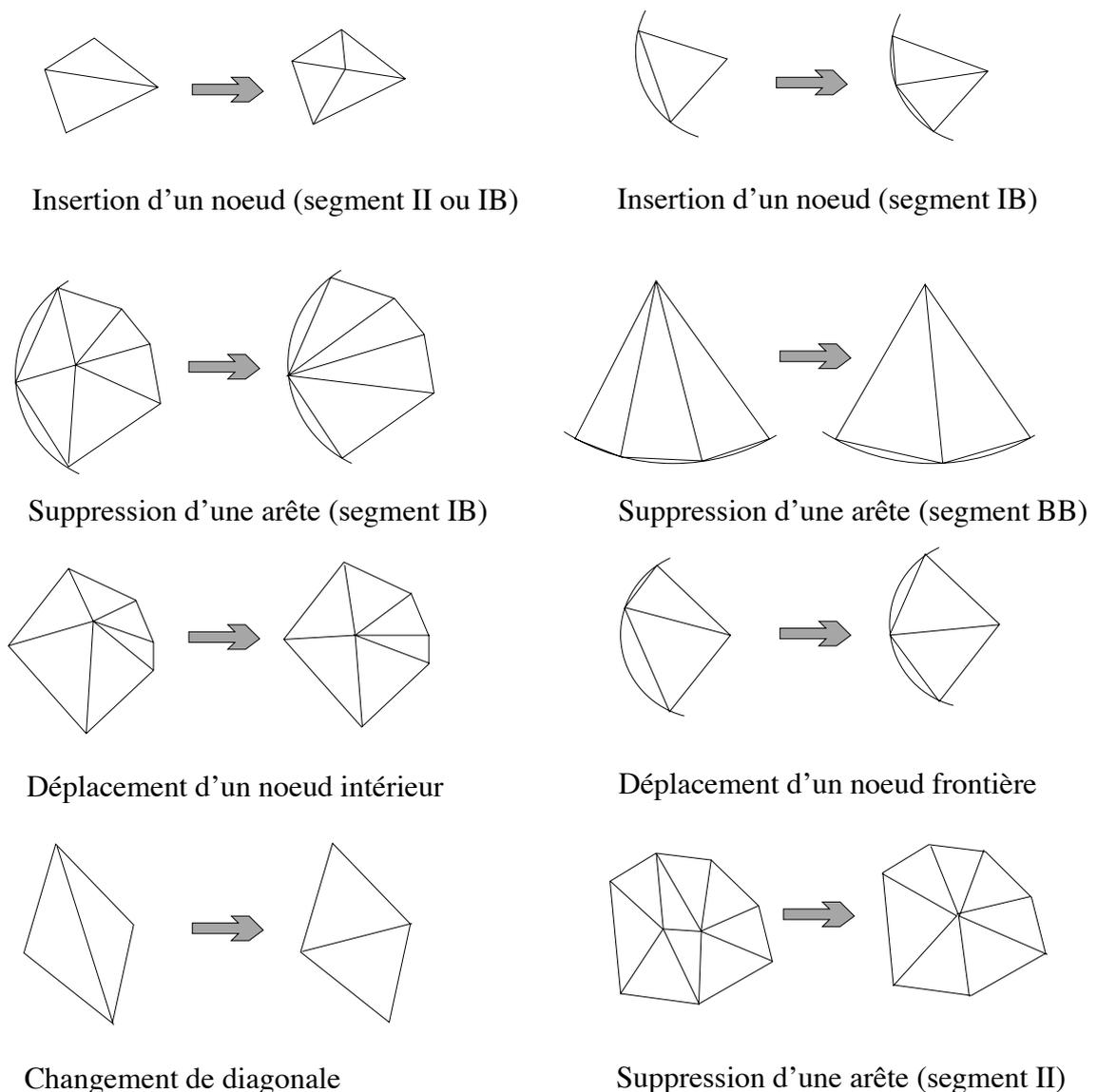


FIGURE 5.6: Opérations élémentaires employées dans la méthode AMA

- **Ajout d'un noeud (A)** : si la norme d'un segment de triangle est supérieure à $\sqrt{16/3}$, alors on ajoute un nouveau noeud. Dans le cas d'un segment II ou IB, on ajoute un noeud

au centre de ce segment ; dans le cas d'un segment BB, on ajoute un noeud au centre de cette arête puis sa position est projetée sur la frontière $\partial\Omega$.

- **Suppression d'une arête (S)** : si la norme d'une arête est inférieure à $\sqrt{4/3}$, alors on supprime cette arête. Les noeuds aux extrémités deviennent un nouveau noeud, dont la position dépend du type d'arête : dans le cas d'un segment II, la nouvelle position est le centre du segment supprimé ; dans le cas d'un segment IB, la nouvelle position est la position du noeud situé sur la frontière ; dans le cas d'un segment BB, la nouvelle position est au centre du segment supprimé qui est projeté sur la frontière $\partial\Omega$.
- **Changement(C)** de diagonale d'un quadrilatère. La diagonale est changée pour l'autre diagonale du quadrilatère si le paramètre de qualité est plus petit après coup.
- **Déplacement d'un noeud (D)** : on recherche une nouvelle position pour le noeud, les positions des autres noeuds étant figées, qui minimise le paramètre de qualité. Dans le cas d'un noeud intérieur, on construit le centre de gravité des triangles partageant le noeud comme sommet puis le noeud est déplacé en direction de ce point jusqu'à ce que le paramètre de qualité soit minimal. Pour les noeuds situés en frontière, on déplace le noeud le long de la frontière afin de minimiser le paramètre de qualité.

Comme évoqué précédemment, ce processus d'optimisation est un processus itératif et Dolejsi a pu déterminer la meilleure séquence d'opérations élémentaires permettant la convergence de la procédure d'adaptation. Ainsi, un nombre fini d'opérations suffit pour obtenir une distribution des noeuds sur laquelle plus aucune opération minimisant le critère de qualité ne peut être effectuée. La stratégie est représentée par la formule :

$$m \times [\mathcal{D} + \mathcal{C} + \mathcal{S} + \mathcal{D} + \mathcal{A} + \mathcal{D} + \mathcal{C}] + \mathcal{D},$$

où m est un entier correspondant au nombre d'itérations nécessaires. Ce nombre est choisi de telle manière qu'au dernier passage, nous n'ayons plus de suppressions de segment, d'insertion de noeud, et de changement de diagonale dans la séquence entre crochets. m est aussi borné de telle manière que l'optimisation s'arrête si $m \geq m_{max}$. En général, $m = 10$. L'expérience acquise par Dolejsi lui a permis de mettre au point une nouvelle formule :

$$m \times (\mathcal{D} + n_1 \times [\mathcal{S} + \mathcal{C}] + \mathcal{D} + n_2 \times [\mathcal{A} + \mathcal{C}] + \mathcal{D} + \mathcal{C}) + \mathcal{D}.$$

5.3.4 Mise en oeuvre

Le point crucial de la méthode AMA réside dans la définition de la matrice d'erreur M_i . Celle-ci détermine directement la qualité du remaillage. On choisit alors empiriquement de définir la matrice d'erreur au noeud i selon :

$$M_i = c [I + \alpha (\|H_i\|) H_i], \quad (5.29)$$

avec

$$H_i = R_i \begin{pmatrix} |\Lambda_{i1}| & 0 \\ 0 & |\Lambda_{i2}| \end{pmatrix} R_i^{-1}$$

et c une constante positive. H_i est exprimée ainsi afin d'avoir une matrice définie positive. Le choix d'ajouter la matrice identité I permet d'assurer la régularité de M_i tout en restant cohérent avec le fait que si H_i s'annule, la triangulation doit devenir uniforme. Dans le cas limite d'une solution uniforme, le domaine de calcul ne doit contenir idéalement que des triangles équilatéraux dont les côtés auraient une longueur (euclidienne) h telle que $6\omega = ch^2$ et dont la surface serait $(6\omega\sqrt{3})/4.c$. Une première approche pourrait ainsi consister à fixer ω et en déduire le nombre idéal d'éléments N_{elem} à introduire en divisant simplement la surface globale du domaine de calcul $|\Omega|$ par la surface d'un tel triangle idéal :

$$N_{elem} = |\Omega| / \left(\frac{\sqrt{3} 6\omega}{4 c} \right) \quad (5.30)$$

Afin d'assurer un contrôle sur le niveau global d'éléments à introduire, on effectue cependant la démarche inverse, qui consiste à **se fixer un nombre idéal d'éléments** N_{elem} que l'on souhaite introduire et on paramètre le coefficient c en fonction de ce nombre idéal :

$$c = \frac{6\omega\sqrt{3}N_{elem}}{4|\Omega|} \quad (5.31)$$

On voit alors que la longueur d'un segment de triangle idéal devient indépendante de la tolérance qu'on pourrait se fixer :

$$\sqrt{6\omega} = \sqrt{\frac{A|\Omega|}{\sqrt{3}N_{elem}}}.$$

Nous devons encore déterminer α . On choisit empiriquement la relation :

$$\alpha(\|H_i\|) = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2 + \|H_i\|},$$

où ϵ_1 et ϵ_2 sont des constantes positives qu'il nous faut choisir. Si l'on choisit de se fixer le **rapport des longueurs effectives** l_{max}/l_{min} , on détermine ϵ_1 du fait que la longueur maximale dans la nouvelle métrique est :

$$l_{max} = \sqrt{3/c},$$

obtenue pour $H_i=0$, et la longueur minimale est obtenue pour $H_i=\beta I$ avec $\beta \gg 1$:

$$l_{min} = \sqrt{\frac{3}{c(1 + \epsilon_1)}},$$

soit :

$$\epsilon_1 = \left(\frac{l_{max}}{l_{min}} \right)^2 - 1. \quad (5.32)$$

Pour déterminer ϵ_2 , on utilise la relation empirique suivante :

$$\epsilon_2 = \frac{\epsilon_1}{p}, \quad (5.33)$$

avec p une constante permettant d'**ajuster la concentration des segments** et donc des noeuds dans les zones de forte courbure.

Ainsi, nous pouvons contrôler un certain nombre de paramètres du maillage parmi lesquels l'étirement des cellules, le nombre idéal de cellules visé, le rapport de longueur entre la plus petite maille du domaine et la plus grande, ainsi que la concentration des segments dans les zones de forte courbure. Ceci nous permet non seulement de gagner en précision dans les zones de fortes courbures, mais aussi de mieux estimer les flux grâce à un ré-alignement des cellules qui améliore la projection du flux sur la normale η_{ij} . Notons que cette méthode a été étendue par Dolejsi aux domaines tri-dimensionnels, ce qui renforce encore l'attractivité de cet outil. Néanmoins, nous ne disposons pas de cette extension pour nos simulations et nous ne présentons dans la suite que des ré-adaptations de maillages bi-dimensionnels. Nous présentons Fig.5.7 un exemple d'adaptation de maillage. Le maillage initial est un maillage uniforme constitué de 38000 mailles. La solution stationnaire convergée à partir de laquelle est effectué le remaillage a été calculée au second ordre en espace, et la quantité choisie pour estimer l'erreur d'interpolation est la densité. Les valeurs des différents paramètres de contrôle utilisés ici sont $p=0.8$, $\epsilon_1=10000$, $c=25$. La condition minimale de positivité qui contrôle la valeur minimale des angles des triangles est fixée à 0.03 (soit un angle minimum de $\alpha=5^\circ$). Le maillage final comporte 45000 mailles, soit à peine plus que le maillage initial. Notons que nous aurions pu obtenir un maillage final comportant autant, voire moins de cellules que le maillage initial en diminuant les valeurs de p et ϵ_1 . Néanmoins, ce jeu de valeurs permet d'ajuster la concentration des segments dans les zones de forte courbure sans toutefois répartir inutilement tous les éléments près des chocs. On peut aussi remarquer que les mailles sont suffisamment petites le long des parois. Une taille de cellule trop importante est en effet problématique pour l'évaluation des lois de parois par exemple.

La méthode AMA est un outil très performant pour le calcul de configurations d'écoulements compressibles présentant de forts gradients de densité. Pratiquement, cette méthode permet de visualiser directement la structure de l'écoulement en observant simplement la structure du maillage. L'application de l'algorithme de ré-adaptation nécessite cependant plusieurs cycles de calculs afin de ne pas introduire une dépendance de la solution au maillage initial trop importante. Une étude de sensibilité vis à vis des conditions initiales et du jeu de paramètres a été conduite dans [143]. Nous présenterons dans les prochains chapitres plusieurs configurations pour lesquelles la méthode AMA s'est montrée très efficace.

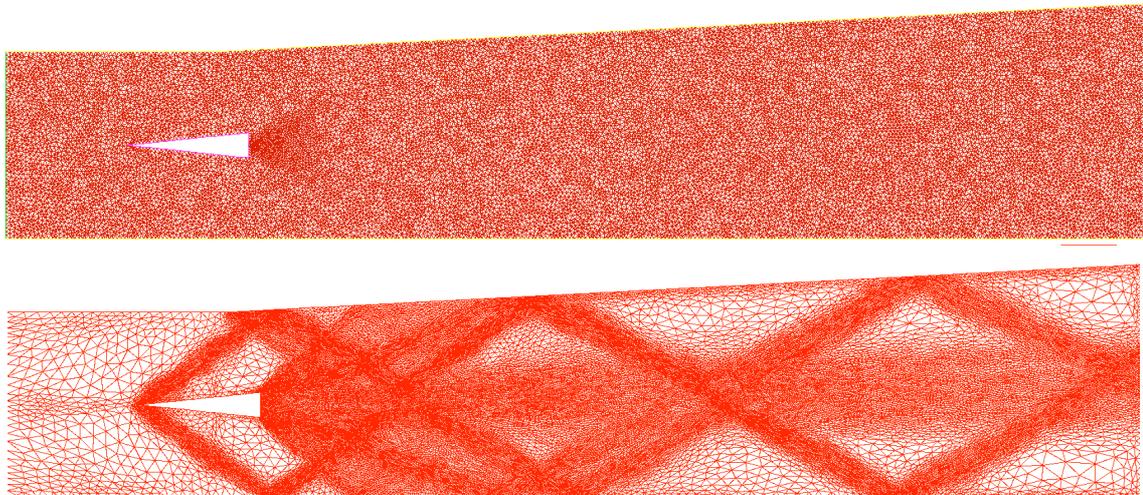


FIGURE 5.7: Exemple de réadaptation de maillage effectuée avec la méthode AMA [133] : le maillage initial est représenté en haut (38000 cellules), le maillage obtenu après utilisation de la méthode AMA est reporté en bas (45000 cellules).

5.4 Module CEDILLE

Le code de calcul N3S-Natur peut être couplé au module CEDILLE (Calcul d'Écoulements Diphasiques par une Logique Lagrangienne Eulérienne) pour la description des écoulements diphasiques [131]. Il existe de nombreuses situations où un milieu fluide est constitué de deux ou plusieurs phases et les méthodes de résolution actuelles ne se prêtent pas toutes aux écoulements rencontrés dans notre étude. La version disponible de CEDILLE offre la possibilité de simuler la diffusion d'un nuage de particules par un écoulement turbulent de gaz en instationnaire et en stationnaire. Nous présentons ici la méthode utilisée dans CEDILLE ainsi que les différents modèles physiques disponibles.

5.4.1 Représentation Eulérienne Lagrangienne

Si l'on part de la constatation qu'un écoulement présentant une phase dispersée est la juxtaposition de petits domaines monophasiques, on pourrait très bien s'imaginer résoudre les équations correspondantes à l'intérieur de chaque phase (dans le cas de bulles ou de gouttelettes comme ici) et appliquer des conditions appropriées aux interfaces pour rendre compte des échanges entre phases. En réalité, il n'est ni utile ni possible de calculer les évolutions de chaque particule, goutte ou bulle. D'une part, il y en a souvent beaucoup trop pour qu'on puisse le faire à un coût raisonnable, et d'autre part la connaissance détaillée des caractéristiques locales et instantanées d'un écoulement turbulent diphasique est encore hors de portée en raison de la complexité de son organisation : il n'est pas possible de contrôler goutte par goutte les

conditions aux limites ou initiales d'une telle expérience. Nous avons donc besoin d'une représentation moyenne, en définissant les caractéristiques du brouillard au sens de moyennes statistiques obtenues sur un grand nombre de "réalisations" de la "même" expérience. La dérivation d'un groupe d'équations de bilan pour un nombre suffisant de variables extensives moyennes doit permettre la description du brouillard comme un milieu continu. Le choix des variables qui caractériseront le spray conduit à une description plus ou moins fine de celui-ci. On peut, d'une manière générale, distinguer trois catégories :

- **La méthode de "Fluide Localement Homogène" (LHF).** C'est une méthode purement Eulérienne (proposée par Faeth et al.[144]) qui consiste à considérer une espèce supplémentaire qui n'est autre que la phase liquide, mais avec la même température moyenne que la phase gazeuse. Les deux phases sont représentées comme un seul fluide, et les deux seules variables qui vont représenter le liquide sont la fraction volumique ou massique de liquide et le nombre de gouttes par unité de volume. Les propriétés du fluide sont à la fois celles d'un liquide et d'un gaz, et en fonction du taux de liquide qu'il contiendra, l'équation d'état devra varier entre celle d'un gaz si le taux de liquide est nul et celle d'un liquide si le taux de liquide est un. Le liquide "diffuse" cependant dans le milieu avec un coefficient de diffusion "effectif", fonction du taux de liquide et qui prend en compte les différences de vitesse entre les gouttes et le gaz.
- **La méthode Eulérienne à deux Fluides (2FE).** Cette méthode Eulérienne est très généralement utilisée dans le cas d'écoulements à deux phases non-réactifs [145]. Les deux phases sont regardées comme des fluides différents et sont décrites de manière Eulérienne. La phase liquide est mieux caractérisée que dans la première approche et la modélisation des termes d'échange entre phases sera plus précise car nous disposons de meilleurs renseignements. Cependant, les différences de température permises entre les différentes gouttes doivent être prises en compte par la présence de flux de diffusion de chaleur "effectif" au sein de la phase liquide, tout comme la dispersion des vitesses des goutelettes par rapport à la moyenne de la phase liquide.
- **La méthode Statistique Eulérienne-Lagrangienne (SEL).** Les phases sont traitées séparément, la phase gazeuse étant décrite de façon Eulérienne grâce aux équations pour le gaz et la phase liquide de façon Lagrangienne. L'approche Lagrangienne consiste à décrire dans l'espace physiques la trajectoire des goutelettes. C'est la méthode la plus largement utilisée de nos jours car elle présente l'intérêt de pouvoir prendre en compte les températures et les quantités de mouvement d'échantillons représentatifs de toutes les gouttes, et on tire partie de la représentation en gouttes pour éviter de décrire les mouvements à l'intérieur du liquide. La connaissance exacte du diamètre de chaque échantillon est bénéfique pour l'estimation des termes responsables de l'évolution du spray, tels que

la vitesse de régression des gouttes, la force de trainée, ou encore les termes liés aux collisions. La représentation des termes d'échange des grandeurs Lagrangiennes avec la phase gazeuse est donc grandement améliorée avec ce type de méthode.

Le couplage CEDILLE-N3SNatur repose sur cette dernière approche. Elle permet d'inclure sans difficulté des lois physiques pour modéliser l'interaction des gouttes avec la phase gazeuse au moyen de termes de corrélation et de termes sources pour la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

5.4.2 Approche cinétique et modèle semi-fluide

Dans l'approche cinétique, la phase liquide dispersée est représentée par une fonction de distribution $f(t, \vec{x}, \vec{u}_l, r_l, T_l)$, où f est la densité des particules au point $(t, \vec{x}, \vec{u}_l, r_l, T_l)$ de l'espace des phases, c'est-à-dire la densité de particules de rayon r_l , de température T_l et de vitesse \vec{u}_l qui se trouvent à l'instant t en \vec{x} . La connaissance de cette fonction de distribution à chaque instant et pour toute position de l'espace permet d'obtenir les différentes caractéristiques d'un nuage de particules. Par exemple, la vitesse moyenne des particules est directement donnée par :

$$\bar{\vec{u}}_l = \frac{1}{N_p} \int \int \int \vec{u}_l f d\vec{u}_l dr_l dT_l, \quad (5.34)$$

où N_p est le nombre de particules par unité de volume obtenu par :

$$N_p = \int \int \int f d\vec{u}_l dr_l dT_l.$$

Il existe différentes manières pour obtenir la fonction densité de probabilité : soit on présume sa forme en utilisant, par exemple, la loi log-normale ou la distribution de Rosin-Rammler, soit on écrit une équation cinétique pour f qui prend en compte les phénomènes physiques responsables des variations de cette fonction. L'équation proposée par Williams [146, 147] traduit l'évolution du nombre probable de particules dont le rayon est compris entre r_l et $r_l + dr_l$ autour de la position \vec{x} , possédant une vitesse comprise entre \vec{u}_l et $\vec{u}_l + d\vec{u}_l$ et une température comprise entre T_l et $T_l + dT_l$ à l'instant t :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}(f\vec{u}_l) + \nabla_{\vec{u}_l}(f\beta) + \frac{\partial}{\partial r_l}(f\mathcal{R}) + \frac{\partial}{\partial T_l}(f\mathcal{T}) = \mathcal{Q}(f, f). \quad (5.35)$$

- **le terme** $\mathcal{R} = dr_l/dt$ est associé à la vitesse de régression des goutelettes sous l'action de l'évaporation. La représentation de ce terme nécessite un modèle d'évaporation.
- **le terme** β correspond à l'accélération d'une goutelette et traduit les efforts dûs à la trainée, à la gravité, à la masse ajoutée et à la force de Basset¹. Pour nos applications, la

1. Le fluide exerce sur la particule une force $F_{\text{masse}} = -1/2\rho_l V d(u_l - u_g)/dt + \rho_l V du_g/dt + F_{\text{visqueux}} + F_{\text{Basset}}$ avec $F_{\text{Basset}} = 3/2\rho_l \pi^{1/2} (2r_l)^2 \int_{t^*}^t dt^*/(t - t^*)^{1/2} d(u_l - u_g)/dt^*$. La force de Basset est un terme d'histoire ou d'hysteresis.

gravité est négligeable, la masse ajoutée et la force de Basset le sont également. Seule la force de trainée est considérée : $\beta = -c(r)(u_l - u_g) = -C/r^2(u_l - u_g)$, où $1/c(r)$ est le temps caractéristique de capture d'une gouttelette par l'écoulement.

- **le terme T** désigne les variations de température de la goutte.
- **le terme $Q(f, f)$** est un terme non linéaire quadratique qui permet la prise en compte des collisions.

Il est très probable que la présence des gouttelettes perturbe le transfert d'énergie en cascade de Kolmogorov. Les plus grandes échelles sont considérées suffisamment grandes pour être incluses dans la description de la phase gazeuse. Pour les plus petites échelles, la turbulence est susceptible de se traduire par un terme de diffusion pour l'équation décrivant le spray. Finalement, nous obtenons l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}(f\vec{u}_l) + \nabla_{\vec{u}_l}(f\beta) + \frac{\partial}{\partial r}(f\mathcal{R}) + \frac{\partial}{\partial T_l}(fT) - \nabla_{\vec{u}_l}(D\nabla_{\vec{u}_l}f) = Q(f, f) \quad (5.36)$$

où D est le coefficient de diffusion calculé à partir de l'énergie cinétique turbulente du gaz et du coefficient de trainée.

La résolution de la fonction de densité de probabilité peut s'effectuer par intégration directe de l'équation (5.36) par une méthode de volumes-finis, par exemple. O'Rourke [148] donne le nom de "full spray equation method" à cette technique, mais son utilisation est utopique. En pratique, on écrit d'une façon particulière la fonction de densité de probabilité en présumant sa forme.

Dans CEDILLE, la distribution de vitesses est représentée par une gaussienne autour de la valeur moyenne, et est donc caractérisée par une densité, une vitesse, et une vitesse quadratique moyenne. On obtient ainsi le modèle semi-fluide en prenant les trois premiers moments de l'équation du spray par rapport à la vitesse. Le modèle semi-fluide repose sur la convergence asymptotique de la distribution de vitesse vers une fonction gaussienne. Si l'on considère la solution de l'équation de Fokker-Planck, f , avec comme donnée initiale la fonction densité f^0 telle que $f^0(\vec{x}, \vec{u}_l, r)$ est gaussienne, alors la distribution de vitesse $f(x, \vec{u}_l, r, t)$ est gaussienne. Ainsi, la densité de probabilité f est caractérisée par le triplet :

$$\begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \\ G_3 \end{pmatrix} = \frac{4}{3}\pi\rho_l r^3 \begin{pmatrix} \int_u f du \\ \int_u f u du \\ \int_u f u^2/2 du \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

Les quantités G_1 , G_2 , et G_3 s'interprètent comme les densités de masse, d'impulsion et d'énergie du spray au point (\vec{x}, r, t) . Ainsi, en prenant les trois premiers moments de l'équation du spray par rapport à la vitesse, nous obtenons le modèle semi-fluide.

De plus, on réalise le suivi d'un grand nombre de "particules numériques" représentant chacune un ensemble de particules réelles de caractéristiques identiques. Pour le modèle semi-fluide [149], les particules numériques seront du type :

$$f^k(\vec{x}, \vec{u}_l, r_l) = \frac{1}{4\pi r_k^3 \rho_l / 3} \Psi(\vec{x}; \vec{x}_k, m_k) \Theta(u, G_k, U_k, E_k) \delta(r - r_k).$$

Ψ est une gaussienne de masse unité, centrée en \vec{x}_k et m_k , Θ est une gaussienne dont les trois premiers moments sont $(G_k, G_k U_k, E_k)$. Ainsi, une particule numérique est caractérisée par les six paramètres suivants : $(G_k, U_k, E_k, \vec{x}_k, m_k, r_k)$. La somme des particules numériques $f = \sum_{k=1}^{N_p} f_k$ représente alors le spray. A partir d'une donnée initiale, il est possible de résoudre l'équation pour chaque particule k en dérivant simplement :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{x}_k}{dt} &= \vec{u}_k \quad \forall k \in [1, N_p], \\ \frac{d\vec{u}_k}{dt} &= \vec{\beta}_k \quad \forall k \in [1, N_p], \\ \frac{dT_k}{dt} &= \mathcal{T}_k \quad \forall k \in [1, N_p], \\ \frac{dr_k}{dt} &= \mathcal{R}_k \quad \forall k \in [1, N_p]. \end{aligned}$$

Il s'agit donc maintenant de modéliser les termes responsables de l'évolution des particules.

5.4.3 Modèles physiques employés

Modèle de dispersion

Le couplage entre les phases n'est pas toujours aisé, en particulier quand il s'agit de relier les corrélations des vitesses des particules et du fluide. La phase porteuse étant calculée à l'aide de méthodes RANS, seules les grandeurs moyennes de cette phase sont connues. Or, par exemple, la force $\vec{\beta}_k$ s'exerçant sur les particules fait apparaître un couplage avec la vitesse du gaz autour de la particule. Si on veut observer une dispersion réaliste du brouillard dans l'espace physique, il est nécessaire de prendre en compte les effets des fluctuations de vitesse de la phase gazeuse. Pour cela, on considère que le mouvement de la particule est la superposition d'un mouvement induit par la force de trainée moyenne et d'un mouvement aléatoire induit par les fluctuations de vitesse du gaz et responsable de la dispersion turbulente des particules dans la phase porteuse. Il faut donc reconstruire une estimation de la vitesse du gaz vue par une particule le long de sa trajectoire. La technique retenue repose sur une méthode stochastique car on reconstruit cette vitesse par le biais d'un tirage aléatoire.

Dans CEDILLE, plusieurs modes de gestion des particules ou "paquets" sont proposés en fonction de l'étalement de ceux-ci.

- Une "diffusion aléatoire suivant l'étalement" de la goutte peut être effectuée. La goutte suit la trajectoire dictée par sa vitesse moyenne tant que son premier paramètre de turbulence (paramètre de dispersion des centres de gravité des paquets autour de la position de l'injecteur) reste inférieur à une certaine valeur. Lorsque ce paramètre atteint la valeur limite grâce à la turbulence de la phase gazeuse, on observe une modification de la position de la particule qui quitte alors sa trajectoire : la nouvelle position est obtenue par un tirage aléatoire. L'étalement est alors remis à zéro et la particule reprend la trajectoire dictée par sa vitesse moyenne, cf Fig.5.8.

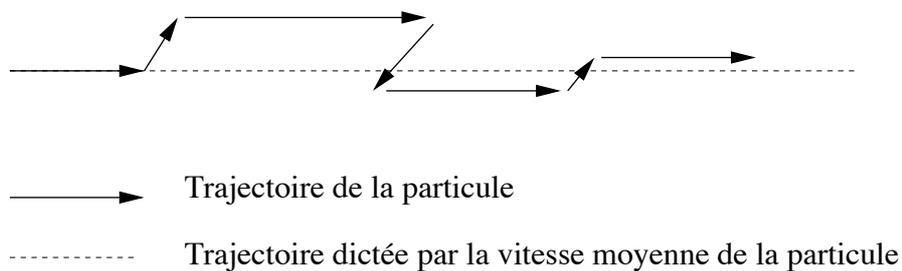


FIGURE 5.8: Dispersion turbulente aléatoire en fonction de l'étalement.

- Une dispersion par "cassure des paquets d'étalement trop grand" est aussi disponible. Le paquet suit alors la trajectoire dictée par sa vitesse moyenne, jusqu'à ce que la valeur de l'étalement atteigne une valeur limite : le paquet est alors séparé en deux paquets fils de tailles identiques, qui subissent une dispersion aléatoire autour de la position initiale du paquet père.

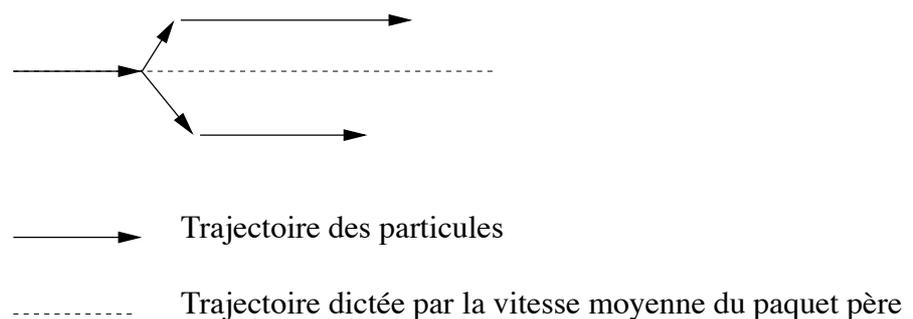


FIGURE 5.9: Dispersion turbulente par cassure du paquet père.

Modèle d'évaporation

Des échanges de quantité de mouvement, de chaleur et de masse interviennent entre les deux phases. Le modèle standard dit en D^2 s'applique au cas particulier d'une goutte isolée en équilibre dynamique avec le gaz environnant (dans le référentiel lié au centre d'inertie de la goutte, la vitesse du gaz est nulle). Ce modèle repose sur plusieurs hypothèses :

- On néglige l'effet de la pesanteur, de la convection naturelle et forcée de telle sorte que la symétrie sphérique du problème soit conservée.
- Le régime d'évaporation est quasi-stationnaire : ce phénomène est lent devant les phénomènes régissant la phase gazeuse qui s'adapte donc instantanément à la diminution du diamètre des gouttes et aux conditions limites locales.
- Les phénomènes sont quasi-stationnaires dans la phase liquide : on néglige la période de chauffage de la goutte et la température est constante et uniforme dans la goutte.
- Les gradients de pression sont nuls et les vitesses faibles (faibles nombres de Mach) : l'énergie cinétique est donc faible devant l'énergie interne.
- Il y a un équilibre thermodynamique à la surface de la goutte entre les phases permettant l'application de la relation de Clausius-Clapeyron.
- La goutte est composée d'un composant unique.
- Les échanges radiatifs, l'effet Soret et Dufour sont négligeables.
- La diffusion de chaleur obéit à la loi de Fourier et la diffusion des espèces à la loi de Fick.
- Les propriétés de transport en phase gazeuse sont constantes (conductivité thermique, coefficient de diffusion de masse,...), on suppose le nombre de Lewis égal à 1 (Prandtl = Schmidt).

Sous ces hypothèses, le carré du diamètre de la goutte décroît linéairement en fonction du temps :

$$\frac{d(d_k^2)}{dt} = -K_0 \text{ avec } K_0 = 8 \frac{\rho_g D}{\rho_l} \ln(1 + B), \quad (5.38)$$

où ρ_g est la masse volumique de la phase gazeuse, ρ_l la masse volumique de la phase liquide, D le coefficient de diffusion de l'espèce du liquide dans l'espèce de la phase gazeuse, B le nombre de Spalding de masse (ou le nombre de Spalding thermique puisque $B_M=B_T=B$ car $Le=1$).

Dans le cas de l'injection d'oxygène liquide dans une chambre de combustion de moteur fusée, les gouttes de liquide et le gaz environnant n'ont pas la même vitesse (notamment juste après l'injection du liquide). Pour prendre en compte l'influence de la convection forcée, il faut multiplier le taux d'évaporation par un facteur ne dépendant que du nombre de Prandtl et du nombre de Reynolds :

$$\frac{d(d_k^2)}{dt} = -K_0 \times C(Re, Pr) \quad (5.39)$$

$$\text{avec } K_0 = 8 \frac{\rho_g D}{\rho_l} \ln(1 + B) \text{ et } C(Re, Pr) = 1 + 0.3\sqrt{Re}Pr^{1/3} \quad (5.40)$$

Cependant, B dépendant de la température du liquide, il faut donc, avant de pouvoir déterminer le taux d'évaporation, déterminer la température du liquide. Pour cela, on réalise un bilan d'énergie sur la goutte. La formulation CEDILLE du modèle d'évaporation est la suivante :

$$E_{\text{Stockage volumique}} - E_{\text{Transfert thermique}} + E_{\text{vaporisation}} = 0$$

$$\frac{4}{3}\pi r^3 \rho_l c_{pl} \dot{T}_l - 2\pi r \lambda^* \text{Nu} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} (T_g - T_l) + 2\pi r (\rho D) \text{Sh} L(T_l) = 0$$

$$\text{avec } \text{Nu} = 2\alpha^{-1.75} + 0.6 \sqrt{\frac{\text{Re}}{\alpha}} \text{Pr}^{1/3} \text{ et } \text{Sh} = 2 + 0.6 \sqrt{\text{Re}} S_c^{1/3}$$

$$\frac{d(r^2)}{dt} = -K \text{ avec } K = \frac{\rho_{dif}}{\rho_l} \text{Sh} \ln(1 + B_M)$$

$$T^* = \frac{T_g + 2T_l}{3}$$

avec le paramètre de transfert de masse B_M défini comme :

$$B_M = \frac{Y_S - Y_\infty}{1 - Y_S}$$

Ici, Y_∞ représente la fraction massique moyenne de l'espèce évaporante dans le volume de gaz associé au paquet numérique.

Modèle d'injection

L'injection du liquide se fait à travers un certain nombre d'injecteurs que l'on peut définir, et qui seront placés par le code sur des facettes d'éléments du maillage. L'injection peut donc aussi bien être réalisée à partir d'une face frontière que d'une face intérieure au domaine. Parmi les paramètres à définir, le débit doit être spécifié ainsi que les diamètres des différentes buses, les rayons de Sauter moyen des gouttes injectées. Le rayon des gouttes injectées suit en général une distribution en racine normale de paramètre 1,2 et de rayon moyen le rayon moyen de Sauter. On peut cependant aussi injecter des gouttes de rayon constant égal au rayon moyen de Sauter imposé. La température moyennes des paquets de goutte doit aussi être spécifiée. L'agitation turbulente des gouttes du paquet au moment de l'injection peut être définie au moyen de trois paramètres caractérisant le carré du diamètre du paquet (donc son étalement), l'énergie cinétique turbulente du paquet, et l'ellipticité de la fonction densité de probabilité.

Modèles d'atomisation primaire et secondaire

Dans le cas où on décide d'injecter de très grosses gouttes afin d'essayer de représenter un éventuel dard liquide, les modèles d'atomisation primaire décrivent la fragmentation primaire du jet, c'est-à-dire, la création de gouttes à partir de la colonne liquide issue de l'injecteur. Actuellement, deux modèles sont disponibles dans CEDILLE. Il s'agit du modèle de Faeth et al. [150] et du modèle de Huh et Gosman [151]. Contrairement au second modèle, le modèle de Faeth ne crée pas de gouttes. Il se contente, sur la base de critères géométriques et aérodynamiques de définir si la particule du dard liquide doit être ou non atomisée (atomisation secondaire) et si oui, de définir le diamètre des gouttes du paquet atomisé. L'originalité du modèle de Huh et Gosman est de lier l'amplitude de la perturbation initiale déstabilisant la surface

du liquide à des perturbations se situant dans l'injecteur. Il s'agit de déterminer les grandeurs caractéristiques du phénomène d'atomisation, son temps τ_A et sa longueur L_A , et de calculer alors l'angle du spray, le taux de décroissance de la turbulence vue par les gouttes mère injectées et la distribution de taille des gouttes filles arrachées.

L'atomisation secondaire peut être activée indépendamment de l'atomisation primaire. Si on décide de ne modéliser que l'atomisation secondaire, on indique le rayon moyen de Sauter des gouttes injectées. Actuellement, quatre modèles permettent de traiter l'atomisation secondaire ou "break-up".

- le modèle de Pilch et Erdmann [152],
- le modèle Reitz et Diwakar [153],
- le modèle de Faeth et al. [150],
- le modèle Taylor Analogy Breakup (TAB) importé de KIVA [154].

Ces différents modèles ne créent pas de nouvelles particules numériques. En revanche, ils produisent des gouttes de diamètre plus faible (le nombre de gouttes des paquets est augmenté pour conserver la masse).

Modèle de collision

Dans un nuage de gouttes, ces dernières sont susceptibles d'entrer en collision ou de percuter les frontières du domaine. Ceci a des conséquences sur le diamètre de la goutte et sur la dynamique de celle-ci. Plusieurs approches sont possibles pour traiter les collisions. Le modèle direct est basé sur le suivi particule par particule : la collision se produit lorsque la distance séparant deux gouttes est inférieure à la somme des deux rayons. L'approche stochastique consiste au préalable à déterminer la probabilité d'apparition d'une collision. La densité de collision entre goutelettes peut être estimée à partir de la théorie cinétique des gaz et une solution peut être obtenue sous plusieurs hypothèses :

- seules les collisions binaires apparaissent,
- le nombre de particules est suffisant pour permettre une étude statistique,
- les vitesses moyennes des particules en collisions sont identiques et les collisions sont gérées par le seul mouvement turbulent,
- les vitesses des particules ne sont pas corrélées,
- les fluctuations de vitesse sont localement isotropes.

Dans le logiciel CEDILLE, un paramètre d'impact est défini entre deux gouttes. Suivant la vitesse des deux gouttes, la collision peut conduire soit à une séparation soit à la coalescence totale (une coalescence partielle n'est pas prise en compte par CEDILLE) des deux gouttes.

Modèle de rebond

Il est rare qu'une goutte impacte une paroi mais le cas échéant, le transfert d'énergie n'est pas négligeable et doit être pris en compte. Watchers et Westerling [155] ont montré que le paramètre essentiel permettant de caractériser le comportement d'une goutte projetée sur une paroi est le nombre de Weber de la goutte, défini comme le rapport entre l'énergie cinétique de la goutte et l'énergie liée à la tension de la surface de celle-ci :

$$\text{We}_i = \frac{\rho_l D_p u_i^2}{\sigma_l}$$

où u_i désigne la composante normale de la vitesse incidente de la goutte calculée dans un repère lié à la paroi, et où les propriétés physiques ρ_l et σ_l (tension superficielle du combustible liquide) doivent être évaluées à la température de saturation du liquide. Le nombre de Weber conditionne directement les phénomènes qui ont lieu au moment de l'impact et permet de définir les conditions de rebond, d'écrasement ou de fragmentation de la goutte :

- $\text{We}_i < 5$: le choc peut être considéré comme élastique,
- $5 < \text{We}_i < 30$: la goutte rebondit sur la plaque sans éclater,
- $30 < \text{We}_i < 80$: la goutte subit des déformations importantes lors de l'impact mais retrouve une forme sphérique après le rebond. Elle ne se désintègre jamais pendant la période de contact avec la surface,
- $\text{We}_i > 80$: la goutte s'étale sur la paroi en formant un film avant de se scinder éventuellement en plusieurs goutelettes.

Plusieurs modèles sont disponibles dans CEDILLE afin de rendre compte de ces interactions : le modèle de rebond élastique, le modèle de rebond de Pilch et Erdman, et un modèle de rebond non élastique traduisant le ruissellement des gouttes le long de la paroi.

5.4.4 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre les méthodes numériques utilisées dans le code de calcul que nous employons pour la simulation numérique d'écoulements turbulents réactifs à masse volumique variable. Les outils de remaillage sont aussi présentés succinctement. Il s'agit maintenant de présenter les résultats des simulations visant à la validation du modèle de combustion que nous avons implanté dans *N3S-Natur*.

Chapitre 6

Présentation des cas tests de simulation numérique

Cette partie est consacrée à la présentation des résultats obtenus à l'issue des simulations numériques menées avec le code *N3S-Natur* dans lequel a été implanté le modèle de combustion turbulente présenté au quatrième chapitre. La flamme jet de Cheng et al.[156, 157] constitue une expérience tout à fait pertinente pour valider notre modèle. En effet, comme nous l'avons vu dans les premiers chapitres, l'allumage spontané peut intervenir dans une couche de mélange supersonique entre deux courants présentant un fort gradient de vitesses ou une température statique d'un des deux courants suffisamment élevée pour assurer la source d'énergie nécessaire au démarrage de la réaction. Cette configuration d'essais présente des niveaux de température totale suffisants qui permettent l'observation de l'allumage spontané, i.e., sans source extérieure d'énergie, et la stabilisation d'une flamme de diffusion décollée des lèvres de l'injecteur de combustible. Nous présenterons les résultats de la simulation numérique de ce cas test dans une première partie.

Dans une seconde partie, nous présenterons les résultats de la simulation d'un second cas test : le cas test expérimental de Waidmann [158]. Il s'agit d'une chambre de combustion de type Scramjet. Dans cette étude, les niveaux de température totale sont trop faibles pour assurer l'allumage spontané. L'allumage est assuré par dépôt d'énergie. En fait, l'intérêt de ce cas test réside plutôt dans les structures compressibles qui apparaissent au sein de l'écoulement : la zone de possible combustion est fortement influencée par l'interaction d'ondes de choc obliques réfléchies par les parois, ce qui nécessite une bonne discrétisation du domaine. Le mélange et donc la combustion sont susceptibles d'être fortement influencés par ces structures. Nous présenterons les résultats des simulations numériques non-réactive et réactive pour lesquelles la méthode de ré-adaptation de maillage a montré toute son efficacité.

6.1 La flamme jet de Cheng

Les résultats reportés dans cette section ont fait l'objet d'une publication à paraître dans *Combustion Science and Technology* [159]. Ils ont aussi été présentés lors des congrès ISIS 18 2008 [160] et INCA 2008 [161].

6.1.1 Description du cas test

Ce montage expérimental a été largement utilisé [162, 163, 23] comme un cas test pertinent pour la modélisation et la simulation numérique de la combustion turbulente. Il s'agit d'un brûleur présentant des vitesses d'injection supersoniques et qui produit un premier jet central d'hydrogène sonique entouré d'un co-courant annulaire axisymétrique d'air vicié chaud à Mach 2.

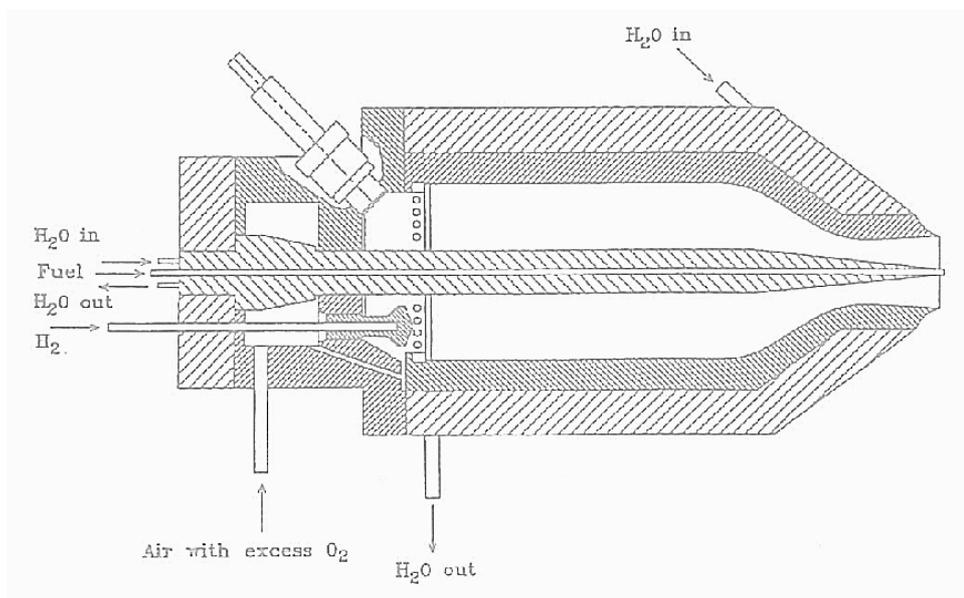


FIGURE 6.1: Schéma du montage expérimental pour le cas test de Cheng.

Le co-courant d'air vicié forme donc le courant d'oxydant pur : il est constitué des produits d'une première combustion en excès d'oxygène interne au brûleur qui sont ensuite accélérés au travers d'une tuyère convergente-divergente pour atteindre Mach 2 et une température statique de 1250K. La température totale du co-courant ainsi formé atteint 2250K. Une telle valeur est suffisante pour promouvoir, la stabilisation de la flamme non-prémélangée via les mécanismes d'augmentation de température induite par la dissipation visqueuse discutés plus haut dans l'exposé. Les deux courants sont injectés dans l'atmosphère ambiante avec des pressions légèrement supérieures à 1bar, ce qui devrait se traduire par l'observation d'un système d'ondes de compression et d'expansions successives d'assez faible amplitude. Les conditions expérimentales

sont rassemblées dans le tableau 6.1. Les conditions aux limites pour l'énergie cinétique turbulente et sa dissipation ont été prescrites en imposant une intensité de turbulence $\sqrt{k}/|\tilde{u}|$ de 1% dans chaque courant comme cela a été fait dans les travaux de Baurle et al.[163].

Paramètres géométriques	
Diam. int. de la couronne d'air vicié	17.78 mm
Diam. ext. de l'injecteur H2	2.36 mm
Diam. int. de l'injecteur H2	3.81 mm
Conditions d'entrée de l'air vicié	
Pression	107 kPa
Température	1250 K
Nombre de Mach	2.0
Vitesse	1420 m/s
Fraction massique en oxygène	0.201
Fraction massique en diazote	0.544
fraction massique en eau vapeur d'eau	0.255
Conditions d'entrée du carburant	
Pression	112 kPa
Température	545 K
Nombre de Mach	1.0
Vitesse	1780 m/s
Fraction massique en hydrogène	1.0

TABLE 6.1: Conditions d'entrée pour la flamme jet de Cheng et al. [156].

6.1.2 Données et observations expérimentales

Le cas test de Cheng est un cas très bien documenté. Des mesures Raman UV ont été réalisées dans la direction radiale en plusieurs positions : 500 à 2000 tirs laser indépendants ont été effectués de manière à obtenir des profils moyens et RMS de la fraction de mélange, de la température, et des fractions molaires des différentes espèces principales, O_2 , N_2 , H_2 , H_2O , mais aussi le radical OH . Pour cette expérience, l'axisymétrie reste imparfaite compte tenu des difficultés associées à l'installation et de l'expansion thermique du jet principal de carburant dans le jet vicié d'air chaud. Dans les données expérimentales, le centre du jet ($y=0$) est considéré comme la position où la fraction de mélange est maximale et la fraction molaire d'azote minimale, ce qui peut expliquer quelques légers décalages ou dissymétries résiduels dans les profils expérimentaux qui seront présentés par la suite. Cette légère dissymétrie est observable sur la photographie présentée Fig.6.4. Voici ce qui a été observé expérimentalement aux différentes

positions le long de l'axe principal x , adimensionnées par le diamètre D de l'injecteur H_2 :

Position $x/D=0.85$: Il ne se produit aucune réaction en cette position proche des injecteurs. Seul le mélange des réactifs se produit dans la zone de cisaillement, que l'on peut visualiser par deux extrêmes de température sur les profils RMS de température. Notons que les profils RMS montrent deux pics "extérieurs" qui caractérisent un mélange avec l'air ambiant dès cette position.

Position $x/D=10.8$: De petites quantités de O_2 , N_2 , H_2O sont détectées dans le jet central d'hydrogène dues plus à un entrainement d'air vicié qu'à une réelle réaction chimique. Cependant, une petite quantité d' OH est décelée dans la région d'air vicié ; elle est susceptible d'être le produit des premières réactions d'initiation de l'oxydation de l'hydrogène. L'auto-allumage est ainsi observé à partir de cette position.

Positions $x/D=21.5$ et $x/D=32.3$: La réaction chimique a lieu et la flamme est stabilisée autour de cette position. Des clichés photographiques à longue exposition ont été reportés par Cheng et ses collaborateurs [157] et on peut observer un maximum d'intensité au voisinage de la position $x/D=25$. Notons que la présence de multiples ondes de pression a tendance à perturber l'axisymétrie des deux jets.

Position $x/D=43.1$: Les maxima de température et de fraction molaire d' OH sont obtenus sur l'axe $y = 0$. Le profil de concentration d' O_2 montre que les molécules d' O_2 sont presque entièrement consommées au centre du jet.

Positions $x/D=64.6$ et 86.1 : Les molécules d'hydrogène ont été consommées. Un excès de molécules d'azote provenant de l'air ambiant a diffusé vers le centre du jet. La concentration en radicaux OH diminue et on peut penser que la composition est localement proche des conditions d'équilibre. Néanmoins, les valeurs RMS mesurées indiquent que les fluctuations de concentration et de température des différentes espèces peuvent atteindre respectivement 20 et 40 pourcents. La non-prise en compte de l'effet de ces fluctuations sur le taux de réaction chimique, c'est-à-dire négliger tout à fait les fluctuations de sous-maille, est donc susceptible d'entraîner des erreurs grossières sur la prédiction de l'écoulement réactif. Appliquer directement une cinétique chimique détaillée aux quantités moyennes ou filtrées, comme cela se pratique couramment en matière de combustion supersonique, semble donc *a priori* inadapté. Cela confirme aussi la pertinence de notre approche basée sur la PDF scalaire qui est à même de prendre en compte de telles fluctuations.

6.1.3 Domaine de calcul

Le domaine de calcul et le type de conditions aux limites employé sont reportés Fig. 6.2. Le maillage est un maillage non-structuré, très reserré dans la zone centrale et au voisinage de l'injecteur de manière à pouvoir capturer la fine couche de cisaillement qui se développe à la confluence de ces deux jets. Il est composé de 35400 noeuds et de 70000 mailles. La taille des mailles augmente de manière significative à mesure que l'on s'éloigne de l'axe de symétrie de manière à obtenir une zone tampon suffisamment éloignée de la zone de mélange, c'est-à-dire à l'endroit où la flamme se stabilise, cf. Fig.6.2. L'espacement minimum entre deux noeuds est de 0,06 mm et atteint 1 mm dans la zone tampon. De plus, le traitement des conditions limites est simplifié : l'emploi de parois pour les conditions aux limites latérales augmente la vitesse de convergence vers l'état stationnaire et nous évite certaines difficultés numériques qui peuvent apparaître avec l'utilisation de conditions aux limites "ouvertes".

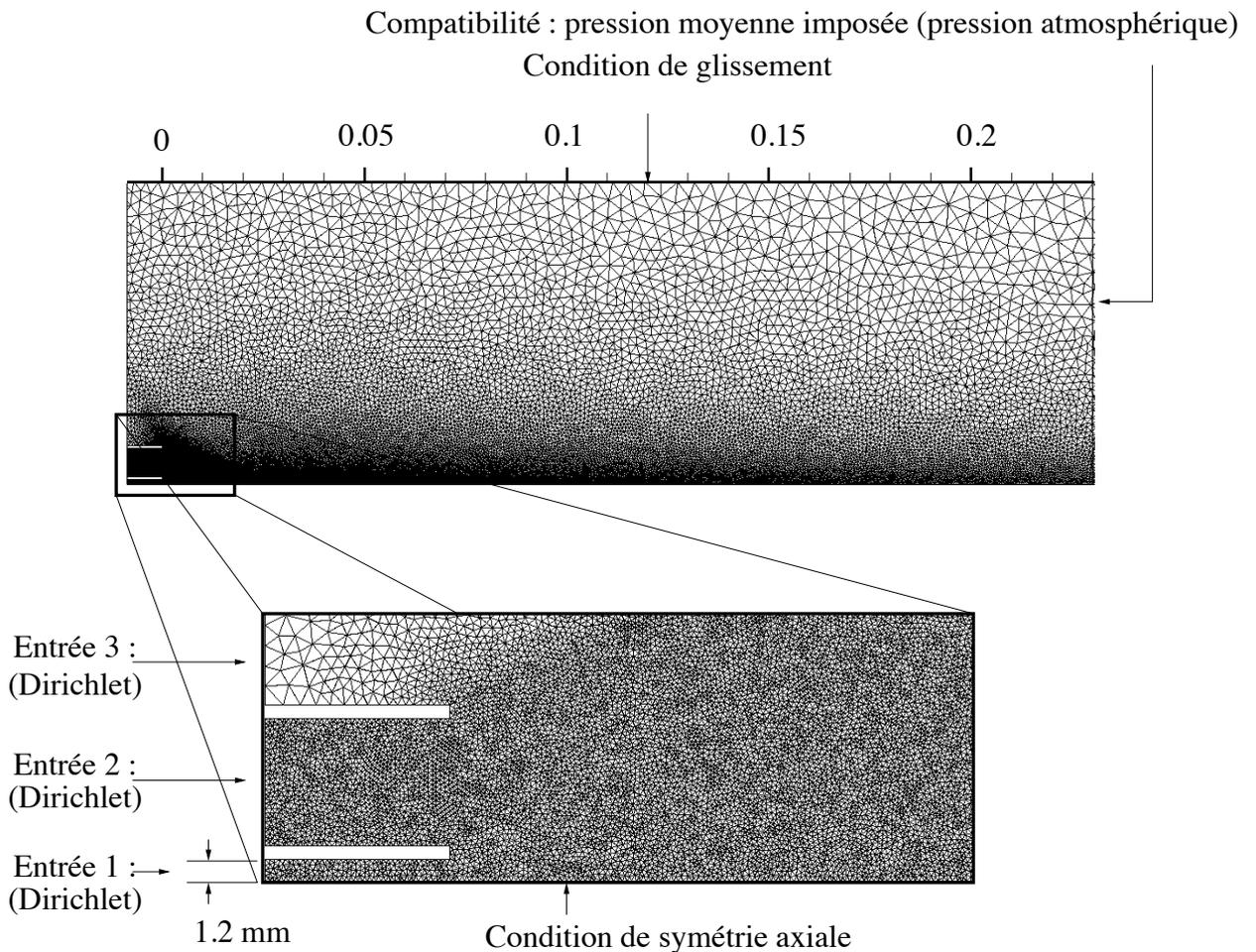


FIGURE 6.2: Domaine de calcul et maillage utilisés pour la simulation numérique du cas test de Cheng et al. [156].

6.1.4 Résultats qualitatifs : auto-allumage et décollement de flamme

Le premier point intéressant est que les résultats de la simulation numérique démontrent la capacité du modèle proposé à rendre compte des deux principales caractéristiques de cette configuration de jet supersonique, à savoir : (i) le décollement de la flamme, et (ii) l'importance du phénomène d'auto-allumage dans le processus de stabilisation de celle-ci. La capacité du modèle à traiter des effets de chimie finie et les fluctuations d'espèces et de vitesse permet d'obtenir une zone de décollement dans l'espace physique, où les phénomènes associés au mélange moléculaire et à la convection sont si importants que la flamme non-prémélangée ne peut s'y maintenir. Trois zones distinctes ont été délimitées sur la Fig.6.3, suivant que la combustion turbulente est entretenue par des phénomènes d'auto-allumage ou non. La première zone correspond à la zone d'induction ; c'est la plus proche des injecteurs : aucune réaction significative n'y est observée. Un peu plus loin des injecteurs, de $x/D=4$ à $x/D=10$, une zone mince au sein de laquelle les effets visqueux sont à l'origine de phénomènes d'auto-allumage a pu être mise en évidence. Dans la troisième région, la baisse d'intensité du mélange turbulent et la présence de gaz brûlés chauds rendent possible la stabilisation d'une flamme de diffusion turbulente.

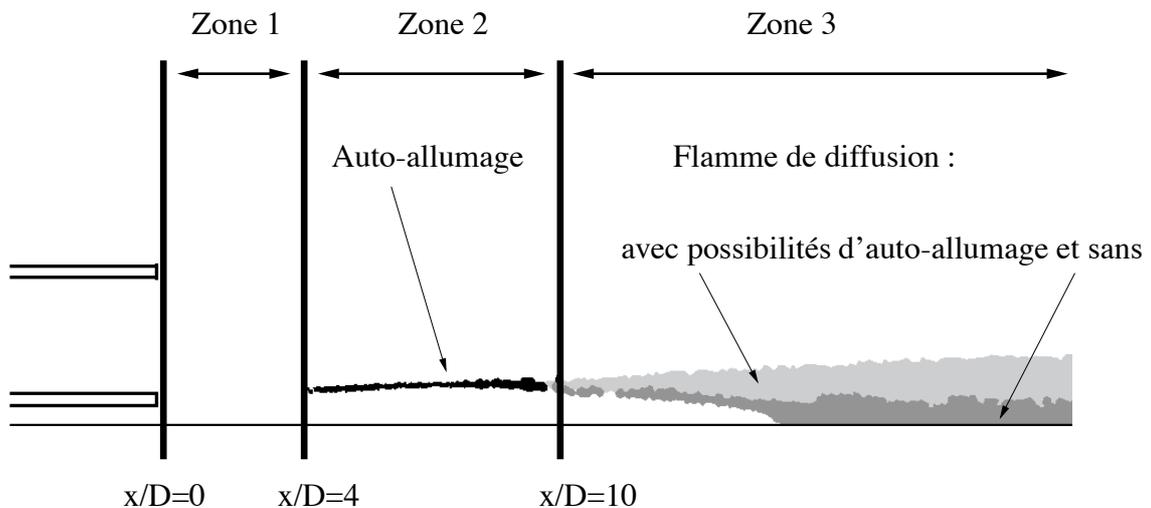


FIGURE 6.3: Délimitation de trois zones distinctes pour le taux de production chimique $\tilde{\omega}_Y$: la flamme non-prémélangée est liftée en zone 1 ($\tilde{\omega}_Y=0$), la combustion turbulente est entretenue par les seuls phénomènes d'auto-allumage en zone 2, et finalement, la conversion des réactifs en produits de combustion résulte à la fois des processus d'auto-allumage et de la flamme de diffusion en zone 3.

La comparaison directe des résultats numériques avec les données expérimentales n'est pas évidente mais, on peut néanmoins dégager quelques similitudes. Les premières molécules de radical hydroxyle OH détectables ont été observées expérimentalement pour $x/D=10.8$. On peut faire un parallèle entre cette observation et la montée en température obtenue avec la simulation

numérique autour de cette position et les trois zones évoquées précédemment. Sur la photographie à longue durée d'exposition obtenue expérimentalement, Fig. 6.4, la hauteur de décollement a été estimée autour de $x/D=25$, position correspondant au saut d'intensité lumineuse émis dans le visible [156]. Une comparaison avec le champ de température moyenne obtenu numériquement montre un bon accord qualitatif avec cette valeur expérimentale, puisque le même saut d'intensité serait clairement obtenu autour de $x/D=25$, si l'on intégrait la solution axisymétrique sur 360 degrés.

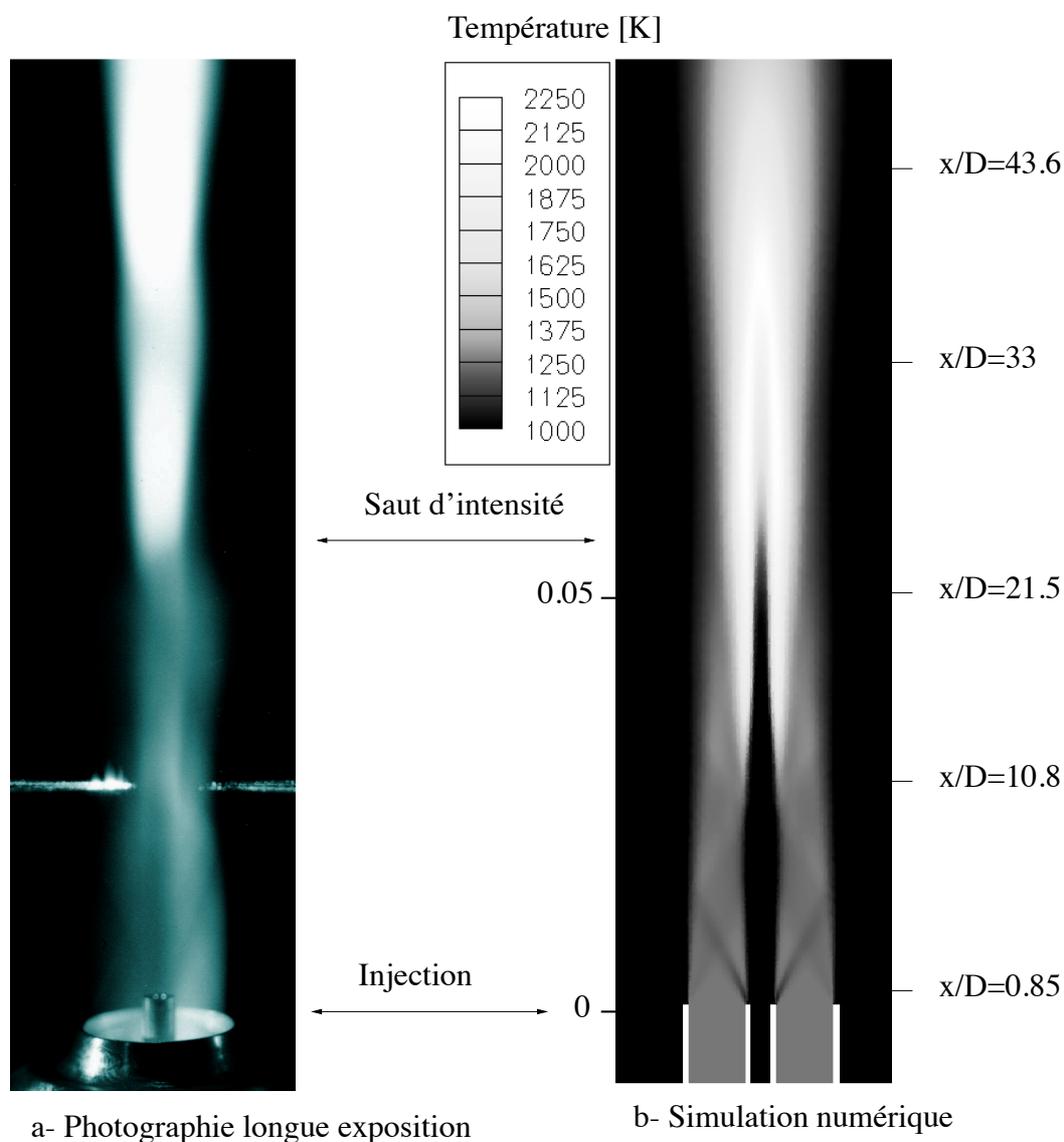


FIGURE 6.4: Comparaison qualitative de la hauteur de lift-off obtenue par l'expérience (a) et par la simulation numérique (b).

6.1.5 Courbes quantitatives

L'accord qualitatif précédemment observé est aussi confirmé par une comparaison plus quantitative des résultats de la simulation numérique avec les données expérimentales. Les figures 6.5 et 6.6 montrent respectivement une comparaison des profils de température moyenne et des profils de fraction massique moyenne de l'espèce H_2O avec les données expérimentales pour quatre positions en aval de la sortie d'injecteur.

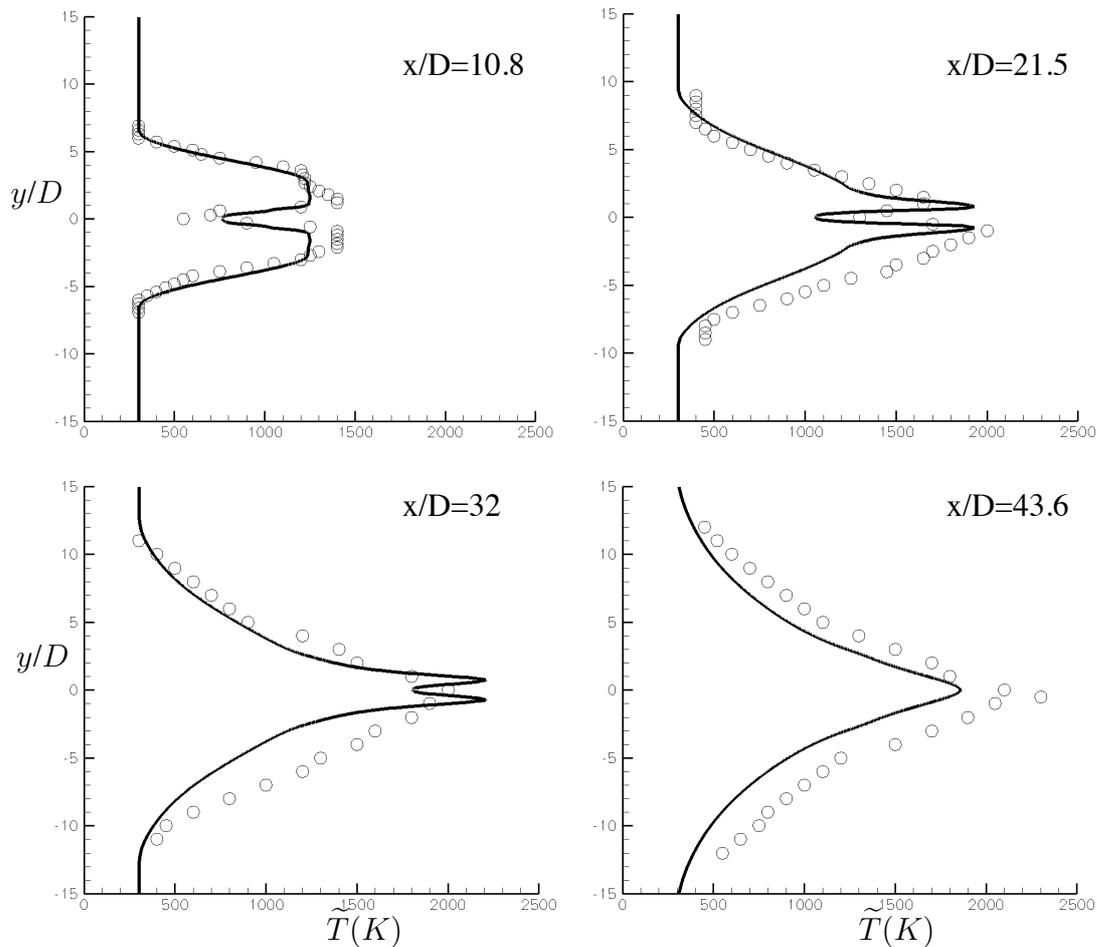


FIGURE 6.5: Comparaison entre les profils issus de la simulation numérique (lignes) et expérimentaux (cercles) pour la température totale moyenne, pour différentes positions x/D en aval des injecteurs.

Même si un bon accord quantitatif ressort de ces comparaisons, les profils obtenus pour la position $x/D=43$ montrent que la longueur de la flamme de diffusion est légèrement sous-estimée par rapport à l'expérience. Il faut remarquer que cette tendance a aussi été signalée dans de précédentes simulations numériques de ce montage expérimental [162, 163, 23]. Néanmoins, l'une des raisons possibles est directement liée aux conditions d'entrée. Comme conseillé dans

les travaux de Cheng et al.[157], les données expérimentales obtenues en $x/D=0,85$ sont utilisées comme conditions d'entrée pour la simulation numérique. Mais le rapport de pressions de fonctionnement donne lieu à une expansion du jet directement suivie par une soudaine décroissance en vitesse. La différence qui en résulte en $x/D=0,85$ peut atteindre environ 15 %, ce qui est suffisant pour expliquer les différences observées entre les résultats de la simulation numérique et les données expérimentales.

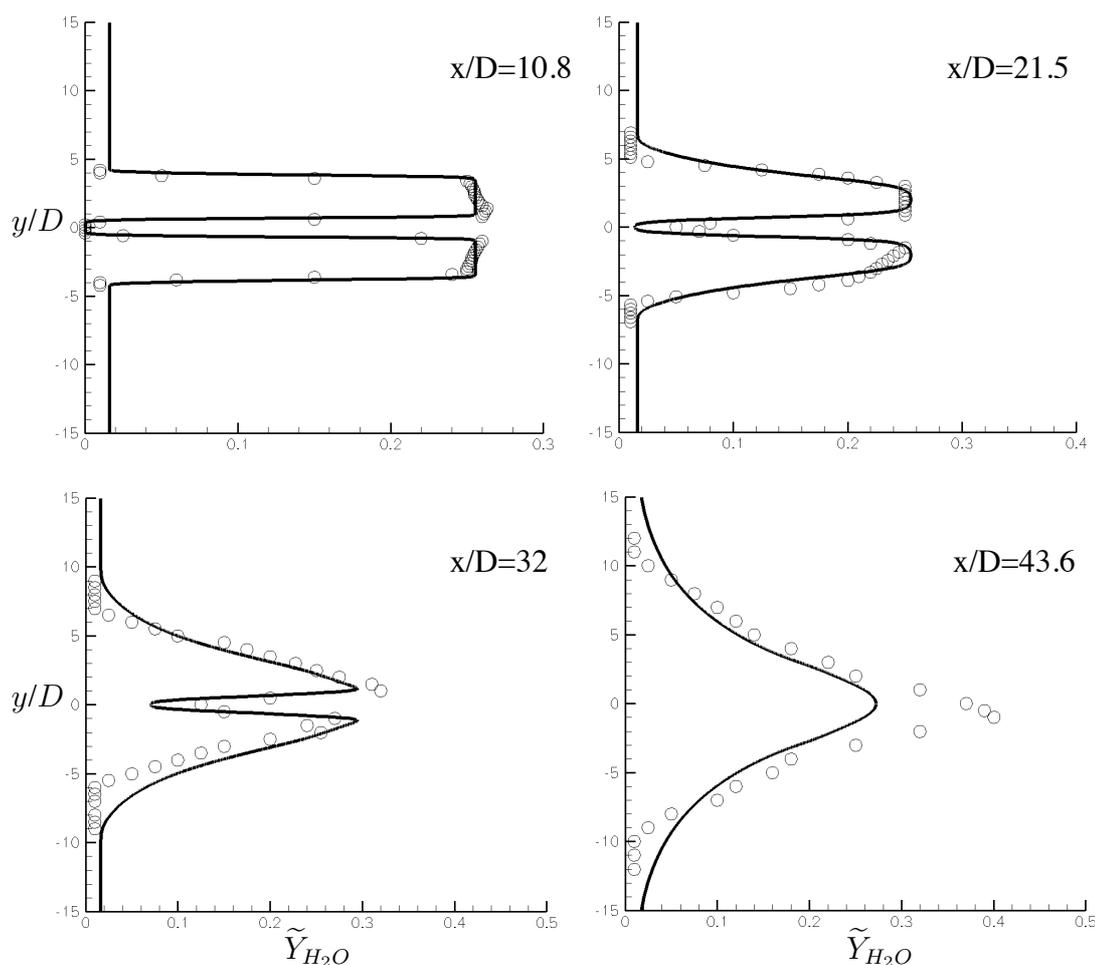


FIGURE 6.6: Comparaison entre les profils issus de la simulation numérique (lignes) et expérimentaux (cercles) pour la fraction molaire moyenne de vapeur d'eau, pour différentes positions x/D en aval des injecteurs.

6.1.6 Conclusions à l'issue de la simulation numérique

La combustion supersonique non-prémélangée dans une géométrie de jets cocourants a été calculée avec succès. Une synthèse des résultats obtenus sur ce cas test vient d'être acceptée pour publication dans *Combustion Science and Technology*. La qualité de la prédiction en

termes de hauteur de décollement de la flamme et de profils de température moyenne est tout à fait comparable aux résultats assez récents obtenus lors de précédentes études basées sur des PDF présumées à paramètres multiples [164], ou bien par le biais de la résolution beaucoup plus coûteuse d'une équation de PDF jointe scalaire-vitesse-fréquence par le biais d'une méthode de Monte Carlo [162]. Nous poursuivons la présentation de la validation du modèle de combustion turbulente, avec les résultats de la simulation numérique du cas test de Waidmann représentatif de la combustion dans une chambre de type Scramjet.

6.2 Modèle de Scramjet de Waidmann

Ces résultats ont été présentés lors des congrès ISIS 18 et AIAA Pegasus Conference tenus respectivement en 2008 et 2009.

6.2.1 Description du montage expérimental

Les essais expérimentaux ont été menés à l'Institut de Recherche en Chimie pour la Propulsion par les équipes du Centre Aéronautique Allemand (DLR) [158]. Une représentation du dispositif d'essais est reportée Fig.6.7 : de l'air préchauffé s'expand à travers une tuyère de Laval et entre dans la chambre de combustion avec un nombre de Mach égal à 2. Cette chambre est constituée de deux parties : une première partie en sortie de la section de Laval de section 45 x 50 mm droite, et d'un canal dont un seul côté est divergent. Au centre de ce canal se trouve un dièdre de 32mm de longueur et de demi-angle 6 degrés, au niveau duquel l'hydrogène est injecté au moyen de 15 trous de diamètre 1mm. Les détails géométriques de la chambre de combustion sont donnés Fig.6.8.

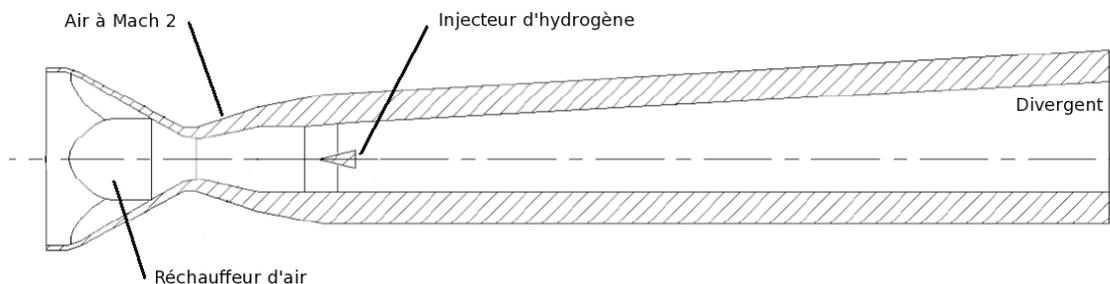


FIGURE 6.7: Montage expérimental du banc M11.

Nous allons effectuer des simulations numériques bidimensionnelles de cette chambre de combustion. Le choix de modéliser un cas 2D ne doit pas se faire sans garder en mémoire les spécificités du cas réel. En effet, l'expérience menée en laboratoire est réalisée avec 15 injecteurs circulaires situés sur l'arrière du dièdre injecteur et on sait que le facteur d'expansion

de ces jets est différent de celui d'un injecteur fente. De plus, la distance séparant deux trous consécutifs est de 2.4 mm : une éventuelle interaction entre jets ne sera pas observée par un calcul 2D tel que nous le faisons. Néanmoins, comme nous allons le constater dans ce qui suit, le calcul 2D est capable de restituer une très grande partie des phénomènes aérodynamiques et ce, à un coût informatique bien moindre que la simulation tridimensionnelle correspondante. On notera, en outre, que les études numériques déjà menées sur ce cas test ont elles aussi été conduites en deux dimensions.

6.2.2 Domaine de calcul et conditions aux limites

Nous avons employé plusieurs conditions aux limites. Le domaine de calcul est représenté Fig.6.9. Les entrées 1 et 2 ont été imposées par des entrées de type supersonique pour lesquelles la pression statique, la température statique, la vitesse ainsi que les variables de turbulence (k et ε) ont été fixées par des conditions de type Dirichlet. La sortie 3 est une sortie de type compatibilité pour laquelle seule la pression statique est fixée. Les parois ont été modélisées par des conditions de glissement $\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$. Les conditions de simulation sont rappelées dans le tableau 6.2. Elles sont identiques à celles figurant dans l'article de Oevermann [165] qui a mené une simulation numérique du même cas-test.

	Air	Hydrogène
Ma	2.0	1.0
\tilde{u} [m/s]	730	1200
\tilde{T} [K]	340	250
\bar{p} [10^5 Pa]	1	1
$\bar{\rho}$ [kg/m^3]	1.002	0.097
\tilde{Y}_{O_2}	0.232	0
\tilde{Y}_{N_2}	0.736	0
\tilde{Y}_{H_2O}	0.032	0
\tilde{Y}_{H_2}	0	1
k [m^2/s^2]	10	2400
ε [m^2/s^3]	650	10^8

TABLE 6.2: Conditions aux limites retenues pour la simulation numérique.

Un premier calcul réalisé avec un maillage uniforme nous a permis de positionner les chocs, confirmant les relations théoriques de calculs de choc oblique, et nous a permis de raffiner localement aux endroits du choc attaché à l'extrémité du dièdre central ainsi qu'au voisinage de l'injection d'hydrogène afin de mieux rendre compte des gradients qui existent entre les zones de recirculation et le courant d'hydrogène. Le maillage final, reporté Fig.6.9, a été obtenu grâce

à la méthode de ré-adaptation présentée dans le chapitre précédent en se basant sur le champ local de densité, ce qui nous a permis de le raffiner à la fois au niveau des discontinuités et dans la couche de mélange Hydrogène-Oxygène, puisque les variations de densité entre l'air et l'hydrogène sont très importantes (rapport 10). Cette technique s'avère très efficace en termes de rapport qualité / coût. En effet, il est possible, rien qu'en observant le maillage, de repérer les structures complexes de l'écoulement : ondes de choc, ondes de détente, réflexions de parois et interactions entre discontinuités et flux central d'hydrogène sont très bien capturées.

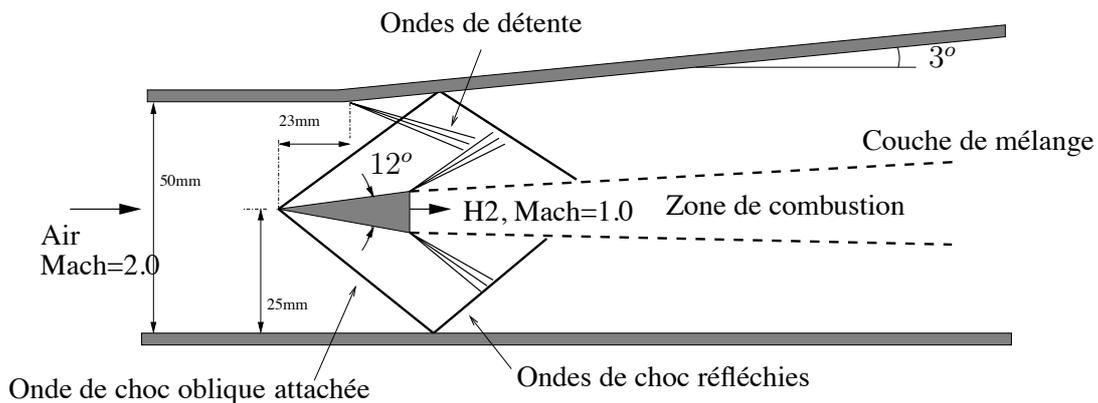


FIGURE 6.8: Schéma de la chambre de combustion de type Scramjet du DLR.

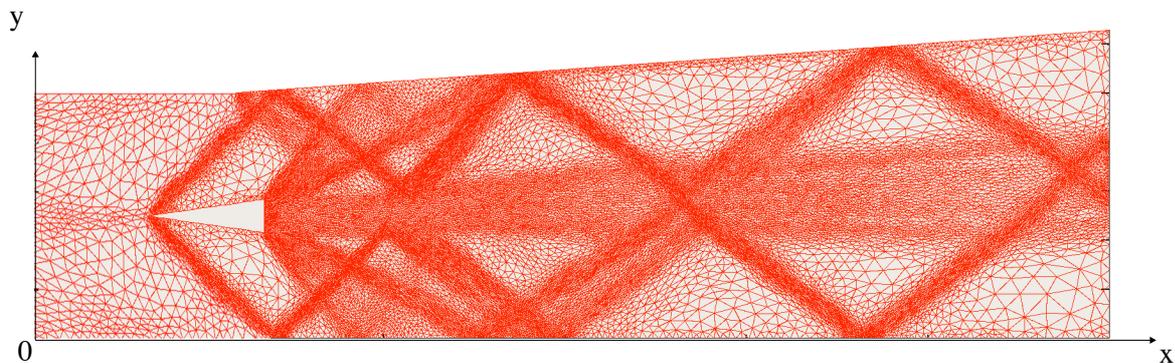


FIGURE 6.9: Maillage final retenu pour les simulations non réactives (45000 mailles)

6.2.3 Résultats de la simulation numérique non-réactive

La simulation numérique de cette configuration se déroule en deux étapes. La première a pour but l'établissement de l'écoulement stationnaire. La comparaison d'une image tirée de l'expérience avec le profil des lignes isobares obtenu avec notre simulation montre que nous arrivons à prédire la majorité des phénomènes physiques prépondérants. Fig.6.10, on distingue parfaitement l'interaction entre les réflexions d'ondes de choc et le jet central d'hydrogène.

Cette interaction a été étudiée, entre autres, par Fujimori et al. [6], notamment pour analyser son influence sur les caractéristiques de stabilisation d'une flamme non-prémélangée. Nous en parlerons un peu plus tard dans la présentation. On peut aussi voir sur cette figure l'interaction de la zone subsonique avec les ondes de choc : la zone subsonique agit un peu comme une paroi et réfléchit le choc issu de la partie supérieure qui rejoint l'onde de recompression en $x = 135\text{mm}$. Plus loin, à environ $x=175\text{mm}$, dans une zone où le jet est supersonique, les ondes sont simplement déviées, voir Fig.6.12. On peut aussi observer Fig.6.11 la forme du jet sous-détendu d'hydrogène en sortie d'injecteur et le disque de Mach qui se forme en aval. La qualité du remaillage nous permet d'observer cette caractéristique, ainsi que les zones de recirculation qui se trouvent derrière le dièdre.

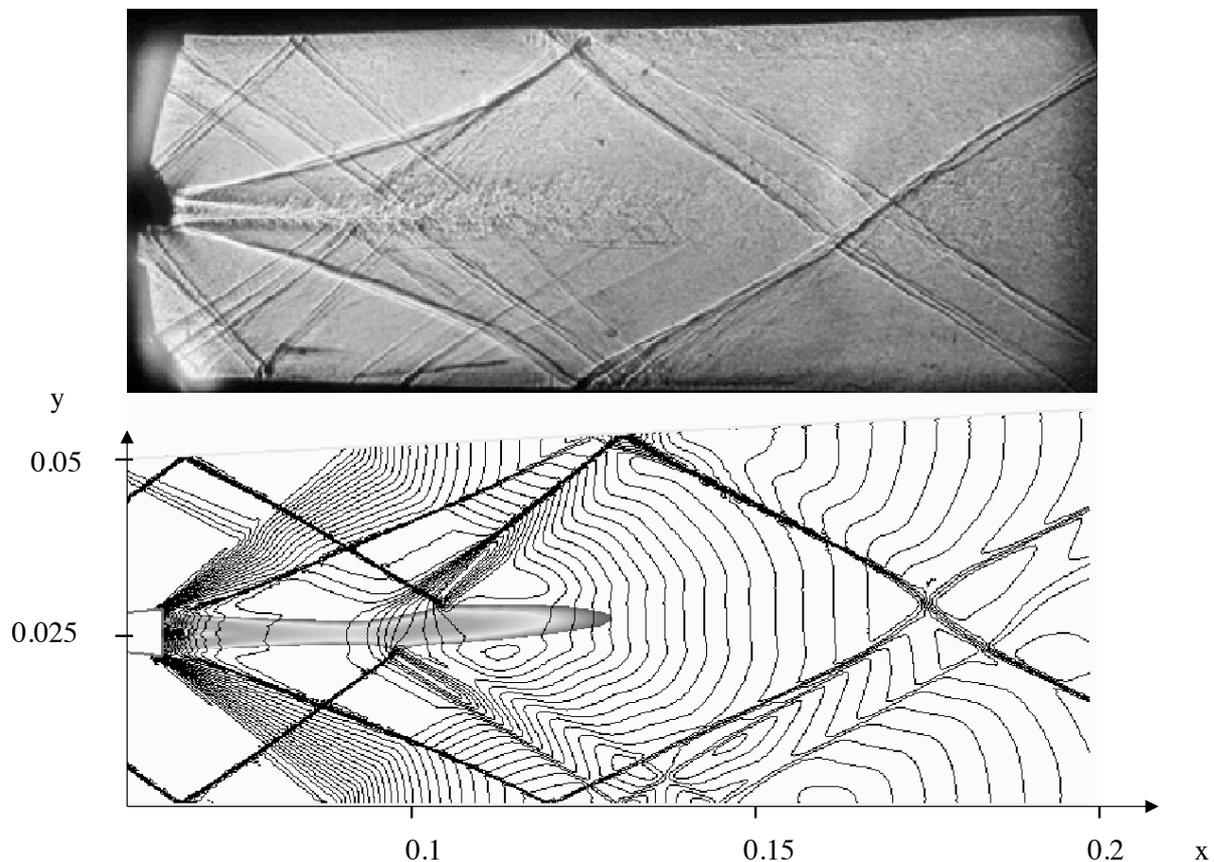


FIGURE 6.10: Schlieren de l'écoulement non réactif (en haut) et isolignes de pression obtenues à l'issue de la simulation numérique (en bas). La zone grisée correspond à la partie subsonique de l'écoulement.

On remarque que, du fait que la seule paroi supérieure constitue le divergent, la réflexion de l'onde "supérieure" intervient avec un angle plus important que celle de l'onde "inférieure", conduisant ainsi à un écoulement dissymétrique. On peut aussi voir sur la Fig.6.10 que le jet d'hydrogène n'est plus sonique mais qu'il le redevient à partir de $x=125\text{mm}$. Qualitativement,

les profils de pression reportés Fig.6.12 suivent bien l'allure générale des profils expérimentaux, mais les niveaux maximum et minimum ne sont pas parfaitement bien restitués. Plusieurs raisons peuvent expliquer ces différences : effets tridimensionnels, mauvaise représentation des interactions couche limite / onde de choc à la paroi, ou encore l'altération de la mesure à la paroi par des effets de couche limite. Ceci est d'autant plus discutable que l'accord entre expérience et simulation est raisonnablement bon en ce qui concerne les profils de vitesse reportés Fig.6.13 : les niveaux sont bien représentés et l'allure bien que décalée vers la paroi supérieure du canal est bien restituée par la simulation. A noter que ce léger décalage a aussi été observé lors de précédentes simulations numériques menées par Oevermann et al.[165], Wepler et Koschel [166] ou encore Berglund et Fureby [167]. Qualitativement, on voit bien qu'immédiatement après l'injecteur, le jet d'hydrogène est fortement ralenti, décélérant de 2000 m/s à 1200 m/s par le biais d'une onde de choc, visible sur la courbe d'isobares Fig.6.10.

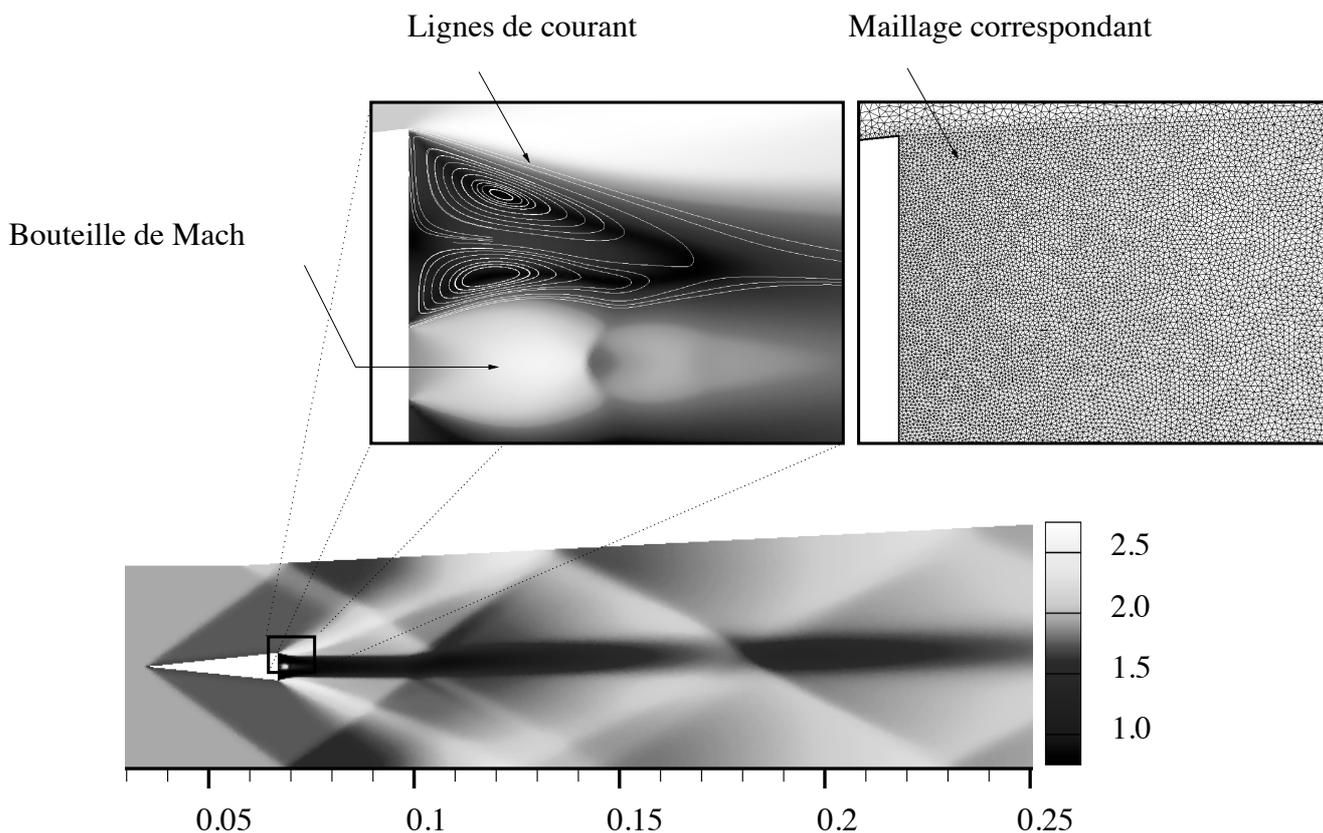


FIGURE 6.11: Champ du nombre de Mach et zones de recirculation en aval du diedre injecteur. Le maillage de la zone correspondante est aussi représenté.

En ce qui concerne les fluctuations de vitesse, représentées Fig.6.14, les niveaux ne sont pas correctement reproduits et l'allure des profils correspondant semble décalée vers le haut. Cela étant, la comparaison ne peut être que qualitative car les données expérimentales moyennes ne sont pas définies de la même manière que les fluctuations v' que nous avons définies comme $v' = \sqrt{2k/3}$ avec une hypothèse de turbulence isotrope $k = \overline{\rho u_i'' u_i''} / 2\rho$ avec $\overline{\rho u_1'' u_1''} = \overline{\rho u_2'' u_2''} = \overline{\rho u_3'' u_3''}$. L'allure générale est bien respectée mais les niveaux sont décalés : on peut estimer que les niveaux sont sur toute la largeur du canal deux fois plus élevés que dans l'expérience. Cependant, nous ne disposons que de champs expérimentaux loin de l'injecteur et, qui plus est, dans une zone de discontinuités où il est très difficile de restituer parfaitement les niveaux. Nous n'avons pas pu, faute de données expérimentales, comparer nos données de simulation dans une zone plus proche de l'injecteur, comme cela a pu être fait dans les cas réactifs reportés dans la suite de l'exposé. Le champ de température nous renseigne sur les amplitudes des variations au passage d'une discontinuité, variations qui sont susceptibles de promouvoir les réactions chimiques. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 3, la seconde limite d'inflammabilité est très sensible à une perturbation de pression et une augmentation locale de la température. Dans le jet central d'hydrogène, Fig.6.15, on remarque deux points dans la couche de cisaillement en interaction avec les ondes de choc réfléchies pour lesquels l'augmentation de température est de l'ordre de 70K. Ces points ne sont pas très éloignés de la stoechiométrie et sont soumis à un fort cisaillement : ils représentent typiquement des points d'auto-allumage possibles. Néanmoins, la température locale ne dépasse pas 450K, et aucun allumage spontané n'est observé lors de l'expérience.

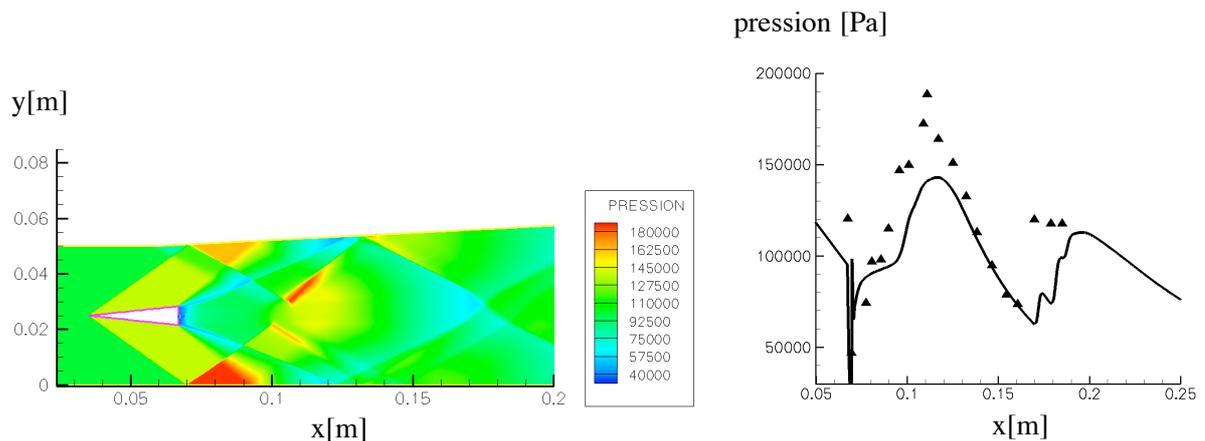


FIGURE 6.12: Champ de pression pour la simulation non-réactive et profil de pression dans la direction principale de l'écoulement le long de la coordonnée $y=25\text{mm}$.

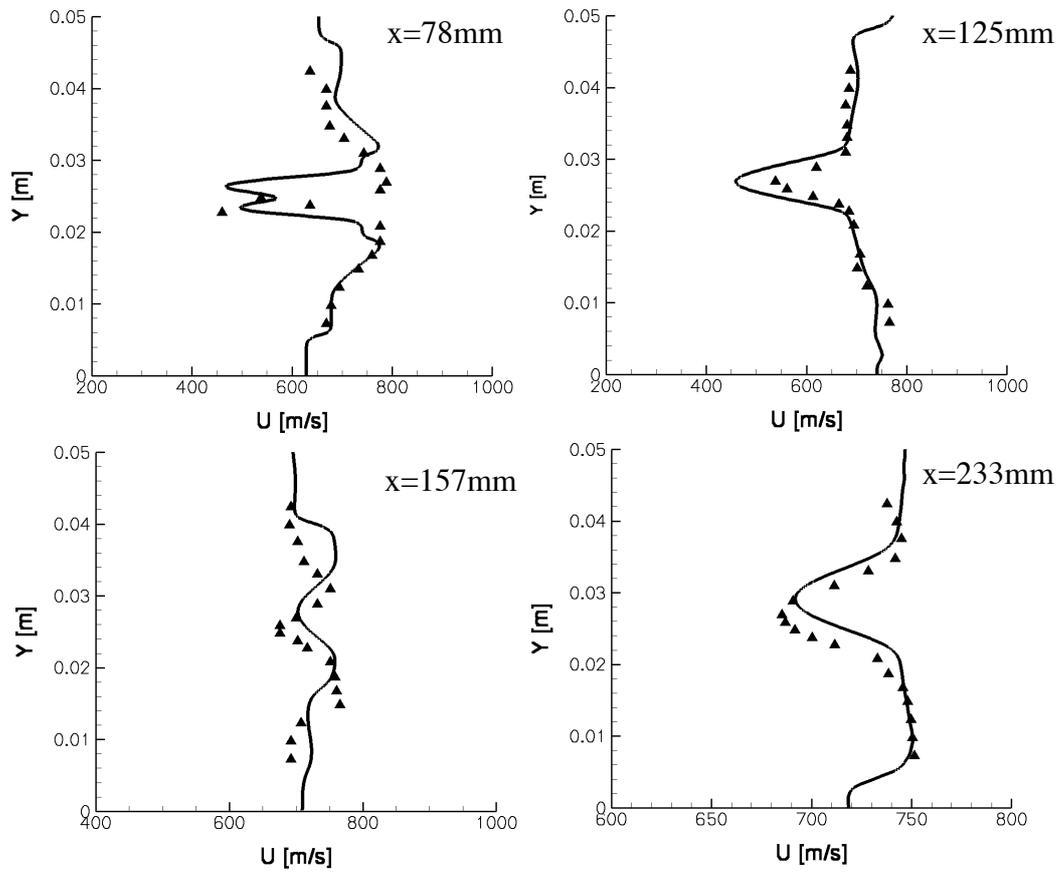


FIGURE 6.13: Profils transverses de vitesse pour différentes positions x .

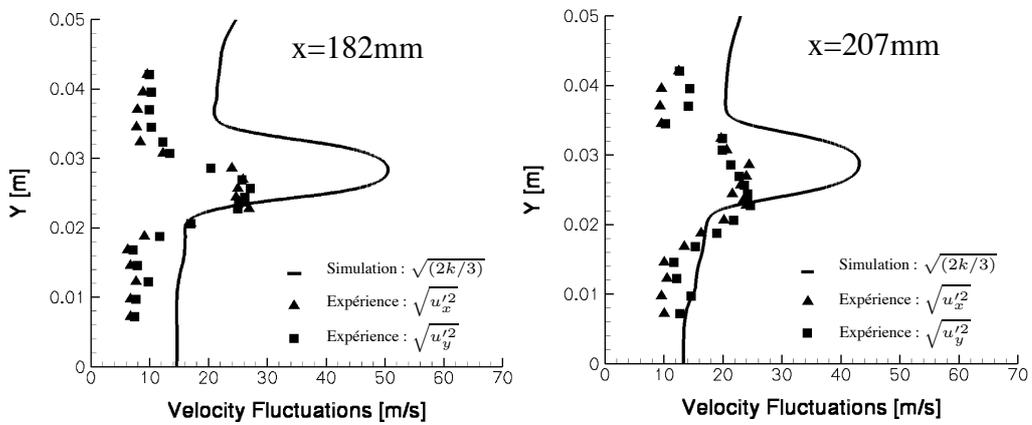


FIGURE 6.14: Profils de fluctuations de vitesse pour deux positions x .

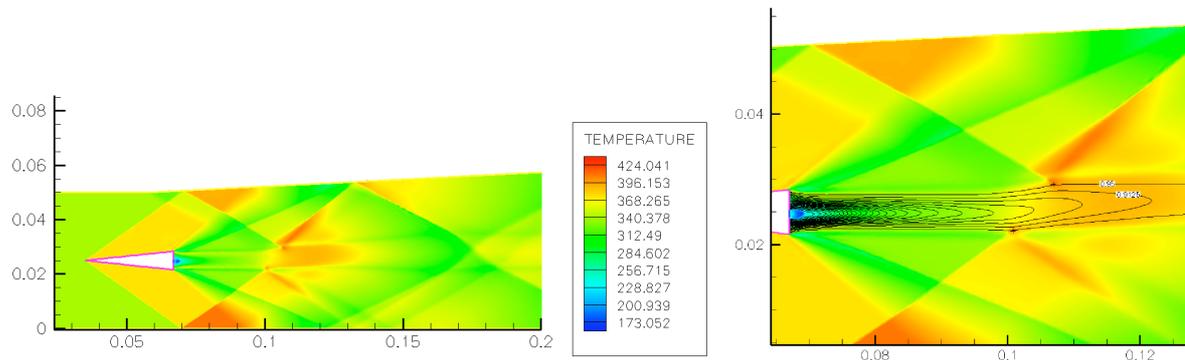


FIGURE 6.15: Champ de température dans la chambre et au voisinage de l'injecteur. Les iso-lignes sont les isovaleurs de la fraction massique en oxygène.

6.2.4 Résultats de la simulation numérique en réactif

Maillage utilisé pour la partie réactive

Le maillage a été aussi ré-adapté à l'issue d'une première simulation réactive. Nous présentons Fig.6.16 le maillage final, constitué de 45000 mailles, avec lequel les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus. La courbure du champ de densité reste un bon critère en réactif. N'oublions pas qu'un écoulement réactif est avant tout un écoulement présentant des variations de densité dues aux gaz chauds produits.

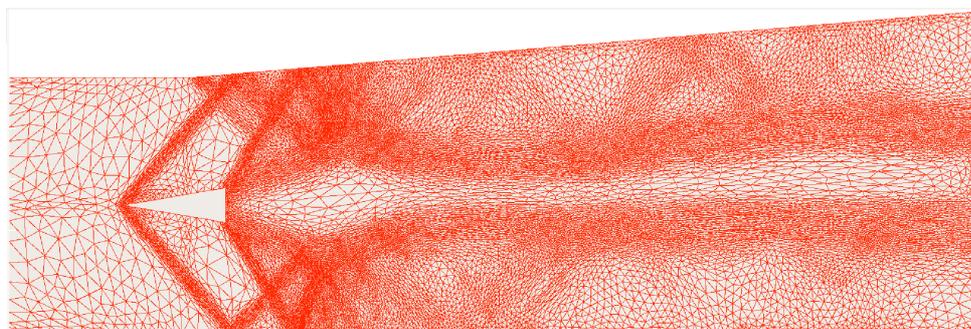


FIGURE 6.16: Maillage obtenu à partir des valeurs de courbure du champ de densité après convergence en mode réactif.

Structure globale de la zone de réaction

Les contours d'iso-pression permettent de mettre en évidence les positions des ondes de choc, Fig.6.17. Ils révèlent la structure globale de l'écoulement lorsque la réaction chimique a lieu. La zone de sillage du dièdre, où se produit la combustion, est le lieu d'une forte recirculation des réactifs qui permet d'assurer la stabilisation de la flamme. L'expansion thermique qui

accompagne la réaction provoque une forte accélération des gaz chauds et la dimension transverse de la zone subsonique diminue. La comparaison avec l'expérience montre que la zone subsonique représentée en couleur Fig.6.17 est bien restituée qualitativement :

- la largeur maximale est en bon accord qualitatif avec la visualisation par ombroscopie.
- le minimum de vitesse se situe au point d'abscisse $x=95$ mm : le positionnement de ce minimum est correct mais l'écoulement semble trop ralenti et l'accélération qui s'ensuit est trop importante. On peut voir, Fig.6.17 que les gaz sont accélérés par le rétrécissement de la zone subsonique jusqu'au point d'abscisse $x=195$ mm. On se rend bien compte sur la photo de l'écoulement qu'il est difficile d'identifier une onde de choc en cet endroit, compte-tenu des forts niveaux de turbulence de l'écoulement, mais le profil de vitesse en $y=25$ mm, Figure 6.18, nous permet d'identifier une zone de recompression à cet endroit.
- l'accélération est suivie en $x = 195$ mm par une légère diminution de vitesse, provoquée par l'onde de compression arrivant de la paroi inférieure. Enfin, l'interaction des premières ondes de choc réfléchies, nettement visibles sur la photographie, avec la zone de réaction est aussi bien visible sur la courbe d'isobares : les ondes sont réfléchies en ondes de détente vers les parois inférieure et supérieure.

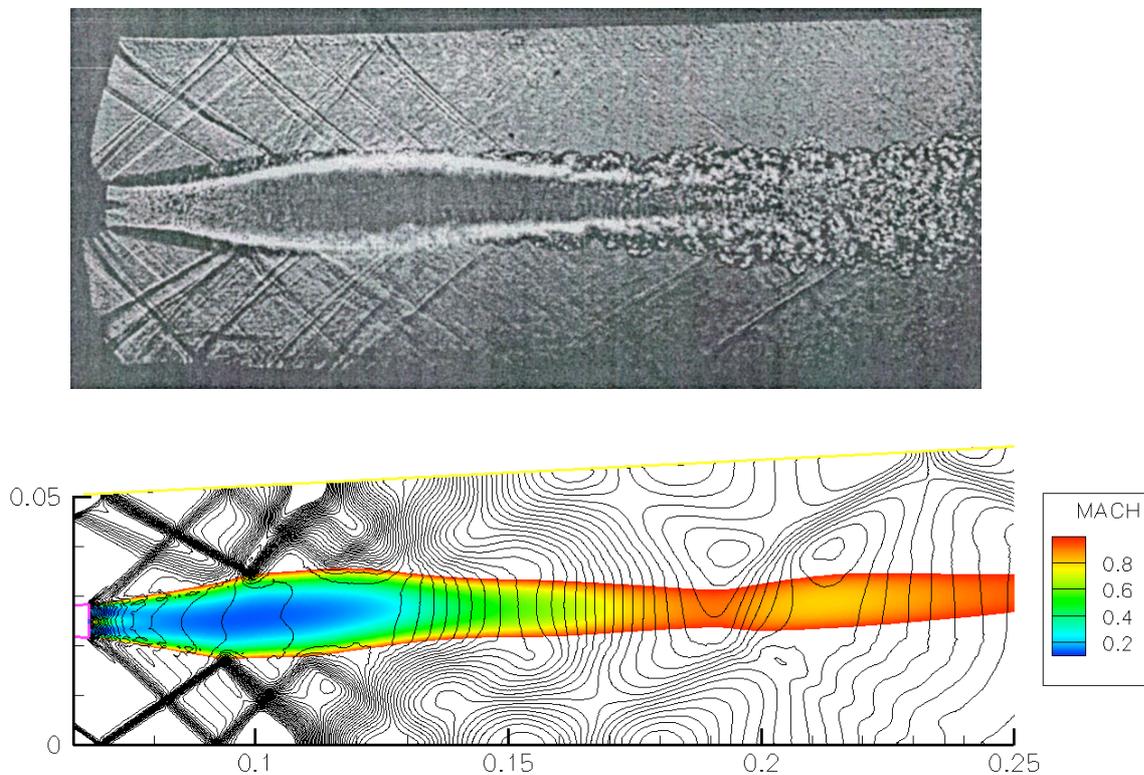


FIGURE 6.17: Courbes isobares. La surface colorée représente la partie subsonique de l'écoulement.

Champs de vitesse moyens et fluctuants

Les quatre graphes présentés Fig.6.18 montrent un bon accord avec l'expérience :

- les niveaux de vitesse sont bien restitués tout le long de l'axe central, $y=25\text{mm}$, et des coupes transversales montrent un accord satisfaisant. Néanmoins, le profil de vitesse en $x=207\text{mm}$ ne concorde pas avec l'expérience, car notre simulation positionne l'onde de compression visible Fig.6.17 trop près de l'abscisse de mesure, à un endroit où la vitesse est en train de diminuer et n'a pas atteint son minimum. Cette limitation est probablement liée à une loi de paroi inadaptée (compression des couches limites, etc.).
- on remarque que les profils de vitesse sont décalés vers la paroi divergente.
- concernant les fluctuations de vitesse, Fig.6.19 les profils sont en bon accord avec l'expérience mais les résultats plus décevants en non réactif ne doivent pas être oubliés. En réalité, on doit garder à l'esprit la difficulté que pose la mesure des fluctuations de vitesse dans ce type d'écoulement. On notera aussi que les différences entre les moyennes et fluctuations de Favre issues des simulations numériques et les moyennes et fluctuations de Reynolds issues des expériences augmentent avec le nombre de Mach et l'expansion thermique liée à la réaction chimique. Dans le cas présent, elles sont susceptibles de devenir importantes et compliquent notablement la comparaison.

Champ de température

Les profils de température à différentes positions le long de l'écoulement sont reportés Fig.6.20. On observe pour la position proche de l'injecteur $x=78\text{mm}$, i.e., une distance équivalente à 11 diamètres, un profil de température présentant deux maxima décentrés de part et d'autre de l'axe de symétrie $y=25\text{mm}$, et une température inférieure au centre. Puis, ces deux maxima se rapprochent pour donner un maximum de température au centre de la veine : l'expérience montre un pic pour $x=125\text{mm}$. Nous ne l'obtenons que pour $x=140\text{mm}$. Cette différence peut s'expliquer par le fait que l'épaisseur de la zone de réaction est largement imposée par les ondes de choc réfléchies, comme le montrent Fujimori et al.[6]. En effet, les ondes de choc servent ici à stabiliser la flamme derrière l'injecteur et on remarque Fig.6.17 que la zone de réaction est la plus large pour $x=100\text{mm}$, là où les ondes de choc interagissent avec la flamme. Les phénomènes de couche limite ne sont pas pris en compte dans la loi de paroi et entraînent un mauvais calcul de l'angle de réflexion. Les ondes sont susceptibles d'être réfléchies avec un angle trop grand, voir Fig.6.21 et donc l'élargissement maximum de la zone de réaction se trouve éloigné de l'injecteur, de même que le pic de température suivant la zone de forte expansion thermique.

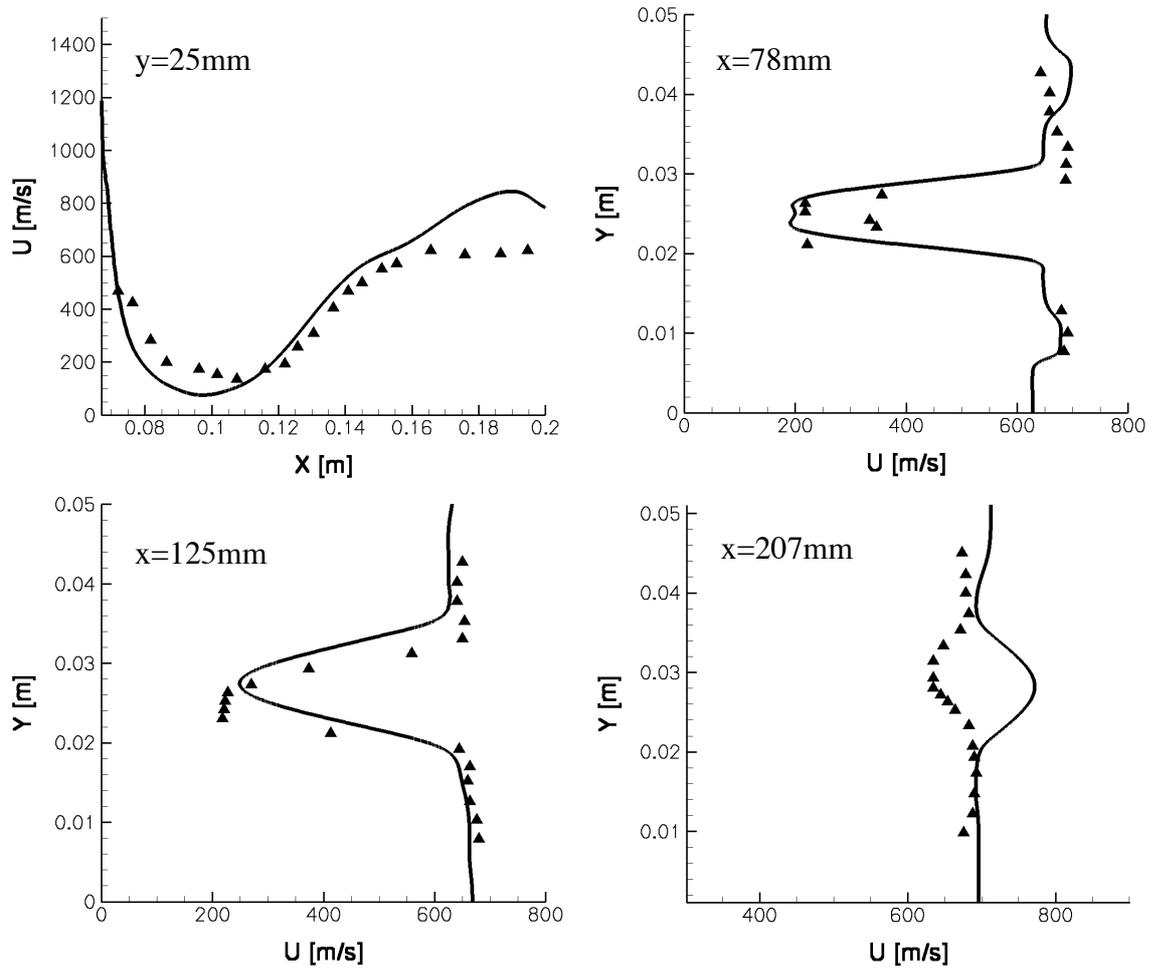


FIGURE 6.18: Profils de vitesse axiale le long de l'axe $y=25\text{mm}$ et pour différentes positions x .

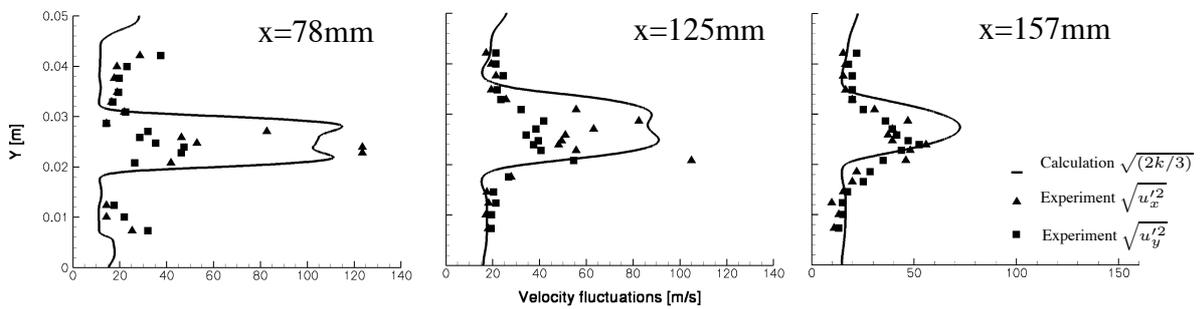


FIGURE 6.19: Profils de fluctuations de vitesse pour différentes positions x .

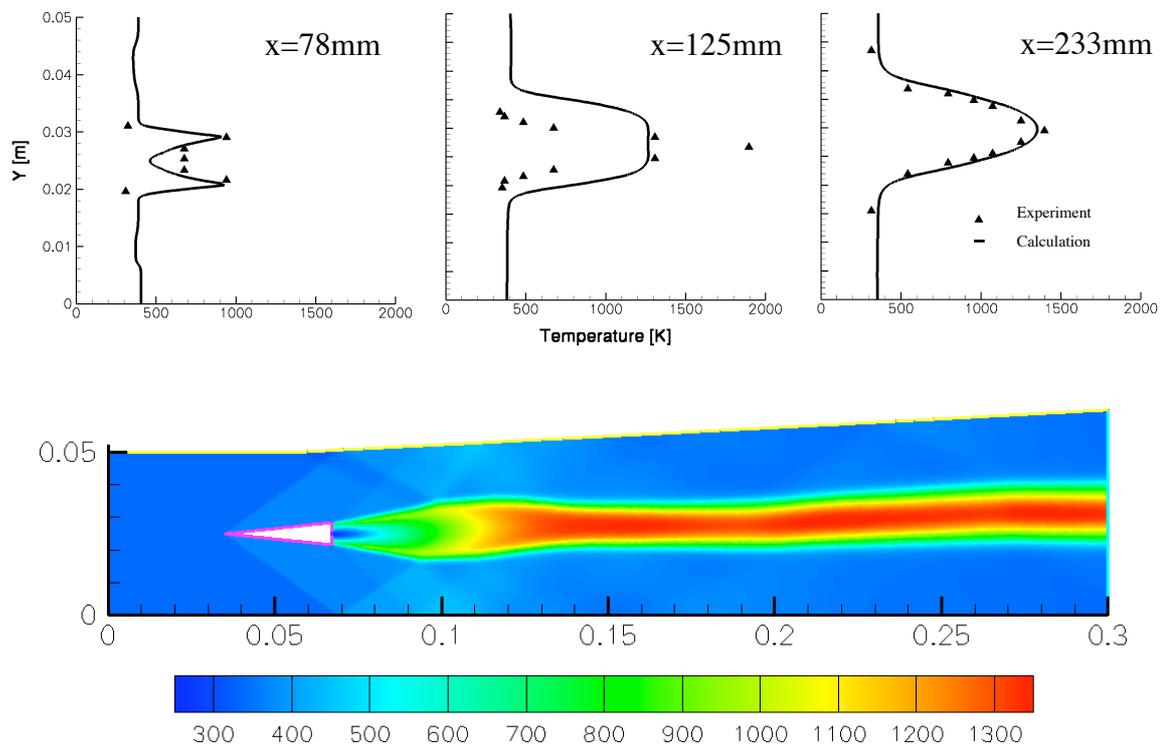


FIGURE 6.20: Profils de température pour différentes positions $x=78$, 125 , et 233mm et champ de température correspondant.

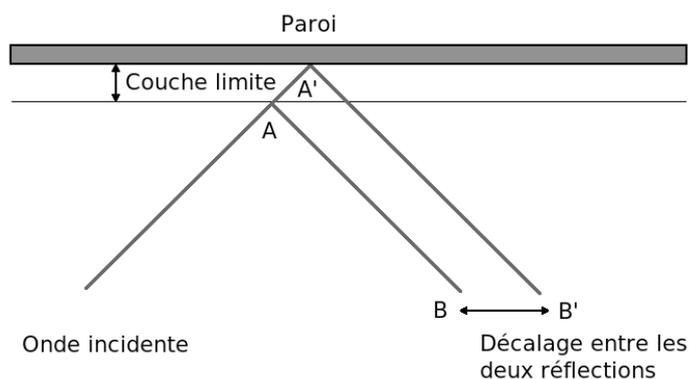


FIGURE 6.21: Schématisation de l'interaction onde de choc/couche limite.

6.3 Conclusion

Les simulations numériques présentées dans cette partie constituent la première étape de validation de la modélisation proposée dans cet exposé. La configuration de Cheng nous a permis de valider la représentation des spécificités de la combustion dans une couche de mélange cisailée

présentant une température totale suffisante pour observer un phénomène d'allumage spontané. La configuration du cas test de Waidmann nous a permis de juger de l'aptitude de notre approche à restituer un cas de combustion turbulente en écoulement rapide confiné et soumis à de fortes discontinuités de pression. Le couplage d'un code compressible avec une méthode de remaillage adaptatif nous permet d'obtenir une précision suffisante pour représenter ce type d'écoulements réactifs turbulents. Ces résultats sont suffisamment encourageants pour que nous nous intéressions maintenant à des configurations plus représentatives de la combustion dans les moteurs fusées.

Chapitre 7

Applications à la combustion dans les Moteurs Fusées

Cette partie est consacrée à la présentation de simulations numériques de configurations plus proches de l'application moteurs fusées. Nous avons pu juger des performances de l'approche numérique couplée au modèle combustion sur des cas académiques bien documentés au cours du chapitre précédent. Les résultats obtenus étant satisfaisants, nous continuons notre démarche en complexifiant la géométrie des configurations auxquelles nous nous intéressons. Une application directe du modèle que nous développons consiste à simuler la flamme jet supersonique utilisée pour initier la combustion des ergols dans la chambre de certains moteurs fusées. La configuration de jets cocourants sous-détendus est susceptible de présenter d'importantes structures compressibles qu'il faudra décrire assez finement, ainsi que des températures totales suffisantes pour promouvoir l'allumage spontané dans la couche de cisaillement. Les résultats de la simulation numérique conduite avec *N3S-Natur* pour ce cas sont présentés dans une première partie. *Ce travail vient d'être publié dans les Comptes Rendus Mécanique de l'Académie des Sciences [161].*

Une deuxième application possible du modèle de combustion turbulente étendu aux écoulements diphasiques est la description de la combustion ayant lieu dans l'écoulement diphasique résultant de l'injection d'hydrogène gazeux et d'oxygène liquide subcritique. Nous présenterons dans une deuxième partie le cas test expérimental MASCOTTE développé par l'ONERA, ainsi que les résultats de simulation de cette configuration. *Les résultats préliminaires déjà obtenus ont été présentés lors du 22ème congrès ICDERS qui s'est tenu à Minsk en Juillet dernier.*

7.1 Jet réactif fortement sous-détendu

7.1.1 Description de la géométrie

L'allumeur est disposé au centre de la plaque d'injection, voir Fig.7.1. Il fonctionne avec un rapport de mélange élevé i.e. en excès d'oxygène. Une circulation coaxiale d'hydrogène permet de refroidir le tube d'injection central de l'allumeur. Le jet coaxial débouche donc sur la plaque d'injection avec au centre un jet de gaz chauds composés de gaz brûlés et d'oxygène (on considère que tout l'hydrogène a préalablement réagi) et, en périphérie, une couronne d'hydrogène pur. La plaque d'injection est composée dans le cas réel de couronnes concentriques d'injecteurs diphasiques disposés autour de l'allumeur. Nous n'envisageons, dans un premier temps, que la situation simple du fonctionnement de l'allumeur seul sans les injecteurs diphasiques.

Paramètres géométriques	
Diam. int. de la couronne d'hydrogène (mm)	a1
Diam. ext. de la torche (mm)	a2
Diam. int. de la torche (mm)	a3
Conditions d'entrée de l'hydrogène	
Pression (MPa)	0.6
Température (K)	325
Nombre de Mach	1
Vitesse (m/s)	1060
Fraction massique en hydrogène	1
Conditions d'entrée du jet principal	
Pression (MPa)	1.05
Température (K)	2000
Nombre de Mach	0.5
Vitesse (m/s)	450
Fraction massique en oxygène	0.7698
Fraction massique en vapeur d'eau	0.2302

TABLE 7.1: Conditions d'entrée pour la torche d'allumage.

Les conditions thermodynamiques au sein de la chambre de combustion sont susceptibles d'évoluer sur une large plage de variations en fonction de la situation de vol envisagée. Ainsi, les conditions extrêmes sont d'un côté l'atmosphère terrestre, et de l'autre une atmosphère proche du vide. Les pressions dans les deux injecteurs coaxiaux étant de plusieurs bars, le rapport de pression sera important et le jet d'autant plus sous-détendu que l'atmosphère de la chambre sera proche du vide. C'est pourquoi nous avons envisagé trois simulations distinctes avec des valeurs

de la pression dans la chambre égales à 1 atm, 0.5 atm, et 0.1 atm respectivement. La chambre est donc initialement remplie d'azote, inerte, aux faibles pressions considérées ici.

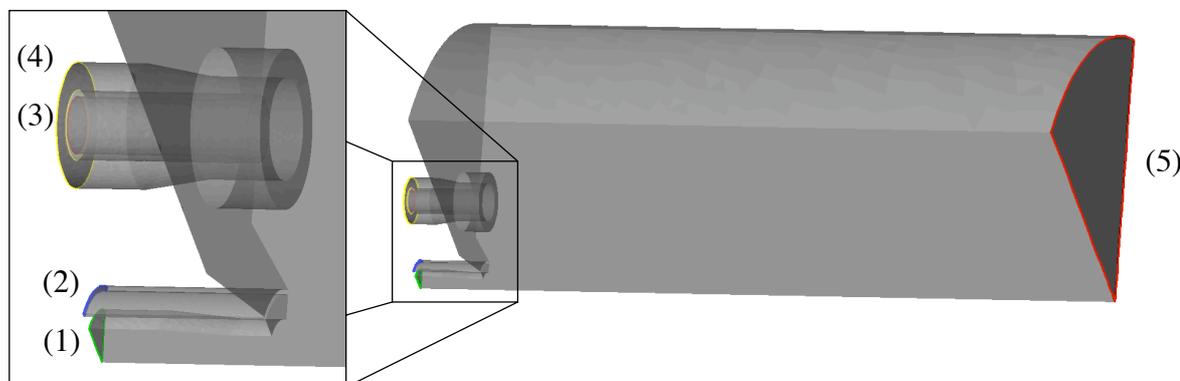


FIGURE 7.1: Domaine de calcul et conditions aux limites pour le cas 3D. 1) Entrée 1 : mélange chaud $\text{GO}_2 + \text{GH}_2\text{O}$. 2) Entrée 2 : GH_2 . 3) Entrée 3 : Lox (ou GO_2 en première approximation). 4) Entrée 4 : GH_2 . 5) Sortie. Conditions de glissement imposées aux parois.

7.1.2 Domaine de calcul

La chambre de combustion a une géométrie purement tridimensionnelle et la simulation de la torche dans son environnement réel ne peut être envisagée sans quelques choix et simplifications. Premièrement, la chambre est considérée dans son intégralité mais les injecteurs périphériques sont remplacés par une paroi fixe non-débitante pour les premières simulations. Ainsi, une simulation 2D axisymétrique est effectuée pour décrire la flamme jet sous-détendue. Deuxièmement, les difficultés liées à la robustesse numérique du calcul et le choix de conditions initiales et aux limites nous ont obligé à simplifier, dans un premier temps, la simulation du transitoire réel. Au lieu de prescrire en entrée la monté en pression réelle (qui obligerait à changer la condition d'entrée de subsonique à supersonique au cours du calcul), nous avons prescrit directement la pression nominale de fonctionnement. Afin de repousser les conditions limites extérieures à la chambre, une condition de pression est appliquée en sortie de tuyère d'éjection. On notera qu'étant données les dimensions de la chambre par rapport aux dimensions de la torche, nous n'avons pas représenté finement la courbure du convergent-divergent en sortie de chambre (bien que le diamètre au col soit respecté). Nous avons préféré concentrer l'effort de discrétisation sur la description précise de la couche de cisaillement du jet sous-détendu où l'allumage spontané est susceptible d'avoir lieu. La méthode de ré-adaptation de Dolejsi s'est, là encore, révélée très efficace pour optimiser cette discrétisation. Néanmoins, nous avons considéré une seconde configuration afin d'étudier l'interaction des injecteurs diphasiques situés en périphérie avec la torche centrale. Le domaine de calcul est le domaine 3D représenté Fig.7.1. Les conditions limites sont rappelées sur cette figure.

7.1.3 Résultats des simulations non réactives

Figs.7.2 et 7.3 sont reportés les maillages obtenus à l'issue des étapes de ré-adaptation de maillage anisotropique, ainsi que le champ du nombre de Mach pour différents rapports de pression entre l'ajutage de l'injecteur et la pression imposée en sortie de chambre. On peut ainsi remarquer l'importance des changements de forme qui interviennent durant la phase transitoire d'allumage de la chambre de combustion. La largeur du tonneau formé par le jet central est susceptible de contraindre fortement l'écoulement en sortie des jets périphériques. Une surpression pourrait s'ajouter à celle provoquée par l'expansion due à la réaction chimique. Ce phénomène est très surveillé par les maîtres d'oeuvre de la chambre réelle pour assurer l'intégrité physique de celle-ci.

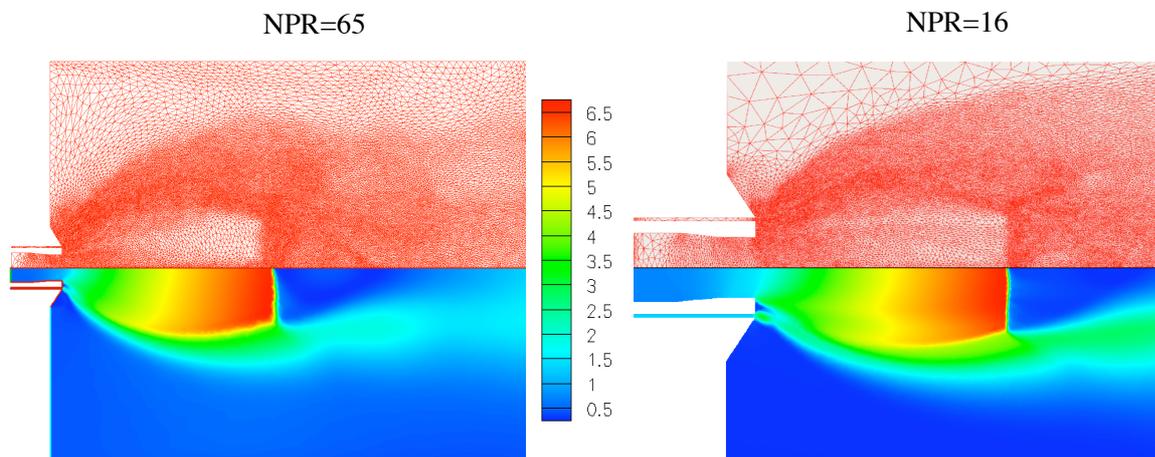


FIGURE 7.2: Maillages retenus pour la simulation des jets sous-détendus après application de la méthode AMA. Partie basse : champ de nombre de Mach. Le disque de Mach est positionné en $x=55\text{mm}$ et $x=29\text{mm}$ pour $\text{NPR}=65$, et $\text{NPR}=13$ respectivement.

Les jets qui nous intéressent correspondent à des rapports de pression supérieurs à 10. Dans ces conditions, le Disque de Mach (DM) interagit directement avec la couche de cisaillement, déstabilisant complètement le jet en aval [143], voir Fig.7.4. Aucune structure de choc stationnaire ne devient alors *a priori* identifiable au delà du disque de Mach. Le choc incident devient très courbé et la zone subsonique s'allonge en aval du disque de Mach. La problématique dans cette zone proche, en aval du disque de Mach, est alors celle d'une couche de mélange supersonique à masse volumique fortement variable comprise entre une couche externe au repos et un noyau subsonique interne fortement comprimé. Cette couche de cisaillement est soumise à une chute de pression totale différente à travers le choc droit et le choc oblique, ce qui semble induire une forte déflexion de la zone interne de la couche vers l'axe.

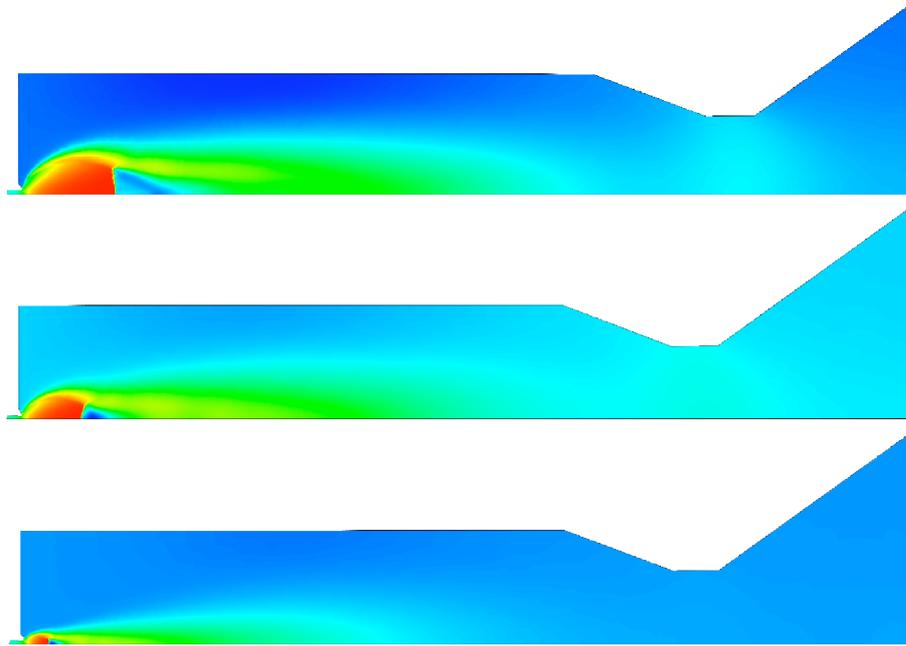


FIGURE 7.3: Influence du rapport de pression sur la géométrie du jet sous-détendu. NPR=130, 65, 13.

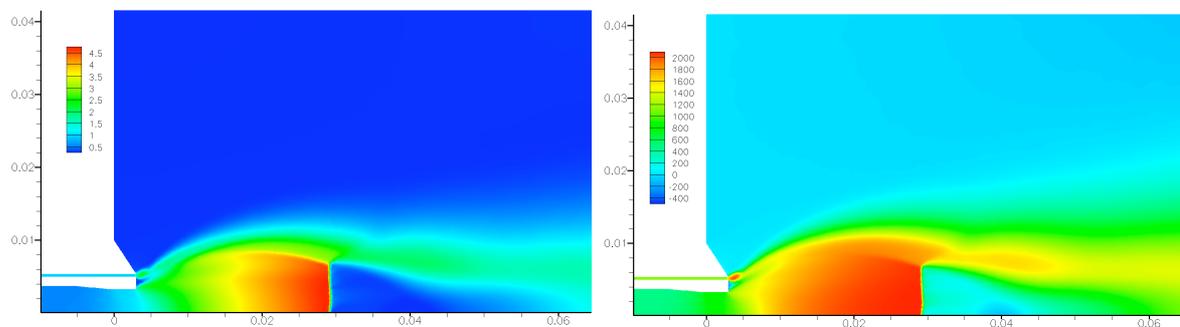


FIGURE 7.4: Champ de vitesse axiale (figure de gauche) et de nombre de Mach (figure de droite) pour un rapport de pression NPR2 ($P=0.5\text{atm}$).

De plus, la structure singulière de l'écoulement que nous étudions semble influencée de manière significative par le co-courant d'hydrogène. En effet, les dimensions du jet simple sous-détendu peuvent être assez bien estimées par des corrélations empiriques telle que celle d'Ashkenas et Sherman [168] qui permet de prédire la position du disque de Mach sur l'axe de symétrie en fonction du rapport de pression à l'ajutage NPR : $X_{DM}/D_e = 0.67 \times \sqrt{P_e/P_a}$. Une différence de l'ordre de 10 à 15 % peut parfois être observée entre des résultats de simulations numériques et le résultat d'une telle corrélation établie à partir d'images Schlieren, c'est-à-dire grâce à une procédure de moyennage temporel appliquée le long du chemin optique dans la

direction d'observation. L'applicabilité et la précision de ce genre de corrélations est discutable pour le cas qui nous concerne. En effet, les résultats de la simulation numérique montrent que le disque de Mach est positionné en $x=30\text{mm}$. Cette valeur est deux fois plus grande que la valeur obtenue avec la corrélation. L'influence du jet annulaire est clairement identifiable Fig.7.4 et ne peut pas être négligée. Cela confirme la forte interaction entre la couche de cisaillement autour du "tonneau" du jet principal et le jet hydrogène.

Quelle en est la conséquence pour le mélange des réactifs dans cette zone ? La visualisation de la fraction moyenne de mélange Fig.7.5 montre la déviation du jet d'hydrogène par le coeur de la torche, ainsi que l'effet de la couche de cisaillement qui permet l'apport d'hydrogène vers le centre de la torche, comme en témoigne l'évolution de la ligne iso- $Z=0.01$. On peut voir sur cette image que le jet annulaire d'hydrogène pur se mélange très rapidement : il n'existe pratiquement pas de zone d'hydrogène pur. On peut dès lors conclure que le mélange est extrêmement intense dans la couche de cisaillement.

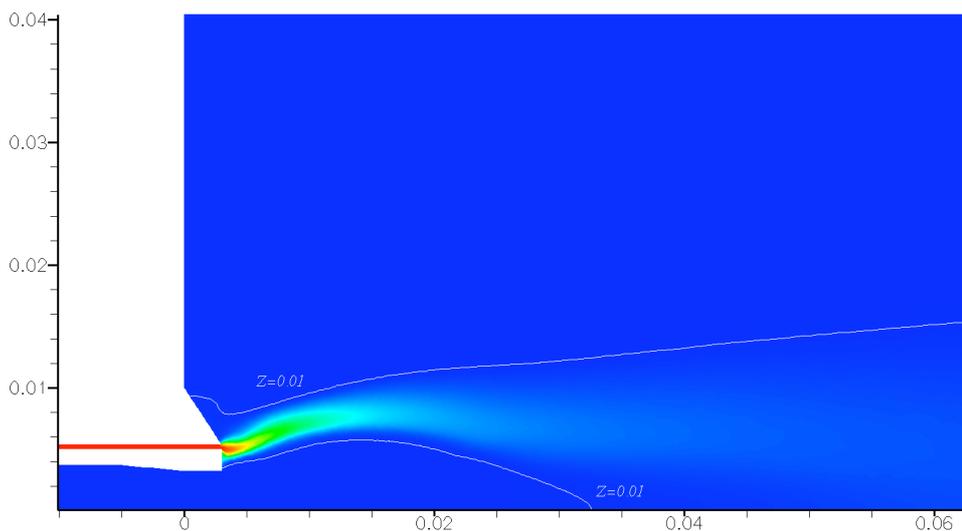


FIGURE 7.5: Champ de fraction de mélange pour un rapport de pression NPR1 ($P=1\text{atm}$).

7.1.4 Auto-allumage et flamme stabilisée

L'inflammation spontanée et la stabilisation de la flamme de diffusion turbulente sont des phénomènes que l'on peut retrouver par la recherche de la solution stationnaire mais dans le cas présent, l'établissement de la structure compressible du jet sous-détendu est fondamental pour la compréhension du phénomène d'auto-allumage. En effet, si l'on considère seulement de mettre en route les termes de production à partir de la solution convergée obtenue en non-réactif, deux zones sont susceptibles d'accueillir des poches d'inflammation : la couche de cisaillement proche des injecteurs décrite plus haut, et la zone subsonique en aval du disque de Mach. Cette dernière présente en effet une zone de recirculation, une composition adéquate et est le lieu

d'une forte température totale. Tous les éléments sont réunis pour que la réaction ait lieu. Cependant, la phase transitoire durant laquelle les réactifs pénètrent la chambre est fortement liée à l'établissement de la bouteille de Mach et la rencontre des deux jets d'hydrogène et d'oxygène chaud. Nous avons pu produire un film de cette phase pour le cas NPR=16 : plusieurs instants reportés Fig.7.6. Détaillons ce que nous voyons sur ces images : tout d'abord, le taux de réaction chimique reste nul dans tout le domaine. On identifie clairement les deux jets par leur températures respectives : le jet d'hydrogène semble impacter la boule formée par le jet central. Il se crée alors des forces de cisaillement à mesure que l'hydrogène s'enroule autour du jet central jusqu'à l'apparition de points d'auto-allumage dans la couche de cisaillement. On peut aisément voir l'augmentation de température qui accompagne la réaction. On remarque que le disque de Mach n'est pas encore établi à ce moment, ce qui confirme l'intérêt de l'étude instationnaire.

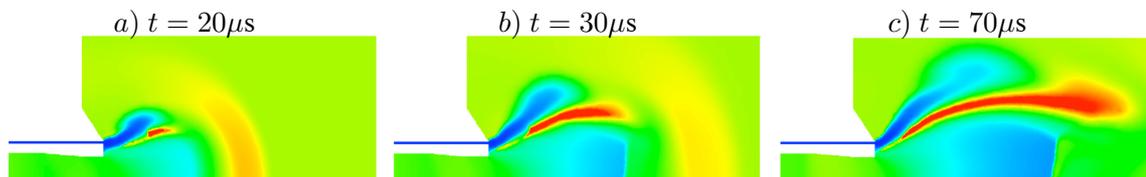


FIGURE 7.6: Champ de température à différents instants de la simulation numérique réactive instationnaire pour un NPR=16.

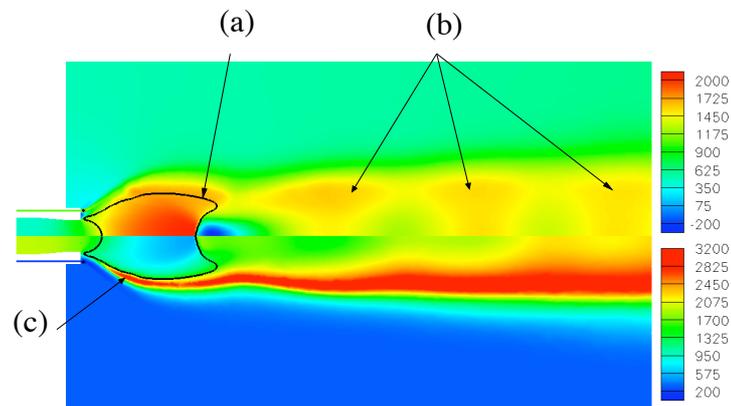


FIGURE 7.7: Solution stationnaire. Haut : champ de vitesse axiale moyenne (m/s). Bas : Champ de température moyenne (K). a) Isoligne $Ma=2$, b) Structure en diamant en aval du disque de Mach. c) Positionnement de la flamme en périphérie du "tonneau" de Mach (Mach Barrel).

La solution stationnaire est représentée Figs.7.7 et 7.8. La pointe extrême du taux de réaction est située à une position $x/D = 0.5$, ce qui suggère une flamme légèrement décollée des injecteurs. On peut noter, Fig.7.8, la formation d'un "dard" d'oxygène qui se détache du jet principal. Ceci s'explique par la présence d'une zone de recirculation située dans l'épaisseur de

la lèvre de l'injecteur et par le fait, comme il est constaté dans les études de l'allumage dans les couches de mélange, que l'allumage se situe préférentiellement du côté du gaz chaud, ce qui amplifie la séparation du courant d'oxygène dans notre cas. Ce résultat fournit une démonstration des capacités du modèle à prédire ce genre d'écoulements réactifs. On remarque que la flamme de diffusion turbulente modifie fortement l'écoulement et les structures compressibles qui accompagnent la torche principale, notamment la position et la forme du disque de Mach, à comparer avec le cas non réactif. Une structure en diamant est visible en aval du disque de Mach.

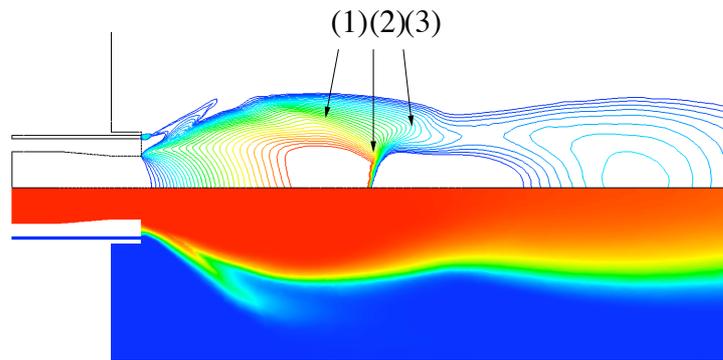


FIGURE 7.8: Isolignes du nombre Mach et champ de fraction massique en oxygène à l'issue de la simulation numérique de la torche GH2/GO2. 1 : onde de choc incidente. 2 : disque de Mach à la séparation du point triple. 3 : onde de choc réfléchie.

7.1.5 Vers le transitoire d'allumage réel

Dans le cas réel, la torche précédemment décrite doit allumer une première rangée d'injecteurs cryogéniques LOx/GH2. Une étude préliminaire en phase gazeuse est effectuée ici afin d'illustrer les différents aspects de ce travail. L'interaction entre la torche et la première couronne d'injecteurs est représentée Fig. 7.9. Le coeur du jet d'oxygène provenant de l'injecteur périphérique est représenté par les isolignes noires. Cette configuration est tridimensionnelle et il s'agit donc de décrire la flamme qui va s'établir dans deux jets ronds "juxtaposés", et idéalement tangents. L'étude de cette configuration n'est pas réalisée dans ce travail de thèse : elle nécessite un effort supplémentaire de modélisation pour la description de la combustion en milieu diphasique et la prise en compte d'entrées multiples.

Premièrement, la description de la combustion non-prémélangée à N entrées, $N > 2$, requiert une attention toute particulière quant à la description du mélange entre les réactifs. Une première approche revenant à considérer les deux flammes de diffusion turbulentes (la torche d'allumage et celle en sortie de l'injecteur périphérique) comme deux flammes découplées peut nous fournir une solution approximative de la solution stationnaire. En effet, on peut considérer qu'une fois les deux flammes de diffusion stabilisées, la part de mélange de réactifs non-brûlés

entre les deux jets reste négligeable. Cette solution n'est pas satisfaisante du point de vue de la modélisation : la considération de la fraction de mélange moyenne et de sa variance ne suffit plus, et les covariances multiples doivent être connues et nécessitent l'introduction de scalaires supplémentaires ainsi qu'un effort de modélisation particulier [169]. Deuxièmement, il est nécessaire de découpler les phénomènes et de s'attacher à obtenir une bonne description de la flamme diphasique entre l'oxygène subcritique et l'hydrogène, seule. Nous continuons ainsi notre progression par la présentation dans la prochaine partie des résultats de simulation numérique du cas test MASCOTTE.

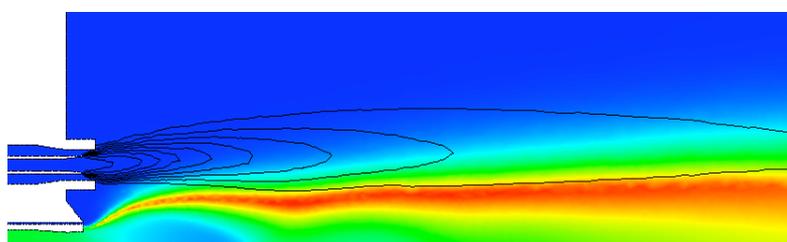


FIGURE 7.9: Champ de température moyenne et isovalues de la fraction massique en oxygène provenant de l'injecteur périphérique.

7.2 Cas MASCOTTE A10 : flamme diphasique subcritique

Le but recherché avec le dispositif MASCOTTE est de reproduire des conditions de fonctionnement représentatives de la combustion dans les moteurs-fusées pour un injecteur simple et avec les propergols réels, c'est-à-dire l'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux. Trois versions de ce montage ont été successivement développées afin de reproduire de telles conditions de fonctionnement, lesquelles sont de plus en plus proches de celles rencontrées durant le fonctionnement réel du moteur. La première version V01 était prévue pour des pressions de fonctionnement dans la chambre assez faibles, jusqu'à 1,0MPa et avec de l'hydrogène à température ambiante. Dans la seconde version V02, un échangeur de chaleur a été ajouté afin de refroidir l'hydrogène jusqu'à 100K. Ceci a permis d'augmenter le débit massique maximum d'hydrogène gazeux à basse pression en maintenant un écoulement subsonique en sortie d'injecteur. Finalement, la dernière amélioration, datant de 1997, a permis de faire fonctionner la chambre de combustion jusqu'à une pression chambre maximum de 7,0 MPa, pression supérieure à la pression critique de l'oxygène qui est de 5,04 MPa.

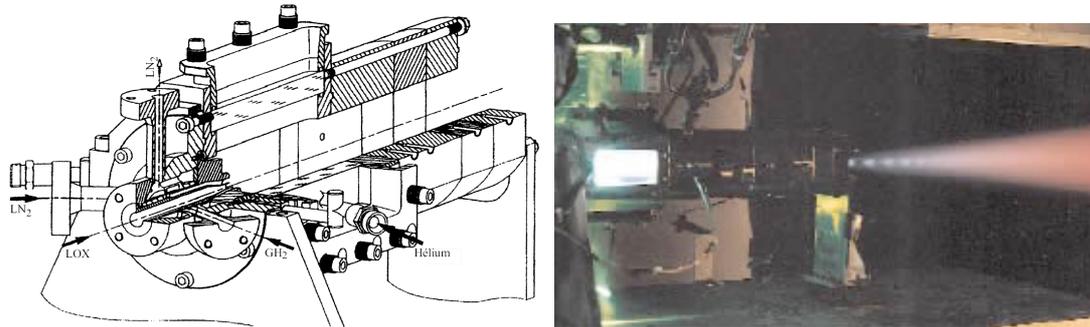


FIGURE 7.10: Boîtier de combustion 10 bar : schéma de principe et montage en fonctionnement [32] (ONERA).

Le système est composé d'un injecteur coaxial isolé alimenté dans la partie centrale en oxygène liquide, et en hydrogène gazeux dans la partie annulaire extérieure. L'injecteur est positionné au centre de la face d'injection carrée de section 50 mm. La longueur de la chambre est de 400 mm. Quatre hublots en silice permettent d'avoir de larges accès optiques. De plus, ces fenêtres de visualisation peuvent être translattées le long de l'axe principal, permettant de visualiser l'intégralité de l'écoulement dans la chambre de combustion. Le col d'échappement de la chambre n'est pas refroidi et l'ensemble du montage a été dimensionné pour des tirs d'une durée de 30s à pression atmosphérique, un débit massique LOx+GH2 de 120g/s maximum et un rapport de mélange de 6. En réduisant la durée de fonctionnement à 20s, dix tirs peuvent être effectués dans la journée, avec 5 à 10 minutes de refroidissement entre chaque. Le banc V01 a permis de réaliser plus de mille tirs avec un débit d'oxygène liquide variant entre 40 et 90 g/s et un débit massique d'hydrogène variant entre 10 et 30 g/s.

Les conditions opérationnelles de la version V01 sont répertoriées dans le tableau 7.2 :

Numéro	Pression [MPa]	Débit de masse O_2 [g/s]	Débit de masse H_2 [g/s]	Rapport des quantités de mouvement J	Rapport de mélange O_2/H_2 , M
A	0.1	50	15	13.4	3.3
C	0.1	50	10.0	6.3	5.0
A10	1.0	50	23.7	14.5	2.1
C10	1.0	50	15.8	6.5	3.2

TABLE 7.2: Conditions expérimentales pour le banc MASCOTTE.

Pour la version V01, le débit de masse d'hydrogène varie entre 5 et 20 g/s pour une température ambiante et une pression de 0,1 MPa. La limite supérieure correspond à la limite sonique en sortie d'injecteur qui ne doit pas être atteinte si l'on veut que l'injecteur soit représentatif d'un injecteur coaxial utilisé dans un moteur fusée.

Sur la Fig.7.11 est représenté l'injecteur coaxial utilisé lors des campagnes MASCOTTE basse pression (V01). Le conduit central d'oxygène mesure initialement 3,7 mm de diamètre puis s'évase pour atteindre en sortie un diamètre $d1=5$ mm. Les lèvres de l'injecteur ont une épaisseur de 0,3 mm en sortie. Le diamètre extérieur de la couronne périphérique d'injection de l'hydrogène est $d3=16$ mm pour le cas V01 utilisé à pression atmosphérique et $d3= 12$ mm pour le cas V01-bis utilisé à 10 bar.

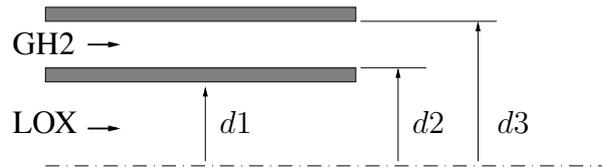


FIGURE 7.11: Géométrie de l'injecteur utilisé dans le cas MASCOTTE à 10 bars.

Le choix des conditions de fonctionnement a été dicté par la sélection de paramètres de similarité capables de représenter, autant que possible, les conditions réelles d'un moteur fusée. L'oxygène est injecté sous forme liquide, et est cisailé par une injection coaxiale périphérique d'hydrogène gazeux, comme indiqué Fig.7.11. Bien que la combustion cryotechnique qui se produit impliquent de nombreux processus physiques et chimiques couplés qui plus est, il est possible d'identifier les principaux paramètres de contrôle. Par exemple, on utilise souvent le paramètre de similitude J , correspondant au rapport de quantité de mouvement à l'injection :

$$J = \frac{(\rho U^2)_{GH2}}{(\rho U^2)_{LOx}}$$

Les travaux de Hopfinger et Lasheras [170] ont montré que la fragmentation du jet liquide était largement fixée par ce rapport des quantités de mouvement entre le gaz et le liquide, et que la taille de goutte était contrôlée par le nombre de Weber, We :

$$We = \frac{\rho_{GH2} d_{LOx} (U_{GH2} - U_{LOx})^2}{\sigma_{LOx}}$$

où ρ_{GH2} et U_{GH2} sont respectivement la densité et la vitesse du jet d'hydrogène gazeux, ρ_{LOx} , U_{LOx} , d_{LOx} , et σ_{LOx} représentent respectivement la densité, la vitesse, le diamètre, et la tension de surface du jet d'oxygène liquide. Si les nombres de Reynolds de l'oxygène liquide et de l'hydrogène gazeux sont suffisamment grands, les deux courants sont turbulents et la fragmentation du jet liquide dépend alors principalement du rapport des quantités de mouvement, J . D'après Villermaux [171], ce rapport contrôle l'atomisation du jet liquide et la longueur du cône liquide, qui serait proportionnelle à $J^{-1/2}$.

Les expérimentateurs ont donc effectué un certain nombre d'études en maintenant le paramètre J à peu près constant, ce qui suppose de modifier le rapport de mélange. Deux conditions

de référence ont été choisies pour la version V01, notées A et C dans le tableau 7.2. Toutes deux présentent un débit de 50 g/s pour l'oxygène liquide et se situent de part et d'autre de la valeur $J = 10$, valeur habituelle des moteurs fusées.

7.2.1 Approche Lagrangienne pour le cas A10

Dans le cas V01 du banc MASCOTTE, l'oxygène est dans son état subcritique, à savoir liquide. La flamme obtenue sous de telles conditions a fait l'objet de nombreuses études (Gicquel et al. [32], Vingert et al. [172], Herding [173], Snyder et al. [174], Guerre [175], Juniper [176], etc.) en partie initiées dans le cadre du GDR 1075. Une visualisation du spray diphasique pour le cas à 10 bar depuis la sortie de l'injecteur jusqu'à une distance de 20 diamètres (D1) est reportée Fig.7.12.

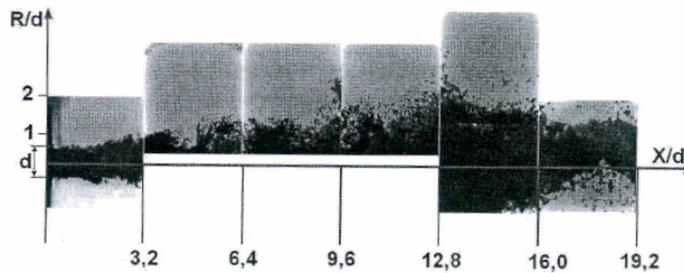


FIGURE 7.12: Visualisation par ombroscopie du spray dans le cas d'une pression de 10 bar [177].

La surface du jet d'oxygène liquide est clairement atomisée : près de l'injecteur, les instabilités à grande échelle provoquées par la couche de cisaillement entraînent la formation d'instabilités de surface qui donneront lieu, plus en aval, à la formation de ligaments et de fines gouttes qui se détacheront du jet. Nous réalisons la simulation numérique de ce cas test à l'aide du code N3SNatur couplé au module diphasique CEDILLE, après s'être assuré du bon comportement des termes sources supplémentaires de l'équation (4.50) lors de simulations préliminaires d'évaporation de gouttes. La modélisation retenue pour l'injection de l'oxygène liquide est basée sur l'hypothèse d'un dard liquide poreux. On considère que l'atomisation primaire du dard a lieu le long du cône potentiel, qui est alors assimilé à une paroi. Les gouttes sont injectées de manière discrète par des injecteurs positionnés près du cône selon la modélisation du dard liquide proposée par Caré et Ledoux [178] et représentée Fig.7.13. Les valeurs des angles d'injection sont données par la relation :

$$\theta(x) = \arctan \left(\frac{R_i \left(1 - \frac{x}{L_{dard}} \right)}{x + \frac{R_i}{\tan(\theta_i)}} \right) \quad \text{avec} \quad \tan(\theta_i) = 0.68 \frac{U_{gaz} - U_{liq}}{U_{liq}} \sqrt{\frac{\rho_{gaz}}{\rho_{liq}}}. \quad (7.1)$$

Cette méthodologie a aussi été retenue dans les travaux de Bodèle et al.[179], Pourouchottamane et al.[180], et Meyers et al.[181]. La longueur du dard est approchée par la formule empirique de Hopfinger et al.[170], en fonction du diamètre d'entrée de l'oxygène et du rapport de quantité de mouvement des deux fluides.

$$\frac{L_{dard}}{D_{injecteur}} = \frac{6}{\sqrt{J}}$$

L'application conduit à une longueur de dard $L_{dard}=7,7\text{mm}$. Les visualisations et mesures granulométriques effectuées par l'ONERA montrent que le processus d'atomisation est très complexe, et que la région proche de la sortie d'injecteur comporte encore des ligaments. Néanmoins, des données granulométriques ont pu être obtenues par PDPA (Phase Doppler Particle Analysis) à une composante. A une distance de 30 mm de la sortie d'injecteur, i.e., 6 diamètres, et à une distance radiale de 5 mm de l'axe de symétrie de la chambre, un diamètre moyen de Sauter de 115 micromètres a été mesuré pour l'échantillon de gouttes détectables par PDPA (les structures non sphériques ne sont pas détectées par PDPA) avec un taux de validation de 47 %. La valeur de 82 micromètres a été recommandée lors du GDR, elle correspond au diamètre moyen de Sauter de la distribution en tailles de gouttes mesurées, tronquée à 250 micromètres (une petite quantité de grosses gouttes est ignorée). Nous retenons dans nos simulations la valeur recommandée lors des workshops consacrés à la modélisation de la combustion dans les Moteurs Fusées.

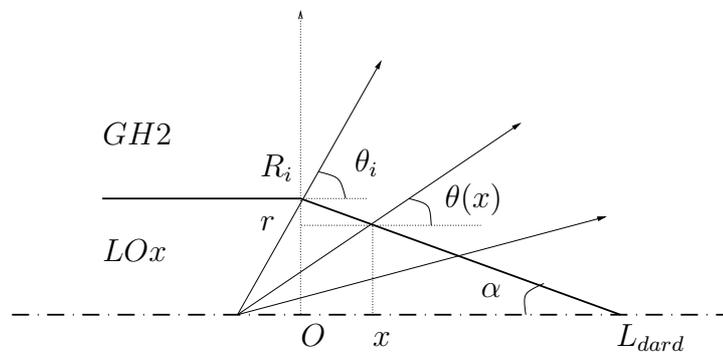


FIGURE 7.13: Géométrie du dard liquide et discrétisation des injecteurs sur la paroi.

Le domaine de calcul retenu pour la simulation est reporté Fig.7.14. La totalité de la chambre de combustion expérimentale doit être représentée. En effet, la tuyère situé en sortie de chambre est susceptible de réguler l'évacuation des gaz chauds, ce qui aura une influence sur les niveaux de température obtenus. La chambre de combustion est ainsi terminée par un domaine correspondant à l'air extérieur où la pression atmosphérique est imposée aux frontières. L'agrandissement reporté Fig.7.14 met en évidence le maillage et la géométrie pour la partie proche injecteur, et plus particulièrement la zone de recirculation située dans la zone arrière $x < 0$ et $y > D/3$, l'injecteur étant en effet positionné en avant de la paroi de la chambre. Cette zone de

recirculation est susceptible d'influencer la valeur de l'angle d'ouverture avec lequel la flamme se stabilise.

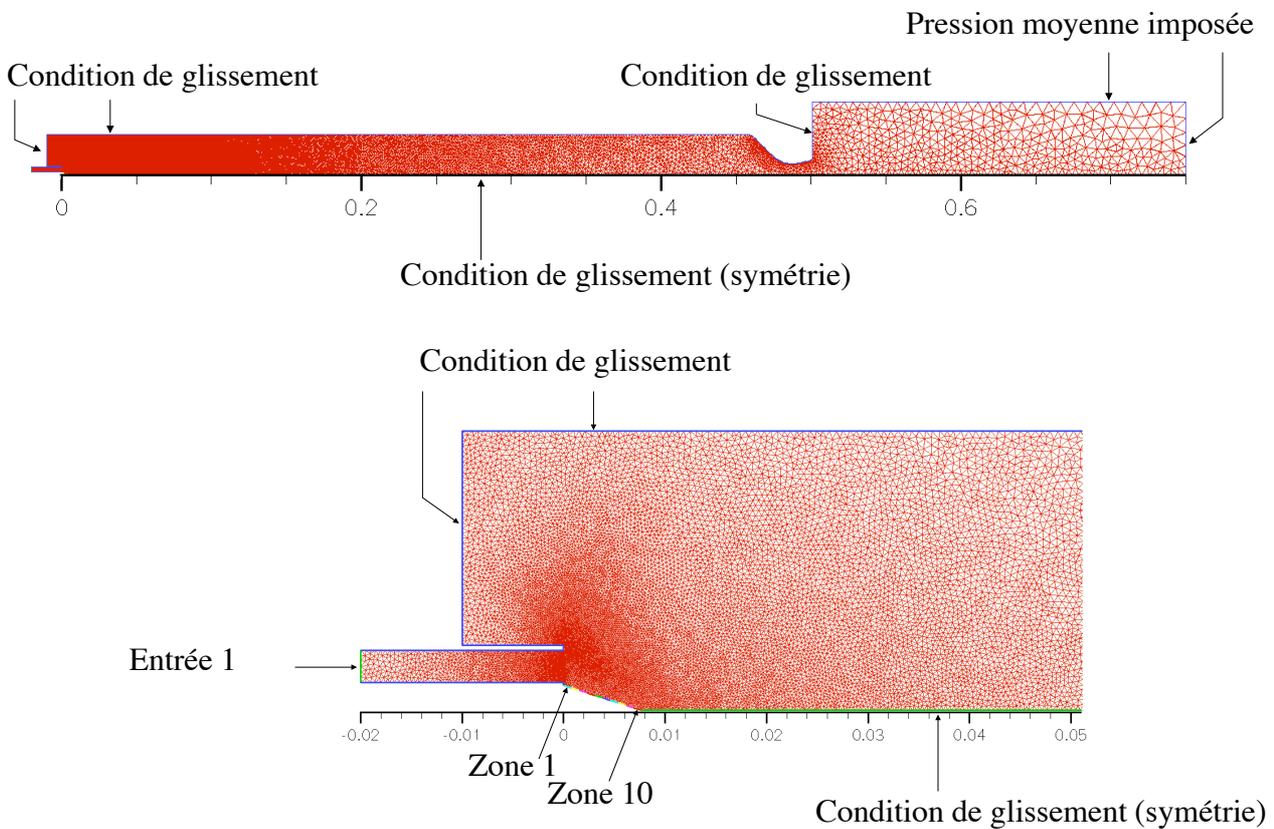


FIGURE 7.14: Domaine de calcul retenu pour le cas de simulation MASCOTTE (26000 noeuds, 52000 mailles). Haut : domaine entier. Bas : agrandissement de la zone proche injecteur, et mise en évidence de la zone de recirculation arrière.

Un trop petit nombre d'injecteurs peut conduire à une mauvaise distribution de gouttes dans le domaine. Fig.7.15 est reportée une visualisation des particules numériques dans le domaine de calcul injectées à partir de cinq injecteurs positionnés le long de la paroi représentative du dard. Les gouttes sont injectées légèrement au-dessus de la paroi, afin de faciliter leur entraînement par la phase gazeuse. On se rend facilement compte que cette représentation est insuffisante : les filets de gouttes sont trop peu dispersés et séparés par des zones vides de gouttes. Afin de remédier à ce problème, nous injectons directement les gouttes à partir d'une face frontière du cône. Cette option, disponible dans CEDILLE, nous permet de répartir uniformément les gouttes injectées le long du dard. Nous avons choisi de diviser la surface de ce dernier en dix zones, chaque zone étant caractérisée par une direction d'injection $\theta(x)$ (avec $\theta_i=69^\circ$) défini par l'équation (7.1). Les données caractéristiques des dix zones sont rappelées dans le tableau 7.3. Une visualisation des gouttes ainsi injectées est reportée Fig.7.16.

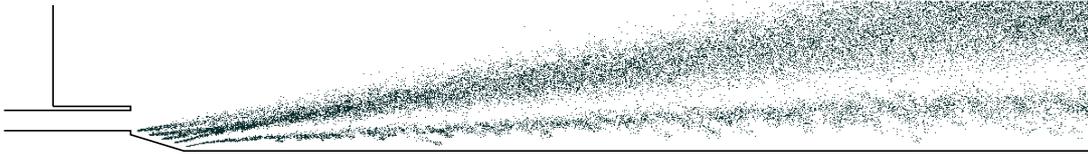


FIGURE 7.15: Position des gouttes injectées au moyen d'injecteurs ponctuels.

	Angle θ	Vitesse U_x (m/s)	Vitesse U_y (m/s)
Zone 1	52.5	6.1	7.93
Zone 2	40	7.35	6.77
Zone 3	28.2	8.8	4.75
Zone 4	21	9.3	3.7
Zone 5	14.5	9.7	2.5
Zone 6	10	9.8	1.8
Zone 7	6.7	10	1.2
Zone 8	4.2	10	0.7
Zone 9	1.8	10	0.3
Zone 10	1	10	0.05

TABLE 7.3: Caractéristiques des injecteurs surfaciques.

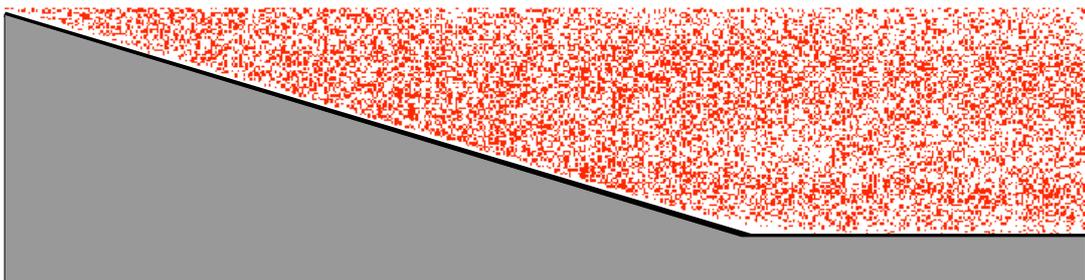


FIGURE 7.16: Agrandissement de la zone proche injecteur : position des gouttes injectées au moyen d'injecteurs surfaciques.

7.2.2 Simulation non-réactive

Avant d'introduire les goutelettes d'oxygène liquide dans le domaine, nous réalisons d'abord la convergence à l'ordre 2 de l'écoulement d'hydrogène pur. Ceci permet aux gouttes d'être

emportées tout de suite par la phase gazeuse (et facilite la convergence numérique). A la fin de cette étape, le champ moyen de vitesse axiale pour la phase gazeuse a l'allure représentée Fig.7.17. Nous constatons que la vitesse est pratiquement constante dans le canal d'injection avec une valeur voisine de 319 m/s. Une vitesse positive est aussi observée le long de la paroi représentant le dard liquide. Dans les premiers temps, les gouttelettes seront donc transportées par ce champ de vitesse. Néanmoins, la présence d'une phase dense modifie profondément la topologie de l'écoulement. Sur la Fig.7.18 est reporté le champ moyen de vitesse axiale en présence de gouttes. On remarque immédiatement l'influence des gouttes sur le champ de vitesse de la phase gazeuse : l'écoulement d'hydrogène est dévié vers l'extérieur alors que la zone proche de l'axe de symétrie est occupée par un mélange de gouttelettes d'oxygène plus lourd.

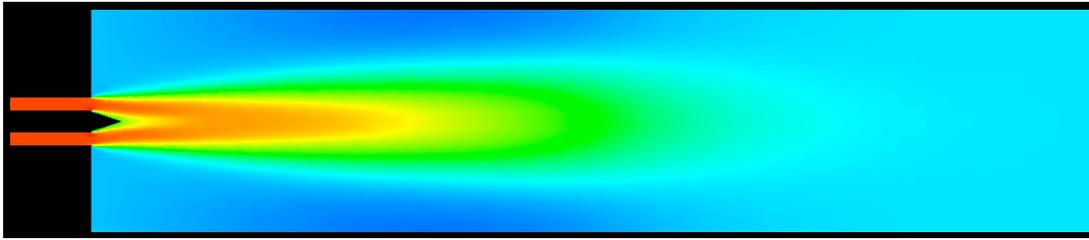


FIGURE 7.17: Champ moyen de vitesse axiale avant injection des gouttes (cas non réactif).

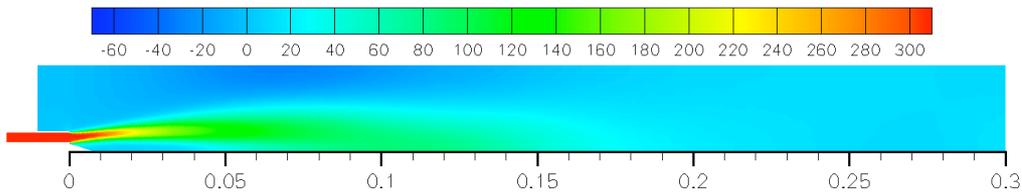


FIGURE 7.18: Champ de vitesse axiale moyenne en présence de gouttes (cas non réactif).

Les champs de température moyenne et de fraction massique moyenne en oxygène évaporé sont reportés Fig.7.19. La production de vapeur est maximale pour des positions proches de l'axe de symétrie et proches de la paroi représentant le dard liquide. Plusieurs raisons peuvent expliquer ceci. Les gouttes injectées au plus près du jet périphérique d'hydrogène sont emportées vers la périphérie tout en s'évaporant. Ainsi, on retrouve une fraction massique en oxygène non négligeable en périphérie (point $x=0.1\text{m}$ et $r=0.25\text{m}$ par exemple), voir Fig.7.19. Il faut tout de même noter que l'oxygène étant beaucoup plus lourd que l'hydrogène, une augmentation même faible de sa concentration entraîne une forte augmentation de sa fraction massique. D'autre part, la valeur de la vitesse au niveau des injecteurs situés plus près de l'axe de symétrie est plus faible (de l'ordre de 20 m/s) et les gouttes sont emportées moins loin, ce qui tend

à augmenter l'accumulation et l'évaporation de gouttes dans cette zone, modifiant en retour le champ de vitesse. La zone de forte concentration en oxygène gazeux qui se forme est une zone froide, où les températures moyennes sont de l'ordre de 90K, voir Fig.7.19. On constate aussi que la variance de la fraction de mélange est plus importante en dehors de la zone froide, voir Fig.7.20.

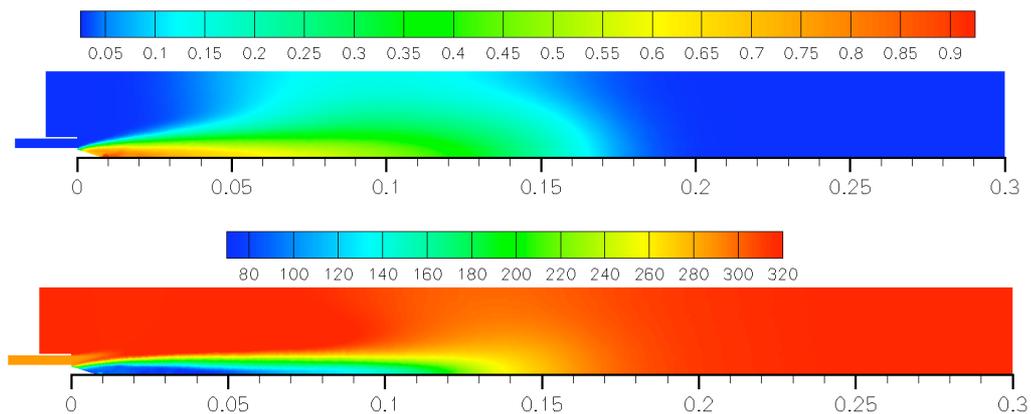


FIGURE 7.19: Champ de fraction massique moyenne en oxygène évaporé (haut) et champ de température moyenne correspondant (bas) pour une simulation non réactive.

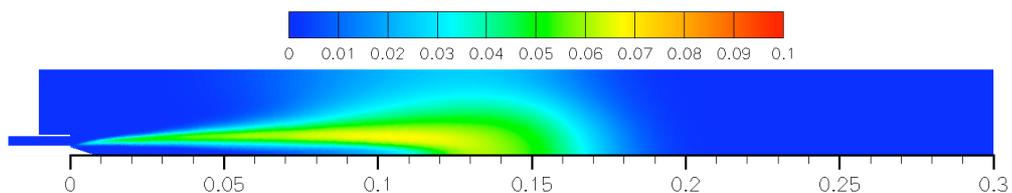


FIGURE 7.20: Champs de variance de la fraction de mélange pour une simulation non réactive.

Les champs d'énergie cinétique turbulente moyenne et de dissipation sont reportés Fig.7.21. Comme attendu, les niveaux sont élevés dans la zone de cisaillement externe du jet d'hydrogène et derrière l'épaisseur séparant le canal d'injection de l'hydrogène et celui d'oxygène. On peut remarquer le faible niveau d'énergie cinétique turbulente dans la zone de forte concentration en oxygène gazeux.

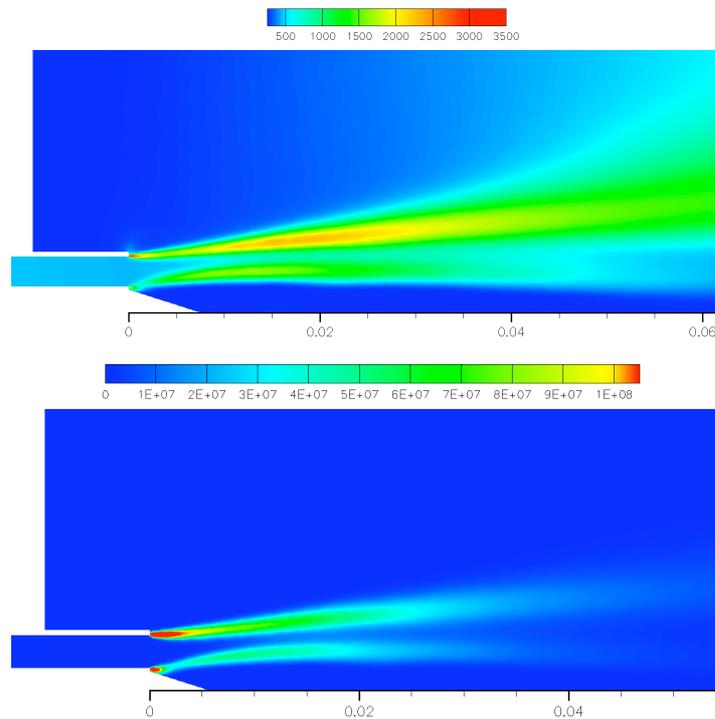


FIGURE 7.21: Champ d'énergie cinétique turbulente moyenne et de dissipation en présence de gouttes pour une simulation non réactive.

7.2.3 Simulation réactive

Les résultats de la simulation réactive du cas test MASCOTTE sont présentés ici. La combustion a été initiée à partir de la solution convergée présentée dans le paragraphe précédent. Nous discuterons dans un premier temps de la position et de la forme de la flamme obtenue que nous essaierons de comparer avec les observations du radical OH effectuées expérimentalement par l'ONERA pour déterminer la position de la flamme. Puis nous présenterons quelques résultats quantitatifs afin de juger de l'accord avec les données disponibles. Malheureusement, ce type de calcul est parfois assez long (plusieurs jours de calcul) et les résultats présentés dans la suite sont issus de simulations non parfaitement convergées, ce qui explique la présence d'instabilités sur les champs moyens.

D'un point de vue qualitatif, plusieurs points peuvent être discutés. Premièrement, l'accrochage de la flamme a toujours été constaté expérimentalement, et la flamme semble entourer le brouillard de goutelettes [176]. Les résultats de notre simulation numérique montrent également que la flamme est accrochée à la lèvre de l'injecteur séparant le canal d'hydrogène et le cœur d'oxygène liquide. Fig.7.22 est reportée une visualisation du radical OH après transformée d'Abel, obtenue expérimentalement (ONERA). On peut constater sur la visualisation expérimentale l'influence de la zone de recirculation sur la géométrie de la flamme, et plus

particulièrement avec quel angle la flamme s'ouvre.

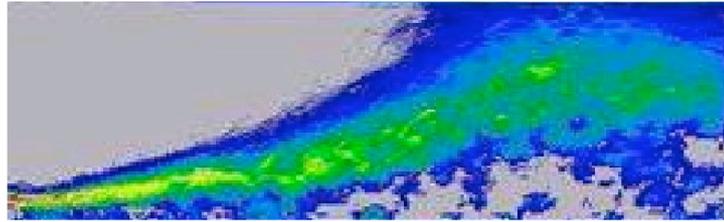


FIGURE 7.22: Visualisation du radical OH par transformée d'Abel (ONERA).

Le champ de vitesse axiale moyenne est reporté Fig.7.23. L'écoulement d'hydrogène débouchant dans la chambre avec une vitesse de 320 m/s est dévié vers la paroi extérieure sous l'effet conjugué de la présence des gouttes et de l'expansion thermique qui accompagne la combustion. Il se crée un coeur froid de faible vitesse entouré d'un courant plus rapide de gaz brûlés et d'hydrogène imbrûlé. Au delà de la position $x = 250$ mm, on constate Fig.7.24 que tout l'oxygène a été consommé, ce qui est bien en accord avec les conditions de fonctionnement en excès d'hydrogène retenues pour ce cas test par les expérimentateurs.

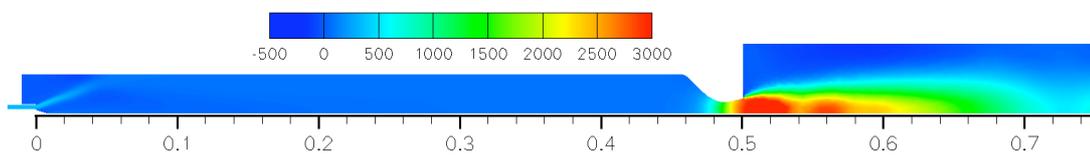


FIGURE 7.23: Champ de vitesse axiale moyenne (m/s), obtenu à l'issue de la simulation numérique réactive.

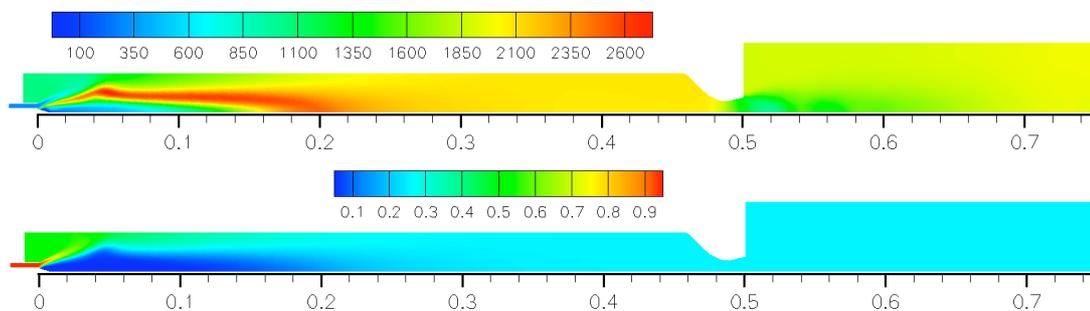


FIGURE 7.24: Champ de température moyenne (K), et champ de fraction de mélange moyenne obtenus à l'issue de la simulation numérique réactive.

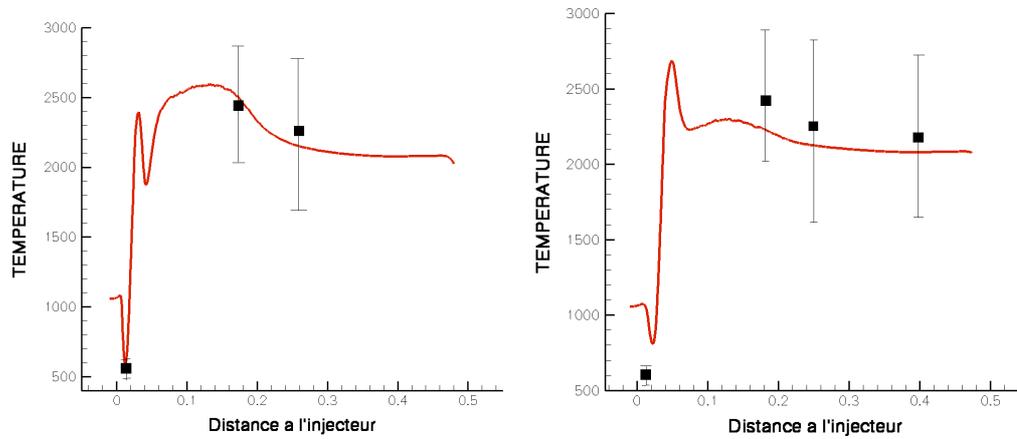


FIGURE 7.25: Profils axiaux de température moyenne (K) en $y=10\text{mm}$ et $y=15\text{mm}$: comparaison avec les mesures DRASC sur H_2 .

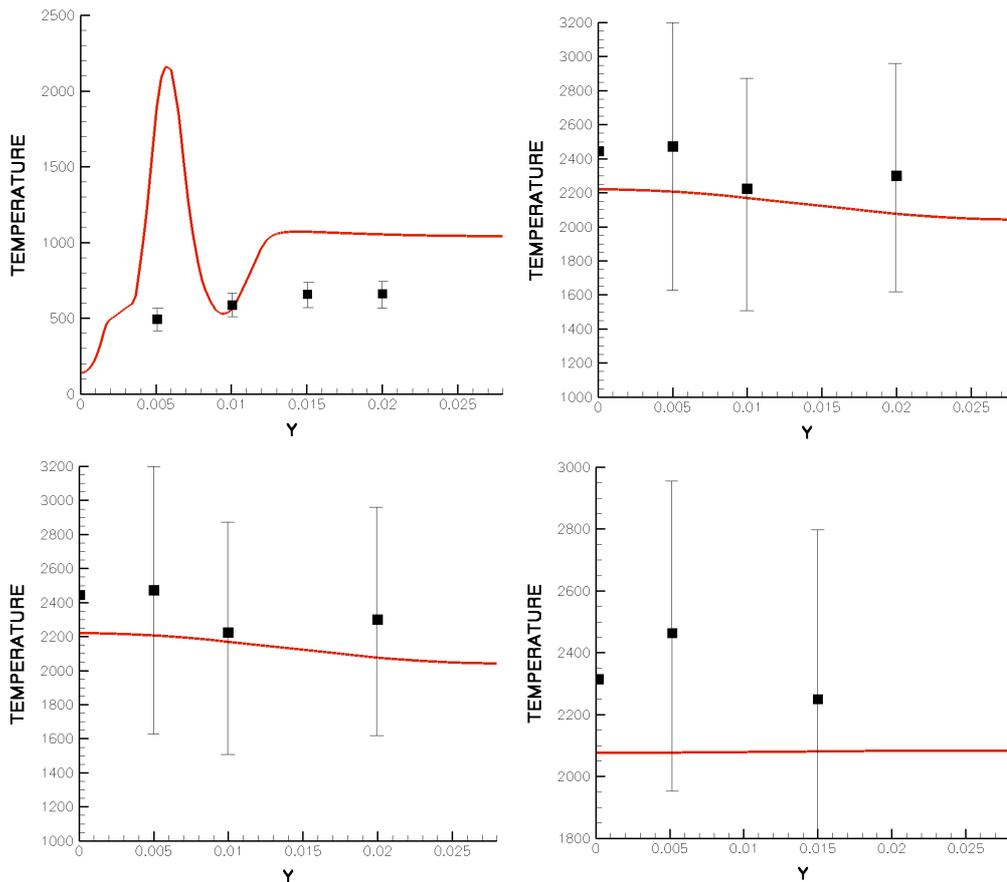


FIGURE 7.26: Profils radiaux de température moyenne (K), en $x=10\text{mm}$, $x=250\text{mm}$, $x=300\text{mm}$, et $x=410\text{mm}$: comparaison avec les mesures DRASC sur H_2 .

D'un point de vue plus quantitatif, les profils axiaux de température moyenne en $y=10\text{mm}$

et $y=15\text{mm}$ sont comparés Fig.7.25 avec les mesures expérimentale DRASC sur H_2 . Les profils radiaux sont reportés Fig.7.26. Les niveaux de température sont en bon accord avec les mesures. Néanmoins, le profil de température en $x=10\text{mm}$ fait apparaître une température trop élevée dans la zone de recirculation. Ceci semble plutôt lié à la méthode d'injection des gouttes qu'au modèle de combustion lui-même. En effet, dans la représentation de Caré et Ledoux que nous avons employée ici, les gouttes les plus proches du canal d'hydrogène sont injectées avec un angle supérieur à 60 degrés. Un tel angle n'est vraisemblablement pas observé expérimentalement, voir Fig.7.12, et on constate aussi cette différence sur la figure 7.22 : l'ouverture de la flamme d'après les observations sur le radical hydroxyle est progressive. Une simulation numérique que nous avons menée avec une direction d'injection ramenée à 30 degrés a confirmé cette hypothèse : les profils de température observés dans la même zone à l'issue de cette simulation sont concluants.

7.3 Conclusions

La simulation du cas MASCOTTE dans des conditions sous-critiques a été menée à bien, et les résultats obtenus montrent un accord qualitatif satisfaisant avec les observations expérimentales. La flamme jet diphasique qui se stabilise est accrochée aux lèvres de l'injecteur et s'épanouit autour d'un coeur central froid composé d'oxygène gazeux et de gouttes d'oxygène liquide. Tout l'oxygène est bien brûlé avant la sortie de la chambre, ce qui est en accord avec les observations expérimentales et les conditions d'injection en excès d'hydrogène. Les profils radiaux et axiaux de température montrent un accord satisfaisant avec les données expérimentales, pour des positions proches de la sortie de l'injecteur et éloignées de celle-ci. Cependant, quelques différences subsistent dans la zone de recirculation proche de l'injection. Ceci souligne l'effort de modélisation qui doit être fourni pour décrire les écoulements diphasiques. Les caractéristiques des particules injectées et l'évolution de leur rayon sont des facteurs déterminants dans le positionnement et la géométrie de la flamme obtenue. De plus, les combinaisons des différents modèles d'atomisation, de collisions-coalescence, de rebond et de dispersion sont susceptibles d'influencer les résultats obtenus. Une étude paramétrique pourra être menée à ce sujet.

Chapitre 8

Conclusions et perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit portent sur la modélisation et la simulation numérique de la combustion turbulente dans des écoulements rapides turbulents, et éventuellement diphasiques, représentatifs des conditions rencontrées dans des moteurs fusées. La description des flammes non-prémélangées qui se stabilisent dans ce type d'écoulements requiert une approche capable de restituer les phénomènes liés à la compressibilité de l'écoulement, au mélange turbulent, et à la cinétique chimique, et éventuellement à la nature diphasique de l'écoulement.

Même si, avec l'augmentation constante des capacités de calcul numérique, on peut imaginer une simulation aux grandes échelles du domaine complet à plus ou moins long terme, à l'heure actuelle, les simulations numériques de la combustion turbulente dans une chambre de moteur fusée ne restent envisageables que par des approches RANS ou U-RANS du fait de la complexité de la géométrie considérée et des conditions extrêmes rencontrées. Du point de vue de la modélisation de la combustion, les modèles de combustion de type flammelettes développés jusqu'à maintenant ne permettent pas de rendre totalement compte des spécificités de la combustion supersonique. L'hypothèse de chimie rapide sur laquelle repose ces modèles est susceptible d'être mise en défaut. De ce fait, les modèles à PDF sont plus appropriés mais peuvent se révéler très coûteux en ressources, dans le cas de modèles à PDF calculée, pour une application industrielle.

L'approche proposée ici permet de pallier à cette difficulté. Elle repose sur l'évaluation de la PDF jointe de deux scalaires, le premier permettant de quantifier la composition du mélange, le deuxième caractérisant l'écart à l'état d'équilibre chimique. Nous avons pu montrer qu'une hypothèse de chimie brusque était satisfaisante : celle-ci nous permet d'introduire une dépendance entre les deux scalaires et de s'en tenir à la seule estimation de la PDF marginale de la variable de mélange. Les spécificités de la combustion supersonique sont incluses ici par le biais de l'enthalpie totale qui nous permet d'inclure l'effet de la conversion de l'énergie cinétique en énergie thermique et son influence sur le développement de la réaction chimique. Enfin, le modèle est aussi employé pour la description de la combustion turbulente en milieu diphasique : les

fluctuations de composition de la phase gazeuse induites par l'évaporation d'un réactif liquide sont prises en compte en suivant la démarche introduite par Borghi [125] déjà employée avec succès dans les travaux de Demoulin et Borghi [124].

Le modèle complet a été implanté dans le code de calcul industriel *N3SNatur*. Ce code Navier-Stokes tridimensionnel compressible et réactif repose sur des schémas numériques à capture de chocs très robustes. Il a été couplé à une méthode d'adaptation de maillage. Cette stratégie s'est révélée très intéressante pour l'amélioration de la discrétisation spatiale des zones de mélange et la capture des fortes discontinuités rencontrées dans les cas de calculs auxquels nous nous sommes intéressés. Nous avons donc effectué la validation du modèle avec le code *N3SNatur* sur plusieurs géométries suffisamment bien documentées : une flamme jet supersonique stabilisée dans le sillage d'injecteurs co-courants H₂ / air vicié, une chambre de combustion de type Scramjet présentant de nombreuses interactions entre la zone de combustion et des ondes de choc, un cas de jet fortement sous-détendu, et enfin un cas d'écoulement diphasique en conditions sous-critiques correspondant à la configuration A-10 du banc MASCOTTE de l'ONERA. Les simulations numériques ont permis d'obtenir des résultats très encourageants et de nombreuses perspectives de développement sont ouvertes.

Une première perspective de développement du modèle de combustion turbulente présenté dans nos travaux concerne la considération d'entrées multiples. En effet, basé sur la considération d'une seule fraction de mélange, il ne permet pour l'instant la description que de géométries constituées de deux entrées. Même si le formalisme pour la considération d'injections multiples est déjà disponible, la description de la composition du mélange nécessite dans le cas turbulent la considération de la PDF jointe de plusieurs variables de mélange, pour laquelle une méthode de PDF partielle a été introduite par Mura et Borghi [94]. Deuxièmement, des améliorations doivent être apportées au modèle de combustion afin de rendre compte du couplage entre la turbulence et le dégagement de chaleur qui accompagne la combustion. Celui-ci peut être à l'origine du phénomène de diffusion à contre-gradient, cela même pour les flammes de diffusion et ce phénomène devrait être inclus dans la fermeture des termes correspondants dans les équations de transport. La description du mélange à petite échelle requiert aussi une attention particulière et la description des processus de combustion pourrait largement bénéficier d'une équation pour la dissipation scalaire. En particulier, tout reste à faire pour prendre en compte dans cette équation l'influence des gouttes s'évaporant [127]. Une extension du modèle à des conditions supercritiques est aussi envisageable et nécessite un effort particulier de modélisation du mélange turbulent, qui est susceptible de s'apparenter à un mélange présentant de forts gradients de densité en phase gazeuse (au delà du point critique) ou à un mélange en présence de deux phases. Des travaux dans ce sens ont déjà été proposés dans la référence [127]. Finalement, des perspectives intéressantes sont ouvertes quant à l'utilisation du modèle dans le cadre d'approches U-RANS ou LES. En effet, Cook et Riley [182] ont déjà proposé un modèle de sous-maille en LES pour la description de la combustion turbulente non-prémélangée. Ils

ont basé leur modèle sur une approche de type flammelles laminaires étirées pour tenter d'inclure des effets de chimie finie, et considéré une PDF de sous-maille présumée pour la fraction de mélange. Le modèle présenté dans ce mémoire, qui repose lui aussi essentiellement sur la description de cette PDF de sous-maille, doit donc pouvoir être étendu à un cadre LES sans la moindre difficulté.

Bibliographie

- [1] Curran, E.T., Heiser, W., Pratt, D.T., "Fluid phenomena in Scramjet combustion systems", *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol.28, pp.323-360, 1996.
- [2] Heiser, W., Pratt, D.T., "Hypersonic airbreathing propulsion", J.S. Przemieniecki (Ed.), *AIAA Education Series*, 1994.
- [3] Bray, K.N.C, Libby, P.A., Williams, F.A., "High speed turbulent combustion", *Turbulent Reacting Flows*, P.A. Libby, F.A. Williams (Eds.), Academic Press, pp.609-638, 1994.
- [4] Bogdanoff, D.W., "Compressibility effects in turbulent shear layers", *AIAA Journal*, 21(6), pp.926-927, 1983.
- [5] Papamoschou, D., Roshko A., "The compressible turbulent shear layer : an experimental study", *Journal of fluid Mechanics*, 197, pp.453-477, 1988.
- [6] Fujimori, T., Murayama, M., Sato, J., Kobayashi, H., Niioka, T., "Flame Holding behind a wedge by incident shock waves", *Iutam symposium on combustion in supersonic flows*, M. Champion and B. Deshaies (Eds.), Kluwer Academic Publishers, pp.95-110, 1997.
- [7] Huh, H., Driscoll, J.F., "Shock-wave-enhancement of the mixing and the stability limits of supersonic hydrogen-air flames", *Proceedings of the Combustion Institute*, 26, pp.2933-2939, 1996.
- [8] Brown, G.L., Roshko, A., "On density effects and large structure in turbulent mixing layers". *Journal of Fluid Mechanics*, 23, pp.1929-1934, 1980.
- [9] Landis, F., Shapiro, A.H., "The turbulent mixing of co-axial gas jets". *Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*, Stanford University Press, California, 1951.
- [10] Kolmogorov, A.N., "Local structure of turbulence in an incompressible fluid for very large Reynolds numbers". *Comptes Rendus (Doklady) de l'Académie des Sciences de l'U.R.S.S.*, 31, pp. 301-305, 1941. Reprinted in : S.K. Friedlander and L. Topper (editors). *Turbulence : Classic Papers on Statistical Theory*, New-York : Interscience Publishers, 1961.
- [11] Liu J.T.C., "Coherent structures in transitional and turbulent free shear flows". *Annual review of fluid mechanics*, 21, pp.285-315, 1989.

- [12] Pope S.B. "An explanation of the turbulent round-jet/plane jet anomaly", *AIAA Journal*, 16, pp.279-281, 1978.
- [13] Chinzei N., Masuya G., Komuro T., Murakami A., Kudou K., "Spreading of two-stream supersonic turbulent mixing layers", *Physics of Fluids*, 29(5), pp.1345-1347, 1986.
- [14] Lau J.C., "Effects of exit Mach number and temperature on mean-flow and turbulence characteristics in round jets". *Journal of Fluid Mechanics*, 105, pp.193-218, 1981.
- [15] Dutton J.C., Burr R.F., Goebel S.G., Messersmith N.L., "Compressibility and mixing in a turbulent free shear layer". *Twelfth symposium on turbulence*, pp. A21-1, 1990.
- [16] Clemens N.T., Paul. P.H., Mungal M.G., Hanson R.K., "Scalar mixing in the supersonic shear layer". *AIAA Paper 91-1720*, 1991.
- [17] Hall J.L., Dimotakis P.E., Rosemann H., "Some measurements of molecular mixing in compressible turbulent shear layers". *AIAA Paper 91-1719*, 1991.
- [18] Burke, S.P., Schumann, T.E., "Diffusion Flames", *Industrial and Engineering Chemistry*, 20, pp.998-1004, 1928.
- [19] Chung, S.H., Lee, B.J., "On the characteristics of laminar lifted flames in a non-premixed jet", *Combustion and Flame*, 86, 1-2, 62, 1991.
- [20] Jackson, T.L., Hussaini, M.Y., "An asymptotic analysis of supersonic reacting mixing layer". *Combustion Science and Technology*, 57, pp.129-140, 1988.
- [21] Grosch, C.E., Jackson, T.L., "Ignition and structure of a laminar diffusion flame in a compressible mixing layer with finite rate chemistry". *Journal of Physics of Fluids*, A3(12), 1991.
- [22] René-Corail, M., Figueira Da Silva, L.F., Deshaies, B., Champion, M., "Structure of combustion in supersonic H₂-Air mixing layers". *STAR European Symposium. Properties of reactive fluids and their application to propulsion*, Nov. 23-27 1992, Poitiers France.
- [23] Morgenthaler, V., Figueira Da Silva, L.F., Deshaies, B., Sabel'nikov, V.A., "Non premixed combustion in supersonic turbulent flows : a numerical study for co-flowing H₂-air jets". *AIAA Paper 99-4917*, 1999.
- [24] He, L., "Etude des phénomènes d'allumage. Applications aux mélanges H₂/O₂". *Mémoire de thèse à l'université de provence*, 1991.
- [25] Figueira Da Silva, L.F., Deshaies, B., Champion, M., René-Corail, M., "Some specific aspects of combustion in supersonic H₂-Air laminar mixing layers". *Combustion Science and Technology* (89), pp.317-333, 1993.
- [26] Palmer, J.L., Hanson, R.K., "Temperature imaging in a supersonic free jet of combustion gases with two-line OH fluorescence", *Applied Optics*, Vol.35, 3, pp.485-499, 1996.

- [27] Adamson, Jr. T.C., Nicholls, J.A., "On the structure of jets from highly underexpanded nozzles into still air". *Journal of the Aerospace Sciences*, Vol.26, pp.16-24, 1959.
- [28] Love, E.S., Grisby, C.E., Lee, L.P., Woodling, M.J., "Experimental and theoretical studies of axisymmetric free jets". *NASA Technical Report R6*, Langley Research Center, 1959.
- [29] Cumber, P.S., Fairweather, M., Falle, S.A.E.G., Giddings, J.R., "Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets". *Journal of Fluids Engineering*, Vol.117, pp.599-604, 1995.
- [30] Panda, J., Seasholtz, R.G., "Measurement of shock structure and shock-vortex interaction in underexpanded jets using Rayleigh scattering". *Physics of Fluids*, Vol.11, No.12, pp.3761-3777, 1999.
- [31] Dam, N.J., Rodenburg, M., Tolboom, R.A.L., Stoffels, G.G.M., Huisman Kleinherenbring, P.M., Ter Meulen, J.J., "Imaging of an underexpanded nozzle flow by UV laser Rayleigh scattering". *Experiments in Fluids*, 24, pp.93-101, 1998.
- [32] Gicquel, P., Vingert, L., Lecourt, L., Barat, M., "Etudes expérimentales des sprays cryogéniques en combustion dans des conditions sub- et supercritiques". *Proceedings Combustion dans les moteurs fusées*, Cépaduès Editions, Toulouse, pp.359-369, 2001.
- [33] Gicquel, P., Brisson, E., Vingert, L., "Experimental investigation of a LOx spray under hot fire conditions". *Proceedings of the 7th International Conference on Liquid Atomization*, Seoul Korea, 1997.
- [34] Herding, G., Snyder, R., Rolon, J.C., Candel, S., "Investigation of cryogenic propellant flames using computerized tomography of OH emission images". *Journal of Propulsion Power*, 13(2), pp.146-151, 1998.
- [35] Juniper, M., Tripathi, A., Scoufflaire, P., Rolon, J.C., Candel, S., "Structure of cryogenic flames at elevated pressures". *28th International Symposium on Combustion*, pp.1103-1110, 2000.
- [36] Faeth, G.M., "Structure and atomization properties of dense turbulent sprays". *23rd International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute, pp.1345-1352, 1990.
- [37] Demoulin, F.X., Borghi, R., "PDF modeling of turbulent spray combustion with application to Diesel like experiment". *Combust. Flame*, **129**, pp.281-293, 2002.
- [38] Vallet, A., Burluka, A.A., Borghi, R., "Development of a Eulerian model for the "atomization" of a liquid jet", *Atomization and Sprays*, 11(6), pp.619-642, 2001.
- [39] Borghi, R., Gonzalez, M., "Applications of Lagrangian models to turbulent combustion". *Combustion and Flame*, **63**, pp.239-250, 1986.
- [40] Borghi, R., "The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling". *Transport Phenomena in combustion*. Vol.1. pp.1-18, 1995.

- [41] Landau, L., Lifshitz, E., "Mécanique des Fluides", Ellipses, 1998.
- [42] Chassaing, P., "Turbulence en mécanique des fluides. Analyse du phénomène dans une perspective de modélisation à l'usage de l'ingénieur", Editions Cépaduès, 2000.
- [43] Favre A., "Equations des gaz turbulents compressibles", *Journal de Mécanique*, vol.4, 1965.
- [44] Morkovin M.V. Effects of compressibility on turbulent flows. Coll. Int. CNRS No. 108, *Mécanique de la turbulence*, 1961.
- [45] Bradshaw P. Compressible turbulent shear layers. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 9, pp.33-52, 1977.
- [46] Barre S., Quine C., et Dussauge J.P. Compressibility effects on the structure of supersonic mixing layers : experimental results. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.259, pp.47-48, 1994.
- [47] Panda J., et Seasholtz R.G. Experimental investigation of Reynolds and Favre averaging in high-speed jets. *AIAA Journal*, Vol.44, No. 9, pp.1952-1959, 2006.
- [48] Pope S.B. Turbulent flows. Cambridge University Press, 2000.
- [49] Zheng L.L., et Bray K.N.C. Effects of dilatation dissipation on turbulent shear layer combustion in high speed flows. *Twenty-fourth Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, pp.405-411, 1992.
- [50] Spalart, P.R., et Allmaras, S.R., "A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows", AIAA Paper 92-0439, 1992.
- [51] Spalart, P.R., et Allmaras, S.R., "A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows", *La Recherche Aérospatiale* 1, 5-21, 1994.
- [52] Jones W.P., Launder B.E. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16, 1119, 1973.
- [53] Bailly C., Comte-Bellot G. *Turbulence*. CNRS Editions, 2003.
- [54] Shyy W., Krishnamurty V.S. Compressibility effects in modelling complex turbulent flows. *Progress in Aerospace Science*, 33 :587-645, 1997.
- [55] Vandromme D. Introduction to the modelling of compressible turbulence - notes de cours, 1997.
- [56] Zeman O. Dilatation dissipation : the concept and application in modelling compressible mixing layers. *Physics of Fluids A (Fluid Dynamics)*, pp.176-188, 1990.
- [57] Blaisdell, G.A., Mansour, N.N., Reynolds, W.C., "Compressibility effects on the growth and structure of homogeneous shear flows", *Journal of Fluid Mechanics* 256, 443-485, 1993.

- [58] Sarkar, S., "The stabilizing effect of compressibility in turbulent shear flows", *Journal of Fluid Mechanics* 282, 163-186, 1995.
- [59] Speziale C.G., Sarkar S., Gatski, T.B., " Modeling the pressure strain correlation of turbulence : an invariant dynamic system approach", *Journal of Fluid Mechanics*, 227, 245-272, 1991.
- [60] Coleman G.N., Mansour N.N. *Physics of Fluids A*, 3(9)2255, 1991.
- [61] Wilcox D.C., "Dilatation-dissipation corrections for advanced turbulence models", *AIAA Journal* 30(11)2639, 1992.
- [62] Huang P.G., Bradshaw P., Coakley T.J., "Turbulence models for compressible flows", *AIAA Journal* 32(4)735, 1994.
- [63] Vreman A.W., Sandham N.D., Luo K.H., "Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics", *Journal of Fluid Mechanics* 320 :235, 1996.
- [64] Pantano, C., Sarkar, S., "A study of compressibility effects in the high-speed turbulent shear layer using direct simulation", *Journal of Fluid Mechanics*, 451, 271-329, 2002.
- [65] Kreutz, T.G., Nishioka, M., et Law, C.K., "The role of kinetic versus thermal feedback in nonpremixed ignition of hydrogen versus heated air", *Combustion and Flame* 99 : 758-766, 1994.
- [66] Linan, A., *Acta Astronautica* 1 : 1007-1039, 1974.
- [67] Giovangigli, V., et Smooke, M.D., *Combustion Science and Technology* 53 : 23-49, 1987.
- [68] Bruel, P., Rogg, B., et Bray, K.N.C., *Twenty-third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp. 759-766, 1990.
- [69] Darabiha, N., et Candel, S., *Combustion Science and Technology* 86 : 67-85, 1992.
- [70] Balakrishnan, G., Smooke, M.D., et Willimas, F.A., Paper No. 95 presented at the 1993 technical meeting of the eastern states section of the Combustion Institute, Princeton University, Princeton, NJ, October 25-27, 1993.
- [71] Stern, W., Kravetz, B., Sokolik, A., " Self-ignition of short delays gas mixtures I Self-ignition of hydrogen mixtures with air", *Acta Physicochimica URSS* 8, 461-480, 1938.
- [72] Lewis, B., Von Elbe, G., "Ignition of explosive gas mixtures by electric sparks. 2. Theory of the propagation of flame from an instantaneous point source of ignition", *Journal of Chemical Physics*, 15(11), 803-808, 1947.
- [73] Nishioka, M., et Law, C.K., "A numerical study of ignition in the supersonic hydrogen/air laminar mixing layer", *Combustion and Flame* 108 : 199-219, 1997.
- [74] Champion, M., Deshaies, B., Joulin, G., "Relative influences of convective and diffusive transports during spherical flame initiation", *Combustion and Flame* 74(2), 161-170, 1988.

- [75] Mastorakos, E., Baritaud, T.A., et Poinso, T., *Combustion and Flame* 109 :198-223, 1997.
- [76] Im, H.G., Chen, J.H., et Law, C.K., "Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows", Twenty-Seventh symposium (International) on COmbustion / The Combustion Institute, 1047-1056, 1998.
- [77] Im, H.G., Helenbrook, B.T., Lee, S.R., et Law, C.K., *Journal of Fluid Mechanics* 322 : 275-296, 1996.
- [78] A.E. Lutz, R.J. Kee, J.A. Miller, "SENKIN : a FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis", *Senkin Manual*, 1988.
- [79] Kee, R.J., Miller, J.A., Jefferson, T.H., (1980), "CHEMKIN : A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package", *Sandia National Labs SAND80-8003/UC4*.
- [80] Mitchell, R.E., Kee, R.J., "A General Purpose Computer Code for Predicting Chemical Kinetics Behavior Behind Incident and Reflected Shocks", *Sandia National Labs SAND82-8205*, 1982.
- [81] Westbrook, C.K., Dryer, F.L., "Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion", *Prog. Ener. Combust. Sci.* **10** : 1-57, 1984.
- [82] Eklund, D.R., Drummond, J.P., Hassan, H.A., " *AIAA Journal* **28** (9) : 1633-1641, 1990.
- [83] Jachimowski, C.J., "An analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism with application to Scramjet Combustion", *NASA Technical Paper 2791*, 1988.
- [84] Marathe, A.G., Mukunda, H.S., Jain, V.K., *Combust. Sci. Techn.* **15** : 49-64, 1977.
- [85] A.E. Lutz, M. Rupley, R.J. Kee, "Equil : a CHEMKIN Implementation of STANJAN, for Computing Chemical Equilibria", *Equil Manual*, 1998.
- [86] Borghi, R., "Recent advances in Aerospace Sciences", pp.117-138, C. Bruno et C. Casci Editions, Plenum Publication Corporation, 1985.
- [87] Peters, N., "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion". *Proceedings of the 21st International Symposium on Combustion*, pp.1231-1250, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986.
- [88] Meneveau, C., Poinso, T., "Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion". *Comb. Flame*, 86, pp.311-332, 1991.
- [89] Bilger, R.W., "Structure of diffusion flames". *Combustion Science and Technology* 13, 1-6, pp.155-170, 1976.
- [90] Masri, A.R., Dibble, R.W., Bilger R.W., "Turbulent nonpremixed flames of methane near extinction - Mean structure from raman measurements". *Comb. Flame*, 71, pp.245-266, 1988.

- [91] Rembold, B., Grass, M., Jenny, P., "Parallel hybrid particle/finite volume algorithm for transported PDF methods employing sub-time stepping", *Computers and Fluids*, 37, pp.181-193, 2007.
- [92] Borghi, R., Pourbaix, E., "On the coupling of complex chemistry with a turbulent combustion model", *Physico Chemical Hydrodynamics*, 2, pp.65-77, 1981.
- [93] Launder, B.E., "Heat and Mass Transport". dans : *Turbulence, Topics in Applied Physics*, P. Bradshaw (Ed.), Springer Verlag (Berlin, Heidelberg) (1976), pp.231-287, 1976.
- [94] Mura, A., Borghi, R., "Introducing a new partial PDF approach for turbulent combustion modelling", *Combust. Flame*, 136, pp.377-382, 2004.
- [95] Villermaux, J., Devillon, J.C., "Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique", *Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, Amsterdam 1972, vol. B 1-13 (Elsevier), 1972.
- [96] Dopazo, C., "Recent developments in PDF methods". dans : *Turbulent Reacting Flows*, P.A. Libby and F. A. Williams (Eds.), Academic Press Inc., pp.375-474, 1994.
- [97] Dopazo, C., O'Brien E.E., "Approach to autoignition of a turbulent mixture", *Acta Astronautica* 1, pp.1239-1266, 1974.
- [98] Jones, W.P., Musonge, P., "Closure of the Reynolds stress and scalar flux equations", *Physics of Fluids*, 31, pp.3589-3604, 1988.
- [99] Mura, A., Borghi, R., "Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion", *Combust. Flame*, 133, pp.193-196, 2003.
- [100] Mura, A., Robin, V., Champion, M., "Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames", *Combust. Flame*, 149 (1-2), pp.217-224, 2007.
- [101] Swaminathan, N., Bray, K.N.C., "Effects of dilatation on scalar dissipation in turbulent premixed flames", *Combust. and Flame* 143(4), pp.549-565, 2005.
- [102] Bray, K.N.C., Libby, P.A., Moss, J.B., "Scalar length scale variations in premixed turbulent flames", *Proc. Combust. Inst.*, 20, pp.421-427, 1984.
- [103] Obounou, M., Gonzalez, M., Borghi, R., "A Lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects". *Proc. Combust. Inst.*, 25, pp.1107-1113, 1994.
- [104] Antonia, R.A., Browne, L.W.B., "The destruction of temperature fluctuations in a turbulent plane jet", *Journal of Fluid Mechanics*, 134, pp.67-83, 1983.
- [105] Lumley, J.L., Khajeh-Nouri, B., "Computational modeling of turbulent transport, Turbulent diffusion in environmental pollution", Frenkiel, R.N., Munn, R.E. Editions, *Advances in Geophysics*, pp.169-172, Academic 18A, London, 1974.

- [106] Zeman, O., Lumley, J.L., "Modeling buoyancy driven mixed layers", *Journal of Atmospheric Science*, 33, pp.1974-1988, 1976.
- [107] Mantel, T., Borghi, R., "A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation", *Combust. Flame*, 96, pp.443-457, 1994.
- [108] Newman, G.R., Launder, B.E., Lumley, J.L., "Modelling the behavior of homogeneous scalar turbulence", *Journal of Fluid Mechanics*, 111, pp.217-232, 1981.
- [109] Elghobashi, S.E., Launder, B.E., "Turbulent time scale and the dissipation rate of temperature variance in the thermal mixing layer", *Physics of fluids*, 26, pp.2415-2419, 1983.
- [110] Shih, T.H., Lumley, J.L., "Influence of time scale ratio on scalar flux relaxation", *Journal of Fluid Mechanics*, 162, pp.211-222, 1986.
- [111] Mura, A., Demoulin, F.X., "Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames", *Combustion Theory and Modelling*, 11(2), pp.227-257, 2007.
- [112] Bonniot, C., Borghi, R., Magre, P., "Turbulent combustion in a stirred reactor", *AIAA Paper 77-218*, 1977.
- [113] Bonniot, C., Borghi, R., "Joint probability density function in turbulent combustion", *Acta Astronautica*, 6, pp.309-327, 1979.
- [114] Chen, J.Y., "Stochastic modelling of partially stirred reactors", *Combust. Sci. Technol.*, 122, pp.63-94, 1997.
- [115] Ren, Z., Pope, S.B., "An investigation of the performance of turbulence mixing models", *Combust. Flame*, 136, pp.208-216, 2004.
- [116] Zheng, L.L., Bray, K.N.C., "The application of new combustion and turbulence models to H₂-Air non-premixed supersonic combustion", *Combust. Flame*, 99(2), pp.440-448, 1994.
- [117] Bray, K.N.C., Peters, N., *Turbulent Reacting flows*, P.A. Libby, et F.A. Williams Editions, Academic press, San Diego, p.63, 1994.
- [118] Kuznetsov, V.R., Sabel'Nikov, V.A., *Turbulence and Combustion*, Hemisphere, New-York, 1990.
- [119] Sabel'Nikov, V.A., Deshaies, B., Figueira Da Silva, L.F., "Revisited Flamelet Model for Nonpremixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows", *Combust. Flame*, 114, pp.577-584, 1998.
- [120] Morgenthaler, V., PhD Thesis, Université de Poitiers (1999), FRANCE.
- [121] Eifler, P., Kollman, W., "PDF prediction of supersonic hydrogen flames", 31st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, American Institute of Aeronautics and Astronautics, *AIAA Paper*, 93-0448, 1993.

- [122] Bray, K.N.C., Libby, P.A., Williams, F.A., "High speed turbulent combustion", *Turbulent Reacting Flows*, P.A. Libby, F.A. Williams (Eds.), Academic Press, pp.609-638, 1994.
- [123] Luo, K.H., Bray, K.N.C., "Combustion-induced pressure effects in supersonic diffusion flames", *Proc. Comb. Inst.*, **27**, pp.2165-2171, 1998.
- [124] Borghi, R., Demoulin, F.X., " Modeling of turbulent spray combustion with application to diesel like experiment", *Combust. Flame*, 129(3), pp.281-293, 2002.
- [125] Borghi, R., "The links between turbulent combustion and spray combustion and their modeling", *Transport Phenomena in Combustion*, Volume 1, 1995.
- [126] Spalding, D.B., "The combustion of liquid fuel", *4th International Symposium on Combustion*, Williams and Wilkins, Baltimore, pp.847-864, 1953.
- [127] Demoulin, F.X., Mura, A., Borghi, R., "Turbulent Reaction rate in two-phase flow flames", *Proceedings of the ECCOMAS*, 2004.
- [128] Roe, P.L., "Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes", *Journal of Computational Physics*, 3, pp. 357-372, 1981.
- [129] Lax, P.D., Wendroff, B., "Difference schemes for hyperbolic equations with high order accuracy", *Communications on pure and applied mathematics*, 17(3), pp. 381-390, 1964.
- [130] van Leer, B., "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. A Second Order Sequel to Godunov's Method", *Journal of Computational Physics*, 32, 101-136, 1979.
- [131] Martin, R., "Projet n3S-natur v1.4 - manuel théorique", Technical report, 2001.
- [132] Dolejší, V., "Anisotropic mesh adaptation for finite volume and finite element methods on triangular meshes", *Computational Visual Science*, 1, 165-178, 1998.
- [133] Dolejší, V., Felcman, J., "Anisotropic mesh adaptation for numerical solution of boundary value problems", *Numerical methods for partial differential equations*, 20(4), 576-608, 2004.
- [134] LeVeque, Randall, "Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems", Cambridge University Press. ISBN 978-0521009249, 2000.
- [135] Lax, P.D., "A concept of entropy", E. Zangantello editions, Proceedings of the Wisconsin conference, 1971.
- [136] Hirsch, C., "Numerical computation of internal and external flows. Volume 1 : Fundamentals of numerical discretization", Wiley Series in Numerical Methods in Engineering. Wiley-Interscience Publication, 1988.
- [137] Courant, R., Isaacson, E., Rees, M., "On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences", *Communications on pure and applied mathematics*, 5(3), 243-255, 1952.

- [138] Godunov, S.K., "Finite difference methods for numerical computations of discontinuous solutions of equations of fluid dynamics", *Mat. Sb.* 47, 271, 1959.
- [139] Harten, A., Lax P.D., "On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation schemes", *SIAM Review* 25, 35, 1981.
- [140] Toro, E.F., "Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics", Springer-Verlag, second edition, 1999.
- [141] van Leer, B., van Albada, G.D., et Roberts, W.W., "A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics", *Astronautics and Astrophysics*, 108, 76-84, 1982.
- [142] Figueira da Silva, L.F., Azevedo, J.L.F., and Korzenowski, H., "Unstructured Adaptive Grid Flow Simulations of Inert and Reactive Gas Mixtures", *Journal of Computational Physics*, Vol. 160, No. 2, pp. 522-540, 2000.
- [143] Lehnasch, G., Bruel, P., "A robust methodology for RANS simulations of highly underexpanded jets", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(12), 2179-2205, 2008.
- [144] Faeth, G., "Evaporation and combustion of sprays", *Progress in Energy and Combustion*, 9, 1-76, 1983.
- [145] Simonin, O., "Eulerian formulation for particle dispersion in two-phase flows", *Proceedings of the 5th workshop on two-phase predictions*, Erlangen, 1990.
- [146] Williams, F., "Spray combustion and atomization", *Physics of Fluids* 1, 1958.
- [147] Williams, F., *Combustion Theory*. 2nd Edition, New-York : Benjamin Cummings, 1985.
- [148] O'Rourke, P., "Collective drop effects on vaporizing liquid sprays", *Thèse de doctorat*, University of Princeton, Los Alamos National Laboratory, 1981.
- [149] Domelevo, K., Sainsaulieu, L., "A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flowfield",
- [150] Faeth, G., "Structure and break-up properties of sprays", *International Journal of Multiphase Flow* 21, 99-127, 1995.
- [151] Huh, K.Y., Gosman, A.D., *International Conference on Multiphase Flows*, Tsukuba, 1991.
- [152] Pilch, M., Erdman, C.A., "Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop", *International Journal of Multiphase Flow* 13(6), 741-757, 1987.
- [153] Ning, W., Reitz, R.D., Diwakar, R., "An Eulerian-Lagrangian spray and atomization model with improved turbulence modeling", *Atomization and Sprays*, 19(8), 727-739, 2009.
- [154] Torres, D.J., O'Rourke, P.J., Amsden, A.A., "A discrete multicomponent fuel model", *Atomization and Sprays*, 13(2-3), 131-172, 2003.

- [155] Watchers, L.H.J, et Westerling, N.A.Y., "The heat transfer from a hot wall to impinging water drops in the spheroidal state", 1966.
- [156] Cheng, T.S., Wehrmeyer, J.A., Pitz, R.W., Jarret, O., Northam, G.B., "Finite-rate chemistry effects in a Mach 2 reacting flow", AIAA Paper 91-2320, 1991.
- [157] Cheng, T.S., Wehrmeyer, J.A., Pitz, R.W., Jarret, O., Northam, G.B., "Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame", *Combust. Flame*, **99**, pp.57-173, 1994.
- [158] Waidmann, W., Alff, F., Bohm, M., Brummund, U., Clauss, W., Oswald M., "Supersonic Combustion of Hydrogen/air in a SCRAMJET combustion chamber", *Space Technology*, 15(6), pp.421-429, 1995.
- [159] Izard, J.F., Lehnasch, G., Mura, A., "A Lagrangian model of combustion in high speed flows : application to scramjet conditions", *Combustion Science and Technology*, 181(11), pp.1372-1396, 2009.
- [160] Izard, J.F., Mura, A., "A Lagrangian model for non-premixed combustion in supersonic turbulent flows", *Proceedings of the 18th International Shock Interaction Symposium*, Rouen, 2008.
- [161] Izard, J.F., Mura, A., "Stabilization of non-premixed flames in supersonic reactive flows", *Comptes Rendus Mécanique* 337, Combustion for aerospace propulsion, pp.362-372, 2009.
- [162] Möbus, H., Gerlinger, P., Brüggemann, D., "Scalar and joint scalar-velocity-frequency Monte Carlo PDF simulation of supersonic combustion", *Combust. Flame*, 132(1-2), pp.3-24, 2003.
- [163] Baurle, R.A., Alexopoulos, G.A., Hassan, H.A., "Modeling of Supersonic Turbulent Combustion Using assumed Probability Density Functions", *Journal of Propulsion and Power*, 10 (6), pp.777-786, 1994.
- [164] Baurle, R.A., Girimaji, S.S., "Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations", *Combust. Flame*, 134(1-2), pp.131-148, 2003.
- [165] Oervertmann, M., "Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a SCRAMJET using flamelet modeling", *Aerospace Science and Technology*, 4, pp.463-480, 2000.
- [166] Wepler, U., Koschel, W.W., "Numerical investigation of turbulent reacting flows in a scramjet combustor model", AIAA paper 2002-3572, 2002.
- [167] M. Berglund, M., Fureby, C., "LES of supersonic combustion in a scramjet engine model", *Proceedings of the Combustion Institute* 31, pp.2497-2504, 2007.

- [168] Ashkenas, H., Sherman, F.S., "The structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnels", *Advances in Applied Mechanics - Rarefied Gas Dynamics*, pp.84-105. Academic, New-York, 1966.
- [169] Becker, H.A., Booth, B.D., "Mixing in the Interaction Zone of Two Free Jets", *AICHE Journal* 21(5), pp.949-958, 1975.
- [170] Hopfinger, E., Lasheras, J., "Explosive breakup of a liquid jet by a swirling coaxial gas jet", *Physics of Fluids*, 8, pp.1696-1698, 1996.
- [171] Villiermaux, E., "Mixing and spray formation in coaxial jets", *Journal of Propulsion and Power*, 14(5), pp.807-817, 1998.
- [172] Vingert, L., Habiballah, M., Gicquel, P., Brisson, E., Candel, S., Herding, G., Scoufflaire, P., Rolon, C., Stepowski D., Cessou, A., Bazile, R., Guerre, S., Péalat, M., Grisch, F., Bourchardy, P., "Optical diagnostics for cryogenic liquid propellants combustion", *Symposium AGARD/PEP*, Brussels, 1997.
- [173] Herding, G., "Analyse expérimentale de la combustion d'ergols cryotechniques", Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 1997.
- [174] Snyder, R., Herding, G., Rolon, J., Candel, S., "Analysis of a flame pattern in cryogenic propellant combustion", *Combustion Science and Technology*, 124, pp.333-373, 1997.
- [175] Guerre, S., Bazile, R., Stepowski, D., "Conditioned dissipation and average consumption maps in a turbulent nonpremixed flame using planar-laser induced fluorescence of O₂", *Twenty-sixth symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute*, pp.105-111, 1996.
- [176] Juniper, M., "Combustion cryotechnique à haute pression", Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2001.
- [177] Habiballah, M., Orain, M., Grisch, F., Vingert L., Gicquel, P., "Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the MASCOTTE facility", *Combustion Science and Technology*, 178, pp.101-128, 2006.
- [178] Care, I., Ledoux, M., "Study of an airblast coaxial atomizer. Experiments and modelisation.", dans : ICLASS, pp.763-770, 1991.
- [179] Bodèle, E., Gökalp, I., Zurbach, S., et Saucereau, D. "Modeling of the Break-up of liquid oxygen droplets for application in a cryogenic rocket engine simulation code", *AIAA* 2002-4031, 2002.
- [180] Pourouchottamane, M., "Modélisation des brouillards denses pour la combustion cryotechnique", Thèse de doctorat, Université Aix-Marseille II, 2002.
- [181] Meyers, N., "Modélisation de la combustion cryotechnique avec prise en compte de l'atomisation primaire du jet d'oxygène liquide", Thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, 2003.

- [182] Cook, A.W., Riley, J.J., Kosaly, G., "A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows", *Combust. Flame* 109(3), pp.332-341, 1997.

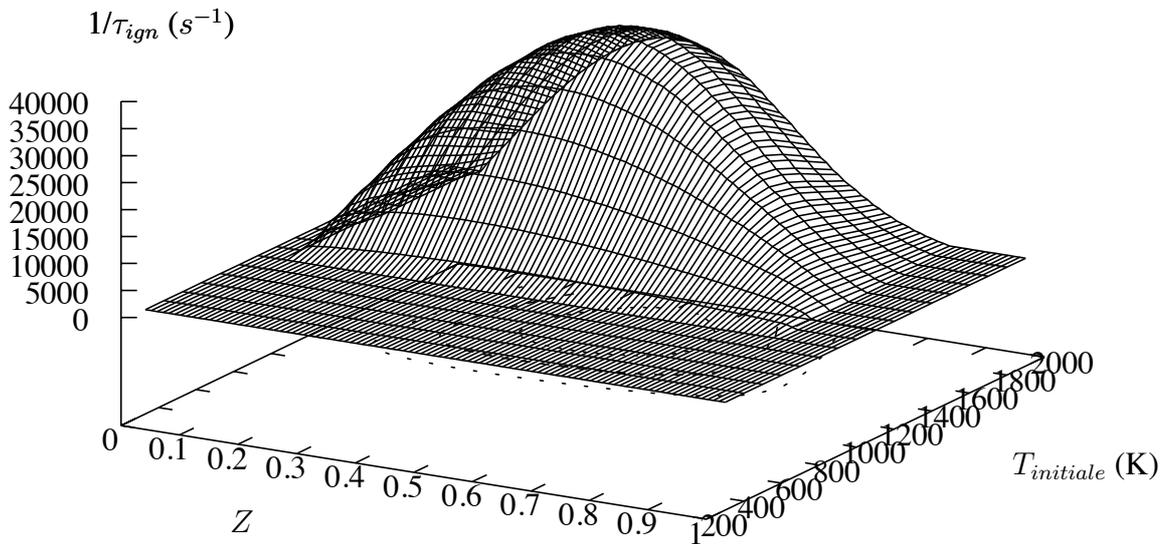
Annexe A

Détail des schémas cinétiques

A.1 Schéma de Kee et al. associé à Mitchell et al.

Réaction (Kee et al.)	A	b	E_a
H + O2 <=> OH + O	5.130E+16	-0.816	16507.0
O + H2 <=> OH + H	1.800E+10	1.000	8826.0
OH + H2 <=> H2O + H	1.170E+09	1.300	3626.0
OH + OH <=> O + H2O	6.000E+08	1.300	0.0
H2 + M <=> H + H + M	2.230E+12	0.500	92600.0
H2O/6.0/ H/2.0/ H2/3.0/			
H + OH + M <=> H2O + M	7.500E+23	-2.600	0.0
H2O/20.0/			
O2 + M <=> O + O + M	1.850E+11	0.500	95560.0
H + O2 + M <=> HO2 + M	2.100E+18	-1.000	0.0
H2O/21.0/ H2/3.3/ N2/0.0/ O2/0.0/			
H + HO2 <=> OH + OH	2.500E+14	0.000	1900.0
H + HO2 <=> H2 + O2	2.500E+13	0.000	700.0
H2 + O2 <=> OH + OH	1.700E+13	0.000	47780.0
O + HO2 <=> O2 + OH	4.800E+13	0.000	1000.0
OH + HO2 <=> H2O + O2	5.000E+13	0.000	1000.0
HO2 + HO2 <=> H2O2 + O2	2.000E+12	0.000	0.0
H2O2 + M <=> OH + OH + M	1.300E+17	0.000	45500.0
H2O2 + H <=> HO2 + H2	1.600E+12	0.000	3800.0
H + O2 + O2 <=> HO2 + O2	6.700E+19	-1.420	0.0
H + O2 + N2 <=> HO2 + N2	6.700E+19	-1.420	0.0
H2O2 + OH <=> H2O + HO2	1.000E+13	0.000	1800.0
+ Mitchell et al.			
N2 + O2 <=> NO + NO	9.100E+24	-2.500	128500.0
N2 + O <=> NO + N	7.000E+13	0.000	75000.0
O2 + N <=> NO + O	1.340E+10	1.000	7080.0
O2 + M <=> O + O + M	3.620E+18	-1.000	118000.0
N2/2.0/ O2/9.0/ O/25.0/			
N2 + M <=> N + N + M	1.920E+17	-0.500	224900.0
N2/2.5/ N/0.0/			
N2 + N <=> N + N + N	4.100E+22	-1.500	224900.0
NO + M <=> N + O + M	4.000E+20	-1.500	150000.0
NO/20.0/ O/20.0/ N/20.0/			

a) $p = 0.6$ bars, T variable, Z variable



b) $T = 1200$ K, p variable, Z variable

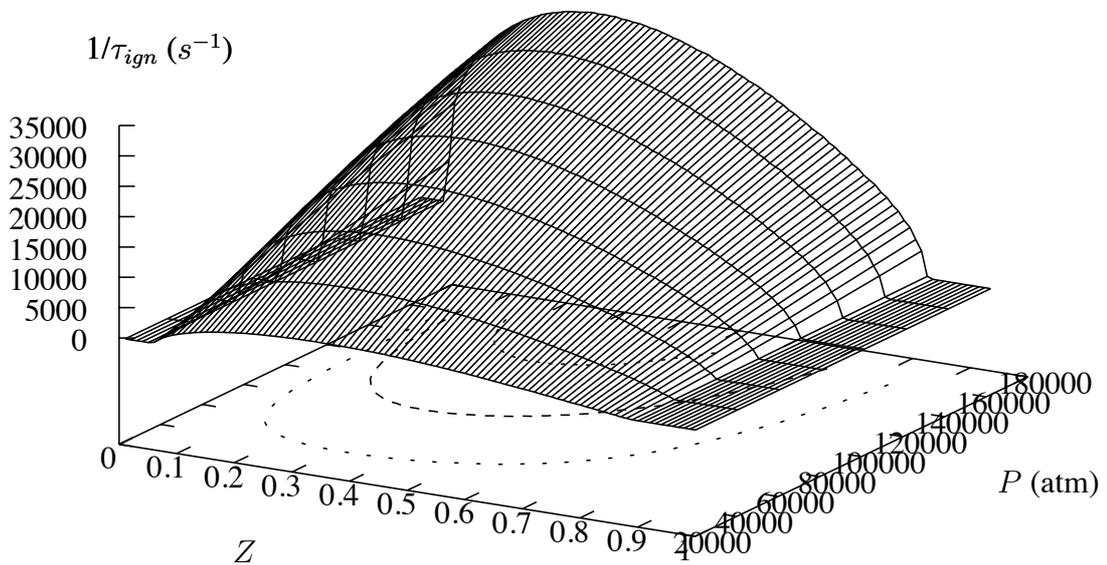


FIGURE A.1: Influence de la température, de la pression, et de la composition sur le schéma de Kee (+Mitchell).

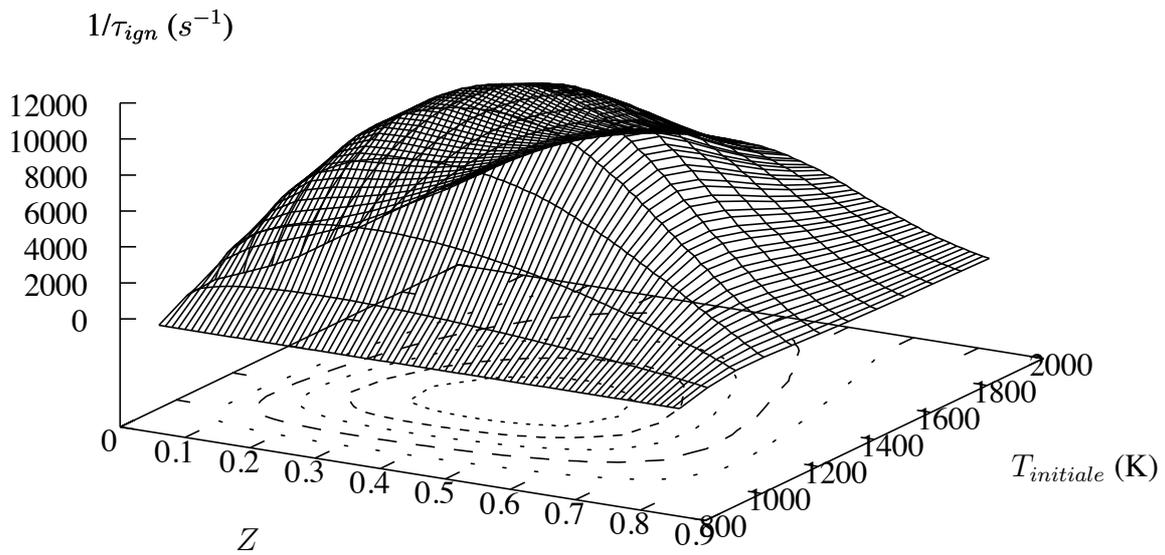
A.2 Schémas de Jachimowski et al.

Il existe plusieurs schémas de Jachimowski, modifiés selon l'importance d'une des réactions élémentaires pour les conditions de l'étude.

Réaction (Jachimowski et al. 1995)	A	b	E_a
$H_2+O_2=OH+OH$	1.70E+13	0.00	48002
$H+O_2=O+OH$	1.20E+17	-0.91	16513.7
$OH+H_2=H_2O+H$	2.20E+13	0.00	5150.15
$O+H_2=OH+H$	5.06E+04	2.67	6290.3
$OH+OH=H_2O+O$	6.30E+12	0.00	1090.12
$H_2O_2+H=H_2+O_2$	1.30E+13	0.00	0
$HO_2+H=OH+OH$	1.50E+14	0.00	1000.1
$HO_2+O=O_2+OH$	2.00E+13	0.0	0.0
$HO_2+OH=H_2O+O_2$	2.00E+13	0.0	0.0
$HO_2+H_2=H_2O_2+H$	3.01E+11	0.0	18700.9
$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	2.00E+12	0.0	0.0
$H+H_2O_2=H_2O+OH$	1.00E+13	0.0	3580.1
$O+H_2O_2=HO_2+OH$	2.80E+13	0.0	6400.2
$OH+H_2O_2=H_2O+HO_2$	7.00E+12	0.0	1435.08
$H+OH+M=H_2O+M$	2.21E+12	-2.0	0.0
$H+H+M=H_2+M$	7.30E+17	-1.0	0.0
$H+O_2+M=HO_2+M$	2.30E+18	-1.0	0.0
$H_2O_2+M=OH+OH+M$	1.21E+17	0.0	45502.06

Réaction (Jachimowski et al. [83])	<i>A</i>	<i>b</i>	<i>E_a</i>
H ₂ +O ₂ =OH+OH	1.70E+13	0.00	48000
H+O ₂ =OH+O	2.60E+14	0.00	16800
O+H ₂ =OH+H	1.80E+10	1.00	8900
OH+H ₂ =H ₂ O+H	2.20E+13	0.00	5150
OH+OH=H ₂ O+O	6.30E+12	0.00	1090
H+OH+M=H ₂ O+M	2.20E+22	-2.00	0
N ₂ /1.0/H ₂ O/6.0/			
H+H+M=H ₂ +M	6.40E+17	-1.00	0
N ₂ /1.0/H ₂ /2.0/H ₂ O/6.0/			
H+O+M=OH+M	6.00E+16	-0.6	0
N ₂ /1.0/H ₂ O/5.0/			
H+O ₂ +M=HO ₂ +M	2.10E+15	0.0	-1000
N ₂ /1.0/H ₂ /2.0/H ₂ O/16.0/			
HO ₂ +H=H ₂ +O ₂	1.30E+13	0.00	0
HO ₂ +H=OH+OH	1.40E+14	0.00	1080
HO ₂ +H=H ₂ O+O	1.00E+13	0.00	1080
HO ₂ +O=O ₂ +OH	1.50E+13	0.0	950
HO ₂ +OH=H ₂ O+O ₂	8.00E+12	0.0	0.0
HO ₂ +HO ₂ =H ₂ O ₂ +O ₂	2.00E+12	0.0	0.0
H+H ₂ O ₂ =H ₂ +HO ₂	1.40E+12	0.0	3600
O+H ₂ O ₂ =OH+HO ₂	1.40E+13	0.0	6400
OH+H ₂ O ₂ =H ₂ O+HO ₂	6.10E+12	0.0	1430
M+H ₂ O ₂ =OH+OH+M	1.20E+17	0.00	45500
N ₂ /1.0/H ₂ O/15.0/			
O+O+M=O ₂ +M	6.00E+17	0	-1800
N+N+M=N ₂ +M	2.80E+17	-0.75	0
N+O ₂ =NO+O	6.40E+09	1.00	6300
N+NO=N ₂ +O	1.60E+13	0	0
N+OH=NO+H	6.30E+11	0.50	0
H+NO+M=HNO+M	5.40E+15	0	-600
H+HNO=NO+H ₂	4.80E+12	0	0
O+HNO=NO+OH	5.00E+11	0.5	0
OH+HNO=NO+H ₂ O	3.60E+13	0	0
HO ₂ +HNO=NO+H ₂ O ₂	2.00E+12	0	0
HO ₂ +NO=NO ₂ +OH	3.40E+12	0	-260
H+NO ₂ =NO+OH	3.50E+14	0	1500
O+NO ₂ =NO+O ₂	1.00E+13	0	600
M+NO ₂ =NO+O+M	1.16E+16	0	66000

a) $p = 0.6$ bars, T variable, Z variable



b) $T = 1200$ K, p variable, Z variable

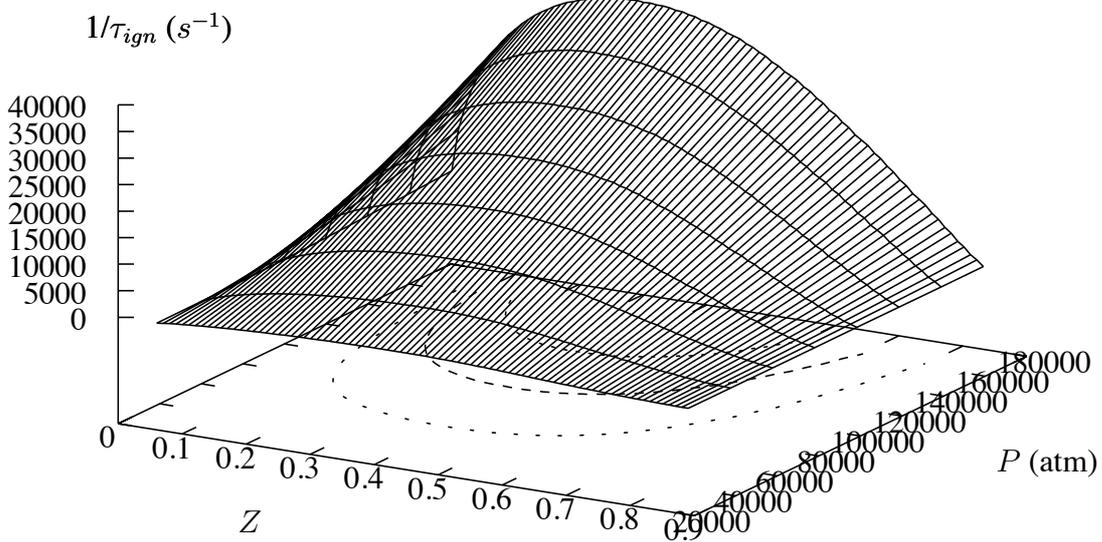
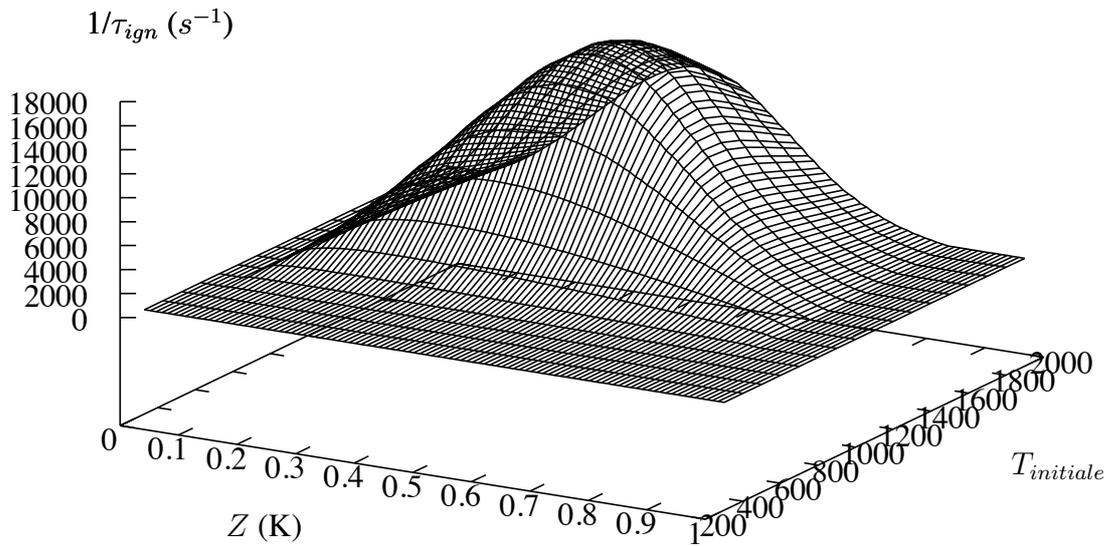


FIGURE A.2: Influence de la température, de la pression, et de la composition sur le schéma de Jachimowski.

A.3 Schéma de Eklund et al.

Réaction (Eklund et al.)	<i>A</i>	<i>b</i>	<i>E_a</i>
H ₂ +O ₂ =OH+OH	0.170E+14	0.00	48150
H+O ₂ =O+OH	0.142E+15	0.00	16400
OH+H ₂ =H ₂ O+H	0.316E+08	1.80	3030
O+H ₂ =OH+H	0.207E+15	0.00	13750
OH+OH=H ₂ O+O	0.550E+14	0.00	7000
H+OH+M=H ₂ O+M	0.221E+23	-2.00	0
H+H+M=H ₂ +M	0.653E+18	-1.00	0

a) $p = 0.6$ bars, T variable, Z variable



b) $T = 1200$ K, p variable, Z variable

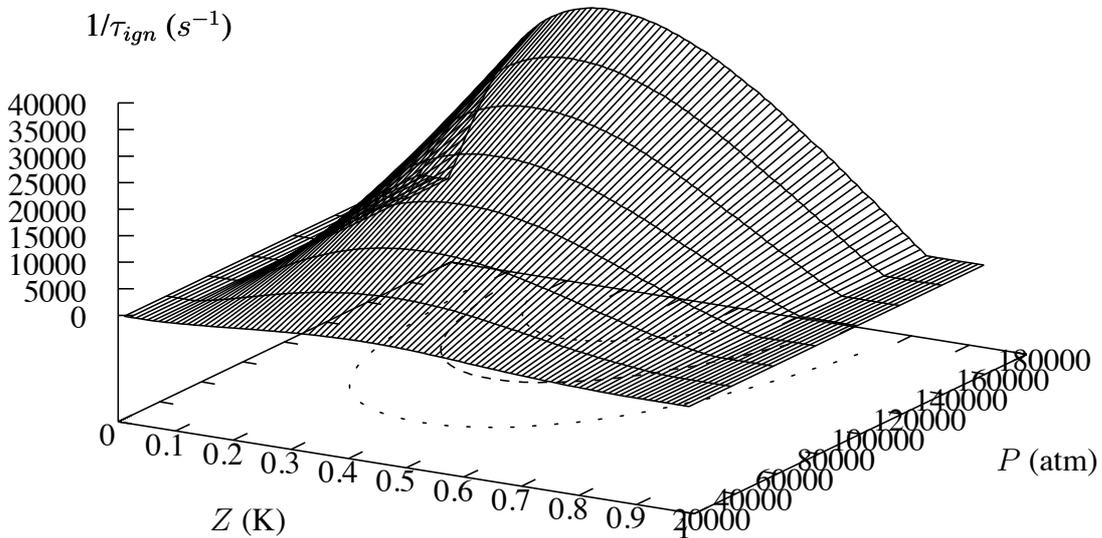
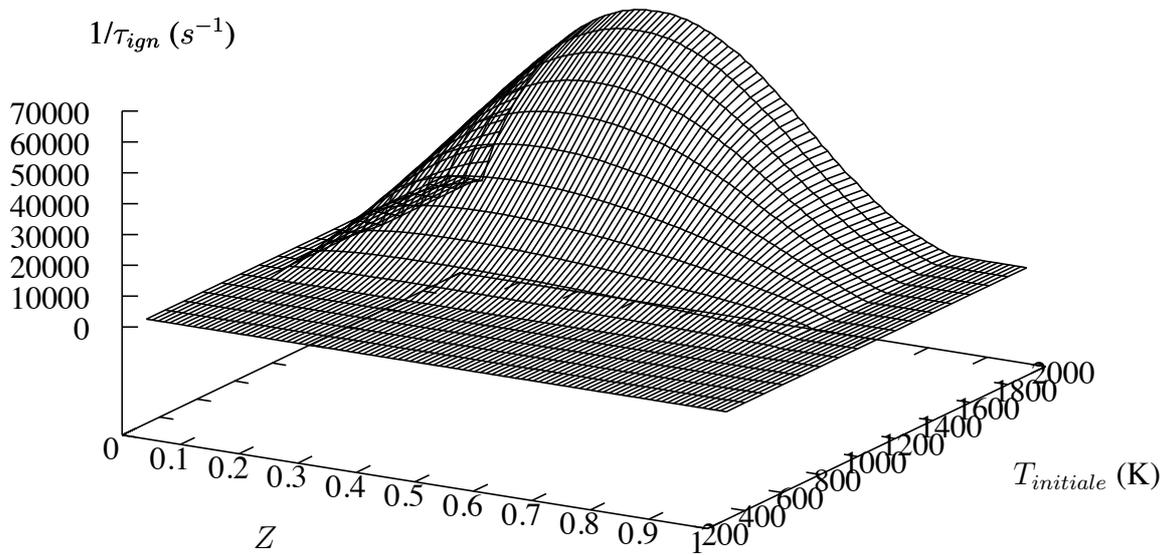


FIGURE A.3: Influence de la température, de la pression, et de la composition sur le schéma d'Eklund.

A.4 Schéma de Westbrook et al. associé à celui de Mitchell et al.

Réaction (Westbrook et al.)	<i>A</i>	<i>b</i>	<i>E_a</i>
H + O2 <=> O + OH	5.130E+16	-0.816	16510.0
O + H2 <=> H + OH	1.810E+10	1.000	8900.0
H2 + OH <=> H2O + H	2.200E+13	0.000	5150.0
O + H2O <=> OH + OH	6.760E+13	0.000	18360.0
H + H + M <=> H2 + M	3.020E+15	0.000	0.0
H + OH + M <=> H2O + M	1.410E+23	-2.000	0.0
O + O + M <=> O2 + M	1.910E+13	0.000	-1790.0
H + O2 + M <=> HO2 + M	1.510E+15	0.000	-1000.0
H + HO2 <=> OH + OH	2.510E+14	0.000	1900.0
H + HO2 <=> H2 + O2	2.510E+13	0.000	700.0
H + HO2 <=> H2O + O	5.010E+13	0.000	1000.0
HO2 + O <=> O2 + OH	5.010E+13	0.000	1000.0
HO2 + OH <=> H2O + O2	5.010E+13	0.000	1000.0
HO2 + HO2 <=> H2O2 + O2	1.000E+13	0.000	1000.0
H2O2 + M <=> OH + OH + M	1.200E+17	0.000	45500.0
H2O2 + H <=> HO2 + H2	1.700E+12	0.000	3750.0
H2O2 + H <=> H2O + OH	3.160E+14	0.000	8940.0
O + H + M <=> OH + M	1.000E+16	0.000	0.0
H2O2 + OH <=> H2O + HO2	1.000E+13	0.000	1800.0
O + OH + M <=> HO2 + M	1.000E+17	0.000	0.0
H2 + O2 <=> OH + OH	2.510E+12	0.000	38950.0
+ Mitchell et al.			
N2 + O2 <=> NO + NO	9.100E+24	-2.500	128500.0
N2 + O <=> NO + N	7.000E+13	0.000	75000.0
O2 + N <=> NO + O	1.340E+10	1.000	7080.0
O2 + M <=> O + O + M	3.620E+18	-1.000	118000.0
N2/2.0/ O2/9.0/ O/25.0/			
N2 + M <=> N + N + M	1.920E+17	-0.500	224900.0
N2/2.5/ N/0.0/			
N2 + N <=> N + N + N	4.100E+22	-1.500	224900.0
NO + M <=> N + O + M	4.000E+20	-1.500	150000.0
NO/20.0/ O/20.0/ N/20.0/			

a) $p = 0.6$ bars, T variable, Z variable



b) $T = 1200$ K, p variable, Z variable

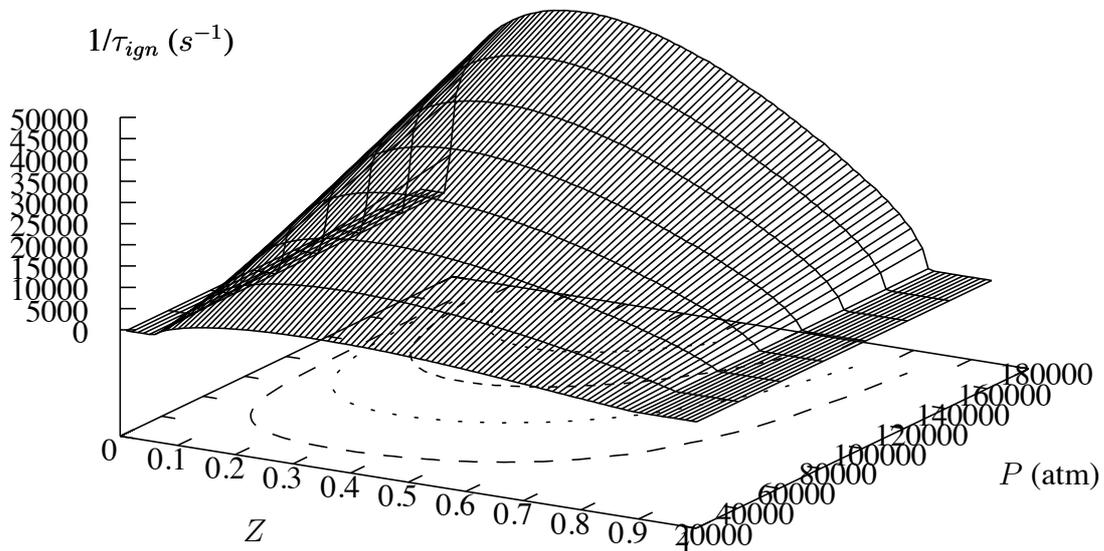


FIGURE A.4: Influence de la température, de la pression, et de la composition sur le schéma de Westbrook.

Annexe B

Expression du taux de réaction d'auto-allumage

B.1 Premier cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^-$

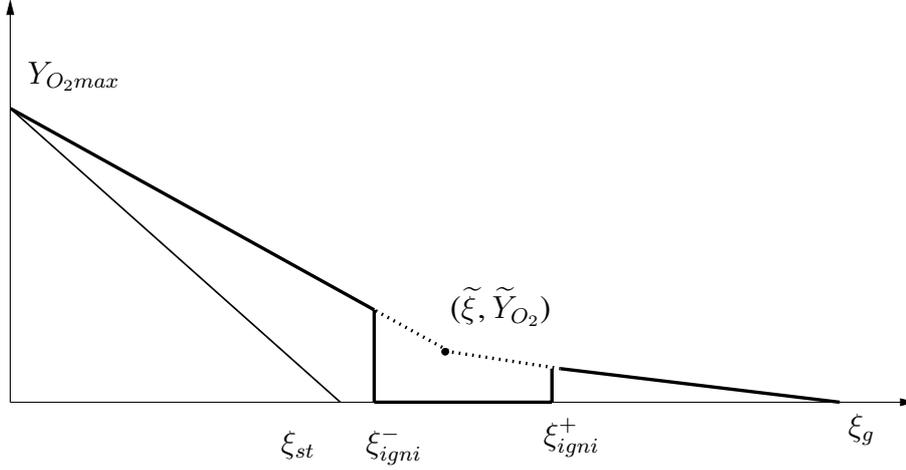
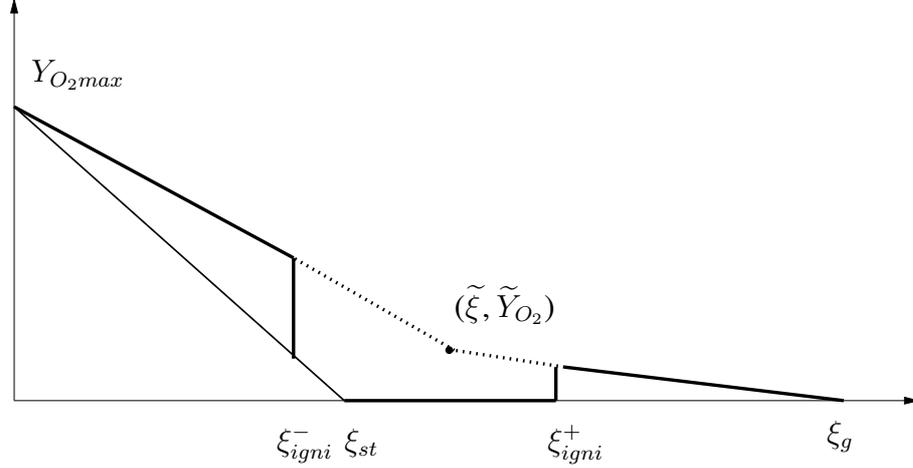


FIGURE B.1: Premier cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^-$

$$\begin{aligned}
 \omega_{auto} &= \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{igni}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} (Y^{eq}(\xi) - Y^{iem}(\xi)) P(\xi) d\xi & (B.1) \\
 &= \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} - Y_{O_2}^{max} \right] P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[-\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} (1 - \xi) \right] P(\xi) d\xi \\
 \omega_{auto} &= \frac{Y_{O_2}^{max}}{\tau_{\xi}} \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi + \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tau_{\xi}(1 - \tilde{\xi})} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi \\
 &- \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tau_{\xi}(1 - \tilde{\xi})} \right) \left(\int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \xi^2 P(\xi) d\xi - \tilde{\xi} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \xi P(\xi) d\xi \right) \\
 &- \left(\frac{(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2})}{\tau_{\xi} \tilde{\xi}} \right) \left(\int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \xi^2 P(\xi) d\xi - \tilde{\xi} \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \xi P(\xi) d\xi \right)
 \end{aligned}$$

B.2 Second cas : $\xi_{st} < \tilde{\xi}$ FIGURE B.2: Second cas : $\xi_{st} < \tilde{\xi}$

$$\begin{aligned}
\omega_{auto} &= \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{igni}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} (Y^{eq}(\xi) - Y^{iem}(\xi)) P(\xi) d\xi \quad (B.2) \\
&= \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{st}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(1 - \frac{\tilde{\xi}}{\xi_{st}}\right) + Y_{O_2}^{max} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\xi_{st}} - Y_{O_2}^{max} + (Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} \right] P(\xi) d\xi \\
&+ \int_{\xi_{st}}^{\tilde{\xi}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} - Y_{O_2}^{max} \right] P(\xi) d\xi \\
&- \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} (1 - \xi) \right] P(\xi) d\xi \\
\omega_{auto} &= \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(Y_{O_2}^{max} \left(\frac{1}{\tilde{\xi}} - \frac{1}{\xi_{st}} \right) - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tilde{\xi}} \right) \left(\tilde{\xi} \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{st}} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{st}} \xi^2 P(\xi) d\xi \right) \\
&+ \frac{(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2})}{\tau_{\xi} \tilde{\xi}} \left(\tilde{\xi} \int_{\xi_{st}}^{\tilde{\xi}} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\xi_{st}}^{\tilde{\xi}} \xi^2 P(\xi) d\xi \right) \\
&- \frac{Y_{O_2}^{max}}{\tau_{\xi}} \int_{\xi_{st}}^{\tilde{\xi}} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tau_{\xi} (1 - \tilde{\xi})} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi \\
&- \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tau_{\xi} (1 - \tilde{\xi})} \left(\tilde{\xi} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{igni}^+} \xi^2 P(\xi) d\xi \right)
\end{aligned}$$

B.3 Troisième cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^+$

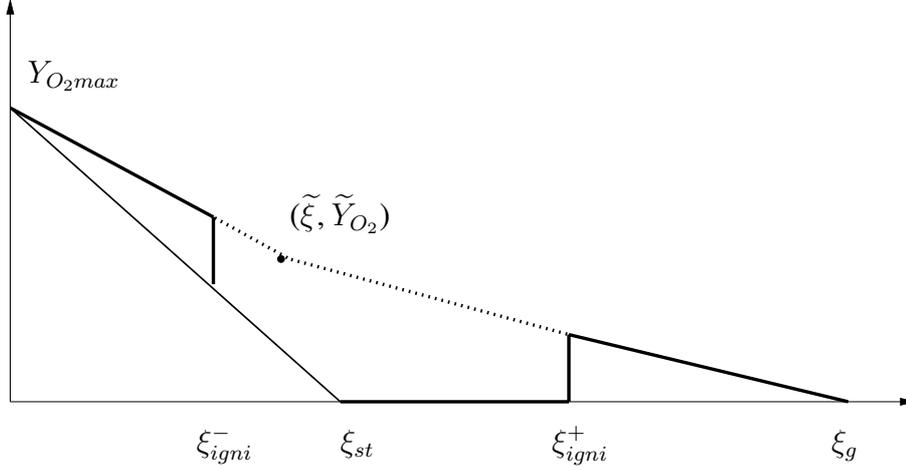
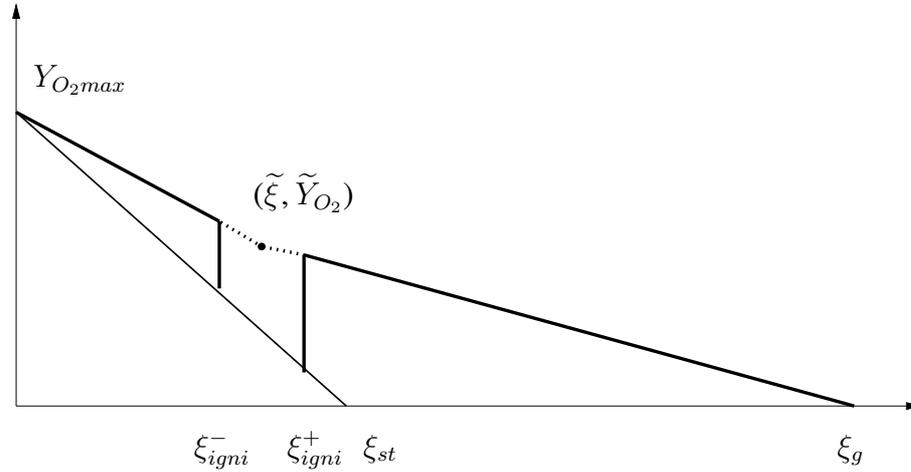


FIGURE B.3: Troisième cas : $\xi_{st} < \xi_{igni}^+$

$$\begin{aligned}
 \omega_{auto} &= \int_{\xi_{igni}^-}^{\xi_{igni}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} (Y^{eq}(\xi) - Y^{iem}(\xi)) P(\xi) d\xi & (B.3) \\
 &= \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(1 - \frac{\tilde{\xi}}{\xi_{st}}\right) + Y_{O_2}^{max} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\xi_{st}} - Y_{O_2}^{max} + (Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} \right] P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{st}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(1 - \frac{\tilde{\xi}}{\xi_{st}}\right) - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} (1 - \xi) \right] \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\xi_{st}}^{\xi_{igni}^+} \left[(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} - Y_{O_2}^{max} \right] \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} P(\xi) d\xi \\
 \omega_{auto} &= \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(Y_{O_2}^{max} \left(\frac{1}{\tilde{\xi}} - \frac{1}{\xi_{st}} \right) - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tilde{\xi}} \right) \left(\tilde{\xi} \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\xi_{igni}^-}^{\tilde{\xi}} \xi^2 P(\xi) d\xi \right) \\
 &+ \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(Y_{O_2}^{max} - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} \right) \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{st}} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi \\
 &+ \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} - \frac{Y_{O_2}^{max}}{\xi_{st}} \right) \left(\tilde{\xi} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{st}} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{st}} \xi^2 P(\xi) d\xi \right) \\
 &- \frac{Y_{O_2}^{max}}{\tau_{\xi}} \int_{\xi_{st}}^{\xi_{igni}^+} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi \\
 &+ \frac{(Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2})}{\tau_{\xi} \tilde{\xi}} \left(\tilde{\xi} \int_{\xi_{st}}^{\xi_{igni}^+} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\xi_{st}}^{\xi_{igni}^+} \xi^2 P(\xi) d\xi \right)
 \end{aligned}$$

B.4 Quatrième cas : $\xi_{st} < \xi_{max}$

 FIGURE B.4: Quatrième cas : $\xi_{st} < \xi_{max}$

$$\begin{aligned}
 \omega_{auto} &= \int_{\xi_{ign}^-}^{\xi_{ign}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} (Y^{eq}(\xi) - Y^{iem}(\xi)) P(\xi) d\xi & (B.4) \\
 &= \int_{\xi_{ign}^-}^{\tilde{\xi}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_{st}}\right) - Y_{O_2}^{max} + (Y_{O_2}^{max} - \tilde{Y}_{O_2}) \frac{\xi}{\tilde{\xi}} \right] P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_{st}}\right) - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} (1 - \xi) \right] P(\xi) d\xi \\
 \omega_{auto} &= \int_{\xi_{ign}^-}^{\tilde{\xi}} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} \left(\frac{1}{\tilde{\xi}} - \frac{1}{\xi_{st}} \right) \xi - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tilde{\xi}} \xi \right] P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[Y_{O_2}^{max} - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} \right] P(\xi) d\xi \\
 &+ \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} \frac{(\tilde{\xi} - \xi)}{\tau_{\xi}} \left[\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} - \frac{Y_{O_2}^{max}}{\xi_{st}} \right] P(\xi) d\xi \\
 \omega_{auto} &= \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(Y_{O_2}^{max} \left(\frac{1}{\tilde{\xi}} - \frac{1}{\xi_{st}} \right) - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\tilde{\xi}} \right) \left(\tilde{\xi} \int_{\xi_{ign}^-}^{\tilde{\xi}} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\xi_{ign}^-}^{\tilde{\xi}} \xi^2 P(\xi) d\xi \right) \\
 &+ \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(Y_{O_2}^{max} - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} \right) \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} (\tilde{\xi} - \xi) P(\xi) d\xi \\
 &+ \frac{1}{\tau_{\xi}} \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{(1 - \tilde{\xi})} - \frac{Y_{O_2}^{max}}{\xi_{st}} \right) \left(\tilde{\xi} \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} \xi P(\xi) d\xi - \int_{\tilde{\xi}}^{\xi_{ign}^+} \xi^2 P(\xi) d\xi \right)
 \end{aligned}$$

B.5 Dernier cas : $\xi_{st} \geq \xi_{max}$

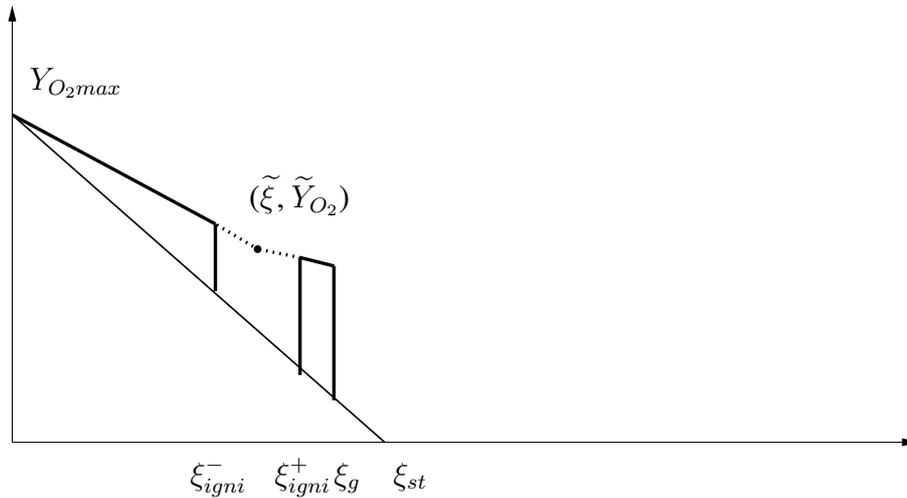


FIGURE B.5: Dernier cas : $\xi_{st} \geq \xi_{max}$

Ce cas correspond à la situation où $\xi_{MAX} = \xi_g$ est différent de 1 comme en diphasique ou ξ_g prendra la valeur ξ_i correspondant à la composition de la vapeur à la surface de la goutte. L'intégration s'arrêterait alors à ξ_g , mais celui-ci est placé avant ξ_{st} : cas très rare, que l'on peut envisager comme la situation où le taux de vaporisation est faible devant le mélange à la surface conduisant à des valeurs de ξ_i très faible...

Annexe C

Numerical Recipes

On s'est efforcé de faire apparaître dans les expressions de ω_{auto} des intégrales proposées par les *Numerical Recipes*. Néanmoins, nous avons besoin de pouvoir calculer une nouvelle intégrale :

$$\mathcal{A} = \int_a^b \xi^2 P(\xi) d\xi \quad \text{avec} \quad P(\xi) = C \cdot \xi^{\beta_1} (1 - \xi)^{\beta_2}$$

Nous disposons des fonctions suivantes :

– **La fonction gamma** définie par l'intégrale :

$$\Gamma(\xi) = \int_0^{\infty} t^{\xi-1} e^{-t} dt$$

qu'il est plus facile (et moins contraignant pour des raisons de dépassement de "virgule flottante") d'utiliser sous la forme $\ln \Gamma(\xi)$.

– **La fonction beta** définie par l'intégrale suivante :

$$B(\xi, w) = B(w, \xi) = \int_0^1 t^{\xi-1} (1-t)^{w-1} dt$$

que l'on peut relier à la fonction gamma par :

$$B(\xi, w) = \frac{\Gamma(\xi)\Gamma(w)}{\Gamma(\xi + w)}$$

– **La fonction gamma incomplète** définie comme :

$$P(a, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt \quad \text{avec} \quad (a > 0)$$

qui a pour limites $P(a, 0) = 0$ et $P(a, \infty) = 1$.

– **La fonction beta incomplète** définie comme :

$$I_x(a, b) = \frac{B_x(a, b)}{B(a, b)} = \frac{1}{B(a, b)} \int_0^x t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \quad \text{avec} \quad (a, b > 0)$$

qui a pour limites $I_0(a, b) = 0$, $I_1(a, b) = 1$.

Annexe D

Equation de la variance de la fraction de mélange en diphasique

Fluctuations de ξ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi}{\partial x_i} &= \xi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \xi \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} + \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \\ &= \xi \rho \omega_v + \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i}\end{aligned}\quad (D.1)$$

Et, en considérant les formes conservatives et non conservatives des équations de transport de ξ ,

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) + \rho \omega_v^\xi \quad (D.2)$$

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) + \rho \omega_v^\xi - \rho \xi \omega_v \quad (D.3)$$

la somme Eq(D.1) x ξ + Eq(D.3) x ξ conduit à :

$$\frac{\partial \rho \xi^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi^2}{\partial x_i} = 2\xi \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) + 2\rho \xi \omega_v^\xi - \rho \xi^2 \omega_v \quad (D.4)$$

Le second membre peut être réécrit pour faire apparaître le taux de dissipation scalaire :

$$\begin{aligned}2\xi \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D 2\xi \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}\end{aligned}$$

On moyenne l'équation ainsi obtenue :

$$\begin{aligned}\frac{\overline{\partial \rho \xi^2}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial \rho u_i \xi^2}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}} \right) - \overline{2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} + \overline{2\rho \xi \omega_v^\xi} - \overline{\rho \xi^2 \omega_v} \\ \frac{\partial \overline{\rho \xi^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i \xi^2}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi^2} \right) - \overline{2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} + \overline{2\rho \xi \omega_v^\xi} - \overline{\rho \xi^2 \omega_v}\end{aligned}\quad (D.5)$$

On moyenne maintenant l'équation de transport (D.1).

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \xi} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\rho u_i \xi} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi} \right) + \overline{\rho \omega_v^\xi} \quad (D.6)$$

On multiplie (D.5) par $2 \cdot \overline{\xi}$:

$$2 \cdot \overline{\xi} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \xi} + 2 \cdot \overline{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\rho u_i \xi} = 2 \cdot \overline{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi} \right) + 2 \cdot \overline{\xi} \overline{\rho \omega_v^\xi} \quad (D.7)$$

Un calcul annexe nous fournit :

$$\begin{aligned}2 \cdot \overline{\xi} \frac{\partial \overline{\rho \xi}}{\partial t} + 2 \cdot \overline{\xi} \cdot \frac{\partial \overline{\rho u_i \xi}}{\partial x_i} &= \frac{\partial \overline{\rho \xi \xi}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i \xi \xi}}{\partial x_i} - \overline{\xi \xi} \left(\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial x_i} \right) \\ &= \frac{\partial \overline{\rho \xi \xi}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i \xi \xi}}{\partial x_i} - \overline{\xi \xi} \overline{\rho \omega_v}\end{aligned}$$

Donc, l'équation (D.6) devient :

$$\frac{\partial \overline{\rho \xi \xi}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \xi \xi}}{\partial x_i} = 2 \cdot \tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \right) + 2 \cdot \tilde{\xi} \overline{\rho \tilde{\omega}_v \xi} - \overline{\xi \tilde{\xi} \rho \tilde{\omega}_v} \quad (\text{D.8})$$

La différence (D.4)-(D.7) permet de retrouver l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{(\tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi} \xi)}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i (\tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi} \xi)}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi^2} \right] - \overline{2 \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} \\ &\quad - 2 \cdot \tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \right] \\ &\quad + \overline{2 \rho \xi \omega_v \xi} - \overline{\rho \xi^2 \omega_v} - 2 \tilde{\xi} \overline{\rho \tilde{\omega}_v \xi} + \overline{\xi \tilde{\xi} \rho \omega_v} \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

On fait apparaître les termes de diffusion turbulente et de production par les gradients moyens :

$$\begin{aligned} 2 \cdot \tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi^2} \right) &= 2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi'' \tilde{\xi}} \right) - 2 \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi'' \xi''} + 2 \overline{\rho u_i'' \xi'' \tilde{\xi}} \right) \\ &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''^2} \right) - 2 \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

On fait apparaître les termes de diffusion laminaire et de dissipation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}} \right) - 2 \cdot \tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}} \right) - 2 \tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} \right) \\ &\quad + \overline{2 \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)} \\ &= \overline{2 \cdot \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} + \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)} \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Le second terme de l'équation précédente s'écrit :

$$\begin{aligned} \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)} &= \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right)} + \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \right)} \\ &= \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right)} + \overline{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_i} \right)} - \overline{2 \cdot \rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} \end{aligned}$$

Finalement, l'équation de transport pour la variance s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2 \tilde{u}_i}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''^2} \right) \\ &\quad - \overline{2 \rho u_i'' \xi'' \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}} - \overline{2 \cdot \rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} + \overline{2 \cdot \xi'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right)} \\ &\quad + \overline{2 \left(\rho \xi \omega_{v \xi} - 2 \tilde{\xi} \overline{\rho \tilde{\omega}_v \xi} \right)} - \overline{\rho \xi^2 \omega_v} + \overline{\xi \tilde{\xi} \rho \omega_v} \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Si le liquide en évaporation est du réducteur, l'équation de transport pour la variance devient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2 \tilde{u}_i}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''^2} \right) \\
 &- 2 \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} + 2 \overline{\xi''} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}} \right) \\
 &+ 2 \left(\overline{\rho \xi \omega_{vap}} - \tilde{\xi} \overline{\rho \omega_{vap}} \right) - \overline{\rho \xi^2 \omega_v} + \tilde{\xi} \overline{\xi \rho \omega_v}
 \end{aligned} \tag{D.13}$$

En revanche, si le liquide en évaporation est de l'oxydant, l'équation de transport pour la variance s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \xi''^2 \tilde{u}_i}}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''^2} \right) \\
 &- 2 \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} + 2 \overline{\xi''} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}} \right) \\
 &- 2 \left(\overline{\rho \xi \omega_{vap}} - \tilde{\xi} \overline{\rho \omega_{vap}} \right) - \overline{\rho \xi^2 \omega_v} + \tilde{\xi} \overline{\xi \rho \omega_v}
 \end{aligned} \tag{D.14}$$

Annexe E

Evaporation d'une goutte en milieu dilué

E.1 Conservation de la masse

– Masse :

$$\frac{d\rho ur^2}{dr} = 0 \quad (\text{E.1})$$

– Fraction massique de vapeur :

$$\rho ur^2 \frac{dY_F}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \rho D \frac{dY_F}{dr} \right) \quad (\text{E.2})$$

– Energie :

$$\rho ur^2 \frac{dC_p T}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \right) \quad (\text{E.3})$$

Si on intègre la seconde équation de conservation, on arrive à :

$$\rho ur^2 = \rho_s u_s r_s^2 = cste$$

On obtient le taux d'évaporation de la goutte :

$$\dot{\omega}_v = 4\pi r_s^2 \rho_s u_s$$

Si l'on effectue maintenant le changement de variable suivant, en introduisant le paramètre de transfert b défini comme :

$$b(r) = \frac{Y_F(r)}{[Y_F]_s - 1}$$

on obtient les nouvelles expressions suivantes du flux de Stefan et du bilan de vapeur :

$$u_s = D \left[\frac{db}{dr} \right]_s$$

$$\rho ur^2 \frac{db}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \rho D \frac{db}{dr} \right) \quad (\text{E.4})$$

Une dernière hypothèse $\rho D = \rho_s D_s$ nous permet d'intégrer cette équation avec les conditions aux limites suivantes :

– la variable Y_F :

$$\begin{cases} r = \delta_m & \rightarrow Y_F = [Y_F]_\infty \\ r = r_s & \rightarrow Y_F = [Y_F]_s \end{cases}$$

– la nouvelle variable b :

$$\begin{cases} r = \delta_m & \rightarrow b = b_\infty \\ r = r_s & \rightarrow b = b_s, \quad u_s = D [db/dr]_s \end{cases}$$

Une première intégration donne :

$$\rho_s r_s^2 u_s (b - b_s + 1) = r^2 \rho_s D_s \frac{db}{dr}$$

donc

$$\frac{r_s^2 u_s}{D} \frac{dr}{r^2} = \frac{db}{b - b_s + 1}$$

et, en utilisant les conditions aux limites loin des gouttes :

$$\frac{r_s^2 u_s}{D} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\delta_m} \right) = \ln \left(\frac{b_\infty - b_s + 1}{b - b_s + 1} \right)$$

$$\frac{r_s^2 u_s}{D} = \frac{r \delta_m}{\delta_m - r} \ln \left(\frac{b_\infty - b_s + 1}{b - b_s + 1} \right)$$

On définit alors le transfert de masse B_m par :

$$B_m = b_\infty - b_s = \frac{[Y_F]_s - [Y_F]_\infty}{1 - [Y_F]_s}$$

donc le flux total de masse quittant la surface s'écrit :

$$r_s u_s = \frac{1}{2} Sh_c D \ln(1 + B_m) \quad (\text{E.5})$$

où Sh_c est le nombre de Sherwood convectif. Finalement :

$$\dot{\omega}_v = 2\pi \rho_s r_s Sh_c D \ln(1 + B_m) \quad (\text{E.6})$$

E.2 Conservation de l'énergie

Une fois la conservation de la masse écrite, on peut faire la même chose avec la conservation de l'énergie. Aucun rayonnement n'est supposé intervenir, seules la convection et la diffusion sont prises en compte ici. Le flux d'énergie atteignant la surface s'écrit donc :

$$\lambda \left[\frac{dT}{dr} \right]_s = h_c (T_\infty - T_s) = \rho_s u_s L_v + \frac{Q_I}{\pi a^2} \quad (\text{E.7})$$

Dans le terme de droite, on peut voir qu'une partie de l'énergie est utilisée pour évaporer le liquide (L_v étant la chaleur latente de vaporisation), et l'autre partie de l'énergie servant à chauffer le coeur liquide (Q_I). En intégrant l'équation de conservation de l'énergie (Eq.4) et en utilisant le flux de Stefan, une première intégration donne :

$$\rho u r^2 C_p T = r^2 \lambda \frac{dT}{dr} + C$$

et

$$\rho u r^2 C_p \left(T - T_s + \frac{h_c(T_\infty - T_s)}{\rho_s u_s C_p} \right) = r^2 \lambda \frac{dT}{dr}$$

On intègre à nouveau :

$$\ln \left(T - T_s + \frac{h_c(T_\infty - T_s)}{\rho_s u_s C_p} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\rho_s u_s r_s^2 C_p}{\lambda} + C'$$

On applique les conditions aux limites loin de la goutte, c'est à dire pour $r = \delta_h$:

$$\ln \left(\frac{T_\infty - T_s + h_c(T_\infty - T_s)/\rho_s u_s C_p}{T - T_s + h_c(T_\infty - T_s)/\rho_s u_s C_p} \right) = \frac{\rho_s u_s r_s^2 C_p}{\lambda} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\delta_h} \right)$$

Quand $r = r_s$, alors :

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{\rho_s u_s C_p}{h_c} + 1 \right) &= \frac{\rho_s u_s r_s C_p}{\lambda} \left(\frac{\delta_h - r_s}{\delta_h} \right) \\ \ln \left(\frac{\rho_s u_s C_p}{h_c} + 1 \right) &= \frac{2}{Nu_c} \frac{\rho_s u_s r_s C_p}{\lambda} \end{aligned}$$

En définissant un nombre de transfert tel que

$$B_h = \frac{\rho_s u_s C_p}{h_c} \quad \text{ou} \quad B_h = \frac{\dot{\omega}_v C_p (T_\infty - T_s)}{\dot{\omega}_v L_v + Q_I}$$

le taux d'évaporation $\dot{\omega}_v = 4\pi\rho_s^2 u_s$ peut s'écrire :

$$\dot{\omega}_v = 2\pi r_s C_p^{-1} \lambda Nu_c \ln(1 + B_h)$$

E.3 Echauffement de la goutte

L'énergie atteignant le cœur liquide est :

$$Q_I = \pi a \lambda \left(Nu(T_\infty - T_s) - \frac{L_v}{C_p} Nu_c \ln(1 + B_h) \right)$$

avec

$$Nu = \frac{h_c r_s}{\lambda} = Nu_c \frac{\ln(B_h + 1)}{B_h}$$

Cela peut se réécrire aussi :

$$Q_I = \dot{\omega}_v \left(\frac{C_p (T_\infty - T_s)}{B_h} - L_v \right)$$

E.4 Nombre de transfert de masse B

Les deux expressions du taux d'évaporation issues de l'équation de conservation de la masse et de l'énergie doivent être égales. Il en résulte que B_m et B_h sont reliés par :

$$B_h = (B_m + 1) \frac{Sh_c Pr}{Nu_c Sc} - 1$$

Conclusion : B_m est le paramètre clef qu'il faut déterminer !

on considèrera B_m comme constant, ce qui nous donne la loi dite du " d^2 " :

– la goutte est à la saturation.

– la température environnante, la pression et la fraction massique de vapeur varient très peu.

Quelques valeurs de ce paramètre de transfert de masse sont reportées dans le tableau ci-dessous :

Combustible + Air	B_m
Iso-octane	6.41
Benzène	5.97
N-heptane	5.82
Kerosène	3.4
Gazole	2.5
Carbone	0.12

TABLE E.1: Nombre de transfert de masse pour différents combustibles dans l'air

Dans le cas de l'oxygène liquide dans de l'hydrogène, $B_m =$

Résumé

Le travail présenté dans ce mémoire est consacré à la combustion turbulente non-prémélangée dans des écoulements rapides, et éventuellement diphasiques. Pour ce type de conditions, il devient nécessaire, du point de vue de la modélisation, de tenir compte du couplage existant entre les effets de compressibilité, les processus de mélange turbulent et la cinétique chimique. Dans ces écoulements, la conversion de tout ou partie de l'énergie cinétique de l'écoulement sous forme d'enthalpie sensible va influencer le développement des réactions chimiques et peut contribuer notablement à la conversion des réactifs en produits de combustion ainsi qu'à la stabilisation des flammes. De plus, les échelles de temps caractéristiques du mélange turbulent et de la cinétique chimique sont susceptibles d'être du même ordre de grandeur et l'hypothèse de chimie infiniment rapide n'est pas toujours applicable. Dans cette étude, une approche basée sur l'évaluation de la PDF jointe de deux quantités scalaires est retenue: la première variable permet de quantifier la richesse locale du mélange, la seconde caractérise l'écart à l'état d'équilibre chimique. Une hypothèse de "chimie brusque" permet d'introduire une dépendance explicite entre ces deux variables pour s'en tenir à la seule détermination de la PDF de la variable de mélange. Cette approche est étendue au cas de la combustion supersonique en considérant de surcroît les variations d'enthalpie totale. Enfin, les fluctuations de composition induites par la vaporisation d'un des deux réactifs sont elles-aussi prises en compte. Le modèle complet est implanté dans un code de calcul Navier-Stokes tridimensionnel compressible et réactif. Dans le cadre de cette étude, la résolution est couplée à une méthode d'adaptation de maillage qui permet d'améliorer significativement la représentation des zones de mélange et des fortes discontinuités. L'approche proposée est ensuite validée en s'appuyant sur différentes géométries: jets co-courants supersoniques H₂-air vicié, jets fortement sous-détendus, chambre de combustion de type Scramjet. Enfin, le modèle est aussi employé pour effectuer un calcul de la configuration Mascotte de l'Onera dans un cas sous-critique. Les simulations numériques correspondantes conduisent à des résultats encourageants et ouvrent de nombreuses perspectives aussi bien quant à l'utilisation du modèle le cadre d'approches U-RANS ou LES que vis-à-vis de son extension à des conditions de combustion extrêmes (super-critiques).