



HAL
open science

Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs.

Yann Moule

► **To cite this version:**

Yann Moule. Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs.. Autre. Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2013. Français. NNT : 2013ESMA0003 . tel-00802265

HAL Id: tel-00802265

<https://theses.hal.science/tel-00802265>

Submitted on 19 Mar 2013

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'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE ET
D'AÉROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

École Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :
Énergétique, Thermique, Combustion

présentée par:

Yann MOULE

Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs.

Directeurs de Thèse: **A. Mura** et **V. Sabel'nikov**

Soutenue le 7 Janvier 2013
devant la Commission d'Examen

- JURY -

M. M. Champion	Directeur de Recherche au CNRS, Institut P'	Président
M. A. Hadjadj	Professeur, INSA Rouen	Rapporteur
M. R. Walther	Professeur, Université de Stuttgart	Rapporteur
M. A. Mura	Chargé de Recherche au CNRS, Institut P'	Examineur
M. V. Sabel'nikov	Directeur de Recherche, Onera	Examineur
M. D. Scherrer	Adjoint au Directeur du DEFA, Onera	Examineur

Laboratoire d'accueil:
Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée
Onera - The French Aerospace Lab
BP 80100 91123 Palaiseau cedex
Tél. : 33 (1) 46 73 43 01



Remerciements

Cette thèse n'aurait pas pu se dérouler sans le soutien financier de l'ONERA. À ce titre, je souhaiterais remercier la Direction Scientifique de l'Office et notamment MM. Jean-Jacques Thibert et Alain Merlen. Je remercie également Mohammed Habiballah ainsi que Alain Cochet pour leur accueil au sein du DEFA, plus particulièrement dans l'unité PRA.

Je remercie vivement M. Michel Champion qui a accepté de présider le jury de thèse, ainsi que MM. Abdellah Hadjadj et Rainer Walther pour leur relecture minutieuse de ce mémoire, en tant que rapporteurs. Je remercie également M. Emmanuel Dufour, membre invité du jury, pour ses remarques et ses conseils.

Que les artisans au bon déroulement de cette thèse MM. Vladimir Sabel'nikov, Arnaud Mura et Dominique Scherrer reçoivent ici toute ma gratitude. Vladimir, merci de m'avoir fait confiance dès le début et d'avoir pris le temps de m'expliquer, encore et encore, la physique de la combustion supersonique. Arnaud, merci pour tes conseils, ta patience et ton regard critique. À tes côtés, j'ai appris à arpenter les chemins sinueux de la Recherche de façon toujours positive. Enfin, Dominique, je te remercie d'avoir accepté "sur ton temps libre" d'encadrer la fin de ma thèse. Merci de prendre le temps de me faire partager tes connaissances.

Je remercie également mes collègues du DEFA, improvisés encadrant d'un jour faute de (trop) connaître le code CEDRE : Nicolas Bertier, Philippe Grenard et Luc-Henry Dorey.

Le développement des superstatoréacteurs n'est pas une tâche aisée. Comme on me l'a souvent fait remarqué : "Scramjet propulsion is the future and always will be". Face aux difficultés quotidiennes, je souhaiterais donc remercier mes compagnons d'infortune : Dominique Scherrer (bis), Marc Ferrier, Thomas Le Pichon, Olivier Dessornes, Axel Vincent et Laurent Serre.

Je remercie les documentalistes ainsi que les équipes Grand Calcul, pour leur réactivité face aux nombreuses difficultés rencontrées. Je remercie également le personnel du feu-LCD : permanents, doctorants et secrétaire pour leur accueil chaleureux à chacune de mes visites poitevines.

Je souhaite remercier mes collègues du DEFA et du DSNA (notamment l'équipe CEDRE) qui ont participé de près ou de loin à la réussite de cette thèse. Je remercie notamment les personnes que j'ai côtoyé au quotidien entre Palaiseau et Châtillon et plus particulièrement, pour les bons moments passés ici mais surtout ailleurs : Julien T., Jean-Baptiste D., Jean-Michel L., Lionel T., Luc-Henry D., Dominique S. (ter), Pascale G. et Florian G.

Je souhaite également du courage à Aymeric B. et Clément LT pour la fin de leur thèse.

This story started in Australia. I would like to thank the hypersonics community at the University of Queensland, especially Peter Jacobs, Madhat Abdel-jawad, Russel Boyce and Michael Smart. Thank you for giving me the opportunity to prove myself, even Down

Under. I would also like to thank Milinda 'Mel' Suraweera and Sandy Tirtey, for sharing with me these amazing moments.

Enfin je remercie infiniment mes amis et ma famille (notamment ceux qui se sont déplacés pour la soutenance) pour leur soutien inconditionnel avec une mention spéciale pour ma femme qui se ravit plus que quiconque de la fin de cette aventure.

À toutes les personnes qui ont eu la patience de me donner le goût d'Apprendre et de Découvrir, je leur dédie ce mémoire.

Résumé

Dans le domaine des systèmes propulsifs, le statoréacteur classique possède de bonnes performances propulsives. Néanmoins, celles-ci se dégradent notablement lorsque les valeurs du nombre de Mach augmentent. Dans le régime hypersonique (au-delà de Mach 6), l'utilisation d'un statoréacteur à combustion supersonique, ou superstatoréacteur, doit permettre de surmonter ces difficultés. La simulation numérique est un des moyens d'étude de la combustion dans ces régimes d'écoulements rapides. Elle doit alors être capable de restituer des effets spécifiques aux écoulements à grand nombre de Mach, pour lesquels les temps caractéristiques chimiques et de mélange aux petites échelles peuvent être du même ordre de grandeur. Ce travail de thèse est consacré à l'amélioration des outils de simulation de la combustion dans les écoulements rapides en prenant en compte les effets de chimie finie et de micro-mélange sur la base d'une approche de réacteur partiellement prémélangé. La modélisation UPaSR ainsi proposée est validée sur la base du calcul d'une flamme jet supersonique. Les simulations numériques correspondantes conduisent à des résultats encourageants qui confirment l'importance, pour ce type de conditions, des effets cinétiques d'une part, et des effets compressibles d'autre part. Enfin, le modèle UPaSR est appliqué à l'analyse d'une configuration plus complexe de superstatoréacteur (RESTM12) étudiée expérimentalement à l'Université du Queensland. Deux méthodes différentes sont utilisées et comparées afin d'obtenir les principaux indices de performance.

Mots-clés : COMBUSTION ; COMBUSTION TURBULENTE ; COMBUSTION SUPERSONIQUE ; AUTO-ALLUMAGE ; MODÉLISATION ; RÉACTEUR PARTIELLEMENT MÉLANGÉ ; MICRO-MÉLANGE ; SIMULATION GRANDE ÉCHELLE ; SUPERSTATORÉACTEUR

Abstract

Classical ramjet engines feature high propulsive performances but drastically decreasing for increasing values of the flight Mach number. In the hypersonic regime (above Mach 6), the use of a supersonic combustion ramjet - a.k.a scramjet - may remedy this limitation. Computational fluid dynamics is one of the tools used for the study of such high-speed turbulent reactive flows. It must take into account the specificities of high Mach number reactive flows, which feature chemical reaction time scales with the same order of magnitude as flow time scales. The present study focuses on the improvement of a CFD tool by taking finite-rate chemistry and micro-mixing effects into account within the framework of the partially stirred reactor concept. In a first step of the validation procedure, the UPaSR closure hence proposed is applied to the numerical simulation of supersonic reactive co-flowing jets. The corresponding numerical results proved to be very encouraging, confirming the essential influence of both finite-rate chemical kinetics and compressibility effects for such conditions. Finally, the UPaSR closure is retained to analyse a full-scale scramjet geometry (RESTM12) experimentally studied at the University of Queensland. Two different approaches are applied and compared to evaluate the main performance indices.

Keywords : COMBUSTION ; TURBULENT COMBUSTION ; SUPERSONIC COMBUSTION ; AUTO-IGNITION ; MODELLING ; PARTIALLY STIRRED REACTOR ; MICROMIXING ; LARGE EDDY SIMULATION ; SCRAMJET

Table des matières

Introduction	xxiii
I Modèles physiques et numériques	1
1 Équations de l'aérothermochimie	3
1.1 Équations de bilan instantané	4
1.1.1 Équations de conservation de la masse	4
1.1.2 Équations de conservation de la quantité de mouvement	5
1.1.3 Équations de conservation de l'énergie	5
1.2 Relations complémentaires	6
1.2.1 Propriétés physiques	6
1.2.2 Loi d'état thermodynamique	7
1.3 Caractéristiques statistiques de la turbulence	7
1.4 Équations filtrées ou moyennées	10
1.4.1 Fermeture des équations	11
1.4.2 Modélisation de la viscosité turbulente	12
2 Modèles de combustion turbulente	15
2.1 Flamme de diffusion laminaire	16
2.1.1 Structure des flammes de diffusion	16
2.1.2 Étirement des flammes de diffusion	18
2.2 Modélisation de la combustion turbulente	20
2.2.1 Phénoménologie de l'interaction chimie/turbulence	20
2.2.2 Modèles généraux	23
3 Méthodes numériques de résolution	29
3.1 Système hyperbolique de lois de conservation	31
3.1.1 Invariants de Riemann	31
3.1.2 Solution faible et onde de choc	32
3.1.3 Le problème de Riemann	32
3.2 Méthodes numériques utilisées dans CEDRE	33
3.2.1 Schémas de flux hyperboliques	34
3.2.2 Intégration temporelle	38
4 Stabilisation par auto-allumage et modélisation	41
4.1 Déstabilisation des couches cisailées supersoniques	42
4.1.1 Épanouissement des couches cisailées	42
4.1.2 Effets de compressibilité	44

4.1.3	Théorie de la stabilité linéaire	47
4.2	Phénoménologie de l'auto-allumage	49
4.2.1	Allumage des mélanges hydrogène-air	49
4.2.2	Lieux d'allumage	52
4.3	Stabilisation des flammes supersoniques	54
4.3.1	Cas subsonique	55
4.3.2	Cas supersonique	57
4.4	Modèle de réacteur partiellement prémélangé	58
 II Validation de la modélisation UPaSR		63
5	Etude préliminaire de la flamme de Cheng	65
5.1	Synthèse bibliographique	66
5.2	Présentation de la flamme jet de Cheng	69
5.3	Étude de sensibilité	72
5.3.1	Aspects numériques	72
5.3.2	Étude de sensibilité aux paramètres généraux	74
5.3.3	Étude de sensibilité aux paramètres d'allumage	77
5.3.4	Étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR	81
5.4	Étude numérique stationnaire	84
5.5	Conclusions	87
6	Simulations instationnaires de la flamme de Cheng	89
6.1	Simulation instationnaire 2D axisymétrique de la flamme jet de Cheng	90
6.1.1	Aspect numérique	90
6.1.2	Discussion	91
6.2	Simulation aux Grandes Échelles de la flamme jet de Cheng	98
6.2.1	Aspect numérique	98
6.2.2	Résultats et discussion	99
6.3	Conclusion	110
 III Application to Scramjet Engines		111
7	Introduction to Scramjet Engines	113
7.1	Historical review	114
7.1.1	Scramjet developments in France	114
7.1.2	Worldwide developments of scramjets	118
7.2	Scramjet physics and key challenges	120
7.2.1	Scramjet operating principle	121
7.2.2	Key technological challenges	123
8	Presentation of a Mach 12 REST Scramjet Engine	125
8.1	Test facility and instrumentation	126
8.1.1	T4 shock tunnel	126
8.1.2	Instrumentation	128
8.1.3	Measurement Uncertainty Analysis	129
8.2	Presentation of a Mach 12 REST Scramjet Engine	130

8.2.1	Test Model	130
8.2.2	Fuel System	132
8.2.3	Test conditions	133
8.2.4	Test time determination	135
9	Numerical Investigation of RESTM12	137
9.1	Modelling strategies	138
9.2	Strategies for the performance analysis	141
9.2.1	Cycle analysis	142
9.2.2	Performance parameters	144
9.3	Results and discussion	145
9.3.1	Fuel off	145
9.3.2	Inlet injection condition	146
9.3.3	Step injection condition	153
9.3.4	Combined injection condition	159
9.3.5	Skin friction reduction	165
9.4	Conclusions	168
	Conclusions et perspectives	171
	A Schémas cinétiques hydrogène-air	175
	B Équation pour la variance de la température	177
	C Cowlside results of RESTM12	179
	Références	183

Table des figures

1	Propulseur à échappement imaginé par Lorin [1]	xxiii
2	Impulsion Spécifique (d'après [2])	xxiv
3	Flamme détachée subsonique et stabilisée par auto-allumage (d'après [3]) . .	xxv
4	Calcul LES de la chambre HyShot II (d'après [4])	xxvi
1.1	Couche de mélange turbulente (d'après [5])	8
1.2	Spectre schématisé d'une turbulence à grand nombre de Reynolds (d'après [6])	8
1.3	Modélisation du spectre d'énergie cinétique turbulente en fonction de l'ap- proche utilisée	10
2.1	Structure d'une flamme laminaire de diffusion (d'après [6])	16
2.2	Solution de Burke et Schumann	18
2.3	Schéma d'une flamme à contre-courant	18
2.4	Courbe de réponse à l'étirement dite «courbe en S»	19
2.5	Les différents régimes de combustion turbulente non-prémélangée (d'après [7])	21
2.6	Les différentes approches de modélisation de l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT) (d'après [6])	22
2.7	Mise en évidence de la forme (tube, feuillet) prise par les structures fines dans une Simulation Numérique Directe de Woodward et al. [8]	27
3.1	Solution du problème de Riemann : les 4 configurations possibles	33
3.2	Juxtaposition des états de différentes cellules voisines	34
3.3	Problème de Riemann complet avec volume de contrôle	36
4.1	Développement d'une couche de mélange	43
4.2	LES d'une couche de mélange temporelle incompressible [9]	43
4.3	Développement d'un jet - zone de coeur potentiel	44
4.4	LES d'un jet libre compressible à Mach 0.7 [10]	44
4.5	Evolution du taux d'épanouissement adimensionné en fonction du nombre de Mach convectif dans une couche de mélange : \square Chambres [11], \triangle De Bisschop [12], ∇ Elliot et Samimy [13], \triangleright Goebel et Dutton [14], \triangleleft Papa- moschou et Roshko [15], \diamond Lau [16] et \circ Bellaud [17]	45
4.6	Schématization du domaine d'auto-inflammation de H ₂ (d'après [18])	51
4.7	Délai d'allumage d'un mélange H ₂ /Air stoechiométrique et à pression de 2 atm	52
4.8	Stabilisation par élargissement brusque	55
4.9	Stabilisation par obstacle	55
4.10	Stabilisation par poches	57
4.11	Injecteur ONERA dans la veine d'essai au LAERTE	58

4.12	Images issues de la combustion d'un jet sonique de H_2 observé avec un temps de pose de $\tau = 1 \times 10^{-2}$ secondes (a) et $\tau = 2 \times 10^{-5}$ secondes (b) (d'après [19])	58
4.13	Evolution de la température dans un réacteur à volume constant calculée à l'aide d'une approche PaSR	60
4.14	Solutions au problème stationnaire du réacteur parfaitement mélangé	61
5.1	Schéma du dispositif expérimental LAERTE	67
5.2	Schéma de la chambre expérimentale du DLR	68
5.3	Schéma de la chambre expérimentale SCHOLAR de la NASA	69
5.4	Schéma du montage expérimental de Cheng, Pitz et collaborateurs [20]	69
5.5	Représentation du maillage utilisé pour l'étude RANS	73
5.6	Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres généraux	76
5.7	Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres d'allumage	79
5.8	Profils de variance de température calculés et mesurés - étude de sensibilité aux paramètres d'allumage	80
5.9	Représentation du temps chimique τ_c en fonction de la fraction de mélange	81
5.10	Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR	83
5.11	Champ de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa]	84
5.12	Champ de fraction volumique de structures fines γ^* [-]	85
5.13	Résultats d'un calcul stationnaire UPaSR à $X/D=10.8$ (gauche), $X/D=21.5$, $X/D=32.3$ et $X/D=43.1$ (droite)	86
6.1	Maillage utilisé pour l'étude instationnaire en 2D axisymétrique	91
6.2	Champ instantané de μ_t/μ dans le cas du calcul bidimensionnel	92
6.3	Champ instantané de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa]	92
6.4	Champ instantané de fraction volumique de structures fines γ^* [-]	93
6.5	Champs instantanés de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] (haut) et de température [K] (bas)	93
6.6	Mécanismes de stabilisation de flamme de Cheng	95
6.7	Résultats moyens d'un calcul instationnaire UPaSR à $X/D=10.8$ (gauche) et $X/D=21.5$ (droite)	96
6.8	Résultats moyens d'un calcul instationnaire UPaSR à $X/D=32.3$ (gauche) et $X/D=43.1$ (droite)	97
6.9	Vue générale du maillage	98
6.10	Vue détaillée du maillage	99
6.11	Champ instantané de μ_t/μ dans le cas du calcul LES	99
6.12	Structure de la flamme. Haut : champ instantané de température et iso-surface de Y_{H_2} . Bas : iso-surface de critère Q et iso-surface de Y_{OH} colorée par la température (bas)	100
6.13	Champ instantané de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa] issus du calcul LES	101

6.14	Champ instantané de fraction volumique de structures fines γ^* [-] issu du calcul LES	102
6.15	Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR sur l'axe de symétrie	102
6.16	Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR à X/D=10.8 (gauche) et X/D=21.5 (droite)	104
6.17	Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR à X/D=32.3 (gauche) et X/D=43.1 (droite)	105
6.18	Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à X/D = 10.8, Y/D = 0.65; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)	107
6.19	Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à X/D = 32.3, Y/D = 1.1; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)	108
6.20	Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à X/D = 43.1, Y/D = 0; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)	109
7.1	Leduc 010	114
7.2	ASMP	115
7.3	ESOPÉ dual-mode scramjet (from [21])	115
7.4	Ejector dual mode ramjet concept of the PREPHA program	116
7.5	LEA vehicle aerodynamic model in S3- scale 1/4	117
7.6	LEA Flight test sequence	118
7.7	Kholod mounted on the nose of a modified SA-5	119
7.8	X-51A under the wing of a B-52	120
7.9	Scramjet principle	121
7.10	Normal (left) and Oblique (right) shock trains details (from [22])	122
7.11	The H-K diagram for a scramjet (from [22])	122
8.1	Schematic of T4 Shock Tunnel (adapted from [23])	126
8.2	Ideal x-t diagram of wave processes after diaphragm rupture for a tailored operating condition (adapted from [24])	127
8.3	PCB TM static pressure transducer mounting arrangement (from [25])	128
8.4	Pitot pressure transducer mounting arrangement (from [26])	129
8.5	Main components of the initial Mach 12 REST scramjet with 150 mm forebody in assembled test orientation	131
8.6	Fueling stations of the Mach 12 REST scramjet	131
8.7	Side view of the Mach 12 REST scramjet mounted in the T4 test section	131
8.8	Front view of the Mach 12 REST scramjet mounted in the T4 test section	132
8.9	Schematic of fuel valve control system.	133
8.10	Measured test time for 10% driver contamination without nozzle starting losses (adapted from [27]).	135
9.1	Overview of the computational mesh : inlet (left) and combustor (right)	139

9.2	Detailed view of the mesh near the injectors : inlet injectors (left) and combustor injectors (right)	139
9.3	Flow stations in a scramjet engine	142
9.4	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations	146
9.5	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations for the inlet injection scheme at $\phi=0.41$	147
9.6	Contours of heat release [$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] calculated from numerical simulations for the inlet injection scheme at $\phi=0.41$. . .	147
9.7	Flowfields of mean temperature (9.7(a)), mean water mass fraction (9.7(b)), mean hydrogen mass fraction (9.7(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.7(d)) in transversal planes calculated for inlet injection at $\phi = 0.41$	149
9.8	Contours of mean water production rate (9.8(a)) and mean heat release (9.8(b)) as a function of M and local ϕ calculated for inlet injection at $\phi = 0.41$	150
9.9	Efficiencies for the inlet injection scheme	151
9.10	Comparison between 1-D analysis and experimental pressure distributions for inlet injection at $\phi = 0.41$	152
9.11	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$	153
9.12	Contours of heat release [$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] in the symmetry plane calculated from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$	154
9.13	Contours of heat release rate and sonic line (in black) in the symmetry plane, water production rate isosurface [$5000 \text{ kg}/\text{m}^3/\text{s}$] colored by premixedness index, pressure isosurface [120 kPa] (in purple) calculated from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$	154
9.14	Flowfields of mean temperature (9.14(a)), mean water mass fraction (9.14(b)), mean hydrogen mass fraction (9.14(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.14(d)) in transversal planes calculated for injection at the step at $\phi = 1.14$	156
9.15	Contours of mean water production rate (9.15(a)) and mean heat release (9.15(b)) as a function of M and local ϕ calculated for injection at the step at $\phi = 1.14$	157
9.16	Efficiencies for the step injection scheme	157
9.17	Comparison between 1-D analysis and experimental pressure distributions for injection at the step with $\phi = 1.14$	158
9.18	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations conducted for the combined injection scheme (1 :2) at $\phi=1.23$	159
9.19	Comparison between the three different fueling schemes in terms of averaged pressure (9.19(a)) and averaged temperature (9.19(b))	160
9.20	Contours of heat release [$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] in the symmetry plane calculated from numerical simulations for the combined injection scheme at $\phi=1.23$	160
9.21	Flowfields of mean temperature (9.21(a)), mean water mass fraction (9.21(b)), mean hydrogen mass fraction (9.21(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.21(d)) in transversal planes calculated for combined injection at $\phi = 1.23$	162

9.22	Contours of mean water production rate (9.22(a)) and mean heat release (9.22(b)) as a function of M and local ϕ calculated for combined injection at $\phi = 1.23$	163
9.23	Efficiencies for the combined (1 :2) injection scheme	163
9.24	Comparison of 1-D analysis and experimental pressure distributions for combined injection at $\phi = 1.23$	164
9.25	Contours of wall shear stress [N/m^2] for the fuel off (9.25(a)), inlet injection (9.25(b)), step injection (9.25(c)) and combined injection (9.25(d)) cases . .	167
9.26	Specific internal thrust variation with fuel equivalence ratio	168
C.1	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowls side for the fuel-off condition	179
C.2	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowls side for the inlet injection condition	180
C.3	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowls side for the step injection condition	181
C.4	Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowls side for the combined injection (1 :2) condition	182

Nomenclature

PRINCIPAUX ACRONYMES

CARS	Coherent Anti-stokes Raman Spectroscopy
CEDRE	Calculs d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Énergétique
CFD	Computational Fluid Dynamics
CMC	Conditional Moment Closure
DNS	Direct Numerical Simulation
DRASC	Diffusion Raman Anti-Stokes Cohérente
EDC	Eddy Dissipation Concept
EDP	Equation aux Dérivées Partielles
EPaSR	Extended Partially Stirred Reactor
HLL	Harten, Lax and van Leer
HLLC	HLL Contact
ICT	Interaction Chimie-Turbulence
IEM	Interaction by Exchange with the Mean
LDA	Laser Doppler Anemometry
LES	Large Eddy Simulation
LIF	Laser-Induced Fluorescence
MIL	Modèle Intermittent Lagrangien
MUSCL	Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws
PaSR	Partially Stirred Reactor
PDF	Probability Density Function
PEUL	Probabiliste Eulerien-Lagrangien
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
PREPHA	Programme de Recherche sur la Propulsion Hypersonique Avancée
PSR	Perfectly Stirred Reactor
QL	Quasi-Laminaire
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
REST	Rectangular to Elliptical Shape Transition
RESTM12	Rectangular to Elliptical Shape Transition Mach 12
RMS	Root Mean Square
SST	Shear Stress Transport
SSTO	Single-Stage-To-Orbit
UPaSR	Unsteady Partially Stirred Reactor

NOMBRES SANS DIMENSION

CFL	Nombre de Courant-Friedrich-Lewy
Da	Nombre de Damkhöler
Ka	Nombre de Karlovitz
M	Nombre de Mach
Pr	Nombre de Prandtl
Sc	Nombre de Schmidt
Re	Nombre de Reynolds

SYMBOLES LATINS

A, B, E_a	Paramètres de la loi d'Arrhenius
c	Vitesse du son
C_f	Coefficient de frottement
C_{p_k}, C_p	Capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce k et de mélange
C_s	Constante du modèle de Smagorinsky
C_μ	Constante du modèle k - ε
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce k
e, e_t	Energies interne et totale
\mathcal{F}	Flux hyperbolique
$F_{1/2}$	Fonction du modèle SST
h_k, h	Enthalpie de l'espèce k et de mélange
$h_{f,k}^0$	Enthalpie de formation de l'espèce k
\mathcal{J}	Matrice jacobienne
J_k^s	Flux de diffusion de masse de l'espèce k
J^{e_t}	Flux de diffusion thermique total, flux de diffusion d'énergie totale
k	Energie cinétique de la turbulence
k_{f_j}/k_{b_j}	Vitesse de réaction directe/inverse de la réaction j
l, L	Echelle caractéristique de longueur
$\mathcal{M}_k, \mathcal{M}$	Masse molaire de l'espèce k et de mélange
\dot{m}	Débit massique
\mathbf{n}	Vecteur normal unitaire
N, Nr	Nombre d'espèces, de réactions
p	Pression
\dot{Q}	Flux de chaleur
Q	Critère Q
R	Constante des gaz parfaits
\mathbf{S}	Partie symétrique du tenseur de déformations
t	Temps
T	Température
\mathbf{u}	Vecteur vitesse
u	Vecteur des variables naturelles
\mathcal{U}	Vecteur des variables conservatives
X_k	Fraction molaire de l'espèce k
Y_k	Fraction massique de l'espèce k
Z	Fraction de mélange

SYMBOLES GRECS

γ	Fraction volumique de structures fines
Δ	Taille du filtre LES (assimilée ici à la taille de maille)
Δt	Pas de temps
$\Delta S_j^0, \Delta H_j^0$	Variation d'entropie et d'enthalpie due à la réaction j
ε	Taux de dissipation de la turbulence
η	Rendement
κ	Constante de von Karman
λ, λ_k	Conductivité thermique de l'espèce k et de mélange
μ, μ_k	Viscosité dynamique de l'espèce k et de mélange
ν	Viscosité cinématique
ν'_k/ν''_k	Coefficients stoechiométriques direct/inverse de l'espèce k
ρ	Masse volumique
$\boldsymbol{\tau}$	Tenseur des contraintes visqueuses
τ	Temps caractéristique
ϕ	Richesse
χ	Taux de dissipation scalaire
ω	Pseudo-dissipation turbulente
ω_k	Taux de réaction chimique de l'espèce k
ω_T	Taux de dégagement de chaleur

INDICES ET EXPOSANTS

*	Relatif aux structures fines
0	(exposant) Relatif aux structures environnantes
0	(indice) Grandeur de référence
c	Combustion
f	Relatif au carburant
i, j	Indice des directions dans l'espace
k	Indice des espèces
K	Échelle de Kolmogorov
m	Mélange
F, O	Fuel/Oxydant
t	Grandeurs turbulentes
T	Échelle intégrale
w	Variable de paroi

AUTRES NOTATIONS

Ψ	Grandeur quelconque
$\bar{\cdot}$	Opérateur de moyenne au sens de Reynolds
$\tilde{\cdot}$	Opérateur de moyenne au sens de Favre
\cdot'	Fluctuation au sens de Reynolds
\cdot''	Fluctuation au sens de Favre

Introduction

L'utilisation d'un système de propulsion aérobique, sans partie mobile, pour les véhicules volant à grande vitesse est une idée née au début du XX^{ème} siècle. L'ingénieur français René Lorin introduit le concept de statoréacteur et en décrit le mode de fonctionnement dans plusieurs articles de la revue l'Aérophile entre 1908 [1] et 1913. Il y décrit notamment l'avantage de convertir l'énergie issue de produits de combustion sous une forme cinétique (détente des gaz de combustion dans une tuyère) plutôt qu'une forme mécanique (arbre mécanique relié à une hélice) pour la propulsion d'un aéronef à grande vitesse.

«Il y aurait un grand avantage à pouvoir supprimer l'intermédiaire de la puissance mécanique. C'est ce que l'on obtient par l'emploi du propulseur à échappement»

C'est donc sous la dénomination « propulseur à échappement » (Fig. 1) qu'apparaît pour la première fois un concept de propulsion par réaction. Même si ce prototype ne vit jamais le jour, Lorin y incorpore déjà les trois éléments majeurs des réacteurs modernes : un système de compression de l'air ambiant, un apport énergétique par combustion du mélange air/combustible, et enfin un système de détente pour les gaz chauds ainsi obtenus. En 1913, Lorin définit véritablement le concept de statoréacteur en proposant une entrée d'air supersonique, sans partie mobile, comme système de compression. Malheureusement, aucun système de propulsion n'est alors capable d'atteindre la vitesse nécessaire à son fonctionnement.

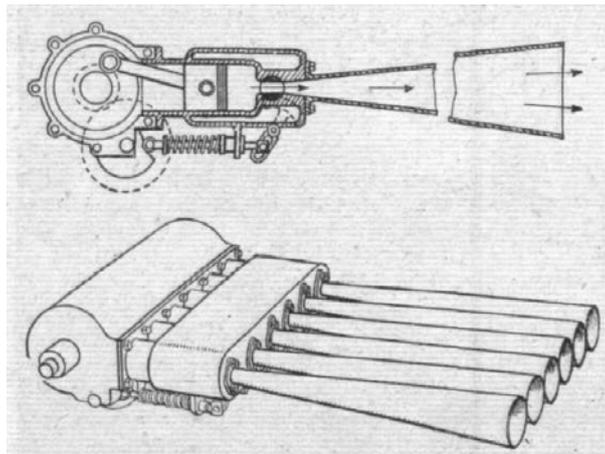


FIGURE 1 – *Propulseur à échappement imaginé par Lorin [1]*

Le statoréacteur possède une meilleure performance propulsive, en terme d'impulsion spécifique (schématisé dans la figure 2), que les propulseurs anaérobies. Cependant cette performance se dégrade fortement lorsque le nombre de Mach augmente. Cela est dû, en partie, aux pertes de pression d'arrêt lors du ralentissement de l'écoulement à des vitesses

subsoniques dans la prise d'air. Dans le régime hypersonique (au-delà de Mach 6), l'utilisation d'un statoréacteur à combustion supersonique, ou superstatoréacteur, permettrait de surmonter ces difficultés.

- Dans le **domaine de la propulsion spatiale**, cela permettrait l'amélioration en performance des systèmes de mise en orbite de type Three-Stage-To-Orbit et d'en réduire le coût de lancement [28]. En effet, certaines études préliminaires démontrent l'intérêt certain d'utiliser ce type d'application pour le 2^{ème} étage d'accélération [29].
- Dans le **domaine du transport civil**, cela permettrait de réduire considérablement le temps de trajet d'un voyage antipodal. Par exemple, l'utilisation d'un aéronef de croisière à Mach 8 rendrait Sydney accessible en 4 heures de vol au départ de Bruxelles [30].
- Dans le **domaine de la défense**, il permettrait d'accroître la pénétration de nouveaux missiles et de diminuer le temps d'intervention d'un drone de reconnaissance.

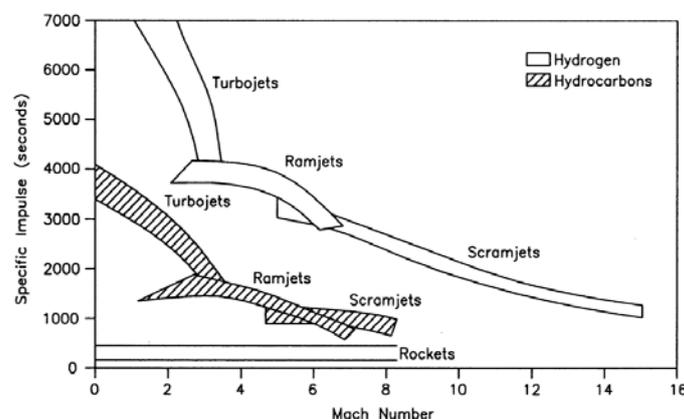


FIGURE 2 – Impulsion Spécifique (d'après [2])

Cependant, le bilan propulsif d'un statoréacteur hypersonique est difficile à établir de façon précise, car dans ce régime de fonctionnement il est la différence de deux grandes valeurs (Poussée moins traînée). Pour illustrer cet effet, Falempin et al. [31] donnent les chiffres suivants :

- À un nombre de Mach de vol de 2, une poussée nette de 1 est obtenue en produisant une poussée de 2 pour compenser une traînée de 1.
- À Mach 8, une poussée nette de 1 est obtenue en produisant une poussée de 7 pour compenser une traînée de 6.
- Enfin à Mach 12, une poussée nette de 1 est obtenue en produisant une poussée de 12 pour compenser une traînée de 11.

Plus particulièrement, une erreur de 5% sur les performances de la tuyère à Mach 8, entraîne une réduction de 35% de poussée nette. À Mach 12, la même erreur entraîne une réduction de 60% de la poussée nette. Il apparaît donc nécessaire de mettre en place des outils de dimensionnement prédictifs. Les moyens expérimentaux, c'est-à-dire essais en soufflerie et en vol, en font partie. Malheureusement ils sont souvent extrêmement coûteux, complexes à mettre en oeuvre, et ne fournissent pas nécessairement toutes les grandeurs caractéristiques de l'écoulement. La simulation numérique (CFD) fournit de ce fait un moyen alternatif et complémentaire pour l'étude du régime des écoulements rapides. Pour cela, elle doit être à la fois précise et, si possible, peu coûteuse. La combustion est par ailleurs déterminante dans les performances propulsives d'un superstatoréacteur. La modélisation doit alors être

capable de prendre en compte les effets de Damköhler, spécifiques aux écoulements à grand nombre de Mach, lorsque les temps caractéristiques de la cinétique chimique et du mélange peuvent être du même ordre de grandeur.

Cette Interaction entre la Chimie et la Turbulence (ICT) intervient directement dans la structure de l'écoulement au sein de la chambre de combustion, notamment dans les couches de mélange issues des jets d'injection de carburant. Les conditions locales permettent alors, ou non, au phénomène d'auto-allumage du mélange air-carburant de se produire. Le cas échéant, la température dans la zone d'allumage est du même ordre de grandeur que la température de croisement T_c , caractéristique de la deuxième limite d'allumage. Dans le cas des écoulements compressibles, l'auto-allumage peut aussi se faire par augmentation de température au travers d'un choc. Une bonne compréhension des phénomènes physiques dans la zone de stabilisation est primordiale, car celle-ci est garante d'un fonctionnement robuste et optimal d'un système de propulsion.

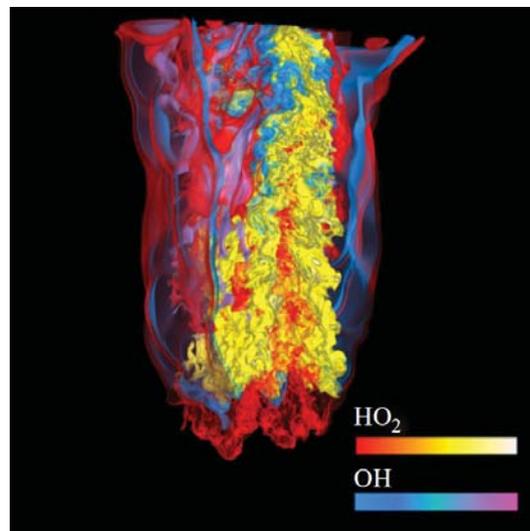


FIGURE 3 – *Flamme détachée subsonique et stabilisée par auto-allumage (d'après [3])*

La stabilisation des flammes par auto-allumage est étudiée au-delà du cadre de la combustion dans les écoulements rapides. La puissance de calcul actuelle permet de plus en plus la réalisation de Simulations Numériques Directes. C'est le cas notamment dans l'étude de Yoo et al. [3] d'une flamme jet H_2 /Air à nombre de Reynolds modéré (Fig. 3). Dans le cas des écoulements compressibles et représentatifs de ceux d'un superstatoréacteur, seuls des Simulations aux Grandes Échelles (LES) sont à l'heure actuelle réalisables. Le cas d'étude de Fureby et al. [4] d'une configuration de chambre de combustion supersonique HiShot II (représentée sur la figure 4) en est un exemple.

Que ce soit dans ce cadre (calculs LES) ou dans le cadre d'une approche RANS, la grande non-linéarité des termes sources chimiques instantanés, nécessite *a priori* de modéliser les termes sources chimiques moyens ou filtrés. En effet, la prise en compte des fluctuations de composition et de température semble importante pour décrire de manière suffisante l'allumage et la stabilisation d'une flamme de diffusion supersonique. Différentes approches ont été utilisées pour cela. Historiquement, l'approche de chimie Quasi-Laminaire, pour laquelle l'ICT n'est pas prise en compte, a largement été utilisée pour le calcul de superstatoréacteurs [32]. La raison principale est que cette approche donne des résultats de

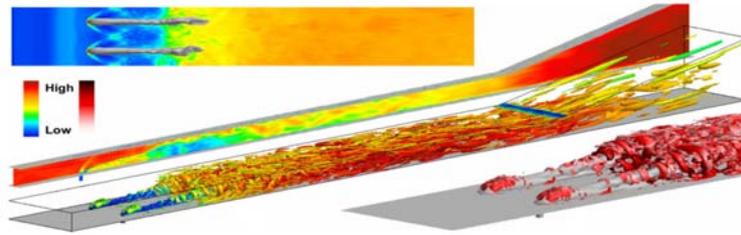


FIGURE 4 – Calcul LES de la chambre HyShot II (d'après [4])

bonne qualité pour un coût de calcul relativement faible. L'approche statistique a notamment été utilisée par Gerlinger et al. [33]. Baurle et al. [34] ont contribué aux méthodes de PDF présumée tandis que Möbus et al. [35, 36] ont collaboré aux développements des méthodes de PDF transportée. Dans ces deux cas, la chimie a été prise en compte de manière détaillée. Cette approche statistique de PDF apparaît alors intéressante mais reste relativement coûteuse. L'approche de flammelette a été utilisée, et plus particulièrement avec une approche LES, par Berglund et Fureby [37]. Plus généralement, cela pose le problème de la justification théorique de l'utilisation de cette approche dans le régime des écoulements supersoniques [38, 39]. Enfin, récemment et sous l'impulsion de Sabel'nikov et Fureby [40], une nouvelle approche, basée sur le mélange turbulent, a été développée et pour laquelle les résultats préliminaires sont encourageants [41].

Cette étude de thèse consiste à développer un modèle, robuste et peu coûteux, à l'aide de cette nouvelle approche, capable de simuler la combustion dans les écoulements rapides en prenant en compte les effets de chimie finie, de micromélange et de l'interaction entre eux et de l'appliquer à la simulation d'une configuration de type superstatoréacteur. Ce mémoire s'articule autour de trois parties :

- La première partie est dédiée à la description des modèles physiques et numériques de base. Dans un premier temps, les équations de l'aérothermochimie sont rappelées. Les différentes approches utilisées dans les codes de simulation numérique pour traiter le caractère turbulent des écoulements (RANS, LES et DNS) sont ensuite présentées ainsi que les équations moyennées ou filtrées résolues par le code CEDRE. Enfin, les modèles de fermeture retenus dans le cadre de cette étude sont décrits (Chapitre 1). Dans un deuxième temps, la structure des flammes laminaires de diffusion et ses caractéristiques sont rappelées. Les différents régimes de combustion induits par l'interaction entre la chimie et la turbulence sont ensuite présentés. Enfin, les différentes approches (géométrique, statistique et mélange) pour traiter ces interactions sont décrites pour finalement rappeler différents modèles généraux basés sur ces approches (Chapitre 2). Dans un troisième temps, les méthodes de résolution du système d'équations présenté au premier chapitre sont explicitées. Les méthodes numériques de résolution spécifique au code CEDRE sont présentées : d'une part le détail du calcul des flux hyperboliques, basé sur la résolution de problèmes de Riemann aux interfaces, et d'autre part les méthodes d'intégration temporelle (Chapitre 3). Dans un quatrième temps, la description du processus de déstabilisation des couches de mélange supersoniques, basée sur des études expérimentales ou sur la théorie de la stabilité linéaire, est détaillée. Après un récapitulatif des mécanismes d'auto-allumage des mélanges H_2 /Air, les différents mécanismes de stabilisation des flammes (dont l'auto-allumage) sont rappelés. Enfin, un modèle physique de réacteur partiellement mélangé, susceptible de prendre en compte

ces phénomènes, est présenté (Chapitre 4).

- La deuxième partie est consacrée à la validation du modèle physique de réacteur partiellement mélangé UPaSR sur un cas de flamme jet supersonique détachée. Pour cela, un cas représentatif est dans un premier temps choisi et présenté. Dans un deuxième temps, l'effet des paramètres influents sur l'auto-allumage dans cette configuration est quantifié. À cet effet, une étude de sensibilité est effectuée dans laquelle les paramètres généraux et relatifs au modèle UPaSR sont testés. Dans un troisième temps, la modélisation proposée est validée pour un jeu de constantes représentatives des conditions physiques. Une étude stationnaire est ainsi menée et la structure de la flamme correspondante est étudiée (Chapitre 5). Puis l'impact des effets instationnaires, notamment les fluctuations de température et de composition, sur l'auto-allumage est étudié à l'aide de la fermeture UPaSR. Pour cela, le cas d'étude du chapitre précédent est analysé par une approche instationnaire. Dans un premier temps, la structure qualitative de la flamme jet détachée est mise en avant. Pour cela, une étude bidimensionnelle axisymétrique est considérée afin d'optimiser la résolution par rapport au coût de calcul. Dans un deuxième temps, des résultats quantitatifs sont établis et comparés aux différents résultats expérimentaux. À cet effet, une Simulation aux Grandes Échelles est menée (Chapitre 6).
- La troisième partie est dédiée à l'étude d'une configuration complexe de superstatoréacteur (RESTM12) en appliquant la modélisation UPaSR. Dans un premier temps, un bref aperçu historique du développement des superstatoréacteurs en France et dans le Monde est donné. Le principe de fonctionnement et les différents enjeux technologiques des superstatoréacteurs sont donnés (Chapitre 7). Dans un deuxième temps, le dispositif expérimental de l'étude du superstatoréacteur RESTM12 à l'Université du Queensland est détaillé : les moyens d'essai (soufflerie T4 de type tube à choc et instrumentation) d'une part et le modèle RESTM12 d'autre part (Chapitre 8). Dans un troisième temps, la modélisation UPaSR est validée sur cette configuration. Deux méthodes différentes sont utilisées et comparées afin d'obtenir les principaux indices de performance. La première est basée sur un outil monodimensionnel et sur l'utilisation des mesures expérimentales de pression, et la deuxième s'appuie sur le calcul de rendements énergétiques à partir des calculs RANS.

Ces travaux ont fait l'objet des communications suivantes :

- Y. Moule, V. Sabel'nikov and A. Mura, *Modelling of Self-Ignition Processes in Supersonic Non Premixed Coflowing Jets Based on a PaSR Approach*. AIAA Paper 2011-2396 (Proceedings of the 16th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, San Francisco, CA, USA), 2011.
- Y. Moule, V. Sabel'nikov, A. Mura and M. Smart, *Numerical Investigation of a Mach 12 REST Scramjet at Off-Design Conditions*. AIAA Paper 2012-5887 (Proceedings of the 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Tours, France), 2012 ; Submitted to the Journal of Propulsion and Power

Première partie

Modèles physiques et numériques

Chapitre 1

Équations de l'aérothermochimie

Table des matières

1.1	Équations de bilan instantané	4
1.1.1	Équations de conservation de la masse	4
1.1.2	Équations de conservation de la quantité de mouvement	5
1.1.3	Équations de conservation de l'énergie	5
1.2	Relations complémentaires	6
1.2.1	Propriétés physiques	6
1.2.2	Loi d'état thermodynamique	7
1.3	Caractéristiques statistiques de la turbulence	7
1.4	Équations filtrées ou moyennées	10
1.4.1	Fermeture des équations	11
1.4.2	Modélisation de la viscosité turbulente	12

Dans ce premier chapitre, les équations de l'aérothermochimie sont rappelées dans un premier temps. Les différentes approches utilisées dans les codes de simulation numérique pour traiter le caractère turbulent des écoulements (RANS, LES et DNS) sont ensuite présentées ainsi que les équations moyennées ou filtrées résolues par le code CEDRE. Enfin, les modèles de fermeture retenus dans le cadre de cette étude sont décrits.

Les équations de l'aérothermochimie sont établies dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Dans chaque volume fluide élémentaire, le rapport du libre parcours moyen des particules à la taille caractéristique de ce volume (nombre de Knudsen) est faible devant l'unité. Le caractère discontinu d'une description moléculaire n'est pas considéré et chaque particule fluide, qui est vu comme un mélange gazeux, peut être décrite par un ensemble de grandeurs macroscopiques. Ces grandeurs sont entièrement déterminées par les équations de Navier-Stokes et par une loi d'état Thermodynamique. Les équations de Navier-Stokes traduisent la conservation de la masse totale, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie [42, 7] et permettent de décrire la convection, la diffusion et les réactions chimiques au sein d'un écoulement fluide.

1.1 Équations de bilan instantané

1.1.1 Équations de conservation de la masse

La conservation de la masse totale s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (1.1)$$

où ρ désigne la masse volumique et u_j est la $j^{\text{ème}}$ composante du vecteur vitesse.

Pour un mélange gazeux constitué de N espèces chimiques, la conservation de la masse s'écrit de manière équivalente pour chaque espèce k (Eq. 1.2) . La somme des N équations de conservation des espèces permet de retrouver l'équation de la masse totale 1.1

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} (-J_{jk}^s) + \rho \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N \quad (1.2)$$

où J_{jk}^s est le flux de diffusion dans la direction j de l'espèce k dans le mélange et $\dot{\omega}_k$ le taux de production (ou de consommation) de l'espèce k .

La diffusion moléculaire s'écrit $J_{jk}^s = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho D_k Y_k)$ selon la loi de Fick, où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange. Cela suppose que l'on néglige la diffusion due aux gradients de température (effet Soret) et celle due aux gradients de pression (effet de baro-diffusion).

Les termes sources chimiques de production (destruction) instantanée des espèces, $\dot{\omega}_k$, sont donnés par la loi d'action des masses. Les N espèces réagissent selon N_r réactions élémentaires, chacune s'écrivant sous la forme canonique :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} R_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} R_k \quad (1.3)$$

où ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stoechiométriques directs et inverses, respectivement, de l'espèce R_k pour la réaction j . L'expression du terme source chimique de l'espèce k est alors donnée, dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, par l'expression suivante :

$$\dot{\omega}_k = \mathcal{M}_k \sum_{j=1}^{N_r} (\nu''_{kj} - \nu'_{kj}) \left(k_{fj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu'_{kj}} - k_{bj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu''_{kj}} \right) \quad (1.4)$$

où C_k et \mathcal{M}_k sont la concentration molaire et la masse molaire, respectivement, de l'espèce k . La vitesse de réaction k_{fj} de la réaction directe j est par la loi d'Arrhenius :

$$k_{fj} = A_j T^{B_j} \exp\left(-\frac{E_a^j}{RT}\right) \quad (1.5)$$

La vitesse de réaction de la réaction inverse j , k_{bj} , est recalculée à partir de la constante d'équilibre de la réaction.

1.1.2 Équations de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de bilan de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} - p \delta_{ij}) + \rho S_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.6)$$

où p est la pression, τ_{ij} est la composante i, j du tenseur des contraintes visqueuses, S_i est la composante dans la direction i du terme source de forces volumiques (gravité, forces électromagnétiques, ...).

1.1.3 Équations de conservation de l'énergie

L'énergie totale du mélange est définie par $e_t = h_t - p/\rho$ avec $h_t = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k + 1/2 u_i u_i$. L'équation de bilan d'énergie totale s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e_t) = \frac{\partial}{\partial x_j} (-J_j^{e_t} + \sigma_{ij} u_j) + \rho S^{e_t} \quad (1.7)$$

où $J_j^{e_t}$ est le flux d'énergie totale dans la direction j , σ_{ij} est la composante i, j du tenseur défini par $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij}$ et S^{e_t} est le terme source de d'énergie totale (travail des forces volumiques, rayonnement, ...).

Le flux d'énergie totale dans la direction j s'écrit $J_j^{e_t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$ en considérant la partie de diffusion de chaleur par conduction (loi de Fourier) et la partie liée à la diffusion d'espèces mais en négligeant la partie liée à la diffusion par gradient de concentration (effet Dufour) ainsi que le rayonnement. λ est la conductivité thermique du mélange.

Les équations 1.6 et 1.7 peuvent être écrites différemment, en faisant apparaître directement le terme de pression dans le terme de transport convectif.

1.2 Relations complémentaires

Les équations de l'aérothermochimie donnent un ensemble de $N + 4$ équations. Le vecteur inconnu est le vecteur de variables conservatives $(\rho Y_1, \dots, \rho Y_N, \rho \mathbf{u}, \rho e_t)$. Il faut donc compléter le système :

- D'un point de vue mécanique, d'une loi de comportement entre le tenseur des contraintes de viscosité et le tenseur des taux de déformation $\boldsymbol{\sigma} = f(\mathbf{D})$
- D'un point de vue thermodynamique, d'une relation d'état pour la pression $p = f(\rho, T)$

1.2.1 Propriétés physiques

Les fluides considérés sont assimilés à des fluides Newtoniens. La relation entre le tenseur des contraintes de viscosité et le tenseur des taux de déformation est linéaire et isotrope. Les coefficients de cette relation linéaire (coefficients de viscosité) ne dépendent que de la température T .

$$\tau_{ij} = \eta \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.8)$$

où μ est la viscosité dynamique et η est obtenu, dans le cadre de l'hypothèse de fluide Newtonien, par l'hypothèse de Stokes $3\eta + 2\mu = 0$. La viscosité dynamique du mélange est obtenue selon la loi de Sutherland :

$$\begin{cases} \mu = \sum_{k=1}^N \mu_k Y_k \\ \mu_k = \mu_k^0 \frac{T_k^0 + T_k^1}{T + T_k^1} \left(\frac{T}{T_k^0} \right)^{1.5} \end{cases} \quad (1.9)$$

où T_k^0, T_k^1, μ_k^0 sont les coefficients de la loi. Le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce k est évalué à partir du nombre de Schmidt de cette espèce, $D_k = \nu / Sc_k$, où $\nu = \mu / \rho$ est

la viscosité cinématique.

Le coefficient de conductivité thermique du mélange est calculé selon :

$$\begin{cases} \lambda = \mu \sum_{k=1}^N \frac{\lambda_k}{\mu_k} Y_k \\ \lambda_k = \frac{\mu_k C_{pk}}{Pr_k} \end{cases} \quad (1.10)$$

où C_{pk} est la capacité thermique à pression constante de l'espèce k , fonction polynomiale de T , et Pr_k est le nombre de Prandtl de l'espèce k .

1.2.2 Loi d'état thermodynamique

La loi d'état thermodynamique s'exprime pour un mélange de gaz parfaits selon :

$$p = \rho r T \quad (1.11)$$

où $r = R/\mathcal{M}$, $R = 8.314 \text{ J}/(\text{mole.K})$ est la constante des gaz parfait et \mathcal{M} est la masse molaire du mélange.

1.3 Caractéristiques statistiques de la turbulence

La turbulence (traitée en détail dans les ouvrages [43, 44, 45, 46]) naît de la nature déterministe et fortement non linéaire des équations de Navier-Stokes. Elle se caractérise par une fluctuation dans le temps et l'espace des grandeurs physiques de l'écoulement, telles que la vitesse ou la pression par exemple, et par la présence de tourbillons. La dimension de ces tourbillons s'étend dans un spectre dont la taille dépend du régime d'écoulement, caractérisé par le nombre de Reynolds. Pour chaque échelle de la turbulence, on peut définir un nombre de Reynolds correspondant :

$$Re(r) = \frac{u r}{\nu} \quad (1.12)$$

où u est la vitesse d'un élément caractéristique de taille r et ν est la viscosité cinématique du fluide. A l'échelle intégrale, on retrouve la définition classique du nombre de Reynolds $Re_L = U L/\nu$ (où L est la taille caractéristique de l'écoulement) qui quantifie le rapport entre les effets d'inertie et les effets visqueux.

Dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente, les gros tourbillons sont les plus énergétiques. Ils interagissent aux grandes échelles avec le mouvement moyen en lui extrayant son énergie cinétique et dépendent donc fortement de la géométrie du problème (forte anisotropie). L'étirement des structures tourbillonnaires permet le transfert de l'énergie à des échelles de plus en plus petites, où les forces dissipatives sont prépondérantes. Les plus petits tourbillons (isotropes) dissipent donc l'énergie créée aux grandes échelles. C'est la cascade

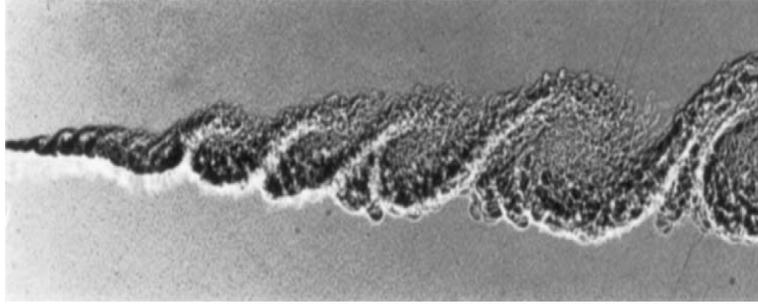


FIGURE 1.1 – Couche de mélange turbulente (d'après [5])

directe d'énergie décrite par la théorie de Kolmogorov. La figure 1.2 représente le spectre classique d'une turbulence homogène isotrope (THI). La gamme de tailles des tourbillons peut être appréciée sur la figure 1.1, qui représente une couche de mélange turbulente à grand nombre de Reynolds entre de l'hélium et de l'azote.

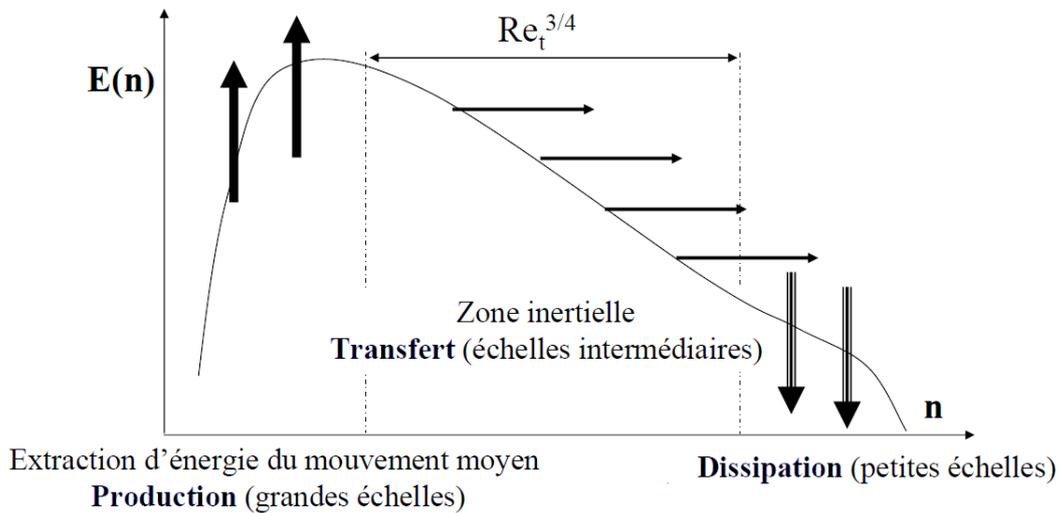


FIGURE 1.2 – Spectre schématisé d'une turbulence à grand nombre de Reynolds (d'après [6])

Les équations de Navier-Stokes ne présentent pas de solution analytique exacte dans le cas général. Il convient par conséquent d'utiliser une résolution numérique capable de rendre compte de l'ensemble des échelles mises en jeu par la turbulence. Pour cela, il existe plusieurs approches :

DNS

La Simulation Numérique Directe (ou DNS pour Direct Numerical Simulation) résout l'ensemble du spectre spatial et temporel des échelles de la turbulence. Le nombre de points de discrétisation est alors de l'ordre de $Re_L^{\frac{9}{4}}$. Dans la mesure où cette approche est très coûteuse en temps de calcul et en occupation mémoire, elle reste utilisée sur des configurations à faible Reynolds et de dimensions réduites. Néanmoins, l'amélioration constante de la puissance de calcul permet de considérer désormais des configurations plus "pratiques" par exemple le calcul de la stabilisation d'une flamme non-prémélangée détachée, à nombre de Reynolds modéré [3].

RANS

L'approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) consiste en une description statistique de l'écoulement. La composante moyenne du vecteur de variables conservatives est transportée, tandis que sa composante fluctuante est modélisée grâce à une équation de fermeture. Chaque variable est composée d'une partie moyenne ($\bar{\Psi}$) et d'une partie fluctuante (Ψ') de sorte que $\Psi = \bar{\Psi} + \Psi'$. L'opérateur de moyenne (opérateur de Reynolds) est linéaire, conserve les constantes, commute avec les opérateurs de dérivation et est idempotent ($\overline{\bar{\Psi}} = \bar{\Psi}$ et $\overline{\Psi'} = 0$). La quantité $\bar{\Psi}$ est la moyenne sur un ensemble de réalisations de Ψ . En faisant une hypothèse d'ergodicité, cette quantité peut-être assimilée à la moyenne temporelle de Ψ .

Dans des écoulements compressibles à masse volumique variable, un opérateur de moyenne pondéré par la masse volumique (opérateur de Favre) est usuellement utilisé :

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\bar{\rho}} \quad (1.13)$$

La décomposition du signal entre sa partie moyenne et sa partie fluctuante s'écrit alors $\Psi = \tilde{\Psi} + \Psi''$. L'introduction de ce type d'opérateur permet la simplification par la fluctuation de la masse volumique et le formalisme des équations instantanées est conservé. La différence des moyennes s'écrit :

$$\tilde{\Phi} - \bar{\Phi} = \frac{\overline{\rho'\Phi'}}{\bar{\rho}} \quad (1.14)$$

Lorsque la masse volumique est constante, les opérateurs de Reynolds et Favre sont strictement équivalents. La différence entre la moyenne au sens de Favre et au sens de Reynolds reste faible lorsque le nombre de Mach est inférieur à cinq et le taux de turbulence modéré [47]. Dans ce cas, la comparaison des grandeurs moyennes (au sens de Favre) calculées aux grandeurs moyennes mesurées expérimentalement est justifiée, tant qu'aucune réaction chimique exothermique n'entre en jeu.

LES

Dans la Simulation aux Grandes Échelles (ou LES pour Large Eddy Simulation), les structures turbulentes sont résolues, d'un point de vue spectral, des plus grandes échelles jusqu'à une échelle de coupure k_c (figure 1.3) située dans la zone inertielle. En dessous de ce nombre d'onde, le spectre est modélisé par un modèle de sous-maille. Cette opération de filtrage par un filtre passe-haut en échelle (et passe-bas en fréquence) dans l'espace spectral correspond à un produit de convolution dans l'espace physique :

$$\bar{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F} \left(\frac{x-x'}{\Delta}, t-t' \right) \Psi(x', t') d^3x' dt' \quad (1.15)$$

où \mathcal{F} est le filtre. Celui-ci possède les propriétés de conservation des constantes, de linéarité et de commutativité avec les opérateurs de dérivation. Chaque variable est donc composée d'une partie filtrée ($\bar{\Psi}$) et d'une partie non-résolue (Ψ'). Contrairement à l'opérateur de moyenne utilisé en RANS, l'opérateur de filtrage en LES perd sa projectivité ($\overline{\bar{\Psi}} \neq \bar{\Psi}$). De plus, l'application du filtre à la partie non résolue ne donne plus zéro ($\overline{\Psi'} \neq 0$). Le filtrage

au sens LES des équations de Navier-Stokes n'est donc pas strictement équivalent à celui en RANS, et des termes supplémentaires apparaissent. Le filtre de Favre¹ est introduit, pondéré par la masse volumique, afin d'obtenir le même formalisme qu'en RANS. En pratique, le filtre est imposé dans l'espace physique à la fois par le maillage et par le schéma numérique.

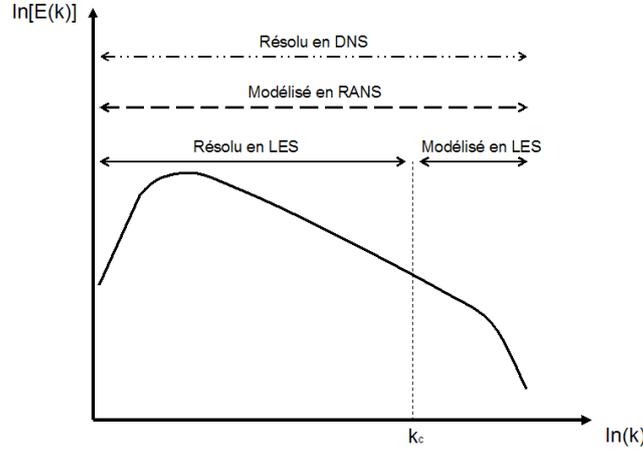


FIGURE 1.3 – Modélisation du spectre d'énergie cinétique turbulente en fonction de l'approche utilisée

1.4 Équations filtrées ou moyennées

Les équations de Navier-Stokes 1.1,1.2,1.6,1.7 filtrées donnent :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[- \left(\overline{\rho u_j Y_k} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k \right) - \overline{J_{jk}^s} \right] + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[- (\overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \bar{\tau}_{ij} \right] + \bar{\rho} \tilde{S}_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_t) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[- (\overline{\rho u_j e_t} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e}_t) + (\overline{\tau_{ij} u_i} - \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i) - \overline{J_j^{e_t}} + \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \right] + \bar{\rho} \tilde{S}^{e_t} \quad (1.19)$$

1. Cet opérateur ne vérifie pas la propriété de commutation des dérivées et n'est donc pas strictement un filtre défini comme tel

La loi d'état thermodynamique filtrée s'écrit :

$$\bar{p} = \bar{\rho} \hat{T} \quad (1.20)$$

Les hypothèses faites au 1.1 restent valables pour les quantités filtrées. Ainsi les flux de diffusion filtrés s'écrivent :

$$\begin{aligned} \overline{J_{jk}^s} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \hat{D}_k \tilde{Y}_k \right) \\ \overline{J_j^{et}} &= -\hat{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^N \hat{D}_k \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (1.21)$$

De même le tenseur des contraintes de viscosité filtré s'écrit :

$$\bar{\tau}_{ij} = \hat{\eta} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \hat{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.22)$$

Les quantités $\hat{\cdot}$ correspondent aux coefficients de transport moléculaire calculés avec la valeur filtrée de la température \tilde{T} .

1.4.1 Fermeture des équations

La fermeture des contraintes visqueuses turbulentes s'écrit :

$$\overline{(\rho u_i u_j)} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \tau_{ij}^t \quad (1.23)$$

Fermeture du tenseur de Reynolds en RANS

Comme il l'a été précisé précédemment, l'opérateur de moyennage au sens de Favre est idempotent. Le tenseur de Reynolds s'écrit simplement :

$$\tau_{ij}^t = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \quad (1.24)$$

Fermeture du tenseur de Reynolds en LES

L'opérateur de filtrage au sens de Favre perd ses propriétés d'idempotence. Le tenseur de Reynolds s'écrit alors avec des termes supplémentaires :

$$\tau_{ij}^t = -\underbrace{\overline{(\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j)} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}_{\mathbf{L}} - \underbrace{\overline{(\rho \tilde{u}_i u_j'')} - \overline{\rho u_i'' \tilde{u}_j}}_{\mathbf{C}} - \underbrace{\overline{\rho u_i'' u_j''}}_{\mathbf{R}} \quad (1.25)$$

Le terme de Leonard **L** correspond aux interactions entre les échelles résolues. Le terme croisé **C** correspond aux interactions entre les échelles résolues et les échelles de sous-maille. Enfin le terme de Reynolds **R** correspond aux interactions entre les échelles de sous-maille. Seuls les termes **R** et **C** nécessitent un effort de modélisation, le terme **L** ne fait apparaître que des termes résolus. Cependant, une approche différente est souvent retenue. Par analogie

avec la viscosité moléculaire des équations instantanées du 1.1, l'hypothèse de Boussinesq est utilisé pour expliciter le tenseur des contraintes turbulentes, en RANS et en LES :

$$\tau_{ij}^t = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (1.26)$$

où k est l'énergie cinétique de turbulence et μ_t est la viscosité dynamique turbulente. L'effort de modélisation est donc reporté sur ces deux paramètres.

Les fermetures des flux de diffusion turbulents sont formellement équivalents en RANS et en LES. Ils s'écrivent de la même façon qu'au 1.1 en utilisant une hypothèse de gradient. Ainsi :

$$\left(\overline{\rho u_j Y_k} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_t \tilde{Y}_k \right) \quad (1.27)$$

$$\left(\overline{\rho u_j e_t} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e}_t \right) + \left(\overline{\tau_{ij} u_i} - \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \right) = - \lambda_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^N D_t \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} + \tau_{ij}^t \tilde{u}_j - \underbrace{\overline{\rho k' u_j''}}_{d_k} + \overline{\tau_{ij} u_j''} \quad (1.28)$$

Le coefficient de diffusion turbulente D_t est estimé à partir du nombre de Schmidt turbulent constant $D_t = \nu_t / Sc_t$. Le coefficient de conductivité thermique turbulent est lui estimé à partir du nombre de Prandtl turbulent constant $\lambda_t = \mu_t C_p / Pr_t$. Le terme d_k correspond (au terme de diffusion des fluctuations de pression $-\overline{p' \mathbf{u}''}$ près) aux termes de diffusion de l'énergie cinétique turbulente. La contribution d_k est donc modélisé par ce terme en RANS et négligé en LES (l'énergie cinétique turbulente de sous-maille est négligée).

1.4.2 Modélisation de la viscosité turbulente

Fermeture de la viscosité turbulente en RANS

Parmi les modèles pour la viscosité turbulente, il existe les modèles algébriques (modèle de longueur de mélange), les modèles à une équation (modèle de Prandtl) et les modèles plus répandus à deux équations (modèles $k-\varepsilon$, $k-\omega$). Le modèle utilisé pour les simulations RANS dans cette étude est le $k-\omega$ SST (Shear Stress Transport) proposé par Menter [48]. L'énergie cinétique turbulente k et la " pseudo-dissipation " ω sont transportées selon :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mathcal{P}_k - \bar{\rho} \varepsilon \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \mathcal{P}_\omega - \beta \bar{\rho} \omega^2 + (1 - F_1) CD_{k\omega} \end{aligned} \quad (1.29)$$

avec

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}\varepsilon &= \beta^* \bar{\rho} k \omega \\
\mathcal{P}_k &= \max \left[\min \left(-\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}; c_l \bar{\rho} \varepsilon \right); 0 \right] \\
\mathcal{P}_\omega &= \frac{\bar{\rho} \gamma}{\mu_t} \mathcal{P}_k \\
\text{CD}_{k\omega} &= 2 \bar{\rho} \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} (\nabla k) \cdot (\nabla \omega)
\end{aligned}$$

Ce modèle permet une transition continue entre k- ω proche de la paroi et k- ε en dehors de la couche limite à l'aide d'une fonction de raccord F_1 . La fonction F_2 permet d'éviter à la limitation SST de s'appliquer en dehors des couches limites. Les différentes constantes ζ du modèle sont données par $\zeta = F_1 \zeta_1 + (1 - F_1) \zeta_2$ avec :

$$\begin{aligned}
\zeta_1 : \quad \sigma_{k1} &= 0,85 & \sigma_{\omega 1} &= 0,5 & \beta_1 &= 0,0750 & \gamma_1 &= \frac{\beta_1}{\beta^*} - \frac{\sigma_{\omega 1} \kappa^2}{\sqrt{\beta^*}} \\
\zeta_2 : \quad \sigma_{k2} &= 1,0 & \sigma_{\omega 2} &= 0,856 & \beta_2 &= 0,0828 & \gamma_2 &= \frac{\beta_2}{\beta^*} - \frac{\sigma_{\omega 2} \kappa^2}{\sqrt{\beta^*}} \\
\beta^* &= 0,09 & \kappa &= 0,41 & c_l &= 20
\end{aligned}$$

D'autre part, les fonctions de raccord et les caractéristiques turbulentes du modèle sont fournies par :

$$\begin{aligned}
\mu_t &= \frac{a_1 \bar{\rho} k}{\max(a_1 \omega; |\tilde{\mathbf{S}}| F_2)} & a_1 &= 0,31 \\
F_1 &= \tanh((arg_1)^4) & arg_1 &= \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega d}; \frac{500 \nu}{d^2 \omega} \right); \frac{4 \bar{\rho} \sigma_{\omega 2}}{\text{CD}_{k\omega} d^2} \right] \\
F_2 &= \tanh((arg_2)^2) & arg_2 &= \max \left(2 \frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega d}; \frac{500 \nu}{d^2 \omega} \right)
\end{aligned}$$

où d est la distance à la paroi et $\tilde{\mathbf{S}}$ est la partie symétrique du tenseur filtré des déformations. Les conditions limites à la paroi pour les grandeurs turbulentes sont les suivantes :

$$\omega = \omega_{\text{vis}}^2 + \omega_{\text{log}}^2 \quad (1.30)$$

$$\omega_{\text{vis}} = \frac{6\nu}{0.075d^2} \quad (1.31)$$

$$\omega_{\text{log}} = \frac{u_\tau}{0.3\kappa d} \quad (1.32)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (1.33)$$

où ω_{vis} et ω_{log} correspondent respectivement à la contribution de la sous-couche visqueuse et de la zone logarithmique, \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal à la paroi.

Fermeture de la viscosité turbulente en LES

Il existe plusieurs modèles pour établir la viscosité de sous-maille dont par exemple le modèle de Smagorinsky, WALE (Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity), MEM (Modèle Echelles Mixtes). Le modèle de Smagorinsky a été utilisé dans notre étude. L'échelle de longueur l suivante est défini :

$$l = \min(\Delta, \kappa d) \quad \text{avec} \quad d = \|\underline{d}_p\| \quad (1.34)$$

où Δ est la taille du filtre (prise égale au diamètre hydraulique de maille) et d_p est la distance à la paroi. La viscosité de sous-maille est alors donnée par :

$$\mu_t = \bar{\rho} (C_s l)^2 \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}} \quad (1.35)$$

où C_s est la constante de Smagorinsky égale à 0.18 et $\tilde{\mathbf{S}}$ est la partie symétrique du tenseur filtré des déformations. Étant donnée la définition de l'échelle de longueur l , la viscosité de sous-maille Smagorinsky s'annule en s'approchant de la paroi. Dans CEDRE, les effets dilatables sont pris en compte en calculant la viscosité de sous-maille à partir du tenseur filtré des déformations $\tilde{\mathbf{D}}$.

Chapitre 2

Modèles de combustion turbulente non-prémélangée dans les écoulements rapides

Table des matières

2.1	Flammes de diffusion laminaire	16
2.1.1	Structure des flammes de diffusion	16
2.1.2	Étirement des flammes de diffusion	18
2.2	Modélisation de la combustion turbulente	20
2.2.1	Phénoménologie de l'interaction chimie/turbulence	20
2.2.2	Modèles généraux	23
2.2.2.1	Modèles de flamelette (Fraction de mélange)	23
2.2.2.2	PDF transportée	24
2.2.2.3	Conditional Moment Closure (CMC)	25
2.2.2.4	Eddy Dissipation Concept (EDC)	25

Dans le deuxième chapitre, la structure des flammes laminaires de diffusion et ses caractéristiques sont rappelées. Les différents régimes de combustion induits par l'interaction entre la chimie et la turbulence sont ensuite présentés. Enfin, les différentes approches (géométrique, statistique et mélange) pour traiter ces interactions sont décrites pour finalement rappeler différents modèles généraux basés sur ces approches.

2.1 Flammes de diffusion laminaire

2.1.1 Structure des flammes de diffusion

Dans les flammes de diffusion (ou non-prémélangées par opposition aux flammes parfaitement prémélangées), les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Une représentation schématique d'une flamme de diffusion est donnée sur la figure 2.1. Dans ce régime de combustion, la flamme est pilotée par la quantité de réactifs entraînés par diffusion moléculaire dans la zone de réaction. L'apport de masse par diffusion limite alors les vitesses de réaction.

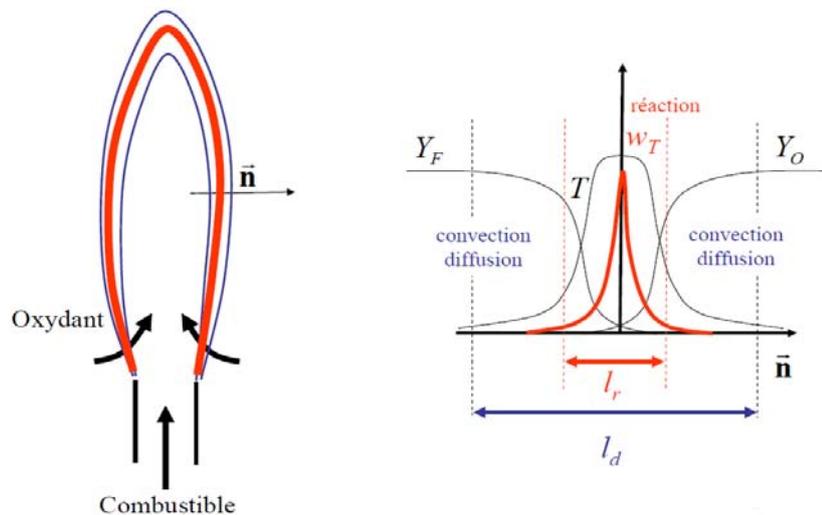


FIGURE 2.1 – Structure d'une flamme laminaire de diffusion (d'après [6])

La flamme de diffusion se structure en trois zones distinctes (figure 2.1) :

- la zone de réaction (l_r) correspond à la zone de dégagement maximal de chaleur (les termes sources chimiques atteignent un maximum), lorsque les réactifs chauds sont mélangés à l'échelle moléculaire dans des proportions stoechiométriques. Les réactifs

y sont entièrement consommés et la température atteint la température adiabatique de flamme.

- la zone de diffusion (l_d) est une zone où les réactifs froids se mélangent aux produits de réaction chauds évacués de la zone de réaction par diffusion. Les réactifs y sont chauffés par diffusion thermique de la zone de réaction et par dilution avec les gaz chauds. Dans l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire, les zones de diffusion des espèces et de la température sont similaires.
- la zone d'apport des réactifs froids, de part et d'autre de la zone de diffusion, alimentée dans le cas présenté ci-dessus par convection.

La structure de la flamme de diffusion laminaire est entièrement pilotée par la compétition entre la chimie et la diffusion, et donc indirectement par l'apport des réactifs. Elle se distingue de la flamme de prémélange, la dynamique de la flamme de diffusion est imposée par la dynamique de l'écoulement qui alimente la flamme.

Dans le cas simplifié d'une réaction unique et irréversible du type :



la variable de Schvab-Zeldovich est définie selon :

$$Z_F = Y_F + \frac{Y_O}{s} \quad (2.2)$$

où s est le coefficient stoechiométrique massique de la réaction ($s = \nu_o M_O / \nu_F M_F$), F est le combustible de fraction massique Y_F , O est l'oxydant de fraction massique Y_O et P correspond aux produits. Dans ces conditions de chimie infiniment rapide, la résolution de la flamme de diffusion laminaire est entièrement déterminée par la connaissance de Z_F . L'équation qui régit l'évolution de Z_F est de type convection-diffusion (sans terme source chimique) et Z_F est donc un scalaire passif.

La variable de Zeldovich est réduite pour définir un autre scalaire passif, la fraction de mélange [49] :

$$Z = \frac{Z_F - Z_F^{\text{ox}}}{Z_F^{\text{fuel}} - Z_F^{\text{ox}}} \quad (2.3)$$

qui se simplifie en :

$$Z = \frac{1}{1 + \phi} \left(\phi \frac{Y_F}{Y_F^\infty} - \frac{Y_O}{Y_O^\infty} + 1 \right) \quad (2.4)$$

où Y_F^∞ désigne la fraction massique de combustible dans l'écoulement de combustible et Y_O^∞ désigne la fraction massique d'oxydant dans l'écoulement d'oxydant. D'autre part, le rapport d'équivalence ϕ est défini par :

$$\phi = \frac{sY_F^\infty}{Y_O^\infty} \quad (2.5)$$

La fraction de mélange Z ainsi définie¹ est également un scalaire passif, pour lequel :

- $Z = 1$ dans l'écoulement de combustible pur
- $Z = 0$ dans l'écoulement d'oxydant pur
- La flamme se localise sur l'iso-surface $Z = Z_{st}$ (en chimie infiniment rapide) pour laquelle $Y_F = Y_O = 0$ lorsque les réactifs sont mélangés en proportions stoechiométriques
- En l'absence de réaction chimique, Z caractérise le mélange du combustible et de l'oxydant

Dans le cas d'une chimie infiniment rapide, les fractions massiques réduites de combustible et d'oxydant et la température sont données en fonction du scalaire passif Z dans la figure (2.2)

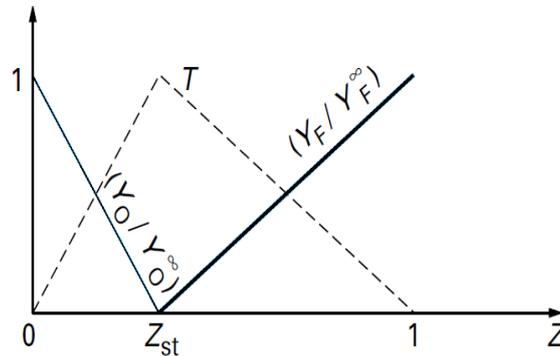


FIGURE 2.2 – Solution de Burke et Schumann

2.1.2 Étirement des flammes de diffusion

Le cas des flammes à contre-courant (figure 2.3) permet de mettre en évidence le rôle prépondérant de la dissipation scalaire dans la dynamique des flammes de diffusion.

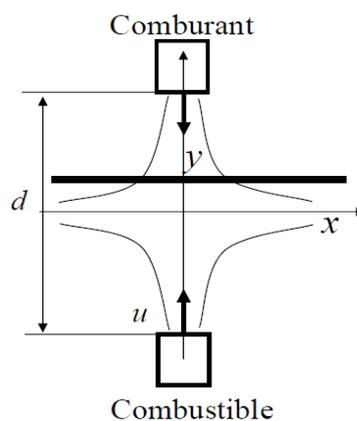


FIGURE 2.3 – Schéma d'une flamme à contre-courant

L'étirement de la flamme ($\varepsilon_S = \partial u / \partial x$) est piloté par la vitesse des jets, et donc par le débit des réactifs injectés. La position de la flamme en $Z = Z_{st}$ dépend de ε_S . La structure

1. On notera que la fraction de mélange est aussi souvent notée ξ

des flammes de diffusion dépend fortement de l'aérodynamique des jets de réactifs à travers le taux d'étirement. Plus généralement, la structure des flammes de diffusion est plutôt caractérisée par la dissipation scalaire χ :

$$\chi = 2D|\nabla Z|^2 \quad (2.6)$$

En faisant l'hypothèse d'une flamme localement unidimensionnelle, c'est-à-dire que les iso-surfaces de Z restent parallèles (les gradients perpendiculaires aux surfaces iso- Z sont négligeables), l'équation d'évolution de Y_F s'écrit :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} = \rho \chi \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_F \quad (2.7)$$

Pour un écoulement stationnaire, l'équation (2.7) se simplifie en :

$$\dot{\omega}_F = -\rho \chi \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} \quad (2.8)$$

Il apparaît alors que les flammes de diffusion peuvent être entièrement décrites à partir de la connaissance de deux grandeurs indépendantes : la fraction de mélange Z et le taux de dissipation scalaire χ . Dans le cas de la flamme décrite précédemment (Fig.2.3), deux régimes de combustion peuvent apparaître :

- Dans le cas où les vitesses d'éjection sont faibles, les gradients de Z sont faibles. Le mélange est faible et le temps de mélange est important
- Dans le cas où les vitesses d'éjection sont fortes, les gradients de Z sont forts. Le mélange est intense et le temps de mélange est court

Il existe donc une valeur critique à partir de laquelle l'extinction est observée. La courbe en S de réponse à l'étirement (Fig.2.4), représentant le taux de production chimique en fonction de la dissipation scalaire (ou de l'étirement), illustre ce phénomène.

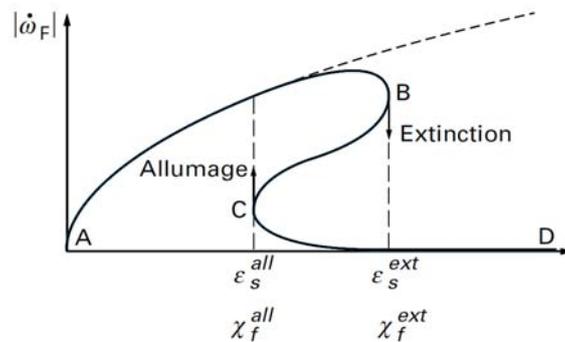


FIGURE 2.4 – Courbe de réponse à l'étirement dite «courbe en S»

La branche [AC] inférieure de cette courbe décrit un état peu réactif, précédant l'allumage, où le faible temps de résidence (mélange) empêche l'emballement thermique de la réaction. De là, une augmentation du temps de résidence entraîne un allumage correspondant au point C (χ_f^{all}). L'augmentation de la dissipation scalaire est directement proportionnelle

à l'apport en réactifs et le caractère fini de la cinétique chimique n'est pas limitant. Cependant, si l'apport des réactifs augmente trop, la réaction chimique n'est plus assez rapide pour brûler les réactifs disponibles et le refroidissement de la zone de réaction due à la vitesse croissante de l'écoulement conduit à l'extinction au point B (χ_f^{ext}). La branche [BC] de la courbe est instable.

2.2 Modélisation de la combustion turbulente

Les équations moyennes sont rappelées au chapitre 1.4. L'équation moyenne de transport de l'espèce k fait intervenir le terme source moyen $\bar{\omega}_k$. Du fait de la grande non-linéarité des termes sources instantanés, il n'est pas possible, de manière générale, de simplifier par $\bar{\omega}_k(T, Y_k) = \dot{\omega}_k(\bar{T}, \bar{Y}_k)$. L'objectif de la modélisation de la combustion turbulente est donc de proposer une fermeture, prenant en compte l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT), pour le terme source chimique moyen.

2.2.1 Phénoménologie de l'interaction chimie/turbulence

La prédominance de l'un des phénomènes de chimie ou de turbulence sur l'autre est contrôlée par les temps caractéristiques de ces deux phénomènes. Pour les flammes de prémélange, le temps caractéristique chimique est généralement défini à partir de la flamme laminaire :

$$\tau_c = \frac{\delta_L}{S_L} \quad (2.9)$$

où S_L est la vitesse et δ_L est l'épaisseur de flamme laminaire. Il est plus délicat de définir un temps caractéristique chimique dans le cas des flammes de diffusion. D'une part, les flammes non-prémélangées n'ont pas d'échelle caractéristique intrinsèque comme par exemple la vitesse de propagation pour les flammes prémélangées. D'autre part, l'épaisseur de flamme dépend fortement du régime d'écoulement. On peut néanmoins citer les échelles caractéristiques suivantes :

- l'échelle spatiale de Kolmogorov l_K caractéristique de la plus petite échelle spatiale de diffusion (épaisseur de diffusion de la flamme δ_f)
- l'épaisseur de flamme (l_d) qui peut être approximée par une échelle spatiale de diffusion [49, 7], $\left(\frac{D}{\chi}\right)_{st}^{1/2}$
- l'épaisseur de la zone de réaction (l_r) qui dépend du temps caractéristique chimique

Comme pour le nombre de Reynolds (Eq. (1.12)), un temps turbulent caractéristique peut être défini pour chaque échelle de la turbulence. Il correspond au rapport de l'échelle de longueur de la turbulence et de la fluctuation de vitesse associée. Différents temps caractéristiques de la turbulence peuvent ainsi être obtenus en fonction de l'échelle des tourbillons considérée. Les plus petits tourbillons sont ainsi décrits par l'échelle de Kolmogorov :

$$\tau_{t,l_K} = \frac{l_K}{w'_{l_K}} \quad (2.10)$$

Les plus grands tourbillons sont quant à eux décrits par l'échelle intégrale :

$$\tau_{t,l_T} = \frac{l_T}{u'_{l_T}} \quad (2.11)$$

Différents nombres sans dimension sont construits à l'aide de ces temps caractéristiques et permettent de caractériser les différents régimes de combustion turbulente. Le nombre de Damköhler définit l'interaction entre les grandes structures tourbillonnaires et la chimie :

$$Da = \frac{\tau_{t,l_T}}{\tau_c} \quad (2.12)$$

Le nombre de Karlovitz définit l'interaction entre les plus petites structures tourbillonnaires et la chimie :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_{t,l_K}} \quad (2.13)$$

Le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = u'l_t/\nu$ peut alors être réécrit en fonction de ces deux nombres adimensionnels :

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (2.14)$$

La classification des régimes de combustion pour les flammes de diffusion est moins directe que celle des flammes prémélangées. L'extinction (quenching) apparaît lorsque le nombre de Damköhler devient trop faible (ou que la dissipation scalaire devient trop grande $\chi_{st} > \chi_q$). Le régime de combustion et la structure de flamme correspondante (détaillé dans la figure 2.5) dépend du rapport des différentes échelles :

- **Chimie rapide** ($l_d \gg l_r$) : le nombre de Damköhler Da est élevé et la flamme est mince. On est dans le régime des flammes LFA (Laminar Flamelet Assumption)
- **Régime intermédiaire** ($l_d \approx l_r \approx l_K$) : des effets instationnaires sont prédominants, la structure de flamme s'éloigne de celle de la flamme laminaire
- **Chimie lente** : l'extinction locale ou globale peut se produire.

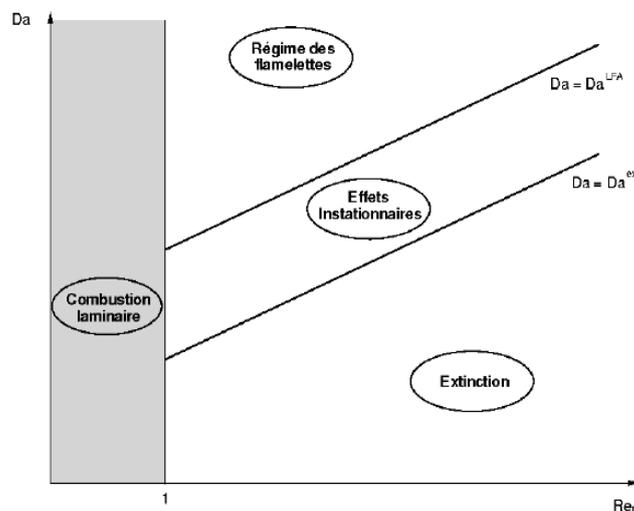


FIGURE 2.5 – Les différents régimes de combustion turbulente non-prémélangée (d'après [7])

Il existe différentes approches pour appréhender l'interaction entre la chimie et la turbulence. Elles sont décrites et comparées en détail dans les travaux de Veynante et Vervisch [50]. La figure 2.6 illustre le point de vue de chacune d'elle.

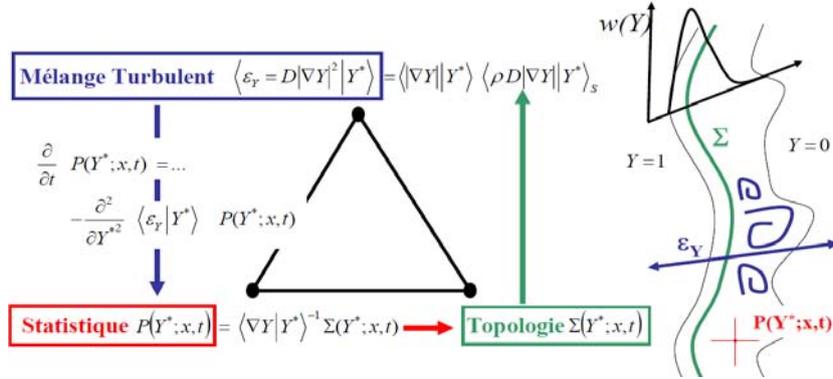


FIGURE 2.6 – Les différentes approches de modélisation de l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT) (d'après [6])

L'approche statistique

La description d'une flamme turbulente à l'aide d'une approche statistique repose entièrement sur la connaissance des fonctions de densité de probabilité (PDF) en chaque point de cette flamme. La PDF $\mathcal{P}(\psi^*)$, associée à la variable ψ , quantifie la probabilité de trouver la variable ψ dans l'intervalle $[\psi^* - \Delta\psi/2, \psi^* + \Delta\psi/2]$, en un point et à un instant donnés. Le terme source chimique moyen est estimé par :

$$\bar{\omega}_k(\mathbf{x}, t) = \int_{Y_1} \dots \int_{Y_N} \dot{\omega}_k(Y_1^*, \dots, Y_N^*) \mathcal{P}(Y_1^*, \dots, Y_N^*; \mathbf{x}, t) dY_1^* \dots dY_N^* \quad (2.15)$$

L'approche topologique

Dans l'approche géométrique, la flamme est assimilée à une surface de discontinuité entre :

- les gaz frais et les gaz brûlés pour les flammes prémélangées
- l'oxydant et le combustible pour les flammes non-prémélangées

Le terme source chimique moyen est alors calculé selon :

$$\bar{\omega}_k = \dot{\Omega}_k \Sigma \quad (2.16)$$

Σ représente la densité de surface de flamme, i.e la surface δA de flamme disponible par unité de volume δV . $\dot{\Omega}_k$ est le taux de production moyen de k par unité de surface de flamme, intégré au travers de la flamme. Ce terme traduit les propriétés locales du front de flamme. L'avantage de la description (2.16) est de découpler la description chimique ($\dot{\Omega}_k$) de l'interaction Chimie-Turbulence (Σ). La densité de surface de flamme Σ peut être estimée à l'aide d'une relation algébrique ou d'une équation classique de diffusion-convection [51].

L'approche mélange turbulent

La dissipation scalaire, comme rappelé précédemment (2.1.2), joue un rôle prépondérant dans la combustion turbulente. Le taux de dissipation mesure directement la diminution des fluctuations du champ scalaire sous l'effet du micromélange turbulent. Il intervient donc, directement ou indirectement, dans la modélisation du terme source chimique moyen. Par

exemple, dans le cas d'une chimie rapide, le taux de production moyen est directement proportionnel au taux de dissipation scalaire $\bar{\omega} \propto \bar{\chi}$.

2.2.2 Modèles généraux

Les différentes approches synthétisées par Peters [49] pour modéliser la combustion turbulente sont rappelées dans le tableau (2.1).

	Prémélange	Diffusion
Chimie infiniment rapide	Modèle Bray-Moss-Libby Modèle de Flamme Cohérente	Modèle Conserved Scalar Equilibrium
Chimie finie	Modèle de Flamelette (G-Equation)	Modèle de Flamelette (Fraction de mélange) Conditional Moment Closure
	Modèle à PDF transportée Modèle Eddy Dissipation Concept (EDC)	

TABLE 2.1 – Classification des modèles de combustion turbulente (adapté de Peters [49])

2.2.2.1 Modèles de flamelette (Fraction de mélange)

La flamme de diffusion turbulente peut être vue comme une collection de flammes laminaires planes étirées par la turbulence, mais dont la structure interne reste peu modifiée. Cette vision, introduite par Peters [52] et Kuznetsov [53] puis largement discutée par Williams [54], permet de simplifier la modélisation de l'interaction Chimie-Turbulence. La méthode de résolution se ramène donc à la connaissance des relations qui existent entre la chimie et les paramètres indépendants dont elle dépend (Z et χ) et de leur distribution statistique. Pour chaque espèce i , la fraction massique moyenne s'écrit :

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i(Z, \chi, t) \mathcal{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t) dZ d\chi \quad (2.17)$$

La difficulté réside alors :

- dans l'établissement d'une "bibliothèque" de flamelettes $Y_i(Z, \chi, t)$
- dans la connaissance fine de la distribution statistique $\mathcal{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t)$ pour laquelle l'indépendance statistique des variables est souvent effectuée, i.e $\mathcal{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t) = \mathcal{P}(Z; \mathbf{x}, t) \mathcal{P}(\chi; \mathbf{x}, t)$

Dans le cas où la PDF $\mathcal{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t)$ est présumée, et si on retient l'hypothèse de flamelettes stationnaires, on obtient le modèle SLFM (Stretched Laminar Flamelet Model) :

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i(Z, \chi_{st}) \mathcal{P}(Z, \chi_{st}; \mathbf{x}, t) dZ d\chi_{st} \quad (2.18)$$

2.2.2.2 PDF transportée

Avec l'approche de PDF transportée, la forme de la PDF n'est pas supposée a priori. Ainsi cette méthode est très précise et reste valable dans tous les régimes de combustion. L'équation de transport de la PDF s'écrit dans l'espace des compositions Ψ sous sa forme la plus générale possible suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \tilde{\mathcal{P}}(\Psi^*; x, t) \right) = & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (u_j | \Psi^*) \tilde{\mathcal{P}}(\Psi^*; x, t) \right]}_{(I)} \\ & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \Psi^*} \left[\bar{\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \right) | \Psi^* \right) \tilde{\mathcal{P}}(\Psi^*; x, t) \right]}_{(II)} \\ & - \frac{\partial}{\partial \Psi^*} \left[\underbrace{\bar{\rho} (\omega(\Psi) | \Psi^*)}_{(III)} \tilde{\mathcal{P}}(\Psi^*; x, t) \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Le membre droit de l'équation se décompose selon :

- (I) : Convection dans l'espace physique
- (II) : Terme de diffusion moléculaire qui peut être mis sous la forme :

$$(II) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}}{\partial x_j} \right) + \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial \Psi_i^* \partial \Psi_j^*} \left[\frac{1}{\bar{\rho}} \left(\rho D \frac{\partial \Psi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \Psi_j}{\partial x_k} | \Psi^* \right) \tilde{\mathcal{P}} \right]$$

Le premier terme (diffusion de la PDF) agit dans l'espace physique alors que le second (dissipation scalaire conditionnelle) modifie la distribution de $\tilde{\mathcal{P}}$.

- (III) : Terme de réaction chimique, fermé en un point, i.e :

$$(\omega(\Psi) | \Psi^*) = \omega(\Psi^*)$$

ce qui constitue l'intérêt majeur de la méthode.

Le terme (II) fait apparaître $(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} | \Psi^*)$, le terme de micromélange qui nécessite un effort de modélisation. En effet, le mélange à l'échelle moléculaire est nécessaire pour que les réactions chimiques se déroulent. Plusieurs fermetures ont été proposées pour ce terme, notamment par Dopazo et O'Brien [55] :

$$\left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} | \Psi^* \right) = \frac{6d}{\lambda_{\Psi}^2} (\bar{\Psi} - \Psi) \quad (2.20)$$

où $6d/\lambda_{\Psi}^2$ est une fonction de la turbulence, caractérisant la destruction des fluctuations de Ψ autour de sa valeur moyenne $\bar{\Psi}$. Ce modèle fait partie des modèles d'échange à la moyenne (IEM) [55]. On peut aussi citer les modèles de coalescence/dispersion (CD) [56], Euclidean Minimum Spanning Tree (EMST) [57] et plus récemment, la fermeture Multiple Mapping Closure (MMC) [58].

Cependant, la description des phénomènes de cinétique chimique finie nécessite de prendre en compte un certain nombre d'espèces, ce qui augmente d'autant la dimension de la PDF jointe et peut rendre en pratique le calcul impossible. Dans de nombreuses applications, le système chimique relaxe rapidement vers un sous-espace attracteur de dimension réduite. La description chimique d'une combustion turbulente non-prémélangée peut alors se faire en terme de fraction de mélange et d'un nombre limité de variables de progrès. Parmi ces techniques, il existe notamment les méthodes ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifold) [59], FGM (Flamelet-Generated Manifold) [60], FPI (Flame Prolongation of ILDM) [61] et REDIM (REaction DIffusion Manifold) [62].

2.2.2.3 Conditional Moment Closure (CMC)

La méthode est développée simultanément et indépendamment dans un premier temps par Klimenko [63] et Bilger [64]. L'idée est que la fraction de mélange ainsi que ses fluctuations pilotent la diffusion turbulente et de ce fait interagissent fortement avec la chimie. Ainsi des équations de transport pour les scalaires réactifs conditionnés par la fraction de mélange (par exemple $\langle Y_k|Z \rangle$) sont résolues. La moyenne non conditionnée d'une quantité ne dépend plus seulement de l'évolution spatiale de la PDF, mais aussi des variations spatiales de ces quantités conditionnées.

L'équation pour le premier moment $Q_k = \langle Y_k|Z \rangle = \int_0^1 Y_k \mathcal{P}(Y_k|Z)$ s'écrit :

$$\frac{\partial Q_k}{\partial t} = \langle \chi|Z \rangle \frac{\partial^2 Q_k}{\partial Z^2} + \langle \dot{\omega}_k|Z \rangle - \langle u_j|Z \rangle \frac{\partial Q_k}{\partial x_j} - \frac{1}{\bar{\rho} \tilde{\mathcal{P}}(Z)} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{\mathcal{P}}(Z) \langle u_j'' Y_k''|Z \rangle \right) \quad (2.21)$$

Lorsque les deux derniers termes de l'équation Eq.(2.21) (la convection moyenne et les flux turbulents conditionnés) sont négligeables devant le chimie, on retrouve le modèle de flammelle instationnaire. Le modèle CMC prend en compte les variations spatiales et temporelles de la dissipation scalaire conditionnelle, lui permettant de traiter un grand nombre de cas dans la combustion turbulente non prémélangée, dont les phénomènes d'allumage et d'extinction. Le terme chimique $\langle \dot{\omega}_k|Z \rangle$ est évalué au premier ordre, c'est-à-dire que l'influence des fluctuations turbulentes est négligée. Alors que cette approximation est fautive pour les quantités non conditionnées, l'erreur est plus petite (parfois acceptable) pour les quantités conditionnées. En effet, la source principale d'erreur dans la non-linéarité des termes sources chimiques vient de la fraction de mélange et le conditionnement à cette variable même limité à la seule considération de la valeur moyenne conditionnelle s'avère donc souvent suffisant.

2.2.2.4 Eddy Dissipation Concept (EDC)

Le modèle EDC considère, à partir d'observations expérimentales et numériques, que les transformations chimiques ont lieu seulement dans les zones dissipatives. C'est dans ces zones que le mélange moléculaire est le plus intense. Dans ce modèle, chaque volume fluide de l'écoulement est traité comme un réacteur partiellement prémélangé avec des zones dissipatives, mélangées à l'échelle moléculaire (noté *), et une zone non-réactive environnante (noté 0). La zone de micromélange se comporte alors comme un réacteur parfaitement mélangé, où les termes sources chimiques sont potentiellement élevés en raison des conditions

favorables de mélange et la zone environnante est chimiquement inerte. Le terme source chimique moyen s'écrit de manière générale :

$$\bar{\omega}_k = \int_{\Psi} \mathcal{P}(\psi) \dot{\omega}_k(\psi) d\psi \quad (2.22)$$

où \mathcal{P} désigne la PDF jointe scalaire, Ψ son domaine de définition et $\psi = [T, Y_k]^T$. La PDF est supposée bimodale avec une contribution de la zone micromélangée (*) et une contribution environnante (0), de telle sorte que le terme source chimique moyen se simplifie comme :

$$\bar{\omega}_k \approx \gamma^* \dot{\omega}_k(\psi^*) + (1 - \gamma^*) \dot{\omega}_k(\psi^0) \approx \gamma^* \dot{\omega}_k(\psi^*) \quad (2.23)$$

où γ^* est la fraction volumique des structures fines, i.e. la fraction de chaque cellule de calcul dans laquelle se déroulent les mécanismes de mélange à petite échelle. Les conditions dans les deux zones définies (*) et (0) sont liées par une équation de quasi-équilibre entre le micromélange et la production chimique, se traduisant pour la masse par :

$$\bar{\rho} (Y_k^* - Y_k^0) = \tau_m \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*) \quad (2.24)$$

et pour l'énergie par :

$$\bar{\rho} \sum_{k=1}^N (Y_k^* h_k^* - Y_k^0 h_k^0) = \tau_m \sum_{k=1}^N h_{k,f}^\theta \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*) \quad (2.25)$$

dans lesquelles τ_m est le temps de micromélange, h_k l'enthalpie et $h_{k,f}^\theta$ l'enthalpie de formation de l'espèce k .

Les travaux de Batchelor et Townsend [65] ont permis de montrer qu'à nombre de Reynolds élevé, les structures fines turbulentes, responsables des phénomènes de mélange et de dissipation à petite échelle, sont concentrées dans des zones isolées. Les gradients de vitesse (dans le cas d'écoulements non-réactifs) sont très intermittents et les structures fines, qui comportent majoritairement de la turbulence à petite échelle, ne sont pas distribuées uniformément.

Chomiak [66] a émis l'hypothèse que ces zones dissipatives et mélangées à l'échelle moléculaire sont une zone préférentielle pour le déroulement des réactions chimiques et propose ainsi un mécanisme de propagation des flammes prémélangées à nombre de Reynolds élevé.

Kuo et Corrsin [67, 68] ont fait la revue des mécanismes d'étirements des tourbillons et montrent que ces structures fines intermittentes sont topologiquement complexes et peuvent s'apparenter à des tubes, des rubans ou des feuillets de vorticit . Ils ont aussi proposé d'identifier γ^* au facteur d'intermittence, γ , qui correspond à la probabilité à un instant et en un point donn s d'avoir un  coulement turbulent.

Des simulations directes r centes [8, 69] ont permis de confirmer num riquement cette structure d' coulement, notamment :

- les tubes de vorticit  de grande intensit  se concentrent en filaments, plong s dans des feuillets de vorticit  de basse intensit ,
- le volume de ces structures fines est petit,



FIGURE 2.7 – Mise en évidence de la forme (tube, feuillet) prise par les structures fines dans une Simulation Numérique Directe de Woodward et al. [8]

- leur volume diminue lorsque le Reynolds augmente.

Dans leur étude Kuo et Corrsin [68], la fraction de structures fines, dans un volume Δ^3 de structures en feuillet (sheet-like) de surface Δ^2 et d'épaisseur de l'ordre de grandeur de l'échelle de Kolmogorov l_K , est estimé selon :

$$\gamma_S^* \approx \frac{l_K \Delta^2}{\Delta^3 + l_K \Delta^2} \approx \frac{l_K}{\Delta + l_K} \approx \frac{l_K}{\Delta} \approx Re_\Delta^{-3/4} \quad (2.26)$$

sachant que $l_K = \Delta Re_\Delta^{-3/4}$ (pour rappel $Re_\Delta^{-3/4} = u' \Delta / \nu$). Dans l'équation (2.26), l'indice S se rapporte à la forme caractéristique de feuillet (sheet-like structure) que prennent les structures fines. Tennekes [70] a supposé que les structures fines prennent la forme de tube (tube-like), d'une longueur de l'ordre de l'échelle de Taylor, l_T , et d'un diamètre de l'ordre de grandeur de l'échelle de Kolmogorov, l_K , de telle sorte que la fraction de structure fine est estimée selon :

$$\gamma_T^* \approx \frac{(l_K^2 l_T) (\Delta / l_T)^3}{\Delta^3} \approx \frac{l_K}{\Delta + l_K} \approx \frac{l_K}{\Delta} \approx Re_\Delta^{-3/4} \quad (2.27)$$

sachant que $l_K = \Delta Re_\Delta^{-1/2}$. Dans l'équation (2.27) l'indice T se rapporte à la forme caractéristique de tube (tube-like structure) que prennent les structures fines. D'après la simulation directe de Woodward et al [8], dont une représentation est donnée dans la figure 2.7, il semblerait que les deux types de structure coexistent.

Magnussen [71, 72] a développé le modèle EDC sur la base de ces observations. Il a par ailleurs supposé que les structures fines prenaient la forme de feuillets dont une fraction seulement, χ , remplissait les conditions favorables à la combustion, de sorte que la fraction de structure fine s'écrit $\gamma^* = \chi \gamma_S^*$. Par ailleurs, le temps de micromélange, τ^* , est modélisé en considérant le débit massique qui traverse des structures en tube.

Chapitre 3

Présentation des méthodes numériques du code CEDRE

Table des matières

3.1	Système hyperbolique de lois de conservation	31
3.1.1	Invariants de Riemann	31
3.1.2	Solution faible et onde de choc	32
3.1.3	Le problème de Riemann	32
3.2	Méthodes numériques utilisées dans CEDRE	33
3.2.1	Schémas de flux hyperboliques	34
3.2.1.1	Le schéma de Roe	35
3.2.1.2	Les méthodes intégrales : le schéma HLLC	35
3.2.1.3	Construction d'un schéma hybride de flux	38
3.2.2	Intégration temporelle	38
3.2.2.1	Méthodes explicites	39
3.2.2.2	Méthodes implicites	39

Dans le troisième chapitre, les méthodes de résolution du système d'équations présenté au premier chapitre sont explicitées. Dans un premier temps, le problème de Riemann (exemple de système hyperbolique) est rappelé. Dans un deuxième temps, les méthodes numériques de résolution spécifiques au code CEDRE sont présentées : d'une part le détail du calcul des flux hyperboliques, basé sur la résolution de problèmes de Riemann aux interfaces, et d'autre part les méthodes d'intégration temporelle.

Le code CEDRE, utilisé dans notre étude, est une plateforme de calcul utilisant une approche multi-physique. Son architecture lui permet d'intégrer plusieurs solveurs, pour la phase gazeuse (Charme), pour la phase dispersée en approche Lagrangienne (Sparte) ou Eulerienne (Spiree), pour les transferts thermiques dans les solides (Acacia) et les transferts radiatifs (Rea et Astre). Ces solveurs peuvent être utilisés seuls ou couplés dans un contexte mono ou multi-domaines [73].

Charme est le solveur traitant de la phase gazeuse. Il utilise la méthode des volumes finis, bien adaptée aux opérateurs hyperboliques, 'cell-centered' sur maillages polyédriques généraux pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Ce solveur a fait l'objet de vérifications et de validations pour de nombreuses applications [74]. En introduisant u le vecteur de variables naturelles, \mathcal{U} le vecteur de variables conservatives et \mathcal{S} le vecteur de termes sources définis comme :

$$u = \begin{bmatrix} \bar{p} \\ \tilde{T} \\ \tilde{\mathbf{V}} \\ \tilde{Y}_k \end{bmatrix}, \mathcal{U} = \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\rho}\tilde{Y}_k \\ \bar{\rho}\tilde{\mathbf{V}} \\ \bar{\rho}\tilde{e}_t \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\rho}\tilde{\omega}_k \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

les équations (1.16) à (1.19) s'écrivent sous la forme compacte et intégrale :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathcal{F}(u, \nabla u) \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} \mathcal{S} d\Omega \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (3.2)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal au bord $\partial\Omega$ du domaine Ω de \mathbb{R}^3 . La discrétisation spatiale permet de passer d'un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) à un système d'équations différentielles ordinaires (EDO), et permet après interpolation des grandeurs aux interfaces, d'estimer le calcul des flux par faces. La nature des flux peut être différente, et par conséquent, les schémas utilisés pour les calculer sont différents :

- Les flux dissipatifs 'visqueux' sont traités à l'aide d'un schéma centré
- Les flux hyperboliques 'non-visqueux' sont calculés à l'aide d'un schéma décentré

La non-linéarité des équations d'Euler (qui concernent la partie non visqueuse) peut provoquer l'apparition de discontinuités au bout d'un temps fini, même si la condition initiale est régulière. Dans les écoulements compressibles, elles correspondent à deux types d'ondes : les ondes de choc et les ondes de détente. Les chocs correspondent à une focalisation des lignes caractéristiques, par exemple lorsque l'écoulement doit s'adapter brutalement. Cette discontinuité dans le cas des équations d'Euler n'en est plus une dans le cas des équations de Navier-Stokes, où la viscosité régularise la solution. Dans le paragraphe 3.1 qui suit, seules les équations d'Euler seront considérées, afin de caractériser ces deux types d'ondes.

3.1 Système hyperbolique de lois de conservation

On considère le système de lois de conservation monodimensionnel suivant :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}(W)}{\partial x} = 0 \quad (3.3)$$

Ce système est supposé hyperbolique strictement. La matrice jacobienne du flux $\mathcal{A} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial W}$ est alors diagonalisable et possède N valeurs propres $\lambda_j(W)$, telles que $\lambda_1(W) < \lambda_2(W) < \dots < \lambda_N(W)$. Dans le cas des équations d'Euler, $\lambda_1 = u - c$; $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$, où c est la vitesse du son définie par $c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}_s$. Les vecteurs propres à droite de \mathcal{A} sont notés r_k .

3.1.1 Invariants de Riemann

On appelle k -caractéristiques les courbes définies par $dx/dt = \lambda_j(W)$. Pour le système hyperbolique 3.3, une fonction scalaire dérivable $\mathcal{R}_k(W)$ est un k -invariant de Riemann si :

$$\frac{\partial \mathcal{R}_k(W)}{\partial W} \cdot r_k(W) = 0 \quad (3.4)$$

Les k -invariants de Riemann sont donc constants le long des trajectoires du vecteur r_k . Dans le cas des équations d'Euler, le calcul des invariants de Riemann donne :

$$\mathcal{R}_1 = \left(u + \frac{2}{\gamma-1}c \right), \quad \mathcal{R}_2 = \left(\frac{u}{p} \right) \quad \text{et} \quad \mathcal{R}_3 = \left(u - \frac{2}{\gamma-1}c \right) \quad (3.5)$$

Une solution du système 3.3 pour laquelle tous les k -invariants de Riemann sont constants est appelée une k -onde simple. Dans une k -onde simple, les k -caractéristiques sont des droites le long desquelles la solution est constante. Les k -ondes simples, auto-semblables en x/t , se répartissent en deux catégories : les ondes de détente (le faisceau de caractéristiques diverge au cours du temps) ou les ondes de compression (le faisceau de caractéristiques converge en un point faisant apparaître une singularité : une onde de choc). Cette solution est possible en considérant la solution faible au problème initial.

3.1.2 Solution faible et onde de choc

Une fonction $W(x, t)$, admettant $W(x, 0) = W_0(x)$ comme condition initiale, est solution faible du système 3.3 si :

- $W(x, t)$ est une solution classique en dehors des singularités
- $W(x, t)$ vérifie les relations de saut de Rankine-Hugoniot à travers les singularités :

$$[[\mathcal{F}(W)]] = \sigma [[W]] \quad (3.6)$$

où σ est la vitesse de la singularité.

Une onde de choc est une courbe de (x, t) (en 1D) à travers laquelle toutes les variables sont discontinues, et donc vérifient les relations de saut de Rankine-Hugoniot. On appelle k-choc, toute solution de 3.3, vérifiant :

- Les conditions de saut 3.6 précédentes
- Les conditions de choc de Lax suivantes :

$$\lambda_k(W_l) < \sigma_k < \lambda_k(W_r) \quad (3.7)$$

Ces inégalités traduisent qu'un choc admissible provient nécessairement de la convergence de deux k-caractéristiques (ondes de compression), alors qu'un choc de détente compatible avec les relations de saut est physiquement impossible, car il impliquerait une diminution de l'entropie.

3.1.3 Le problème de Riemann

Le problème de Riemann est caractéristique de la résolution d'un système d'EDP hyperbolique, et il constitue donc la base des méthodes numériques retenues pour la résolution du système complet des équations de Navier-Stokes compressibles.

Le problème de Riemann est un problème aux conditions initiales fixées, dont l'évolution est décrite par les équations d'Euler. Dans le cas monodimensionnel :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}(\mathcal{U})}{\partial x} = 0 \\ \mathcal{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathcal{U}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathcal{U}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Le problème ainsi posé possède une infinité de solutions auto-similaires qui ne dépendent que de x/t et caractérisées par l'apparition d'un régime de trois ondes séparant quatre états. La solution du problème de Riemann est constituée par deux ondes non linéaires, dont chacune peut être soit un choc, soit un faisceau de détente, encadrant une discontinuité de contact (figure 3.1).

Une étude approfondie des systèmes hyperboliques de lois de conservation est proposée par Després [75].

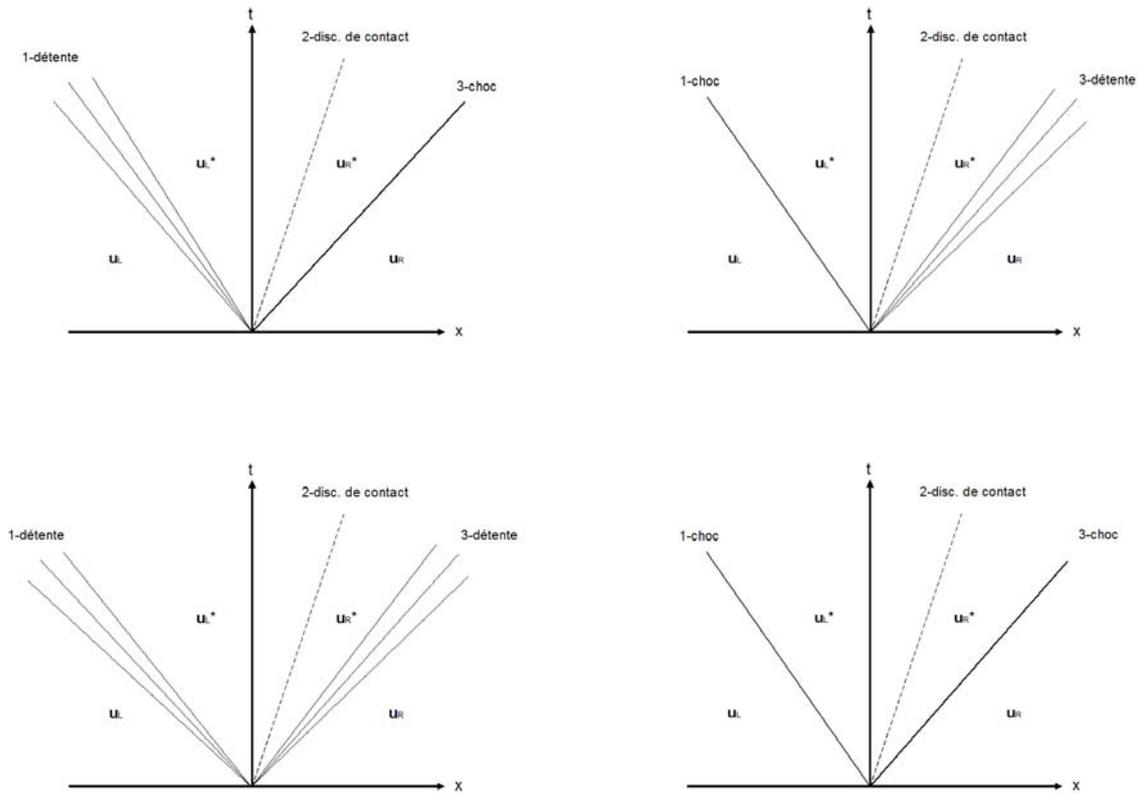


FIGURE 3.1 – Solution du problème de Riemann : les 4 configurations possibles

3.2 Méthodes numériques utilisées dans CEDRE

Le solveur Charme du code CEDRE utilise une formulation de type volumes finis pour discrétiser les équations de conservation (3.2) sous forme intégrale. Cette approche est plus adaptée aux calculs où peuvent apparaître des discontinuités car les relations de sauts (3.6) de Rankine-Hugoniot sont directement incluses dans la forme intégrale des équations. Après le pavage du domaine physique en volumes de contrôle (les cellules du maillage), les équations de bilan sur chaque facette des cellules s'écrivent :

$$V_i \frac{d\mathcal{U}_i}{dt} = - \sum_j \mathcal{S}_{ij} \mathcal{F}_{ij} + V_i \sigma_i \quad (3.9)$$

où V_i est le volume de la cellule i , σ_i sont les sources volumiques, et \mathcal{F}_{ij} les flux de la cellule i vers chacune de ses voisines j et \mathcal{S}_{ij} l'aire de la facette interface. Cette égalité permet d'assurer la conservativité de la méthode de discrétisation. Il convient maintenant de détailler :

- l'intégration temporelle permettant d'estimer le terme $d\mathcal{U}_i/dt$
- le calcul des flux numériques \mathcal{F}_{ij}

La contribution visqueuse au calcul des flux numériques, qui tend à atténuer les fortes discontinuités, ne sera pas présentée par la suite.

3.2.1 Schémas de flux hyperboliques

La résolution des flux hyperboliques dans le solveur Charme se fait à l'aide de schémas décentrés, constituant la base de la méthode MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws) [76, 77, 78]. Gressier [79] donne une description détaillée de l'emploi des schémas décentrés pour les écoulements compressibles. La partie concernant la reconstruction des variables aux interfaces à l'aide d'interpolations n'est pas détaillée ici mais est traitée en détail dans le manuscrit de Haider [80].

Les schémas numériques utilisés dans CEDRE peuvent être classés en différentes catégories :

- Les schémas à décomposition de flux (ou *Flux Vector Splitting* (FVS)) pour lesquels le flux numérique s'écrit comme la somme de deux contributions indépendantes des cellules de part et d'autre de l'interface considérée. On trouve dans cette catégorie les schémas de Steger et Warming et de van Leer.
- Les solveurs de Riemann parmi lesquels existent plusieurs grandes familles : les solveurs utilisant des schémas de type Godunov, consistant à résoudre exactement le problème de Riemann non linéaire, les solveurs qui résolvent de façon exacte le problème linéarisé (schéma de Roe) et enfin les solveurs qui résolvent de façon approchée le problème non linéaire (schéma HLL). Ces méthodes sont appelées FDS (*Flux Difference Splitting*).
- Enfin, les schémas hybrides tels AUSM+ et HUS.

L'approche de Godunov est élégante car le décentrement est introduit de manière naturelle, sur des considérations physiques. Le calcul des flux Godunov aux interfaces se ramène alors aux calculs de problèmes de Riemann à ces interfaces. Une solution constante par morceaux, séparée par des ondes (choc, discontinuité de contact ou détente) est alors construite (Fig. 3.2). Le schéma consiste au calcul en trois étapes :

- reconstruction des états en fonction de la configuration de la cellule (Figure 3.1)
- résolution du problème de Riemann à l'interface
- projection à l'itération t^{n+1}

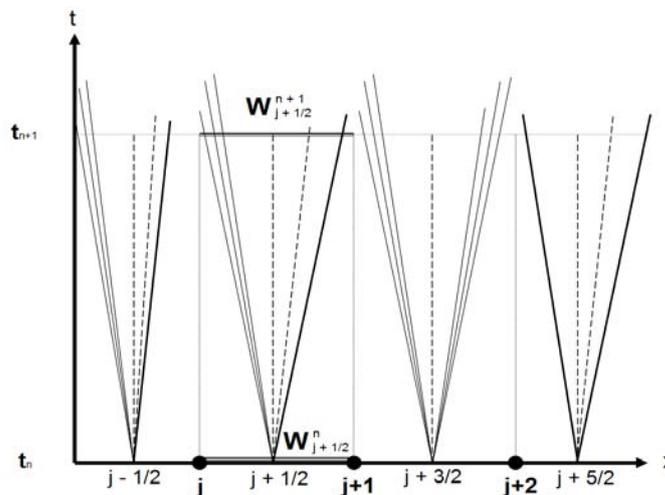


FIGURE 3.2 – Juxtaposition des états de différentes cellules voisines

Pour que cette méthode soit exacte, il est nécessaire que les ondes ne franchissent pas les

interfaces adjacentes, ce qui donne le critère de stabilité CFL habituel pour les équations d'Euler :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} (|u_j^n| + c_j^n) \leq 1 \quad (3.10)$$

La méthode ainsi proposée peut se révéler assez coûteuse et complexe, notamment dans l'évaluation des états intermédiaires (ondes non-linéaire). Le problème peut être simplifié, par exemple en le linéarisant. C'est le cas du schéma de Roe.

3.2.1.1 Le schéma de Roe

Le schéma de Roe, dans la catégorie des solveurs de Riemann approchés, est probablement l'un des plus célèbres. Il est basé sur la résolution du système linéaire approché. Avec les notations de l'équation (3.8), il s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \tilde{\mathcal{A}} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = 0 \\ \mathcal{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathcal{U}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathcal{U}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (3.11)$$

où $\tilde{\mathcal{A}}$ est la matrice du système linéarisé. Il est important que :

- $\tilde{\mathcal{A}}$ soit diagonalisable à valeurs propres réelles (comme \mathcal{A} , le problème reste hyperbolique)
- par consistance $\tilde{\mathcal{A}}(\mathcal{U}_L, \mathcal{U}_R)$ coïncide avec la jacobienne du système non-linéaire lorsque \mathcal{U}_L et \mathcal{U}_R tendent vers un même état
- la conservativité soit assurée dans les discontinuités, i.e $\mathcal{F}_L - \mathcal{F}_R = \tilde{\mathcal{A}}(\mathcal{U}_L - \mathcal{U}_R)$

3.2.1.2 Les méthodes intégrales : le schéma HLLC

Le schéma HLLC, proposé par Toro [81], est basé sur le schéma HLL (Harten, Lax and van Leer), introduit par Harten [82]. L'originalité de la résolution de ce schéma est que celui-ci résout de façon approchée le problème de Riemann non linéaire en utilisant les relations intégrales de conservation pour calculer les états intermédiaires entre les ondes.

Formulation intégrale du problème de Riemann

On considère le problème de Riemann complet de la figure (3.3). La solution exacte du problème de Riemann est constituée de deux ondes non linéaires encadrant une discontinuité de contact. Les vitesses des ondes correspondantes sont notés \mathcal{S}_L , pour la plus lente, \mathcal{S}_R , pour la plus rapide, et \mathcal{S}_M pour l'onde intermédiaire.

Le problème de Riemann s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = 0 \quad (3.12)$$

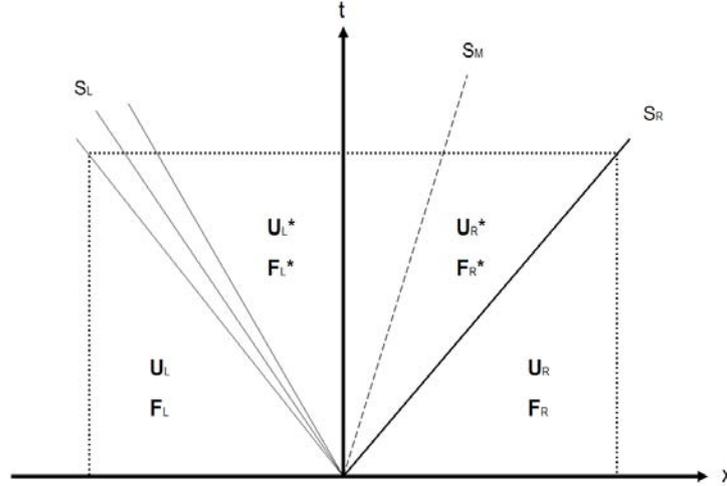


FIGURE 3.3 – Problème de Riemann complet avec volume de contrôle

On rappelle que dans le cas des équations d'Euler, pour un gaz monoespèce, sans transport de scalaire passif :

$$\mathcal{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{V} \\ \rho e_t \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{F} = \begin{bmatrix} \rho u_n \\ \rho u_n \mathbf{V} + p \mathbf{n} \\ \rho u_n e_t + p v_n \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

où \mathbf{U} est la vitesse relative du fluide, $u_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$, $v_n = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$ et \mathbf{n} le vecteur normal de la face concernée. La forme intégrale de la loi de conservation (3.12) sur le volume de contrôle de la figure (3.3) $[x_L, x_R] \times [0, \tau]$ s'écrit après division par la longueur $\tau (\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L)$:

$$\frac{1}{\tau (\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L)} \int_{\tau \mathcal{S}_L}^{\tau \mathcal{S}_R} \mathcal{U}(x, \tau) dx = \mathcal{U}_{HLL} = \frac{\mathcal{S}_R \mathcal{U}_R - \mathcal{S}_L \mathcal{U}_L + \mathcal{F}_L - \mathcal{F}_R}{\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L} \quad (3.14)$$

\mathcal{U}_{HLL} correspond donc à l'état moyen de la solution exacte du problème de Riemann entre l'onde la plus lente et l'onde la plus rapide.

Le schéma HLL

Le schéma proposé par Harten consiste à considérer trois états constants séparés par deux ondes discontinues. L'état intermédiaire entre l'onde la plus rapide et l'onde la plus lente est l'état moyen de la solution exacte du problème de Riemann \mathcal{U}_{HLL} . Le flux correspondant \mathcal{F}_{HLL} est calculé à partir des relations de sauts de Rankine-Hugoniot sur chaque onde de sorte que :

$$\mathcal{F}_{sc} = \begin{cases} \mathcal{F}_L & \text{si } 0 < \mathcal{S}_L \\ \mathcal{F}_{HLL} & \text{si } \mathcal{S}_L < 0 < \mathcal{S}_R \\ \mathcal{F}_R & \text{si } \mathcal{S}_R < 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

avec

$$\mathcal{F}_{HLL} = \mathcal{F}_L + \mathcal{S}_L (\mathcal{U}_{HLL} - \mathcal{U}_L) = \mathcal{F}_R + \mathcal{S}_R (\mathcal{U}_{HLL} - \mathcal{U}_R)$$

Le flux de face s'écrit sous forme compacte en utilisant la convention $\sigma_k = 1$ si $\mathcal{S}_k > 0$ et -1 sinon ($k \in \{L, R\}$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{sc} = \mathcal{F}_L \left[\frac{\mathcal{S}_R(1 + \sigma_R) - \mathcal{S}_L(1 + \sigma_L)}{2(\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L)} \right] &+ \mathcal{F}_R \left[\frac{\mathcal{S}_R(1 - \sigma_R) - \mathcal{S}_L(1 - \sigma_L)}{2(\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L)} \right] \\ &+ (\mathcal{U}_R - \mathcal{U}_L) \left[\frac{\mathcal{S}_L \mathcal{S}_R (\sigma_R - \sigma_L)}{2(\mathcal{S}_R - \mathcal{S}_L)} \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

La méthodologie HLL présente l'avantage d'être à la fois efficace et robuste. Malheureusement, l'hypothèse faite sur la configuration d'onde pour la solution peut s'avérer rédhitoire dans le traitement des cas avec une interface physique : surface de contact, couche de mélange, etc. Dans ce cadre, Toro propose le schéma de résolution HLLC (C pour Contact) avec le traitement d'une onde intermédiaire.

Reconstitution de la discontinuité de contact : le schéma HLLC

Le schéma HLLC s'appuie sur la méthodologie HLL, avec la présence d'une onde intermédiaire supplémentaire correspondant à la valeur propre $\lambda = u$. Le schéma de flux proposé est alors :

$$\mathcal{F}_c = \begin{cases} \mathcal{F}_L & \text{si } 0 < \mathcal{S}_L \\ \mathcal{F}_L^* & \text{si } \mathcal{S}_L < 0 < \mathcal{S}_M \\ \mathcal{F}_R^* & \text{si } \mathcal{S}_M < 0 < \mathcal{S}_R \\ \mathcal{F}_R & \text{si } \mathcal{S}_R < 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

Les états intermédiaires dépendent de la vitesse des ondes. Ils sont déterminés en appliquant les relations de saut de Rankine-Hugoniot au travers de chacune des trois ondes d'une part, et en faisant l'hypothèse de continuité de la vitesse normale et de la pression au travers de l'onde intermédiaire assimilée à une discontinuité de contact d'autre part.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_L - \mathcal{F}_L^* &= \mathcal{S}_L(\mathcal{U}_L - \mathcal{U}_L^*) \\ \mathcal{F}_L^* - \mathcal{F}_R^* &= \mathcal{S}_M(\mathcal{U}_L^* - \mathcal{U}_R^*) \\ \mathcal{F}_R^* - \mathcal{F}_R &= \mathcal{S}_R(\mathcal{U}_R^* - \mathcal{U}_R) \end{aligned} \quad (3.18)$$

La pression p^* associée aux états \mathcal{U}_R^* et \mathcal{U}_L^* n'est pas la pression thermodynamique mais une inconnue indépendante. Ainsi $\mathcal{F}_L^* \neq \mathcal{F}(\mathcal{U}_L^*)$ et $\mathcal{F}_R^* \neq \mathcal{F}(\mathcal{U}_R^*)$

Le flux de face s'écrit sous forme compacte en utilisant la convention $\sigma_k = 1$ si $\mathcal{S}_k > 0$ et -1 sinon ($k \in \{L, R, M\}$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_c = \frac{\mathcal{F}_L + \mathcal{F}_R}{2} + \frac{\sigma_L + \sigma_R}{2} \frac{\mathcal{F}_L - \mathcal{F}_R}{2} + \frac{\sigma_L - \sigma_R}{2} \left(\mathcal{S}_L \frac{\mathcal{U}_L^* - \mathcal{U}_L}{2} + \mathcal{S}_R \frac{\mathcal{U}_R^* - \mathcal{U}_R}{2} \right. \\ \left. + \sigma_M \mathcal{S}_M \frac{\mathcal{U}_L^* - \mathcal{U}_R^*}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Estimation des vitesses des ondes

Einfeldt [83, 84] et Davis [85] proposent pour les vitesses de propagation le choix suivant :

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_L &= \min(u_{n_L} - c_L, u_{n_R} - c_R, \hat{u}_n - \hat{c}) \\ \mathcal{S}_R &= \max(u_{n_L} + c_L, u_{n_R} + c_R, \hat{u}_n + \hat{c})\end{aligned}\quad (3.20)$$

où $\hat{\cdot}$ désigne la moyenne de Roe des états L et R . L'égalité des valeurs de p^* permet de fournir une condition sur la valeur de \mathcal{S}_M :

$$\mathcal{S}_M = \frac{p_L - p_R + \rho_L u_{n_L} (u_{n_L} - \mathcal{S}_L) - \rho_R u_{n_R} (u_{n_R} - \mathcal{S}_R)}{\rho_L (u_{n_L} - \mathcal{S}_L) - \rho_R (u_{n_R} - \mathcal{S}_R)} \quad (3.21)$$

3.2.1.3 Construction d'un schéma hybride de flux

Afin d'améliorer la robustesse du schéma HLLC, notamment dans les zones de fortes discontinuités, un schéma de flux de face hybride a été construit et implémenté de telle sorte que :

$$\mathcal{F}_{hyb} = \alpha \mathcal{F}_{sc} + (1 - \alpha) \mathcal{F}_c \quad (3.22)$$

où le paramètre d'hybridation est défini comme :

$$\alpha = \frac{|p_L - p_R|}{p_L + p_R} \quad (3.23)$$

3.2.2 Intégration temporelle

Les méthodes d'intégration temporelle utilisées dans CEDRE sont décrites exhaustivement dans les travaux de Bertier [86]. Les principales idées sont cependant brièvement rappelées.

Le but de l'intégration temporelle est de résoudre le système d'équations différentielles ordinaires suivant :

$$M\dot{\mathcal{U}} = \mathcal{F}(u, \nabla u, t) \quad (3.24)$$

avec la matrice M diagonale par blocs contenant les volumes des cellules, en remplaçant la solution exacte $\mathcal{U}(t)$ par une suite de valeurs discrètes. Entre deux instants t^n et t^{n+1} , l'intégration temporelle consiste donc à évaluer :

$$M\delta\mathcal{U} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathcal{F}(u, \nabla u, t) dt \quad \text{avec} \quad \delta\mathcal{U} = \frac{\mathcal{U}^{n+1} - \mathcal{U}^n}{\Delta t} \quad (3.25)$$

où $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Les schémas présentés par la suite utilisent une formulation en delta, c'est-à-dire que l'inconnue du système discret n'est pas \mathcal{U}^{n+1} mais $\delta\mathcal{U}$.

3.2.2.1 Méthodes explicites

Les méthodes d'intégration explicites sont les plus immédiates à mettre en oeuvre car le calcul de l'état au temps t^{n+1} ne fait intervenir que l'état au temps t^n . Cependant, toutes ces méthodes ont leur stabilité conditionnée par une contrainte dite de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) sur le pas de temps utilisé. Ainsi en notant localement \mathbf{v} la vitesse convective, c la vitesse du son et Δx la taille de maille, la définition classique du nombre de CFL sur un problème monodimensionnel s'écrit :

$$\text{CFL} = \Delta t \frac{|\mathbf{v}| + c}{\Delta x} \quad (3.26)$$

Le pas de temps doit alors respecter en tout point du domaine de calcul :

$$\Delta t < \text{CFL}_{\max} \frac{\Delta x}{|\mathbf{v}| + c} \quad (3.27)$$

où la valeur du nombre de CFL_{\max} dépend de la limite de stabilité du schéma considéré.

La plus simple des méthodes d'intégration explicites est celle d'Euler, qui peut s'interpréter comme une méthode des rectangles à gauche en temps $M\delta\mathcal{U} = \mathcal{F}(u^n)$. La matrice de masse M étant diagonale, la résolution de ce système est triviale, ce qui rend le processus d'intégration entre deux pas de temps très peu coûteux. Cependant son domaine de stabilité extrêmement réduit rend cette méthode très difficilement utilisable en pratique. De plus, c'est une méthode peu précise, car seulement d'ordre un en temps.

Une façon simple d'étendre le domaine de stabilité de cette méthode et de la rendre plus précise consiste à procéder à une évaluation supplémentaire des états entre t^n et t^{n+1} . C'est le principe de la méthode de Runge-Kutta à deux étapes :

$$\begin{cases} M\delta\mathcal{U}_1 = \mathcal{F}(u^n) \\ M\delta\mathcal{U} = \mathcal{F}[\theta u_1 + (1 - \theta) u^n] \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathcal{U}_1 = \mathcal{U}^n + \Delta t\delta\mathcal{U}_1 \\ \mathcal{U}^{n+1} = \mathcal{U}_1 + \Delta t\delta\mathcal{U} \end{cases} \quad (3.28)$$

La stabilité et la précision de la méthode d'Euler sont améliorées en utilisant non seulement la "pente" en t^n , mais également celle prédite à l'instant intermédiaire t_1^1 . Pour $\theta = 0.5$, la méthode est précise à l'ordre 2 et la stabilité est obtenue pour un pas de temps tel que $\text{CFL}_{\max} < 0.5$. La méthode effectivement utilisée dans le code est une variante, qui utilise comme seconde étape $M\delta\mathcal{U} = \theta\mathcal{F}(u_1) + (1 - \theta)\mathcal{F}(u^n)$.

3.2.2.2 Méthodes implicites

L'utilisation de schémas implicites permet de s'affranchir, en partie ou totalement, de la contrainte CFL (3.27) au prix d'une mise en oeuvre plus complexe, faisant intervenir au second membre du système l'évaluation des flux des états calculés au temps t^{n+1} . Le θ -schéma implicite est défini en non-linéaire comme :

1. Les instants physiques sont notés en utilisant des exposants (t^n) alors que les évaluations intermédiaires sont mises en indice (t_1).

$$M\delta\mathcal{U} = \mathcal{F} [\theta u^{n+1} + (1 - \theta) u^n] \quad (3.29)$$

Comme pour le schéma de Runge-Kutta, ce schéma admet également la variante :

$$M\delta\mathcal{U} = \theta\mathcal{F}(u^{n+1}) + (1 - \theta)\mathcal{F}(u^n) \quad (3.30)$$

Selon les valeurs de θ , on obtient les schémas suivants :

- $\theta = 0$: méthode d'Euler explicite
- $\theta = 0.5$: méthode de Crank-Nicolson
- $\theta = 1$: méthode d'Euler implicite

Les différentes étapes liées à l'application du schéma d'intégration d'Euler implicite au système d'équations différentielles ordinaires (3.24) sont au nombre de trois dans le cadre des méthodes numériques utilisées dans CEDRE :

- **Linéarisation du second membre.** Les schémas (3.29) et (3.30) conduisent à l'écriture de systèmes dont les seconds membres sont des fonctions non-linéaires de l'état u^{n+1} . De façon à pouvoir résoudre ces systèmes par des méthodes itératives classiques, le terme $\mathcal{F}(u^{n+1})$ est alors développé au premier ordre autour de l'état u^n :

$$\mathcal{F}(u^{n+1}) = \mathcal{F}(u^n) + \left. \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\mathcal{U}} \right|_n (u^{n+1} - u^n) + \mathcal{O}(\Delta\mathcal{U}(t))^2 \quad (3.31)$$

La linéarisation de $\mathcal{F}(u^{n+1})$ par rapport à u^n consiste à négliger les termes d'ordre deux et supérieurs $\mathcal{O}(\Delta\mathcal{U}(t))^2$ dans (3.31). \mathcal{J} est la matrice jacobienne des seconds membres par rapport aux états :

$$\mathcal{J} = \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\mathcal{U}} \quad (3.32)$$

L'unique θ -schéma linéarisé, à l'aide de (3.31), s'écrit :

$$(M - \theta\Delta t\mathcal{J}^n)\delta\mathcal{U} = \mathcal{F}(u^n) \quad (3.33)$$

- **Approximation du jacobien.** En toute rigueur, le calcul de \mathcal{J} devrait faire intervenir les cellules du second voisinage. Ceci mène à la construction d'une matrice très remplie dont le conditionnement n'est pas optimal. Le code CEDRE n'utilise en pratique qu'une approximation de ce jacobien, notée $\hat{\mathcal{J}}$. Avec cette approximation, le système linéaire (3.33) se réécrit donc :

$$(M - \theta\Delta t\hat{\mathcal{J}}^n)\delta\mathcal{U} = \mathcal{F}(u^n) \quad (3.34)$$

L'utilisation de ce jacobien approché, construit à l'aide d'une discrétisation spatiale d'ordre un, modifie de façon importante les propriétés des schémas d'intégration temporelle [86].

- **Résolution itérative du système linéaire.** Le système linéaire issu de la phase implicite est résolu à l'aide de la méthode GMRES (Généralisation de la Méthode de minimisation du RÉSidu).

Malgré ces approximations, le schéma d'Euler implicite donne lieu à une méthode robuste, d'ordre un en temps et idéale pour la recherche d'un état stationnaire à grand pas de temps. On notera que dans la limite des très grands pas de temps, le schéma d'Euler implicite tend asymptotiquement vers la méthode de Newton, ce qui assure une bonne convergence du processus itératif.

Chapitre 4

Stabilisation par auto-allumage des flammes détachées en régime supersonique et sa modélisation

Table des matières

4.1	Déstabilisation des couches cisailées supersoniques	42
4.1.1	Épanouissement des couches cisailées	42
4.1.2	Effets de compressibilité	44
4.1.3	Théorie de la stabilité linéaire	47
4.2	Phénoménologie de l'auto-allumage	49
4.2.1	Allumage des mélanges hydrogène-air	49
4.2.2	Lieux d'allumage	52
4.3	Stabilisation des flammes supersoniques	54
4.3.1	Cas subsonique	55
4.3.2	Cas supersonique	57
4.4	Modèle de réacteur partiellement prémélangé	58

Dans le quatrième chapitre, la description du processus de déstabilisation des couches de mélange supersoniques, basée sur des études expérimentales ou sur la théorie de la stabilité linéaire, est détaillée. Après un récapitulatif des mécanismes d'auto-allumage des mélanges H_2 /Air, les différents mécanismes de stabilisation des flammes (dont l'auto-allumage) sont rappelés. Enfin, un modèle physique de réacteur partiellement mélangé, susceptible de prendre en compte ces phénomènes, est présenté. Cette dernière partie a fait l'objet de la communication suivante : *Y. Moule, V. Sabel'nikov and A. Mura, Modelling of Self-Ignition Processes in Supersonic Non Premixed Coflowing Jets Based on a PaSR Approach. AIAA Paper 2011-2396 (actes de la 16th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, San Francisco, CA, USA), 2011.*

4.1 Déstabilisation des couches cisailées supersoniques

4.1.1 Épanouissement des couches cisailées

La théorie de la stabilité linéaire (voir paragraphe 4.1.3), impulsé par les travaux de Rayleigh, permettent de montrer qu'un écoulement devient instable dès lors qu'il présente un point d'inflexion dans son profil de vitesse. C'est notamment le cas des couches de mélange et des jets. Une zone instable apparaît, dominée dans un premier temps par des structures tourbillonnaires bidimensionnelles à grande échelle qui favorisent le mélange pour laisser place dans un deuxième temps à une turbulence à petite échelle tridimensionnelle.

Couche de mélange

La figure (4.1) décrit schématiquement une couche de mélange. Un écoulement de combustible, en général froid, est injecté aux conditions (U_1, ρ_1, c_1) . En parallèle, un écoulement d'air, en général chaud, est injecté aux conditions (U_2, ρ_2, c_2) . Les deux écoulements sont séparés physiquement par l'injecteur. Une instabilité de type Kelvin-Helmoltz se développe, pour créer une oscillation des lignes de courants. L'écoulement le plus rapide amplifie par entraînement cette oscillation pour finalement former des structures tourbillonnaires à grandes échelles. Ces structures, une fois formées, interagissent et peuvent s'apparier pour former des structures primaires. Des structures secondaires, de plus faible intensité, peuvent se former et interagir avec les structures primaires, phénomène essentiel dans la transition vers un écoulement tridimensionnel.

Les paramètres r et s sont introduits tels que $r = U_2/U_1$ et $s = \rho_2/\rho_1$. Heiser et Pratt donnent le taux d'épanouissement d'une couche cisailée laminaire [22].

$$\delta = 8\sqrt{\frac{\nu x}{U_c}} \quad (4.1)$$

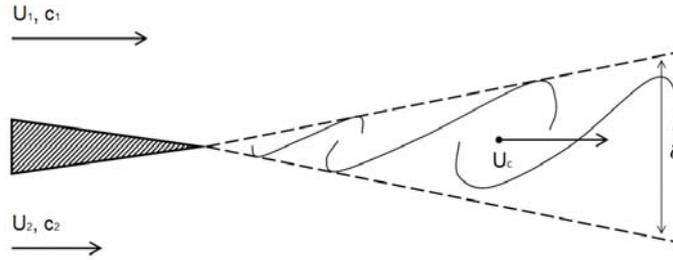


FIGURE 4.1 – Développement d'une couche de mélange

Dimotakis donne le taux d'épanouissement moyen d'une couche cisillée turbulente [87]

$$\delta = C_\delta \left(\frac{1-r}{1+\sqrt{sr}} \right) \left(\frac{1+\sqrt{s}}{2} \right) \left[1 - \frac{(1-\sqrt{s})/(1+\sqrt{s})}{1+1.29(1+r)/(1-r)} \right] x \quad (4.2)$$

Le taux d'épanouissement d'une couche de mélange est une grandeur importante car il caractérise indirectement le mélange entre les différents écoulements. Il est primordial aussi dans le cas d'écoulements réactifs, puisqu'il pilotera pour partie le mélange à plus petite échelle et donc le phénomène de combustion. Le développement des couches de mélange est notamment étudié par Hadjadj et Kudryavtsev [88] en compressible et par Silvestrini et al. [9] (voir fig. 4.2) en incompressible à l'aide de simulations numériques de haute résolution.

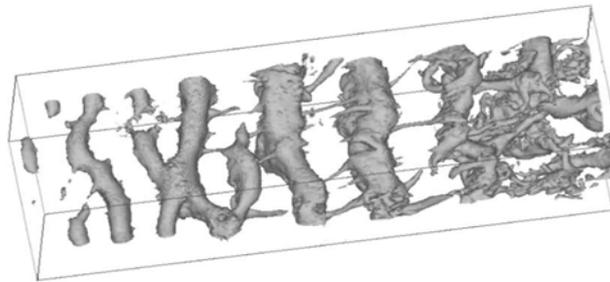


FIGURE 4.2 – LES d'une couche de mélange temporelle incompressible [9]

Jet rond

Le développement d'un jet rond en espace libre est différent de celui de la couche de mélange : d'une part le diamètre du jet est une échelle caractéristique supplémentaire, d'autre part l'épanouissement des couches de mélange se développant aux lèvres de l'injecteur est limité d'un côté par l'axe de symétrie de l'injecteur. Les couches de mélange se rejoignent alors pour former le coeur potentiel du jet (Figure 4.3).

Le jet axisymétrique se développe en différentes structures : structures annulaires, structures hélicoïdales et structures azimutales. Les structures dominantes créées en sortie de l'injecteur sont de type annulaire. De la même manière que pour la couche de mélange plane, ces structures peuvent s'apparier pour former alors des structures hélicoïdales. Cette interaction détruit progressivement les grandes structures pour assurer la transition vers un écoulement turbulent tridimensionnel (Figure 4.4).

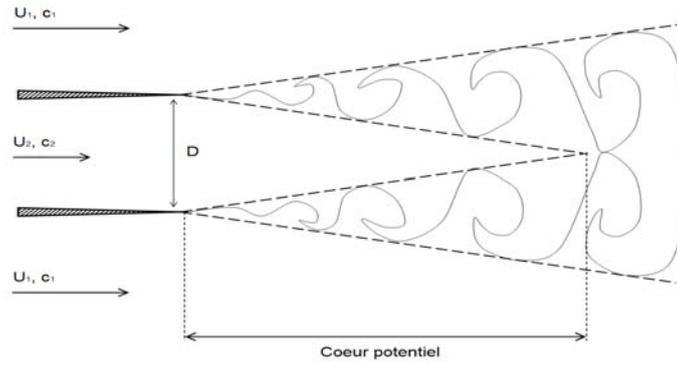


FIGURE 4.3 – Développement d'un jet - zone de coeur potentiel

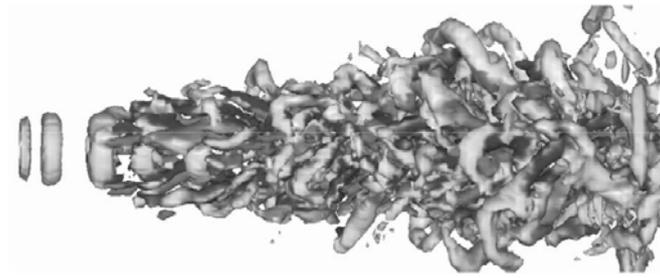


FIGURE 4.4 – LES d'un jet libre compressible à Mach 0.7 [10]

4.1.2 Effets de compressibilité

Afin de caractériser les effets de compressibilité sur le développement d'une couche cisailée, Bogdanoff [89] propose l'utilisation d'un nombre de Mach convectif. Il n'est pas simplement le nombre de Mach d'un côté ou de l'autre de la couche ni même la différence des deux mais un nombre de Mach qui quantifie la convection des grosses structures relatives aux écoulements de part et d'autre de la couche de mélange (illustré dans la figure 4.1) :

$$M_c = \frac{U_1 - U_c}{c_1} = \frac{U_c - U_2}{c_2} = \frac{U_1 - U_2}{c_1 + c_2} \quad (4.3)$$

avec

$$U_c = \frac{c_2 U_1 + c_1 U_2}{c_1 + c_2} \quad (4.4)$$

Dans son étude, Bogdanoff compare aussi les taux d'expansion calculés par la théorie de la stabilité linéaire et les taux mesurés expérimentalement. Papamoschou montre plus précisément que le Mach convectif est différent de part et d'autre de la couche de mélange [90], cela d'autant plus que le Mach convectif est important¹. Ainsi, on distingue :

1. En supposant que la pression totale est identique de chaque côté de la couche de mélange, ainsi que le rapport des chaleurs spécifiques γ à la traversée de la couche, alors la relation $M_{c_1} = M_{c_2} = M_c$ est vérifiée.

$$\begin{cases} M_{c_1} = (U_1 - U_c)/c_1 \\ M_{c_2} = (U_c - U_2)/c_2 \end{cases} \quad (4.5)$$

Dimotakis [87] propose un facteur de correction de compressibilité, à multiplier au taux de la relation (4.2), pour estimer le taux d'épanouissement d'une couche cisillée compressible.

$$f = 0.2 + 0.8e^{(-3M_{c_1}^2)} \quad (4.6)$$

Bellaud [17] donne le taux d'épanouissement de la couche de mélange compressible adimensionné par le taux d'épanouissement de la couche équivalente incompressible en fonction du nombre de Mach convectif pour différents résultats expérimentaux (Figure 4.5).

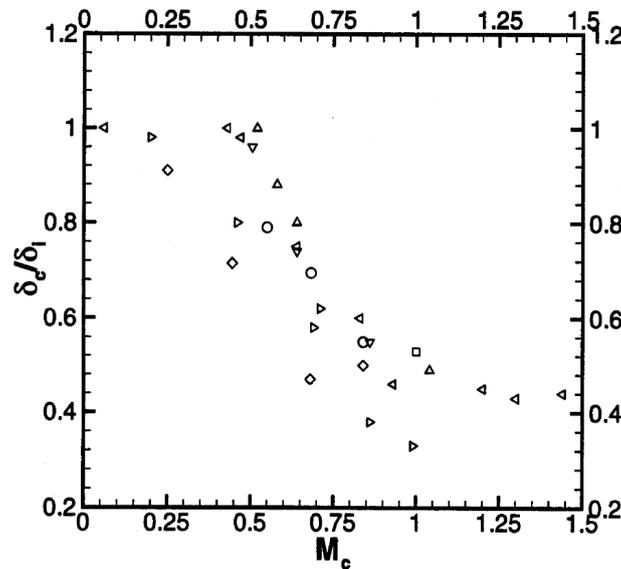


FIGURE 4.5 – Evolution du taux d'épanouissement adimensionné en fonction du nombre de Mach convectif dans une couche de mélange : \square Chambres [11], \triangle De Bisschop [12], ∇ Elliot et Samimy [13], \triangleright Goebel et Dutton [14], \triangleleft Papamoschou et Roshko [15], \diamond Lau [16] et \circ Bellaud [17]

Cette figure montre notamment que les effets de compressibilité font diminuer fortement le taux d'épanouissement d'une couche de mélange, d'un facteur supérieur à 2 pour un Mach convectif unitaire. Zeman [91] et Sarkar et al. [92] proposent simultanément l'utilisation d'un nombre de Mach turbulent pour rendre compte des effets de compressibilité sur la turbulence, justifié notamment par des simulations numériques directes d'écoulements cisillés :

$$M_t = \frac{\tau_a}{\tau_t} = \frac{q}{a} \quad (4.7)$$

où $\tau_a = l_t/a$ est l'échelle de temps acoustique associé à l'échelle intégrale, $\tau_t = l_t/q$ est une échelle de temps caractéristique des grosses structures turbulentes, a est la vitesse du son et $q = \sqrt{\widetilde{u'^2}}$ est l'intensité des fluctuations de vitesse. Le nombre de Mach turbulent est défini localement et permet donc de quantifier localement les effets de compressibilité, contrairement au Mach convectif qui n'en donne qu'une idée globale.

Plus récemment, les effets de compressibilité sur le développement des couches limites sont étudiés par Simulation Numérique Directe [93, 94].

Modélisation de la compressibilité

L'énergie cinétique de turbulence $k = \widetilde{u''_i u''_i} / 2$ peut être déterminée exactement par une équation de transport, obtenue en écrivant l'équation pour la contrainte de Reynolds avec $i = j$ (dans le cadre de la modélisation $k-\omega$ SST présenté au chapitre 1, cette équation est modélisée par l'équation (1.29)).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{\rho} k' u''_j + \tau_{ij} u''_i - \delta_{ji} p' u''_i)}_{(I)} - \underbrace{\bar{\rho} u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{(II)} - \underbrace{\bar{u}''_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(III)} + \underbrace{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}}_{(IV)} - \underbrace{\bar{\rho} \varepsilon}_{(V)} \quad (4.8)$$

Les deux termes du membre de gauche de l'équation (4.8) correspondent classiquement au terme instationnaire et au terme de transport. Les termes du membre de droite de l'équation se décomposent selon :

(I). Le premier terme correspond à la diffusion des contraintes par la turbulence, les fluctuations de pression et la diffusion moléculaire. Ce terme est généralement modélisé sous la forme d'une loi de transport par gradient.

(II). Le deuxième terme correspond au terme de production par les gradients moyens. Il est fermé en utilisant la fermeture étendue de Boussinesq.

(III). Le troisième terme correspond à l'interaction entre le flux de masse turbulent et le gradient moyen de pression.

(IV). Le quatrième terme est le terme de pression dilatationnelle. Il exprime l'échange se produisant entre l'énergie interne et l'énergie cinétique dans les écoulements compressibles. Sarkar [95] décompose les fluctuations de pression en un champ compressible et un champ incompressible. La partie incompressible vérifie une équation de Poisson, et se décompose en une partie 'rapide' et une partie 'lente', en terme de réponse au changement du gradient de vitesse moyenne. Zeman [96] analyse plutôt l'équation de la variance de la pression pour établir son modèle de relaxation basé sur une constante de décroissance associée à la vitesse de propagation acoustique des grandes structures. Les modélisations correspondantes proposées sont :

$$\overline{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}} = \begin{cases} \alpha_{Zd} \left(\frac{p'^2}{p_e^2} - 1 \right) \bar{\rho} \varepsilon_s M_t + \alpha_{Zc} \frac{p'^2}{\gamma \bar{p}} \widetilde{S}_{ii} & \text{Zeman} \\ \alpha_{Sd} \bar{\rho} \varepsilon_s M_t^2 + \alpha_{Sc} \gamma \bar{p} \widetilde{S}_{ii} M_t^4 & \text{Sarkar} \end{cases} \quad (4.9)$$

où α_{Zd} , α_{Zc} , α_{Sd} et α_{Sc} sont les constantes du modèle, p_e^2 est la valeur de la variance de la pression à l'équilibre et $\widetilde{\mathbf{S}}$ est la partie symétrique du tenseur moyen des déformations.

(V). Le cinquième terme est le terme de dissipation moléculaire. Il s'écrit :

$$\bar{\rho} \varepsilon = \frac{1}{2} \mu \overline{\left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right)^2} - \frac{2}{3} \mu \overline{\left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_i} \right)^2} \quad (4.10)$$

Le premier terme ε_s est appelé dissipation solénoïdale et le deuxième ε_d , purement compressible, est appelé dissipation dilatationnelle. Il est possible de déterminer une équation de transport exacte pour $\bar{\rho}\varepsilon$, mais difficile à établir avec le formalisme de Favre. Sarkar[92] montre à l'aide d'une analyse asymptotique, confirmé à l'aide de Simulations Numériques Directes, que l'influence de la compressibilité sur la partie solénoïdale reste négligeable, dès lors que le nombre de Mach reste modéré. Concernant la partie dilatationnelle, Zeman [91] conceptualise la notion de "shocklet" d'après des Simulations Numériques Directes 2D de Passot et Pouquet [97]. Dès lors que le Mach turbulent devient unitaire (i.e les fluctuations de vitesse approchent des vitesses soniques), un champ turbulent initialement solénoïdal évolue vers un état où apparaissent localement des structures instationnaires, de type choc, et où la dissipation de l'énergie cinétique turbulente augmente rapidement par les effets de dilatation. Zeman propose pour la dissipation dilatationnelle :

$$\varepsilon_d = c_d F(M_t, K) \varepsilon_s \quad (4.11)$$

où $c_d = 0.75$ est une constante du modèle et $F(M_t, K)$ décrit la répartition probable des nombres de Mach amont aux chocs en fonction du facteur d'aplatissement K (kurtosis) et du niveau des fluctuations de vitesse (M_t). Une expression simplifiée de cette fonction est proposée :

$$\begin{cases} F(M_t) = 1 - e^{-\left(\frac{M_t - M_{t0}}{\Lambda}\right)^2} & \text{si } M_t \geq 1 \\ F(M_t) = 0 & \text{si } M_t < 1 \end{cases}$$

où $M_{t0} = 0.1$ et $\Lambda = 0.6$ sont des constantes du modèle. Parallèlement, Sarkar[92] propose dans son étude par Simulation Directe de la décroissance d'une turbulence isotrope compressible, une relation plus directe entre ε_d et ε_s :

$$\varepsilon_d = \alpha_1 M_t^2 \varepsilon_s \quad (4.12)$$

où $\alpha_1 = 1$ est une constante du modèle.

4.1.3 Théorie de la stabilité linéaire

Les travaux fondateurs de la théorie de la stabilité linéaire sont dus à Rayleigh. Les bases mathématiques de cette théorie furent établies pour les écoulements incompressibles indépendamment par Orr et Sommerfeld. Les équations de Navier-Stokes décrivant ces écoulements sont fortement non-linéaire, ainsi pour y étudier la croissance modale de perturbations, il est nécessaire de linéariser le problème. Chaque variable $\psi(x, y, z, t)$ peut se décomposer en une grandeur moyenne $\bar{\psi}(x, y, z, t)$ et une petite perturbation $\psi'(x, y, z, t)$. En injectant cette décomposition dans le système d'équation (1.1-1.7), il apparaît trois types de termes.

- Les termes faisant apparaître les termes moyens $\bar{\psi}(x, y, z, t)$ satisfont les équations de Navier-Stokes et peuvent donc être éliminés.
- Parmi les termes faisant apparaître les petites perturbations, les termes quadratiques du second ordre par rapport aux termes linéaires sont négligés.

- Parmi les termes faisant apparaître les petites perturbations, il reste donc les termes non-quadratiques et les termes croisés faisant apparaître $\psi'(x, y, z, t)$ et $\bar{\psi}(x, y, z, t)$

Les termes restant satisfont un système d'équations différentielles linéaire dit “*système d'équations aux petites perturbations*”. Dans le repère lié à l'écoulement moyen (par exemple le plan (x, z)), le système admet des solutions sous forme de modes normaux (d'amplitude complexe qui ne dépend que de y)

$$\psi'(x, y, z, t) = \hat{\psi}(y) \exp[i(\alpha x + \beta z - \omega t)] \quad (4.13)$$

α et β sont les nombres d'onde dans la direction de l'écoulement et la direction transverse respectivement, ω est la pulsation. L'angle de la perturbation est donné par :

$$\tan(\theta) = \frac{\beta}{\alpha} \quad (4.14)$$

L'analyse temporelle correspond au cas où ω est complexe, $\omega = \omega_r + i\omega_i$. L'évolution d'une perturbation en fonction du temps est étudiée à un point fixe. Le facteur d'amplification linéaire est ω_i . L'analyse spatiale correspond au cas où α est complexe, $\alpha = \alpha_r + i\alpha_i$. On étudie alors la croissance en espace d'une perturbation. Le facteur d'amplification linéaire est $-\alpha_i$.

A faible nombre de Mach, Sandham [98] retrouve à l'aide de la stabilité linéaire temporelle les taux d'expansion expérimentaux $\delta' = d\delta/dx$ des jets étudiés par Brown et Roshko [5]. Ils sont directement proportionnels à $\lambda = (U_1 - U_2) / (U_1 + U_2)$. Sandham et Reynolds [99] étudient l'effet du nombre de Mach sur l'évolution des instabilités d'une couche de mélange compressible, en comparant les résultats de Simulations Numériques Directes et les résultats de la théorie de la stabilité linéaire temporelle. Le nombre de Mach convectif est utilisé comme indicateur de la compressibilité.

- Pour un nombre de Mach convectif faible ($M_c < 0.6$), le mode de déstabilisation bidimensionnel est le plus rapidement amplifié. A partir de $M_c = 0.6$, il n'y a plus de direction préférentielle pour le mode de déstabilisation le plus efficace, favorisant une transition vers un écoulement tridimensionnel.
- Pour un nombre de Mach convectif M_c compris entre 0.6 et 1.0, les ondes obliques sont le mode de déstabilisation le plus amplifié. Le mode de déstabilisation bidimensionnel est toujours amplifié et continue de jouer un rôle important.
- Pour un nombre de Mach convectif élevé ($M_c > 1.0$), le mode oblique est le plus rapidement amplifié d'un facteur 5 par rapport au mode bidimensionnel, qui n'a plus d'effet sur le développement de la couche de mélange. Les structures à grande échelle sont largement affectées par l'augmentation du nombre de Mach, avec des tourbillons orientés de plus en plus de manière oblique.

Fedioun et Lardjane [100] confirme l'abrupte changement de direction des modes de déstabilisation les plus instables autour de $M_c \approx 0.6$ pour des couches de mélange binaires, et indépendamment du rapport de densité.

4.2 Phénoménologie de l'auto-allumage

Les aspects fondamentaux de l'allumage des flammes non-prémélangées, par auto-allumage ou forcé, sont largement discutés et décrits par E. Mastorakos [101]. L'auto-allumage correspond à la transition d'un état pas ou peu réactif à un état de combustion établie. L'interaction entre la turbulence et la chimie joue un rôle primordial dans la détermination des sites préférentiels d'auto-allumage. Ils se situent dans les zones de faible dissipation scalaire mais pas nécessairement à la stoechiométrie. L'auto-allumage se décrit simplement dans le cas du réacteur parfaitement mélangé à température initiale T_{ini} fixée. Les vitesses de réactions étant fortement non-linéaires, sont très sensibles aux légères augmentations de température. Ainsi, un léger dégagement de chaleur fait augmenter la température qui par conséquence fera augmenter d'autant plus le dégagement de chaleur, etc, créant un emballement thermique ("thermal runaway").

4.2.1 Allumage des mélanges hydrogène-air

L'hydrogène H_2 est un combustible dont les propriétés physico-chimiques ont largement été étudiées notamment pour ses applications à la propulsion spatiale. Il possède un fort pouvoir calorifique et par conséquent, une haute impulsion spécifique, ainsi qu'une grande capacité de refroidissement et d'auto-inflammabilité. Pour pallier ses difficultés d'emport, liées à une faible densité, l'hydrogène est souvent stocké dans des conditions cryogéniques. Dans le domaine de la propulsion par moteur aérobie hypersonique, l'hydrogène est aussi un combustible potentiel. Il a été utilisé avec succès, dans les deux essais en vol à Mach 7 et à Mach 10, parfois mélangé à un additif (type Silane) afin d'assurer une combustion robuste, lors du programme X-43 de la NASA. Certaines études récentes montrent aussi l'intérêt d'utiliser un mélange $CH_4 - H_2$, facilitant ainsi le stockage d'un tel combustible. Cette option a été retenue pour propulser le véhicule expérimentale LEA (décrit en détail au chapitre 7) développé en partie à l'Onera. Enfin, certaines études envisagent aussi l'emploi de combustibles plus classiques, hydrocarbures liquides (type kérosène) et combustibles endothermiques [102].

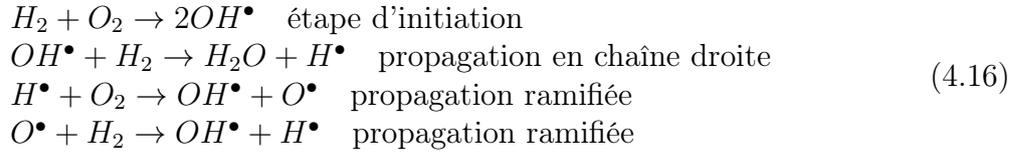
Mécanismes de combustion

La théorie du complexe activé se place au départ dans le même cadre que la théorie des collisions mais entre dans le détail des interactions entre les espèces pour décrire la formation d'un complexe intermédiaire d'énergie élevée (via l'énergie d'activation du modèle Arrhénius) qui se décompose par la suite pour donner les produits de réaction. Le mécanisme de combustion de l'hydrogène commence par la réaction de dissociation de H_2 . Cette réaction s'écrit :



où M est un troisième corps, c'est-à-dire, tout autre molécule du milieu (H_2 inclus). Les efficacités de troisième corps qui quantifie l'efficacité du processus de dissociation dépendent de manière générale de la réaction et de l'espèce concernée. Si le troisième corps est un gaz, les vitesses de dissociation et de recombinaison augmentent en fonction de sa concentration. 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. Dans le cas de l'hydrogène, ces réactions s'écrivent :



suivies des réactions de recombinaison des radicaux telles que :



Limites d'inflammation de mélanges H_2 -Air

L'auto-inflammation des mélanges homogènes H_2 - O_2 à différentes températures, pressions et compositions est étudiée entre autres par Lewis et von Elbe [103]. Trois limites d'auto-inflammation sont mises en évidence. L'auto-inflammation explosive se réalise par un mécanisme cinétique en chaîne. La limite d'explosion est définie par la condition suivante :

$$2k_{(H+O_2 \rightarrow O+OH)} > k_{(H+O_2+M \rightarrow HO_2+M)} \tag{4.18}$$

où k est la constante de vitesse de la réaction entre parenthèses. Sur le diagramme P - T schématisé en figure 4.6, la limite d'explosion coïncide avec la seconde limite d'auto-inflammation aux basses températures puis continue vers les températures plus élevées. Elle délimite alors le domaine de conditions d'auto-inflammation explosif (une période d'induction suivie d'inflammation et de combustion très rapides) aux hautes pressions et thermique/explosif ou thermique (une période d'induction suivie de croissance progressive de la température et éventuellement de combustion rapide) aux basses pressions. Kreutz et Law [18] poursuivent l'étude numérique de l'auto-inflammation des mélanges H_2 - O_2 dans une configuration non-prémélangées à contre-courant d'air. Ils étudient ainsi l'impact du taux d'étirement sur les limites d'inflammabilité, et retrouve la forme caractéristique des limites d'inflammation pour les mélanges homogènes. Des noyaux d'auto-inflammation sont de plus mis en évidence, dans une zone proche du maximum de température et où le taux de production de radicaux par branchement est maximal.

La première limite d'allumage est définie comme la branche inférieure sur la courbe en 'Z' dans la zone de basse pression de la figure 4.6 où la température d'allumage augmente lorsque la pression diminue. Kreutz et Law constatent que le transport de masse, principalement par diffusion, joue un rôle très important. Les pertes par diffusion des radicaux en dehors du noyau d'allumage deviennent notamment significatives. Comme pour la limite d'explosion, la première limite d'allumage est pilotée par la production de radical H de l'étape de branchement ($H + O_2 \rightarrow O + OH$) et de l'étape de terminaison ($H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$).

La seconde limite d'allumage est définie comme la branche intermédiaire sur la courbe en 'Z' dans la zone de moyenne pression de la figure 4.6 où la température d'allumage augmente lorsque la pression augmente. Le noyau d'allumage est caractérisé par des pics de concentration en espèces minoritaires H , O et OH sans que toutefois le dégagement de

chaleur associé soit important. Ces espèces sont en état dit "d'équilibre" car leurs taux de production/destruction sont peu affectés par les phénomènes de transport dans le noyau d'allumage. Les espèces HO_2 et H_2O sont soit stables, soit métastables : elles sont formées dans le noyau d'allumage par des réactions rapides et sont lentement transportées en dehors du fait de leur faible réactivité. Ces espèces agissent comme un "puits" de radicaux formés dans le noyau. Cela constitue une différence majeure avec le cas des mélanges homogènes.

La troisième limite d'allumage est définie comme la branche supérieure sur la courbe en 'Z' dans la zone de haute pression de la figure 4.6 où la température d'allumage diminue de nouveau lorsque la pression augmente. Comme pour le cas de la première limite d'allumage, le transport de masse joue un rôle crucial. Cela est dû aux réactions de propagation ($2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2 \rightarrow 2OH + O_2$) et de branchement ($HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H \rightarrow 2OH + H$) qui entrent en compétition avec l'étape de terminaison ($H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$).

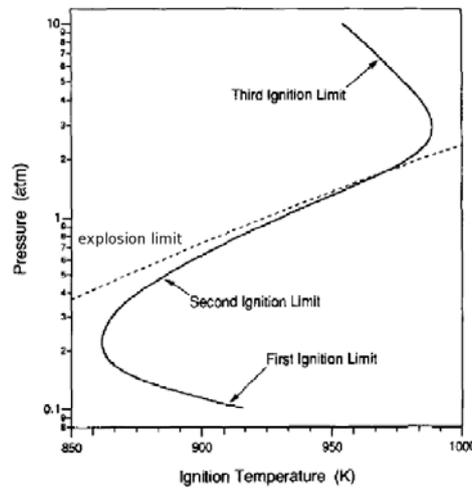


FIGURE 4.6 – Schématisation du domaine d'auto-inflammation de H_2 (d'après [18])

L'importance des réactions de branchement et de terminaison de H et O_2 pour la réalisation de la réaction globale est marquée. La température de croisement T_c est définie comme la température pour laquelle les vitesses de réactions de branchement et de terminaison deviennent du même ordre de grandeur (équation 4.18). Cela signifie qu'au-delà de cette limite, la combustion peut s'auto-entretenir car la production de radicaux nécessaires, pour que la décomposition chimique s'opère, est supérieure à sa consommation. Kreutz et Law concluent que la température de croisement donne une très bonne approximation de la température d'auto-inflammation sur une plage de pression assez grande, qui par ailleurs ne dépend ni du taux d'étirement ni de la concentration des espèces. Sur une configuration à contre-courant d'air, ces auteurs pointent l'importance du transport de masse sur les temps de résidence dans le noyau d'allumage et donc sur l'auto-allumage. L'augmentation progressive de radicaux libres (période d'induction) aboutit finalement à un emballement des réactions puis une augmentation de température.

Délai d'allumage

La prise en compte d'une chimie finie détaillée est primordiale pour décrire finement les cas où les temps caractéristiques chimique et turbulent sont du même ordre de grandeur, comme par exemple le cas de l'auto-allumage. De nombreux mécanismes plus ou moins

détaillés sont disponibles dans la littérature. Deux mécanismes sont évalués sur un paramètre représentatif de notre cas d'étude : le délai d'allumage. Ces délais sont comparés à des données expérimentales rassemblées par O'Conaire [104]. Le délai d'allumage, τ , est la pente de la tangente mesurée au maximum temporel du taux de production d'eau, selon $\tau = (d[H_2O]/dt)_{\max}$.

Les deux mécanismes envisagés sont :

- Mécanisme Onera adapté de Eklund et Drummond [105] à 6 espèces et 7 réactions
- Mécanisme réduit de Jachimowski [106] à 8 espèces et 19 réactions

Ces deux mécanismes sont détaillés dans l'annexe A. Un exemple de résultats de délai d'allumage est reporté figure 4.7 pour un mélange H₂/air stoechiométrique et à pression de 2 atm.

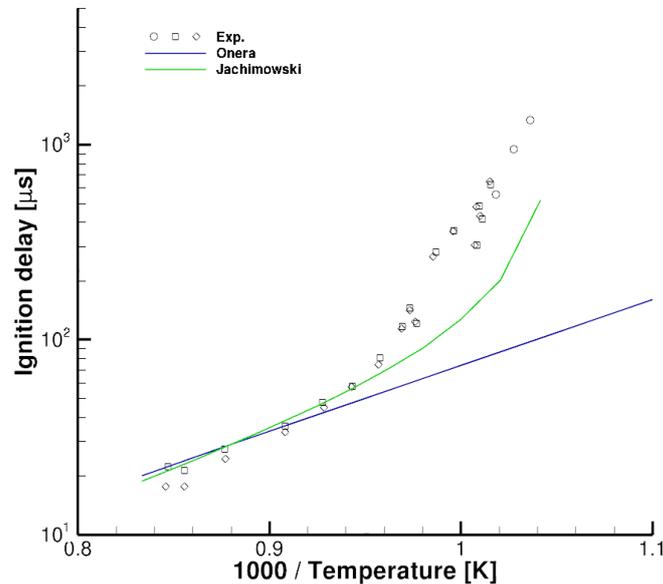


FIGURE 4.7 – Délai d'allumage d'un mélange H₂/Air stoechiométrique et à pression de 2 atm

4.2.2 Lieux d'allumage

Dans le cas d'une couche de mélange laminaire monodimensionnelle, l'auto-allumage se déroule à la fraction de mélange la plus réactive (most reactive mixture fraction) f_{MR} qui peut être déterminée uniquement par l'énergie d'activation, la température du carburant et de l'oxydant [107] au travers d'une analyse asymptotique. Pour un écoulement turbulent, Mastorakos et al. [108] ont montré à l'aide de Simulations Numériques Directes 2D que f_{MR} était très proche de celle établie asymptotiquement mais également très proche du temps d'allumage le plus court pouvant être obtenu à l'issue de calculs de réacteurs adiabatiques parfaitement mélangés. D'autre part, l'auto-allumage a lieu dans des zones de faible dissipation scalaire et le temps d'auto-allumage τ_{ign} est fortement affecté par l'évolution de la dissipation scalaire conditionnelle $\langle \chi|Z \rangle$.

Dans le cas d'une modélisation à plusieurs réactions, il n'est plus possible de définir un unique f_{MR} [109]. Dans cette étude, Sreedhara et Lakshmisha arrivent aux mêmes

conclusions pour un mélange n-héptane/air à l'aide de simulations Simulations Numériques Directes 3D. L'allumage se déroule au centre des structures tourbillonnaires, pour se déplacer vers la périphérie à cause notamment du gradient de densité, confirmant les limites de l'emploi des structures de flammelles pour décrire les structures d'allumage.

Yoo et al. [3] concluent leur Simulation Numérique Directe d'une flamme jet détachée d'hydrogène sur l'importance de l'espèce HO_2 dans l'initiation de l'auto-allumage. En amont de la flamme, la réaction ($H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$) est prépondérante dans la production de HO_2 . L'étape de branchement ($HO_2 + H \rightarrow OH + OH$) contribue alors à la production de radicaux OH et induit finalement l'emballement thermique. Ces caractéristiques ont été observées dans des études antérieures [18, 110] sur la zone d'induction chimique précédant l'emballement thermique. Yoo et al. montrent par ailleurs que l'auto-allumage peut se dérouler à une fraction de mélange proche de f_{MR} si la dissipation scalaire locale est inférieure à un certain seuil χ^i pendant un temps suffisamment long.

L'influence du niveau de turbulence sur le délai d'inflammation est étudiée dans le cadre de Simulation Numérique Directe 2D par différents auteurs. À faible niveau de turbulence, Mastorakos et al. [108] montrent une réduction du délai d'allumage par rapport au cas laminaire. Im et al. [110] étudient l'allumage dans une couche de mélange turbulente H_2 -Air pour plusieurs niveaux d'intensité de turbulence. Ils suggèrent que :

- Les délais d'auto-allumage sont finalement assez insensibles aux niveaux de turbulence. L'allumage étant un phénomène local, il existe nécessairement un endroit où les conditions de mélange sont favorables, tant que la turbulence existe.
- Dans le cas d'une turbulence faible, un seul noyau d'allumage dominant persiste dans la zone d'induction, tandis que dans le cas d'une turbulence forte, plusieurs noyaux d'allumage d'égale intensité coexistent. Dans ce cas, la dissipation scalaire dans le noyau d'allumage fluctue plus rapidement, et il est donc plus difficile de maintenir des conditions favorables (dissipation scalaire faible) en un seul point pendant la période d'induction.
- L'allumage est provoqué par un emballement cinétique où la réaction de branchement ($HO_2 + H \rightarrow OH + OH$) joue un rôle prépondérant. Par ailleurs, HO_2 est un bon marqueur de l'allumage. Enfin, le noyau d'allumage est plutôt situé du côté de l'air chaud.

Auto-allumage dans les écoulements rapides

L'allumage dans les couches de mélange laminaires supersoniques H_2 /Air est étudié en détail par différents auteurs, à l'aide d'une analyse asymptotique basée sur une hypothèse d'énergie d'activation élevée. Ils montrent en particulier l'influence des paramètres tels que le gradient de vitesse transverse ou la température sur le délai d'auto-inflammation :

En poursuivant les travaux de Liñán et Crespo [111, 107] pour les couches de mélanges subsoniques, Jackson et Hussaini [112] montrent l'influence de la dissipation visqueuse sur l'allumage d'une couche de mélange réactive laminaire supersonique. L'étude est menée à l'aide d'une chimie simplifiée à une étape. Le paramètre de contrôle de l'auto-allumage est le produit du nombre de Mach caractéristique avec un paramètre de cisaillement. En effet, l'équation adimensionnée de la température laisse apparaître explicitement le nombre de Mach au carré devant le terme de frottement visqueux. Les termes sources chimiques étant considérablement sensible à la température, la dissipation visqueuse peut donc indirectement jouer un rôle prépondérant sur l'emballement thermique.

Im et al. [113] étudient une couche de mélange réactive laminaire supersonique avec un mécanisme cinétique réduit. Ils mettent en évidence l'existence de quatre régimes d'auto-

allumage distincts qui dépendent de la façon dont est apportée la chaleur nécessaire à l'auto-allumage : échauffement visqueux ou transfert de chaleur depuis le courant d'air chaud, et par les réactions prédominantes. À haute température (supérieure à la température de croisement), le branchement radicalaire suivi d'un emballement thermique est le processus indiqué pour l'auto-inflammation. De manière générale, la longueur d'induction, pour une température donnée du courant d'air chaud, croît avec l'augmentation de la vitesse de l'écoulement dans un premier temps avant de diminuer par la suite.

L'analyse est confirmée par des résultats de simulations directes. Figueira da Silva et al. [114] rapporte la même structure d'allumage que celle donnée par l'analyse asymptotique de Liñán et Crespo [107] dans leur étude d'une couche de mélange laminaire supersonique à pression constante :

- tout d'abord une zone d'induction,
- puis un emballement thermique dans une région proche de la stoechiométrie,
- une zone de combustion où flammes de pré-mélange et diffusion coexistent (la flamme de diffusion est la principale source de chaleur. Les effets moléculaires, notamment la diffusion de H_2 , jouent un rôle important)
- et enfin la flamme de diffusion.

L'allumage se déroule du côté chaud, une augmentation de la température provoque donc une diminution du délai d'allumage. Une augmentation du gradient de vitesse provoque aussi une diminution du délai d'allumage : le temps d'induction est diminué par augmentation de la température due à la dissipation visqueuse.

L'étude de Nishioka et Law [115] concerne aussi l'allumage dans une couche de mélange supersonique laminaire H_2 /Air. Elle complète celle conduite par Figueira da Silva et al. dans la région des basses températures. Comme dans l'étude de Im et al., les résultats sont distingués 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. Nishioka et Law reportent les mêmes conclusions que Kreutz et Law [18] dans le régime des hautes températures : la prise en compte du dégagement de chaleur n'est pas nécessaire pour décrire l'auto-allumage. Celui-ci est piloté d'avantage par un emballement cinétique dû à une prolifération radicalaire. Les auteurs pondèrent enfin les résultats des études asymptotiques (de Im et al. notamment) où sont faite l'hypothèse de paramètre de Chapman-Rubensin $\mu\rho$ constant. Cette hypothèse entraîne en effet une erreur d'un ou deux ordres de grandeur sur l'estimation des distances d'auto-allumage.

Dans le cadre plus général de l'étude de l'auto-allumage dans des écoulements supersoniques, certains auteurs rapportent le cas de l'allumage dans les couches limites, notamment [116, 117, 118].

4.3 Stabilisation des flammes supersoniques

Le contrôle de la combustion est une problématique de premier ordre dans les systèmes industriels (fours industriels, moteurs, etc), que ce soit d'un point de vue de la sécurité (explosions à la suite d'une fuite) ou d'un point de vue des performances (extinction en vol d'un turboréacteur). Dans le cas des systèmes propulsifs, le pilote doit s'assurer que la combustion soit stabilisée dans la chambre de combustion pour tous les régimes de vol. La stabilité, ou non, de la flamme résulte d'une compétition entre le temps caractéristique du

transport (convection, diffusion) et du temps caractéristique de la chimie. Le mécanisme de stabilité est assuré lorsque les deux temps sont du même ordre de grandeur. Par exemple dans le cas d'une flamme de prémélange, la vitesse de flamme (turbulente) doit être du même ordre de vitesse que la vitesse d'apport des gaz frais. Lorsque ce n'est pas le cas, il est nécessaire d'assurer l'accrochage de la flamme par une approche soit aérodynamique (injection swirlée par exemple), soit mécanique (accroche-flamme).

4.3.1 Cas subsonique

La méthode la plus classique pour stabiliser une flamme est de la localiser dans une zone de basse vitesse et à haute température, par exemple en créant une zone de recirculation de gaz brûlés. Les mécanismes d'interaction entre une flamme et des structures tourbillonnaires sont étudiés en détail par Renard et al. [119].

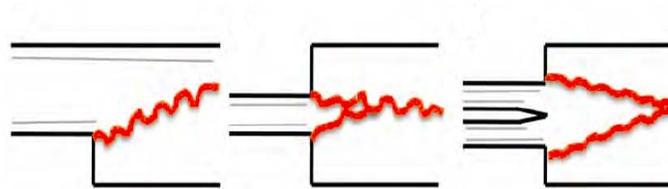


FIGURE 4.8 – Stabilisation par élargissement brusque

La figure 4.8 illustre trois configurations où la combustion a lieu en aval d'un élargissement brusque. La flamme y est stabilisée par des recirculations permettant l'alimentation en gaz brûlés (chauds) (pour la combustion prémélangée) ou en réactifs (pour la combustion non prémélangée) et s'accroche au niveau du coin de l'élargissement. La marche descendante simple (gauche) en écoulement prémélangé est une configuration étudiée d'un point de vue expérimental, notamment à l'Onera, mais aussi d'un point de vue numérique avec notamment une approche turbulente hybride RANS/LES de type DES (Detached Eddy Simulation) [120]. Le double élargissement brusque (milieu) est utilisé également pour étudier les instabilités de combustion et notamment le rôle joué par les tourbillons dans l'apparition de ces instabilités. Le cas du double élargissement existe aussi avec deux canaux séparés (banc ORACLES (milieu) de l'Institut P') qui présente l'avantage de fonctionner en prémélangé et en partiellement prémélangé. Il est à ce titre un cas de validation intéressant pour la validation de modèles de combustion turbulente [121].

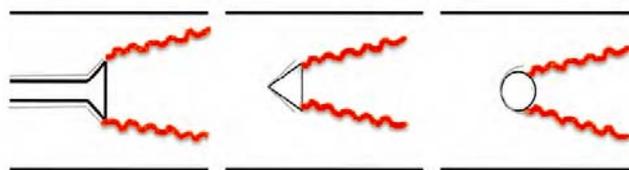


FIGURE 4.9 – Stabilisation par obstacle

La figure 4.9 illustre trois configurations où la combustion a lieu en aval d'un obstacle [122]. Dans ce cas, la couche de mélange qui se développe en aval du décollement

permet la stabilisation de la flamme. Cette méthode est employée notamment dans les statoréacteurs. On peut distinguer le cas du barreau cylindrique débouchant sur un embout conique dans une chambre à section carrée (gauche), l'accroche flamme en forme de prisme (milieu) et le barreau cylindrique placé dans la direction transverse de l'écoulement (droite). Toutes ces géométries permettent de valider d'un point de vue aérodynamique, les modèles hybrides RANS/LES bien adaptés pour prédire le point de décollement et du point de vue combustion, les modèles pour la combustion turbulente prémélangée.

L'auto-allumage peut aussi assurer un rôle stabilisateur de flammes non-prémélangées et son étude demande alors, dans des contextes industriels variés (moteur diesel HCCI (Homogeneous Charge Compression Engine), fuite gaz inflammables, etc), une attention particulière. En effet, la base d'une flamme détachée détermine la stabilité et les caractéristiques de la combustion qui se déroule en aval. Dans le cas des turbines à gaz LPP (Lean-Premixed-Prevapourised) conçue pour réduire les émissions de NOx, l'auto-allumage est au contraire non désirable. La stabilisation et la structure d'une flamme jet H_2 /Air détachée non-prémélangée fait l'objet de nombreuses études numériques et expérimentales. Gordon et al. [123, 124] définissent des indicateurs permettant de statuer sur le mode de stabilisation d'une flamme jet turbulente détachée. Deux modes peuvent être particulièrement concernés : l'auto-allumage ou la propagation d'une flamme partiellement prémélangée. Par ailleurs, Domingo et Vervisch [125] propose, dans une étude plus fondamentale, la structure de flamme triple comme mode de propagation principal de l'auto-allumage d'un milieu partiellement prémélangé.

Le premier indicateur est un bilan des contributions des termes de convection, diffusion et production chimique à l'état stationnaire. Gordon et al. distinguent explicitement la contribution axiale et transverse des termes de diffusion dans ce bilan. La précision de la méthode est avérée lorsque la somme des contributions est égale à zéro.

Le deuxième indicateur est l'historique temporelle du radical HO_2 . Les différentes études de Simulation Numériques Directes tendent à montrer que l'auto-allumage apparaît lorsque le radical HO_2 dépasse une valeur seuil en amont de la base de la flamme. Une stabilisation par flamme de pré-mélange est, quant à elle, plutôt caractérisée par une augmentation simultanée des radicaux tels H , O , OH et HO_2 .

Markides et Mastorakos [126, 127] dans leur étude expérimentale d'une flamme jet détachée confirme l'impact de la turbulence, et du mélange, sur le processus chimique de l'auto-allumage. Ils mettent en évidence quatre régimes de stabilisation en fonction des paramètres conjugués de vitesse et température pour chacun des écoulements : 'pas d'allumage', 'allumage sporadique', 'flashback' et 'flamme détachée'. Le passage d'un régime à un autre peut s'avérer être très sensible à la température d'air (de l'ordre de quelques Kelvin). Le cas de 'Flashback' se déroule pour une vitesse des écoulements d'air et de fuel faibles, et une température d'air élevée. L'allumage se déroule dans un point indéterminé de l'espace, puis un phénomène de flashback se produit par propagation probable d'une flamme triple. La structure finale résultante est une flamme de diffusion attachée. Par ailleurs, dans une étude antérieure [108], Mastorakos et al. montrent que la vitesse du front d'allumage est inférieure à la vitesse de flamme laminaire stoechiométrique. Dans le cas du régime 'flamme détachée', une augmentation de la vitesse d'air à température fixée provoque une augmentation du délai d'auto-inflammation. Markides et Mastorakos suggèrent que la turbulence a tendance à augmenter le délai d'inflammation par effet d'une augmentation de la dissipation scalaire.

Yoo et al. [3] montrent dans leur Simulation Numérique Directe grâce au marqueur HO_2 que l'auto-allumage est le mécanisme de stabilisation de la flamme.

4.3.2 Cas supersonique

La stabilisation de la combustion dans un écoulement supersonique [128] est largement affectée par la vitesse des écoulements considérés. Les mécanismes de propagation de flamme prémélangée ou partiellement prémélangée ne sont plus applicables. D'autres mécanismes sont notables : la stabilisation de la combustion peut s'effectuer au moyen d'une, ou plusieurs, ondes de choc obliques. Le problème générique de ce type de configurations est celui d'une onde de choc oblique prenant naissance à la base d'un dièdre placé dans un mélange réactif en écoulement supersonique. Cette onde de choc est responsable d'une compression et d'une élévation de la température du mélange réactif qui conduit ensuite à un allumage de celui-ci. Dans le cas limite des forts nombres de Mach, le couplage qui s'effectue entre la zone de combustion et l'onde de choc oblique conduit à un renforcement de cette dernière et à une transition onde de choc oblique - onde de détonation oblique. Ce problème est étudié aussi bien numériquement [129] qu'expérimentalement [130]. Suivant les conditions du mélange en amont du dièdre, plusieurs types de transition peuvent être observés. Un autre problème important pour cette configuration est la stabilité du système onde de choc oblique / onde de détonation oblique. L'onde de détonation peut jouer un rôle dans le processus d'allumage, comme cela est suspecté dans de récents essais du mât d'injection Hypermixer de la JAXA, adapté à la chambre de combustion HiShot et testé dans les conditions de la soufflerie Hiest (High Enthalpy Shock Tunnel). Ce phénomène est observé expérimentalement [131] et numériquement [132].

La stabilisation de la combustion par recirculation dans une cavité est également étudiée, notamment pour les statomixtes (*dual-mode ramjet*) [133]. Ce type de moteur permet, avec une géométrie fixe, de fonctionner dans des conditions alternativement subsoniques et supersoniques.

Dans le cas d'une injection non-prémélangée pariétale ou par mât dans la chambre de combustion, la couche de mélange ainsi créée entre l'air et l'hydrogène est le lieu d'une compétition locale entre le mélange et la cinétique chimique. Il peut ainsi se produire des inflammations locales (figure 4.10).

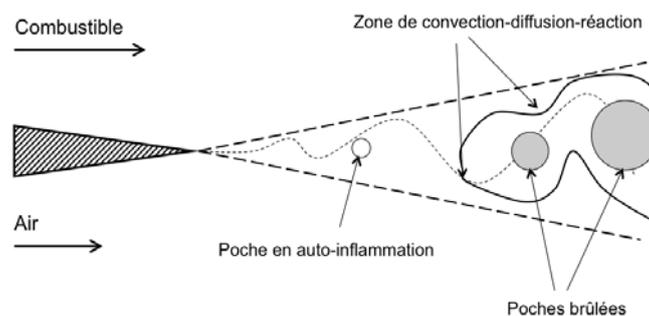


FIGURE 4.10 – Stabilisation par poches

Les caractéristiques locales de l'écoulement sont déterminées par les effets de compressibilité, la dissipation visqueuse, les fluctuations de température et de composition ainsi que de la forte interaction entre ces différents phénomènes. L'allumage de mélanges hydrogène/éthylène, par exemple, est piloté par la combustion de poches (quelques millimètres) partiellement prémélangées en combustion intermittente. En fonction du nombre de Damköhler local, la nature de l'allumage observé est différent : Magre et Sabel'nikov [134] mettent en évidence un mode d'allumage dit "étalé" en opposition à un mode d'allumage "brusque". La figure (4.11) illustre ce mode d'allumage obtenu lors d'une campagne d'essais JAXA - Onera sur l'installation LAERTE Onera en Veine Forcée. Ce mode d'allumage est caractérisé par un dégagement de chaleur soudain suivant un temps d'induction important.

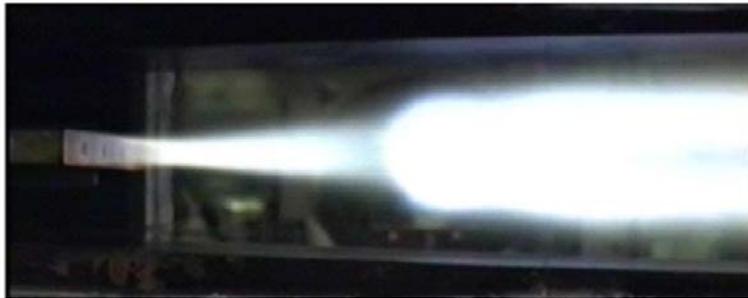


FIGURE 4.11 – *Injecteur ONERA dans la veine d'essai au LAERTE*

Il est possible que l'auto-allumage se produise à l'intérieur des tourbillons du côté chaud, où les conditions locales sont favorables (faible dissipation scalaire, température élevée et temps d'induction faible (mélange pauvre)). Les travaux de Zabaikin et Tretyakov [19] permettent de mettre en évidence une structure d'allumage similaire à celle observée au LAERTE (Figure 4.12 (a)). Pour autant, une image instantanée (Figure 4.12 (b)) semble révéler une combustion intense en périphérie des tourbillons, dans la zone de cisaillement où les effets moléculaires peuvent être prépondérants.

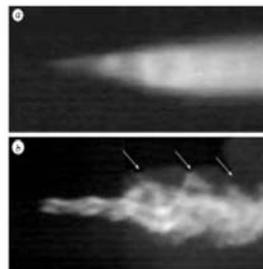


FIGURE 4.12 – *Images issues de la combustion d'un jet sonique de H_2 observé avec un temps de pose de $\tau = 1 \times 10^{-2}$ secondes (a) et $\tau = 2 \times 10^{-5}$ secondes (b) (d'après [19])*

4.4 Modèle de réacteur partiellement prémélangé

L'approche de réacteur partiellement prémélangé (en anglais PaSR - Partially Stirred Reactor) permet de prendre en compte les effets de micromélange, de chimie finie ainsi que de l'interaction entre les deux. Il apparaît alors comme un contexte théorique acceptable pour modéliser les effets de sous-maille que ce soit avec une approche RANS ou une

approche LES. Dans sa thèse, Dumand [135] compare différentes approches de réacteurs partiellement mélangé pour décrire la combustion turbulente dans des petits volumes. Il compare notamment les délais d'auto-inflammation prédits par les modèles IEM, Vulis et PDF présumées dans les cas simples de réacteurs isochores. Les différentes approches sont adaptées et validées pour le cas de la combustion supersonique dans le cadre de la thèse de George [136]. Il montre qu'une approche de réacteur parfaitement mélangé n'est pas adaptée pour décrire l'auto-allumage de mélanges hydrocarbures/hydrogènes dans un écoulement supersonique coaxial confiné d'air chaud. Les approches de réacteur partiellement (type Vulis) mélangés semble plus adaptées. Une nouvelle approche est développée sur ces conclusions. L'approche est basée sur des observations expérimentales et numériques (simulation DNS) d'écoulements non-réactifs. L'idée générale de ce modèle est qu'à nombre de Reynolds élevé, les structures turbulentes ne sont pas distribuées uniformément dans l'espace mais dans des zones fines (aux petites échelles) et dont le volume total est petit comparé au volume intégral (un mécanisme probable de propagation des flammes turbulentes, à nombre de Reynolds élevé, basé sur cette hypothèse, a été proposé par Chomiak [66]). Le modèle PaSR est un modèle local qui considère que le mélange moléculaire et la source chimique sont dans l'état de quasi-équilibre. Par conséquent, les effets instationnaires et convectifs sont négligés. Les équations de ce modèle sont algébriques et permettent d'autre part de prendre en compte le phénomène de chimie finie. Le modèle PaSR est basé sur le modèle EDC de Magnussen décrit précédemment au (2.2.2.4).

Le modèle PaSR

Le modèle PaSR diffère de EDC par deux points : (i) l'évaluation de la fraction volumique des zones dissipatives où les transformations chimiques ont lieu, (ii) l'introduction de nouveaux temps caractéristiques (temps de résidence). C'est également un modèle multi-échelles. Les équations qui donnent les conditions dans les structures fines sont identiques à celles du modèle EDC, à savoir (2.24) et (2.25). Ces équations traduisent le bilan de masse (pour chaque espèce) et le bilan d'énergie entre la zone (*) et la zone (⁰). La fraction volumique de structure fine γ^* est défini dans ce modèle comme le rapport entre le volume de la zone réactive et la somme des volumes des zones réactives et micromélangées, de sorte que $\gamma^* = \tau_c / (\tau_c + \tau_m)$. Le temps de micromélange τ_m est égal à la moyenne harmonique entre l'échelle de Kolmogorov τ_K et l'échelle intégrale τ_t (ou l'échelle de coupure τ_Δ pour l'approche LES), i.e $\tau_m = \sqrt{\tau_K \tau_t}$. Le temps caractéristique chimique peut être estimé de plusieurs façons. Il peut, par exemple, être assimilé au temps caractéristique d'une flamme stoechiométrique de prémélange laminaire. Cette formulation originale du modèle PaSR, liée à la résolution des équations (2.24) et (2.25), a été validée en LES par Fureby et al. [41] sur le cas expérimental de superstatoréacteur Onera/JAXA.

Pour illustrer les difficultés liées à l'utilisation d'un modèle algébrique de type PaSR pour décrire le phénomène d'allumage, on considère l'équation (4.19) déduite du système (2.24 & 2.25) en supposant une chaleur spécifique constante et en utilisant $\bar{\psi} = \gamma^* \psi^* + (1 - \gamma^*) \psi^0$ pour une variable ψ donnée :

$$\bar{\rho} \frac{(T_k^* - \tilde{T}_k)}{\tau_m (1 - \gamma^*)} = \dot{\omega}_T(T^*, Y_k^*) \quad (4.19)$$

L'équation (4.19) est formellement équivalente à celle d'un réacteur parfaitement mélangé (PSR pour Perfectly Stirred Reactor), associé à la zone de structures fines (*). Il est alimenté

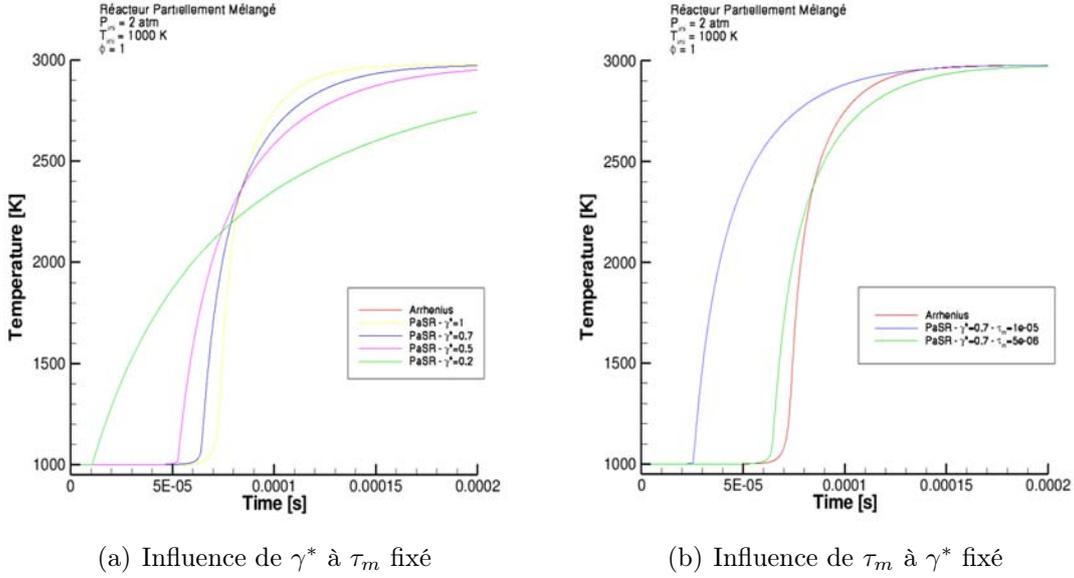


FIGURE 4.13 – Evolution de la température dans un réacteur à volume constant calculée à l'aide d'une approche PaSR

par diffusion moléculaire avec la composition et température moyennes, i.e $T_{in} = \tilde{T}$ où T_{in} est la température en entrée du réacteur. Le temps de résidence dans le réacteur associé est donné par $\tau_{res} = \tau_m (1 - \gamma^*)$. Le deuxième terme de l'équation (4.19) correspond au dégagement de chaleur dans le réacteur, c'est à dire dans la région de structures fines, tandis que le premier terme quantifie les transferts thermiques du réacteur, c'est-à-dire l'énergie cédée par le réacteur par unité de temps. Le deuxième terme de l'équation (4.19) est représenté dans la figure 4.14 par la courbe HR (Heat Released). À basse température le dégagement de chaleur est faible. Il atteint un maximum, correspondant à une température proche de la température de flamme adiabatique, et redevient négligeable à l'équilibre. Le profil de la courbe HR dépend fortement des conditions d'entrée. Le premier terme de l'équation (4.19) est représenté dans la figure 4.14 par la courbe HT (Heat Transfer) qui est une droite dans ce diagramme de pente $1/\tau_{res}$. La solution stationnaire au problème du PSR posé correspond à l'intersection entre les deux courbes HR et HT. Différents comportements sont à prévoir, relativement à la valeur du temps de résidence.

Pour un temps de résidence suffisamment court, il n'existe qu'une seule solution correspondant au point S_{low} , intersection entre la droite HT_{low} avec la courbe HR. C'est la solution, dite *froide*, au problème du PSR pour lequel le mélange entrant ne peut pas brûler en raison du temps de résidence très faible à l'intérieur du réacteur. La solution correspondante reste proche, voire égale, aux conditions d'entrée. D'un point de vue du PaSR $\gamma^* \rightarrow 1$, d'après (5.3b), et donc $Y_k^* \sim \tilde{Y}_k$. Dans ce cas, l'évolution du réacteur est limitée par la chimie.

Pour un temps de résidence suffisamment long, il n'y a là aussi qu'une seule solution correspondant au point S_{high} , intersection entre la droite HT_{high} avec la courbe HR. C'est la solution, dite *chaude*, au problème du PSR pour lequel le mélange entrant brûle quasiment entièrement avant de sortir du réacteur. D'un point de vue du PaSR $\gamma^* \rightarrow 0$ et donc $Y_k^* \sim \tilde{Y}_k^{eq}(\tilde{\Psi})$. Dans ce cas, l'évolution du réacteur est limitée par le mélange.

Pour les valeurs intermédiaires du temps de résidence, il existe trois solutions distinctes

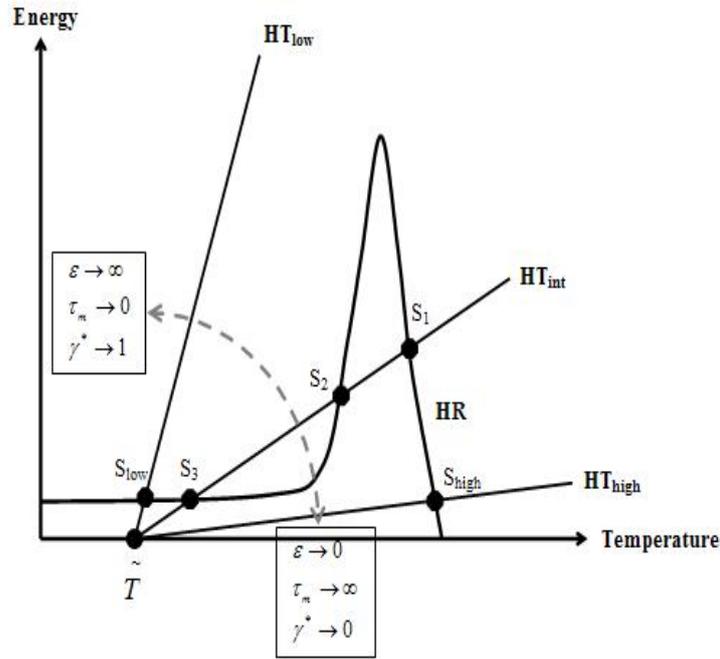


FIGURE 4.14 – Solutions au problème stationnaire du réacteur parfaitement mélangé

S_1 , S_2 et S_3 correspondant à l'intersection de HT_{int} avec HR (voir figure 4.14). Le point S_1 correspond à la solution dite *chaude* tandis que S_3 est associée à la solution *froide*. Quant au point intermédiaire S_2 , il est intrinsèquement instable. Dans ce cas, un phénomène d'hystérésis apparaît et la solution finale doit être choisie entre S_1 et S_3 . Ce choix dépend de "l'histoire" du réacteur, c'est à dire la manière dont les conditions stationnaires ont été atteintes dans le réacteur. Du point de vue de la modélisation PaSR, ce cas apparaît important car il pourrait décrire certains aspects fondamentaux de l'auto-allumage, notamment l'allumage brusque décrit dans la section précédente (4.3), en passant rapidement de la solution *froide* à la solution *chaude*. La difficulté réside dans le fait que les conditions moyennes ($\bar{\cdot}$) peuvent être très différentes des conditions (*). D'un point de vue numérique, la résolution du système (2.24 & 2.25) n'en est que plus délicate. Un algorithme de Newton-Raphson est utilisé, mais en fonction des conditions initiales retenues pour le processus itératif, celui-ci peut converger ou non. Cette difficulté peut être levée en considérant un terme instationnaire dans le système, définissant ainsi le modèle UPaSR :

$$\begin{cases} \partial \bar{\rho} Y_k^* / \partial t + \bar{\rho} (Y_k^* - Y_k^0) / \tau_m = \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*) \\ \bar{\rho} \sum_{k=1}^n (Y_k^* h_k^* - Y_k^0 h_k^0) = \tau_m \sum_{k=1}^n h_{k,f}^\theta \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*) \end{cases} \quad (4.20)$$

Comme pour l'équation 4.19, le système précédent peut s'écrire à l'aide des conditions moyennes ($\bar{\cdot}$) et micromélangées (*), en utilisant le changement de variable $\bar{\psi} = \gamma^* \psi^* + (1 - \gamma^*) \psi^0$ (pour une variable ψ donnée) :

$$\begin{cases} \partial \bar{\rho} Y_k^* / \partial t + \bar{\rho} (Y_k^* - \tilde{Y}_k) / [\tau_m (1 - \gamma^*)] = \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*) \\ h(Y_k^*, T^*) = h(\tilde{Y}_k, \tilde{T}) \end{cases} \quad (4.21)$$

À chaque itération courante et dans chaque maille de calcul, le système d'équations ainsi obtenu est résolu à l'aide d'une intégration temporelle implicite. Les inconnues sont les conditions micromélangées (*) tandis que les conditions moyennes ($\bar{\cdot}$) sont imposées par le solveur Charme. Lorsque les conditions dans les structures fines (*) sont déterminées, le taux de production moyen est finalement calculé pour chaque espèce k selon $\tilde{\omega}_k = \gamma^* \dot{\omega}_k(T^*, Y_k^*)$.

Deuxième partie

Validation d'une approche UPaSR pour
la modélisation des flammes détachées
en régime supersonique

Chapitre 5

Etude numérique préliminaire de sensibilité de la flamme jet de Cheng

Table des matières

5.1	Synthèse bibliographique	66
5.2	Présentation de la flamme jet de Cheng	69
5.3	Étude de sensibilité	72
5.3.1	Aspects numériques	72
5.3.2	Étude de sensibilité aux paramètres généraux	74
5.3.3	Étude de sensibilité aux paramètres d'allumage	77
5.3.4	Étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR	81
5.4	Étude numérique stationnaire	84
5.5	Conclusions	87

L'objectif de ce cinquième chapitre est la validation du modèle physique de réacteur partiellement mélangé UPaSR sur un cas de flamme jet supersonique détachée. Pour cela, un cas représentatif est dans un premier temps choisi et présenté. Dans un deuxième temps, l'effet des paramètres influents sur l'auto-allumage dans cette configuration est quantifié. À cet effet, une étude de sensibilité est effectuée dans laquelle les paramètres généraux et relatifs au modèle UPaSR sont testés. Dans un troisième temps, la modélisation proposée est validée pour un jeu de constantes représentatives des conditions physiques. Une étude stationnaire est ainsi menée et la structure de la flamme correspondante est étudiée.

5.1 Synthèse bibliographique

Différents cas test de combustion dans des écoulements supersoniques sont listés et analysés. Les diagnostics optiques et mesures expérimentales sont identifiés, en vue d'une comparaison avec les résultats issus de simulations numériques. Les modélisations de l'Interaction Chimie-Turbulence et simulations numériques associées sont aussi rappelées. Le but est la validation du modèle UPaSR sur une configuration de flammes détachées en régime supersonique.

Chambre de combustion Onera/LAERTE

Issue du programme PREPHA (détaillé au chapitre 7), une chambre de combustion supersonique est installée et testée dans le laboratoire de recherche LAERTE à l'Onera. La chambre (schématisée dans la figure 5.1) est constituée dans une première partie d'un canal de section carrée suivie dans une deuxième partie d'un canal divergent de largeur constante et de section rectangulaire. La chambre est longue de 870mm, de section carrée de 45mm × 45mm et de 2.3 ° d'angle de divergence. L'entrée de la chambre est connectée à une tuyère qui détend à Mach 2 un écoulement d'air vicié issu d'un réchauffeur. L'injection de gaz (hydrogène, mélange hydrogène/éthylène, mélange hydrogène/méthane, hélium ou azote) se fait également à Mach 2, longitudinalement à l'écoulement d'air principal au bout d'un injecteur cylindrique passant par la tuyère principale dans l'axe du canal. Les conditions génératrices typiques d'une rafale sont de 0.7 MPa et 1800 K. Le banc d'essai est décrit en détail par Collin et al. [137]. Pour la combustion de l'hydrogène, les valeurs de température moyennes et RMS (Root Mean Square) mesurées par DRASC (Diffusion Raman Anti-Stokes Cohérente) sont rapportées par Magre et al. [138] ainsi que Magre et Bouchardy [139]. Les vitesses moyennes longitudinales mesurées par LDA (Laser Doppler Anemometry) ainsi que les champs moyens et les champs fluctuants des composantes de vitesse obtenus par PIV (Particle Image Velocimetry) sont publiés par Weisgerber et al [140]. Enfin, des mesures de champs instantanés et moyens de concentration en *OH* par PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) et des mesures de pression pariétale sont données par Bresson et al [141]. Pour la combustion de mélanges méthane-hydrogène et éthylène-hydrogène, des résultats

de pression pariétale ont été présentés par George et al [142]. Ce cas d'étude a l'avantage de présenter une géométrie simple qui peut éventuellement être représentée par une configuration axisymétrique. Les résultats expérimentaux sont nombreux et détaillés, cependant les conditions limites de turbulence en entrée de chambre et d'état thermique des parois ne sont pas documentées.

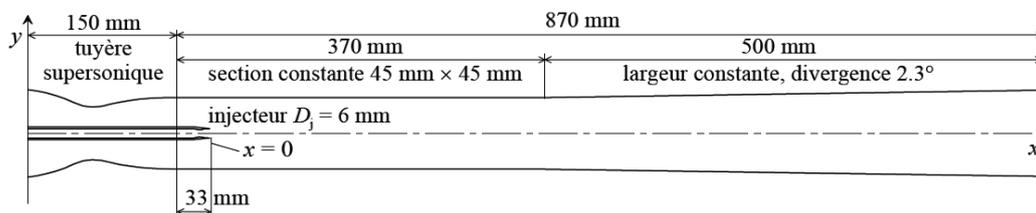


FIGURE 5.1 – Schéma du dispositif expérimental LAERTE

Ce dispositif expérimental fait l'objet d'un certain nombre de simulations numériques. Gaffié et al. [143] publient des résultats à l'aide du code MSD (prédécesseur du code CEDRE), pour lesquels plusieurs modèles d'Interaction Chimie-Turbulence sont testés : modèle stochastique Lagrangien PEUL (Probabiliste Eulerien-Lagrangien) et calcul des taux de réaction avec prise en compte des fluctuations de température. Deux schémas cinétiques (Eklund et al. [105] et Davidenko et al. [144]) sont comparés par Quintilla et al. [145] avec le code CEDRE. Les effets relatifs au combustible, aux conditions limites (température totale de l'air vicié, température des parois) et aux traitements numériques (configurations 2D et 3D, résolution spatiale, modèle de paroi) sont étudiés avec une approche quasi-laminaire. Enfin, Davidenko et al. [146] développent un schéma cinétique réduit pour la combustion des mélanges hydrogène-méthane et l'appliquent à la simulation de cette configuration. Les résultats obtenus sont sensibles aux modèles numériques et aux conditions limites retenus mais sont en général en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Chambre de combustion DLR

L'institut du DLR, en Allemagne, dispose également d'un dispositif pour l'étude la combustion supersonique, dont une représentation est donnée Fig. 5.2. La chambre est constituée d'un canal de section rectangulaire en deux parties : la première est de section constante $45\text{mm} \times 50\text{mm}$, et la deuxième dispose d'un angle de divergence sur un seul côté. La chambre est raccordée à une tuyère délivrant de l'air vicié à Mach 2. Les conditions génératrices sont assez faibles, la température totale est de 600 K. Dans ces conditions, l'hydrogène ne peut pas s'auto-inflammer. Celui-ci est donc injecté, par l'intermédiaire de 15 injecteurs soniques de 1mm de diamètre, au culot d'un dièdre de 32mm de long et de demi-angle de 6° situé au centre du canal. Les résultats expérimentaux sont publiés par Waidmann et al. [147] et par Oevermann [148] et concernent l'écoulement avec et sans combustion de l'hydrogène. Ils comprennent les distributions pariétales de pression ainsi que des visualisations strioscopiques de l'écoulement derrière le dièdre. Les profils moyens et RMS des vitesses longitudinales et transversales sont mesurés par PIV et LDA. Les profils transversaux de température moyenne sont mesurés par DRASC. La zone de mélange est observée par diffusion Rayleigh. De l'émission spontanée et de la fluorescence (LIF) du radical OH sont mesurées dans la zone réactive. Les conditions amont de turbulence ne sont pas précisées.

Cette expérience est simulée avec une approche RANS par Oevermann [148] en faisant une hypothèse bidimensionnelle pour la géométrie et en utilisant une modélisation de flammelettes. De plus une méthode de raffinement local de maillage est utilisée. Les résultats

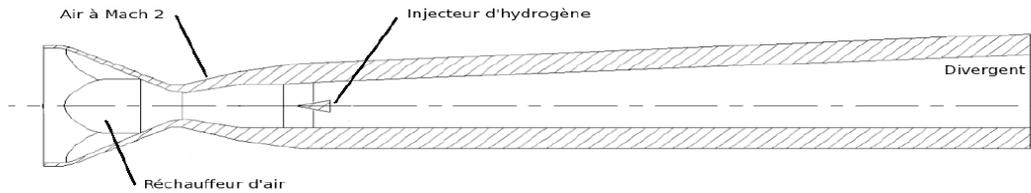


FIGURE 5.2 – Schéma de la chambre expérimentale du DLR

de la simulation en non-réactif sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Un plus grand désaccord est observé dans le cas de l'écoulement réactif. Une approche similaire est employée par Izard [149], avec notamment l'utilisation de l'adaptation de maillage AMA (Anisotropic Mesh Adaptation). Le bon accord des résultats en écoulement non réactif justifie l'utilisation d'une telle méthode pour les écoulements comprenant de fortes zones de discontinuités (choc, couches de mélange). Pour la modélisation de la combustion turbulente, la modélisation MIL (Modèle Intermittent Lagrangien) est employée. Les résultats obtenus dans des conditions réactives sont sensiblement meilleurs. Génin et Menon [150] puis Berglund et Fureby [37] utilisent des approches LES différentes pour simuler les écoulements réactif et non réactif. Berglund et Fureby utilisent notamment deux modèles de flammelle à une ou deux équations. Les résultats sont comparables pour les deux approches, en bon accord avec l'expérience pour les cas non-réactifs et présentant quelques différences pour les résultats réactifs.

Chambre de combustion NASA/SCHOLAR

Le Centre de Recherche de Langley (LaRC) possède plusieurs dispositifs pour étudier la combustion supersonique. Parmi eux, la chambre SCHOLAR (représentée Fig. 5.3) est une chambre expérimentale constituée de plusieurs parties : un premier segment de section constante, une marche descendante sur la partie supérieure, un deuxième segment à nouveau de section constante et enfin une partie avec une section divergente (d'angle constant de 3°). La largeur est constante et égale à 87.88mm tandis que la hauteur de la section d'entrée est de 38.56mm. Cinq injecteurs pilotes (de 1.27mm de diamètre) sont situés en amont de la marche, tandis que l'injection principale est située en aval de la marche sur la paroi supérieure. L'injecteur principal (de 7.6mm de diamètre) produit un jet supersonique d'hydrogène (Mach 2.5) avec un angle de 30° par rapport à l'écoulement d'air principal (Mach 2). Celui-ci est produit par un brûleur dont les produits sont détendus dans une tuyère connectée à la chambre. Les conditions dans l'écoulement d'air vicié sont les suivantes : nombre de Mach de 2, vitesse de 1400 m/s, pression statique de 100 kPa, température statique de 1200 K, température totale de 1830 K. Les conditions sont donc favorables à un auto-allumage de l'hydrogène dans la couche de mélange du jet. Les résultats expérimentaux sont publiés par Cutler et al. [151]. Ils comprennent les distributions pariétales de pression et de flux de chaleur le long de la chambre. Des profils moyens et RMS de température, mesuré par méthode DRASC, sont également fournis dans plusieurs sections transversales. Rodriguez et Cutler [152] rapportent également des profils de pression Pitot dans la section d'entrée de la chambre.

Cette expérience est simulée à l'aide de calculs RANS par Drummond et al. [153] et par Rodriguez et Cutler [152], en utilisant une approche quasi-laminaire. Rodriguez et Cutler réalisent une étude paramétrique afin de mesurer les effets : du maillage, du modèle de turbulence, des nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents et des conditions limites

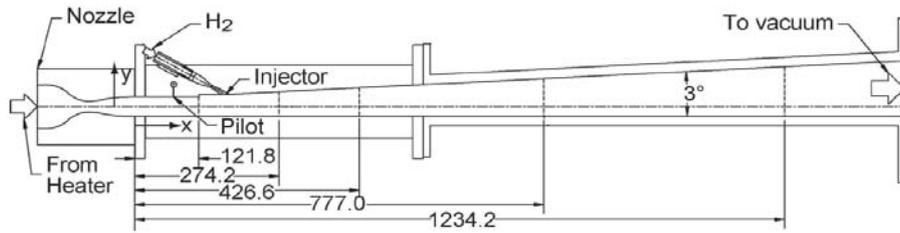


FIGURE 5.3 – Schéma de la chambre expérimentale SCHOLAR de la NASA

turbulentes. Les résultats de pression et de température sont comparés. Rodriguez et Cutler concluent qu'il est impossible dans le cadre de leur étude de prédire simultanément le délai d'auto-inflammation, la distribution de pression et la pénétration du jet. Ingenito et Bruno [154] utilisent un modèle de sous-maille ISCM (Ingenito Supersonic Combustion Modeling) pour la viscosité turbulente et un schéma cinétique à une étape pour calculer la chambre expérimentale SCHOLAR en LES. Les résultats présentent des différences avec les profils expérimentaux, notamment une sous-estimation de la pression en sortie de chambre. Peterson et al. [155] développent et utilisent une approche hybride RANS/LES pour les calculs non-réactifs et réactifs de ce cas. Les résultats présentent, là encore, des différences notamment dans le cas réactif et dans la dernière partie de la chambre.

5.2 Présentation de la flamme jet de Cheng

Le Centre de Recherche de Langley possède un autre dispositif expérimental, antérieur à SCHOLAR, et mieux documenté.

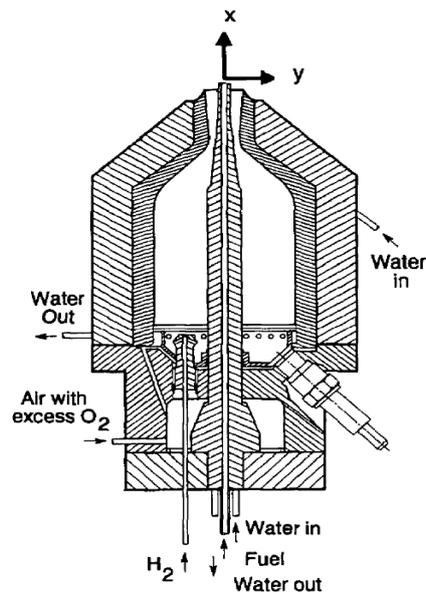


FIGURE 5.4 – Schéma du montage expérimental de Cheng, Pitz et collaborateurs [20]

Avec ce dispositif, l'objectif est d'étudier l'auto-allumage du couple hydrogène/air dans des conditions supersoniques. Pour cela, l'hydrogène est injecté sonique dans un écoulement

supersonique libre d'air vicié. Le dispositif est axisymétrique et comporte un injecteur cylindrique central d'hydrogène de diamètre 2.36mm et une injection d'air vicié dans une tuyère annulaire Mach 2 de diamètre de sortie égal à 17.78mm. Le brûleur est représenté schématiquement sur la figure 5.4. Une chambre de combustion primaire permet de fournir les conditions génératrices souhaitées. Les parois sont refroidies par eau. Les conditions nominales de fonctionnement sont données par Cheng et al. [20] et reportées dans le tableau 5.1. Les conditions génératrices rapportées sont notamment de 778 kPa et 1750 K. Les conditions dans le plan de sortie de la tuyère sont également fournies.

Paramètres géométriques	
Diam. int. de sortie de la tuyère d'air vicié [mm]	17.78
Diam. int. de l'injecteur H_2 (D) [mm]	2.36
Diam. ext. de l'injecteur H_2 [mm]	3.81
Conditions relatives à l'air vicié	
Conditions génératrices	
Pression totale [Pa]	778 000 ($\pm 4\%$) ¹
Température totale [K]	1750
Débit d'air vicié [kg/s]	0.09633 ($\pm 2.2\%$) ¹
Conditions en sortie de tuyère	
Pression [Pa]	107 000
Température [K]	1250
Mach	2
Vitesse [m/s]	1420
Fraction molaire en O_2 [-]	0.201
Fraction molaire en N_2 [-]	0.544
Fraction molaire en H_2O [-]	0.255
Conditions relatives au carburant	
Conditions génératrices	
Débit de H_2 [kg/s]	0.000362 ($\pm 3\%$) ¹
Conditions de sortie	
Pression [Pa]	112 000
Température [K]	545
Mach	1.0
Vitesse [m/s]	1780
Fraction molaire en H_2 [-]	1.0

TABLE 5.1 – Conditions nominales de fonctionnement du brûleur

Cette expérience a fait l'objet d'un certain de nombre de mesures expérimentales. Tout d'abord, Jarrett et al. [156] publient des profils de température moyenne et de concentration moyenne de N_2 et de O_2 mesurées par DRASC ainsi que des profils de vitesse moyenne obtenus par LDA. Cheng et al. [157, 20] rapportent les profils des valeurs moyennes et RMS de la température et des fractions molaires des espèces O_2 , H_2 , H_2O , N_2 et OH dans plusieurs plans transversaux situés à $X/D = \{0.85; 10.8; 21.5; 32.3; 43.1; 64.7; 86.1\}$. Des diagrammes de dispersion de la température et des espèces majoritaires en fonction de la fraction de mélange sont aussi fournis en six points $(X/D, Y/D) = \{(0.85, -0.65); (10.8, -$

1. Quantités mesurées

0.65);(32.3,-1.1);(32.3,1.1);(43.1,0);(86.1,0)}. Ces mesures sont effectuées par diffusion Raman spontanée à l'exception du radical OH mesuré par LIF. Enfin Dancey [158] présente des profils radiaux de vitesse axiale moyenne et RMS obtenus par LDA. Même si la température de l'eau de refroidissement est mesurée, cette information n'est pas publiée. Ainsi, aucune information n'est disponible sur les températures de paroi. Enfin, la géométrie interne de la chambre primaire de combustion n'est pas détaillée. Malgré son caractère axisymétrique, les résultats reportés par Cheng et al. [157, 20] présentent une dissymétrie qui n'est pas clairement expliquée par les auteurs.

Cette expérience a pour vocation initiale la validation des modèles de calculs de la combustion supersonique. C'est aussi la raison pour laquelle elle est largement documentée. Parmi les approches utilisées, la majorité des auteurs initialise la simulation dans le plan de sortie du brûleur en imposant les conditions spécifiées par Cheng et al. [20] Dans ce cadre, Jarrett et al. [156] présentent des résultats de simulation obtenus avec un modèle algébrique de viscosité turbulente et avec le mécanisme cinétique global de Rogers et Chinitz [159]. L'ajustement du modèle de la viscosité turbulente permet d'obtenir un bon accord avec les résultats expérimentaux.

Baurle et ses collaborateurs [Baurle et al. [160, 161], Baurle et al. [162], Baurle et Girimaji [34]] développent et valident un modèle à PDF présumée multi-variable. Les résultats issus des simulations sont comparés aux résultats expérimentaux et aux résultats des simulations conduites avec l'approche quasi-laminaire. Différents modèles de turbulence à une et à deux équations ainsi que des modèles cinétiques simplifiés et détaillés extraits du mécanisme de Jachimowski [106] sont étudiés. Les différences dues au modèle de turbulence et au modèle cinétique sont relativement faibles par rapport aux écarts entre les résultats numériques et expérimentaux.

Möbus et al. [35, 36] développent un modèle basé sur les PDF transportées. Ils proposent dans un premier temps une modélisation pour le transport des PDF des quantités scalaires (composition chimique et enthalpie), puis dans un deuxième temps pour le transport des PDF et des PDF jointes des scalaires, de la vitesse et de la fréquence turbulente par la méthode de Monte Carlo. Le schéma cinétique utilisé est celui issu de l'étude de Baurle et al [160]. Les résultats de simulation issus de ce dernier modèle présentent les meilleures comparaisons avec les profils mesurés. De manière surprenante, l'approche quasi-laminaire surestime les pics de la température et des fractions de OH et de H_2O dans la zone d'allumage.

Morgenthaler et al. [163] comparent des résultats de simulations avec l'utilisation d'un modèle de flammelette (adapté par Sabel'nikov et al. [164] aux écoulements supersoniques) et avec l'utilisation du modèle PEUL. Les résultats issus de la simulation présentent certaines disparités avec les résultats expérimentaux dues notamment aux hypothèses simplificatrices : l'air ambiant extérieur n'est pas pris en compte, les lèvres de l'injecteur ne sont pas modélisées et enfin les couches limites sont négligées.

Dauplain et al. [165] proposent pour la première fois l'utilisation d'une approche de simulation aux grandes échelles (AVBP) pour l'étude de cette flamme. La distance d'auto-allumage issue de cette simulation est surestimée. Cela est dû notamment à l'utilisation d'un schéma cinétique simplifié à deux étapes et à la surestimation du mélange au coeur du jet. Les résultats obtenus ne sont pas en bon accord avec les expériences.

L'étude de Gerlinger et al. [33] est la première à considérer l'effet induit par une tuyère sur le délai d'allumage. La géométrie de la tuyère est reconstruite a posteriori pour obtenir les conditions en sortie de tuyère spécifiées dans [20]. Les auteurs étudient seulement l'impact

de la tuyère sur la recombinaison des radicaux issus du réchauffeur. Ils proposent par ailleurs une étude paramétrique de l'influence du maillage, du pas de temps, du schéma cinétique et de la présence de radicaux dans l'écoulement d'air vicié sur le délai d'auto-inflammation. Izard et al. [166] adaptent l'approche lagrangienne du modèle MIL aux écoulements supersonique pour l'appliquer à cette expérience. La méthode proposée donne de bons résultats. Gomet et al. [167] proposent néanmoins de l'améliorer encore en considérant des équations de transport supplémentaires pour des quantités reliées aux temps de résidence des particules fluides, une quantité clé dans les problèmes d'allumage.

Enfin, plus récemment, Boivin et al. [168] étudient l'influence d'un schéma cinétique réduit et détaillé sur le délai d'auto-inflammation à l'aide de simulations tridimensionnelles instationnaires. La viscosité turbulente de sous-maille est modélisée à l'aide du modèle classique de Smagorinsky et aucune modélisation de la combustion turbulente de sous-maille n'est utilisée. Les résultats obtenus surestiment le mélange au coeur du jet et les champs de température correspondants ne permettent pas de décrire la zone d'allumage de manière pleinement satisfaisante.

Concernant l'ensemble des résultats de simulation relatifs à cette expérience, aucune méthode n'a donné d'accord complètement satisfaisant pour l'ensemble des données expérimentales.

5.3 Étude de sensibilité

Les études précédentes ont permis de mettre en avant la grande sensibilité des résultats de la flamme supersonique stationnaire de Cheng et al. [20], notamment aux conditions limites. Afin de quantifier ces effets, une étude de sensibilité à différents paramètres d'ordre général (turbulence, conditions limites, géométrie) ou plus spécifique au modèle UPaSR est entreprise.

5.3.1 Aspects numériques

La géométrie du brûleur supersonique nous a été aimablement fournie sous la forme d'un maillage par le Prof. R. Baurle de la NASA. La géométrie qui en est extraite correspond au dessin technique du montage fourni par ailleurs par le Prof. A. Cutler. Le maillage est réalisé à l'aide du mailleur GMSH. Il est composé de cellules triangulaires (voir Fig. 5.5) et le nombre total d'éléments est donné dans le tableau 5.2.

	Cellules internes	Faces
Total	99 321	155 911

TABLE 5.2 – *Éléments du maillage employé pour l'étude RANS*

Étant donné la symétrie du brûleur, le maillage retenu pour l'étude est bidimensionnel axisymétrique. Il comporte une large zone tampon autour du jet pour faciliter le traitement des conditions limites ouvertes avec le code CEDRE.

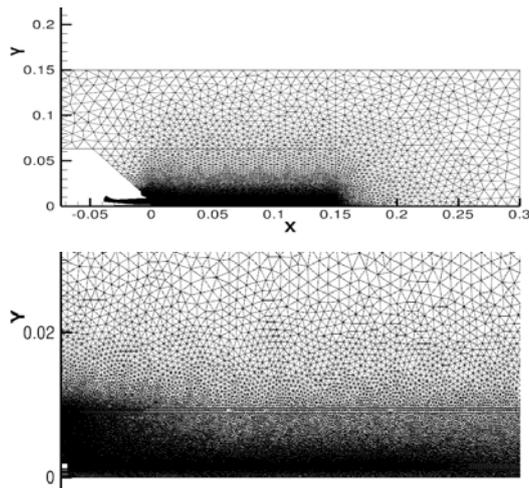


FIGURE 5.5 – Représentation du maillage utilisé pour l'étude RANS

En présence de la tuyère, les conditions limites imposées sont les conditions génératrices données par Cheng et al. [20] et rappelées dans le tableau 5.1. Afin d'obtenir un profil de température dans le plan de sortie de la tuyère conforme avec les mesures DRASC fournies, la température génératrice imposée (2050 K) est supérieure à celle indiquée expérimentalement (1750 K). Gerlinger et al. [33] ont remarqué le même effet avec l'emploi d'une géométrie différente, pour laquelle débit d'espèces et conditions génératrices sont conservées. Les conditions retenues dans notre étude sont répertoriées dans le tableau 5.3.

	Hydrogène	Air vicié	Air ext.
P_i [Pa]		780 000	101 300
T_i [K]	595	2050	300
\dot{m} [kg/m ² /s]	82.8	-	-
Y_{O_2}	-	0.245	0.233
Y_{N_2}	-	0.580	0.767
Y_{H_2O}	-	0.175	-
Y_{H_2}	1	-	-

TABLE 5.3 – Valeurs imposées aux conditions limites

Le type de condition limite retenue est donné pour chacune d'entre elles dans le tableau 5.4.

	Type de condition	Variable imposée
Air vicié	Entrée subsonique	P_i, T_i, Y_k, k, ω
Hydrogène	Entrée subsonique	$T_i, \rho \mathbf{u}, Y_k, k, \omega$
Air ambiant	Entrée subsonique	P_i, T_i, Y_k, k, ω
Sortie	Sortie subsonique	p
Parois	Paroi	T_w

TABLE 5.4 – Type de condition limite retenue

Dans le cadre des simulations RANS, le modèle de turbulence utilisé est le modèle $k - \omega$ (présenté dans la partie (1.4.2)). Le tenseur de Reynolds ainsi que les flux turbulents sont

fermés à l'aide des corrélations détaillées dans la partie (1.4). Les nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents sont pris égaux à 0.7. Les flux non-visqueux sont estimés à l'aide du schéma de flux HLLC en conjonction avec un limiteur Van Leer. La résolution spatiale est d'ordre 2. L'intégration temporelle, obtenue à l'aide d'un schéma Euler implicite, est d'ordre 1. Enfin, le pas de temps utilisé pour chacun des cas de calcul est de 1.0×10^{-6} s.

5.3.2 Étude de sensibilité aux paramètres généraux

Outre les paramètres de la modélisation UPaSR, les résultats de simulations RANS sont sensibles à un certain nombre de paramètres. On étudie dans un premier temps, l'influence des paramètres de turbulence, des conditions limites et des schémas cinétiques. L'influence de chaque paramètre est étudiée en regardant son impact sur la distribution de température dans différentes sections.

Cas		Cinétique	Condition Limite de Turbulence (Turbulence Plan Sortie)			Temp. paroi T_w [K]
CasRef	sans tuyère	Jachimowski	-	-	sans	500
			$T_{U_\infty} = 1\%$	$l_t = 70\%d$	corr. comp.	
Cas0a	avec tuyère	Onera (Eklund)	$T_{U_\infty} = 5\%$	$l_t = 10\%d$	sans	500
			$T_{U_\infty} \approx 0.75\%$	$l_t \approx 3.5\%d$	corr. comp.	
Cas0b	avec tuyère	Jachimowski	$T_{U_\infty} = 5\%$	$l_t = 10\%d$	sans	500
			$T_{U_\infty} \approx 0.75\%$	$l_t \approx 3.5\%d$	corr. comp.	
Cas0c	avec tuyère	Jachimowski	$T_{U_\infty} = 5\%$	$l_t = 10\%d$	sans	700
			$T_{U_\infty} \approx 0.75\%$	$l_t \approx 3.5\%d$	corr. comp.	
Cas0d	avec tuyère	Jachimowski	$T_{U_\infty} = 10\%$	$l_t = 50\%d$	sans	500
			$T_{U_\infty} \approx 1.5\%$	$l_t \approx 7.7\%d$	corr. comp.	
Cas0e	avec tuyère	Jachimowski	$T_{U_\infty} = 10\%$	$l_t = 50\%d$	avec corr.	500
			$T_{U_\infty} \approx 1.5\%$	$l_t \approx 7.7\%d$	comp. Sarkar	

TABLE 5.5 – Matrice de cas - étude de sensibilité aux paramètres généraux

Un cas de référence est défini, il est désigné dans la suite (CasRef). La tuyère du brûleur primaire n'est pas considérée. La composition chimique du mélange gazeux est décrite par 9 espèces (H_2 , H_2O , N_2 , O_2 , OH , H , O , HO_2 et H_2O_2) et la cinétique chimique utilisée est celle proposée par Jachimowski, comprenant 19 réactions, et rappelée dans l'Annexe A. Les conditions limites imposées dans le plan de sortie de la tuyère sont celles définies dans l'article de référence [20]. Le cas suivant (Cas0a) correspond au cas où la tuyère est prise en compte. La composition chimique du mélange gazeux est décrite par 7 espèces (H_2 , H_2O , N_2 , O_2 , OH , H et O) et la cinétique chimique utilisée est celle proposée par l'Onera, comprenant 7 réactions, adaptée de la cinétique d'Eklund et rappelée dans l'Annexe A. Le cas (Cas0b) permet d'étudier les effets combinés de la prise en compte de la tuyère avec la cinétique de Jachimowski. Le cas suivant (Cas0c) est identique au précédent (Cas0b), à l'exception de la température de paroi qui est augmentée à 700 K, afin d'analyser son influence sur l'auto-allumage. Le cas (Cas0d) permet d'étudier l'influence du niveau de turbulence, injecté en entrée du calcul, et reste identique au cas (Cas0b) pour tous les autres paramètres. Enfin, le dernier cas (Cas0e) étudie l'influence de la correction de compressibilité proposée par

Sarkar et présentée dans la partie (4.1), notamment pour la couche de mélange extérieure présentant un Mach convectif supérieur à l'unité.

Tous ces cas ne prennent pas en compte l'Interaction Chimie-Turbulence, et une simple modélisation Quasi-Laminaire est utilisée. Ils sont synthétisés dans le tableau 5.5.

Résultats

Les résultats correspondants aux cas définis dans le tableau 5.5 sont donnés dans la figure 5.6.

La section $X/D=10.8$ se situe avant le début de la zone d'auto-allumage. Les profils de température dans cette section sont semblables pour tous les cas définis. Seul le cas (CasRef) correspondant au cas sans tuyère le sous-estime. On peut également remarquer dans ce cas un début de combustion, provoquant un pic de température situé à une ordonnée Y/D comprise entre 1 et 2. Dans les autres cas, le pic de température existe également mais est dû au caractère hétérogène du profil de pression dans le plan de sortie de la tuyère. Celui-ci induit une série de réflexion de chocs entre les deux couches de mélange, augmentant localement la température.

L'écart entre les différents résultats dans la section suivante, située à $X/D=21.5$, est plus marqué. Pour le cas de référence (CasRef), l'auto-allumage se poursuit par rapport à la section précédente et provoque une élévation locale et assez étroite de la température dans la couche de mélange. Pour les autres cas (en présence de la tuyère), les profils de température sont assez semblables, notamment dans leur structure, seuls les niveaux diffèrent. Le cas de calcul avec la cinétique Onera (Cas0a) sous-estime la température dans la zone d'auto-allumage. Tous les autres cas présentent des profils qui surestiment légèrement la température. Le niveau de turbulence imposé en entrée du calcul ne semble pas avoir d'effet notable sur l'augmentation de température observée dans la zone d'auto-allumage ((Cas0b) et (Cas0d)). Seule la température de paroi, plus élevée dans le cas (Cas0c) par rapport à (Cas0b), semble avoir un effet bénéfique sur l'auto-allumage : les vitesses de réactions dans la couche de mélange sont augmentées par effet de température à cause d'une température plus élevée dans la couche limite.

Cette effet s'estompe dans la zone de flamme, correspondant à la section suivante $X/D=32.3$. Les deux paramètres jouant au premier ordre sont le schéma cinétique (Cas0a) et le caractère homogène des conditions limites (sans la présence de la tuyère, (CasRef)). Le schéma cinétique Onera ne semble pas prédire la bonne température de flamme qui est sous-estimée. Lorsque la tuyère n'est pas prise en compte (CasRef), la structure du jet n'est correctement décrite et la flamme n'est pas encore refermée, laissant une zone de température faible sur l'axe de rotation du jet.

Dans la dernière section à $X/D=43.1$, les profils de température correspondant à chacun des cas sont similaires. Seul le cas de référence (sans tuyère) présente un profil différent, de manière identique à la section précédente ($X/D=43.1$). Globalement, la correction de compressibilité de Sarkar (Cas0e) ne modifie pas significativement les résultats, notamment pour le phénomène d'auto-allumage.

Les profils de température sont finalement comparés sur l'axe de symétrie du brûleur. Les tendances observées dans les coupes transversales se confirment. L'absence de prise en compte de la tuyère (CasRef) ne permet pas de décrire le profil de montée en température sur l'axe et donc le délai d'auto-allumage.

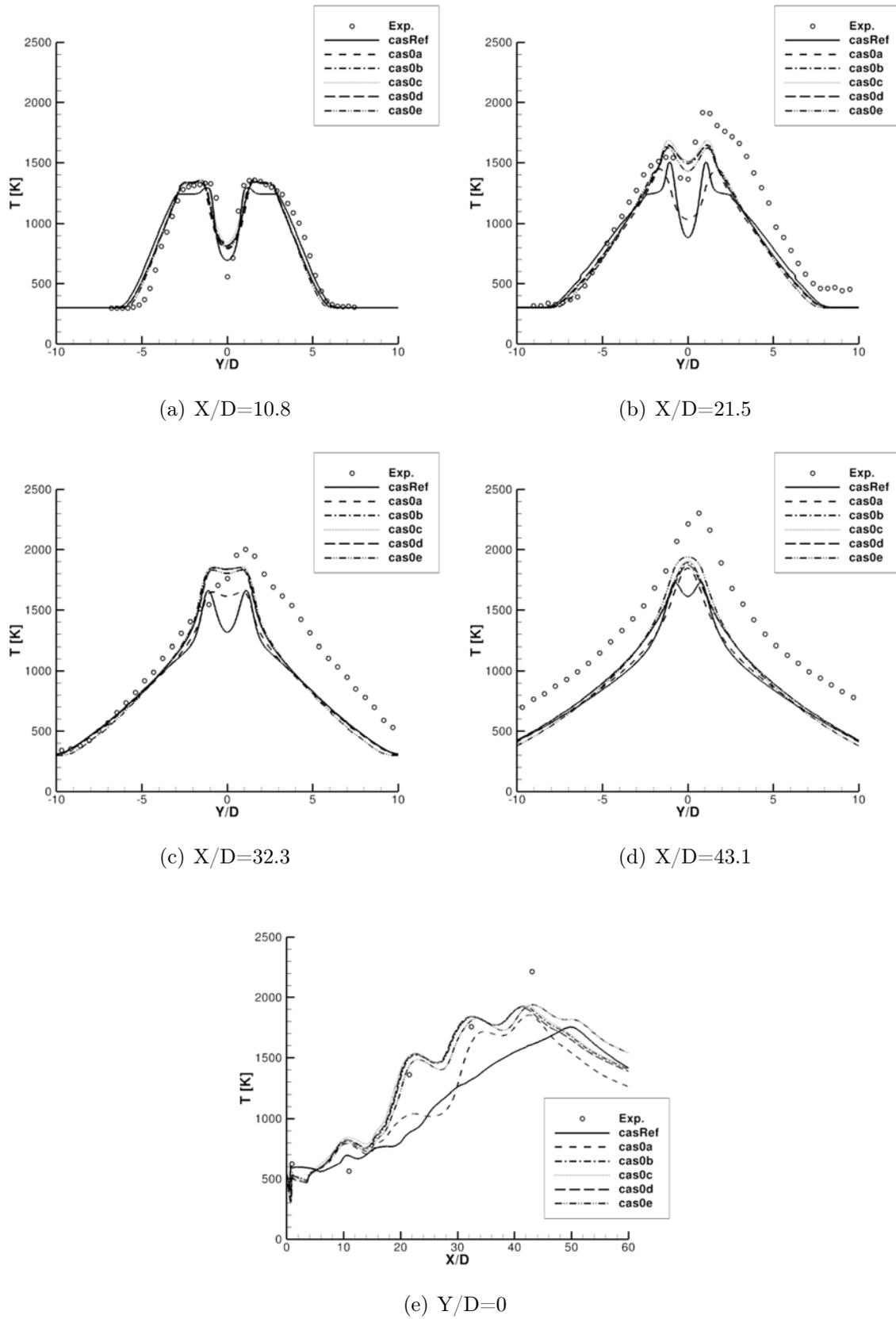


FIGURE 5.6 – Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres généraux

L'utilisation du schéma cinétique Onera permet de trouver une température dans la zone de flamme proche de celle donnée par l'utilisation du schéma cinétique de Jachimowski. Cependant le profil de montée en température est décalé d'une dizaine de diamètre par rapport au profil expérimental. Le délai d'auto-allumage est là encore mal estimé. Les autres cas (Cas0b,c,d,e) donnent une montée de température semblable à celle observée expérimentalement, même si le mélange semble être surestimé à la sortie de l'injection centrale d'hydrogène, au coeur du jet.

5.3.3 Étude de sensibilité aux paramètres d'allumage

L'approche RANS ne permet pas de résoudre les fluctuations de température et de composition aux grandes échelles. Dans la configuration du brûleur de Cheng, les fluctuations de température dans le courant d'air vicié en sortie de tuyère atteignent un niveau assez important correspondant à environ 10% de la température statique. Plusieurs approches ont été développées pour les prendre en compte. Les travaux de Baurle et ses collaborateurs [Baurle et al. [160, 161], Baurle et al. [162], Baurle et Girimaji [34]] ont notamment permis de développer une approche à PDF présumée multi-variable. Gerlinger [169] propose également une approche à PDF présumée appliquée à l'utilisation d'une cinétique chimique détaillée.

Afin d'étudier la sensibilité aux fluctuations de température, notamment dans la zone d'allumage, une équation de transport pour la variance de la température $\sigma_T = \overline{T'^2}$ est proposée pour cette étude et implémentée dans CEDRE. Cette forme approchée est obtenue à partir de l'équation de la variance de l'énergie et s'écrit sous la forme suivante (les détails sont donnés en Annexe B) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\sigma_T) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j\sigma_T) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \sigma_T}{\partial x_j} \right] = 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)^2 - C_T \hat{\gamma} \bar{\rho} \omega \sigma_T - C_{TP} \bar{\rho} \sigma_T \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (5.1)$$

Le premier terme du membre de droite de l'équation (5.1) correspond au terme de production des fluctuations par le gradient moyen de température. Le deuxième terme quantifie quant à lui un terme de destruction avec un temps caractéristique ($1/\omega$) de la turbulence, corrélé aux fluctuations du champ de vitesse. Il est contrôlé par la constante C_T qui caractérise le rapport des temps caractéristiques du mélange scalaire à celui de la turbulence. Enfin, le dernier terme peut être positif ou négatif selon le signe de la divergence de la vitesse et quantifie les effets de dilatabilité sur les fluctuations de température. Ce terme est contrôlé par la constante C_{TP} . À titre indicatif, on notera que Gerlinger et al. [33] utilisent dans leur étude le jeu de constantes $C_T=2$ et $C_{TP}=0.8$.

Le taux de production chimique moyen est alors calculé selon :

$$\begin{cases} \bar{\omega}_k = \dot{\omega}_k(\tilde{T}, \tilde{Y}_k) & \text{si } \tilde{T} > T_c \\ \bar{\omega}_k = \dot{\omega}_k(\tilde{T}, \tilde{Y}_k) \cdot f(\tilde{T}, \sigma_T) & \text{si } \tilde{T} < T_c \end{cases} \quad (5.2)$$

où la fonction $f(\tilde{T}, \sigma_T)$ correspond au développement à l'ordre 2 par rapport à la température des termes sources chimiques, et T_c est la température de coupure. Celle-ci est un paramètre du modèle. Lorsque \tilde{T} est supérieure à T_c , les effets non linéaires des fluctuations de température sur les termes sources chimiques sont négligés, et le taux de production chimique moyen pour l'espèce k est alors calculé par l'approche QL.

Les différents cas d'étude sont donnés dans le tableau 5.6. Ils sont définis pour différentes température T_c et différentes constantes C_T et C_{TP} . Le cas (Cas1b) étudie l'influence de la température de coupure lorsque les autres paramètres sont fixés. Le dernier cas (Cas1c) étudie l'influence des constantes C_T et C_{TP} lorsque la température de coupure T_c est fixée. Ces cas de calculs reprennent les conditions limites turbulentes, la géométrie (avec tuyère) et le schéma cinétique de Jachimowski définies précédemment pour le (Cas0b) (Table 5.5). Dans les trois cas, aucune fluctuation de température n'est imposée en entrée du domaine de calcul ($\sigma_T = 0$ aux conditions limites).

Cas	T_c	Constantes d'allumage	
Cas1a	900	$C_T = 0.5$	$C_{TP} = 0.5$
Cas1b	1100	$C_T = 0.5$	$C_{TP} = 0.5$
Cas1c	900	$C_T = 2$	$C_{TP} = 2$

TABLE 5.6 – Matrice de cas - étude de sensibilité aux paramètres d'allumage

Résultats

Les résultats des cas définis dans le tableau 5.6 sont reportés dans la figure 5.7. Il n'y a pas d'effet significatif de la modélisation sur les résultats. Les profils de température des cas étudiés ((Cas1a), (Cas1b) et (Cas1c)) sont superposés à celui du cas (Cas0b), pris ici comme référence. Les profils de variance de température obtenus par l'équation (5.1) sont donnés dans la figure 5.8 et comparés aux profils expérimentaux. La forme générale de ces profils est correcte et suit dans l'ensemble les tendances du cas expérimental. Les niveaux sont en revanche largement sous-estimés. Dans la zone d'intérêt, i.e. la couche de mélange centrale située autour de l'ordonnée $Y/D=1$, les écarts avec les niveaux expérimentaux peuvent atteindre 75 %. D'un point de vue de la modélisation, les niveaux de variance de température obtenue par l'équation de transport (5.1) sont trop faibles (de l'ordre de 100 K dans la zone d'allumage) pour avoir un effet significatif sur les termes sources chimiques moyens. L'intérêt d'une représentation des fluctuations de température de température à l'aide d'une équation classique de convection-diffusion avec une fermeture simplifiée des termes sources de production/destruction apparaît alors limitée.

De manière assez surprenante, les profils de température (identique à ceux du (Cas0b)) sont en assez bon accord avec les profils expérimentaux. Une étude plus approfondie de la représentation des fluctuations de température en régime supersonique, ainsi que leurs effets possibles sur le processus d'auto-allumage, nécessiterait d'être menée afin de lever toute ambiguïté sur cette influence.

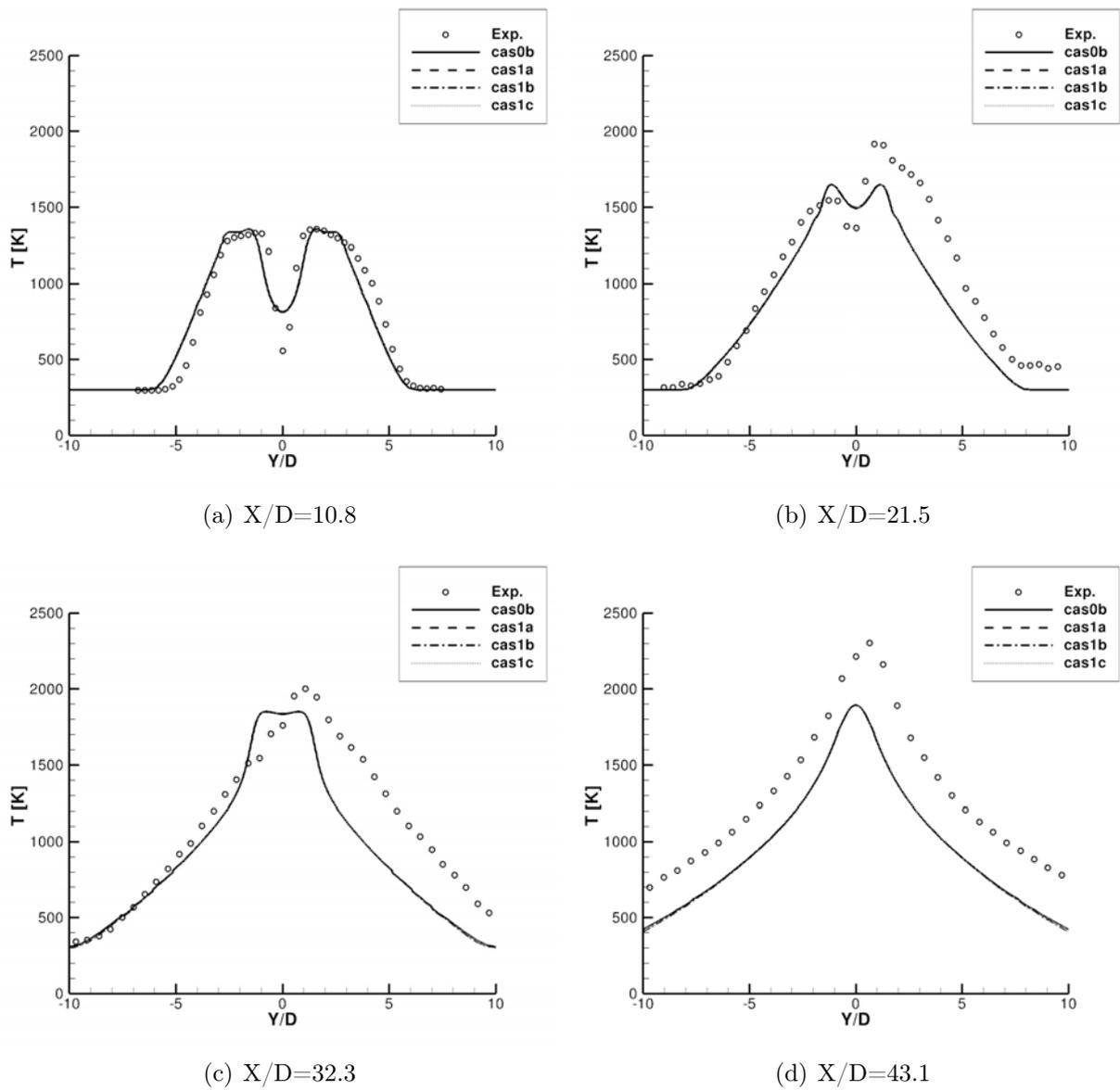


FIGURE 5.7 – Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres d'allumage

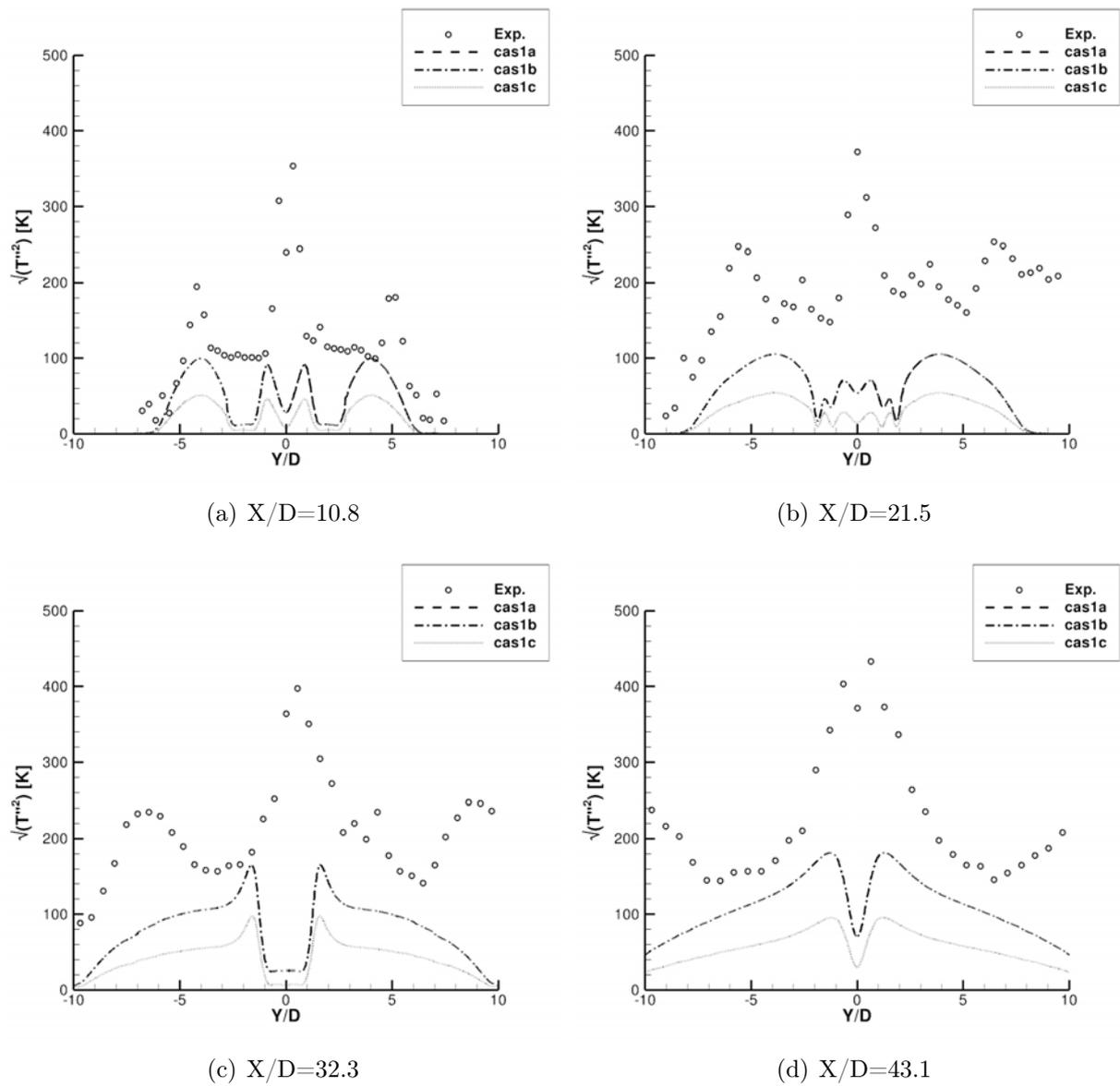


FIGURE 5.8 – Profils de variance de température calculés et mesurés - étude de sensibilité aux paramètres d'allumage

5.3.4 Étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR

Le modèle d'Interaction Chimie-Turbulence UPaSR est implémenté dans le code CEDRE. Ce modèle fait intervenir des paramètres dont l'étude de la sensibilité est présentée ci-dessous. On rappelle au préalable les équations de UPaSR :

$$\begin{cases} \partial \bar{\rho} Y_k^* / \partial t + \bar{\rho} (Y_k^* - Y_k^0) / \tau_m = \dot{\omega}_k (T^*, Y_k^*) \\ \bar{\rho} \sum_{k=1}^n (Y_k^* h_k^* - Y_k^0 h_k^0) = \tau_m \sum_{k=1}^n h_{k,f}^\theta \dot{\omega}_k (T^*, Y_k^*) \end{cases} \quad (5.3a)$$

$$\gamma^* = \tau_c / (\tau_c + \tau_m) \quad (5.3b)$$

$$\bar{\dot{\omega}}_{k, \text{UPaSR}} = \gamma^* \dot{\omega}_k (T^*, Y_k^*) \quad (5.3c)$$

Les différents cas d'étude sont répertoriés dans le tableau 5.7. Ils sont définis pour différents temps chimiques τ_c . Celui-ci peut être non borné ($Z_{\text{inf}} = 0$ et $Z_{\text{sup}} = 1$) ou borné ($Z_{\text{inf}} = 0.01$ et $Z_{\text{sup}} = 0.05$) en fonction de la fraction de mélange Z . Une représentation est fournie dans la figure 5.9. Les deux premiers cas (Cas2a) et (Cas2b) permettent d'étudier l'influence des valeurs prises par la fraction de mélange pour définir les bornes de définition du temps chimique. Le troisième cas (Cas2c) permet d'étudier l'influence de la valeur du temps chimique prise entre ces bornes.

Il est à noter que la valeur du temps chimique dans le cas (Cas2b) est assimilée au temps caractéristique d'une flamme laminaire de prémélange stoechiométrique à pression atmosphérique. Le temps chimique tend par ailleurs vers l'infini dans l'écoulement pur d'hydrogène ($Z_{\text{inf}} = 1$) et dans l'écoulement pur d'air vicié ($Z_{\text{inf}} = 0$). Ce cas est donc le plus représentatif des phénomènes physiques mis en jeu.

Tous ces cas de calculs reprennent les conditions limites turbulentes, la géométrie (avec tuyère) et le schéma cinétique de Jachimowski définies précédemment pour le (Cas0b) (Table 5.5)

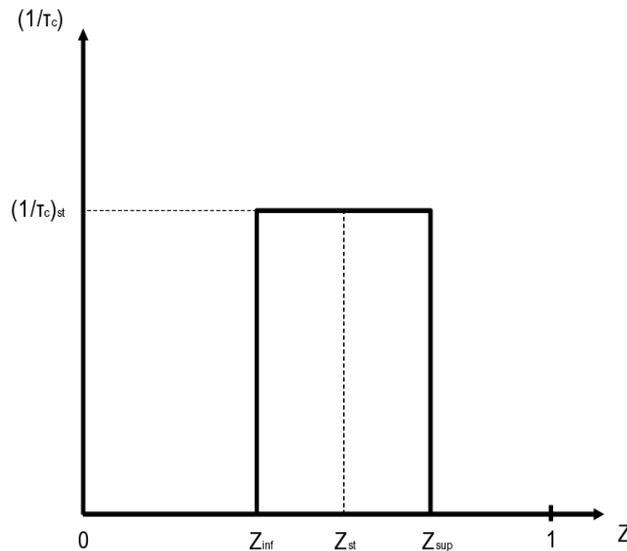


FIGURE 5.9 – Représentation du temps chimique τ_c en fonction de la fraction de mélange

Résultats

Les résultats des cas définis dans la table 5.7 sont donnés dans la figure 5.10. Les profils de

Cas		τ_c [s]
Cas2a	non borné	1×10^{-4}
Cas2b	borné	1×10^{-4}
Cas2c	borné	1×10^{-5}

TABLE 5.7 – Matrice de cas - étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR

température sont comparés entre eux, ainsi qu'au profil issu du cas (Cas0b), pris là encore comme référence. Pour les cas (Cas2a) et (Cas2b), ces profils sont quasiment superposés dans l'ensemble des sections transversales. Le fait de définir un temps chimique constant sur tout ou une partie du domaine de définition de la fraction de mélange ne semble pas avoir d'effet majeur. Le dernier cas (Cas2c) est légèrement différent puisque, hormis la première section $(X/D)=10.8$ où la combustion ne se déroule pas encore, les niveaux de température atteints sont légèrement inférieurs aux cas (Cas2a) et (Cas2b). En effet, lorsque, à τ_m fixé, τ_c diminue, γ^* diminue également. Le terme γ^* pilote le terme de production moyen et joue son rôle de réacteur imparfaitement mélangé. Le fait que la composition $\Psi^* = (T^*, Y_k^*)$ soit différente de l'état moyen ne semble pas jouer un rôle dominant. Le fait de diminuer le temps chimique τ_c à donc pour effet de diminuer le dégagement de chaleur.

De manière plus générale, la modélisation UPaSR proposée ne semble pas avoir d'effet significatif sur la zone d'allumage dans les conditions considérées ici. Cette région, pilotée par la cinétique, est une zone où γ^* est assez proche de l'unité. La solution au système 5.3a est alors très proche de l'écoulement moyen.

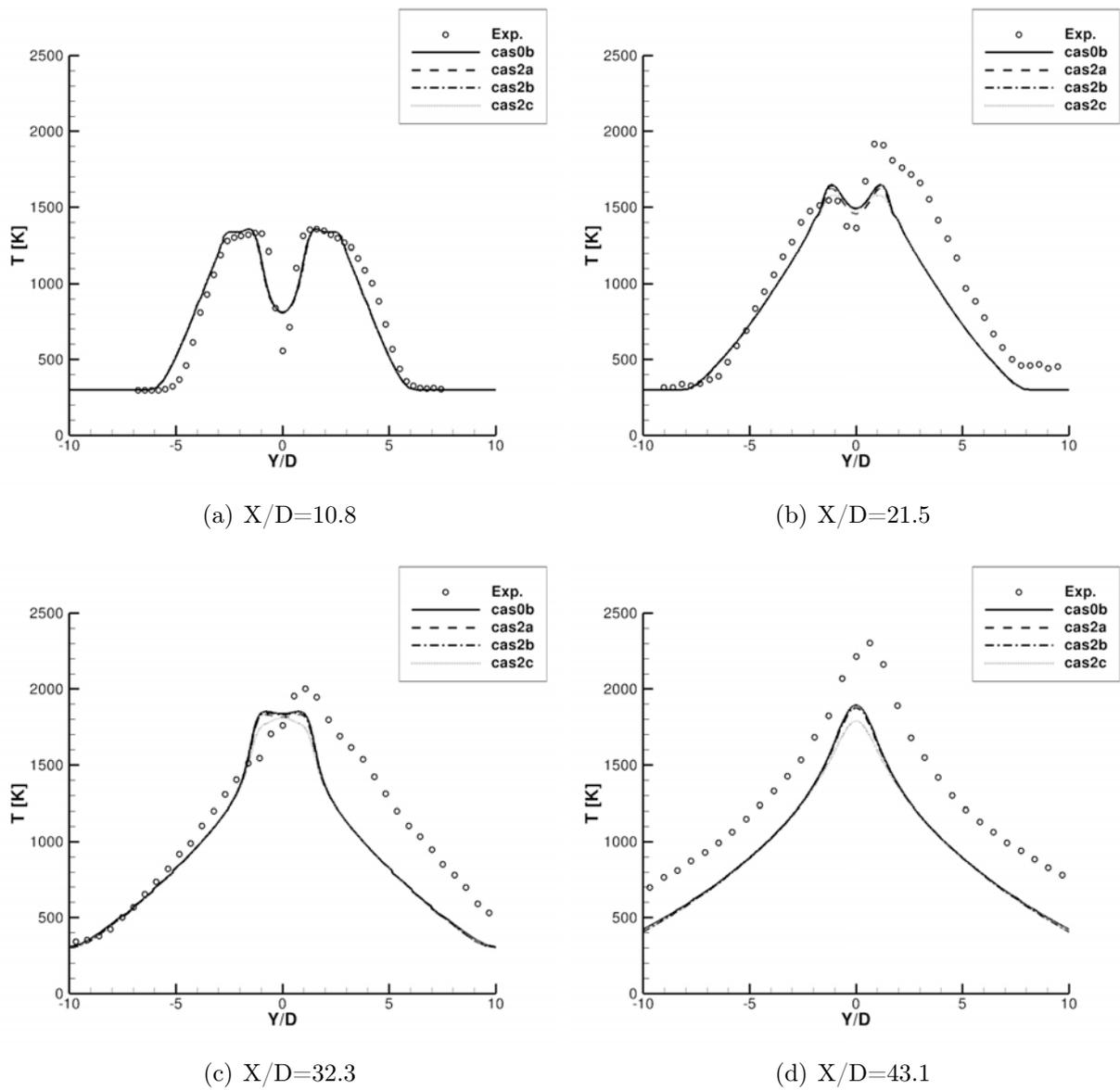


FIGURE 5.10 – Profils moyens de température issus des simulations numériques et expérimentaux - étude de sensibilité aux paramètres de UPaSR

5.4 Étude numérique stationnaire

L'étude de sensibilité précédente a permis de mettre en avant les paramètres influents sur l'auto-allumage et la structure de flamme. La partie suivante est plus spécifiquement dédiée à l'analyse physique des phénomènes mis en jeu.

Structure de flamme

Le cas (Cas2b) défini précédemment, proposant le jeu de constantes les plus représentatives concernant les phénomènes physiques associés, est étudié en détail.

Le champ de dégagement de chaleur avec les isolignes de pression est donné dans la figure 5.11. Elle permet de délimiter très clairement quatre zones. Dans la région proche de l'injecteur ($0 < X/D < 10$), aucune réaction significative n'est observée ; il s'agit de la zone d'induction. Plus loin, une zone mince se développe ($10 < X/D < 16$) entre l'hydrogène froid et l'air vicié chaud. Il s'agit de la zone d'auto-allumage. Elle est précédée par un pic de formation de radical HO_2 en amont, dans la zone d'induction, au coeur du jet. Certains auteurs [124, 3, 110] rapportent l'importance de ce pic de formation de radical dans la stabilisation par auto-allumage des flammes détachées. L'auto-allumage se poursuit jusque dans la zone où la flamme se positionne ($16 < X/D < 24$). Cette zone de fort taux de dégagement de chaleur se localise au milieu d'une cellule de choc. Elle est alimentée en réactifs au centre du jet et s'apparente fortement à une structure de flamme de prémélange. Le dégagement de chaleur diminue fortement dans la zone suivante ($24 < X/D < 30$) sous l'effet d'une diminution importante de la pression. Il augmente de nouveau ($30 < X/D < 34$) dans la cellule de choc suivante où l'hydrogène restant est consommé.

L'auto-allumage est dans ce cas largement affecté par la structure du jet. Celui-ci présente alternativement des cellules de choc, où la pression est élevée, et des zones de détente, où la pression est plus faible. La zone d'auto-allumage (située approximativement autour de la section $X=21.5$) est localisée dans une cellule de choc, la pression joue un rôle très favorable en augmentant sensiblement les vitesses de réactions.

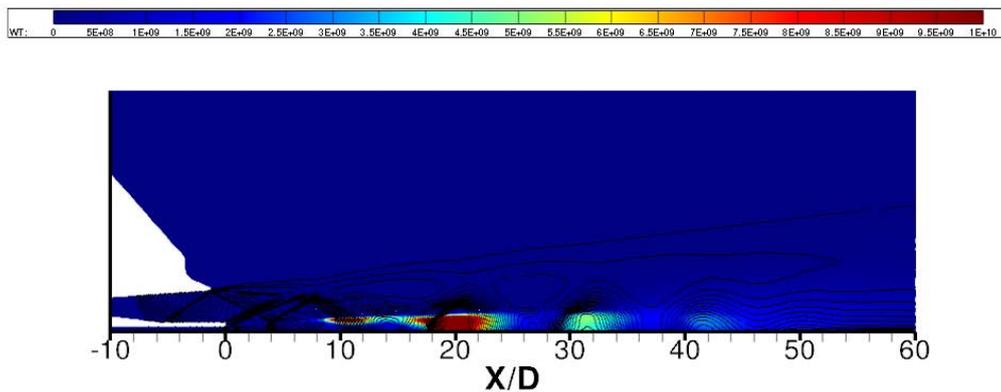


FIGURE 5.11 – Champ de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa]

Le champ de fraction volumique de structures fines γ^* est illustré dans la figure 5.12. Dans les zones de fort taux de dégagement de chaleur, γ^* varie entre 0.95 et 1, indiquant que le processus est largement limité par les effets cinétiques. Lorsque γ^* tend vers un, l'état Ψ^* , solution du système (5.3a), tend vers la solution moyenne $\tilde{\Psi}$ obtenue par l'approximation

QL. Dans ces conditions, la modélisation UPaSR n'apporte que très peu de modifications par rapport à l'approche QL.

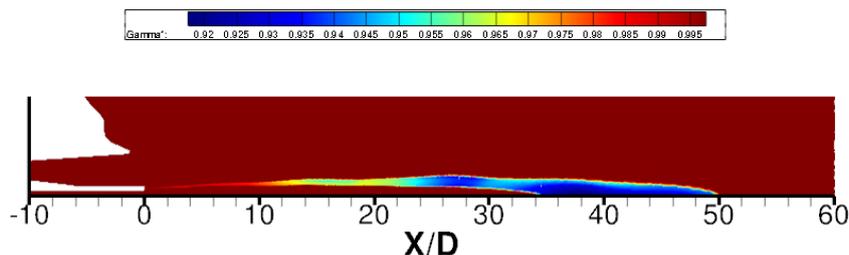


FIGURE 5.12 – Champ de fraction volumique de structures fines γ^* [-]

Résultats

Les résultats détaillés de la simulation sont donnés dans la figure 5.13. Les profils de température moyenne ainsi que des fractions molaires moyennes des espèces majoritaires (Y_{H_2} , Y_{O_2} et Y_{H_2O}) issus des simulations numériques sont comparés aux données expérimentales pour les quatre sections transversales.

Les résultats dans la première section ($X/D=10.8$) sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Le mélange au coeur du jet semble être légèrement surestimé, le profil expérimental d'hydrogène étant sous-estimé. Les profils de température, d'oxygène et d'eau semblent être quant à eux bien représentés. Cette section correspond à la fin de la zone d'induction et au début de la zone d'auto-allumage. Les effets de la combustion sur les profils moyens demeurent donc encore limités, et le bon accord général des résultats numériques confirme l'importance de l'effet des conditions limites, notamment avec la prise en compte de la tuyère. Le profil de pression obtenu en sortie étant fortement hétérogène, son impact sur la structure du jet est du premier ordre.

Les différences entre les résultats numériques et expérimentaux dans la deuxième section ($X/D=21.5$) sont plus marquées. Ces derniers présentent une asymétrie marquée due à la combustion. Celle-ci n'a jusqu'à présent jamais été justifiée ou expliquée (ni expérimentalement, ni numériquement). Les profils d'hydrogène et d'oxygène sont sous-estimés, suggérant dans cette section une surestimation du phénomène de combustion. Pour autant, les profils de température et d'eau se situent correctement, respectivement sur la borne basse et la borne haute des profils asymétriques.

La section suivante ($X/D=32.3$) est située en aval de la flamme dans les gaz chauds. Les profils expérimentaux présentent là encore une forte dissymétrie au niveau de leurs valeurs maximales, au centre du jet. Les profils de température et de fraction molaire d'eau issus de la simulation se situent entre la borne minimale et la borne maximale des profils asymétriques. Les profils d'hydrogène et d'oxygène sont en assez bon accord avec les résultats expérimentaux. Toutefois, les remarques faites pour la section précédente restent dans une moindre mesure valables. Le taux de dégagement de chaleur reste dans cette section assez modéré, ainsi les réactifs finissent de réagir entre eux.

La dernière section ($X/D=43.1$) permet de caractériser la température et la composition de fin de combustion. La simulation sous-estime la température sur tout le profil, notamment la température de flamme, malgré une consommation quasi complète des réactifs. Cette zone est largement affectée par le développement de la couche limite extérieure, où le nombre de Mach convectif est élevé. Aucun effort particulier n'a été fait sur le traitement de cette couche de mélange qui n'affecte pas directement le phénomène d'auto-allumage.

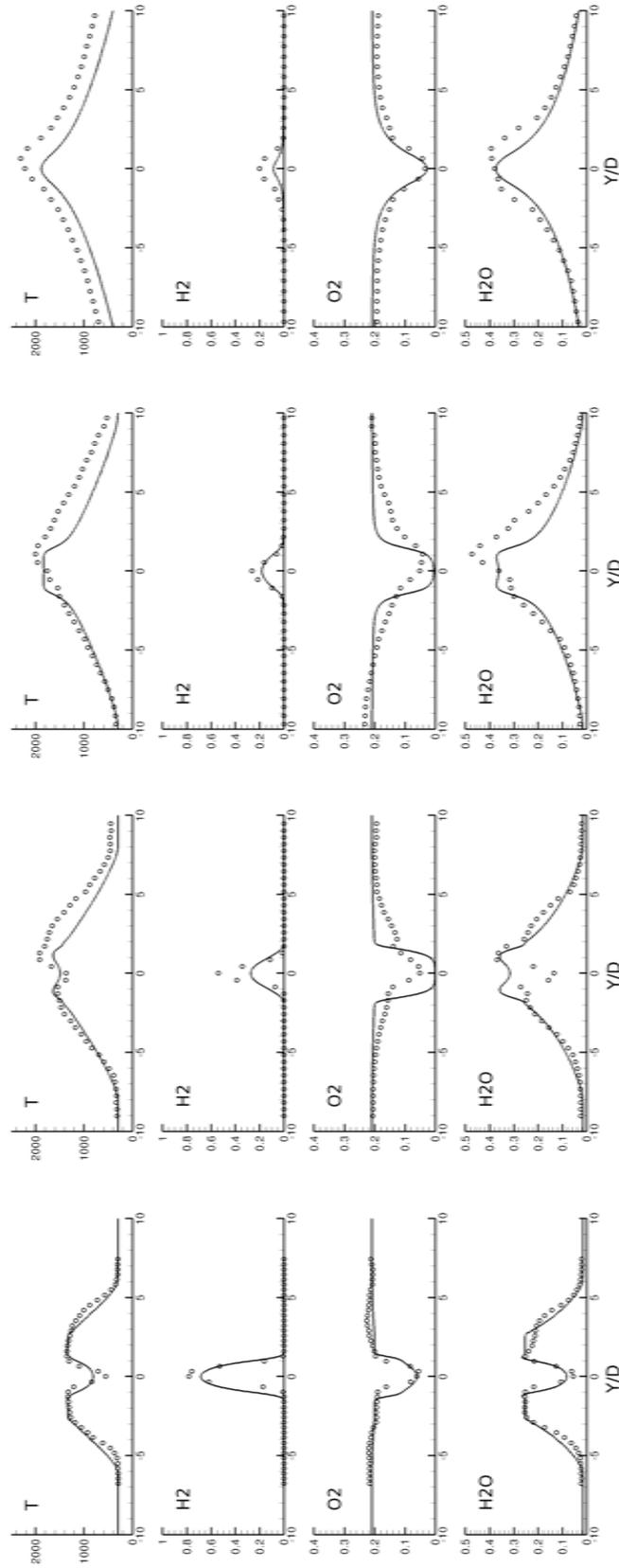


FIGURE 5.13 – Résultats d'un calcul stationnaire UPaSR à $X/D=10.8$ (gauche), $X/D=21.5$, $X/D=32.3$ et $X/D=43.1$ (droite)

Cela en plus des difficultés de représentation du mélange avec l'approche RANS utilisée peuvent expliquer les différences observées. Les profils de fractions molaires d'hydrogène, d'oxygène et d'eau sont malgré tout bien restitués par le calcul.

5.5 Conclusions

Le cas d'une flamme jet supersonique détachée a été utilisé pour la validation du modèle UPaSR.

Dans un premier temps, une étude de sensibilité a été effectuée afin de déterminer les paramètres influents et leurs effets sur l'auto-allumage. La prise en compte de la tuyère externe, permettant de débiter l'air vicié, apparaît alors être de premier ordre. La géométrie interne provoque une distribution hétérogène de la pression dans le plan de sortie de la tuyère. Celle-ci apparaît d'ailleurs légèrement inférieure à la valeur indiquée par Cheng et al. [20] et elle détermine la structure du jet. La prise en compte d'un schéma cinétique permettant de décrire la distance d'auto-allumage et la température de fin de combustion correctement est également primordiale. À ce titre, le schéma réduit de Jachimowski à 9 espèces et 19 réaction semble assez bien approprié. Les fluctuations de température générées par le brûleur en sortie de tuyère sont relativement élevées. Une modélisation spécifique pour les prendre en compte est proposée. Les résultats correspondants sont faiblement impactés. Cela est notamment dû à une sous-estimation globale dans la couche de mélange du niveau de ces fluctuations par l'approche utilisée. Des efforts de modélisation supplémentaires doivent être déployés spécifiquement pour une fermeture plus fine des termes de l'équation de transport de la variance de température et de son taux de dissipation. Enfin, les paramètres du modèle UPaSR sont étudiés. Dans les conditions d'écoulement de la flamme de Cheng, où l'auto-allumage est principalement conditionné par les effets compressibles, l'approche UPaSR n'apporte que peu ou pas de modifications notables sur les résultats numériques obtenus par rapport à l'approche quasi-laminaire.

Dans un deuxième temps, une étude de la structure de la flamme, pour un jeu de constante UPaSR donné, a été conduite. L'auto-allumage est fortement influencé par les conditions de pression, alternativement élevée dans les cellules de choc et plus faible dans les zones de détente. Une structure, semblable à de l'auto-allumage par emballement thermique, est initiée dans la zone d'induction, juste après laquelle se localise la zone principale de dégagement de chaleur. Celle-ci est semblable à une structure de flamme de prémélange stabilisée par un choc à $X/D=18$.

Chapitre 6

Simulations instationnaires de la flamme jet de Cheng

Table des matières

6.1	Simulation instationnaire 2D axisymétrique de la flamme jet de Cheng	90
6.1.1	Aspect numérique	90
6.1.2	Discussion	91
6.2	Simulation aux Grandes Échelles de la flamme jet de Cheng .	98
6.2.1	Aspect numérique	98
6.2.2	Résultats et discussion	99
6.3	Conclusion	110

L'objectif du sixième chapitre est d'étudier l'impact des effets instationnaires, notamment les fluctuations de température et de composition, sur l'auto-allumage, à l'aide de la fermeture UPaSR. Pour cela, le cas d'étude du chapitre précédent est analysé par une approche instationnaire. Dans un premier temps, la structure qualitative de la flamme jet détachée est mise en avant. Pour cela, une étude bidimensionnelle axisymétrique est considérée afin d'optimiser la résolution par rapport au coût de calcul. Dans un deuxième temps, des résultats quantitatifs sont établis et comparés aux différents résultats expérimentaux. À cet effet, une Simulation aux Grandes Échelles est menée.

6.1 Simulation instationnaire 2D axisymétrique de la flamme jet de Cheng

Le chapitre 5 s'est attaché à l'étude stationnaire de la flamme jet de Cheng. Afin de caractériser les spécificités instationnaires, notamment sur la stabilisation de la flamme détachée, une étude qualitative et préliminaire est entreprise. Afin d'en atténuer les coûts, une approche bidimensionnelle axisymétrique est retenue.

6.1.1 Aspect numérique

Le maillage est effectué à l'aide du mailleur GMSH. Il est composé de cellules rectangulaires dans la zone centrale du jet et de cellules triangulaires en périphérie (voir Fig. 6.1). Le nombre total d'éléments est reporté dans le tableau 6.1.

	Cellules internes	Faces
Total	516 568	985 391

TABLE 6.1 – *Détail du maillage employé pour l'étude instationnaire axisymétrique*

Etant donné la symétrie du brûleur et l'approche retenue, le maillage est bidimensionnel axisymétrique. Il conserve une large zone tampon autour du jet afin de faciliter le traitement des conditions limites ouvertes avec le code CEDRE.

La viscosité turbulente est calculée avec le modèle de Smagorinsky (présenté dans la partie (1.4.2)) où la constante C_s est fixée à 0.18. Le tenseur de Reynolds ainsi que les flux turbulents sont fermés à l'aide des corrélations détaillées dans la partie (1.4). Les flux non-visqueux sont estimés à l'aide du schéma de flux HLLC en conjonction avec un limiteur de Van Leer. La résolution spatiale est d'ordre 2. L'intégration temporelle, obtenue à l'aide d'un schéma explicite Runge-Kutta en respectant le critère CFL, est elle aussi d'ordre 2.

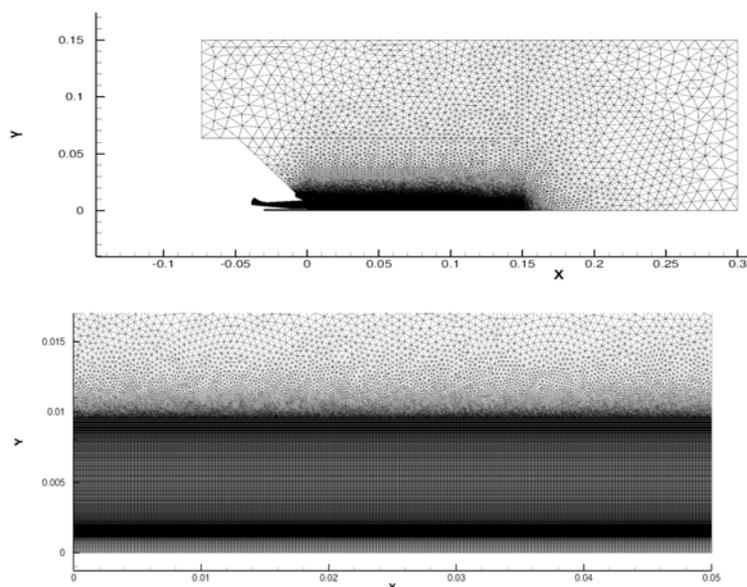


FIGURE 6.1 – Maillage utilisé pour l'étude instationnaire en 2D axisymétrique

Enfin, le pas de temps utilisé est de 4.0×10^{-9} s. Le domaine physique est découpé en 64 domaines répartis sur 32 coeurs Nehalem bi-processeurs cadencés à 2.80 GHz.

Les conditions limites sont définies en détail dans le chapitre précédent (tableau (5.3)). Aucun traitement instationnaire particulier n'est appliqué aux conditions limites. Ce choix est motivé notamment par l'absence de données expérimentales sur le spectre de la turbulence dans le plan de sortie de la tuyère. Par ailleurs, pour un écoulement supersonique tel que celui considéré ici, l'intensité de la turbulence demeure assez faible et d'impact limité sur le développement de la couche de mélange. Cependant, une étude approfondie serait nécessaire pour conclure plus définitivement sur ce point particulier.

Les paramètres du modèle UPaSR retenus pour cette simulation sont ceux du cas (Cas2b) définis, au chapitre 5, dans le tableau 5.7.

6.1.2 Discussion

Limitations de l'approche

L'approche axisymétrique bidimensionnelle ne permet pas de décrire la cascade d'énergie de la turbulence de manière satisfaisante. La limitation apparaît notamment lors de la transition vers un écoulement tridimensionnel. Comme le prédit la théorie de la stabilité linéaire (décrite en partie dans la partie (4.1.3)), le mode d'instabilité bidimensionnel est cependant le plus efficace pour les couches de mélange à faible nombre de Mach convectif. L'approche semble donc en partie appropriée pour la description des premières étapes du développement de la couche de mélange hydrogène/air vicié.

Elle présente par dessus tout l'avantage d'être beaucoup moins coûteuse en temps de calcul qu'une simulation aux grandes échelles. La zone d'intérêt peut, dans ce cas, être suffisamment résolue pour obtenir une simulation de très bonne qualité. La figure 6.2 représente le champ de μ_t/μ .

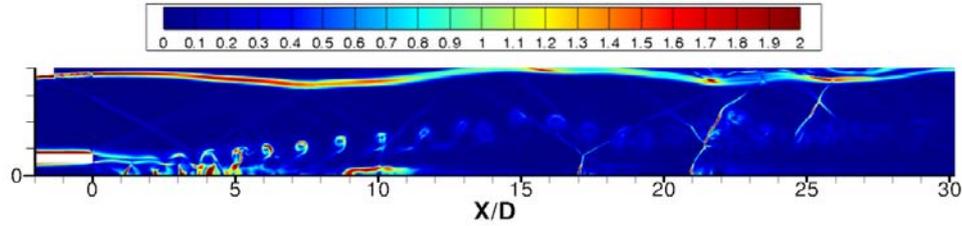


FIGURE 6.2 – Champ instantané de μ_t/μ dans le cas du calcul bidimensionnel

La couche de mélange qui se développe donne naissance à des structures tourbillonnaires clairement visibles sur la figure. Le maillage est tel que la viscosité turbulente et la viscosité moléculaire sont du même ordre de grandeur dans la majeure partie de la zone où se déroule l'auto-allumage. Une autre limite existe : les termes de transport moléculaire sont décrits simplement dans CEDRE. D'une part les effets Soret et baro-diffusion sont négligés, d'autre part les vitesses de diffusion des espèces sont décrites via la viscosité cinématique du mélange et paramétré par un nombre de Schmidt. Ainsi, les diffusivités binaires d'une espèce par rapport à une autre ne sont pas prises en compte.

Dans le cadre de simulations aux grandes échelles pour lesquelles les phénomènes de transport moléculaire peuvent conditionner la structure de la flamme, par exemple pour une flamme de diffusion, un effort particulier devrait être accompli pour décrire plus finement ces phénomènes.

Structure qualitative de la flamme

Un champ instantané du taux de dégagement de chaleur avec les isolignes de pression est donné dans la figure 6.3. La structure de la flamme est similaire à celle décrite au chapitre précédent, avec l'existence de quatre zones distinctes. Les zones d'induction et d'auto-allumage se localisent en moyenne aux mêmes endroits. Cependant la couche de mélange hydrogène/air semble être plus épaisse, notamment à cause de la formation de tourbillons. Dans la zone d'auto-allumage, le dégagement de chaleur est localisé en périphérie des tourbillons. La flamme se positionne en moyenne autour de $X/D=18$, de manière identique à l'étude stationnaire précédente. Une des principales différences observée par rapport aux calculs précédents est associée à la dynamique instationnaire d'un choc, positionné en $X/D=21$ sur la figure 6.3, qui provoque l'inflammation du mélange hydrogène/air. Cependant, la dynamique correspondante est largement influencée par le développement de la couche de mélange supérieure, qui est quant à lui tridimensionnel.

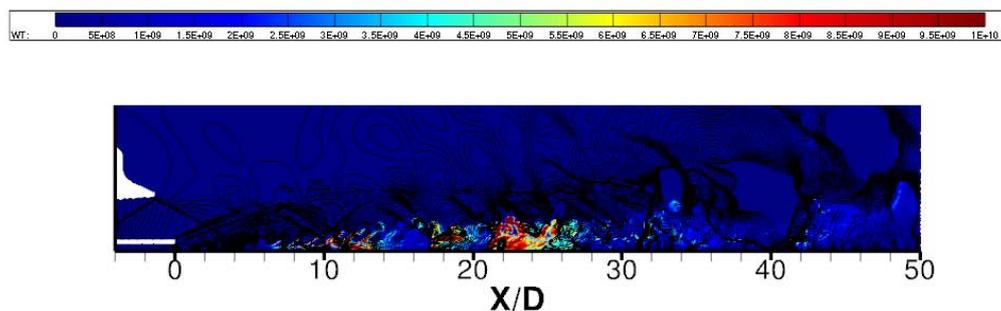


FIGURE 6.3 – Champ instantané de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa]

Un champ instantané de fraction volumique de structures fines γ^* est reporté sur la figure 6.4. De manière assez semblable avec l'étude stationnaire précédente, les zones de fort taux de dégagement de chaleur correspondent aux zones où γ^* varie entre 0.90 et 1. Cela indique que le processus instationnaire de combustion est principalement limité par les effets cinétiques. Les zones de structures fines, à l'image du champ du taux de dégagement de chaleur, sont assez réparties. Les valeurs de γ^* atteignent localement 0.7.

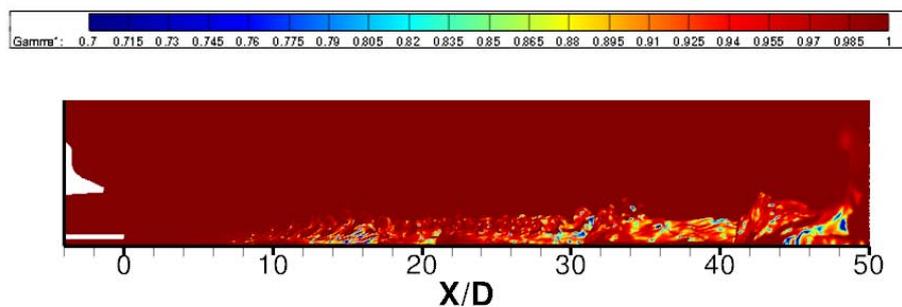


FIGURE 6.4 – Champ instantané de fraction volumique de structures fines γ^* [-]

La figure 6.5 représente les champs instantanés de dégagement de chaleur (haut) et de température (bas). Le détail de la zone d'auto-allumage est donné dans la figure 6.6.

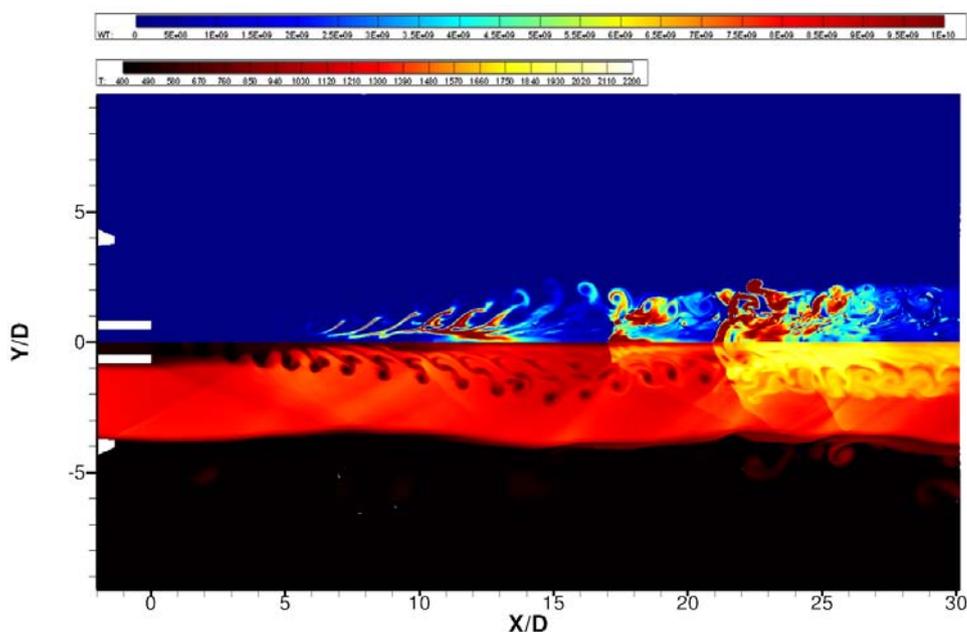


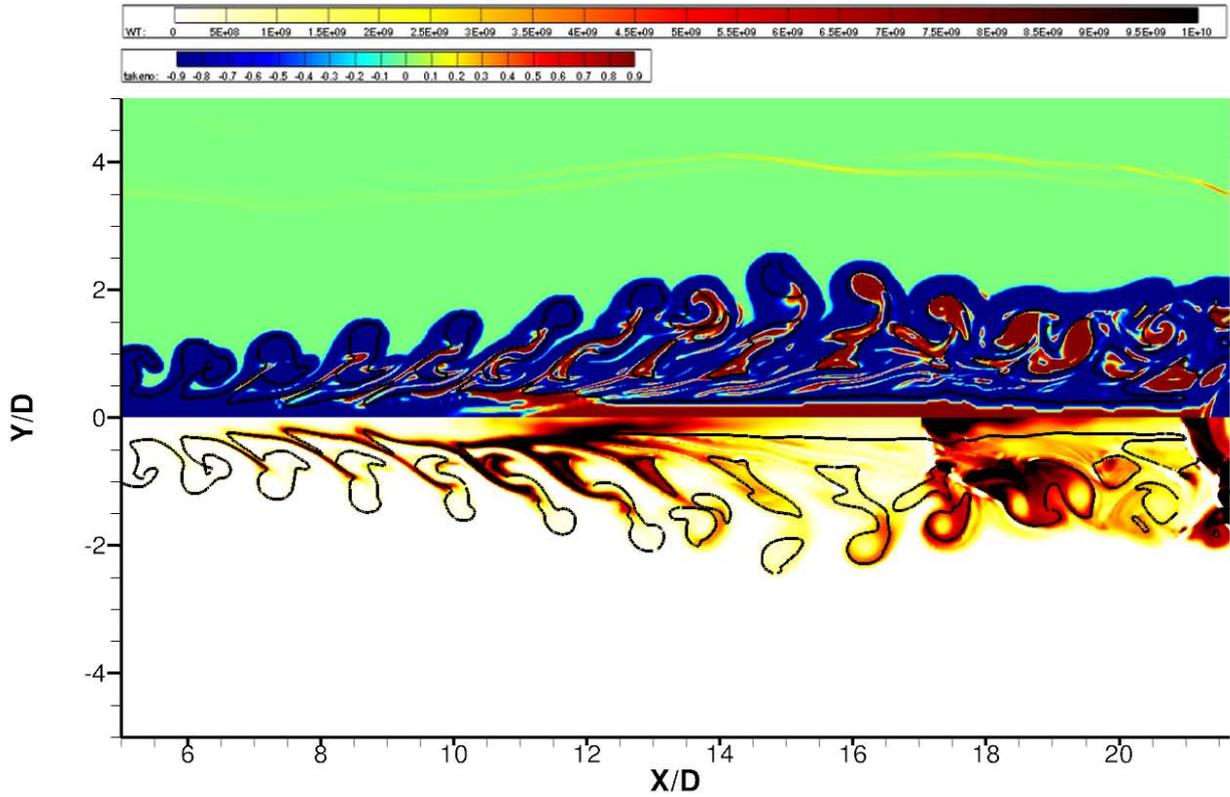
FIGURE 6.5 – Champs instantanés de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] (haut) et de température [K] (bas)

La figure 6.6(a) correspond au champ instantané de critère Takeno (haut) et de dégagement de chaleur (bas) avec l'iso-ligne stoechiométrique représentée en noir. Dans la zone d'auto-allumage ($6 < X/D < 17$), le champ de critère Takeno indique une structure majoritaire de diffusion (couleur bleue) à la périphérie des tourbillons entre l'hydrogène et l'oxygène. Toutefois, l'enroulement des tourbillons crée des structures allongées où les réactifs sont mélangés (couleur rouge pour le critère Takeno) et chauds. Cette interface, localisée entre l'air

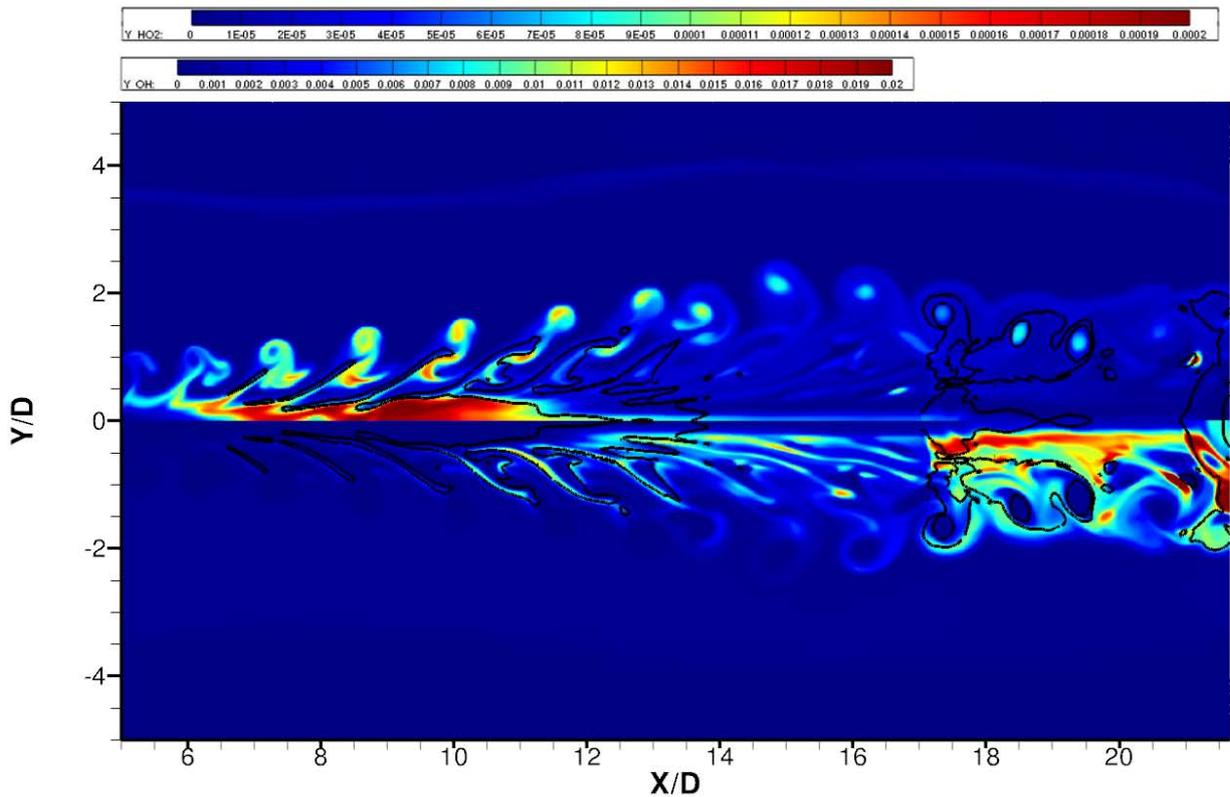
vicié chaud et l'hydrogène froid, est le siège du dégagement de chaleur. L'isoligne de $\phi = 1$ indique par ailleurs que ce phénomène se déroule à la stoechiométrie. Une partie du dégagement de chaleur se déroule également en périphérie des tourbillons d'hydrogène formés dans la couche de mélange. Le critère de Takeno et l'isoligne stoechiométrique indiquent dans ce cas une structure de flamme de diffusion. Plus loin dans l'écoulement ($X/D > 17$), un choc provoque localement une augmentation de la température et donc une auto-inflammation. Au coeur du jet, sur l'axe, l'écoulement est prémélangé et plutôt riche. Le dégagement de chaleur y est important. Quant aux tourbillons d'hydrogène convectés par l'écoulement, le choc a pour effet d'y intensifier la combustion qui se produit en leur périphérie.

La figure 6.6(b) correspond au champ instantané de Y_{HO_2} (haut) et Y_{OH} (bas) avec l'isoligne $\dot{\omega}_T = 5 \times 10^9 \text{ W.m}^{-3}$ représentée en noir. L'auto-allumage par emballement thermique se caractérise par un pic de production de HO_2 , comme il l'a été discuté précédemment dans la partie 4.2. Ici, le pic de production de HO_2 se localise sur l'axe du jet en amont des premières zones de dégagement de chaleur. Il est par ailleurs produit au sein des tourbillons d'hydrogène et se trouve toujours du côté froid de l'écoulement. Le radical OH est quant à lui localisé dans les zones de dégagement de chaleur. Il est par ailleurs souvent utilisé comme marqueur pour localiser expérimentalement les fronts de flammes. Dans notre cas, il est localisé aux interfaces hydrogène/air identifiées auparavant, ainsi que dans la zone principale de dégagement de chaleur située après le choc de stabilisation.

Des résultats plus quantitatifs sont aussi fournis à titre indicatif dans les figures 6.7 et 6.8. Les profils moyens et RMS de température et de fraction molaire des espèces majoritaires sont comparés aux profils expérimentaux. Ces résultats qui sont obtenus par le biais d'une simulation numérique bidimensionnelle ne sont pas discutés plus en détail.



(a) Champ instantané de critère Takeno (-) (haut) et dégagement de chaleur ($W.m^{-3}$) (bas) avec isoligne $\phi = 1$



(b) Champ instantané de Y_{HO_2} (-) (haut) et Y_{OH} (-) (bas) avec isoligne $\dot{\omega}_T = 5 \times 10^9 W.m^{-3}$

FIGURE 6.6 – Mécanismes de stabilisation de flamme de Cheng

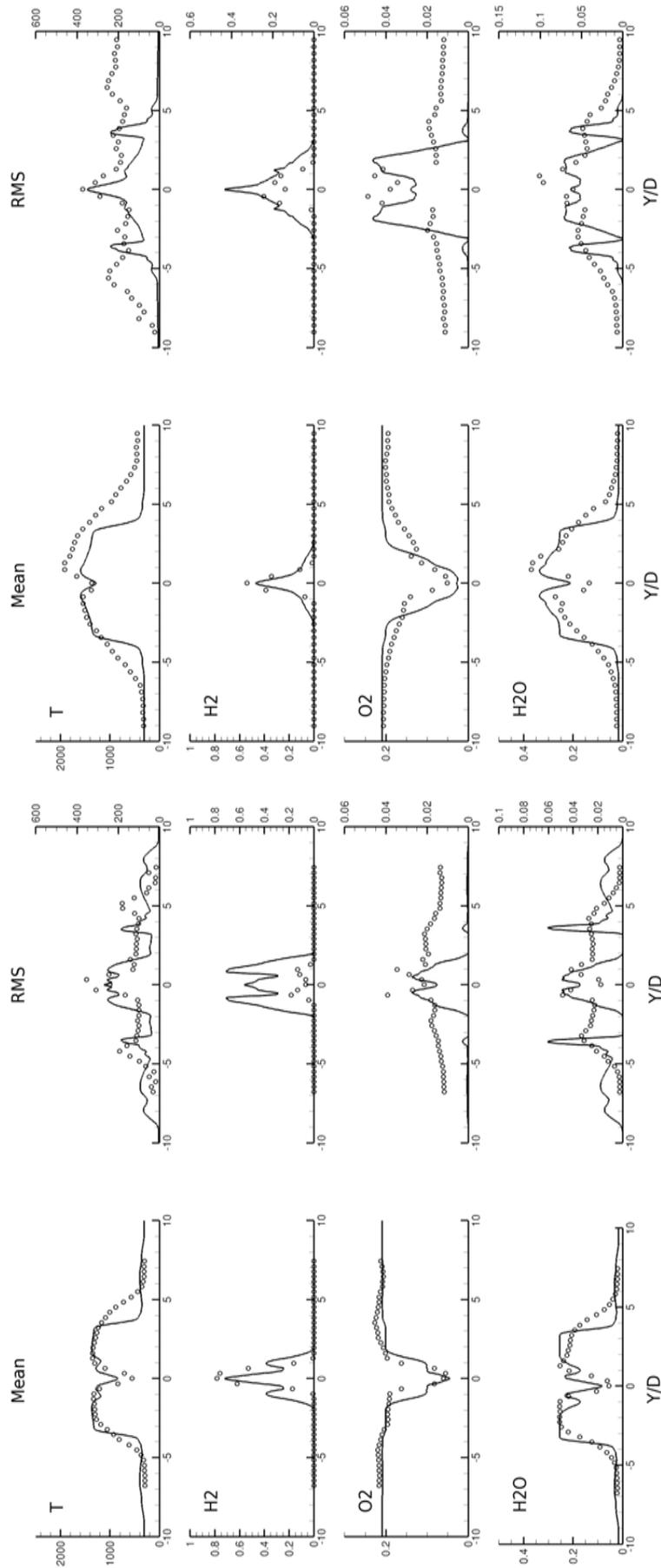


FIGURE 6.7 – Résultats moyens d'un calcul instationnaire UPaSR à $X/D=10.8$ (gauche) et $X/D=21.5$ (droite)

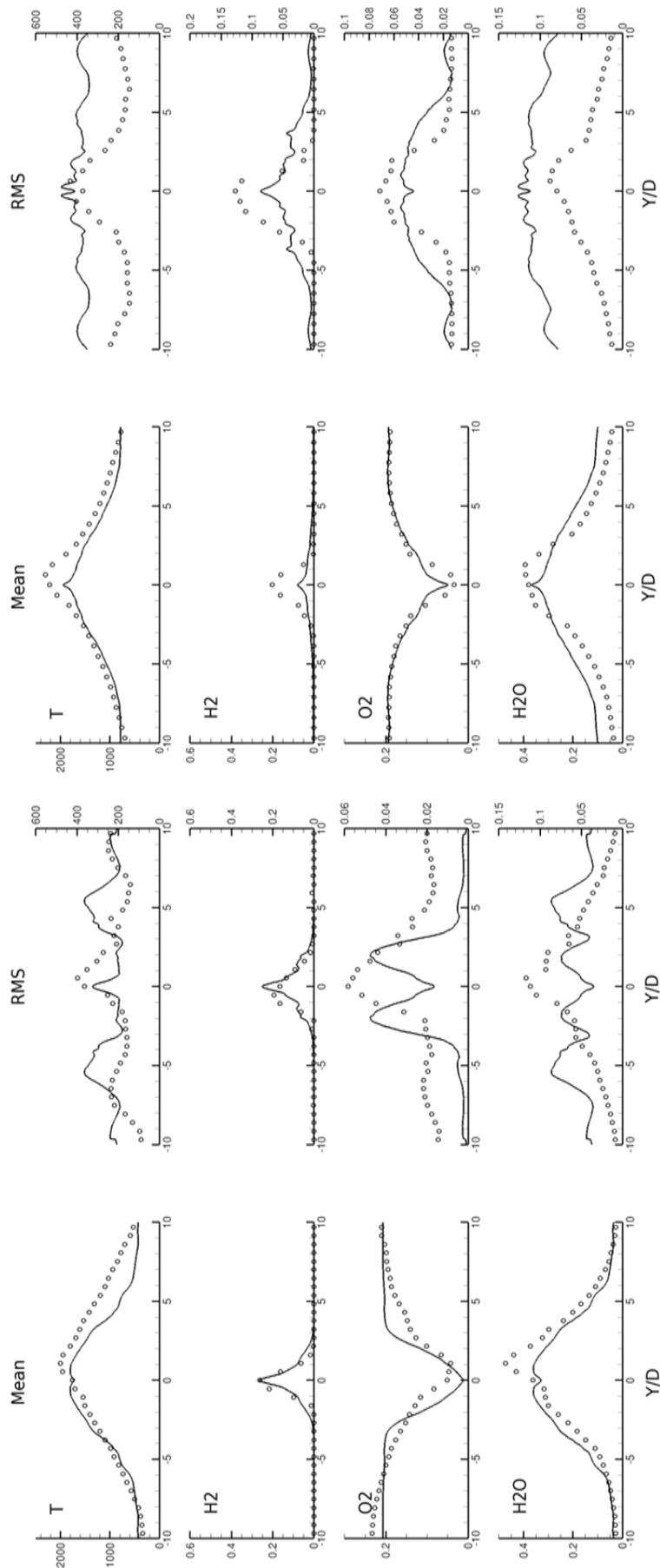


FIGURE 6.8 — Résultats moyens d'un calcul instationnaire UPaSR à $X/D=92.3$ (gauche) et $X/D=43.1$ (droite)

6.2 Simulation aux Grandes Échelles de la flamme jet de Cheng

L'étude instationnaire axisymétrique bidimensionnelle précédente est prolongée et approfondie dans cette partie à l'aide d'une approche de Simulation aux Grandes Échelles tridimensionnelle.

6.2.1 Aspect numérique

Le maillage est effectué à l'aide du mailleur Star-ccm+. Il est composé de cellules hexaédriques au coeur de l'écoulement et de couches de prismes aux parois (voir Fig. 6.9 et Fig. 6.10). Le nombre total d'éléments est donné dans le tableau 6.2. À titre comparatif, les maillages utilisés dans les études précédentes menées par Dauplain et al. [165] et Boivin et al. [168] comportaient 807 520 et 6 600 000 cellules, respectivement.

	Cellules internes	Faces
Total	30 965 803	93 626 430

TABLE 6.2 – Détail du maillage employé pour la LES

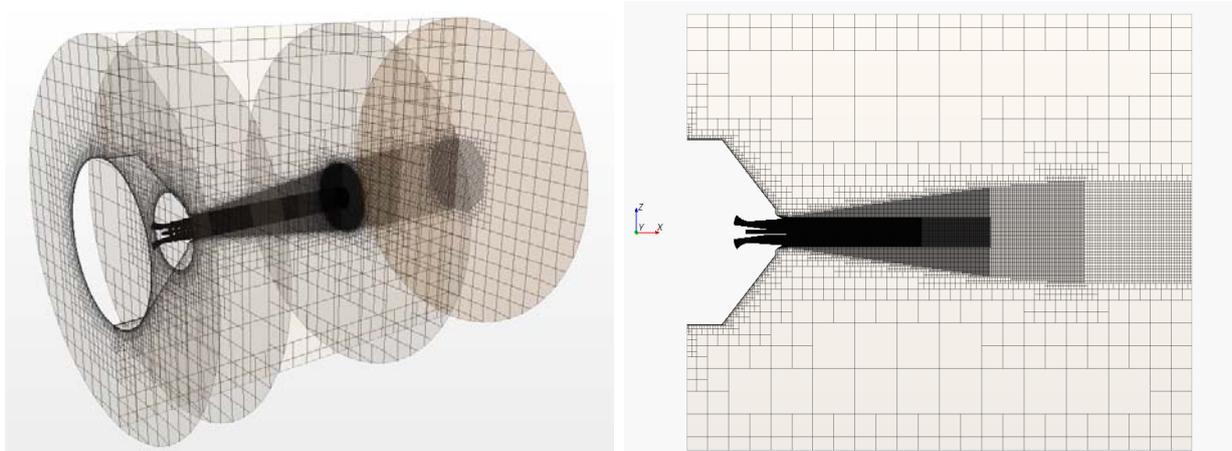


FIGURE 6.9 – Vue générale du maillage

La taille caractéristique de maille à la sortie de la tuyère, au coeur du jet, est de 2×10^{-4} m. La couche de prisme répartie sur les parois du brûleur est composée de cinq cellules réparties sur une épaisseur de 1×10^{-4} m. La zone d'intérêt présente alors un niveau de résolution élevé comme le représente le champ de μ_t/μ dans la figure 6.11. La géométrie complète du dispositif est considérée. Le maillage possède une large zone tampon autour du jet afin de traiter au mieux les conditions limites ouvertes avec le code CEDRE.

La viscosité turbulente est calculée avec le modèle de Smagorinsky (présenté dans la partie (1.4.2)) avec une constante C_s fixée à 0.18. Le tenseur de Reynolds ainsi que les flux turbulents sont fermés à l'aide des corrélations détaillées dans la partie (1.4). Les flux non-visqueux sont estimés à l'aide du schéma de flux HLLC en conjonction avec un limiteur Van Leer. La résolution spatiale est d'ordre 2. L'intégration temporelle, obtenue à l'aide

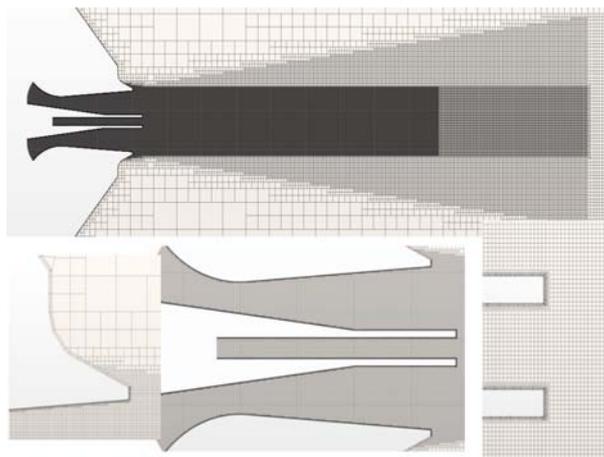
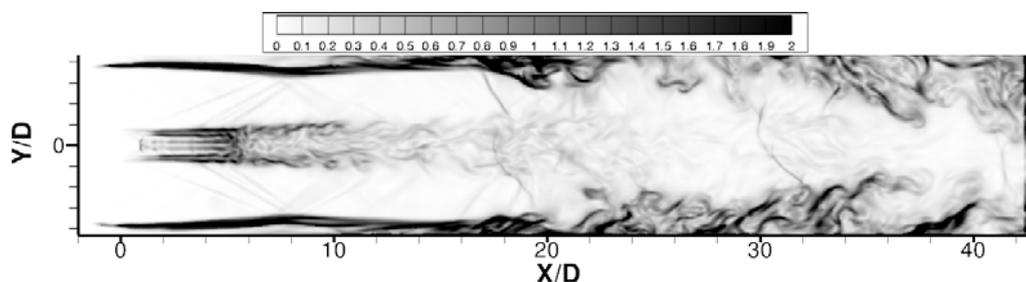


FIGURE 6.10 – Vue détaillée du maillage

d'un schéma explicite Runge-Kutta en respectant le critère CFL, est d'ordre 2. Enfin, le pas de temps utilisé est de 5.0×10^{-10} s. Le domaine physique est découpé en 480 domaines répartis sur 480 coeurs Westmere bi-processeurs cadencés à 3.07 GHz.

Les conditions limites sont définies en détail dans le chapitre 5 précédent (tableau (5.3)). De manière similaire à l'étude bidimensionnelle, on notera qu'aucun traitement instationnaire particulier n'est appliqué aux conditions limites.

Les paramètres du modèle UPaSR retenus pour cette simulation sont celles du cas (Cas2b) définis, au chapitre 5, dans le tableau 5.7.

FIGURE 6.11 – Champ instantané de μ_t/μ dans le cas du calcul LES

6.2.2 Résultats et discussion

Structure de flamme

La représentation instantanée de la structure de la flamme est reportée sur la figure 6.12. Dans la figure supérieure, le champ instantané de température et une iso-surface de Y_{H_2} (en blanc) sont donnés. Dans la figure inférieure, une iso-surface de critère Q (en blanc) et une iso-surface de Y_{OH} colorée par la température sont représentées. La couche de mélange extérieure, séparant le jet d'air vicié et l'air ambiant, se développe de manière assez différente comparée au cas bidimensionnel axisymétrique. La transition d'un mode de déstabilisation bidimensionnel vers une couche turbulente développée complètement tridimensionnelle est très rapide.

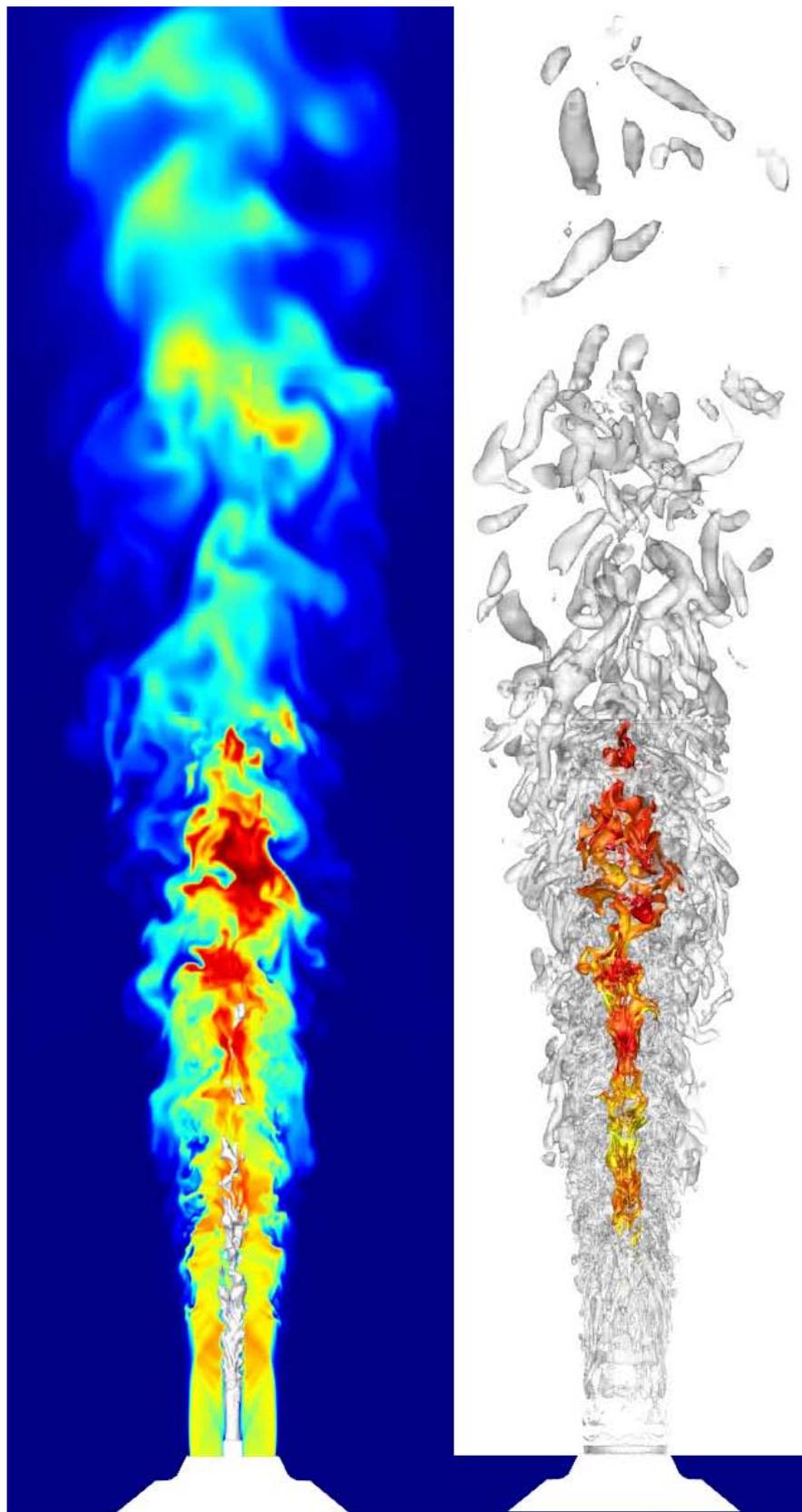


FIGURE 6.12 – Structure de la flamme. Haut : champ instantané de température et iso-surface de critère Q et iso-surface de Y_{OH} colorée par la température (bas)

Le développement de la couche de mélange intérieure, séparant le jet d'hydrogène avec le jet d'air vicié, présente plus de similarités avec le cas bidimensionnel axisymétrique, le mode de déstabilisation majeur étant fortement bidimensionnel. La flamme jet est détachée et elle se stabilise à une vingtaine de diamètre des lèvres de l'injecteur.

La répartition instantanée du taux de dégagement de chaleur est présentée dans la figure 6.13. Les iso-lignes de pression [50-150 kPa] sont également représentées, afin de mettre en évidence la forte influence des phénomènes de compressibilité (chocs, détente) sur le dégagement de chaleur. La structure de la flamme est très similaire à celle reportée précédemment dans l'étude stationnaire (5.4) et instationnaire bidimensionnelle (6.1). Quatre zones distinctes sont très clairement délimitées. La zone d'induction ($0 < X/D < 10$), la zone d'auto-allumage ($10 < X/D < 18$), la zone de stabilisation ($18 < X/D < 26$) où la flamme se positionne au pied d'une cellule de choc et enfin une dernière zone ($30 < X/D < 34$) de fin de combustion.

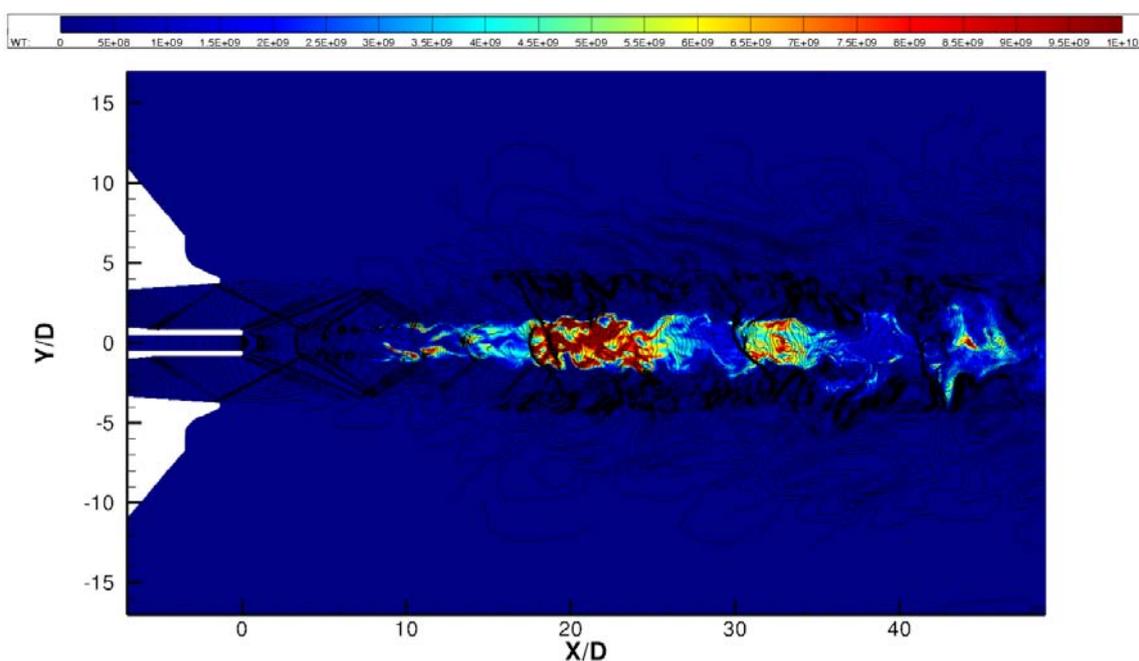


FIGURE 6.13 – Champ instantané de dégagement de chaleur [$W.m^{-3}$] et isolignes de pression [50-150 kPa] issus du calcul LES

Les zones de fort taux de dégagement de chaleur se produisent dans des zones micromélangées à l'échelle de la maille (voir fig. 6.14), où les phénomènes cinétiques prédominent. Ces zones correspondent au cas où $\gamma^* \sim 1$ et ainsi l'apport de la fermeture UPaSR, dans les conditions étudiées, par rapport à une approche quasi-laminaire peut s'avérer limité. La zone d'auto-allumage est caractérisée par un pic de formation de radical HO_2 en amont et localisé au coeur du jet. La stabilisation de la flamme est aussi largement affectée par la présence d'une cellule de choc située à $X/D \sim 20$. Celle-ci a pour effet majeur de conduire à l'inflammation spontanée du mélange dans le coeur du jet par augmentation de la température au travers du choc.

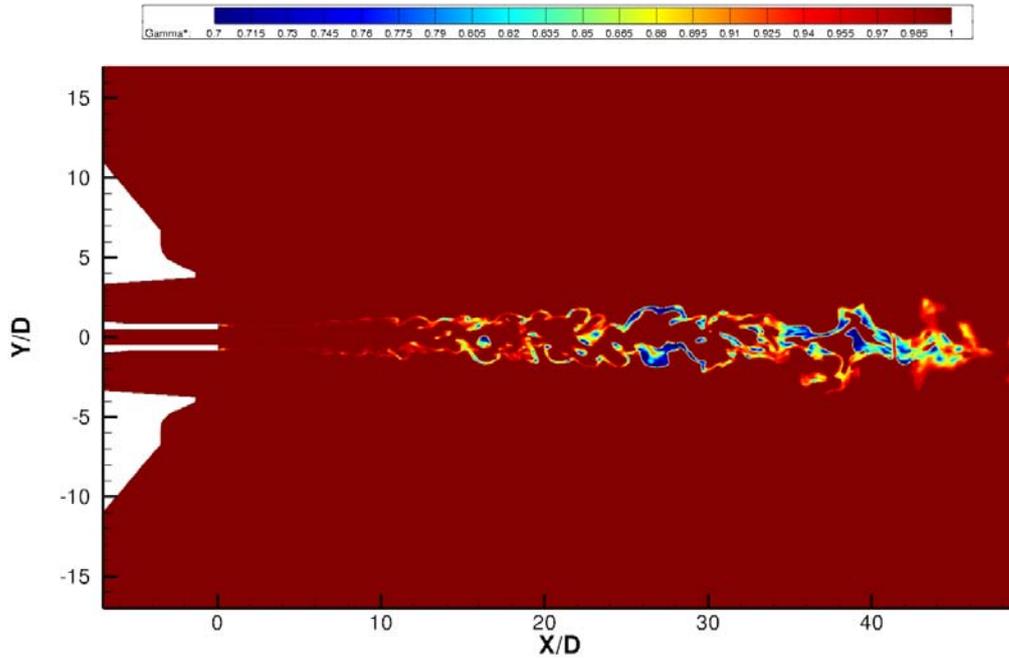


FIGURE 6.14 – Champ instantané de fraction volumique de structures fines γ^* [-] issu du calcul LES

Résultats quantitatifs

Les résultats de la Simulation aux Grandes Échelles sont donnés dans les figures 6.15, 6.16 et 6.17. Les profils moyens et RMS (basés sur les fluctuations résolues) de température et de fraction molaire des espèces majoritaires sont comparés aux profils expérimentaux sur l'axe de symétrie (Fig. 6.15).

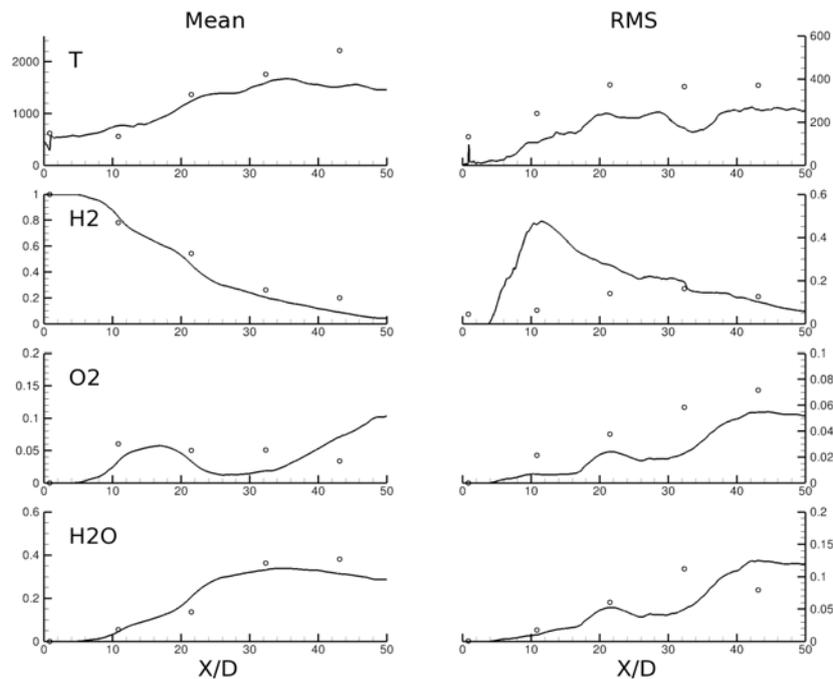


FIGURE 6.15 – Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR sur l'axe de symétrie

Le profil de montée en température moyenne issu de la simulation est en très bon accord avec celui observé expérimentalement. Le délai d'auto-allumage est bien restitué, cependant la température de fin de combustion semble être sous-estimée. Les profils des fractions molaires moyennes d'hydrogène et d'eau sont également en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Seule la fraction molaire d'oxygène est mal estimée, notamment en champ lointain. Les profils RMS sont en bon accord général avec les résultats expérimentaux, excepté pour l'hydrogène pour lequel les fluctuations résolues semblent être surévaluées.

Les profils moyens et RMS (basés sur les fluctuations résolues) de température et de fraction molaire des espèces majoritaires sont également comparés aux profils expérimentaux dans quatre sections transversales (Fig. 6.16 et 6.17).

Les résultats obtenus pour les quantités moyennes dans la première section ($X/D=10.8$) sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Le caractère légèrement asymétrique des résultats expérimentaux n'est pas reproduit. L'écoulement moyen en sortie de la tuyère semble néanmoins être bien capté par un maillage suffisamment raffiné dans cette zone et grâce à l'utilisation de conditions limites appropriées. Les quantités RMS issues de la simulation sont également comparées aux mesures expérimentales. Même si l'ordre de grandeur et la tendance des profils sont corrects, les niveaux prédits ne correspondent pas aux mesures. L'influence d'une prise en compte stationnaire des conditions limites est ici plus visible, notamment sur la température. Le niveau de fluctuations RMS de température dans le courant d'air vicié est largement sous-estimé. Le phénomène pilotant la majeure partie du dégagement de chaleur étant la présence de cellules de choc, il semblerait que la non prise en compte de ces fluctuations ne soit pas pénalisant pour avoir une distance d'auto-allumage correcte. Par ailleurs, comme dans le cas bidimensionnel discuté plus haut, les fluctuations RMS de H_2 sont largement surestimées.

Au caractère asymétrique près, les résultats numériques moyens obtenus dans la deuxième section ($X/D=21.5$) sont là encore en assez bon accord avec les résultats expérimentaux. Contrairement au cas RANS stationnaire, les profils d'hydrogène et d'oxygène sont ici bien prédits, le mélange étant mieux décrit avec l'approche LES. Dans cette section les quantités RMS sont globalement mieux restituées. L'effet des conditions limites n'est plus dominant et les quantités fluctuantes sont largement affectées par le développement des deux couches de mélange. Ainsi, le niveau des fluctuations RMS de température est en assez bon accord avec les mesures expérimentales, excepté au coeur du jet d'hydrogène. Par ailleurs, le maillage n'est pas assez raffiné en périphérie du jet pour décrire de manière satisfaisante les caractéristiques instationnaires de l'air ambiant. Ainsi, les niveaux de fluctuations RMS d'oxygène sont largement sous-estimés pour $Y/D > 5$ ou $Y/D < -5$.

Dans la section suivante ($X/D=32.3$), l'asymétrie des résultats expérimentaux restent fortement marqués. Les profils moyens issus de la simulation numérique sont en bon accord avec la borne minimale des profils asymétriques expérimentaux. Comme pour la section précédente, les profils de fluctuations RMS sont en bon accord général avec les profils expérimentaux. Les niveaux sont bien prédits, exceptés pour les RMS de température, Y_{O_2} et Y_{H_2O} au coeur du jet.

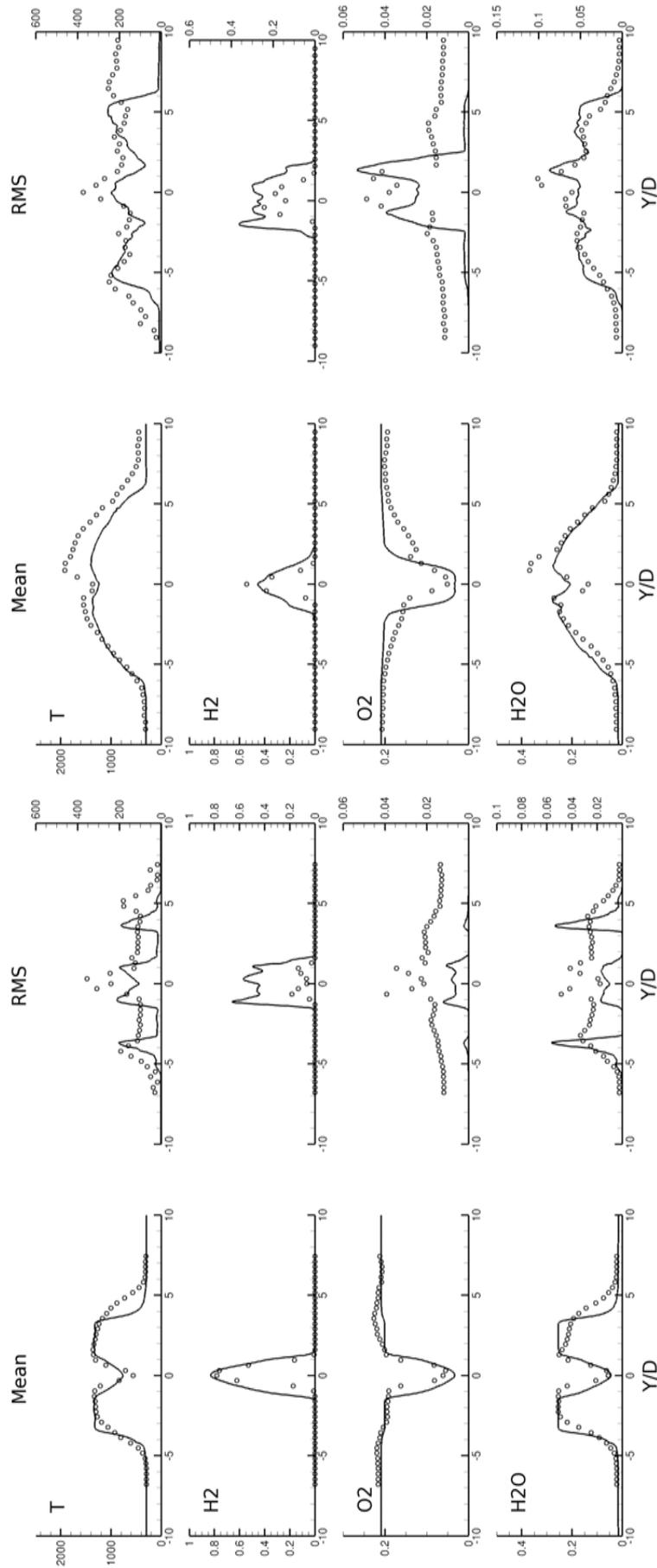


FIGURE 6.16 – Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR à $X/D=10.8$ (gauche) et $X/D=21.5$ (droite)

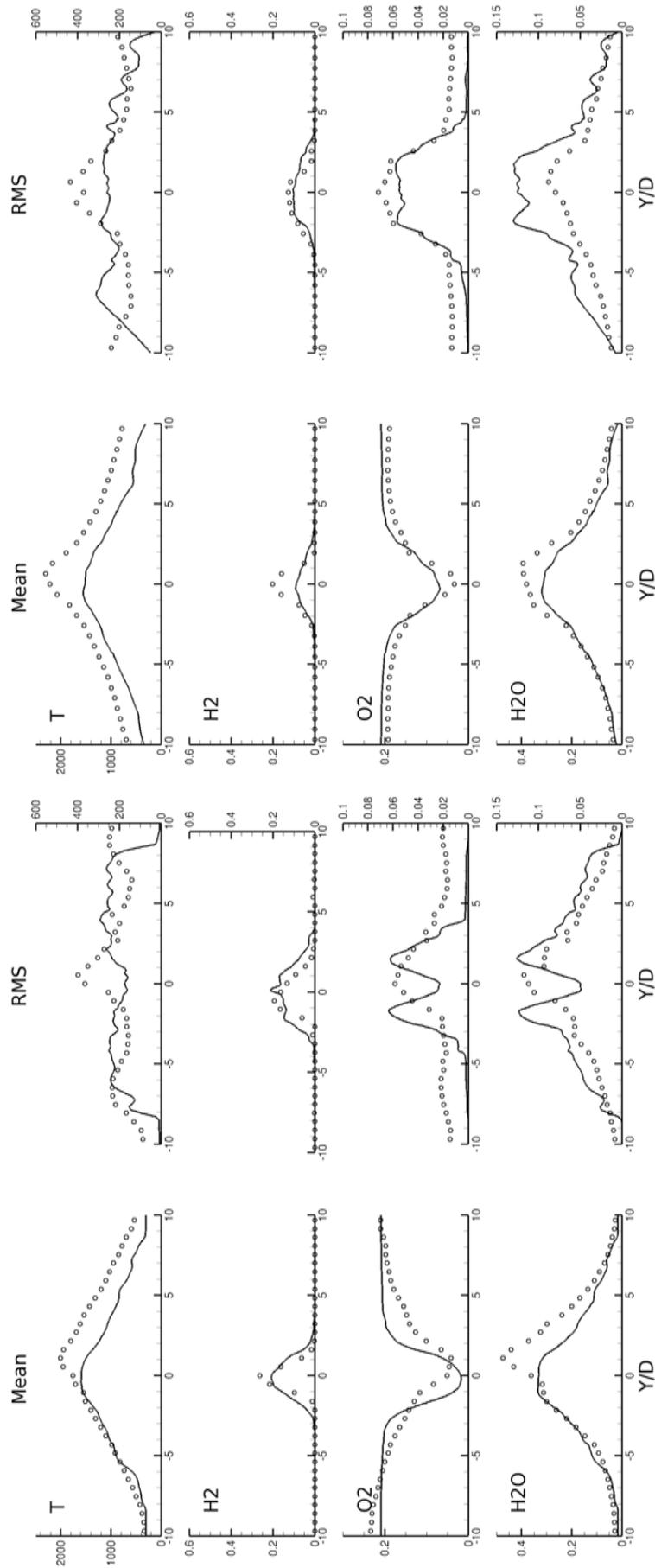


FIGURE 6.17 – Résultats moyens d'un calcul LES UPaSR à $X/D=32.3$ (gauche) et $X/D=43.1$ (droite)

Dans la dernière section ($X/D=43.1$), la simulation sous-estime la température moyenne sur tout le profil, notamment la température de flamme. Ceci peut-être dû à une présence assez faible de réactifs. Ce cas peut être expliqué par une surestimation des taux de consommation de réactifs (combustion) mais également par un mélange mal représenté (diffusion turbulente/numérique). Les fluctuations RMS issues de la simulation numérique sont en bon accord pour l'hydrogène et l'oxygène. Elles le sont également pour la température et l'eau, excepté dans le coeur du jet.

Les résultats numériques et expérimentaux sont également comparés en terme de diagrammes de dispersion pour la température et la fraction molaire des espèces majoritaires dans les figures 6.18, 6.19 et 6.20. Les diagrammes de gauche correspondent aux mesures expérimentales instantanées tandis que les diagrammes de droite correspondent aux résultats instantanés de la simulation LES sur une période de 0.17 ms. Les deux courbes limites d'équilibre (en trait plein) et de mélange pur (en pointillé) sont également représentées. Les résultats sont comparés à trois différents endroits de l'écoulement $[X/D, Y/D] = [10.8, 0.65]$, $[32.3, 1.1]$ et $[43.1, 0]$, correspondant respectivement aux trois figures 6.18, 6.19 et 6.20.

La première figure (fig. 6.18), correspond au capteur situé à $X/D = 10.8$ et $Y/D = 0.65$. Ce point se situe à la fin de la zone d'induction, i.e. au tout début de la zone d'auto-allumage, loin de la zone de flamme stabilisée. Ainsi, les points de température et de composition sont assez peu dispersés et situés très proche de la courbe de mélange, confirmant la faible prédominance des réactions chimiques. Le bon accord général observé au niveau de ces diagrammes montre que le mélange aux grandes échelles est relativement bien résolu. Des radicaux OH sont observés à richesse faible, tant d'un point de vue expérimental que numérique. Ils correspondent aux produits de combustion issus de la chambre de combustion amont du brûleur. Numériquement, une partie de ces radicaux est également due à un début de réactions chimiques.

La deuxième figure (fig. 6.19), correspond au capteur situé à $X/D = 32.3$ et $Y/D = 1.1$. Ce point est situé au coeur de la flamme stabilisée, dans une cellule de choc. Les niveaux de température et de composition se rapprochent de leur valeur d'équilibre. La gamme de valeurs de la fraction de mélange mesurées à ce point semble être plus restreinte (dans l'intervalle $[0,0.08]$) que celle calculée numériquement (dans l'intervalle $[0,0.12]$). Il en va de même pour le niveau des fluctuations, assez dispersées dans le cas expérimental. Les niveaux maximum de température (~ 3000 K à la stoechiométrie) et de vapeur d'eau (~ 0.7) mesurés expérimentalement ne sont notamment pas atteints dans la simulation LES. Cela est notamment dû à une sous-estimation des niveaux de fluctuations RMS au niveau de l'axe du jet, comme il l'a été observé dans la figure 6.17. D'autre part, ces résultats sont à pondérer par le fait que les dispersions de température et de composition sont moindres sur le "capteur" symétrique situé à $X/D = 32.3$ et $Y/D = -1.1$. Celles-ci sont d'ailleurs du même ordre de grandeur que pour les résultats présentés ici.

La troisième figure (fig. 6.20), correspond au capteur situé à $X/D = 43.1$ et $Y/D = 0$. Ce point est situé sur l'axe du jet dans le sillage des gaz brûlés. Les niveaux de température et de composition sont à leur valeur d'équilibre. Dans ce cas on observe un bon accord entre la gamme de valeurs mesurées de la fraction de mélange à ce point et celle calculée numériquement ($[0,0.1]$ et $[0,0.09]$ respectivement). La dispersion des valeurs de température et de fraction molaire d'eau est, comme dans le cas précédent, moindre que celle mesurée expérimentalement.

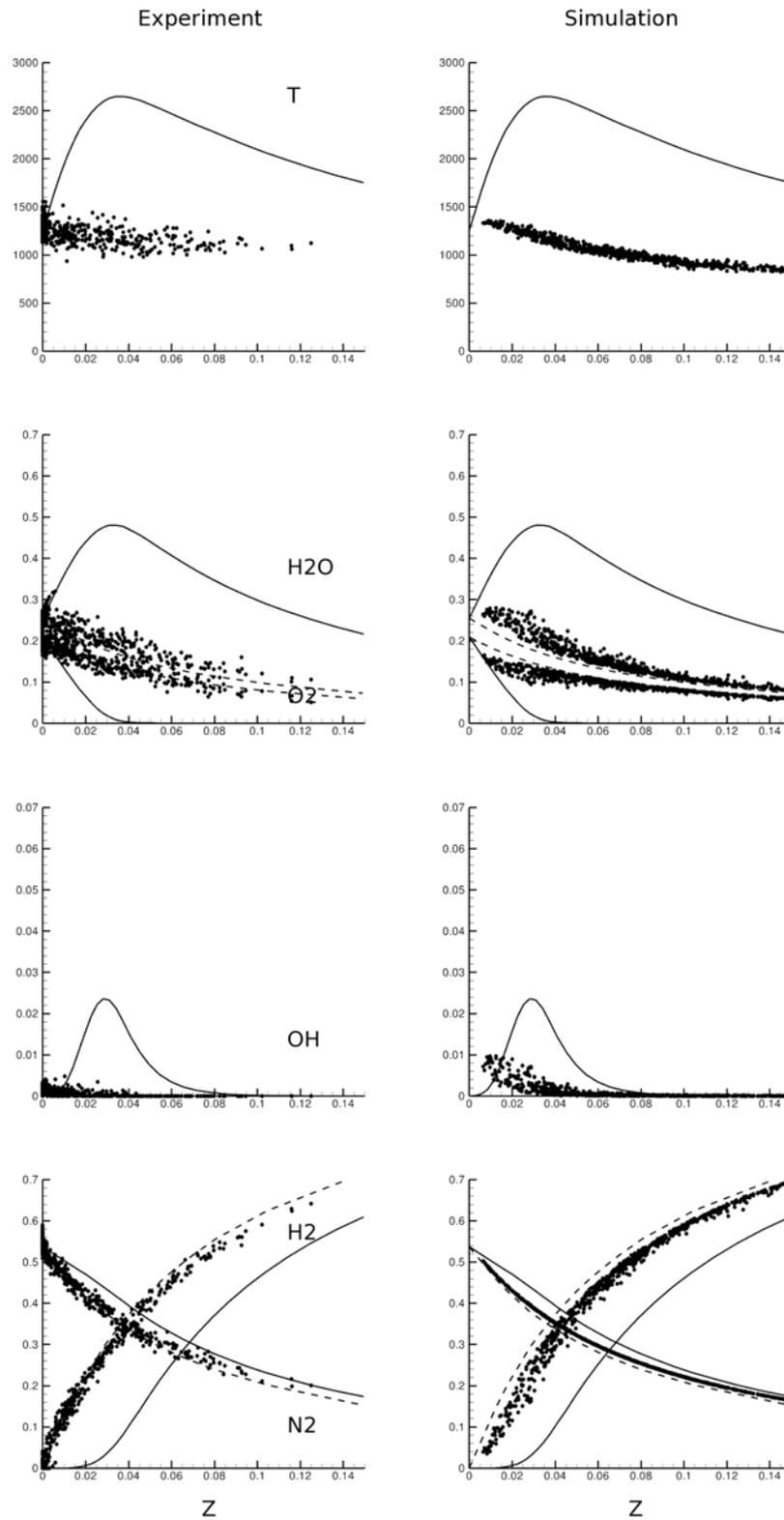


FIGURE 6.18 – Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à $X/D = 10.8$, $Y/D = 0.65$; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)

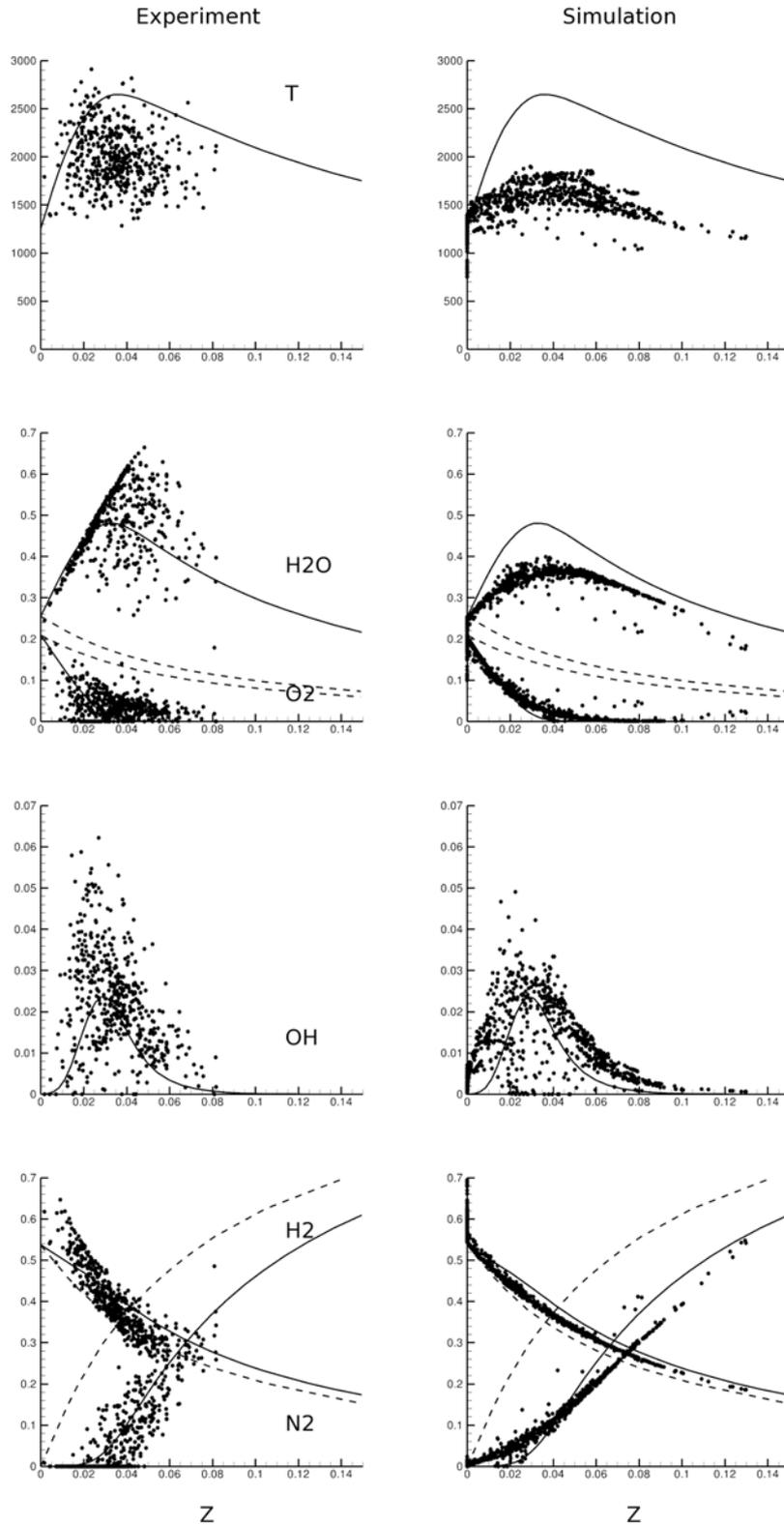


FIGURE 6.19 – Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à $X/D = 32.3$, $Y/D = 1.1$; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)

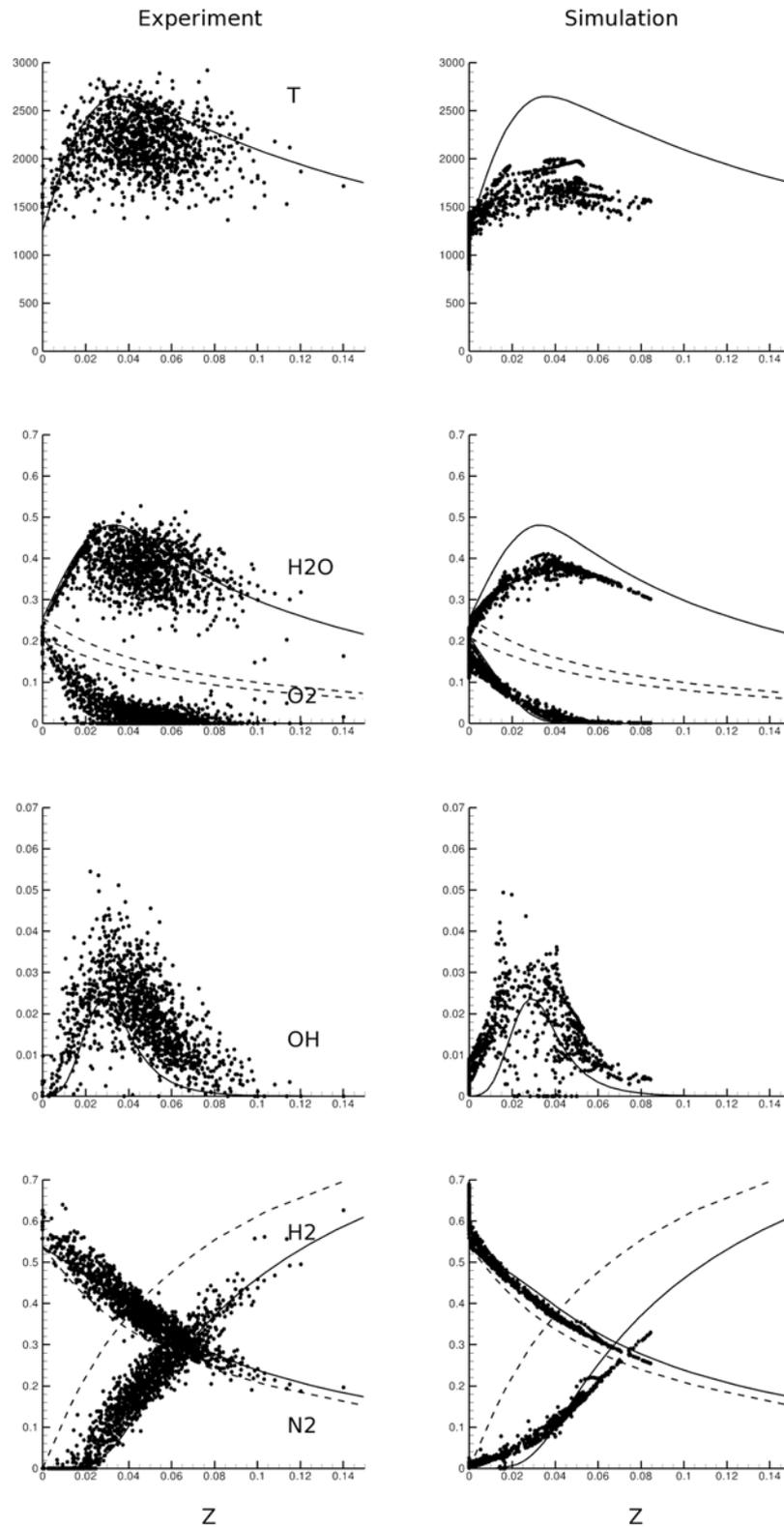


FIGURE 6.20 – Diagramme de dispersion expérimental (gauche) et numérique (droite) de température et des fractions molaires des espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O et OH en fonction de la fraction de mélange à $X/D = 43.1$, $Y/D = 0$; Courbes d'équilibre (trait plein) et de mélange pur (trait pointillé)

6.3 Conclusion

Une approche instationnaire a été mise en place pour étudier le cas d'une flamme jet supersonique détachée. L'apport principal de cette méthode est une meilleure prise en compte des structures aux grandes échelles et donc de leur influence sur le mélange. L'approche bidimensionnelle axisymétrique permet d'obtenir une description qualitative de la structure de flamme à moindre coût de calcul et avec une résolution élevée. L'approche tridimensionnelle de Simulation aux Grandes Échelles permet d'avoir des résultats quantitatifs. Elle permet également d'avoir des résultats sensiblement meilleurs par rapport au cas de l'étude stationnaire RANS, notamment en champ proche dans la zone d'auto-allumage. La forte influence des effets compressibles et de cinétique chimique finie (et finalement assez peu du mélange) explique pourquoi les résultats restent proches en utilisant une approche stationnaire RANS ou instationnaire LES.

Du point de vue de la modélisation de la combustion, le dégagement de chaleur est largement piloté par la structure du jet notamment au travers des cellules de choc. Le dégagement de chaleur se déroule dans des zones où la fraction volumique de structures fines γ^* est proche de l'unité. L'apport d'une modélisation basé sur le concept de réacteur partiellement mélange est dans ces conditions assez faible comparé au cas de l'approche quasi-laminaire.

La structure de la flamme de Cheng est dominé dans un premier temps ($0 < X/D < 20$) par l'auto-allumage (au sens d'un emballement cinétique) de la couche de mélange hydrogène / air vicié. Un pic de formation d'hydroperoxyde (HO_2) est produit puis consommé, ce qui déclenche les étapes cinétiques de branchement. Dans un deuxième temps ($X/D > 20$), la première cellule de choc du jet provoque une augmentation locale de la température suffisante pour provoquer un auto-allumage du mélange hydrogène / air du jet. Ce phénomène, source principale de dégagement de chaleur permet de stabiliser la flamme à une distance d'environ $X/D \sim 25$. Deux types d'auto-allumage semblent coexister dans cette structure de flamme et pilotent sa stabilisation.

Troisième partie

Application to Scramjet Engines

Chapitre 7

Introduction to Scramjet Engines

Table des matières

7.1	Historical review	114
7.1.1	Scramjet developments in France	114
7.1.2	Worldwide developments of scramjets	118
7.2	Scramjet physics and key challenges	120
7.2.1	Scramjet operating principle	121
7.2.2	Key technological challenges	123

In the seventh chapter, scramjet development history is briefly reviewed in France and in the World in a first part. Scramjet operating principle and main key challenges are presented in a second part.

7.1 Historical review

7.1.1 Scramjet developments in France

Scramjet propulsion technology and history have been reviewed extensively over several decades [170, 171, 172, 173]. The first studies start in the early 1900s. French engineer René Lorin introduces the concept of ejector ramjets in different articles between 1908 [1] and 1913. Actual construction and testing of viable ramjet designs occurs in the mid-1930s. Leduc designs and tests the first ramjet-powered aircraft, Leduc 010 (see Fig. 7.1), in April 1949.



FIGURE 7.1 – *Leduc 010*

France develops several operational ramjet missiles between 1950 and 1960 (Nord Véga and SE-4400) breaking several speed records. In 1962, the Stalaltex missile designed and constructed by Onera is the first ramjet-powered vehicle to reach Mach 5. During the 1980s, France expands the development of the ramjet technology with the ASMP (Air-Sol Moyenne Portée; medium-range air to surface missile) program. The ASMP missile (see Fig. 7.2) is an air-launched nuclear missile and the last-resort warning shot in the French strike force prior to a full-scale deployment of strategic nuclear weapons. During the 1990s, France

continues the research and development technology in ramjets with MPSR, Mars and the next-generation ASMP-A (Amélioré).



FIGURE 7.2 – *ASMP*

The first studies on supersonic combustion in France start in the early 1960s. Shock-induced combustion of air/hydrogen, air/kerosene or air/propane mixtures are more particularly investigated respectively by Bellet et al. in Poitiers [174] and Reingold and Serruys in Paris [175]. In the meantime, experimental diffusion flames are studied at Onera at different conditions (Mach 2.5-3), with different fuels (kerosene and hydrogen) and different geometries. Following this early work, the ESOPE program is launched in 1966, mainly to assess the possibility of supersonic combustion for an operational vehicle. ESOPE (Fig. 7.3) is a dual-mode axisymmetric scramjet concept with an annular combustor, which consists of a single geometry for both subsonic and supersonic combustion modes. Flight tests are initially envisaged at Mach 7 but are later cut off due to resources limitation in favor of the ASMP program notably. Two ground test conditions are nevertheless retained : ESOPE A to study supersonic combustion at Mach 7, and ESOPE C to study transonic combustion at Mach 3 to 7. The experiments are carried out at the S4MA test facility in Modane. The results are uneven as fully supersonic combustion has never been achieved due to the facility limitations, however the transonic combustion mode has been deeply studied. The ESOPE program ends in 1973.



FIGURE 7.3 – *ESOPE dual-mode scramjet (from [21])*

The PREPHA¹ program starts in 1992 and is initially aiming at developing a knowledge base on hydrogen-fueled dual-mode ramjet technology for SSTO (Single-Stage-To-Orbit)

1. PREPHA (Programme de Recherche sur la Propulsion Hypersonique Avancée) is the French acronym for Research and Technology Program for Advanced Hypersonic Propulsion

applications. It includes five main topics : scramjet, computational codes, materials, vehicles and test facilities. The program includes industrial partners (Aerospatiale, Dassault Aviation, SEP and Snecma) and Onera and is co-funded with the Ministry of Defense (DGA), the Ministry of Research and Technology (MENESR and CNRS), the National Space Agency (CNES) for an average 95 millions of USD (then reduced to ≈ 70 USD). A large part of the effort has been devoted to the development of new test facilities. At Onera, ATD 5 cell is added to perform connected pipe tests up to Mach 7.5 flight conditions. The test section is $100 \times 100 \text{ mm}^2$ for a maximum of 5 kg/s air mass flow rate. A specific laboratory, denoted LAERTE, is also developed to study supersonic combustion with extended use of optical measurement methods (CARS (Coherent Anti-stokes Raman Spectroscopy), LIF, etc.). At Aerospatiale, a second combustor CHAMOIS (cross-sectional area about 0.05 m^2) is constructed and successfully tested at nominal flight Mach number of 6. The test bench hence developed can also be used for technology validation : thermo-mechanical validation of variable geometry inlet or nozzle, injection strut, strutjets, etc. System studies on a SSTO vehicle are performed and four concepts of combined propulsion systems are considered : two twin-duct concepts (turborocket-scramjet-rocket and turbojet-dual mode ramjet-rocket) and two one-duct concepts (rocket-dual mode ramjet-rocket and ejector dual mode ramjet-rocket (depicted in Fig. 7.4)). The one-duct rocket-dual mode ramjet-rocket concept is the more efficient and is able to place into orbit the heavier maximum payload mass.



FIGURE 7.4 – Ejector dual mode ramjet concept of the PREPHA program

Specific developments of scramjet components are also performed :

- **Inlet**

Experimental studies are focused on Mach 6 to Mach 12 inlets with a one-duct fixed geometry combustor. Variable capture area inlets concepts are tested to ensure the right geometrical contraction ratio evolution. The results confirm that a very high performance level in the Mach number range from 1.5 to 12 is not feasible. The experiments are essentially aimed at defining maximum contraction ratios, effects of the boundary layer thickness, maximum deviation angle on the compression ramps, etc.

- **Combustor**

Combustor experimental studies are carried out in the newly built Aerospatiale Subdray test facility and in the Onera Palaiseau ATD test facility. A series of fundamental experiments on fuel jet penetration, air/hydrogen mixing and injection and combustion stability

are performed. Different injection struts are experimentally and numerically studied. Vitiating effects in direct connected pipe tests are also investigated through the Monomat combustor. Finally two thrust measurement methods are developed and compared.

• Nozzle and Afterbody

Experimental and numerical approaches are considered to study the influence of different design parameters : length of the movable or fixed cowl flap, expansion ramp evolution, etc. Parameters effects on the jet interaction with the external airframe are also looked at.

The PREPHA program ends in 1999. No follow-up program is at the moment envisaged by the National and European Space Agencies to continue the development of the high-speed airbreathing propulsion technology for space applications.

With the objective of preserving the intellectual and material investment from the PREPHA program, Onera and the German Space Agency DLR join their effort in a common research program called JAPHAR (1997-2002). The program aims at studying a Mach 4-8 experimental vehicle with a fixed dual-mode ramjet (using gaseous hydrogen) and associated basic physics with application to reusable space launchers. A missile application study is simultaneously launched with PROMETHEE (1999-2002). This activity is completed in collaboration with MBDA France and concerns the development of a variable-geometry dual-mode ramjet for long-range air-to-ground missiles.

The LEA program [176] starts in 2003 and is the current main activity on high-speed airbreathing propulsion technology development shared between Onera and MBDA France. The program purpose is the development of an experimental hypersonic vehicle (depicted at a smaller scale in S3 facility in figure 7.5) equipped with a dual-mode ramjet to fly at Mach 4 to 8. For that purpose, a specific on-ground development methodology coupling experimental and numerical approaches has been defined. It is mandatory to validate this methodology in flight because of the extreme sensitivity of the aero-propulsive balance on the one hand, and the limited capability of ground test facilities to represent right flight conditions on the other hand. A flight experimental program is therefore included in the project.

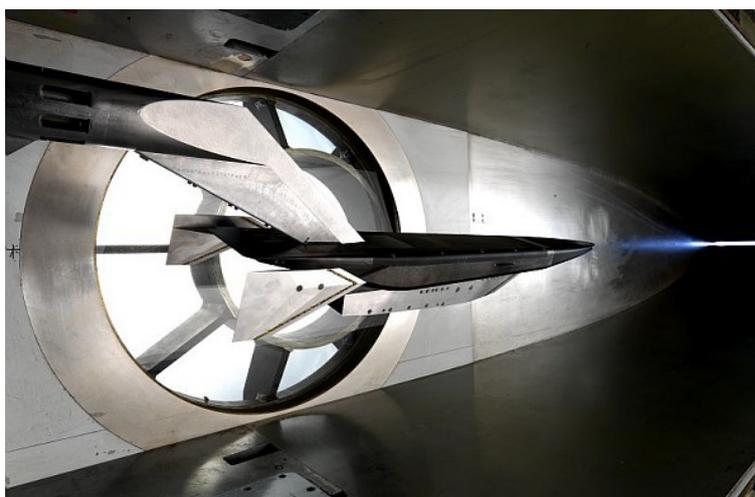


FIGURE 7.5 – LEA vehicle aerodynamic model in S3– scale 1/4

The LEA experimental vehicle is accelerated thanks to an air-launched booster up to the required Mach number, chosen in the range 4 to 8. After the booster separation and

stabilization phases, the experimental vehicle is intended to fly autonomously during 20-30 seconds (see Fig. 7.6). During the flight, the airbreathing propulsion system is fed during 5 to 10 seconds with a fuel-to-air equivalence ratio variation. This method ensures flight data acquisition at the right Mach number without the requirement of a largely positive aero-propulsive balance. The vehicle is specifically instrumented to give a precise evaluation of the aeropropulsive balance with and without combustion and to determine the contribution of each propulsion system component to this balance. All measured parameters are transmitted to ground by telemetry. The vehicle is non-recoverable and therefore non-reusable.

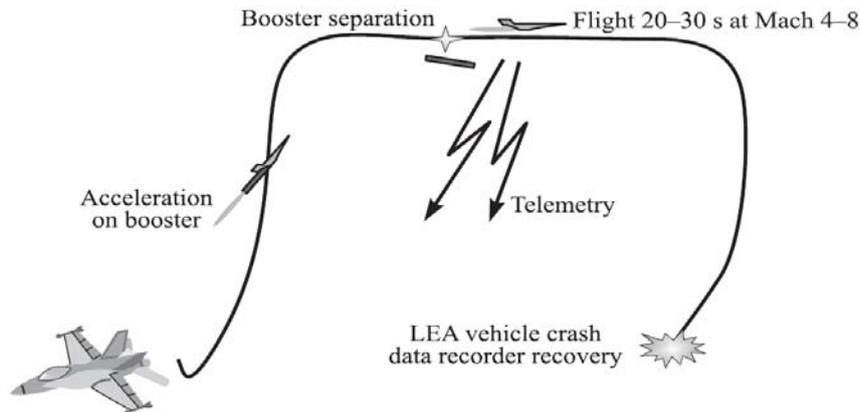


FIGURE 7.6 – *LEA Flight test sequence*

The LEA program must address two key issues :

- the accurate prediction of the aero-propulsive balance of an airbreathing vehicle at high Mach number
- the development of high-temperature materials for the combustion chamber while ensuring reliability and limited mass

and should allow to conclude on the feasibility and interest of possible applications by 2015.

7.1.2 Worldwide developments of scramjets

A detailed review of scramjet developments worldwide is elaborated by Curran [172]. Among the numerous international programs and studies dedicated to the study of airbreathing propulsion at high Mach number, some of them are special because they include at least one final flight test. The milestones of the scramjet-powered aircraft development race are recalled hereafter.

Russia has a long experience with scramjet technology developments. The scramjet research program has been carried out at many institutions including the Central Institute of Aviation Motors (CIAM), the Central Aerohydrodynamic Institute (TsAGI), the Institute of Theoretical and Applied Mechanics (ITAM), the Moscow Aviation Institute (MAI). TsAGI has several test facilities including a freejet test bed, a direct-connect setup and small wind tunnels. The institute investigates physical processes in the dual-mode scramjet, including combustion in supersonic flow and pseudoshock. The creation of these facilities allows the performance of a large volume of work with scramjet combustors. Part of this investigation is carried out within the framework of the German Hypersonics Technology

Program (1993-1996) [177, 178].

CIAM teams are developing both applied aspects of scramjet combustors and the principal aspects of supersonic combustion problems. Thermodynamics of combustion, combustion efficiency, mixing, stabilization and flame holding, heat protection with hydrogen cooling, flame extinction and influence of shock waves on supersonic combustion are studied, mainly through experimental investigations.

ITAM investigations cover a number of fundamental aspects of supersonic combustion but the main efforts are directed to the dual-mode scramjet with stepped combustor.

MAI Institute studies supersonic combustion mechanisms and mixing process especially with a unique transparent combustor and optical diagnostics. A concept of wide-range (Mach 3 to 12) ramjet is developed in cooperation with MBDA.

In 1991, a scramjet flight test demonstrates operation in both the subsonic and supersonic combustion modes with the Russian Hypersonic Flying Laboratory (HFL) named Kholod (see Fig. 7.7). This axisymmetric hydrogen fueled, dual-mode scramjet is tested, first with internal funding (1991), then in 1993 and 1995, in cooperation with France. The last tests were performed within the scope of a CIAM-NASA cooperation. This test series provides a large amount of results covering ground and flight data obtained for similar free stream conditions.



FIGURE 7.7 – *Kholod mounted on the nose of a modified SA-5*

Most of the topics are treated with an experimental approach which gives Russia one of the most unique and largest test facility panel for high-speed airbreathing propulsion in the world.

The demonstration of supersonic combustion for the first time in flight conditions is disputed with the Australian HiShot II flight. HiShot is a project from the University of Queensland (UQ) to demonstrate the possibility of supersonic combustion in flight conditions and assess the predictability of shock tunnel experiments. The program includes five launches between 2001 and 2007. Supersonic combustion is achieved during flights HyShot II (2002) and III (2006). Two new on-going programs aims at performing a sustained Mach 8 scramjet powered flight (HIFiRE 8 a.k.a. HyShot VII) and a Mach 8 free-flying scramjet powered flight test (SCRAMSPACE).

The American main basis for scramjet propulsion studies is the NASP (National Aero-Space Plane) project which is started in 1986 and cancelled in the early 1990s. As part of the program, the Rockwell X-30 demonstrator is designed to create a SSTO spacecraft and passenger spaceliner. Due to budget overrun, the project is cancelled and a more modest hypersonic program is set up. The X-43 is part of the Hyper-X program launched by NASA

and included many contractors such as Boeing and GASL. The X-43A vehicle still holds the speed record for a jet-propelled aircraft with its second flight at Mach 9.8 in 2004. The primary goals of the Hyper-X Program are to validate the airframe-integrated, dual-mode, scramjet powered vehicle in flight and provide databases for validation of design methods and tools. An extensive hypersonic aerodynamic, propulsion and thermal database has been generated for this class of vehicle. X-43B, C and D variants are dropped and the X-51 program is announced by AFRL. The X-51 "WaveRider" program is a cooperative effort of the US Air Force, DARPA, NASA, Boeing and Pratt & Whitney Rocketdyne and is managed by the US Air Force Research Laboratory.



FIGURE 7.8 – X-51A under the wing of a B-52

It consists of a hydrocarbon-fueled scramjet engine mounted on a waverider vehicle for hypersonic flight testing. The X-51A achieved in 2010 the longest duration flight (over 200 seconds) at speeds over Mach 5 and the longest scramjet burn time (140 seconds).

7.2 Scramjet physics and key challenges

The scramjet (supersonic combustion ramjet) engine can be considered as a classical ramjet in which the compressed air flow from the inlet is kept supersonic throughout the flowpath. Those engines are designed for airbreathing propulsion of vehicles at high Mach numbers (above 5 or 6). In a ramjet engine, the air from the inlet is progressively decelerated to reach subsonic speeds before the combustor. The transformation from kinetic energy into thermal energy is irreversible and induces total pressure losses. Therefore, the inlet performance decreases when the Mach number increases, especially after Mach 5. Furthermore, the deceleration of air flow to subsonic conditions at high Mach numbers result in high temperature and pressure. As the temperature rises in the combustor, the combustion process becomes less exothermic. The dissociation reactions are favoured in comparison with the recombination reactions, even at high pressure. The chemical equilibrium is displaced towards the production of radicals. The combustion efficiency is by consequent lowered. High temperature and pressure also induce important mechanical and thermal loads. In order to maintain a low temperature rise and total pressure loss, the solution is to keep the flow supersonic throughout the engine.

7.2.1 Scramjet operating principle

Hypersonic airbreathing configurations are characterized by a highly integrated propulsion flowpath. Advanced airframe-integrated concepts seek to exploit these interactions to maximize performance and improve stability. The scramjet propulsion system consists of the following major components (see Fig. 7.9) : the forebody constituting an external inlet, the internal inlet, the isolator, the combustor, the internal nozzle and the afterbody forming an external nozzle.

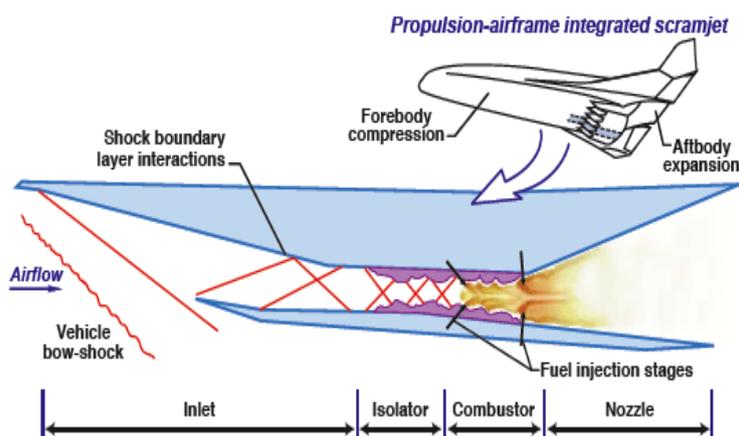


FIGURE 7.9 – Scramjet principle

The purpose of the air induction system is to capture and compress air for the remaining components of the engine. For high-speed flows, the necessary high pressure is provided without neither movable parts nor compressor. The forebody provides the initial external compression and the inlet provides the final internal compression of the propulsion cycle. The compression system is designed to provide the required mass capture and aerodynamic contraction ratio at maximum inlet efficiency (total pressure recovery). The compression occurs through a system of oblique shock waves or isentropic turning Mach waves. The captured stream tube contains non-uniformities, due to the reflection of oblique shock waves thus giving birth to shock-boundary layer interactions and subsequent separation. These non-uniformities can influence the combustion processes.

The isolator allows supersonic flow to adjust to a static backpressure larger than its inlet static pressure. The back pressure can result from heat released by combustion, choking as a result of the formation of thermal throat or blockage by the presence of injected fuel. The backpressure effect can propagate upstream through the subsonic region of the separated boundary layer along the duct wall. In the presence of sufficient adverse pressure gradient, the boundary layer can separate from the wall, which causes a mismatch in pressure between the core stream and the separated boundary layer. This usually causes a series of shock and expansion waves called shock trains. Two types of shock trains can exist within an isolator. At high Mach number and thinner inlet boundary layers, the oblique shock train prevails whereas at low Mach numbers and thicker inlet boundary layers, the normal shock train prevails (see Fig. 7.10). The isolator isolates the combustion process from the inlet compression process and helps in preventing an inlet unstart.

The combustor provides an efficient mixing between the injected fuel and the incoming airstream from the isolator, within the available combustor length. The fuel is injected to the

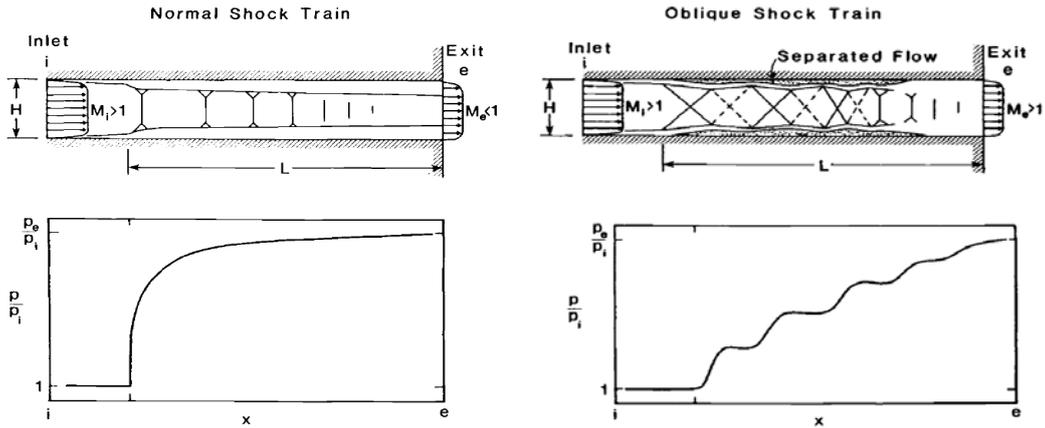


FIGURE 7.10 – Normal (left) and Oblique (right) shock trains details (from [22])

incoming airstream at appropriate locations and with the desired injection flow properties. Flame holders and stabilization techniques can be employed in the combustor, so as to obtain the heat release pattern that will maximize the engine thrust potential.

The expansion system consists of the internal nozzle and vehicle afterbody. It completes the expansion of the high pressure and temperature gas mixture from the combustor to produce net thrust. The potential energy generated by the hot gas is converted into kinetic energy during the expansion process. The nozzle must process the flow distortions generated by the air induction system, isolator and combustor. The scramjet nozzle physical phenomena include flow chemistry, boundary layer effects, non-uniform flow conditions and three-dimensional effects. The efficiency of the propulsion system is greatly conditioned by the design of the nozzle.

As a summary, the thermodynamic cycle of the scramjet engine is depicted in the H-K diagram in figure 7.11. The air is decelerated and compressed from the freestream condi-

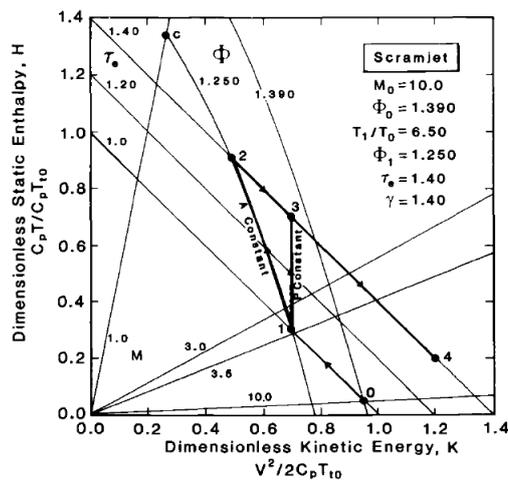


FIGURE 7.11 – The H-K diagram for a scramjet (from [22])

tions (point 0) to the combustor entry condition (point 1) by means of a combination of isentropic compression and oblique shock waves. The purposes of this compression are to

provide a satisfactory static temperature ratio T_1/T_0 for thermodynamic cycle efficiency purpose and to produce high values of p_1 and T_1 to support complete and stable combustion in the combustor. The combustor entry Mach number remains supersonic. The air is heated in a combustion process that releases the chemical energy of the fuel. The heating is represented by an increase in total temperature. The precise path of this process depends on the philosophy of the combustor design : the first (point 1 to point 2) is frictionless, constant area heating and the second (point 1 to point 3) is frictionless, constant pressure heating. In this example, there is no possibility for reaching point c and thermal choking conditions. The heated air is finally accelerated and expanded from the combustor exit conditions such as point 2 or 3 to the freestream static pressure at point 4. Because of the total pressure losses in the scramjet, the Mach number at point 4 can never be as large as the freestream Mach number but is large enough in such a manner that the kinetic energy and velocity at point 4 exceed that of point 0. Therefore the scramjet produces a net thrust in this example.

7.2.2 Key technological challenges

The technical issues for practical scramjet propulsion concern each component of the engine namely the inlet, the combustor and the nozzle. Each component is usually analyzed separately before integration and system studies.

Significant technical challenges concerning inlets for hypersonic airbreathing propulsion systems are non-exhaustively listed as inlet starting process, shock / boundary layer interaction, contraction ratio maximization and total pressure recovery. The challenges in nozzle design are more focused on performance and efficiency rather than operability, as it is the case for inlet design. Technical challenges concern high initial temperatures, significant divergence and skin friction losses, potential relaminarization of the flow and radicals recombination in a finite nozzle length.

The requirement for mixing of fuel/air and cooling are far more stringent for scramjet propulsion system as compared to subsonic combustion engines. Also, losses due to shock waves and skin friction are amplified. Another issue of concern during the design of combustor for scramjet engine is the aerodynamic heating of the combustor walls, which can affect the aerodynamic performance and durability of the combustor. At supersonic and hypersonic flight speeds, the residence time in the combustor is very short and can be of the same magnitude order than the chemistry characteristic time scale. The key to a highly performing scramjet is therefore efficient mixing between fuel and air, followed by robust combustion. Many different strategies have been developed to facilitate this involving fuel injection through flush wall holes [179, 180, 181] or, alternatively, fuel injection in combination with physical obstructions to the flow such as cavities [182, 183], ramps [184, 185] and struts [32, 186]. An alternative methodology involves the possibility of moving fuel injection forward into the inlet [187, 188]. This concept has the important advantage of significantly increasing the mixing length for fuel and air without increasing the overall length of the engine (as the inlet is already required for compression). In such a configuration the fuel can be significantly mixed before it reaches the combustion chamber, and combustion chamber length can then be determined simply by the time needed to ignite and complete the combustion reaction. Possible disadvantages of this idea are (1) disruption or changes to the operation of the inlet, and (2) pre-ignition of fuel on the forward facing inlet surfaces and

consequent drag generation. While these phenomena may limit the general applicability of this concept, it has been successfully implemented at Mach 8 [189]. The potential benefits of inlet injection at even higher hypersonic speed where mixing length requirements dominate combustion chamber length, warrant its further investigation.

Another recently developed fuel injection concept applicable to higher speeds involves injection of fuel into the boundary layer such that combustion occurs close to the wall. This has been shown in both experimental [190] and analytical studies [191] to produce a significant reduction in skin friction in the combustor. As skin friction drag in the high dynamic pressure combustor region can be up to 1/3 of the flowpath drag [191], this reduction can provide significant benefits to the overall performance of a scramjet powered vehicle.

Chapitre 8

Presentation of a RESTM12 Engine

Table des matières

8.1	Test facility and instrumentation	126
8.1.1	T4 shock tunnel	126
8.1.2	Instrumentation	128
8.1.3	Measurement Uncertainty Analysis	129
8.2	Presentation of a Mach 12 REST Scramjet Engine	130
8.2.1	Test Model	130
8.2.2	Fuel System	132
8.2.3	Test conditions	133
8.2.4	Test time determination	135

In the eighth chapter, representative elements of scramjet testing in a short-duration impulse facilities are firstly highlighted. For that purpose, a typical shock tunnel facility is presented in a first part and specific instrumentation is described in a second part. A full-scale scramjet geometry (RESTM12) experimentally studied at the University of Queensland and retained for the application of the UPaSR closure is secondly presented.

8.1 Test facility and instrumentation

The experiments presented in the next chapter (Chap. 9) were carried out by Suraweera and Smart [192] in the T4 free piston reflected shock tunnel located in the School of Mining and Mechanical Engineering, at The University of Queensland. In this section the shock tunnel facility, and the nozzle used in the experiments are detailed. In addition, the instrumentation and the data acquisition system used for measurements in the test facility and on the model test surface are outlined.

8.1.1 T4 shock tunnel

Description

The T4 facility is a free piston driven, reflected shock tunnel. The shock tunnel facility has a driver of 229 mm internal diameter that is 26 m in length, and a 75 mm internal diameter shock tube that is 10 m in length. A layout of the shock tunnel is presented in Fig. 8.1. It is capable of producing flows with nozzle-supply enthalpies in excess of 20 MJ/kg [193]. Typical operating conditions result in flows with nozzle-supply enthalpies in the range of 3 MJ/kg to 12 MJ/kg, with test times of approximately 3.0 ms to 0.5 ms. Stagnation pressures approaching 90 MPa can be achieved. The shock tunnel facility consists of an annular reservoir, free piston, compression (or driver) tube, shock tube, nozzle, test section, and dump tank. A steel primary diaphragm of varying thickness separates the driver gas in the compression tube from the test gas in the shock tube. A secondary 0.1 mm thick mylar diaphragm separates the shock tube section from the test section. The contoured Mach 7.6 Nozzle was utilised for the test program.

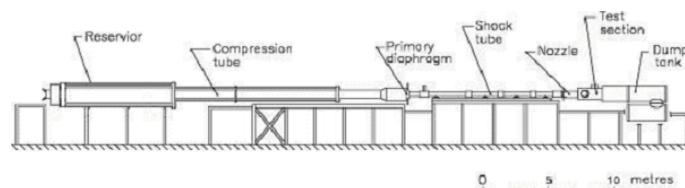


FIGURE 8.1 – Schematic of T4 Shock Tunnel (adapted from [23])

Principle of Operation

An x - t diagram of the wave processes after primary diaphragm rupture is given in Fig. 8.2. Behind the primary shock wave is the interface (contact surface) between the test gas and driver gas. In the preferred *tailored interface mode*¹ [194] the pressure ratio and the velocity change across the reflected shock on either side of the contact surface are the same. The reflected shock will then pass through the interface without producing additional compression or expansion waves which are reflected towards the nozzle. The test time is theoretically limited by the arrival of expansion waves that attenuate the nozzle-supply pressure, however, in reality the interface is not well defined and the driver gas does contaminate the test gas. The driver gas contamination results in the termination of useful test flow while nozzle-supply pressure is still constant [27]. In a free piston-driven shock tunnel, the motion of the piston after the diaphragm rupture is tuned to try to maintain a constant driver supply pressure as the driver gas expands into the shock tube. This is referred to as *tuning* the condition. Tuned conditions are obtained by varying the proportion of helium and argon in the compression tube and the shock tube filling pressure.

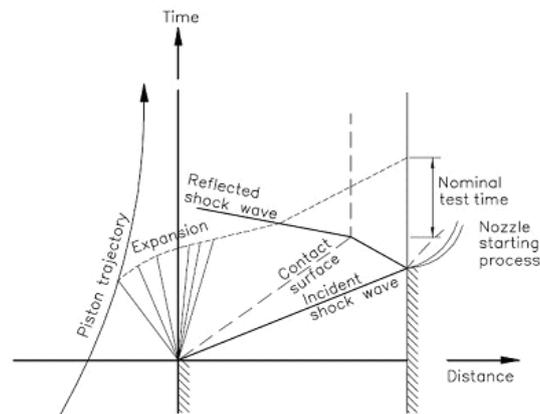


FIGURE 8.2 – Ideal x - t diagram of wave processes after diaphragm rupture for a tailored operating condition (adapted from [24])

Nozzle

An axisymmetric contoured nozzle capable of producing flows of Mach 7.6 was used in the test campaign. The main dimensions of the nozzle are presented in Table 8.1. The nozzle consists of an initial conical section to produce an expanded uniform source flow, and a contoured section to straighten the flow with the tunnel axis.

Nozzle	Throat Diameter [mm]	Exit Diameter [mm]	Length [mm]
Mach 7.6	16	270	1150

TABLE 8.1 – Nozzle dimensions used in the test campaign

A 2006 Pitot survey [195] of the Mach 7.6 Nozzle was conducted at a nozzle-supply enthalpy and pressure of 4.1 MJ/kg and 31 MPa, respectively, at downstream locations 0 mm, 180 mm, 270, and 500 mm from the nozzle exit plane. The Pitot survey indicated a test core flow diameter of 200 mm at the nozzle exit plane, and a contracted core flow

1. In this mode, the test time is theoretically limited only by the arrival of expansion waves that attenuate the nozzle stagnation pressure

diameter of approximately 155 mm at the cowl capture plane (at a downstream distance of 450 mm from the nozzle exit plane).

8.1.2 Instrumentation

A combination of KuliteTM and PCBTM piezoelectric pressure transducers were used to measure pressure levels within the test model. A data acquisition system recorded and stored the temporal signal histories of the model and tunnel transducers.

Model Pressure Measurements

Static pressure levels were measured on the test surface using KuliteTM XTEL-190M piezoelectric pressure transducers. The pressure transducers have an excitation voltage of 10 V and are subject to three different pressure ranges of 0 - 10 psi, 0 - 25 psi, and 0 - 100 psi. The transducers' sensing faces are thermally protected from the flow by 25mm cellophane discs which cover the sensing diaphragms. A layer of silicone grease separates the cellophane discs from the sensing face. All pressure transducers are recess mounted. The pressure tap holes in the test surface are at least 1.5 mm in depth and 2 mm in diameter.

Pressure levels were measured in the plenum chambers using PCBTM type 111A26 piezoelectric pressure transducers. The pressure transducers are voltage mode, acceleration-compensated quartz sensors powered by PCBTM 483A ICP power supply. The static pressure transducers are calibrated using a method developed by Knell [196]. The transducer mounting arrangement is shown in Fig. 8.3. The transducers' sensing faces are also thermally protected from the flow by attaching 25mm cellophane discs to the sensing face of the diaphragms. The cellophane discs are adhered to the sensing faces using a smear of silicone grease. The static pressure transducers are mounted in the model using a mounting system developed by Jacobs et al. [197]. Transducers mounted on the plenum chambers are isolated mechanically and electrically using a combination of rubber o-rings, fibre washers, and brass sleeves (see Fig. 8.3).

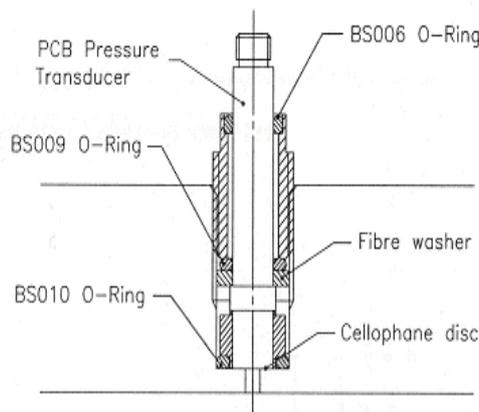


FIGURE 8.3 – PCBTM static pressure transducer mounting arrangement (from [25])

Pitot pressure measurements were also recorded with a PCBTM type 111A26 piezoelectric pressure transducer. The pressure transducer are mounted inside a Pitot probe as shown in Fig. 8.4. The probe is supported by a bracket on the centre-line, 15 mm above the leading edge of the engine.

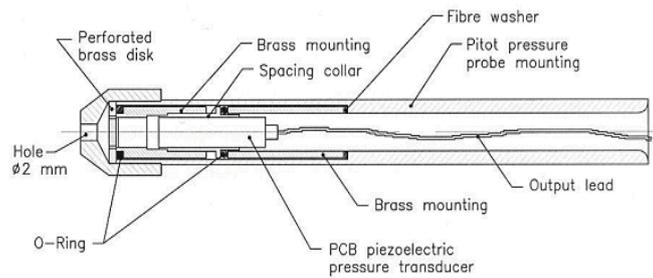


FIGURE 8.4 – Pitot pressure transducer mounting arrangement (from [26])

Shock Tunnel Pressure Measurements

The nozzle-supply pressure was measured using two PCBTM charge-mode piezoelectric transducers, powered by separate charge amplifiers. The nozzle-supply pressure was measured at a location 60 mm upstream of the interface between the shock tube and the nozzle.

The shock speed was measured by connecting in series the outputs from three piezoelectric pressure transducers located at approximately 2 m intervals along the shock tube. The series connection produced a combined signal. As the incident shock wave passed each sensor, the pressure rise caused by the pressure change across the primary shock wave induced a step change in the output from the combined signal. The shock speed was determined from the time between pressure rises and the distance between each sensor. There is generally some attenuation of the shock speed as the primary shock travels down the shock tube. The signals from the three shock timing sensors and from the nozzle-supply transducers allow the shock speed to be calculated after three successive 2 m internals. Stalker and Morgan [198] argue that the gas that has been processed last by the shock wave enters the nozzle and test section first. Hence, the shock speed was determined from the last two shock timing stations.

8.1.3 Measurement Uncertainty Analysis

This section presents the uncertainty analysis for the pressure measurements, and the data acquisition system. In the analysis uncertainties were assumed to be normally distributed and uncorrelated.

The systematic uncertainty in static pressure measurements, P , was determined from previous studies [199, 200]. The contributing factors to pressure measurement uncertainty are listed for both KuliteTM and PCBTM transducers below.

- KuliteTM pressure transducer calibration, $P \pm 2\%$
- Transducer mounting effects, $P \pm 1\%$
- Measurement of voltage output in data recording, $P \pm 0.5\%$

The total systematic uncertainty in P measured by KuliteTM transducers, determined from root-sum-square (RSS) of the contributing variables, is $\pm 2.3\%$.

- PCBTM pressure transducer calibration, $P \pm 2\%$
- Transducer mounting effects, $P \pm 3\%$
- Measurement of voltage output in data recording, $P \pm 0.5\%$

The total systematic uncertainty in P measured by PCBTM transducers, determined from root-sum-square (RSS) of the contributing variables, is $\pm 3.6\%$.

8.2 Presentation of a Mach 12 REST Scramjet Engine

This section gives a general description of the test model and fuel injection system used for the experimental investigation in the T4 shock tunnel. In addition, the input and derived T4 test conditions are summarised.

8.2.1 Test Model

General Layout

The M12REST scramjet model used in the test program, shown in Fig. 8.5, is 1980 mm long and has a maximum width of 180 mm. The test model consists of four components; a forebody plate, a REST (Rectangular-to-Elliptical Shape Transition) inlet, an elliptical combustor, and a generic elliptical nozzle. The forebody and inlet sections are 150 mm and 1062 mm long, respectively, with 0.7 mm leading edge radii. The inlet has a total geometric contraction ratio of 6.61, an internal contraction ratio of 2.26 and a short isolator downstream of the throat. The 150 mm wide frontal capture area of the inlet is 113 cm² and all leading edges (including the forebody plate) have radii of 0.7 mm. Inlet injection is through three 4 mm diameter portholes angled at 45° to the local flow, at a downstream distance of 652 mm from the leading edge of the model. The portholes are sized using the work of McClinton [180] to enable the fuel jets to penetrate through the inlet boundary layer to facilitate mixing in the mainstream flow of the engine. The aspect ratio of the elliptical cross-section at the end of the inlet is 1.76. The inlet section is terminated by a 2.5 mm rearward facing circumferential step (area ratio = 1.245) where fuel can be injected through a set of 48 portholes, 1.5 mm in diameter, angled at 10° to the axis of the combustor. The step height is sized to be smaller than the local boundary layer thickness to promote combustion of fuel within the boundary layer. Sonic injection is employed for both fuel stations and a fast response solenoid valve is used to supply gaseous hydrogen fuel to either or both the fueling stations.

A cross section of the test model along the symmetry plane is shown in Fig. 8.6 to illustrate both fueling stations with further detail. The combustor entrance height immediately downstream of the step is $H = 40.3$ mm, and is angled at 6° to the inlet axis in order to re-align the local flow with the nominal flight direction. The combustor consists of a constant area section, 322 mm in length ($L/H = 8.0$), and a diverging section, 242 mm in length ($L/H = 6.0$) to an area ratio of 2.0 relative to the inlet throat. The angle of divergence is kept constant around the circumference at approximately 1.6°. The generic thrust nozzle is an elliptical cone with a 201 mm length and an area ratio of 4.0. In Fig. 8.7 the scramjet engine is shown mounted in the shock tunnel test section along with the Pitot probe used for the tests in Fig. 8.8.

The inlet was machined using a three-axis mill from a plastic material called NECURON[®] 6519 which has a density of 660 kg/m³ and a yield strength of 30 MPa. Fibreglass layers were applied to the external body of the inlet to provide additional structural strength.

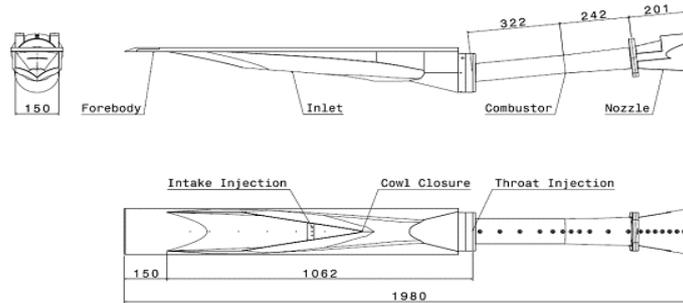


FIGURE 8.5 – Main components of the initial Mach 12 REST scramjet with 150 mm forebody in assembled test orientation

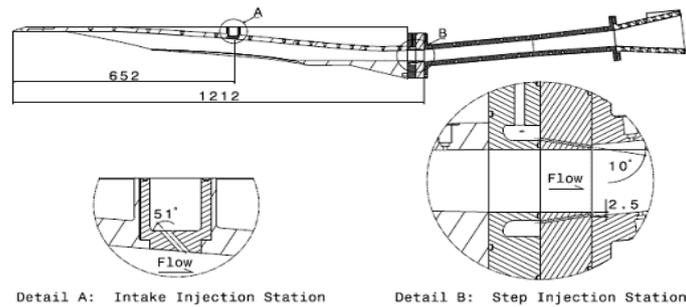


FIGURE 8.6 – Fueling stations of the Mach 12 REST scramjet

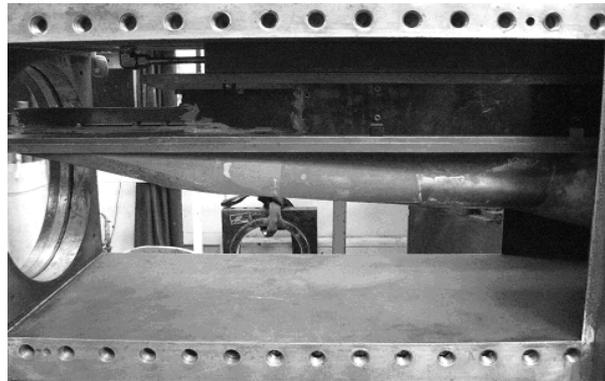


FIGURE 8.7 – Side view of the Mach 12 REST scramjet mounted in the T4 test section

The combustor section was made in a similar manner to the inlet. The elliptical nozzle was manufactured with a glass filled nylon material called CAPFormTM using a Selective Laser Sintering (SLS) technique. The fuel reservoirs and injectors were machined from aluminium and mild steel, respectively. The process of machining enabled a high manufacturing tolerance of ± 0.05 mm, while the SLS technique produced an acceptable precision level of ± 0.15 mm in the nozzle. The model has survived 109 shots, over two separate test programs, relatively intact.

Instrumentation and Data Acquisition

The test surfaces comprised the intake wall and both the upper (body-side) and lower (cowl-side) sections of the combustor and nozzle. The centre-line of each test surface was instrumented with KuliteTM, Series XTEL-190M pressure transducers at intervals ranging from 25 mm to 100 mm in length. As stated earlier, three pressure ranges were used in the test model : 0 - 68.8 kPa (0 - 10 psi), 0 - 172.3 kPa (0 - 25 psi), and 0 - 689.4 kPa (0

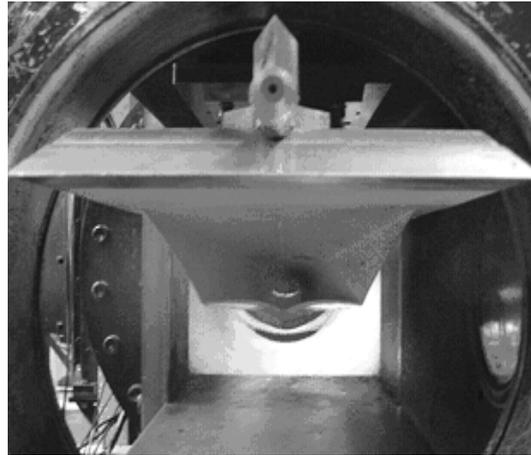


FIGURE 8.8 – Front view of the Mach 12 REST scramjet mounted in the T₄ test section

- 100 psi). The error associated with the use of these pressure transducers was $\pm 1.0\%$ of full scale. Both fuel plenum chambers were instrumented with two PCBTM, Model 111A26 piezoelectric pressure transducers each. The error associated with the use of these pressure transducers was $\pm 2.0\%$ of full scale.

The data acquisition system for the T₄ shock tunnel consists of a National Instruments PXI data acquisition system, and a LabVIEWTM visual interface program. Sampling periods of 1ms and 50ms were used to gather data for the short time base and long time base signals, respectively. For typical T₄ operation, the data acquisition triggered from the pressure jump associated with the arrival of the primary shock wave at one of the two nozzle-supply pressure transducer signals.

8.2.2 Fuel System

Fuel Injection

Hydrogen fuel was injected from a room temperature reservoir through a fast-acting solenoid valve. The fuel reservoir consisted of a coiled (14.19 m) Ludwig tube which kept the temperature of the fuel approximately constant at 300 K during injection. The injection flow was initiated at least 3 ms prior to test flow arrival. A 1/2 inch Joucomatic Asco solenoid valve, type SC B223A103, was used during the test program as it was suitable for operation at reservoir pressures between 200 kPa and 2000 kPa. The fuel valve was controlled by a controller board assembled in-house at The University of Queensland. A schematic of the system controlling the fuel valve is shown in Fig. 8.9. A signal from a linear voltage displacement transducer, LVDT, which measures the recoil of the tunnel as the shot is fired, was used as a trigger for the fuel valve. Once the specified recoil threshold was reached, two successive electrical pulses were sent via a controller board and relay switch to open and close the solenoid valve during the test time.

The pressure levels in both the inlet and step injection plenum chambers were recorded by two PCBTM transducers. The inlet plenum chamber pressure levels during the test time were constant to within $\pm 4\%$, while the combustor plenum chamber pressure levels were constant to within $\pm 3\%$.

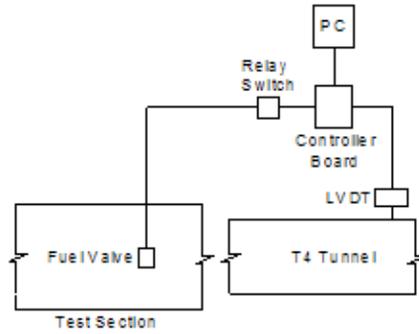


FIGURE 8.9 – Schematic of fuel valve control system.

Fuel Valve Calibration

For each of the injection schemes (inlet and throat), the fuel system was calibrated prior to testing to determine the mass flow rate of hydrogen as a function of the reservoir and plenum pressures. Contributing factors to the pressure measurement uncertainty are pressure transducer calibration, transducer mounting effects, and measurement of data signal voltage output. The calibration procedure for the shock tunnel fuel system is described by Robinson et al. [201]. The instantaneous mass flow rate of the fuel is given by :

$$\dot{m}_f = \frac{1}{\alpha} P_{o,i}^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} P_f^{\frac{\gamma+1}{2\gamma}} \quad (8.1)$$

where α [m.s] is the experimentally determined fuel calibration constant given by :

$$\alpha = \frac{R_f T_{o,i}}{V_o (P_{o,f} - P_{o,i})} P_{o,i} \int_{t_i}^{t_f} P_f^{\frac{\gamma+1}{2\gamma}} \quad (8.2)$$

and

$P_{o,i}$ is the initial pressure in the fuel reservoir, $P_{o,f}$ is the final pressure in the fuel reservoir, P_f is the measured pressure in the plenum chamber, V_o is the volume of fuel reservoir ($1.66 \times 10^{-3} \text{ m}^3$), $T_{o,i}$ is the initial temperature in fuel reservoir (300 K), R_f is the ideal gas constant of the fuel, t_i is the initial time, and t_f is the final time.

For inlet and step fuelled runs, the calibration constant was calculated for each successive fuel-on shot during the experimental campaign in order to determine the fuel equivalence ratio. The calibration constants were always within 9% of the calibration mean values.

8.2.3 Test conditions

The engine was tested in a standard semi-freejet mode due to test facility constraints. The facility nozzle simulated the flows over the forebody section of the engine. The engine was assumed to be installed on a vehicle with a forebody equivalent to a 6 degree wedge.

Conditions in the nozzle-supply region were calculated using the Equilibrium Shock Tube Calculation (ESTC) numerical code developed by McIntosh [202]. ESTC is a one-

dimensional numerical code that has as inputs the shock tube filling pressure and temperature, the measured speed of the incident shock, and the nozzle-supply pressure during the test time. ESTC calculations are based on an inviscid mixture of reacting gases in thermodynamic equilibrium. The species considered for air test gas are e^- , N_2 , O_2 , Ar , N , O , NO , and NO^+ . For nitrogen test gas, N_2 , and N are considered.

The test condition defined in Table 8.2 was used for the experimental campaign.

Test Condition	Diaphragm Thickness [mm]	Reservoir Pressure [MPa]	Driver Pressure [kPa]	Driver Gas Composition [%Ar / %He]	Shock Tube Pressure [kPa]
1	4	3.5	53.6	80 / 20	150

TABLE 8.2 – Nominal T4 input conditions

ESTC calculations were performed for each distinct tunnel run and the nominal conditions are provided in Table 8.3.

Test Condition	Supply Pressure [MPa]	Primary Shock Speed [m/s]	Stagnation Temperature [K]	Stagnation Enthalpy [MJ/kg]
1	31.093	2074	3300	4.18

TABLE 8.3 – Summary of nominal nozzle-supply conditions

The flow properties and the chemical composition at the nozzle exit were determined using the one-dimensional Non-equilibrium Nozzle Flow (NENZF) numerical code developed by Lordi et al. [203]. Inputs to the NENZF code are the nozzle-supply temperature determined from the ESTC code, the nozzle-supply pressure and the nozzle length required to match the measured or expected Pitot to nozzle-supply pressure ratio. NENZF calculations were made for each T4 run and nominal flow properties at the nozzle exit for each test condition are presented in Table 8.4.

Test Condition	T_e [K]	P_e [kPa]	ρ_e [kg/m ³]	U_e [m/s]	M_e [-]	$Re_u \times 10^6$ [m ⁻¹]
1	371	3.307	0.0310	2759	7.155	3.95

TABLE 8.4 – Summary of nominal nozzle exit conditions

The nominal flight conditions for the study are presented in Table 8.5. The flight conditions were determined by processing the nozzle exit flow properties upstream of an oblique shock generated from a planar 6 degree wedge.

Test Condition	T_∞ [K]	P_∞ [kPa]	ρ_∞ [kg/m ³]	U_∞ [m/s]	M_∞ [-]	$Re_u \times 10^6$ [m ⁻¹]
1	256	1.044	0.01415	2805	8.7	2.42

TABLE 8.5 – Summary of calculated nominal flight conditions

8.2.4 Test time determination

The beginning of the test time is dependent on the nozzle starting process and the model flow establishment time. The nozzle starting process is initiated by the rupture of the secondary diaphragm and is completed when the unsteady expansion created in start-up is swept out of the nozzle, and the boundary layers on the nozzle wall are fully established [204]. For the T4 shock tunnel, the onset of steady nozzle flow is taken to be the point in time when the ratio of the Pitot pressure to nozzle-supply pressure has reached a steady level. A transit time is included to allow for the flow to travel from the location where the nozzle-supply pressure is measured, 60 mm upstream of the end of the shock tube, and the location of Pitot pressure measurement.

Once the nozzle start-up has been achieved, the test flow must have sufficient time to reach fully established conditions. The establishment time is the time required for the flow to reach steady state after flow onset. Past experimental and numerical studies for flat plates in shock tunnel flows have correlated measurements for establishment time in terms of the number of model flow lengths [205, 206, 207]. Attached laminar and turbulent boundary layers take approximately 3.3 and 2.0 flow lengths, respectively, to reach steady state. As the boundary layers on the test surface were expected to be both laminar and turbulent for the present study, an arbitrary value of 3.0 flow lengths was considered sufficient along the test surface for full flow establishment.

The length of test time is dictated by either an unacceptable pressure decay in the flow or by driver gas contamination. The end of test time was taken to be the shorter of either the Pitot pressure dropping 10% below the mean level during the test period, or when the level of driver gas contamination in the test section exceeded 10%. Mass-spectrometry measurements of tuned T4 flow conditions obtained by Skinner [27] are presented in Fig. 8.10. This study, together with results from a driver-gas detector study of T4 [208], enabled the length of test time to be determined for the nominal condition used in the present set of experiments.

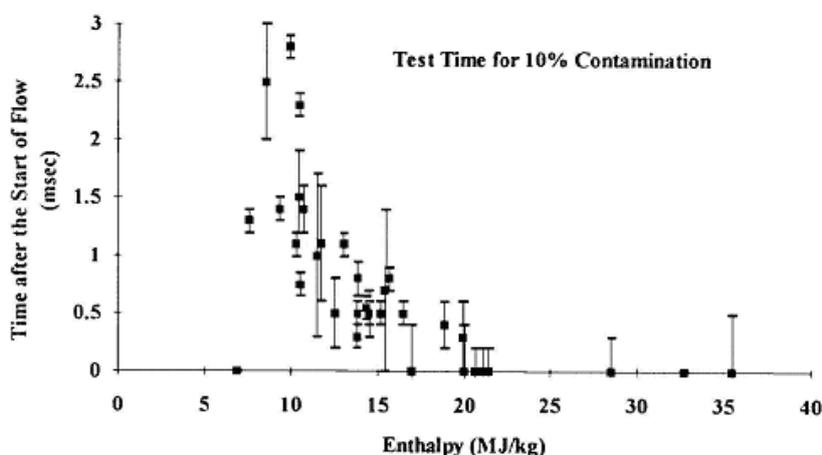


FIGURE 8.10 – Measured test time for 10% driver contamination without nozzle starting losses (adapted from [27]).

Chapitre 9

Numerical Investigation of a Mach 12 REST Scramjet Engine at Off-Design Conditions

Table des matières

9.1	Modelling strategies	138
9.2	Strategies for the performance analysis	141
9.2.1	Cycle analysis	142
9.2.2	Performance parameters	144
9.3	Results and discussion	145
9.3.1	Fuel off	145
9.3.2	Inlet injection condition	146
9.3.3	Step injection condition	153
9.3.4	Combined injection condition	159
9.3.5	Skin friction reduction	165
9.4	Conclusions	168

In the ninth chapter, the UPaSR closure is retained to analyse a full-scale scramjet geometry (RESTM12) experimentally studied at the University of Queensland. For that purpose, two different approaches are applied and compared. The first one is based on a quasi-one-dimensional tool using experimental pressure distributions and the second one is based on RANS numerical simulations through the calculation of energetic efficiencies. The main performance indices are finally established. This work has been presented as follows : *Y. Moule, V. Sabel'nikov, A. Mura and M. Smart, Numerical Investigation of a Mach 12 REST Scramjet at Off-Design Conditions. AIAA Paper 2012-5887 (Proceedings of the 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Tours, France), 2012.*

There are only a few scramjet ground test facilities in the world, and the development of scramjet engines with a flight envelope from Mach 6-12 is a subject of interest in the Centre for Hypersonics at The University of Queensland. When integrated with a vehicle, scramjets that can operate with high performance over this range can be used as the propulsion system for the airbreathing stage of a multi-stage access-to-space system [29]. As part of this research activity, a 3-D scramjet with a rectangular-to-elliptical shape transition (REST) inlet and an elliptical combustor has been developed with a design point of Mach 12. Both inlet injection and an injector scheme designed to generate combustion in the boundary layer were incorporated into this flowpath. Ground testing of this engine with hydrogen fuel at conditions simulating flight at Mach 8.7 showed robust combustion from both injection schemes [192].

9.1 Modelling strategies

Considering the symmetry of the RESTM12 engine, only one half of the engine geometry is modelled for RANS numerical simulations. The mesh was created with Star-ccm+. It is composed of tetrahedral cells and prism layers alongside the walls (See Fig. 9.1). The mesh is refined near the injectors (in the inlet and at the entrance of the combustor) where the characteristic size has been decreased to 0.2 mm (See Fig. 9.2). Table 9.1 gathers the main characteristics of the computational mesh.

Turbulence is modelled within a RANS framework. Numerical simulations are performed with a $k - \omega$ closure (presented extensively in part (1.4.2)) and the turbulence Reynolds stress tensor $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ is therefore modelled using the Boussinesq approximation. Reynolds



FIGURE 9.1 – Overview of the computational mesh : inlet (left) and combustor (right)

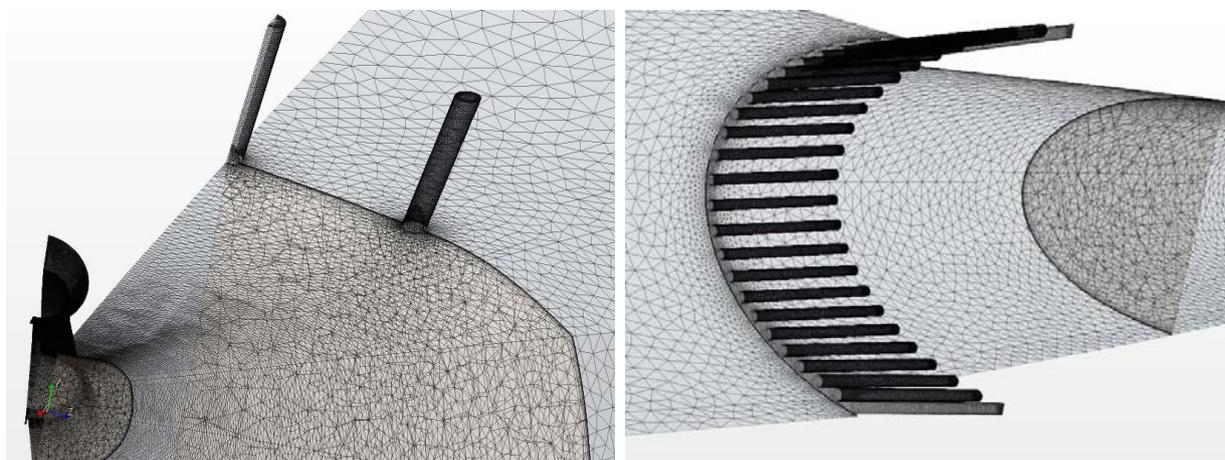


FIGURE 9.2 – Detailed view of the mesh near the injectors : inlet injectors (left) and combustor injectors (right)

	Cells	Faces	Prism Layer thickness [mm]	Number of layers	Characteristic size [mm]
Injectors	-	-	0.2	4	0.2
Inlet/Combustor/Nozzle	-	-	1	12	2
Total	4 482 589	9 622 572	-	-	-

TABLE 9.1 – Mesh details

turbulent mass and energy fluxes, i.e. $\overline{\rho u_j'' Y_k''}$ and $\overline{\rho u_j'' e_t''}$, are obtained from the turbulent diffusivity approximation by introducing turbulent Schmidt numbers the values of which are set to 0.7. The UPaSR closure, presented previously in the chapter 4, is also used to integrate the turbulence-chemistry interaction effects. The chemical composition is described using nine species (H_2 , H_2O , N_2 , O_2 , OH , H , O , HO_2 and H_2O_2) and the finite rate chemical reactions are described with the reduced nineteen-step chemical scheme proposed by Jachimowski (Appendix A). Inviscid fluxes are computed using the HLLC (Harten-Lax-van Leer Contact) approximate Riemann solver and second-order accuracy is achieved via variable extrapolation also often referred to as Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws (MUSCL) scheme. It is applied in conjunction with Van Leer flux limiters to ensure

the monotonicity of the numerical scheme while the temporal integration is processed with a first order implicit numerical scheme.

Table 9.2 summarizes the important test conditions for the experiments. The first column reports the simulated flight conditions for the test program. In the semi-free-jet mode of the experiments, the facility nozzle exit flow is equivalent to the flow on the vehicle forebody that enters the engine. These properties are listed in column 2. The last column contains the 1-D flux conserved quantities at the inlet throat.

Quantity	Units	Simulated Flight	Region	
			Equivalent Forebody	Throat
Stagnation Enthalpy	MJ.kg ⁻¹	4.192	4.192	3.702
Mach no.	-	8.735	7.155	3.853
Static Temperature	K	256.2	371.3	1024
Static Pressure	kPa	1.044	3.307	64.23
Dynamic Pressure	kPa	55.77	118.3	635.1
Static Density	kg.m ⁻³	1.415×10 ⁻²	3.099×10 ⁻²	0.2175
Velocity	m.s ⁻¹	2805.3	2763.5	2416.8
Unit Reynolds no.	m ⁻¹	2.418×10 ⁶	3.890×10 ⁶	12.13×10 ⁶

TABLE 9.2 – *Nominal test flow conditions*

The boundaries and the corresponding imposed variables are provided in Table 9.3 while the values of the imposed boundary conditions for the aerothermochemical, turbulent variables and species mass fractions are given in Table 9.4.

Boundary condition	Imposed variable
Supersonic inlet	$p, T, \mathbf{u}, Y_k, k, \omega$
Subsonic inlet	$p, T_i, \rho \mathbf{u}, Y_k, k, \omega$
Subsonic outlet	p
Supersonic outlet	-
Walls	T_w

TABLE 9.3 – *Type of boundary conditions*

The experiments were carried out in a short-duration facility and therefore cold walls are taken isothermal at a temperature of $T_w=300$ K. The freestream conditions correspond to the ones described in the second column of Table 9.2 and a uniform flow is also assumed.

Different injection schemes have been studied during the experimental program. Hydrogen fuel was injected at equivalence ratio values ranging between 0.30 and 1.23 using four distinct injection schemes. An initial study was conducted with the inlet fuel injection scheme. This was followed by a study of injection from the step at the entrance of the combustor. Finally, two combined injection configurations using both fueling stations were employed. For the second combined configuration, the mass flow rate to the inlet fueling station was reduced by placing a restrictor plate in the intake fuel line. The approximate ratios of mass flow rates through the inlet and step fueling stations for the first and second combined injection schemes were 9 :11 and 1 :2, respectively. The numerical investigation focuses on three different cases :

Name	Inlet in	Inlet inj	Step inj
p [Pa]	3307	-	-
T [K]	371	-	-
T_i [K]	-	360	360
\mathbf{u} [m/s]	2759	-	-
\dot{m}_f [kg/s]	-	see Table 9.5	
k [m ² /s ²]	1142	1	1
ω [s ⁻¹]	370	100	100
Y_{O_2}	0.233	-	-
Y_{N_2}	0.767	-	-
Y_{H_2}	-	1	1

TABLE 9.4 – Values of the imposed variables the boundary conditions

- Inlet injection only at equivalence ratio of $\phi=0.41$ (A higher equivalence ratio induced engine unstart)
- Step injection only at equivalence ratio of $\phi=1.14$
- Combined injection in 1 :2 proportions at a global equivalence ratio of $\phi=1.23$

The determination of the experimental equivalence ratio is described in the previous chapter. In the numerical simulations, the hydrogen mass flow rate corresponding to the experimental equivalence ratio is determined using the numerical mass flow rate of air captured by the inlet at the proposed off-design conditions ($\dot{m}_{\text{air}}=0.84$ kg/s). Table 9.5 summarizes the hydrogen mass flow rate \dot{m}_f in [kg/s] in the three different fueling schemes.

Injection scheme	Inlet inj	Step inj
Inlet injection	0,01	-
Step injection	-	0,0279
Combined injection	0,01	0,0201

TABLE 9.5 – Hydrogen mass flow rate \dot{m}_f [kg/s] for the three different fueling schemes

Finally, a time step of 5.0×10^{-7} s is applied to the RANS simulations until steady state conditions are reached.

9.2 Strategies for the performance analysis

Two different strategies to evaluate the scramjet engine performance are presented and compared in the part (9.3). The first one is performed using a quasi-one-dimensional tool which is based on a stream thrust analysis as developed by Smart [209] and the second one relies on energetic efficiencies as obtained from the results of RANS numerical simulations. For the latter, it should be noted that, despite past and recent interest in supersonic combustion, CFD studies of entire scramjet engines such as the one reported herein have been seldom documented, and only a few exceptions can be found in the litterature, see for instance [210, 211]

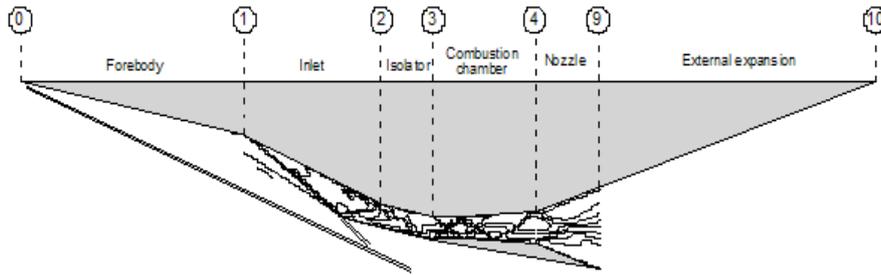


FIGURE 9.3 – Flow stations in a scramjet engine

9.2.1 Cycle analysis

Stream thrust based performance calculation methods

The performance of a scramjet engine, either uninstalled or when integrated on a hypersonic vehicle, is most easily determined by what is called stream thrust analysis. This technique conserves the fluxes of mass, momentum and energy on a control volume that moves with and surrounds the engine or vehicle [209]. Figure 9.3 shows a schematic of the internal flowpath of an airframe-integrated scramjet with particular reference stations highlighted. Following the convention of Heiser & Pratt [22], station 0 denotes the freestream flow ahead of the vehicle, and a streamtube with area A_0 captures the airflow processed by the engine. Station 1 lies downstream of the vehicle forebody shock and represents the properties of the flow that enters the inlet. Station 2 is located at the inlet throat, which is usually the minimum area in the flowpath, and the length between stations 2 and 3 is referred to as the isolator. Station 3 represents the combustor inlet (where fuel is added), and fuel and air are mixed and burned by the end of the combustor at station 4. The nozzle includes an internal expansion up to station 9, and an external expansion to station 10 at the end of the vehicle.

Using the flow stations of Figure 9.3, stream thrust analysis supplies the following relation for the uninstalled thrust of an engine :

$$T = F_{10} - F_0 - F_{add} \quad (9.1)$$

where F_0 is the stream thrust of the air entering the engine at freestream conditions, F_{10} is the stream thrust of the air and combustion products exiting the vehicle, and F_{add} is the additive drag, which consists of both the spillage and plume drag on the control volume. Calculation of F_0 reduces to a determination of the freestream capture area (A_0). Air spillage (and therefore spillage drag) decreases as the vehicle speed approaches the design point of the engine, and the plume drag varies depending on the amount of external expansion on the vehicle aft-body. Both these forces are usually estimated through CFD analysis or rules-of-thumb based on empirical or experimental databases. The determination of F_{10} requires an analysis that follows the air through the complete scramjet flowpath. It is appropriate to break this analysis into three distinct processes ; i.e. those of compression, combustion and expansion.

Inlet compression

The level of inlet compression has been determined previously through numerical simulation using the NASA Langley code, VULCAN [212]. This computational code solves the three-dimensional Navier-Stokes equations for turbulent, non-equilibrium, chemically reacting flows using structured grids. A $k-\omega$ model was used to model the turbulent hypersonic flow in the current experiments. No combustion calculations were performed in this instance, and a single species model for air applicable up to temperatures of 20000 K was retained. Transition to turbulence in the boundary layer was assumed to occur at all leading edges, and the wall temperature was assumed to be 300 K.

Combustion

The processes of fuel addition, fuel/air mixing and combustion are modelled using a stream thrust based cycle analysis that conserves mass, momentum and energy with the assumption of quasi-one-dimensional flow. The combustor flow is modelled as a mixture of thermally perfect gases that are supposed to be in thermodynamic equilibrium. The gross parameters for the air entering the combustor are mass flow rate, \dot{m}_2 , stream thrust, F_2 , and total enthalpy, H_{t2} . The incoming flow area is A_2 . The gross parameters associated with fuel injection are fuel flow rate, \dot{m}_f , fuel stream thrust, F_f , and fuel total enthalpy, H_{tf} . As the fuel/air mixture travels downstream, a proportion of the fuel is allowed to react with the air, and the gross parameters of the flow are calculated using a control volume analysis associated with incremental steps of length Δx along the combustor and keeping mass, momentum and energy constant. Through calls to thermodynamic equilibrium routines, state properties and the velocity are determined at all stations along the combustor. The amount of fuel that is allowed to react with the air at a particular station is dictated by a fuel based combustion efficiency curve, $\eta_c(X)$ that takes the form :

$$\eta_c = \eta_{c,tot} \frac{\theta X}{1 + (\theta - 1)X} \quad (9.2)$$

In the above expression $\eta_{c,tot}$ is the fuel based combustion efficiency at the end of the combustor, $X = (x - x_3)/(x_4 - x_3)$ and θ is an empirical constant of order 1 to 10 which depends on the rate of mixing [179]. The proportion of the fuel that is not mixed with the air is considered to be inert, and is included as un-reacted species in the thermodynamic equilibrium calls. The incremental area change (ΔA) across a control volume of length Δx is known from the area distribution, and incremental changes to the stream thrust and total enthalpy from fuel combustion, friction forces, pressure forces and heat loss are calculated to determine the stream thrust and total enthalpy of the flow exiting the control volume. The analysis starts at station 2, and marches along the combustor until station 4 is reached. In all instances a skin friction coefficient $C_f = 0.002$ is used to calculate the viscous drag, and Reynolds analogy (with a wall temperature of 300 K) is used to determine a heat transfer coefficient and the corresponding heat losses to the structure.

Nozzle expansion

Flow through the expansion nozzle is calculated using the same 1-D method used in the combustor, but with no further combustion of fuel. No account is taken for any non-equilibrium effects in the nozzle, and a skin friction coefficient $C_f = 0.002$ is used.

9.2.2 Performance parameters

Three different efficiencies are defined, in the framework of RANS simulations, to characterize the energetic efficiency of a scramjet engine in three different ways. The product of these efficiencies is equal to the global efficiency of the combustion chamber. The 'R' subscript relates to the reactants while the 'P' subscript relates to the products. Each efficiency ratio is defined in a given section. The reaction heat is classically defined as $H_R - H_P^{T_R}$, where H_R is the enthalpy flux of reactants and $H_P^{T_R}$ is the enthalpy flux of the products calculated at the temperature T_R . The effective heat release is therefore defined as $H_R - H_P^{T_R} - \dot{Q}_P$ where \dot{Q}_P stands for the heat losses at the walls of the combustion chamber.

Thermal efficiency

A thermal efficiency is defined as the ratio of the effective heat release and the reaction heat :

$$\eta_{\text{th}} = \frac{H_R - H_P^{T_R} - \dot{Q}_P}{H_R - H_P^{T_R}} \quad (9.3)$$

Chemical efficiency

A chemical efficiency is defined as the ratio of the reaction heat and the reaction heat if the reactants were fully oxidized taking the mixture heterogeneity into account.

$$\eta_{\text{ch}} = \frac{H_R - H_P^{T_R}}{H_R - H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{ox}}}} \quad (9.4)$$

where $H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{ox}}}$ is the enthalpy flux of the products calculated at the temperature T_R with the composition \mathbf{Y}^{ox} , and \mathbf{Y}^{ox} is the local composition of the products assuming a complete oxidation of the available hydrogen into water (depending on the local equivalence ratio) and taking the mixture heterogeneity into account :

$$H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{ox}}} = \int_{\text{Section}} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} h(T_R, \mathbf{Y}^{\text{ox}}, p) dS \quad (9.5)$$

Mixing efficiency

A mixing efficiency is defined as the ratio of the reaction heat assuming a complete oxidation, taking the mixture heterogeneity into account, and the reaction heat assuming a complete oxidation and with the equivalent homogeneous mixture.

$$\eta_{\text{m}} = \frac{H_R - H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{ox}}}}{H_R - H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{id}}}} \quad (9.6)$$

where $H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{id}}}$ is the enthalpy flux of the products calculated at the temperature T_R with the composition \mathbf{Y}^{id} , and \mathbf{Y}^{id} is the ideal composition of the products assuming a complete oxidation of the available hydrogen (depending on the global equivalence ratio) into water with the equivalent homogeneous mixture :

$$H_P^{T_R, \mathbf{Y}^{\text{id}}} = \int_{\text{Section}} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} h(T_R, \mathbf{Y}^{\text{id}}, p) dS \quad (9.7)$$

Finally, the combustion efficiency is defined as $\eta_c = \eta_{\text{ch}} \cdot \eta_m$ while the overall energetic efficiency of the engine is calculated with $\eta_e = \eta_c \cdot \eta_{\text{th}}$.

Conventional thrust

The thrust T of an engine, calculated by equation (9.1) using the stream thrust analysis, can also be defined as $-\int_{\Sigma} [p\mathbf{n} + \rho\mathbf{V}(\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}] d\sigma$. Considering that this classical definition of the thrust does not take the scramjet engine integration on a vehicle into account, a conventional thrust is preferred and defined as :

$$T_{\text{conv}} = - \int_{\Sigma} [(p - p_{\infty}) \mathbf{n} + \rho\mathbf{V}(\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}] d\sigma \quad (9.8)$$

9.3 Results and discussion

The results obtained with the different injection schemes are now presented with the fuel off condition analysed as a reference case.

9.3.1 Fuel off

Arrays of pressure transducers on both the bodyside (top side) and cowlside (bottom side) of the engine have been used to measure the pressure on the symmetry plane of the model during the test campaign. Figure 9.4 shows a comparison on the bodyside between the pressure distribution calculated through the flowpath, and the measured pressures without fuel injection. A comparison on the cowlside between the calculated and the measured pressure distribution is given in Appendix C. In order to compare these results with numerical simulations, the experimental data are normalized by the static pressure at the exit of the facility nozzle (P_1) for each experimental condition, whereas both the numerical results and cycle analysis are normalized by the nominal equivalent forebody pressure ($P_1 = 3.307$ kPa). The x -axis has its origin at the leading edge and is parallel to the model forebody, oriented in a direction opposite to the main flow. The y -axis has the same origin and is directed in the opposite direction of the engine. A satisfactory agreement between the experiments and the simulation is obtained. The flow inside the engine is clearly dominated by the topology of the compressible flowfield (shock and expansion waves locations). The mass capture ratio for the inlet was determined from the CFD results to be $m_c = 87.4\%$ ($\dot{m}_{\text{air}} = 0.84$ kg/s) at this off-design condition. Without fuel injection, the thermal losses are 0.295 MW.

Conventional Thrust		Thermal Loss	Total Pressure Loss
x-axis [N]	y-axis [N]	[W]	P_{t9}/P_{t1} [-]
-346	-105	2.95×10^5	0.11

TABLE 9.6 – Performance at fuel-off

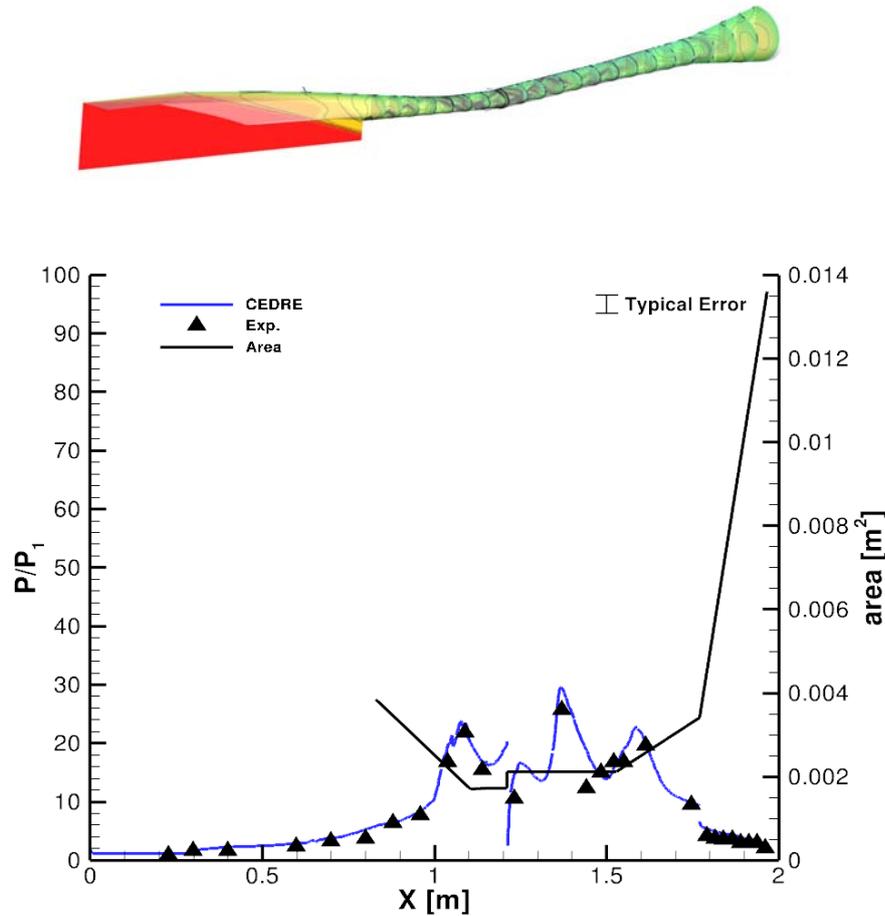


FIGURE 9.4 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations

The performance of the engine in terms of conventional thrust and thermal loss are given in Table 9.6. In this condition without fuel injection, the RESTM12 scramjet engine is characterised by a negative thrust of -346 N and a negative lift of -105 N.

9.3.2 Inlet injection condition

RANS Simulations

Figure 9.5 shows a comparison on the bodyside between the pressure distribution calculated through the flowpath and the measured pressures in the inlet injection scheme at an equivalent ratio of $\phi=0.41$. A comparison on the cowside between the calculated and the measured pressure distribution is given in the Appendix. The blue curve denoted 'Arrhenius' corresponds to the simulation without Turbulence-Chemistry Interaction model. This is the so-called Quasi-Laminar (QL) representation where the mean reaction rates are calculated considering only the mean temperature and composition. The red curve denoted 'UPaSR' corresponds to the simulations conducted with the UPaSR closure. It can be seen that results obtained with QL and UPaSR closures are quite similar. This confirms that in the present conditions the most essential point is to represent in a satisfactory manner the compressible flowfield. It is worth noting that both simulations do not match perfectly

the experimental point located at $x = 1.5$ m, at the beginning of the diverging part of the combustor. This may be ascribed to a small separation zone associated to the shock impingement on the bodyside.

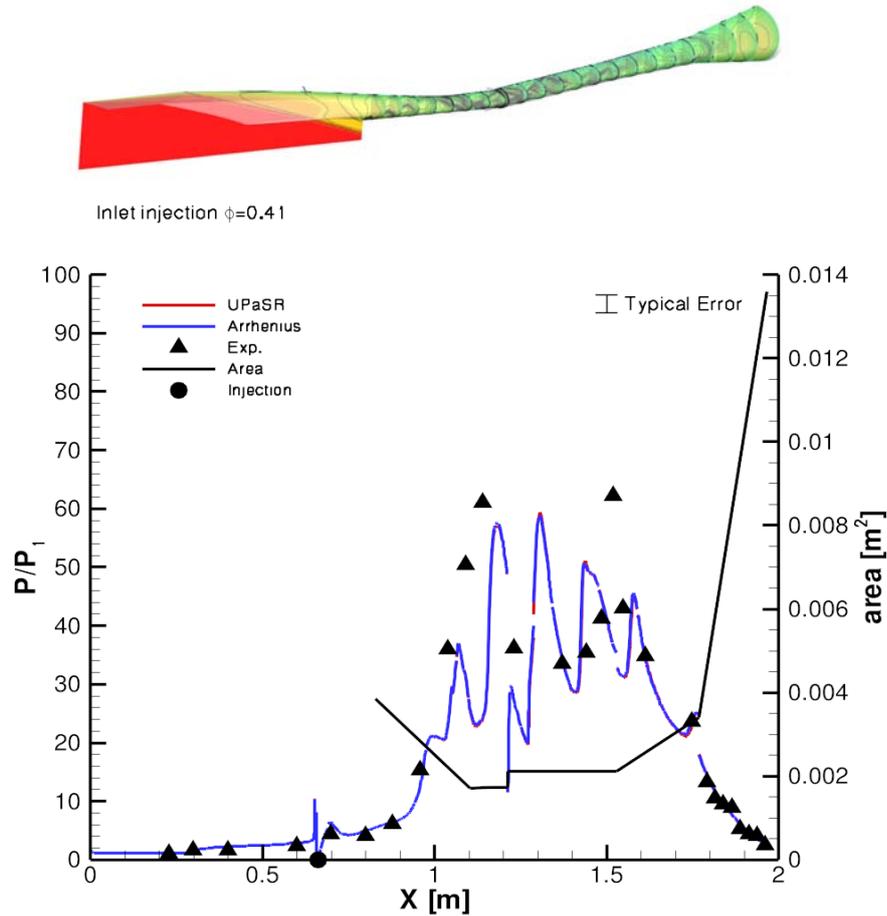


FIGURE 9.5 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations for the inlet injection scheme at $\phi=0.41$

The main purpose of the inlet injection scheme is to promote mixing between fuel and air without disrupting the operation of the inlet. Most of the mixing is actually happening before the inlet throat located at $x = 1.104$ m. The flame anchors to the reflecting shock in the isolator where most of the heat is released (see Fig. 9.6). This operating mode is not necessarily expected because it creates a pressure peak in the isolator and may disrupt the operation of the inlet.

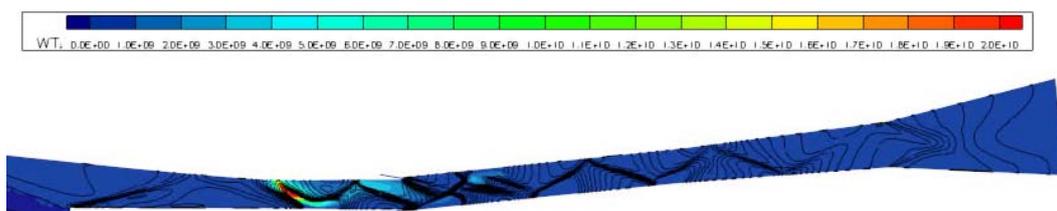


FIGURE 9.6 – Contours of heat release [$W.m^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] calculated from numerical simulations for the inlet injection scheme at $\phi=0.41$

Figure 9.7 displays the flowfields of mean temperature (9.7(a)), mean water mass fraction (9.7(b)), fine-scale volume fraction γ^* (9.7(d)) and mean hydrogen mass fraction (9.7(c)). The combustion takes place on the upper part of the engine as the fuel penetration does not exceed one half of the engine height. In the combustor, the temperature reaches up 2460 K which indicates a strong combustion process. The fine-scale structures are located around the fuel tubes in the inlet, and in the core flow in the combustor. The different areas where the heat is released are located in the isolator where the value of the fine-scale volume fraction γ^* is close to unity. Auto-ignition happens because of the temperature rise induced by a reflecting oblique shock. In this case, the UPaSR closure has no additional effect on the combustion process compared to QL and therefore both approaches give comparable pressure results. Contours of mean water production rate (9.8(a)) and mean heat release (9.8(b)) are depicted on Fig. 9.8 as a function of the Mach number and the equivalence ratio. The production of water indicates a strong supersonic combustion at a variable equivalence ratio ranging between 0 and 2.7.

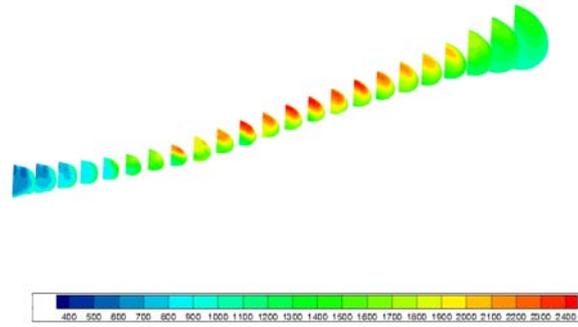
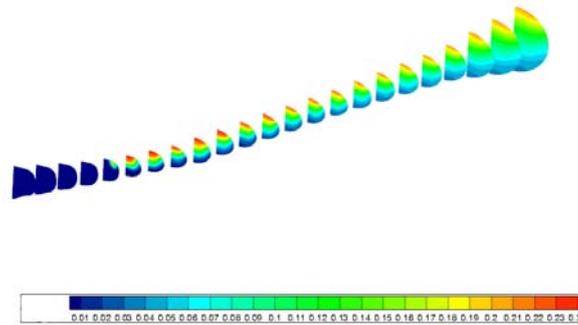
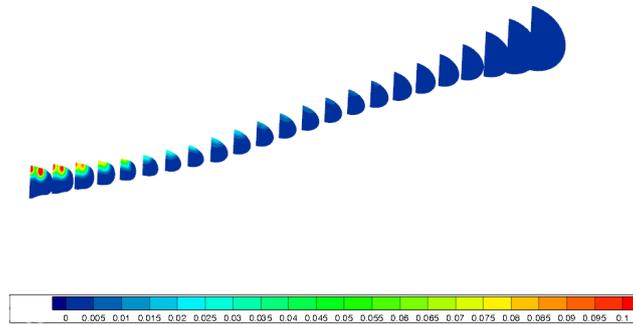
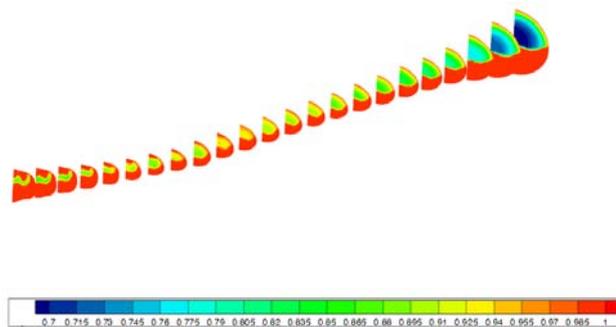
(a) T (K)(b) Y_{H_2O} (-)(c) Y_{H_2} (-)(d) γ^* (-)

FIGURE 9.7 – Flowfields of mean temperature (9.7(a)), mean water mass fraction (9.7(b)), mean hydrogen mass fraction (9.7(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.7(d)) in transversal planes calculated for inlet injection at $\phi = 0.41$

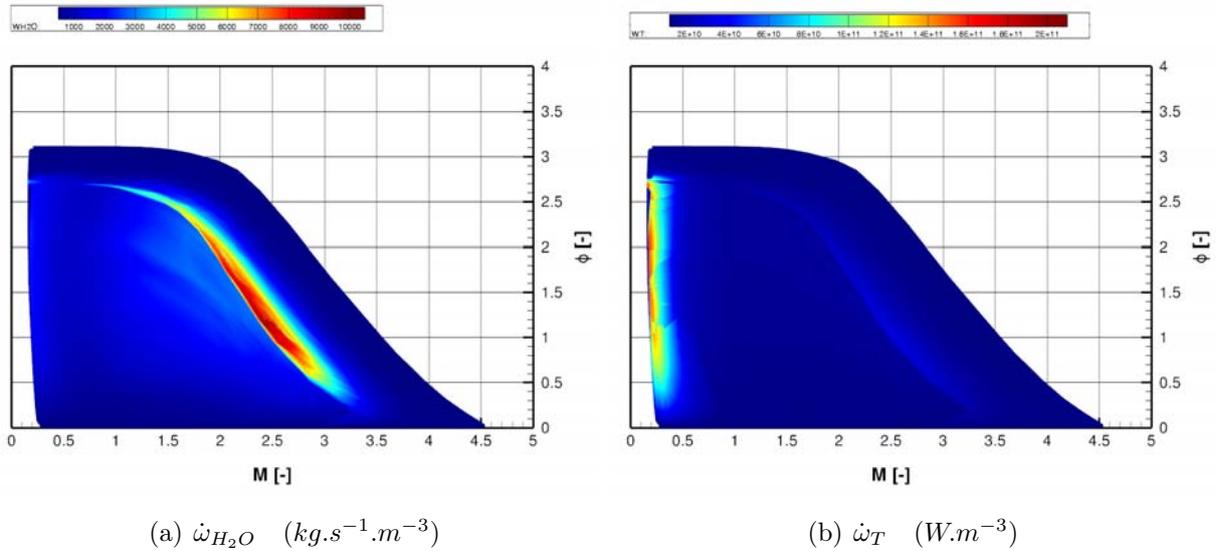


FIGURE 9.8 – Contours of mean water production rate (9.8(a)) and mean heat release (9.8(b)) as a function of M and local ϕ calculated for inlet injection at $\phi = 0.41$

However, a significant part of the heat is released at subsonic speeds. Because of the porthole injection scheme, the combustion process happens in the vicinity of the walls. Radicals from the hot gases, near high temperature equilibrium, are diffused towards the cold boundary layer and they are subsequently recombined in a much more exothermic way.

The good mixing process is confirmed on Fig. 9.9. The mixing efficiency is up to 70% at the entrance of the isolator (which corresponds to the inlet throat) and approximately 85% at the entrance of the combustor. The engine combustion efficiency is 78 %. It could be improved by substantially increasing the chemical efficiency. In the nozzle, the temperature drops due to the expansion and therefore allows species to recombine. If the expansion is too brutal, the temperature decreases too rapidly and freezes the mixture, which seems to be presently the case. The quite low equivalence ratio prevents a strong heat release in the combustion chamber. The thermal efficiency is very low at less than 1 %. The rather small dimensions of the engine seem to be penalizing with regards to thermal loss to the engine structure. Furthermore and as discussed above, radicals recombination in the boundary layer increases the thermal loads at the walls. The thermal loss is 0.448 MW, which is an increase of 51.9 % compared to the case where no fuel is injected.

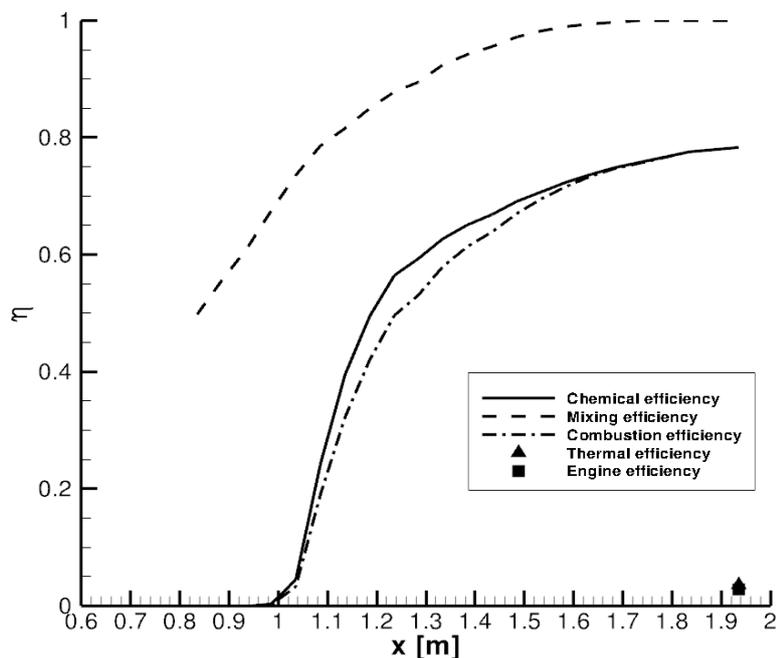


FIGURE 9.9 – Efficiencies for the inlet injection scheme

The performance of the engine in terms of conventional thrust and thermal loss are given in Table 9.7.

Conventional Thrust		Thermal Loss	Total Pressure Loss
x-axis [N]	y-axis [N]	[W]	Pt_9/Pt_1 [-]
-240	-133	4.48×10^5	0.035

TABLE 9.7 – Performance for inlet injection scheme at $\phi=0.41$

With fuel inlet injection at $\phi=0.41$, the RESTM12 scramjet engine produces a negative thrust of -240 N and a negative lift of -133 N.

Stream thrust analysis

The 1-D cycle analysis is typically started at the inlet throat, and proceeds along the isolator, combustor and nozzle. The throat conditions used to start the calculations are based on Numerical Simulations (column 3 of Table 9.2), and the “best match” combustion efficiency curves are chosen so as to (i) match the observed pressure distribution in the flowpath as closely as possible (within the limitations of the 1-D analysis), and (ii) give the same integrated inviscid thrust in the combustor and nozzle as the experimental data. In some instances the 1-D analysis that matches the inviscid thrust in the combustor and nozzle under-predicts the observed pressure rise in the isolator and combustor.

Figure 9.10 shows experimental pressure measurements for both fuel-off (bodyside only for clarity) and inlet injection at an equivalence ratio of $\phi = 0.41$ (both body and cowlside). The first thing to note is that inlet injection changes the pressure distribution in the inlet. Through experiments with nitrogen as the test gas (instead of air), it has been determi-

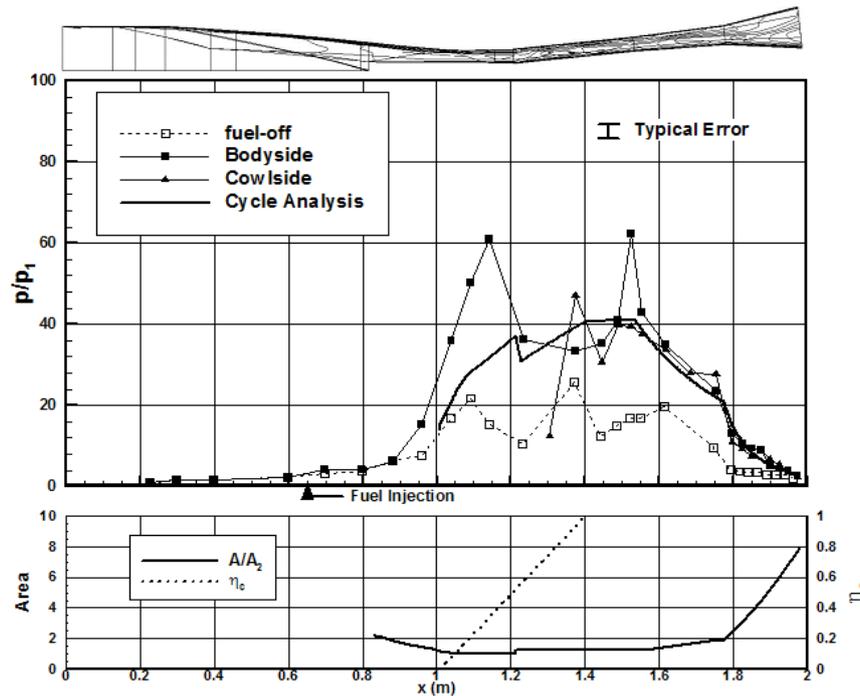


FIGURE 9.10 – Comparison between 1-D analysis and experimental pressure distributions for inlet injection at $\phi = 0.41$

ned in the experimental program [192] that these changes are not caused by combustion, but can be attributed to changes in the inlet shock structure caused by the fuel plume. Downstream of the throat both the fueled body and cowside pressure distributions are considerably higher than with no fuel injection. These increments are due to combustion of fuel. Cycle analysis was initiated upstream of the throat at $x = 1.008$ m, with 1-D flux conserved properties consistent with the CFD solution at this axial position. Injection of fuel in the inlet was modeled in this instance by adding the fuel at the starting point of the calculation. Figure 9.10 shows the 1-D pressure distribution predicted by the “best match” cycle analysis, in comparison with the experimental data. The calculated pressure rises rapidly in the isolator and constant area portion of the combustor, before leveling off and then decreasing through the divergent part of the combustor and the nozzle. The prescribed combustion efficiency curve that produced this pressure distribution is reported in the bottom plot of Figure 9.10, along with the internal area distribution of the engine. This fuel based combustion efficiency curve increases linearly from zero to 100% over a distance of approximately 400 mm. The cycle analysis is not able to match the shock dominated pressure distribution in the inlet, but follows the experimental pressure distribution through the combustor and nozzle. Combustion appears to be completed in a length approximately equal to 300 mm, well within the constant area section of the combustor.

With this approach, a 100% combustion efficiency is necessary to match the pressure distribution and is representative of the overall engine efficiency (as thermal, chemical and mixing efficiencies are not distinguished). It overestimates the engine efficiency calculated with the RANS approach (4%) because some crucial aspects are not taken into account in

the cycle analysis :

- Combustion is induced by a shock and assumed to be fully premixed.
- Radicals recombine in the cold boundary layer and increases the thermal loads at the wall (the calculated heat loss to the structure predicted by the cycle analysis is 0.278 MW).

From the experimental point of view, all inlet injection tests conducted at $\phi > 0.41$ gave raise to engine unstarts, so while inlet injection leads to high mixing efficiency, there is a limit to the amount of fuel that can be injected at such conditions.

9.3.3 Step injection condition

RANS Simulations

Figure 9.11 shows a comparison on the bodyside between the pressure distribution calculated through the flowpath and the measured pressure levels in the step injection scheme at an equivalence ratio of $\phi=1.14$. A comparison on the cowside between the calculated and the measured pressure distribution is given in Appendix C.

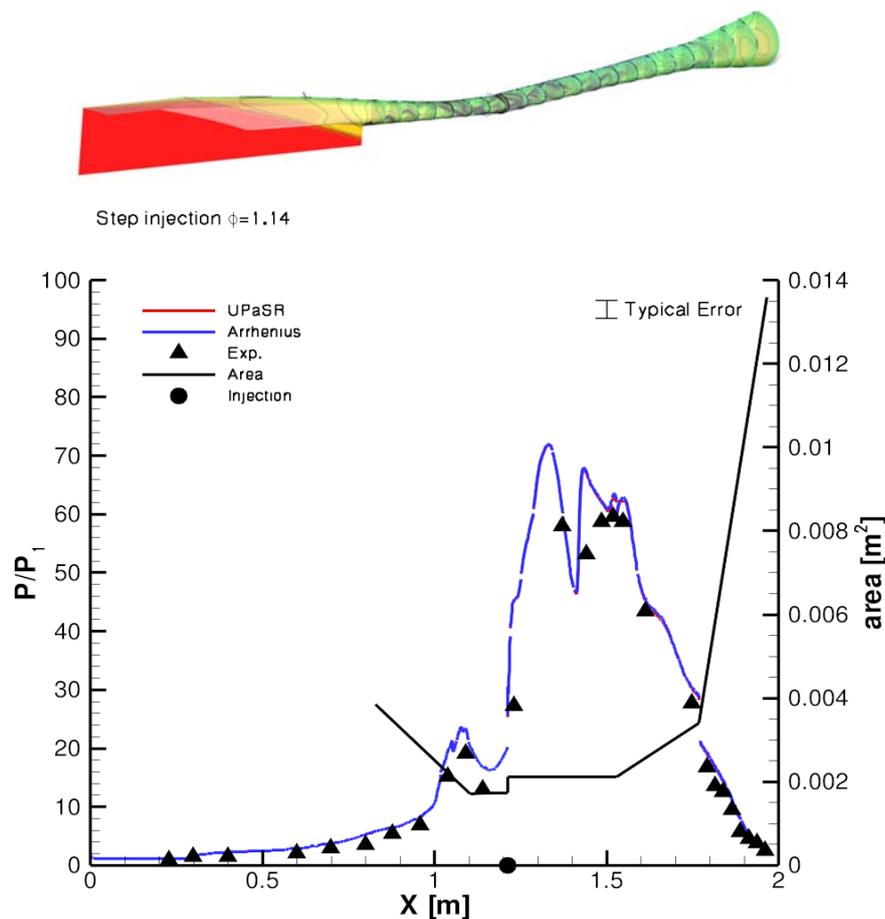


FIGURE 9.11 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$

The blue curve denoted 'Arrhenius' corresponds to the simulation performed with the QL closure that ignores the influence of the unresolved fluctuations while the red curve

denoted 'UPaSR' is associated to the simulation conducted with the UPaSR closure. The results obtained with both approaches are again quite similar and in a good agreement with the experimental results. The step injection scheme has been designed primarily to generate combustion in the boundary layer for reduced combustor drag, rather than high combustion efficiency. The fuel is therefore tangentially injected behind a small step at the combustor inlet. A large recirculation region is created which reduces the flow section. The combustor wall features an angle of 6° with respect to the inlet axis in order to re-align the flow streamlines with the nominal flight direction. The resulting oblique shocks are converging in the core of the combustor. The heat release peaks behind this shock pattern in a torus-shaped region (see Fig. 9.13) and spreads out all along the first part of the combustor where the section area is constant (see Fig. 9.12).

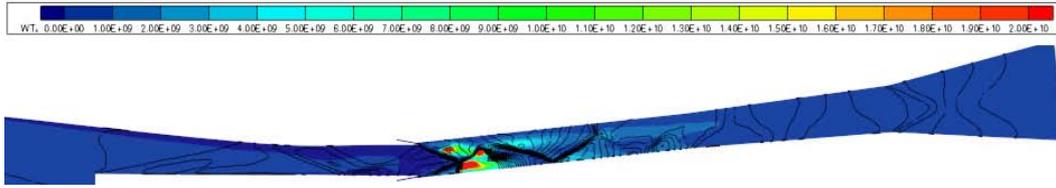


FIGURE 9.12 – Contours of heat release [$W.m^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] in the symmetry plane calculated from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$

In order to assess the combustion regime, a premixedness index is considered in the flame region. This quantity, often referred to as the Takeno index, see Yamashita et al.[213], is defined as :

$$\frac{\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{H_2}}{\|\nabla Y_{O_2}\| \cdot \|\nabla Y_{H_2}\|} \quad (9.9)$$

Considering the small influence of unresolved fluctuations of concentration, that has been evidenced above, the formula 9.9 is applied to average quantities, i.e \tilde{Y}_{O_2} and \tilde{Y}_{H_2} . A positive value of this index (white color in Fig. 9.13) has been originally interpreted by the authors as corresponding to a premixed flame while a negative value (black color in Fig. 9.13) corresponds to a diffusion flame. It is first and foremost a good indication of the gradient orientation of the mean concentration field of oxygen with regards to mean concentration of hydrogen.

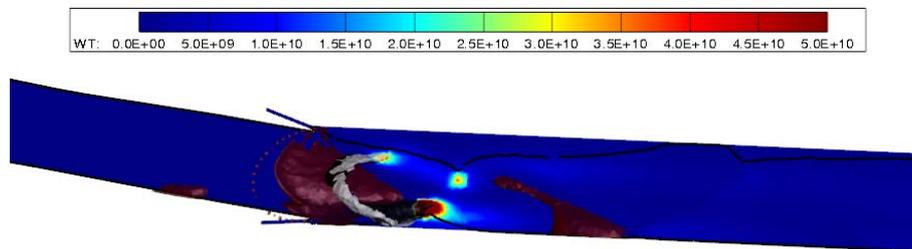


FIGURE 9.13 – Contours of heat release rate and sonic line (in black) in the symmetry plane, water production rate isosurface [$5000 \text{ kg/m}^3/\text{s}$] colored by premixedness index, pressure isosurface [120 kPa] (in purple) calculated from numerical simulations for the step injection scheme at $\phi=1.14$

The Takeno index indicates that the flame area is fed through diffusion where the gradients of hydrogen and oxygen are in opposite directions. Contours of mean water production

rate (9.15(a)) and mean heat release (9.15(b)) are depicted on Fig. 9.15 as a function of the Mach number and the equivalence ratio. The production of water indicates that the combustion process is happening at equivalence ratios ranging from 0.5 to 6. No particular peak at equivalence ratio equal to 1 is observed. This may indicate that even though the gradients direction are suggesting a diffusion flame structure, the combustion process is dictated by the shock pattern located at the combustor inlet. In this case, a part of the burning flow is subsonic, corresponding to the lower part of the combustor whereas the major part of the combusting flow remains supersonic. As already discussed for the inlet injection case, radicals from the hot gases recombine in the boundary layer, creating a large heat release near the wall, at subsonic speeds. Figure 9.14 shows the flowfields of mean temperature (9.14(a)), mean water mass fraction (9.14(b)), fine scale volume fraction γ^* (9.14(d)) and mean hydrogen mass fraction (9.14(c)). The combustion process is stronger on the lower part of the combustor and more staged on the upper part of the combustor where the temperature reaches up 2550 K. The fine-scale structures are located in the core flow in the combustor. The area of maximum heat release is confined in the very first part of the combustor. In this region, the fine-scale volume fraction γ^* is close to unity and the UPaSR closure has therefore no significant effects on pressure results in comparison with the QL approach.

Combustion is expected to be limited by the mixing between the fuel and the air. However, the mixing efficiency is up to 85% at approximately $x = 1500$ mm, which corresponds to the first half of the constant section part of the combustor (see Fig. 9.16). The turbulent mixing (through the turbulent viscosity μ_t) is strongly affected and enhanced by the shock structure in this region. The presence of these shock wave structures increases its maximum value by a factor of five. The engine combustion efficiency reaches approximately 78 % at the end of the combustor. The injection fuel scheme is designed to reduce skin friction by boundary layer combustion but in the same time, most of the heat is produced near the walls. The thermal efficiency is therefore quite low (50%) despite the high equivalence ratio. The thermal losses are 0.540 MW, which corresponds to an increase of 83.1 % compared to the case where no fuel is injected.

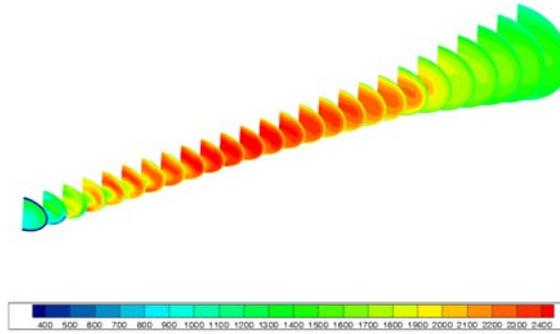
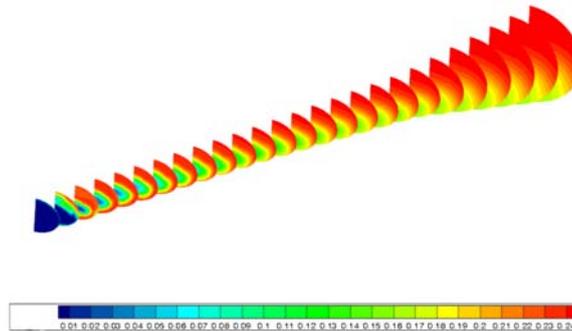
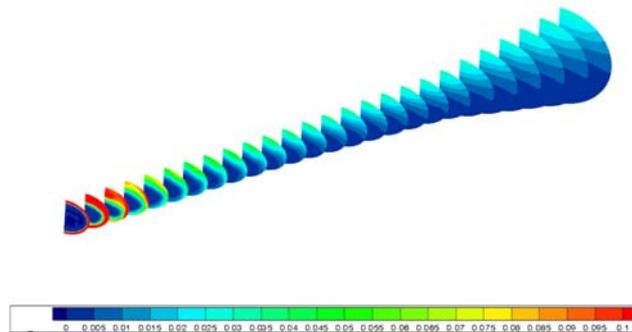
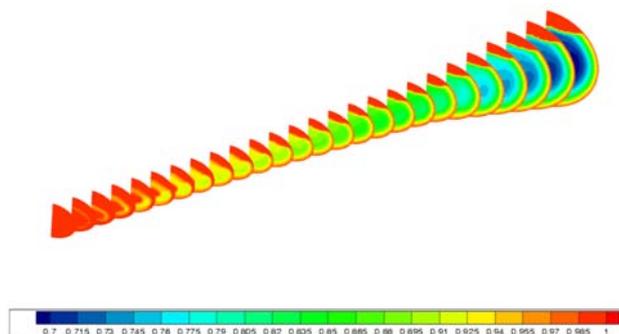
(a) T (K)(b) Y_{H_2O} (-)(c) Y_{H_2} (-)(d) γ^* (-)

FIGURE 9.14 – Flowfields of mean temperature (9.14(a)), mean water mass fraction (9.14(b)), mean hydrogen mass fraction (9.14(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.14(d)) in transversal planes calculated for injection at the step at $\phi = 1.14$

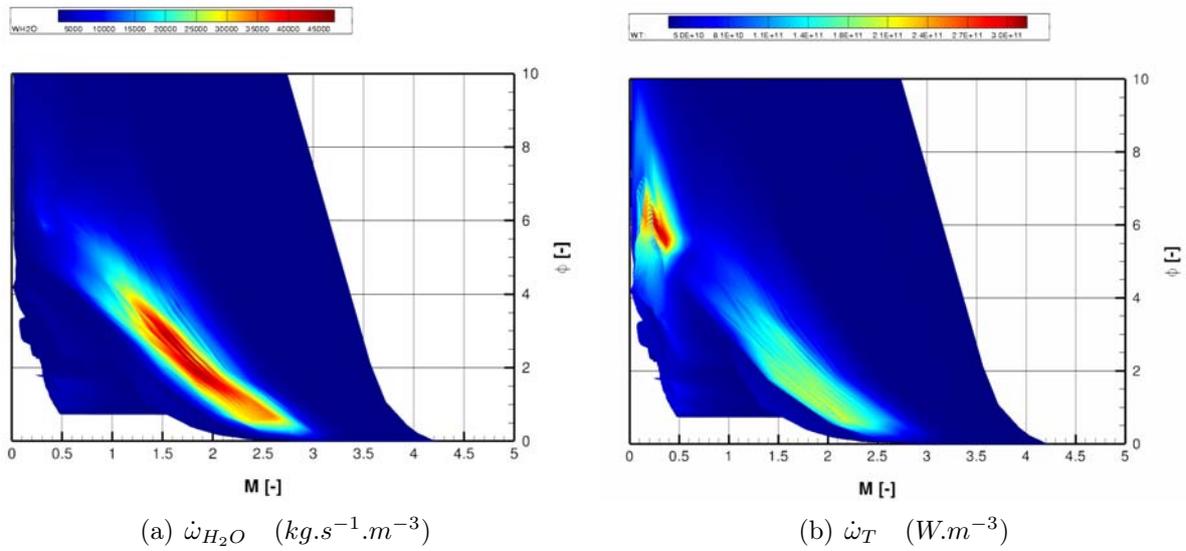


FIGURE 9.15 – Contours of mean water production rate (9.15(a)) and mean heat release (9.15(b)) as a function of M and local ϕ calculated for injection at the step at $\phi = 1.14$

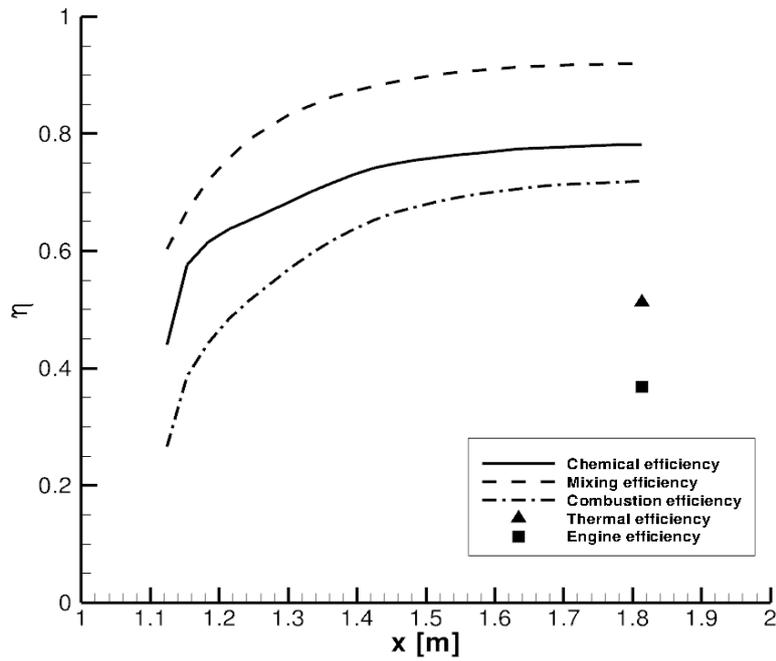


FIGURE 9.16 – Efficiencies for the step injection scheme

The performance of the engine in terms of conventional thrust and thermal losses are provided in Table 9.8.

Conventional Thrust		Thermal Loss	Total Pressure Loss
x-axis [N]	y-axis [N]	[W]	Pt_9/Pt_1 [-]
-58	-138	5.40×10^5	0.027

TABLE 9.8 – Performance for step injection scheme at $\phi=1.14$

With fuel injection at the step at $\phi=1.14$, the RESTM12 scramjet engine produces a negative thrust of -58 N and a negative lift of -138 N.

Stream thrust analysis

Figure 9.17 shows a comparison of the experimental measurements and the “best match” cycle analysis for streamwise injection behind the step at $\phi = 1.14$. The cycle analysis is started at the throat, and fuel is added at the step. Mixing between parallel co-flowing streams of hydrogen and air results in general, in a case without shocks, in relatively slow mixing. This is the case here with the 1D assumption. A maximum fuel based combustion efficiency of $\eta_c = 44.0\%$ is reached at approximately $x = 1500$ mm, which corresponds to a length of 440 mm ($L/H = 10.9$) for mixing, ignition and reaction. The corresponding heat loss to the structure calculated by the cycle analysis code is 0.282 MW. With regards to the cycle analysis hypothesis, streamwise fuel injection behind the step has a limited capacity for fueling the entire duct.

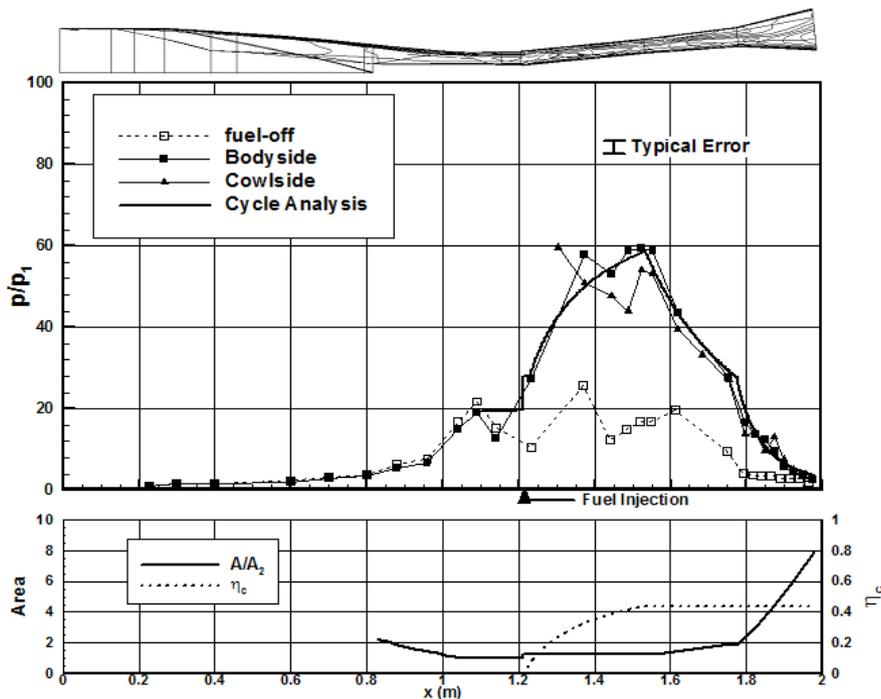


FIGURE 9.17 – Comparison between 1-D analysis and experimental pressure distributions for injection at the step with $\phi = 1.14$

Surprisingly, both approaches (RANS and Cycle analysis) give a comparable engine efficiency of approximately 40%. In this step injection case, the shock structure has a

bigger influence on mixing than originally thought : the mixing efficiency ends up to be quite high. The heat losses, and they are largely underestimated through the cycle analysis, appear to be quite large.

9.3.4 Combined injection condition

RANS Simulations

Figure 9.18 shows a comparison on the bodyside between the pressure distribution calculated through the flowpath and the measured pressures in the combined injection scheme at an equivalent ratio of $\phi=1.23$. A comparison on the cowlside between the calculated and the measured pressure distribution is also provided in Appendix C.

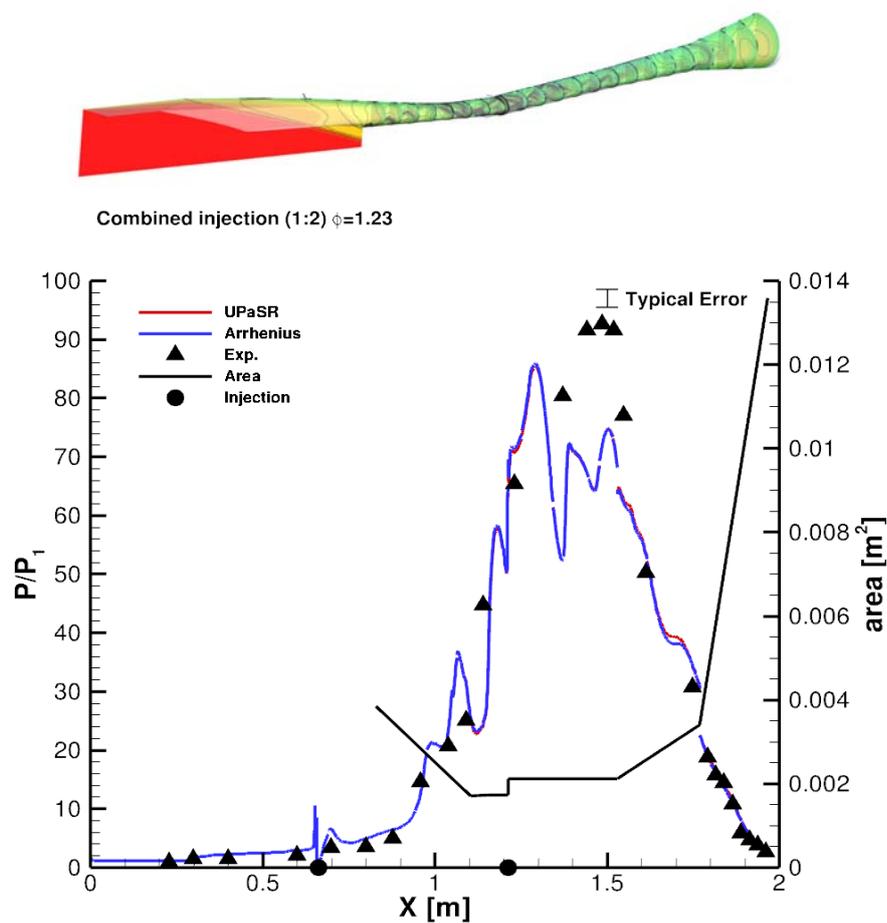


FIGURE 9.18 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations conducted for the combined injection scheme (1 :2) at $\phi=1.23$

The blue curve denoted 'Arrhenius' corresponds to the numerical simulation performed with the QL closure while the red curve denoted 'UPaSR' is associated with the one conducted using the UPaSR closure. The numerical results are in a good agreement with the experimental results up to the second part of the combustor on the bodyside. The cowlside results are in a good agreement with the experimental results all along the flowpath. The discrepancies on the bodyside may result from a local boundary layer separation.

The global equivalence ratio is $\phi=1.23$ distributed between the inlet ($\phi_{inlet} = 0.41$) and the step ($\phi_{step} = 0.82$). This injection can therefore be thought as a superposition of the previous inlet injection scheme and a step injection at equivalence ratio of $\phi=0.82$. Figure 9.19 displays the averaged pressure (9.19(a)) and averaged temperature (9.19(b)) in the transversal sections of the engine for the different fueling schemes. Both pressure and temperature curves are superimposed for combined and inlet injection cases up to the step, at the beginning of the combustor. Injection at the step allows then to reach a higher mean pressure and temperature than with inlet injection or step injection alone. Maximum of pressure and temperature are also obtained in a lower delay in the case of combined injection than the step injection case alone.

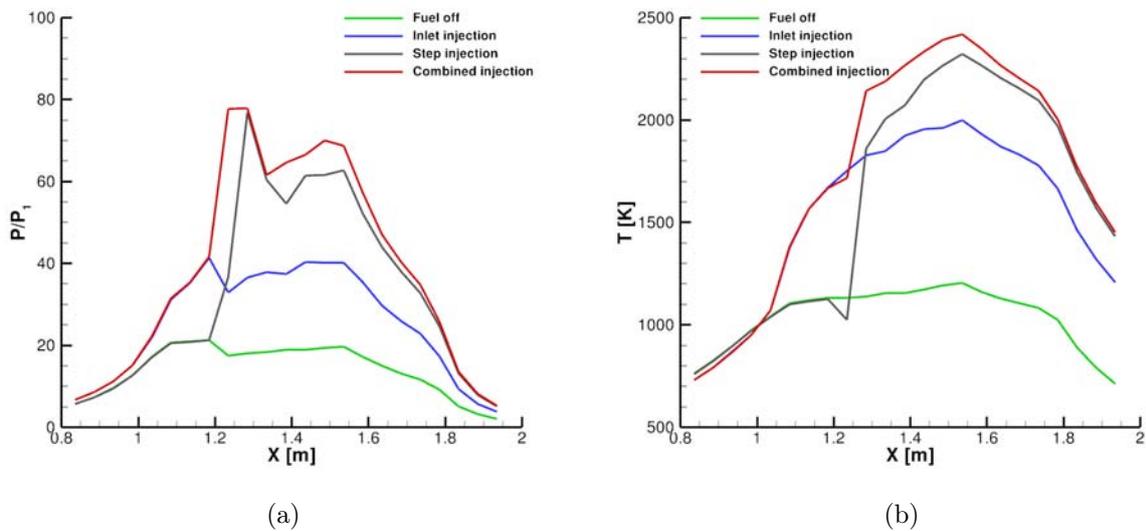


FIGURE 9.19 – Comparison between the three different fueling schemes in terms of averaged pressure (9.19(a)) and averaged temperature (9.19(b))

The flame structure is also different. Compared to the step injection case alone, the heat is released on the lower side of the combustor (see Fig. 9.20). This is due to the lack of oxygen on the upper part of the combustor which is filled with hot combustion products. These products are issued from the combustion that takes place downstream of the first injection stage in the inlet. The shock pattern is also impacted.

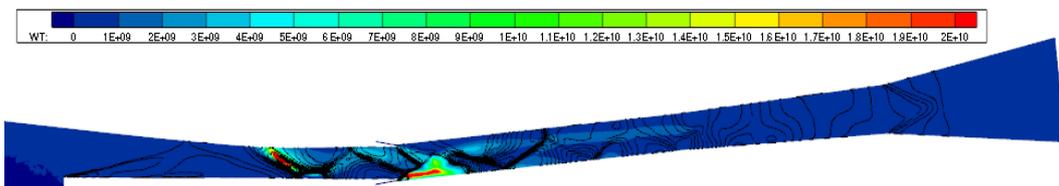


FIGURE 9.20 – Contours of heat release [$W.m^{-3}$] and pressure isolines [50-250 kPa] in the symmetry plane calculated from numerical simulations for the combined injection scheme at $\phi=1.23$

Figure 9.21 also shows the flowfields of mean temperature (9.21(a)), mean water mass fraction (9.21(b)), fine scale volume fraction γ^* (9.21(d)) and mean hydrogen mass fraction (9.21(c)). The field of the heat release rate is similar to the step injection and inlet injection cases alone and associated with the aerodynamic structure. In these regions, the fine-scale

volume fraction γ^* is close to unity and therefore the numerical results obtained in terms of pressure values are very similar by using either the UPaSR or the QL approach. Contours of mean water production rate (9.22(a)) and mean heat release (9.22(b)) are also depicted on Fig. 9.22 as a function of the Mach number and the equivalence ratio. The previous step injection scheme is clearly visible in this figure and dominates the overall process. The production of water indicates that the combustion process occurs at equivalence ratio values ranging between 0.5 and 10, with traces of H_2O production at equivalence ratio up to a value of 20. The inlet injection scheme favors the combustion process due to the step injection scheme.

The mixing efficiency in the combined injection case is indeed affected by combustion occurring upstream of the combustor. The mixing efficiency is increased to 60% at a location $x=1420$ mm, whereas it is equal to 55% at the same location with the step injection scheme alone. The final combustion efficiency is also slightly higher. In the meantime, the thermal efficiency is also lower in the combined injection case. Note that the decrease of the mixing efficiency at a location of approximately $x=1200$ mm is only due to the fuel injection at the step and must not be attributed to a physical reason. Finally, the thermal losses are 0.607 MW, which is an increase of 105.8 % compared to the case where no fuel is injected.

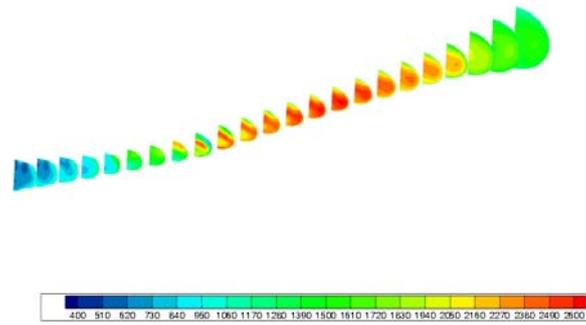
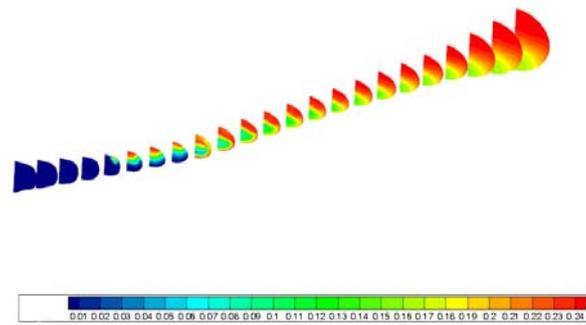
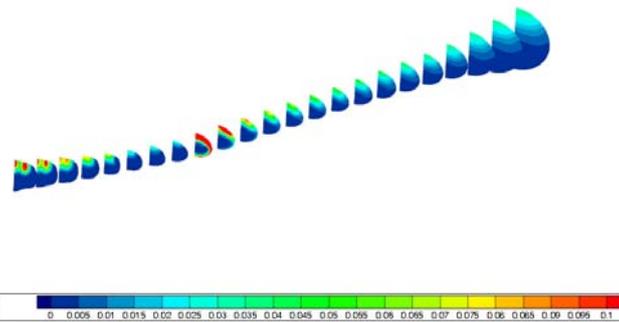
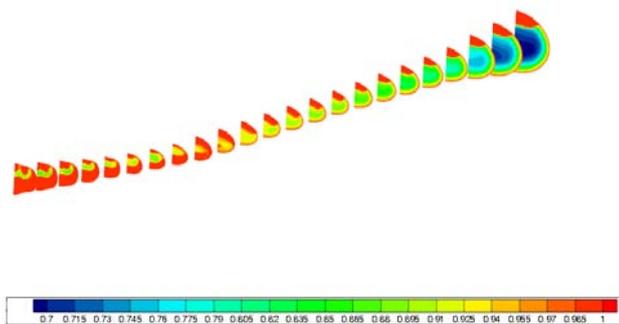
(a) T (K)(b) Y_{H_2O} (-)(c) Y_{H_2} (-)(d) γ^* (-)

FIGURE 9.21 – Flowfields of mean temperature (9.21(a)), mean water mass fraction (9.21(b)), mean hydrogen mass fraction (9.21(c)) and fine scale volume fraction γ^* (9.21(d)) in transversal planes calculated for combined injection at $\phi = 1.23$

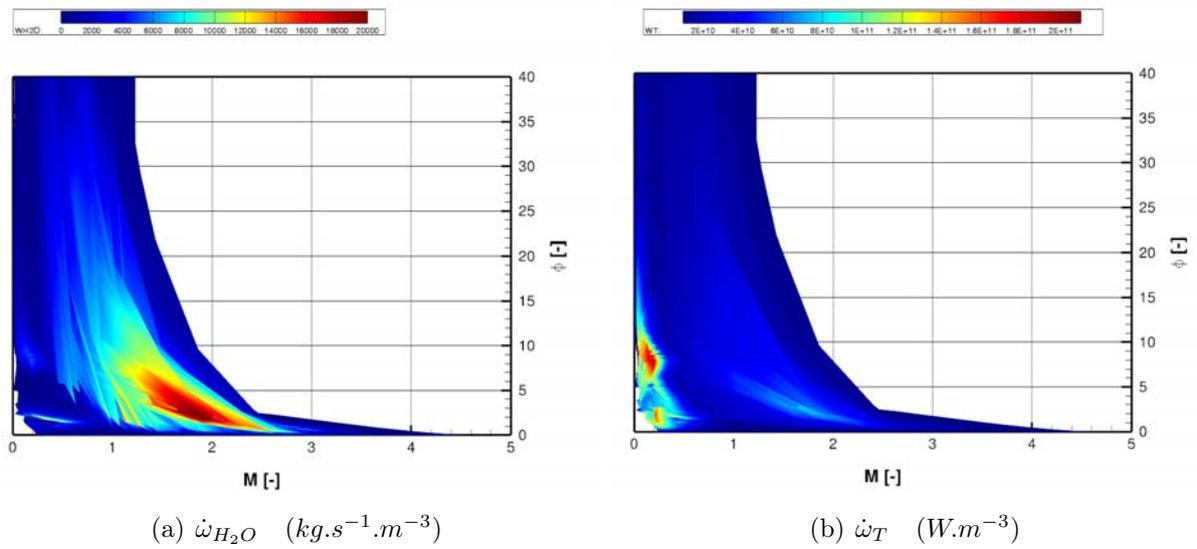


FIGURE 9.22 – Contours of mean water production rate (9.22(a)) and mean heat release (9.22(b)) as a function of M and local ϕ calculated for combined injection at $\phi = 1.23$

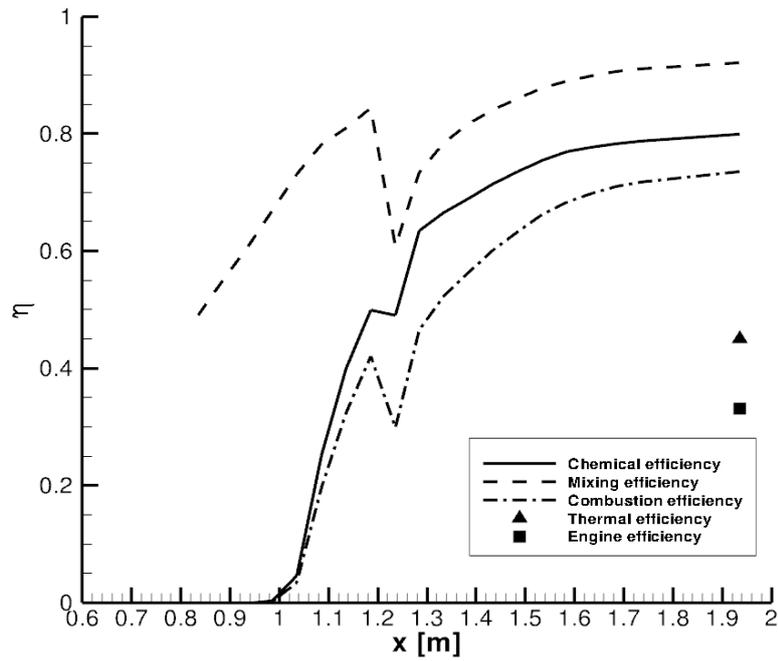


FIGURE 9.23 – Efficiencies for the combined (1 :2) injection scheme

The performance of the engine in terms of conventional thrust and thermal loss are given in Table 9.9.

Conventional Thrust		Thermal Loss	Total Pressure Loss
x-axis [N]	y-axis [N]	[W]	Pt_9/Pt_1 [-]
-50	-182	6.07×10^5	0.027

TABLE 9.9 – Performance for combined (1 :2) injection scheme at $\phi=1.23$

With combined injection at $\phi=1.23$, the RESTM12 scramjet engine produces a negative thrust of -50 N and a negative lift of -182 N.

Stream thrust analysis

Figure 9.24 shows experimental data and matching cycle analysis for combined injection at $\phi = 1.23$ ($\phi_{inlet} = 0.41$; $\phi_{step} = 0.82$). In this instance there is a small amount of pressure rise observed upstream of the throat, and a very high level of pressure in the isolator and constant area section of the combustor. The cycle analysis calculation that matched the inviscid thrust in the combustor and nozzle predicts a pressure rise in the isolator and combustor that is markedly lower than observed in the experiments. The maximum combustion efficiency obtained for inlet injection conditions reaches $\eta_c = 90\%$, and the combustion length is 200 mm. Fuel injection at the step shows an unchanged combustion length, and a combustion efficiency of $\eta_c = 27\%$. This results in an overall air based combustion efficiency of $\eta_{c,air} = 68.1\%$, which is the highest value obtained for all cases investigated. The corresponding heat losses to the structure calculated by the cycle analysis code are 0.318 MW.

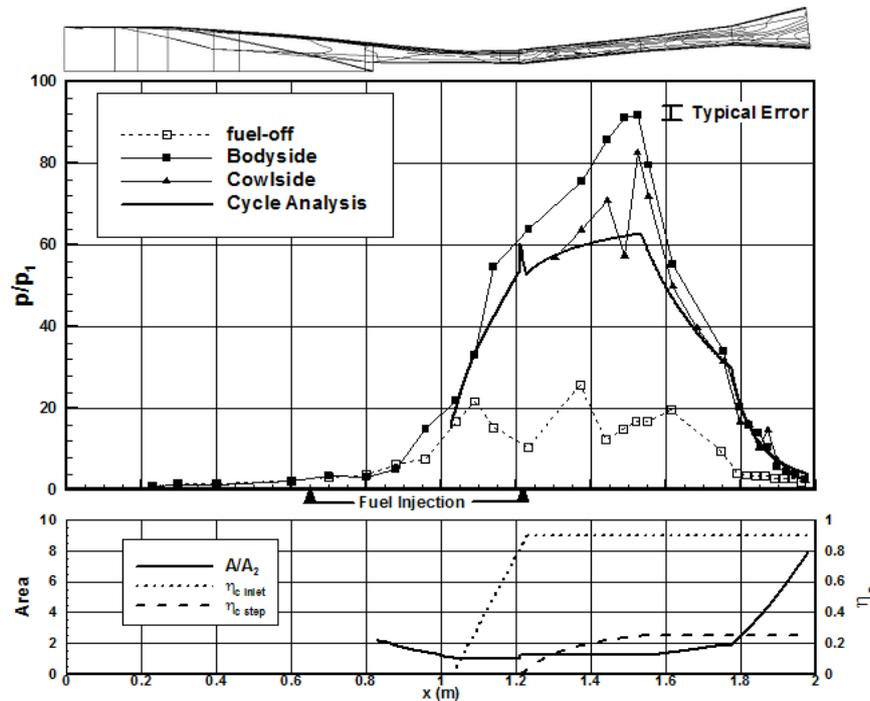


FIGURE 9.24 – Comparison of 1-D analysis and experimental pressure distributions for combined injection at $\phi = 1.23$

For the combined injection case, both approaches gave comparative results in terms of performances. Mixing efficiency is overestimated in order to match experimental results whereas thermal losses are underestimated. A large part of the heat loss to the walls is the outcome of radicals recombination which is not taken into account with the Reynolds analogy. Enhanced mixing due to the presence of shocks is also neglected in the one-dimensional analysis.

The internal specific thrust (which corresponds to the combustor and the nozzle thrust divided by the captured mass flow rate) is calculated and compared¹ with both RANS Simulations and Cycle Analysis in Table 9.10. This confirms that when similar efficiencies (combined injection and step injection cases) are considered, specific thrusts are also similar.

	Fuel off	Inlet injection	Step injection	Combined injection
RANS Simulations	-4	171	440	479
Cycle analysis	46	318	453	525

TABLE 9.10 – Comparison between the predicted specific thrusts f [m/s]

9.3.5 Skin friction reduction

The local skin friction coefficient C_f is defined as $C_f = 2\tau_w/\rho_e U_e^2$, where ρ_e and U_e are the local conditions at the edge of the boundary layer, and τ_w is the wall shear stress. Local skin friction coefficients are usually presented in form of a proportional reduction in skin friction coefficient from the value calculated with no injection as $(C_{fn} - C_f)/C_{fn}$, where C_f is the value calculated for fuel injection and C_{fn} is the value calculated when no fuel is injected. A value of zero corresponds to no change in the value of the skin friction coefficient, a positive value corresponds to a decrease in C_f and a negative value to an increase in C_f .

RANS Simulations

In the case of the RESTM12 engine, fuel on comparisons with the fuel off case may be meaningless as combustion inside and outside the boundary layer induces very different core flows. Comparisons performed in terms of shear stresses are therefore preferred. For each injection case, the viscous drag is calculated and results are reported in the Table 9.11.

Fuel off	Inlet injection	Step injection	Combined injection
-360	-412	-413	-436

TABLE 9.11 – Viscous drag [N] calculated for the different fueling schemes

No viscous drag reduction is observed for any of the fueling scheme. Values of viscous drag are very close to each other for the different cases. Local diminution of skin friction can be attributed to either a viscosity effect or combustion in the boundary layer. In this case, the decrease of density due to heat release results in local fluid dilatation which increases boundary layer displacement. The expansion of the boundary layer reduces mean velocity gradients, and hence induces lower skin friction levels. In addition, Stalker [191] emphasizes

1. It is worth noting that specific thrust calculations start at the inlet throat for the Cycle Analysis and at the step for RANS Simulations

that the boundary layer density reduction due to combustion-induced temperature rise decreases turbulent viscosity and hence Reynolds (turbulent shear) stresses, thus reducing skin friction.

Contours of wall shear stress are displayed on the figure 9.25 and large non-uniformities can be observed in each case. Mean velocity gradients are quite important on the lower side of the combustor, even for the fuel off condition. The shock structure is in that case of great influence, especially through boundary layer thickening with shock impingement. On the upper side of the engine, the maximum shear stress is lower by approximately a factor of five. There is little or no effect of viscosity. Inlet injection has the major effect of strengthening the shock compression throughout the flowpath. In terms of wall shear stress, the effects observed in the fuel off case are therefore here worsened. The integral main effect is an increase of viscous drag compared to the fuel off case. On the one hand, step injection has a local effect of decreasing wall shear stress due to viscosity effect at the very beginning of the combustor when no combustion occurs. On the other hand, the combustion has also the main effect of strengthening the shocks and therefore increasing the shear stress between two shock - boundary layer interactions. The global balance is again an increase of the viscous drag compared to the fuel off case.

No specific effect of the combined injection scheme is observed on the shear stress distribution. The viscous drag in this case is therefore quite close to the step and inlet injections schemes.

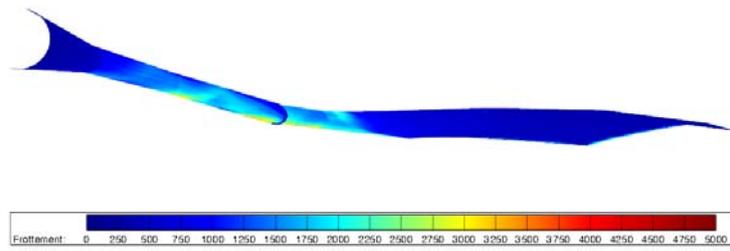
Stream thrust analysis

Referring once again to the flow stations definition, the internal thrust of the flowpath, F_{int} , is calculated as follows :

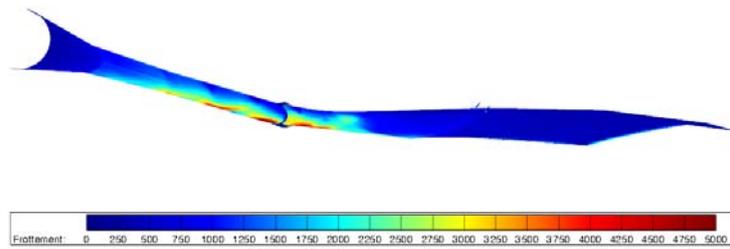
$$T_{int} = F_9 - F_2 - D_{inlet} \quad (9.10)$$

where F_9 is the stream thrust at the exit of the internal flowpath (based on the cycle analysis calculations), F_2 is the stream thrust at the throat, and D_{inlet} is the inlet drag calculated from the VULCAN code (the availability of the inlet drag means there is no need to calculate the additive drag). Figure 9.26 shows the variation of specific thrust, $f = T_{int}/\dot{m}_{air}$ with equivalence ratio for the three fueling configurations. Specific thrust varies linearly for inlet injection, but is limited to low values of the equivalence ratio. Step injection shows a similarly increasing specific thrust for $\phi < 0.5$, with a levelling off at higher ϕ consistent with mixing limited combustion. The combined injection shows linearly increasing specific thrust from $\phi = 0.66$ to the maximum equivalence ratio examined of 1.23. The rate of increase is slightly lower than observed for inlet injection only, due to the low combustion efficiency of step injection. At $\phi = 1$ and above, combined injection produces the highest specific thrust. Net positive thrust for the internal flowpath is generated for all fueling configurations above an equivalence ratio of $\phi = 0.35$ with the stream thrust analysis. The maximum specific thrust is obtained from the combined injection at an equivalence ratio of 1.23 at a level of 252 m/s (25.7 lbF/lbm).

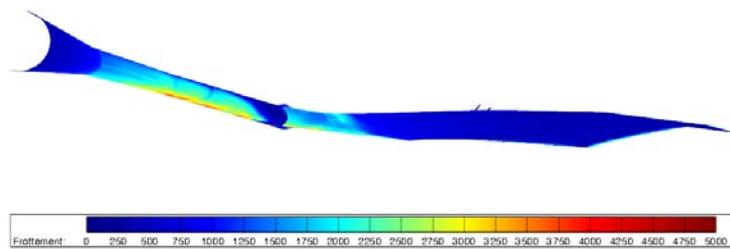
Up till this point the performance calculations have not included any effects of skin friction reduction from combustion in the boundary layer (with a value of $C_f = 0.002$ used throughout the flowpath to account for viscous losses). Based on the previous analysis of Stalker [191], streamwise fuel injection at the step as performed in the current engine should



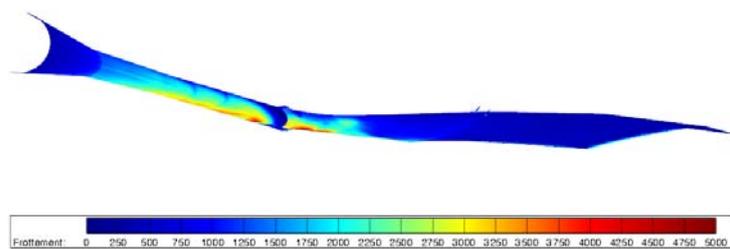
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 9.25 – Contours of wall shear stress [N/m^2] for the fuel off (9.25(a)), inlet injection (9.25(b)), step injection (9.25(c)) and combined injection (9.25(d)) cases

produce a significant reduction in skin friction coefficient in the combustor. In an attempt to quantify the effect of boundary layer combustion on the internal thrust in this instance, the following variation in C_f (which is considered to be a conservative estimate of the effect of boundary layer combustion) is applied to the constant area section of the combustor only :

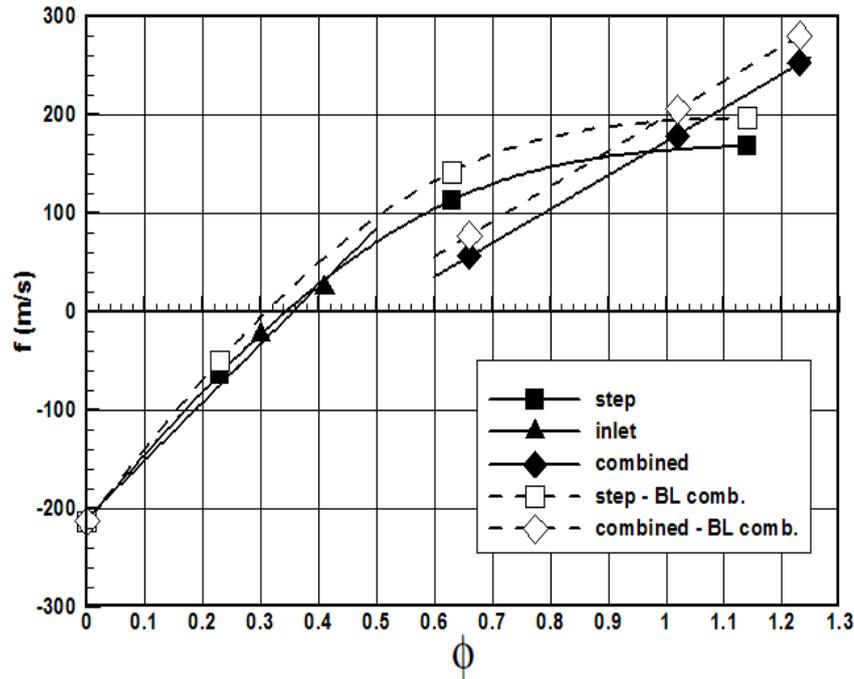


FIGURE 9.26 – Specific internal thrust variation with fuel equivalence ratio

$$\begin{aligned} C_f &= 0.002(1 - \phi_{step}) & \phi_{step} < 0.5 \\ C_f &= 0.001 & \phi_{step} \geq 0.5 \end{aligned} \quad (9.11)$$

The change in the specific internal thrust levels produced by this assumption are shown in Figure 9.26. The inlet injection results remain unaltered, but the net specific thrust levels of both the step and combined injection configurations are increased by amounts ranging between 25 and 36% at $\phi \approx 0.65$, and approximately 15% at $\phi > 1$. Combustor skin friction reduction from boundary layer combustion is useful at these off-design conditions, but it might gain further importance at the Mach 12 design point for this engine, when small changes in thrust and drag will have more substantial effects on the overall net thrust.

9.4 Conclusions

Numerical simulations performed on a full three-dimensional scramjet engine at representative Mach 8.7 flight conditions have been reported. Most of the previous numerical studies devoted to similar conditions were often focused on simpler geometries featuring also lower levels of total enthalpies, see for example [214, 37]. Results of pressure distributions along the flowpath of the RESTM12 engine in the symmetry plane, for different fuelling strategies, have been presented. A good agreement is obtained between numerical simulations and experimental data. It can be seen that numerical results obtained with either the QL or the UPaSR closure are quite similar. This confirms that the essential point to cope with such scramjet engine conditions is to represent satisfactorily the compressible flowfield which seems to be the case here. Further applications of the UPaSR closure to

others conditions will be required to delineate the possible gains and limitations of the present modelling proposal.

For each fueling strategy, auto-ignition is completed in the internal oblique shocks. Most of the heat is released in small regions located in the vicinity of the auto-ignition region. The mixing efficiency is found to be quite high, even for the step injection case. The main reason for such a behavior is that turbulent mixing is significantly enhanced by the presence of shock waves. Comparisons with cycle analysis have been performed. Two major flow phenomenon are clearly neglected : improved turbulent mixing behind shocks and radical recombinations in the cold boundary layer. When engine efficiencies happens to be comparable with RANS simulations, global performances, such as internal specific thrust, are also comparable.

An attempt to reduce skin friction through boundary layer combustion has been evaluated in every fueling configuration. Hydrogen injection in the boundary layer creates a local reduction of the viscous drag, before combustion happens, due to viscosity effect. However, the combustion process induces an increase of the mean velocity gradient on the bodyside of the engine in each fueling configuration. No global viscous drag reduction has therefore been evidenced in comparison with the fuel off case.

Different solutions may be investigated to improve the RESTM12 engine performance.

- The mixing efficiency is probably the most difficult parameter to play with. In the RESTM12 engine, the mixing efficiency, depending on the fueling configuration, ends up to be quite high. Passive and active mixing devices exist to improve the mixing efficiency but generally penalize the total pressure loss. A good compromise should be investigated in much more details for each and different conditions.
- Improving the chemical efficiency should be, on the contrary, more straightforward. The diverging part of the combustor and the nozzle are concerned. In these parts of the engine, the temperature drops due to the expansion and therefore allows species to recombine. This effect increases significantly the chemical efficiency. If the expansion is too brutal, it might freeze the mixture. A compromise between diverging angles and sufficient nozzle length should be further studied.
- Finally, the thermal efficiency is greatly affected by the engine small dimensions. However these dimensions are usually dictated by the dimensions of the test section facility. The thermal efficiency can be improved by using bigger engines and thermal loss can also be soaked up with an active cooling device.

Flow non-uniformities combined with combustion seem to prevent viscous drag reduction at off-design conditions, in each fueling configuration, with the given RESTM12 geometry. The step injection scheme induces a combustion process that takes place inside and outside the boundary layer. A proper tangential hydrogen injection in the boundary layer with a smaller step and no kink between the inlet and the combustor as studied in some aspects by Kirchhartz et al. [215] and Chan et al. [216] could be envisaged as a new configuration.

Conclusions et perspectives

CONCLUSIONS

Les travaux présentés dans ce manuscrit concernent la modélisation et la simulation de la combustion dans les écoulements rapides turbulents représentatifs des conditions rencontrées dans les superstatoréacteurs. L'approche utilisée doit être capable de restituer des effets spécifiques aux écoulements à grand nombre de Mach, pour lesquels les temps caractéristiques chimiques et de mélange aux petites échelles peuvent être du même ordre de grandeur. Pour cela les effets de chimie finie et de micro-mélange ont été pris en compte sur la base d'une approche de réacteur partiellement prémélangé. La modélisation UPaSR ainsi proposée a été implémentée dans le code CEDRE, validée sur la base du calcul d'une flamme jet supersonique puis appliquée à l'analyse d'une configuration plus complexe de superstatoréacteur.

Simulation d'une flamme jet détachée stabilisée par auto-allumage en régime supersonique

Le cas d'une flamme jet supersonique détachée a été utilisé pour la validation du modèle UPaSR. Dans un premier temps (Chapitre 5), une étude de sensibilité a été effectuée afin de déterminer les paramètres influents et leurs effets sur l'auto-allumage. La prise en compte de la tuyère Mach 2, permettant de débiter l'air vicié, apparaît alors être de première importance. La géométrie interne provoque une distribution hétérogène de la pression dans le plan de sortie de la tuyère qui détermine la structure du jet. La prise en compte d'un schéma cinétique permettant de décrire correctement la distance d'auto-allumage est également primordiale. Une modélisation spécifique pour la prise en compte des fluctuations de température est proposée. Les résultats correspondants sont faiblement impactés. Cela est notamment dû à une sous-estimation globale dans la couche de mélange du niveau de ces fluctuations par l'approche utilisée. Enfin, les paramètres du modèle UPaSR ont été étudiés. Dans les conditions d'écoulement de la flamme de Cheng, où l'auto-allumage est principalement conditionné par les effets compressibles, l'approche UPaSR n'apporte pas ou peu de modifications sur les résultats par rapport à l'approche Quasi-Laminaire. Une étude de la structure de la flamme, pour un jeu de constante UPaSR donné, a été conduite. L'auto-allumage est fortement influencé par les conditions de pression, alternativement haute dans les cellules de choc et basse dans les zones de détente. Une structure, semblable à de l'auto-allumage par emballement thermique, est initiée dans la zone d'induction, juste après laquelle se localise la zone principale de dégagement de chaleur. Celle-ci est semblable à une structure de flamme de prémélange stabilisée par un choc. Deux types d'auto-allumage semblent coexister dans cette structure de flamme et pilotent sa stabilisation. Les simulations numériques conduisent à des résultats encourageants qui confirment l'importance, pour ce type de conditions, des effets cinétiques d'une part, et des effets

compressibles d'autre part.

Dans un deuxième temps (Chapitre 6), une approche instationnaire a été mise en place afin d'étudier son impact, notamment les fluctuations de température et de composition, sur l'auto-allumage. L'apport principal de cette méthode est une meilleure prise en compte des structures aux grandes échelles et donc de leur influence sur le mélange. L'approche bi-dimensionnelle axisymétrique permet d'obtenir une description qualitative de la structure de flamme à moindre coût de calcul et avec une résolution élevée. L'approche tridimensionnelle de Simulation aux Grandes Échelles permet d'avoir des résultats quantitatifs. Elle permet également d'avoir des résultats sensiblement meilleurs par rapport au cas de l'étude stationnaire RANS, notamment en champ proche dans la zone d'auto-allumage. La forte influence des effets compressibles et de cinétique chimique finie (et finalement assez peu du mélange) explique pourquoi les résultats restent similaires en utilisant une approche stationnaire RANS ou instationnaire LES. Du point de vue de la modélisation de la combustion, le dégagement de chaleur est largement piloté par la structure du jet notamment au travers des cellules de choc. Le dégagement de chaleur se déroule dans des zones où la fraction volumique de structures fines γ^* est proche de l'unité. L'apport d'une modélisation basée sur le concept de réacteur partiellement mélange est, dans ces conditions, assez faible comparé à l'approche Quasi-Laminaire.

Applications aux superstatoréacteurs

La modélisation UPaSR a été appliquée (Chapitre 9) à l'analyse d'une configuration plus complexe de superstatoréacteur (RESTM12) étudiée expérimentalement à l'Université du Queensland.

Les profils de pression issus de la simulation numérique ont notamment été comparés aux profils expérimentaux dans le plan de symétrie du moteur, pour différentes stratégies d'injection d'hydrogène. Les résultats obtenus avec l'approche UPaSR et QL sont comparables et globalement en bon accord avec les résultats expérimentaux. Dans de telles conditions, il apparaît primordial de représenter correctement le champ aérodynamique compressible, ce qui semble être le cas ici. L'application de la modélisation UPaSR dans d'autres conditions est par ailleurs nécessaire afin de déterminer les possibles limitations et améliorations apportées par ce modèle. Pour chaque stratégie d'injection (dans l'entrée d'air, dans la chambre de combustion ou combinée), l'auto-allumage se fait au travers des chocs obliques. Les niveaux atteints par les rendements énergétiques de mélange sont relativement élevés, même dans le cas de l'injection tangentielle d'hydrogène dans la chambre de combustion. Dans ce cas, le mélange turbulent est largement favorisé par la présence des ondes de choc obliques. Deux méthodes différentes ont par la suite été utilisées et comparées afin d'obtenir les principaux indices de performance. La première est basée sur un outil monodimensionnel et sur l'utilisation des mesures de pression expérimentales, et la deuxième s'appuie sur le calcul de rendements énergétiques à partir des calculs RANS. La première méthode ne permet de prendre en compte ni les effets tridimensionnels (chocs, détentes, etc.), ni les flux thermiques pariétaux de manière satisfaisante. Cependant, lorsque les rendements de moteur sont comparables, les poussées spécifiques prédites par les deux méthodes se trouvent être également comparables. Le rendement énergétique de chambre est largement pénalisé par les pertes thermiques, dues aux petites dimensions du moteur et à la combustion se déroulant en proche paroi. Il peut être sensiblement amélioré en augmentant le rendement chimique dans la tuyère, en favorisant la recombinaison radicalaire.

Une technique de réduction du frottement à la paroi par combustion dans la couche limite a été évaluée dans cette configuration de moteur. Des effets locaux de réduction du coef-

ficient de frottement ont été observés, l'injection d'hydrogène provoquant localement une diminution de la viscosité. Cependant, la combustion qui intensifie les ondes de choc dans la chambre, provoque par ailleurs une augmentation du gradient de vitesse moyen à la paroi. Finalement, aucune réduction globale de la traînée par cette technique n'a été observée.

PERSPECTIVES

Amélioration de la modélisation ICT

La mise en place de la modélisation UPaSR nécessite la définition de temps caractéristiques chimique et de micro-mélange. Il serait pertinent de faire une étude similaire à celle menée au Chapitre 5 pour laquelle différentes définitions du temps de micro-mélange sont envisagées (basées sur l'échelle de Taylor, sur l'échelle de Kolmogorov, etc.). De même, d'autres méthodes pour calculer le temps caractéristique chimique doivent être considérées. Une première, assez répandue dans le domaine de la combustion turbulente, consiste à tabuler le temps chimique, comme par exemple dans l'étude de Izard et al. [166]. Cette méthode présente l'avantage d'être relativement simple à mettre en oeuvre, la contre-partie étant l'élaboration de ces tables. Une autre stratégie pourrait consister à s'appuyer sur l'existence, pour les systèmes chimiques de larges dimensions, d'un sous-espace de plus basses dimensions sur lequel l'ensemble de la dynamique peut être projetée. Enfin, les différents calculs d'application présentés dans ces travaux de thèse (Chapitres 5,6 et 9) ont montré que, dans les conditions étudiées, les zones de dégagement de chaleur étaient grandement pilotées par les effets cinétiques (zones où γ^* est proche de l'unité). Ainsi l'effet de la modélisation UPaSR proposée n'apporte pas ou peu de modifications par rapport à l'approche Quasi-Laminaire. Il serait donc intéressant de continuer la validation de UPaSR sur d'autres cas représentatifs, où l'interaction entre la chimie et la turbulence est susceptible de jouer un rôle plus important, notamment lorsque l'auto-allumage est entièrement piloté par emballage cinétique/thermique. Par ailleurs, la modélisation UPaSR a été utilisée *ad hoc* pour calculer la limite d'extinction pauvre d'une chambre de statoréacteur [217]. Dans ce cas, l'effet de la modélisation est beaucoup plus marqué et l'apport de la méthode permet d'obtenir des résultats probants, confirmant son intérêt.

Une autre voie d'amélioration de la modélisation de l'ICT est l'utilisation du modèle EPaSR (Extended PaSR) [40]. Ce modèle permet de prendre en compte les effets convectifs et instationnaires de la fraction volumique de structures fines (*), par la résolution complète des équations différentielles partielles décrivant les zones (*) et (0). La modélisation PaSR apparaît dans ce cadre comme un cas limite particulier de EPaSR. Ce modèle présente une analogie forte avec un modèle multi-fluides. Cela constitue pour le moment une limitation pour son implémentation dans le solveur Charme (coexistence de deux énergies, mélanges, pressions, etc).

Validation des modèles ICT

Les résultats expérimentaux de la flamme jet de Cheng (Chapitres 5 et 6) montrent des fluctuations importantes de la température en sortie du brûleur. Ces fluctuations ont par ailleurs été négligées dans notre étude, faute de connaître leur origine exacte. Leur impact sur l'auto-allumage devrait être plus spécifiquement quantifié, notamment dans le cadre d'une étude RANS stationnaire. Dans notre cas, une équation de transport modélisée pour les fluctuations de température a été proposée sous la forme d'une équation classique de

convection-diffusion. Des efforts de modélisation doivent se faire plus spécifiquement pour une fermeture plus fine des termes inconnus qui interviennent dans la forme exacte (mais non fermée) de cette équation de transport.

Plus généralement, il serait judicieux de valider la modélisation ICT sur une configuration où les conditions limites sont mieux maîtrisées. À ce titre, un certain nombre de campagnes expérimentales récentes ont été menées. D'un point de vue plus académique, le groupe de la NASA Langley a mis au point un nouveau dispositif expérimental permettant d'étudier la combustion dans des écoulements supersoniques [218]. L'étude est réalisée pour différents mélanges (hydrogène-air, méthane-air), différentes conditions enthalpiques et différentes valeurs du nombre de Mach. Différents dispositifs de mesure ont notamment été mis en place [219, 220, 221] permettant une connaissance assez complète des conditions dans l'écoulement et aux limites. En ce qui concerne la validation de modèles sur des configurations représentatives de chambres de superstatoréacteur, le laboratoire LAERTE de l'Onera a été équipé en 2011 d'une nouvelle veine d'essai dans le cadre du projet européen LAPCAT II. Une base de donnée est en cours de construction pour laquelle les conditions limites sont bien connues. Les dispositifs de mesure comprennent des mesures de pression et de température pariétales ainsi que des visualisations par caméscope dans le visible et par caméra intensifiée dans l'ultraviolet et le visible (chimiluminescence de OH^* ou CH^* notamment). Des mesures de concentration par PLIF ainsi que des mesures de vitesse par PIV sont également envisagées.

Annexe A

Schémas cinétiques hydrogène-air

Schéma cinétique réduit de Jachimowski

Les vitesses de réactions se mettent sous la forme $k = AT^B e^{-E_a/RT}$; les coefficients sont exprimés avec les unités s, moles, cm³, cal et K. Pour le mécanisme réactionnel de combustion H_2 /Air réduit de Jachimowski, les coefficients sont résumés dans la table A.1. Il comprend 8 espèces (H_2 , H_2O , O_2 , OH , H , O , HO_2 et H_2O_2) et 19 réactions.

TABLE A.1 – Schéma cinétique réduit de Jachimowski à 9 espèces et 19 réactions

Reaction	A	B	E_a
(1) $H_2 + O_2 \rightarrow HO_2 + H$	7.00×10^{13}	0	56800
(2) $H + O_2 \rightarrow OH + O$	2.20×10^{14}	0	16800
(3) $O + H_2 \rightarrow OH + H$	5.06×10^4	2.67	6290
(4) $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	2.66×10^8	1.51	3430
(5) $OH + OH \rightarrow H_2O + O$	1.50×10^9	1.14	0
(6) $H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	8.62×10^{21}	-2.0	0
(7) $H + H + M \rightarrow H_2 + M$	7.30×10^{17}	-1.0	0
(8) $H + O + M \rightarrow OH + M$	2.60×10^{16}	-0.6	0
(9) $O + O + M \rightarrow O_2 + M$	1.10×10^{17}	-1.0	0
(10) $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$	2.30×10^{18}	-1.0	0
(11) $HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	1.50×10^{14}	0	1000
(12) $HO_2 + O \rightarrow O_2 + OH$	2.00×10^{13}	0	0
(13) $HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	2.00×10^{13}	0	0
(14) $HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	2.00×10^{12}	0	0
(15) $H + H_2O_2 \rightarrow H_2 + HO_2$	1.70×10^{12}	0	3780
(16) $H + H_2O_2 \rightarrow OH + H_2O$	1.00×10^{13}	0	3580
(17) $O + H_2O_2 \rightarrow OH + HO_2$	2.80×10^{13}	0	6400
(18) $OH + H_2O_2 \rightarrow H_2O + HO_2$	7.00×10^{12}	0	1435
(19) $OH + OH + M \rightarrow H_2O_2 + M$	1.60×10^{22}	-2.0	0

Les efficacités de troisième corps sont pour toutes les réactions : 2.5 pour $M = H_2$, 16.0 pour $M = H_2O$, 4.0 pour $M = CO_2$, et 1.0 pour toutes les autres espèces.

Schéma cinétique réduit Onera

Les vitesses de réactions se mettent sous la forme $k = AT^B e^{-E_a/RT}$; les coefficients sont exprimés avec les unités s, moles, cm^3 et K. Pour le mécanisme réactionnel de combustion H_2 /Air réduit Onera, les coefficients sont résumés dans la table A.2. Il comprend 6 espèces (H_2 , H_2O , O_2 , OH , H et O) et 7 réactions.

TABLE A.2 – Schéma cinétique réduit Onera à 6 espèces et 7 réactions

Reaction	A	B	E_a
(1) $H_2 + O_2 \rightarrow OH + OH$	1.70×10^{13}	0	24233
(2) $H + O_2 \rightarrow OH + O$	1.42×10^{14}	0	8254
(3) $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	3.16×10^7	1.80	1525
(4) $O + H_2 \rightarrow OH + H$	2.07×10^{14}	0	6920
(5) $OH + OH \rightarrow H_2O + O$	5.50×10^{13}	0	3523
(6) $H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	8.62×10^{22}	-2.0	0
(7) $H + H + M \rightarrow H_2 + M$	6.53×10^{17}	-1.0	0

Les efficacités de troisième corps sont égales à 1 pour toutes les réactions et pour toutes les espèces.

Annexe B

Équation pour la variance de la température

L'équation de bilan instantanée pour l'énergie e s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (\text{B.1})$$

où q_i est le flux de chaleur, τ_{ij} est le tenseur des forces visqueuses.
En multipliant l'équation précédente par e , on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e^2) = 2e \left[-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (\text{B.2})$$

Si on décompose les variables sous la forme $\psi = \tilde{\psi} + \psi''$ et que l'on moyenne $\overline{\langle . \rangle}$, on obtient après simplification :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}^2) + \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} e''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{e}^2 + \bar{\rho} \tilde{u}_i'' e''^2 + 2\bar{\rho} \tilde{e} \tilde{u}_i'' e'' + \bar{\rho} \tilde{u}_i e''^2 \right] = 2(\tilde{e} + e'') \overline{\left[-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right]} \quad (\text{B.3})$$

D'autre part l'équation pour \tilde{e} s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{e} + \bar{\rho} \tilde{u}_i'' e'' \right] = \overline{\left[-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right]} \quad (\text{B.4})$$

En multipliant l'équation précédente par \tilde{e} , on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}^2) - \bar{\rho} \tilde{e} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{e}^2 + \bar{\rho} \tilde{e} \tilde{u}_i'' e'' \right] - \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{e} + \bar{\rho} \tilde{e} \tilde{u}_i'' e'' \right] \frac{\partial \tilde{e}}{\partial x_i} = \tilde{e} \overline{\left[-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right]} \quad (\text{B.5})$$

L'équation de la variance de l'énergie s'obtient par soustraction (B.3)-(B.5), et en simplifiant :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} e''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i e''^2 + \bar{\rho} u_i'' e''^2 \right] + 2\bar{\rho} e'' u_i'' \frac{\partial \tilde{e}}{\partial x_i} = 2e'' \left[-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (\text{B.6})$$

Les hypothèses retenues sont :

$$\begin{aligned} \bar{\rho} e'' u_i'' &= -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad \bar{\rho} \tilde{u}_i e''^2 = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial e''^2}{\partial x_i} \\ e'' \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= C_e \hat{\gamma} \bar{\rho} \omega e''^2 \\ e'' \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= C_{eP} \bar{\rho} e''^2 \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \end{aligned}$$

En posant $\sigma_e = e''^2$, l'équation simplifiée pour la variance de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \sigma_e) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \sigma_e) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\hat{\gamma} \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \sigma_e}{\partial x_i} \right] = \underbrace{2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right)^2}_{Se_1} - \underbrace{C_e \hat{\gamma} \bar{\rho} \omega \sigma_e}_{Se_2} - \underbrace{C_{eP} \bar{\rho} \sigma_e \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j}}_{Se_3} \quad (\text{B.7})$$

En supposant au premier ordre que $\sigma_T = \tilde{T}^2 = \sigma_e / \hat{C}_v^2$, l'équation de la variance de la température s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \sigma_T) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \sigma_T) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \sigma_T}{\partial x_j} \right] = 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)^2 - C_T \hat{\gamma} \bar{\rho} \omega \sigma_T - C_{TP} \bar{\rho} \sigma_T \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (\text{B.8})$$

Annexe C

Cowlside results of RESTM12

Fuel off condition

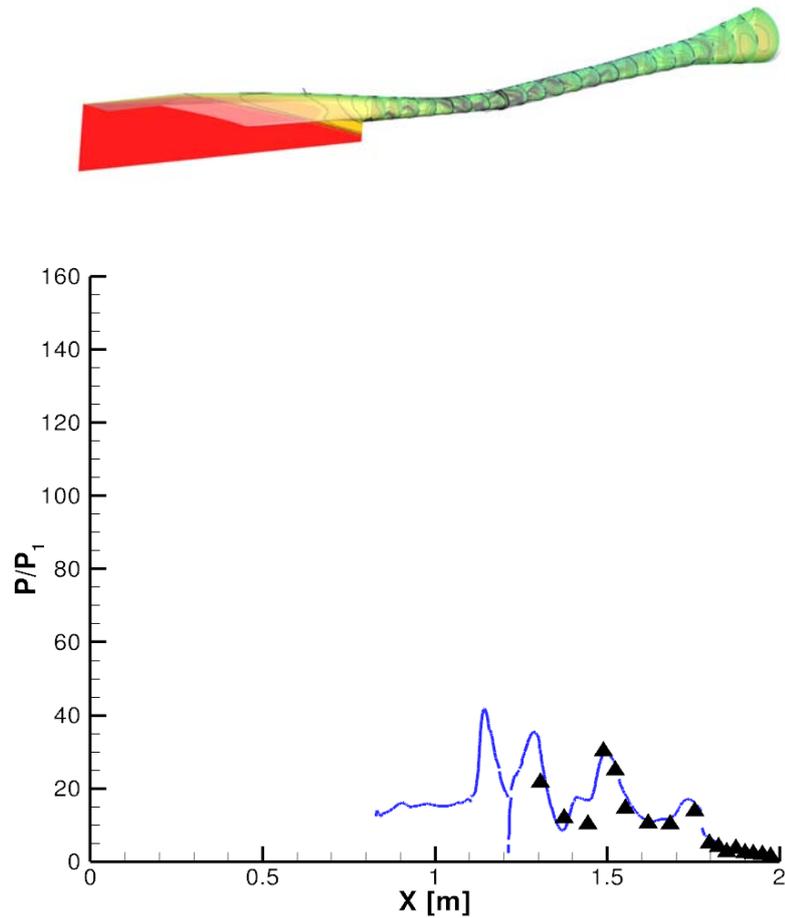


FIGURE C.1 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowlside for the fuel-off condition

Inlet injection condition

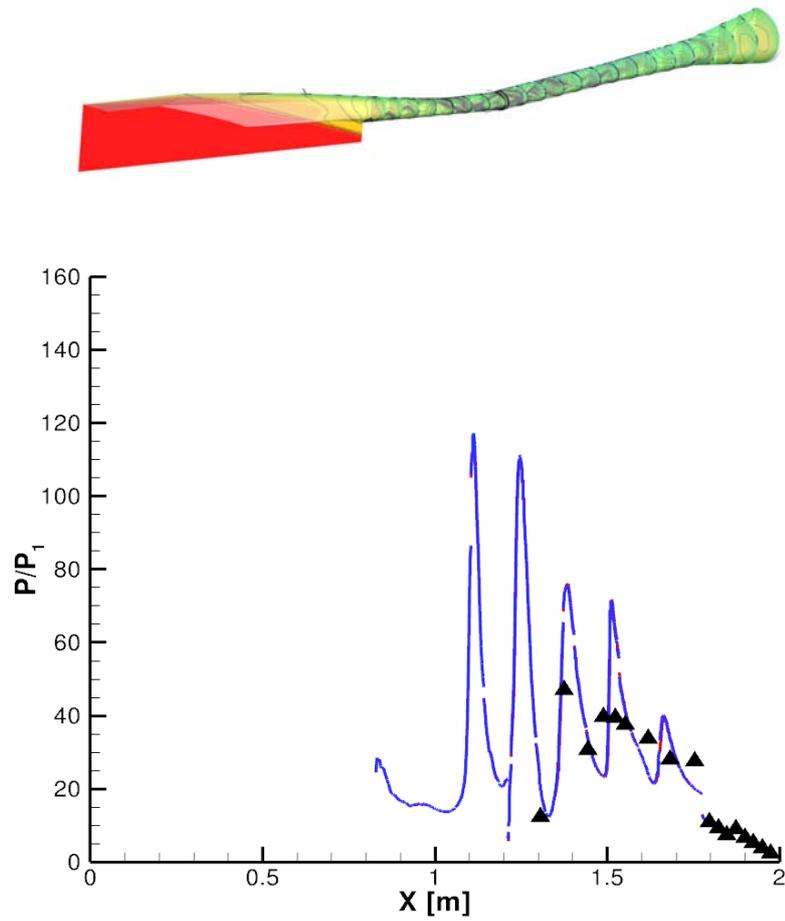


FIGURE C.2 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowlside for the inlet injection condition

Step injection condition

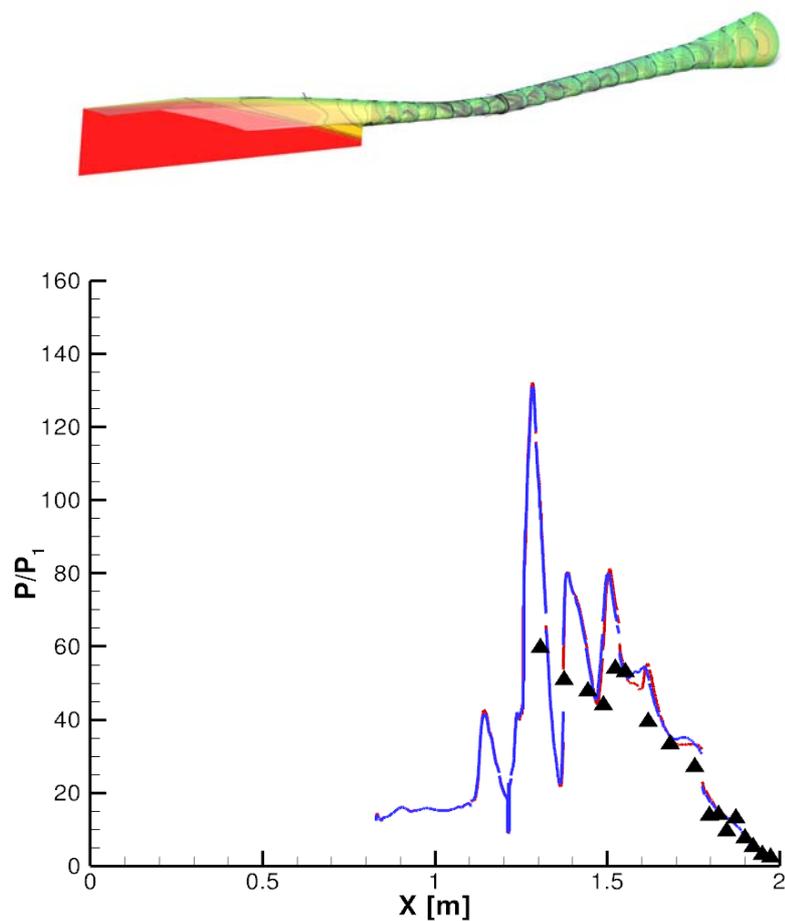


FIGURE C.3 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowlside for the step injection condition

Combined injection (1 :2) condition

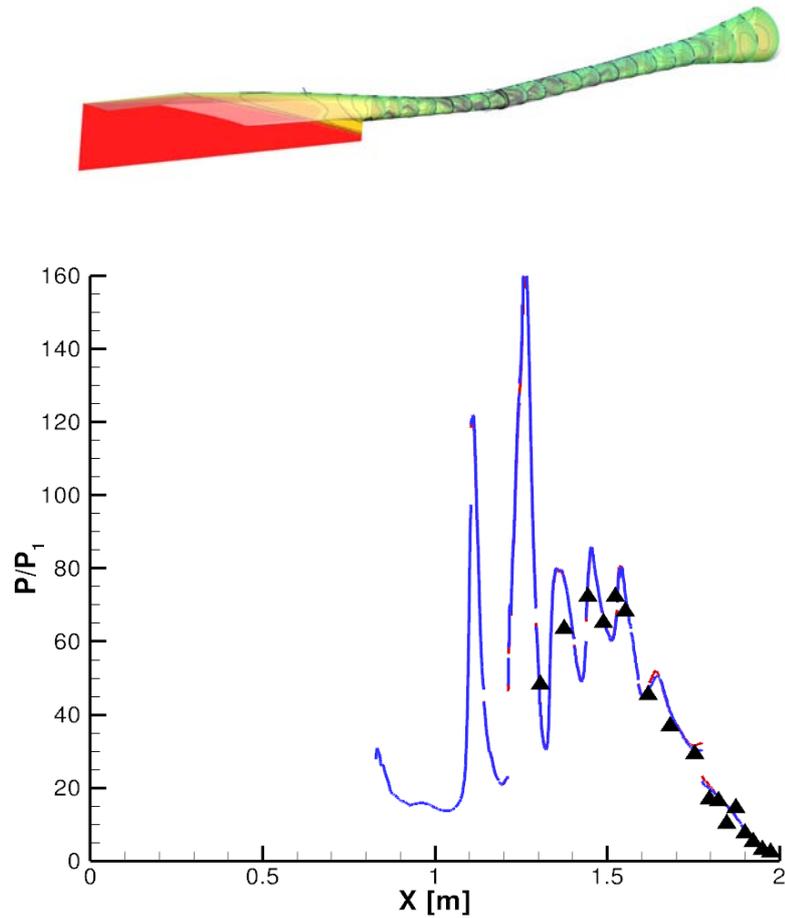


FIGURE C.4 – Comparison between experimental pressure distribution and pressure profile as obtained from numerical simulations on the cowlside for the combined injection (1 :2) condition

Bibliographie

- [1] R. Lorin, “Le propulseur à échappement et l’aéroplane à grande vitesse,” *L’Aérophile*, pp. 332–336, 1908. xiii, xxiii, 114
- [2] D. Kors, “Design consideration for combined air breathing-rocket propulsion systems,” in *2nd AIAA International Aerospace Planes Conference*, 1990. xiii, xxiv
- [3] C. Yoo, R. Sankaran, and J. Chen, “Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated coflow : flame stabilization and structure,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 640, p. 453–481, 2009. xiii, xxv, 8, 53, 57, 84
- [4] C. Fureby, M. Chapuis, E. Fedina, and S. Karl, “CFD analysis of the HyShot II scramjet combustor,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, p. 2399–2405, 2011. xiii, xxv, xxvi
- [5] G. Brown and A. Roshko, “On density effects and large structure in turbulent mixing layers,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 64, pp. 775–816, 1974. xiii, 8, 48
- [6] A. Mura, *Aérothermochimie des Ecoulements Turbulents Réactifs*. Cours de Master ISAE-ENSMA, 2007. xiii, 8, 16, 22
- [7] T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2nd ed., 2001. xiii, 4, 20, 21
- [8] P. Woodward, D. Porter, I. Sytine, S. Andersson, A. Mirrin, B. Curtis, C. Cohen, W. Dannevik, A. Dimitis, D. Eliason, K. Winkler, and S. Hodson, “Very high resolution simulations of compressible turbulent flows,” in *Proceedings of the 4th UNAM Supercomputing Conference*, 2001. xiii, 26, 27
- [9] J. Silvestrini, P. Comte, and M. Lesieur, “DNS and LES of spatial incompressible mixing layer,” in *10th Symposium on Turbulent Shear Flows*, 1995. xiii, 43
- [10] M. Mairi, M. Lesieur, and O. Métais, “Vortex control in large-eddy simulations of compressible round jets,” *Journal of Turbulence*, vol. 7, pp. 1–22, 2006. xiii, 44
- [11] O. Chambres, *Analyse Expérimentale de la Modélisation de la Turbulence en Couche de Mélange Supersonique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1997. xiii, 45
- [12] J. DeBisschop, *Comportement de la Turbulence en Couche de Mélange Supersonique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1993. xiii, 45
- [13] G. Elliott and M. Samimy, “Compressibility effects in free shear layers,” *Physics of Fluids A*, vol. 2, pp. 1231–1240, 1990. xiii, 45
- [14] S. Goebel and J. Dutton, “Experimental study of compressible turbulent mixing layer,” *AIAA Journal*, vol. 29, pp. 538–546, 1991. xiii, 45
- [15] D. Papamoschou and A. Roshko, “The compressible turbulent shear layer : An experimental study,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 197, pp. 453–477, 1988. xiii, 45

- [16] J. Lau, "Effects of exit Mach number and temperature on mean-flow and turbulence characteristics in round jets," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 105, pp. 193–218, 1981. xiii, 45
- [17] S. Bellaud, *Mesures et Analyses Détaillées des Champs Turbulents en Couche de Mélange Annulaires Supersoniques*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1999. xiii, 45
- [18] T. Kreutz and C. Law, "Ignition in nonpremixed counterflowing hydrogen versus heated air : Computational study with detailed chemistry," *Combustion and Flame*, vol. 104, pp. 157–175, 1996. xiii, 50, 51, 53, 54
- [19] S. Vorontsov, V. Zabaikin, A. Smogolev, and P. Tret'yakov, "Vortex structures in combustion of hydrogen in a supersonic cocurrent air stream," *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, vol. 39, pp. 119–123, 2003. xiv, 58
- [20] T. Cheng, J. Wehrmeyer, R. Pitz, O. Jarrett, and G. Northam, "Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen - air diffusion flame," *Combustion and Flame*, vol. 99, pp. 157–173, 1994. xiv, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 87
- [21] P. Kuentzmann and F. Falempin, "Ramjet, scramjet and PDE – an introduction," *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, vol. 13, 2002. xv, 115
- [22] W. Heiser and D. Pratt, *Hypersonic Airbreathing Propulsion*. AIAA Education Series, 1994. xv, 42, 122, 142
- [23] G. Kelly, *A Study of Reynolds Analogy in a Hypersonic Boundary Layer Using a New Skin Friction Gauge*. PhD thesis, The University of Queensland, 1992. xv, 126
- [24] J. Odam, *Scramjet Experiments Using Radical Farming*. PhD thesis, The University of Queensland, 2004. xv, 127
- [25] S. Rowan, *Viscous Drag Reduction in a Scramjet Combustor*. PhD thesis, The University of Queensland, 2003. xv, 128
- [26] A. Smith, *Multiple Component Force Measurement in Short Duration Test Flows*. PhD thesis, The University of Queensland, 1999. xv, 129
- [27] K. Skinner, *Mass Spectrometry in Shock Tunnel Experiments of Hypersonic Combustion*. PhD thesis, The University of Queensland, 1994. xv, 127, 135
- [28] A. Kothari, J. Livingston, C. Tarpley, V. Raghavan, K. Bowcutt, and T. Smith, "Rocket based combined cycle hypersonic vehicle design for orbital access," in *17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2011. xxiv
- [29] M. K. Smart and M. R. Tetlow, "Orbital delivery of small payloads using hypersonic airbreathing propulsion," *Journal of Spacecraft and Rocket*, vol. 46, no. 1, pp. 117–125, 2009. xxiv, 138
- [30] J. Steelant, "Sustained hypersonic flight in europe : First technology achievements within LAPCAT II," in *17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2011. xxiv
- [31] F. Falempin, M. Bouchez, and M. Calabro, "The microspace launcher : First step to the fully air-breathing space launcher," *Eucass Proceedings : Progress in Propulsion Physics*, vol. 1, pp. 569–592, 2009. xxiv
- [32] O. Dessornes and D. Scherrer, "Tests of the JAPHAR dual mode ramjet engine," *Aerospace Science and Technology*, vol. 9, pp. 211–221, 2005. xxv, 123

- [33] P. Gerlinger, K. Nold, and M. Aigner, “Influence of reaction mechanisms, grid spacing, and inflow conditions on the numerical simulation of lifted supersonic flames,” *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, vol. 62, pp. 1357–1380, 2010. xxvi, 71, 73, 77
- [34] R. Baurle and S. Girimaji, “Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations,” *Combustion and Flame*, vol. 134, pp. 131–148, 2003. xxvi, 71, 77
- [35] H. Möbus, P. Gerlinger, and D. Brüggemann, “Comparison of eulerian and lagrangian monte carlo PDF methods for turbulent diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 124, pp. 519–534, 2001. xxvi, 71
- [36] H. Möbus, P. Gerlinger, and D. Brüggemann, “Scalar and joint scalar-velocity-frequency monte carlo PDF simulation of supersonic combustion,” *Combustion and Flame*, Vol. 132, p. 3-24., vol. 132, pp. 3–24, 2003. xxvi, 71
- [37] M. Berglund and C. Fureby, “LES of supersonic combustion in a scramjet engine model,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, pp. 2497–2504, 2007. xxvi, 68, 168
- [38] F. A. Williams, “Progress in knowledge of flamelet structure and extinction,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 26, pp. 657–682, 2000. xxvi
- [39] Z. Fan, W. Liu, M. Sun, Z. Wang, F. Zhuang, and W. Luo, “Theoretical analysis of flamelet model for supersonic turbulent combustion,” *Science China Technological Sciences*, vol. 55, pp. 193–205, 2012. xxvi
- [40] V. Sabel’nikov and C. Fureby, “LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy,” *to appear in Combustion and Flame*, 2012. xxvi, 173
- [41] M. Berglund, E. Fedina, C. Fureby, J. Tegner, and V. Sabelnikov, “Finite rate chemistry large-eddy simulation of self-ignition in a supersonic combustion ramjet,” *AIAA Journal*, vol. 48, no. 3, pp. 540–550, 2010. xxvi, 59
- [42] F. A. Williams, *The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. New York : Perseus, 2nd ed., 1964. 4
- [43] M. Lesieur, *Turbulence in Fluids*. Springer, 2008. 7
- [44] S. Pope, *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000. 7
- [45] G. Batchelor, *The theory of homogeneous turbulence*. Cambridge University Press, 1953. 7
- [46] R. Schiestel, *Modélisation et Simulation des Ecoulements Turbulents*. Hermes, 1993. 7
- [47] A. Favre, “Equations des gaz turbulents compressibles,” *Journal de Mécanique*, vol. 4, 1965. 9
- [48] F. Menter, “Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications,” *AIAA Journal*, vol. 32, pp. 1598–1605, 1994. 12
- [49] N. Peters, *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000. 17, 20, 23
- [50] D. Veynante and L. Vervisch, “Turbulent combustion modeling,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 28, pp. 193–266, 2002. 22
- [51] A. Trouvé and T. Poinso, “The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 278, pp. 1–31, 1994. 22

- [52] N. Peters, "Local quenching of diffusion flamelets and non-premixed turbulent combustion," *Western States Section of the Combustion Institute*, vol. paper WSS 80-4. 23
- [53] V. Kuznetsov, "Effect of turbulence on the formation of large superequilibrium concentration of atoms and free radicals in diffusion flames," *Mehanika Zhidkosti Gasa*, vol. 6, pp. 3–9, 1982. 23
- [54] F. A. Williams, *Recent Advances in Theoretical Descriptions of Turbulent Diffusion Flames : Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*. Plenum Press, 1975. 23
- [55] E. O'Brien, "The probability density function approach to reacting turbulent flows," *Topics in Applied Physics*, vol. 44, 1980. 24
- [56] J. Janicka, W. Kolbe, W., and Kollmann, "Closure of the transport-equation for the probability density function of turbulent scalar fields," *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, vol. 4, pp. 47–66, 1979. 24
- [57] S. Subramaniam and S. Pope, "A mixing model for turbulent reactive flows based on euclidean minimum spanning trees," *Combustion and Flame*, vol. 115, p. 487–514, 1998. 24
- [58] A. Klimenko and S. Pope, "The modeling of turbulent reactive flows based on multiple mapping conditioning," *Physics of Fluids*, vol. 7, p. 1907–1925, 2003. 24
- [59] U. Maas and S. Pope, "Simplifying chemical kinetics – intrinsic low-dimensional manifolds in composition space," *Combustion and Flame*, vol. 88, p. 239–264, 1992. 25
- [60] J. van Oijen, R. Bastiaans, and L. D. Goey, "Low-dimensional manifolds in direct numerical simulations of premixed turbulent flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, p. 1377–1384, 2007. 25
- [61] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin, "Laminar premixed hydrogen/air counter-flow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, p. 1901–1908, 2000. 25
- [62] V. Bykov and U. Maas, "The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 11, p. 1–24, 2007. 25
- [63] A. Klimenko, "Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flows," *Fluid Dynamics*, vol. 25, pp. 327–334, 1990. 25
- [64] R. Bilger, "Conditional moment closure for turbulent reacting flows," *Physics of Fluids A*, vol. 5, pp. 436–444, 1993. 25
- [65] G. Batchelor and A. Townsend, "The nature of turbulent motion at large wavenumbers," *Proceedings of the Royal Society A*, vol. 199, p. 238, 1949. 26
- [66] J. Chomiak, "A possible propagation mechanism of turbulent flames at high Reynolds numbers," *Combustion and Flame*, vol. 15, p. 319, 1970. 26, 59
- [67] Y. Kuo and S. Corrsin, "Experiments on internal intermittency and fine structures distribution functions in fully turbulent fluid," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 50, p. 285, 1971. 26
- [68] Y. Kuo and S. Corrsin, "Experiments on the geometry of the fine structure regions in fully developed turbulence," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 56, p. 447, 1971. 26, 27

- [69] M. Tanahashi, M. Sato, M. Shimura, and T. Miyauchi, “DNS and combined laser diagnostics of turbulent combustion,” *Journal of Thermal Science and Technology*, vol. 3, p. 391, 2008. 26
- [70] H. Tennekes, “Simple model for the small scale structure of turbulence,” *Physics of Fluids*, vol. 11, p. 671, 1968. 27
- [71] B. Magnussen, “On the structure of turbulence and a generalised eddy dissipation concept for chemical reactions in turbulent flow,” in *19th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 1981. 27
- [72] B. Magnussen, “The eddy dissipation concept,” in *ECCOMAS - Thematic Conference on Computational Combustion*, 2005. 27
- [73] A. Refloch, B. Courbet, A. Murrone, P. Villedieu, C. Laurent, P. Gilbank, J. Troyes, L. Tessé, G. Chaineray, J. Dargaud, E. Quémérais, and F. Vuillot, “CEDRE software,” *Aerospace Lab Journal*, vol. 2, 2011. 30
- [74] D. Scherrer, F. Chedeveigne, P. Grenard, J. Troyes, A. Murrone, E. Montreuil, A. Chazottes, F. Vuillot, N. Lupoglazoff, M. Huet, B. Sainte-Rose, P. Thorigny, N. Bertier, J.-M. Lamet, T. Le Pichon, E. Radenac, A. Nicole, L. Matuszewski, and M. Errera, “Recent CEDRE applications,” *Aerospace Lab Journal*, vol. 2, 2011. 30
- [75] B. Després and F. Dubois, *Systèmes hyperboliques de lois de conservations : application à la dynamique des gaz*. Les Éditions de l’École Polytechnique, 2005. 32
- [76] E. Godlewski and P. Raviart, *Hyperbolic systems of conservation laws*. Ellipses, Mathématiques et Applications, 1991. 34
- [77] E. Toro, *Riemann Solver and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1999. 34
- [78] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons, 1988. 34
- [79] J. Gressier, *Robustesse et Précision des Schémas Décentrés pour les Écoulements Compressibles*. PhD thesis, École Nationale Supérieure de l’Aéronautique et de l’Espace, 1999. 34
- [80] F. Haider, *Discretisation en maillage non structuré général et application à la LES*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2009. 34
- [81] E. Toro, M. Spruce, and W. Speares, “Restoration of the contact surface in the HLL-riemann solver,” *Shock Waves*, vol. 4, pp. 25–34, 1994. 35
- [82] A. Harten, P. Lax, and B. V. Leer, “On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws,” *SIAM Review*, vol. 25, pp. 35–61, 1983. 35
- [83] B. Einfeldt, C. Munz, P. Roe, and B. Sjögreen, “On godunov-type methods near low densities,” *Journal of Computational Physics*, vol. 92, pp. 273–295, 1991. 37
- [84] B. Einfeldt, “On godunov-type methods for gas dynamics,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 25, pp. 294–318, 1988. 37
- [85] S. Davis, “Simplified second-order godunov-type methods,” *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol. 9, pp. 445–473, 1988. 37
- [86] N. Bertier, *Simulation des Grandes Echelles en Aérothermique sur des Maillages Non-Structurés Généraux*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2006. 38, 40
- [87] S. Murthy and E. Curran, *High-Speed Flight Propulsion Systems*. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics Series, 1991. 43, 45

- [88] A. Hadjadj and A. Kudryavtsev, “Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics,” *Journal of Turbulence*, vol. 6, pp. 1–25, 2005. 43
- [89] D. Bogdanoff, “Compressibility effects in turbulent shear layers,” *AIAA Journal*, vol. 21, pp. 926–927, 1983. 44
- [90] D. Papamoschou, “Structure of the compressible turbulent shear layer,” *AIAA Journal*, vol. 29, no. 5, pp. 680–681, 1991. 44
- [91] O. Zeman, “Dilatation dissipation : The concept and application in modeling compressible mixing layers,” *Physics of Fluids A*, vol. 2, pp. 178–188, 1989. 45, 47
- [92] S. Sarkar, G. Erlebacher, M. Hussaini, and H. Kreiss, “The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 227, pp. 473–493, 1991. 45, 47
- [93] A. Vreman, *Direct and Large-Eddy Simulation of the Compressible Turbulent Mixing Layer*. PhD thesis, Universiteit Twente, 1995. 46
- [94] A. Chaudhuri, A. Hadjadj, A. Chinnayya, and S. Palerm, “Numerical study of compressible mixing layers using high-order WENO schemes,” *Journal of Scientific Computing*, vol. 47, pp. 170–197, 2010. 46
- [95] S. Sarkar, “The pressure-dilatation correlation in compressible flows,” *Physics of Fluids A*, vol. 4, pp. 2674–2682, 1992. 46
- [96] O. Zeman, “On the decay of compressible isotropic turbulence,” *Physics of Fluids A*, vol. 3, pp. 951–955, 1991. 46
- [97] T. Passot and A. Pouquet, “Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 181, pp. 441–466, 1987. 47
- [98] N. Sandham and W. Reynolds, “Compressible mixing layer : Linear theory and direct simulation,” *AIAA Journal*, vol. 28, pp. 618–624, 1990. 48
- [99] N. Sandham and W. Reynolds, “Three-dimensional simulations of large eddies in the compressible mixing layer,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 224, pp. 133–158, 1991. 48
- [100] I. Fedioun and N. Lardjane, “Temporal linear stability analysis of three-dimensional compressible binary shear layers,” *AIAA Journal*, vol. 43, pp. 111–123, 2005. 48
- [101] E. Mastorakos, “Ignition of turbulent non-premixed flames,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 35, pp. 57–97, 2009. 49
- [102] L. Maurice, T. Edwards, and J. Griffiths, *Scramjet Propulsion*, ch. Liquid Hydrocarbon Fuels for Hypersonic Propulsion, pp. 757–822. 2000. 49
- [103] B. Lewis and G. von Elbe, *Combustion, Flames and Explosions of Gases*. Academic Press ; 3rd edition, 1987. 50
- [104] M. O’Conaire, H. Curran, J. Simmie, W. Pitz, and C. Westbrook, “A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation,” *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 36, p. 603–622, 2004. 52
- [105] D. Eklund, J. Drummond, and H. Hassan, “Calculation of supersonic turbulent reacting coaxial jets,” *AIAA Journal*, vol. 28, pp. 1633–1641, 1990. 52, 67
- [106] C. Jachimowski, “An analysis of combustion studies in shock expansion tunnels and reflected shock tunnels,” tech. rep., NASA, 1992. 52, 71

- [107] A. Liñàn and A. Crespo, “An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies,” *Combustion Science and Technology*, vol. 14, pp. 95–117, 1976. 52, 53, 54
- [108] E. Mastorakos, T. Baritaud, and T. Poinso, “Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows,” *Combustion and Flame*, vol. 109, pp. 198–223, 1997. 52, 53, 56
- [109] S. Sreedhara and K. Lakshmisha, “Autoignition in a non-premixed medium : DNS studies on the effects of three-dimensional turbulence,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 2051–2059, 2002. 52
- [110] H. Im, J. Chen, and C. Law, “Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows,” *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute*, vol. 27, p. 1047–1056, 1998. 53, 84
- [111] A. Liñàn, “The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies,” *Acta Astronautica*, vol. 1, 1974. 53
- [112] T. Jackson and M. Hussaini, “An asymptotic analysis of supersonic reacting mixing layer,” *Combustion Science and Technology*, vol. 57, pp. 129–140, 1988. 53
- [113] H. Im, B. Helenbrook, S. Lee, and C. Law, “Ignition in the supersonic hydrogen/air mixing layer with reduced reaction mechanisms,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 322, pp. 275–296, 1996. 53
- [114] L. Figueira da Silva, B. Deshaies, M. Champion, and M. René-Corail, “Some specific aspects of combustion in supersonic H₂-air laminar mixing layers,” *Combustion Science and Technology*, vol. 89, pp. 317–333, 1993. 54
- [115] M. Nishioka and C. Law, “A numerical study of ignition in the supersonic hydrogen/air laminar mixing layer,” *Combustion and Flame*, vol. 108, pp. 199–219, 1997. 54
- [116] H. Im, J. Bechtold, and C. Law, “Analysis of thermal ignition in supersonic flat-plate boundary layers,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 249, pp. 99–120, 1993. 54
- [117] L. Figueira da Silva, B. Deshaies, and M. Champion, “Boundary layer ignition of hydrogen-air mixtures in supersonic flows,” *Journal of Thermal Science*, vol. 3, pp. 43–48, 1994. 54
- [118] L. Figueira da Silva, B. Deshaies, and M. Champion, “Numerical study of ignition within hydrogen-air supersonic boundary layers,” *AIAA Journal*, vol. 31, pp. 884–890, 1993. 54
- [119] P. Renard, D. Thévenin, J. Rolon, and S. Candel, “Dynamics of flame/vortex interactions,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 26, p. 225–282, 2000. 55
- [120] B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux, “A DES method applied to a backward facing step reactive flow.,” *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 337, pp. 340–351, 2009. 55
- [121] V. Robin, M. Champion, and A. Mura, “A second-order model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio,” *Combustion Science and Technology*, vol. 180, p. 1709–1734, 2008. 55
- [122] S. Sanquer, P. Bruel, and B. Deshaies, “Some specific characteristics of turbulence in the reactive wakes of bluff-bodies,” *AIAA Journal*, vol. 36, pp. 994–1001, 1998. 55

- [123] R. Gordon, A. Masri, S. Pope, and G. Goldin, “A numerical study of auto-ignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated co-flow,” *Combustion Theory and Modelling*, vol. 11, p. 351–376, 2007. 56
- [124] R. Gordon, A. Masri, S. Pope, and G. Goldin, “Transport budgets in turbulent lifted flames of methane autoigniting in a vitiated co-flow,” *Combustion and Flame*, vol. 151, pp. 495–511, 2007. 56, 84
- [125] P. Domingo and L. Vervisch, “Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed turbulent mixtures,” *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute*, vol. 26, p. 233–240, 1996. 56
- [126] C. Markides and E. Mastorakos, “An experimental study of hydrogen autoignition in a turbulent co-flow of heated air,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, pp. 883–891, 2005. 56
- [127] C. Markides, *Autoignition in Turbulent Flows*. PhD thesis, University of Cambridge, 2005. 56
- [128] M. Barrère and A. Mestre, “Stabilisation de la flamme en combustion supersonique,” *La Recherche Aéronautique*, vol. 1, pp. 1–13, 1988. 57
- [129] L. Figueira da Silva and B. Deshaies, “Stabilization of an oblique detonation wave by a wedge : a parametric numerical study,” *Combustion and Flame*, vol. 21, pp. 152–156, 2000. 57
- [130] C. Viguier, L. Figueira da Silva, D. Desbordes, and B. Deshaies, “Onset of oblique detonation over a wedge : Comparaison between experimental and numerical results,” *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute*, vol. 26, pp. 3023–3031, 1996. 57
- [131] T. Sunami, K. Itoh, K. Sato, and T. Komuro, “Mach 8 ground tests of the hypermixer scramjet for HyShot-IV flight experiment,” in *14th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2006. 57
- [132] T. Sunami, “CFD simulation of a detonation wave in a hypermixer scramjet combustor,” in *12th Symposium on Propulsion System for Reusable Launch Vehicles*, 2011. 57
- [133] D. Micka and J. Driscoll, “Combustion characteristics of a dual-mode scramjet combustor with cavity flameholder,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, pp. 2397–2404, 2009. 57
- [134] P. Magre and V. Sabelnikov, “Self-ignition of hydrogen-ethylene mixtures in a hot supersonic air flow,” in *11th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2002. 58
- [135] C. Dumand, *Mélange et Combustion dans les Petits Volumes : Application aux Micro Systèmes Energétiques*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2005. 59
- [136] E. George, *Modélisation et Simulations de l'Auto-Allumage de Mélanges Hydrocarbures/Hydrogènes dans un Écoulement Supersonique Coaxial Confiné d'Air Chaud*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2007. 59
- [137] G. Collin, O. Dessornes, and P. Magre, “Installations d’essais pour les recherches fondamentales en combustion,” in *AGARD Conference on Future Aerospace Technology in the Service of the Alliance*, 1997. 66

- [138] P. Magre, G. Collin, O. Pin, J. Badie, G. Olalde, and M. Clément, "Temperature measurements by CARS and intrusive probe in an air-hydrogen supersonic combustion," in *8th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 1998. 66
- [139] P. Magre and P. Bouchardy, "Nitrogen and hydrogen coherent anti-stokes raman scattering thermometry in a supersonic reactive mixing layer," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, pp. 697–703, 2000. 66
- [140] H. Weisgerber, R. Martinuzzi, U. Brummund, and P. Magre, "Mesures de vitesse par PIV dans une combustion supersonique hydrogène-air à Mach 2," in *37e Colloque d'Aérodynamique Appliquée "Aérodynamique et Propulsion des véhicules à grande vitesse"*, 2001. 66
- [141] A. Bresson, P. Bouchardy, P. Magre, and F. Grisch, "OH/acetone PLIF and CARS thermometry in a supersonic reactive layer," in *10th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2001. 66
- [142] E. George, P. Magre, and V. Sabel'nikov, "Self-ignition of hydrogen-hydrocarbons mixtures in a hot supersonic confined coflow of air," in *13th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2005. 67
- [143] D. Gaffié, U. Wepler, P. Magre, W. Koschel, and P. Novelli, "Numerical investigation of supersonic reacting hydrogen jets in a hot air coflow," in *10th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2001. 67
- [144] D. Davidenko, I. Gökalp, E. Dufour, and D. Gaffié, "Kinetic mechanism validation and numerical simulation of supersonic combustion of methane-hydrogen fuel," in *11th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2002. 67
- [145] V. Quintilla, P. Magre, D. Scherrer, P. Destors, and E. Dufour, "Experimental and numerical investigation of supersonic reacting hydrogen/methane jets in hot air coflows," in *13th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2005. 67
- [146] D. Davidenko, I. Gökalp, E. Dufour, and D. Gaffié, "Numerical simulations of supersonic combustion of methane-hydrogen fuel in an experimental combustion chamber," *Parallel Computational Fluid Dynamics - Advanced Numerical Methods, Software and Application*, pp. 529–536, 2004. 67
- [147] W. Waidmann, F. Alff, M. Böhm, U. Brummund, W. Clauß, and M. Oswald, "Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber," *Space Technology*, vol. 15, pp. 421–429, 1995. 67
- [148] M. Oevermann, "Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a SCRAMJET using flamelet modeling," *Aerospace Science and Technology*, vol. 4, pp. 463–480, 2000. 67
- [149] J.-F. Izard, *Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides*. PhD thesis, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2009. 68
- [150] F. Génin and S. Menon, "Simulation of turbulent mixing behind a strut injector in supersonic flow," *AIAA Journal*, vol. 48, pp. 526–539, 2010. 68
- [151] A. Cutler, P. Danehy, R. Springer, S. O'Byrne, D. Capriotti, and R. DeLoach, "Coherent anti-stokes raman spectroscopic thermometry in a supersonic combustor," *AIAA Journal*, vol. 41, pp. 2451–2459, 2003. 68

- [152] C. Rodriguez and A. Cutler, “Numerical analysis of the SCHOLAR supersonic combustor,” tech. rep., NASA, 2003. 68
- [153] P. Drummond, G. Diskin, and A. Cutler, “Fuel-air mixing and combustion in scramjets,” in *38th AIAA Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 2002. 68
- [154] A. Ingenito and C. Bruno, “Physics and regimes of supersonic combustion,” *AIAA Journal*, vol. 48, pp. 515–525, 2010. 69
- [155] D. Peterson, E. Tylczaky, and G. Candler, “Hybrid reynolds-averaged and large-eddy simulation of scramjet fuel injection,” in *17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 2011. 69
- [156] O. Jarrett, A. Cutler, R. Antcliff, T. Chitsomboon, C. Dancey, and J. Wang, “Measurements of temperature, density, and velocity in supersonic reacting flow for CFD code validation,” *25th JANNAF Combustion Meeting*, vol. 1, pp. 357–374, 1988. 70, 71
- [157] T. Cheng, J. Wehrmeyer, R. Pitz, O. Jarrett, and G. Northam, “Finite-rate chemistry effects in a Mach 2 reacting flow,” in *27th AIAA Joint Propulsion Conference*, 1991. 70, 71
- [158] C. Dancey, “The turbulent flow field downstream of an axisymmetric Mach 2 supersonic burner : LDA measurements,” in *32nd AIAA Joint Propulsion Conference*, 1996. 71
- [159] R. Rogers and W. Chinitz, “Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations,” *AIAA Journal*, vol. 21, pp. 586–592, 1983. 71
- [160] R. Baurle, G. Alexopoulos, and H. Hassan, “Assumed joint probability density function approach for supersonic turbulent combustion,” *Journal of Propulsion and Power*, vol. 10, pp. 473–484, 1994. 71, 77
- [161] R. Baurle, G. Alexopoulos, and H. Hassan, “Modeling of supersonic turbulent combustion using assumed probability density functions,” *Journal of Propulsion and Power*, vol. 10, pp. 777–786, 1994. 71, 77
- [162] R. Baurle, A. Hsu, and H. Hassan, “Assumed and evolution probability density functions in supersonic turbulent combustion calculations,” *Journal of Propulsion and Power*, vol. 11, pp. 1132–1138, 1995. 71, 77
- [163] V. Morgenthaler, L. Figueira da Silva, B. Deshaies, and V. Sabel’nikov, “Non-premixed combustion in supersonic turbulent flows : a numerical study for co-flowing h_2 -air jets,” in *9th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, 1999. 71
- [164] V. Sabel’nikov, B. Deshaies, and L. Figueira da Silva, “Revisited flamelet model for nonpremixed combustion in supersonic turbulent flows,” *Combustion and Flame*, vol. 114, pp. 577–584, 1998. 71
- [165] A. Dauptain, B. Cuenot, and T. Poinso, “Large eddy simulation of a supersonic hydrogen-air diffusion flame,” in *Complex Effects in Large Eddy Simulation*, 2005. 71, 98
- [166] J.-F. Izard, G. Lehnasch, and A. Mura, “A lagrangian model of combustion in high-speed flows : Application to scramjet conditions,” *Combustion Science and Technology*, vol. 181, pp. 1372–1396, 2009. 72, 173

- [167] L. Gomet, V. Robin, and A. Mura, "Influence of residence and scalar mixing time scales in non-premixed combustion in supersonic turbulent flows," *Combustion Science and Technology*, vol. 184, pp. 1471–1501, 2012. 72
- [168] P. Boivin, A. Dauplain, C. Jiménez, and B. Cuenot, "Simulation of a supersonic hydrogen–air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry," *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 1779–1790, 2012. 72, 98
- [169] P. Gerlinger, "Investigation of an assumed PDF approach for finite-rate chemistry," *Combustion Science and Technology*, vol. 175, pp. 841–872, 2003. 77
- [170] A. Ferri, "Review of scramjet propulsion technology," *Journal of Aircraft*, vol. 5, pp. 3–10, 1968. 114
- [171] F. Falempin, *Scramjet Propulsion*, ch. Scramjet Developments in France, p. 47–118. 2000. 114
- [172] E. Curran, "Scramjet engines : The first forty years," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 17, pp. 1138–1148, 2001. 114, 118
- [173] R. Fry, "A century of ramjet propulsion technology evolution," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 20, pp. 27–58, 2004. 114
- [174] J. Bellet, J. Soustre, T. Kageyama, and N. Manson, "Deux souffleries pour l'étude de la combustion en écoulement supersonique," *Entropie*, vol. 32, p. 42, 1970. 115
- [175] L. Reingold and M. Serruys, "La combustion stabilisée sur une onde de choc dans un Écoulement supersonique permanent," *Entropie*, vol. 22, p. 21, 1968. 115
- [176] F. Falempin and L. Serre, "French flight testing program LEA - status in 2011," in *17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2011. 117
- [177] R. Walther, V. Sabel'nikov, Y. Korontsvit, and O. V. V. Sermanov, "Progress in the joint german - russian scramjet technology programme," in *International Symposium on Air Breathing Engines*, pp. 1217–1329, 1995. 119
- [178] R. Walther, W. Koschel, V. Sabel'nikov, Y. Korontsvit, and V. Ivanov, "Investigation into the aerothermodynamic characteristics of scramjet components," in *International Symposium on Air Breathing Engines*, pp. 598–606, 1997. 119
- [179] C. Rogers, "A study of mixing of hydrogen injected normal to a supersonic airstream," tech. rep., NASA, 1971. 123, 143
- [180] C. McClinton, "The effect of injection angle on the interaction between sonic secondary jets and a supersonic free stream," tech. rep., NASA, 1972. 123, 130
- [181] F. Billig, R. Orth, and M. Lasky, "A unified analysis of gaseous jet penetration," *AIAA Journal*, vol. 9, pp. 1048–1058, 1971. 123
- [182] M. Gruber, R. Baurle, T. Mathur, and K. Hsu, "Fundamental studies of cavity-based flameholder concepts for supersonic combustors," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 17, pp. 146–153, 2001. 123
- [183] R. Baurle and D. Eklund, "Analysis of dual-mode hydrocarbon scramjet operation at Mach 4-6.5," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 18, pp. 990–1002, 2002. 123
- [184] J. Donahue, J. McDaniel, and H. Haj-Hariri, "Experimental and numerical study of swept injection into a supersonic flowfield," *AIAA Journal*, vol. 32, pp. 1860–1867, 1994. 123

- [185] G. Northam, I. Greenberg, C. Byington, and D. Capriotti, "Evaluation of parallel injection configurations for Mach 2 combustion," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 8, pp. 491–499, 1992. 123
- [186] T. Sunami, P. Magre, A. Bresson, F. Grisch, M. Orain, and M. Kodera, "Experimental study of strut injectors in a supersonic combustor using OH-PLIF," in *13th AIAA International Space Planes and Hypersonics Systems and Technologies*, 2005. 123
- [187] A. Gardner, A. Paull, and T. McIntyre, "Upstream porthole injection in a 2D scramjet model," *Shock Waves*, vol. 11, pp. 369–375, 2002. 123
- [188] J. Odam and A. Paull, "Comparison of experimental thrust measurements with theoretical values for a scramjet engine," in *12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies*, 2003. 123
- [189] J. Turner and M. Smart, "Application of inlet injection to a 3-D scramjet at Mach 8," *AIAA Journal*, vol. 48, pp. 829–838, 2010. 124
- [190] C. Goyne, R. Stalker, and A. Paull, "Shock-tunnel skin-friction measurement in a supersonic combustor," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 15, pp. 699–705, 1999. 124
- [191] R. Stalker, "Control of hypersonic turbulent skin friction by boundary-layer combustion of hydrogen," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 42, pp. 577–587, 2005. 124, 165, 166
- [192] M. Suraweera and M. Smart, "Shock tunnel experiments with a Mach 12 REST scramjet at off-design conditions," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 25, pp. 555–564, 2009. 126, 138, 152
- [193] D. Mee, "Boundary layer transition measurements in hypervelocity flows in a shock tunnel," *AIAA Journal*, vol. 40, pp. 1542–1548, 2002. 126
- [194] C. Wittliff, M. Wilson, and A. Hertzberg, "The tailored-interface hypersonic shock tunnel," *Journal of Aerospace Sciences*, vol. 26, pp. 219–228, 1959. 127
- [195] M. Suraweera, "Mach 7.6 nozzle pitot survey in T4 shock tunnel," tech. rep., Department of Mechanical Engineering, The University of Queensland, 2006. 127
- [196] M. Knell, "Calibration of a Mach 7.6 nozzle," tech. rep., Department of Mechanical Engineering, The University of Queensland, 2003. 128
- [197] P. Jacobs, R. Rogers, E. Weidner, and R. Bittner, "Flow establishment in a generic scramjet combustor," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 8, p. 890–899, 1992. 128
- [198] R. Stalker and R. Morgan, "The university of queensland free piston shock tunnel T4 – initial operation and preliminary calibration," in *4th National Space Engineering Symposium*, 1988. 129
- [199] C. Goyne, *Skin Friction Measurements in High Enthalpy Flows at High Mach Number*. PhD thesis, The University of Queensland, 1998. 129
- [200] M. Suraweera, "Application of mounting configurations for Kulite pressure transducers in T4 shock tunnel," tech. rep., Department of Mechanical Engineering, The University of Queensland, 2006. 129
- [201] M. Robinson, S. Rowan, and J. Odam, "T4 free piston shock tunnel operator's manual," tech. rep., Department of Mechanical Engineering, The University of Queensland, 2003. 133

- [202] M. McIntosh, “Computer program for numerical calculation of frozen and equilibrium conditions in shock tunnels,” tech. rep., Department of Physics, Australian National University, 1968. 133
- [203] J. Lordi, R. Mates, and J. Moselle, “Computer program for the numerical solution on nonequilibrium expansions of reacting gas mixtures,” tech. rep., NASA, 1966. 134
- [204] C. Smith, “The starting process in a hypersonic nozzle,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 24, p. 625–640, 1966. 135
- [205] E. Felderman, “Heat transfer and shear stress in the shock-induced unsteady boundary layer on a flat plate,” *AIAA Journal*, vol. 6, p. 408–412, 1968. 135
- [206] W. Davies and L. Bernstein, “Heat transfer and transition to turbulence in the shock-induced boundary layer on a semi-infinite flat plate,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 3, p. 87–112, 1969. 135
- [207] R. East, R. Stalker, and J. Baird, “Measurements of heat transfer to a flat plate in a dissociated high-enthalpy laminar air flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 97, p. 673–699, 1980. 135
- [208] A. Paull, “A simple shock tunnel driver gas detector,” *Shock Waves*, vol. 6, p. 309–312, 1996. 135
- [209] M. Smart, “Scramjets,” *The Aeronautical Journal*, vol. 111, pp. 605–620, 2007. 141, 142
- [210] T. Mitani and T. Kouchi, “Flame structures and combustion efficiency computed for a Mach 6 scramjet engine,” *Combustion and Flame*, vol. 142, pp. 187–196, 2005. 141
- [211] R. Pecnik, V. Terrapon, F. Ham, G. Iaccarino, and H. Pitsch, “Reynolds-averaged navier–stokes simulations of the HyShot II scramjet,” *AIAA Journal*, vol. 50, pp. 1717–1732, 2012. 141
- [212] J. White and J. Morrison, “A pseudo-temporal multi-grid relaxation scheme for solving the parabolized Navier-Stokes equations,” in *14th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 1999. 143
- [213] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno, “A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames,” *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute*, vol. 26, p. 27–34, 1996. 154
- [214] A. Mura and J. Iazard, “Numerical simulation of supersonic nonpremixed turbulent combustion in a scramjet combustor model,” *Journal of Propulsion and Power*, vol. 26, pp. 858–868, 2010. 168
- [215] R. Kirchhartz, D. Mee, and R. Stalker, “Supersonic skin-friction drag with tangential wall slot fuel injection and combustion,” *AIAA Journal*, vol. 50, pp. 313–324, 2012. 169
- [216] W. Chan, D. Mee, M. Smart, J. Turner, and R. Stalker, “Boundary layer combustion for viscous drag reduction in practical scramjet configurations,” in *27th International Council of the Aeronautical Sciences*, 2010. 169
- [217] T. Le Pichon, V. Sabel’nikov, Y. Moule, and A. Cochet, “Assessment of a partially stirred reactor combustion model to predict the lean blow-out limit of a ramjet combustor,” in *18th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technology Conference*, 2012. 173

-
- [218] A. Cutler, G. Magnotti, R. Baurle, D. Bivolaru, S. Tedder, P. Danehy, M. Weigl, F. Beyrau, and T. Seeger, “Development of supersonic combustion experiments for CFD modeling,” in *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2007. 174
- [219] S. Tedder, P. Danehy, G. Magnotti, and A. Cutler, “CARS temperature measurements in a combustion-heated supersonic jet,” in *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2009. 174
- [220] D. Bivolaru, A. Cutler, P. Danehy, R. Gaffney, and R. Baurle, “Spatially and temporally resolved measurements of velocity in a H₂-air combustion-heated supersonic jet,” in *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2009. 174
- [221] G. Magnotti and D. Cutler, “Dual-pump CARS development and application to supersonic combustion,” tech. rep., NASA, 2012. 174

Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs.

Dans le domaine des systèmes propulsifs, le statoréacteur classique possède de bonnes performances propulsives. Néanmoins, celles-ci se dégradent notablement lorsque les valeurs du nombre de Mach augmentent. Dans le régime hypersonique (au-delà de Mach 6), l'utilisation d'un statoréacteur à combustion supersonique, ou superstatoréacteur, doit permettre de surmonter ces difficultés. La simulation numérique est un des moyens d'étude de la combustion dans ces régimes d'écoulements rapides. Elle doit alors être capable de restituer des effets spécifiques aux écoulements à grand nombre de Mach, pour lesquels les temps caractéristiques chimiques et de mélange aux petites échelles peuvent être du même ordre de grandeur. Ce travail de thèse est consacré à l'amélioration des outils de simulation de la combustion dans les écoulements rapides en prenant en compte les effets de chimie finie et de micro-mélange sur la base d'une approche de réacteur partiellement prémélangé. La modélisation UPaSR ainsi proposée est validée sur la base du calcul d'une flamme jet supersonique. Les simulations numériques correspondantes conduisent à des résultats encourageants qui confirment l'importance, pour ce type de conditions, des effets cinétiques d'une part, et des effets compressibles d'autre part. Enfin, le modèle UPaSR est appliqué à l'analyse d'une configuration plus complexe de superstatoréacteur (RESTM12) étudiée expérimentalement à l'Université du Queensland. Deux méthodes différentes sont utilisées et comparées afin d'obtenir les principaux indices de performance.

Mots-clés : COMBUSTION ; COMBUSTION TURBULENTE ; COMBUSTION SUPERSONIQUE ; AUTO-ALLUMAGE ; MODÉLISATION ; RÉACTEUR PARTIELLEMENT MÉLANGÉ ; MICRO-MÉLANGE ; SIMULATION GRANDE ÉCHELLE ; SUPERSTATORÉACTEUR

Modelling and Simulation of Combustion in Supersonic Flows. Applications to Scramjets.

Classical ramjet engines feature high propulsive performances but drastically decreasing for increasing values of the flight Mach number. In the hypersonic regime (above Mach 6), the use of a supersonic combustion ramjet - a.k.a scramjet - may remedy this limitation. Computational fluid dynamics is one of the tools used for the study of such high-speed turbulent reactive flows. It must take into account the specificities of high Mach number reactive flows, which feature chemical reaction time scales with the same order of magnitude as flow time scales. The present study focuses on the improvement of a CFD tool by taking finite-rate chemistry and micro-mixing effects into account within the framework of the partially stirred reactor concept. In a first step of the validation procedure, the UPaSR closure hence proposed is applied to the numerical simulation of supersonic reactive co-flowing jets. The corresponding numerical results proved to be very encouraging, confirming the essential influence of both finite-rate chemical kinetics and compressibility effects for such conditions. Finally, the UPaSR closure is retained to analyse a full-scale scramjet geometry (RESTM12) experimentally studied at the University of Queensland. Two different approaches are applied and compared to evaluate the main performance indices.

Keywords : COMBUSTION ; TURBULENT COMBUSTION ; SUPERSONIC COMBUSTION ; AUTO-IGNITION ; MODELLING ; PARTIALLY STIRRED REACTOR ; MICROMIXING ; LARGE EDDY SIMULATION ; SCRAMJET