



HAL
open science

Etude de l'interaction choc/turbulence/combustion en écoulement cisailé réactif: analyse des jets réactifs fortement sous-détendus.

Romain Buttay

► **To cite this version:**

Romain Buttay. Etude de l'interaction choc/turbulence/combustion en écoulement cisailé réactif: analyse des jets réactifs fortement sous-détendus.. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2015. Français. NNT: 2015ESMA0009 . tel-01236072

HAL Id: tel-01236072

<https://theses.hal.science/tel-01236072>

Submitted on 1 Dec 2015

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.

THESE

Pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National—Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale :

Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :

Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Romain Buttay

Etude de l'interaction Choc / Turbulence / Combustion en écoulement cisailé réactif : analyse des jets réactifs fortement sous détendus

Directeur de thèse : **Arnaud Mura**

Co-encadrant : **Guillaume Lehnasch**

Soutenue le 22 octobre 2015

devant la commission d'examen

Jury

M. F. Anselmet	Professeur Ecole Centrale Marseille	Président
M. Y. D'Angelo	Professeur INSA de Rouen	Rapporteur
M. C. Tenaud	Directeur de Recherche au CNRS	Rapporteur
M. A. Chinnayya	Professeur ISAE-ENSMA	Examineur
M. L. Gomet	Ingénieur expert Organes de Combustion SNECMA DMS	Examineur
M. G. Lehnasch	Maître de conférences ISAE-ENSMA	Examineur
M. Y. Moule	Ingénieur expert Aérodynamique & Performances MBDA	Examineur
M. A. Mura	Directeur de Recherche au CNRS	Examineur

*And now we are Free.
I will see you again... but not yet... Not yet!*

*A mes parents, mon frère et ma sœur
A Aline*

Remerciements

Le travail résumé dans ce mémoire s'est effectué à l'Institut P'-UPR 3346 du CNRS, dans le département Fluides, Thermique et Combustion. Cette thèse n'aurait pas pu se dérouler sans le soutien financier du CNRS et de la région Poitou-Charente.

Je tiens à remercier MM. Yves D'Angelo et Christian Tenaud d'avoir accepté d'être mes rapporteurs, Fabien Anselmet d'être président du jury et pour les commentaires pertinents qu'ils m'ont fait à la lecture de ma thèse. Merci également à Ashwin Chinnayya, Laurent Gomet et Yann Moule d'avoir accepté d'évaluer mon travail de thèse et de participer au jury.

Mes respectueux remerciements s'adressent à mon directeur de thèse, M. Arnaud Mura pour avoir accepté de diriger cette thèse et dont les conseils précieux m'ont été indispensables sur le plan scientifique. Je tiens également à le remercier pour la confiance et la sympathie qu'il m'a témoignées au cours de ces quelques années de thèse.

Je remercie chaleureusement M. Guillaume Lehnasch d'avoir co-encadré cette thèse, pour les moyens qu'il a mis à ma disposition pour effectuer ce travail, la confiance, l'enthousiasme, et les conseils avisés qu'il m'a apporté.

Merci aussi aux collègues passés dans le bureau pour la bonne ambiance qui y a régné durant ces années. Aux anciens : Merci à Pedro, Laurent et Sylvain. Aux actuels : Merci à Anthony, Kim Quoc, Aimad et Radouan. Merci également à Jocelyne pour ses pauses réglementaires.

Finalement j'adresse un grand merci à toute ma famille, et mes parents ainsi qu'à ma fiancée, pour leur soutien et leurs encouragements tout au long de mon cursus.

Table des matières

Remerciements	i
Table des matières	iii
Liste des tableaux	vii
Table des figures	ix
Liste des symboles	xix
1 Introduction	1
2 Phénoménologie	3
2.1 Introduction	3
2.2 Jets compressibles	3
2.2.1 Écoulement compressible	3
2.2.2 Choc et détente	4
2.2.3 Jets compressibles	5
2.2.4 Jets compressibles sous-détendus	6
2.2.5 Jets compressibles fortement sous-détendus	10
2.2.6 Caractéristiques instationnaires des jets fortement sous-détendus . .	13
2.3 Phénoménologie du mélange scalaire passif	16
2.3.1 Mélange scalaire	16
2.4 Allumage et Combustion	23
2.4.1 Chimie des mélanges d'hydrogène	24
2.4.2 Limites d'allumage des mélanges hydrogène/air	24
2.4.3 Auto-allumage des mélanges d'hydrogène	25
2.4.4 Auto-allumage dans les écoulements à haute vitesse	26
3 Présentation de l'outil numérique	27
3.1 Introduction	27

3.2	Equations et modèles mathématiques	27
3.2.1	Equations de Navier-Stokes pour un mélange réactif de gaz	28
3.2.2	Propriétés thermodynamiques	29
3.2.3	Propriétés de transport détaillé	30
3.2.4	Propriétés de transport simplifié	32
3.2.5	Cinétique chimique	32
3.2.6	Récapitulatif	34
3.3	Méthodes numériques	35
3.3.1	Discrétisation spatiale des flux convectifs	36
3.3.2	Discrétisation spatiale des flux diffusifs	40
3.3.3	Intégration temporelle	42
3.4	Critères de stabilité numérique	44
3.4.1	Température du mélange	45
3.4.2	Conditions aux limites	45
3.4.3	Récapitulatif	54
3.5	Vérifications numériques du code CREAMS	55
3.5.1	Tube à choc de Sod	55
3.5.2	Taux de convergence global	57
3.5.3	Taux de convergence du schéma WENO7	59
3.5.4	Tube à choc multi-espèces inerte	62
3.5.5	Scalabilité de CREAMS	62
3.6	Récapitulatif	62
4	Simulation de jets fortement sous-détendus d'air	65
4.1	Introduction	65
4.2	Description des configurations étudiées	65
4.3	Vérification des calculs	68
4.3.1	Convergence des statistiques	68
4.3.2	Vérification de la résolution spatiale	70
4.4	Comparaison des deux niveaux de résolution	75
4.5	Etude de la structure globale du jet	79
4.5.1	Etude de l'anisotropie du jet	87
4.6	Champ scalaire : mélange turbulent	89
4.7	Interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire	98
4.8	Influence des termes à masse volumique variable.	103
4.9	Conclusion	105

5	Simulations de jets inertes d'hydrogène fortement sous-détendus	107
5.1	Introduction	107
5.2	Description de la configuration	107
5.3	Vérification des deux cas de calcul	108
5.3.1	Convergence des bases de données.	109
5.3.2	Résolution spatiale	110
5.4	Étude de la structure macroscopique du jet	112
5.4.1	Influence du changement de fluide injecté	112
5.4.2	Effet de masse volumique variable	123
5.5	Analyse du mélange aux petites échelles	131
5.5.1	Évolution du gradient scalaire	131
5.5.2	Étude de la dynamique du gradient scalaire	135
5.5.3	Etude des PDFs de scalaires passifs	142
5.6	Effet de la prise en compte des termes de transport détaillés	144
5.7	Conclusion	149
6	Allumage et combustion de jets d'hydrogène fortement sous détendus	151
6.1	Introduction	151
6.2	Propension du jet d'hydrogène à l'allumage	151
6.2.1	Probabilité d'allumage du jet d'hydrogène	152
6.2.2	Détermination des zones favorables à l'allumage	153
6.3	Allumage forcé du jet d'hydrogène central	157
6.3.1	Description de la configuration	157
6.3.2	Étude de la propagation de la réaction chimique	158
6.4	Allumage de type moteur fusée	172
6.4.1	Description de la configuration	172
6.4.2	Description de la structure du jet	173
6.4.3	Énergie cinétique de turbulence	178
6.4.4	Etude de l'auto-allumage	178
6.5	Conclusion	186
7	Conclusion et perspectives	187
A	Approximation de Burke et Schumann	191
B	A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier-Stokes solver	195
C	Analysis of small-scale scalar mixing processes in highly under-expanded jets	197

Bibliographie**199**

Liste des tableaux

3.1	Mécanisme réactionnel de Ó Conaire et al. [1]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en unités s-cm ³ -cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes : H ₂ , O ₂ , H, O, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , H ₂ O, N ₂	34
3.2	Valeurs du coefficient a_{kl}^r pour le schéma WENO7 (r=4).	40
3.3	Paramètres pour le tourbillon	51
3.4	Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma centré. . .	58
3.5	Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma WENO7. . .	58
3.6	Analyse de convergence du schéma WENO7	61
4.1	Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul (sans les zones tampons) a pour dimensions $L'_1 \times L'_2 \times L'_3$. Il est constitué d'un nombre de points $N' = N'_1 \times N'_2 \times N'_3$. Le diamètre d'injection D est utilisé comme longueur de référence.	66
4.2	Paramètres de l'écoulement.	68
4.3	Caractérisation de la résolution de la simulation (les nombres de Reynolds ainsi que les longueurs caractéristiques sont évaluées à $x/D = 14$ et $r/D = 1.75$).	70
5.1	Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul (sans les zones tampons) a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitué d'un nombre total de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. Le diamètre d'injection D est utilisé comme longueur de référence.	108
5.2	Paramètres de l'écoulement.	108
5.3	Caractérisation de la résolution de la simulation (les nombres de Reynolds ainsi que les longueurs caractéristiques sont évalués à $x/D = 14$ et $r/D = 1.75$).	110
5.4	Comparaison des temps de mélange obtenus à l'aide du modèle <i>IEM</i> (τ_{IEM}) et basé sur le transport d'un scalaire passif ($\tau_\xi = \widetilde{\xi}''^2/\widetilde{\varepsilon}_\xi$) et estimation de la constante $C_{IEM} = \tau_\xi/\tau_{IEM}$	142

6.1 Paramètres de l'écoulement.	172
---	-----

Table des figures

2.1	Schéma de la formation de faisceaux de détente et de compression.	5
2.2	Schéma du jet libre.	6
2.3	Schéma du jet faiblement sous-détendu ($1.1 > NPR > 2.1$). 1 : Choc incident “en tonneau”, 2 : Choc réfléchi, 3 : Ligne isobare de la couche de cisaillement, 4 : Couche de cisaillement du jet, 5 : Zone potentielle, 6 : Zone de transition, 7 : Zone développée, 8 : Profil de similitude des champs de vitesse et de température (d’après Lehnasch [2])	7
2.4	Schéma du jet modérément sous détendu ($2.1 > NPR > 7$). 1 : Faisceau de détente, 2 : Choc incident “en tonneau”, 3 : Point triple, 4 : Choc réfléchi, 5 : Poche subsonique, 6 : Couche de mélange induite par le disque de Mach , 7 : Ligne isobare de la couche de cisaillement, 8 : Couche de cisaillement du jet, 11 : Longueur de la première cellule de choc, 12 : Longueur de la seconde cellule de choc, 13 : Distance entre l’ajutage et le disque de Mach, 14 : Longueur de la poche subsonique (d’après Lehnasch [2]).	8
2.5	Schéma de la structure du jet fortement sous détendu ($7 > NPR > 10$). 2 : Choc incident “en tonneau”, 3 : Ligne isobare de la couche de cisaillement, 4 : Choc réfléchi, 5 : Couche de cisaillement du jet, 6 : Disque de Mach, 8 : Couche de mélange du disque de Mach, 11 : Zone de détente supersonique, 12 : Zone de compression supersonique (d’après Lehnasch[2])	9
2.6	Schéma de la structure du jet très fortement sous détendu ($NPR > 10$). 1 : Choc incident “en tonneau”, 2 : Couche de mélange, 3 : Ligne isobare de la couche de cisaillement, 4 : Choc réfléchi, 5 : Disque de Mach (d’après Lehnasch [2])	10
2.7	Évolution de la position du disque de Mach en fonction de la pression totale (données de Addy [3] (\odot), Ashkenas [4] (\square), Dubois [5] (∇) et Love [6] (\triangle)). La courbe en pointillés correspond à la corrélation de Ashkenas et Sherman [4].	11
2.8	Évolution du diamètre du disque de Mach en fonction de la pression totale (données de Crist et al. [7]).	12

2.9	Schéma de la structure proche d'un jet fortement sous-détendu. 1 : Buse d'injection, 2 : Choc incident "en tonneau", 3 : Disque de Mach, 4 : Choc réfléchi, 5 : Couche de cisaillement, 6 : Couche tourbillonnaire de structures longitudinales, 7 : Couche de mélange du disque de Mach, 8 : Tourbillon longitudinal de type Taylor-Görtler (d'après Lehnasch[2])	13
2.10	Forme modèle du spectre d'énergie de la turbulence.	18
2.11	Aspect des spectres d'énergie de la turbulence (trait plein) et d'un scalaire passif ξ en fonction de son nombre de Schmidt (traits pointillés).	21
2.12	Schéma bidimensionnel de l'interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire. Les directions e_1 et e_3 correspondent respectivement aux directions propres d'étirement et de compression.	23
3.1	Stencils candidats pour l'évaluation du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$ par interpolation essentiellement non oscillante du schéma WENO7.	38
3.2	Schéma des ondes caractéristiques entrant et sortant du domaine selon l'axe x pour des vitesses subsoniques.	46
3.3	Iso-contours de la vitesse longitudinale superposés au champs de P^* pour six instants différents.	52
3.4	Champs des pressions moyennes pour une couche de mélange subsonique.	53
3.5	Evolution de la pression moyenne au cours du temps en deux points de calcul pour la condition parfaitement non réfléchissante (\blacktriangle) et la condition NSCBC (\bullet).	54
3.6	Tube à choc de Sod [8]. Comparaison entre les solutions numériques (CFD) et analytiques de la masse volumique (a), la vitesse (b), la pression (c) et l'énergie spécifique interne (d). $t = 0.2$, 400 points de calcul, CFL=0.5.	56
3.7	Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondant (b).	59
3.8	Isolignes de masse volumique (a) et de la composante transversale de vitesse (b) à deux instants différents. $N = 160$	60
3.9	Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique obtenue après 1 cycle (a) et 10 cycles (b) en fonction de l'inverse du pas de temps pour différents niveaux de résolution.	60
3.10	Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondante (b).	61
3.11	Tube à choc multi-espèces inerte. Profils de masse volumique (a), vitesse (b), température (c) et rapport des chaleurs spécifiques (d). $t = 40 \mu s$, 400 points de calcul, CFL=0.5.	63

3.12	Résultats de scalabilité pour le code CREAMS. La droite idéale est représenté en trait plein et les résultats du code de calcul sont présentés en trait pointillé.	63
4.1	Domaine de calcul : définition des plans d'analyse.	66
4.2	Domaine de calcul : conditions aux limites retenues.	66
4.3	Etude de la convergence de base de donnée (vitesse longitudinale).	69
4.4	Étude de convergence du signal de pression mesuré au voisinage du dernier plan d'analyse $x/D = 14$	69
4.5	Champ de l'index de qualité IQ_η superposé aux iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.1$ et $r = 0.0$ (a) et profils de IQ_η sur les iso-lignes $r = 0.0$ et $\xi = 0.1$ (b).	71
4.6	Champs estimés à posteriori du rapport de la viscosité de sous-maille et de la viscosité moléculaire ν_{SGS}/ν obtenus avec le modèle de Smagorinsky (a) et avec le modèle fonction de structure (b) ainsi que des profils de ce même rapport obtenus à différentes distances de l'injection pour le modèle de Smagorinsky (c) et pour le modèle à fonction de structure (d).	72
4.7	Spectre de l'énergie cinétique turbulente tracé en fonction du nombre d'onde $\kappa [m^{-1}]$	74
4.8	Visualisation instantanée de la zone d'activation de la pondération non linéaire du schéma WENO.	75
4.9	Analyse de l'influence du niveau de résolution sur la structure du jet : cartographie des champs instantanés du nombre de Mach (a), d'un schlieren basé sur la masse volumique (b) et de la vorticité (c). Les parties supérieures correspondent au "jet-2" et les parties inférieures au "jet-1".	76
4.10	Analyse de l'influence du niveau de résolution sur la structure du jet : profils moyens axiaux du nombre de Mach (a), de la pression adimensionnée $P^* = P/P_{amb}$ (b), de la vitesse adimensionnée $\tilde{u}^* = \tilde{u}/u_{inj}$ (c) et de la fraction de mélange $\tilde{\xi}$ (d).	77
4.11	Analyse de l'influence du niveau de résolution sur la structure du jet : profils moyens radiaux de la vitesse longitudinale adimensionnée $\tilde{u}^* = \tilde{u}/u_{inj}$ (a) et de la variance adimensionnée de la vitesse longitudinale $\widetilde{u'^2}/u_{inj}^2$ (b).	78
4.12	Configuration du champ proche.	79
4.13	Profils axiaux de la pression normalisée, de la température normalisée, du nombre de Mach et de la vitesse axiale normalisée.	80
4.14	Position adimensionnée du disque Mach, la courbe en pointillé correspond à la corrélation empirique de Ashkenas et Sherman [4].	80

4.15	Structure moyenne de l'écoulement. (a) : champ moyen de la composante longitudinale de la vitesse \tilde{u} ($m.s^{-1}$) (partie supérieure) et champ de l'énergie cinétique turbulente k ($m^2.s^{-2}$) (partie inférieure); (b) : champ moyen de la masse volumique $\bar{\rho}$ ($kg.m^{-3}$)(partie supérieure) et champ de la variance normalisée $\bar{\rho}^2/\bar{\rho}^2$ (partie inférieure); (c) : champ moyen de nombre de Mach (partie supérieure) et champ moyen de la fraction de mélange ξ (partie inférieure); (d) : iso-contours de la pression (50 niveaux pris entre 2500 Pa et 2.10^5 Pa).	82
4.16	Profils axial de la vitesse normalisée $u^* = \tilde{u}/u_{inj}$ sur l'axe du jet, u_{inj} représente la vitesse d'injection du jet.	83
4.17	Profils radiaux des composantes moyennes de vitesse adimensionnées.	83
4.18	Champ de l'énergie cinétique turbulente k/u_{inj}^2	84
4.19	Composantes principales du tenseur de Reynolds adimensionnées.	85
4.20	Champs des nombres de Reynolds turbulent et de Mach turbulent.	86
4.21	Profils des échelles caractéristiques de la turbulence.	87
4.22	Vue d'ensemble du mélange en aval du disque de Mach.	88
4.23	Plans des invariants (II_a^*, III_a^*) pour différentes sections de l'écoulement.	90
4.24	Plans des invariants (η, ξ) pour différentes sections de l'écoulement.	91
4.25	Profils radiaux des deux premiers moments du scalaire passif.	92
4.26	Variance scalaire en fonction de $\tilde{\xi}$	94
4.27	Fonctions densité de probabilité $\tilde{P}(\xi)$ situées à $x/D = 6, 8, 10, 12$ et 14 le long des iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.3$ (a), $\tilde{\xi} = 0.5$ (b) et $\tilde{\xi} = 0.7$ (c). Évolution du skewness S_ξ associé à ces fonctions (d).	94
4.28	Échelles caractéristiques de temps de la turbulence et du mélange scalaire obtenues à partir de l'énergie cinétique de turbulence et de la variance du scalaire passif et leur taux de dissipation respectif. En suivant l'équation (4.13), le taux de dissipation scalaire moyen $\tilde{\epsilon}_\xi$ est approximé par \tilde{N}_ξ	96
4.29	Profils de la constante $C_\xi = \tau_\xi/\tau_t$ le long de différentes iso-lignes de $\tilde{\xi}$	97
4.30	Schématisation de l'action du champ de vitesse sur le champ scalaire.	99
4.31	Pdf des valeurs propres d'étirement (\blacktriangle) et de compression (\bullet) non adimensionnées (a) et adimensionnées par (ν/η^2) (b) pour trois différents rayons et $x/D = 14$	100
4.32	Orientations entre le gradient scalaire et les gradients de vitesse dans le champ lointain.	100
4.33	Orientations entre le gradient scalaire et les gradients de vitesse dans la région proche du choc réfléchi.	101
4.34	Pdf de chacune des contributions au produit $\lambda_i \times \cos^2 \theta_i$	101

4.35	Iso-surface instantanée du gradient scalaire ($\nabla\xi = \nabla\xi_{tres}$) coloriée par le cosinus de l'angle ($\mathbf{n}_\xi, \mathbf{e}_3$) entre le gradient scalaire et la direction principale de compression du tenseur S_{ij}	102
4.36	Profils radiaux de la contribution des termes associés aux variations de masse volumique dans l'équation de transport du SDR.	104
4.37	Profils radiaux des rapports entre les termes (X) et ($VIII$) et entre les termes (XI) et ($VIII$) de l'équation de transport du SDR.	104
5.1	Description de la géométrie utilisée pour les jets d'hydrogène.	109
5.2	Étude de la convergence de base de données (vitesse longitudinale).	109
5.3	Étude de convergence du signal de pression mesuré au voisinage du dernier plan d'analyse $x/D = 14$	110
5.4	Spectre de l'énergie cinétique turbulente $E_u(\kappa)$ tracé en fonction du nombre d'onde $\kappa [m^{-1}]$ à différentes abscisses.	111
5.5	Spectre du traceur passif $E_\xi(\kappa)$ tracé en fonction du nombre d'onde $\kappa [m^{-1}]$ à différentes abscisses.	111
5.6	Cartographie des zones de déclenchement de la pondération non-linéaire du schéma WENO7.	112
5.7	Comparaison en champ proche entre le jet d'air "jet-2" et le jet d'hydrogène "jet-3" : schlieren basé sur la masse volumique (a) et vorticit� adimensionn�e par (U_{inj}/D) (b). Les parties sup�rieures correspondent au cas hydrog�ne et les parties inf�rieures au cas air.	113
5.8	�volution de l'�paisseur δ_2 de la couche supersonique entre le choc <i>en tonneau</i> et la p�riph�rie du jet.	114
5.9	Comparaison entre le jet d'air "jet-2" et le jet d'hydrog�ne "jet-3" : nombre de Mach (a), temp�rature (en K) (b) et rapport $\overline{\rho^2}/\overline{\rho}^2$ (c). Les parties sup�rieures de chacune des trois figures correspondent au cas hydrog�ne et les parties inf�rieures au cas air.	115
5.10	Structure du jet d'hydrog�ne : profils axiaux du nombre de Mach moyen (a), de la vitesse axiale normalis�e \tilde{u}/u_{inj} (b), de la temp�rature normalis�e \overline{T}/T_{inj} (c) et du traceur passif $\tilde{\xi}$ (d).	116
5.11	Structure du jet d'hydrog�ne : profils radiaux du nombre de Mach moyen (a), de la temp�rature normalis�e \overline{T}/T_{inj} (b) et du traceur passif $\tilde{\xi}$ (c). Les symboles (●) correspondent au jet d'air "jet-2" et les symboles (■) au jet d'hydrog�ne "jet-3".	118

5.12	Comparaison entre le jet d'air "jet-2" et le jet d'hydrogène "jet-3" : scalaire passif $\tilde{\xi}$ (a), variance du scalaire passif $\tilde{\xi}''^2$ (b) et taux de ségrégation (c). Les parties supérieures correspondent au cas hydrogène et les parties inférieures au cas air.	119
5.13	Structure du jet d'hydrogène : champ de la composante longitudinale de la vitesse moyenne \tilde{u} ($m.s^{-1}$) (a), champ de nombre de Mach moyen (b) et iso-contours de la pression moyenne (Pa) (c).	121
5.14	Structure du jet d'hydrogène : comparaisons des profils radiaux de l'énergie cinétique turbulente (a) et des tensions turbulentes adimensionnées R_{11} , R_{22} et R_{33} (composantes longitudinale (b), radiale (c) et azimutale (d)). Les symboles (●) correspondent au jet d'air "jet-2" et les (■) au jet d'hydrogène "jet-3".	122
5.15	Champ du nombre de Mach turbulent $M_t = \sqrt{u'_i u'_i}/c$	123
5.16	Champs des fluctuations des variables thermodynamique. La partie supérieure correspond au champ de $\overline{\rho'^2}/\overline{\rho}^2$ et la partie inférieure représente le champ de $\overline{P'^2}/\overline{P}^2$	124
5.17	Profils des fluctuations adimensionnées des variables thermodynamiques : masse volumique $\overline{\rho'^2}/\overline{\rho}^2$ (a) et pression $\overline{P'^2}/\overline{P}^2$ (b).	124
5.18	Champ des contributions des modes acoustique (partie supérieure) et entropique (partie inférieure) dans les fluctuations de masse volumique.	125
5.19	Contribution des modes acoustique et entropique dans les fluctuations de masse volumique pour différentes distances de l'injection ($x/D = 6$ (a) et $x/D = 14$ (b)).	126
5.20	Corrélation entre les fluctuations de masse volumique et de scalaire passif (a) ainsi qu'entre les fluctuations de masse volumique et de pression (b).	127
5.21	Champ moyen de vorticité (s^{-1}) (partie supérieure) et d'enstrophie (s^{-2}) (partie inférieure).	129
5.22	Production d'enstrophie. Comparaison entre le terme barocline (s^{-3}) et le terme de dilatation (s^{-3}) de l'enstrophie. La partie supérieure correspond au terme de dilatation et la partie inférieure au couple barocline.	129
5.23	Bilan de l'enstrophie dans le plan de sortie du domaine ($x/D = 14$) : (a) terme de convection, (b) étirement tourbillonnaire, (c) expansion volumique, (d) couple barocline et (e) diffusion visqueuse.	130
5.24	<i>Scatterplots</i> des fractions de mélange basées sur les fractions massiques d'éléments Z_H (en rouge), Z_O (en bleu) et Z_N (en vert) en fonction du scalaire passif transporté ξ pour différentes positions longitudinales. Les figures (a), (b) et (c) sont positionnées à $x/D = 06$ tandis que les figures (d), (e) et (f) sont positionnées à $x/D = 14$	132

5.25	Evolution du gradient moyen de fraction massique d'élément hydrogène en fonction de la direction radiale. Nous représentons ici le gradient dans la direction longitudinale ∇_x et radiale ∇_r . Ces gradients moyens sont évalués pour une position longitudinale $x/D = 8$ (a) et $x/D = 14$ (b).	133
5.26	Évolution de la norme du gradient de fraction massique d'espèce conditionnée par le scalaire passif transporté ξ . Les gradients conditionnés sont basés sur les fractions massiques élémentaires. Les données sont représentées pour différentes distances de l'injection : $x/D = 6$ (a), $x/D = 8$ (b), $x/D = 12$ (c) et $x/D = 14$ (d).	134
5.27	Comparaisons entre les profils de diffusion conditionné de $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla X) X^* \rangle$ pour $X = \xi$ et $X = Y_{H_2}$ dans le plan $x/D = 6$ pour les valeurs de $\tilde{\xi} = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7	137
5.28	Comparaisons entre les profils de diffusion conditionné de $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla X) X^* \rangle$ pour $X = \xi$ et $X = Y_{H_2}$ dans le plan $x/D = 14$ pour les valeurs de $\tilde{\xi} = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7	138
5.29	Profils des gradients conditionnés $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \rangle$ en fonction du traceur passif superposés aux droites <i>IEM</i> pour le plan $x/D = 6$	141
5.30	Profils des gradients conditionnés $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \rangle$ en fonction du traceur passif superposés aux droites <i>IEM</i> pour le plan $x/D = 14$	141
5.31	PDF de ξ suivant les iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.1$ (a), $\tilde{\xi} = 0.3$ (b), $\tilde{\xi} = 0.5$ (c) et $\tilde{\xi} = 0.7$ (d).	143
5.32	Comparaison des skewness des fonctions densité de probabilité de ξ (■) et de Y_{H_2} (●) pour trois valeurs moyennes du scalaire passif $\tilde{\xi}$	143
5.33	Comparaison entre le champ moyen du nombre de Mach pour le cas transport simplifié (TS) et le cas transport détaillé (TD).	145
5.34	Effets de la prise en compte des termes de transport détaillé. Profils axiaux du nombre de Mach (a), de la vitesse axiale adimensionnée (b), de la température adimensionnée (c) et du traceur passif (d).	146
5.35	Effets de la prise en compte des termes de transport détaillé. Profils radiaux de la vitesse axiale adimensionnée (a), de la température adimensionnée (b) et du traceur passif (c). Les symboles (●) correspondent à la simulation "jet-3" et les symboles (■) au jet d'hydrogène "jet-4".	146
5.36	Effets de la prise en compte du transport détaillé sur le coefficient de viscosité dynamique μ ($kg/(m.s)$) (a) et (b) et de conductivité thermique λ ($W/(m.K)$) (c) et (d). Pour les champs présentés, les parties supérieures correspondent à la simulation "jet-3" et les parties inférieures à la simulation "jet-4". Pour les profils, les symboles (●) correspondent au transport simplifié tandis que les symboles (■) correspondent au transport détaillé.	147

5.37 Effets de la prise en compte du transport détaillé sur les gradients de flux de masse dans le plan $x/D = 6$	148
5.38 Effets de la prise en compte du transport détaillé sur les gradients de flux de masse dans le plan $x/D = 14$	148
6.1 PDF de ξ pris en différents rayons du jet d'hydrogène.	152
6.2 Probabilité d'allumage en fonction du rayon du jet pour différentes valeurs de x/D	153
6.3 Probabilité d'allumage P_{inf} et température moyenne du jet pour plusieurs valeurs de x/D	154
6.4 Limite d'auto-inflammation du mélange hydrogène/air : champ instantané de la fraction massique d'hydrogène prise entre les limites d'inflammabilité ξ_{ign}^- et ξ_{ign}^+ coloré par la température et superposé à un schlieren basé sur la masse volumique.	155
6.5 Fonction densité de probabilité jointe de la température et du traceur passif dans le plan $x/D = 6$ (a) et dans le plan $x/D = 14$ (b).	155
6.6 Délais d'auto-allumage d'un mélange hydrogène-air en fonction de la température (mélange stoechiométrique, mélange 4% H_2 et 75% H_2) (figure issue de la référence [9]).	156
6.7 Champs de température (en K) autour du noyau d'allumage en trois instants.	159
6.8 Champs du taux de dégagement de chaleur ω_0 ($m^2.s^{-3}$) autour du noyau d'allumage en trois instants.	160
6.9 Champs du taux de dissipation scalaire autour du noyau d'allumage en trois instants.	161
6.10 Champs de la fraction massique du radical OH autour du noyau d'allumage en trois instants.	162
6.11 Champs de la fraction massique du radical HO_2 autour du noyau d'allumage en trois instants.	163
6.12 Champs de la fraction massique du radical H_2O_2 autour du noyau d'allumage en trois instants.	164
6.13 Champs de l'indice de Takeno dans le sillage du noyau d'allumage pour les trois instants considérés.	165
6.14 Définitions des deux zones d'études	167
6.15 <i>Scatterplots</i> de la température dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.	168
6.16 <i>Scatterplots</i> de la fraction massique d' H_2 dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.	168

6.17	<i>Scatterplots</i> de la fraction massique d' H_2O dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps. La courbe noire correspond à l'approximation de chimie infiniment rapide (limite de Burke et Schumann).	169
6.18	<i>Scatterplots</i> de la fraction massique d' OH dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.	169
6.19	Fonction densité de probabilité de l'index de Takeno G	170
6.20	Grandeurs moyennes conditionnées par la fraction de mélange transportée.	171
6.21	Schéma de la configuration utilisée pour étudier l'auto-allumage dans le sillage d'un jet fortement sous détendu.	173
6.22	Champ du nombre de Mach dans le champ proche de l'injection illustrant la complexité de la topologie de l'écoulement compressible issu de ces deux jets co-courants.	174
6.23	Champ instantané (a) et champ moyen (b) de la fraction de mélange ξ reconstruite à partir de la fraction massique d'azote Y_{N_2} et de la fraction de mélange élémentaire basée sur l'élément oxygène ξ_O	176
6.24	Champ et profil axial du Nombre de Mach moyen (a) et champ de la température moyenne (K) et profil axial de la température moyenne normalisée (b).	177
6.25	Profils radiaux des espèces principales de l'écoulement : H_2 (a), O_2 (b), H_2O (c) et N_2 (d).	177
6.26	Visualisation du champ de l'énergie cinétique turbulente k ($m^2.s^{-2}$) et des profils radiaux de k normalisés.	178
6.27	Champ et profils radiaux du dégagement de chaleur ω_0 ($m^2.s^{-3}$) (a) et champ et profils radiaux de l'indice de Takeno G (b).	179
6.28	Champs instantanés de la fraction massique du radical OH superposés à une visualisation pseudo-Schlieren.	180
6.29	Moyenne conditionnelle de la température et du taux de dégagement de chaleur.	181
6.30	Fractions massiques moyennes conditionnées par la fraction de mélange pour les espèces réactives H_2 , H_2O et OH	181
6.31	<i>Scatterplots</i> de la température obtenus en quatre abscisses du jet. La figure (a) correspond à l'abscisse $x/D = 8$, (b) correspond à l'abscisse $x/D = 10$, (c) correspond à l'abscisse $x/D = 12$ et (d) correspond à l'abscisse $x/D = 14$	182
6.32	<i>Scatterplots</i> de la fraction massique de vapeur d'eau obtenus en quatre abscisses du jet.	182
6.33	<i>Scatterplots</i> de la fraction massique du radical OH obtenus en quatre abscisses du jet.	183

6.34	<i>Scatterplots</i> de la fraction massique du radical HO_2 obtenus en quatre abscisses du jet.	183
6.35	Visualisation en deux instants distincts du critère α de détection des zones de production du radical HO_2	185
6.36	Visualisation de la réactivité λ en deux instants distincts dans les zones délimitées par $0.05 < \alpha < 0.95$	185
A.1	Variation de la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} (a) et d'oxygène Y_{O_2} (b) en fonction de la fraction de mélange avec l'approximation de Burke et Schumann [10].	191

Liste des symboles

Abréviations

ACM	<i>Artificial compression method</i>
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CREAMS	<i>Compressible reactive multi-species solver</i>
CPU	Central processing unit
DNS	<i>Direct numerical simulation</i>
ENO	<i>Essentially non-oscillatory</i>
Fo	Nombre de Fourier
HPC	<i>High performance computing</i>
H	Symbole chimique de l'hydrogène atomique
H ₂	Symbole chimique du dihydrogène
H ₂ O	Symbole chimique de l'eau
HO ₂	Symbole chimique du radical hydroperoxyde
H ₂ O ₂	Symbole chimique du peroxyde d'hydrogène
IEM	<i>Interaction by Exchange with the Mean</i>
LES	<i>Large eddy simulation</i>
LLF	<i>Local Lax-Friedrichs</i>
LMSE	<i>Linear Mean Square Estimation</i>
LRM	<i>Linear Relaxation Model</i>
MPI	<i>Message passing interface</i>
M _α	Masse molaire de la α ^{ème} espèce
N ₂	Symbole chimique du diazote

NSCBC	<i>Navier-Stokes characteristic boundary conditions</i>
O	Symbole chimique de l'oxygène atomique
O ₂	Symbole chimique du dioxygène
OH	Symbole chimique du radical hydroxyle
ODE	<i>Ordinary differential equation</i>
PDF	<i>Probability density function</i>
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier-Stokes</i>
Rms	<i>Root mean square</i>
RK	Runge-Kutta
Sc	Nombre de Schmidt
SW	<i>Shock wave</i>
TD	Transport détaillé
TS	Transport simplifié
TVD	<i>Total variation diminishing</i>
WENO	<i>Weighted essentially non-oscillatory</i>

Symboles grecs

β_i	Coefficient dépendant de la température dans la loi d'Arrhenius de la $i^{\text{ème}}$ réaction (ou paramètres de lissage utilisés pour le calcul des poids normalisés du schéma WENO7)
γ	Rapport des capacités calorifiques du mélange
$\Delta h_{f\alpha}^0$	Enthalpie standard de formation de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
Δt	Pas de discrétisation temporelle
Δx_i	Pas de discrétisation spatiale dans la $i^{\text{ème}}$ direction
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
ε	Paramètre du schéma WENO7 évitant la division par zéro
θ_α	Coefficient de diffusion thermique de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
κ	Viscosité de volume du mélange
Λ	Matrice des valeurs propres du système hyperbolique

λ	Conductivité thermique du mélange (ou réactivité)
λ'	Conductivité thermique partielle du mélange
μ	Viscosité dynamique du mélange
ν	Viscosité cinématique du mélange
$\nu'_{\alpha i}$	Coefficient stœchiométrique côté produit de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce durant la $i^{\text{ème}}$ réaction chimique
$\nu''_{\alpha i}$	Coefficient stœchiométrique côté réactif de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce durant la $i^{\text{ème}}$ réaction chimique
ρ	Masse volumique du mélange
τ_{ij}	Tenseur de contraintes visqueuses
ω	Vorticité
$\dot{\omega}_0$	Taux de dégagement de chaleur
ω_i	Poids normalisés utilisés pour la pondération des flux numériques du schéma WENO7
$\dot{\omega}_\alpha$	Taux de production de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
ξ	Scalaire passif
ϵ_ξ	Taux de dissipation scalaire ($D \frac{\partial \xi''}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \xi''}{\partial x_\alpha}$)
N_ξ	Taux de dissipation scalaire ($D \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha}$)
χ_α	Rapport de diffusion thermique de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce

Symboles latins

A_i	Facteur pré-exponentiel de la loi d'Arrhenius pour la $i^{\text{ème}}$ réaction (ou matrice jacobienne de la forme conservative du système d'équations hyperbolique dans la $i^{\text{ème}}$ direction)
A_γ	Poids atomique du $\gamma^{\text{ème}}$ élément
a_γ	Fraction massique du $\gamma^{\text{ème}}$ élément
$a_{\gamma i}$	Flux diffusif du $\gamma^{\text{ème}}$ élément dans la $i^{\text{ème}}$ direction
$a_{n\alpha}$	Coefficients polynômiaux des tables de JANAF
c	Célérité du son
c_p	Chaleur spécifique à pression constante du mélange

$c_{p\alpha}$	Chaleur spécifique à pression constante de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
c_v	Chaleur spécifique à volume constante du mélange
$c_{v\alpha}$	Chaleur spécifique à volume constante de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
d_k	Poids optimaux pour la pondération des flux aux interfaces lors de l'interpolation WENO7
$d_{\alpha i}$	Vecteur de diffusion de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce dans la $i^{\text{ème}}$ direction
$D_{m\alpha}$	Coefficient de diffusion de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange
$D_{\alpha\beta}$	Coefficient de flux de diffusion binaire
e	Energie spécifique interne du mélange
e_t	Energie spécifique totale du mélange
e_{ijk}	Symbole de Levi-Civita
E_{A_i}	Energie d'activation de la $i^{\text{ème}}$ réaction
F_i	Vecteur des flux convectifs dans la $i^{\text{ème}}$ direction
$\hat{f}_{i+1/2}$	Approximation numérique du flux eulérien à l'interface $i + 1/2$
$\hat{f}_{s,i+1/2}$	Approximation numérique du flux caractéristique à l'interface $i + 1/2$
G_i	Vecteur des flux diffusifs dans la $i^{\text{ème}}$ direction
h	Enthalpie spécifique du mélange
h_α	Enthalpie spécifique de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
k	Energie cinétique turbulente
k_{bi}	Constante de réaction inverse de la $i^{\text{ème}}$ réaction
k_{ci}	Constante d'équilibre de la $i^{\text{ème}}$ réaction
k_{fi}	Constante de réaction directe de la $i^{\text{ème}}$ réaction
L_i	Longueur du domaine de calcul dans la $i^{\text{ème}}$ direction (ou opérateur discret d'intégration de la partie inerte des équations)
L_r	Opérateur discret d'intégration des termes réactifs
Le	Nombre de Lewis
L_η	Echelle de Kolmogorov
L_λ	Micro-échelle de Taylor

M	Nombre de Mach (ou troisième corps considéré dans une réaction élémentaire)
N_i	Nombre de points de calcul dans la $i^{\text{ème}}$ direction
$N_{\alpha\gamma}$	Nombre d'atomes γ dans la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
N	Nombre d'espèces dans le mélange
N_r	Nombre de réactions élémentaires
p	Pression du mélange
Q	Vecteur des variables conservées
q_i	Composante cartésienne du flux de chaleur dans la $i^{\text{ème}}$ direction (ou taux global de la $i^{\text{ème}}$ réaction élémentaire)
R	Constante universelle des gaz parfaits
$R(f, g)$	Coefficient de corrélation des quantités fluctuantes f et g
R_i	Matrice de vecteurs propres à droite dans la $i^{\text{ème}}$ direction
R_i^{-1}	Matrice de vecteurs propres à gauche dans la $i^{\text{ème}}$ direction
R_{ij}	Tenseur de contraintes de Reynolds
Re_λ	Nombre de Reynolds de la micro-échelle de Taylor
S	Vecteur de termes sources
S_ξ	Skewness des PDFs de ξ
T	Température
t	Temps
U	Vecteur des variables primitives
u_i	Composante cartésienne de la vitesse dans la direction i
$V_{\alpha i}$	Composante cartésienne de vitesse de diffusion de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce dans la direction i
W	Masse molaire du mélange (ou vecteur des variables caractéristiques)
W_α	Masse molaire de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
x_i	Coordonnées cartésiennes
$[X_\alpha]$	Concentration molaire de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce
Y_α	Fraction massique de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce

Autres notations

- Moyenne au sens de Reynolds
- Moyenne au sens de Favre
- ' Fluctuation de Reynolds
- '' Fluctuation de Favre

Indices

- C Combustible
- mr *Most reactive*
- O Oxydant
- P Produits
- ref Etat de référence
- st Stœchiométrique
- ∞ Etat à l'infini

Chapitre 1

Introduction

L'hydrogène occupe de plus en plus l'espace médiatique d'une part grâce à ses caractéristiques énergétiques très intéressantes et d'autre part à l'aide de ses propriétés environnementales. Sa combustion dans l'oxygène ne générant que de l'eau, il est perçu comme non polluant dans un monde qui cherche à limiter au maximum les émissions de CO_2 . Il est de plus en plus envisagé comme une réelle alternative aux hydrocarbures. Une des raisons principales réside dans sa haute énergie par unité de masse comparée aux combustibles fossiles : un kilogramme d'hydrogène libère environ trois fois plus d'énergie qu'un kilogramme de kérosène. De plus, l'hydrogène présente des temps caractéristiques d'auto-allumage très faibles. Il reste néanmoins de nombreux challenges à relever pour que l'énergie issue de sa combustion puisse se substituer de façon pérenne aux combustibles plus classiques. Ces propriétés réactives rendent son utilisation civile très délicate. Le défi le plus important à relever est celui de son stockage. De part sa faible densité et sa forte volatilité, c'est un gaz difficile à stocker. Les techniques de stockage actuelles proposent une autonomie comparable à celle offerte par le pétrole (pour le transport terrestre) avec des réservoirs de 150 litres pressurisés à 700 bars.

Sur le plan de la sécurité *grand public*, les obstacles semblent difficilement surmontables. L'acceptation sociale de l'hydrogène dépendra de la confiance du public en sa sûreté. La maîtrise des risques est donc particulièrement importante pour que l'hydrogène puisse remplacer de manière durable les carburants traditionnels. L'utilisation de l'hydrogène à grande échelle comme vecteur d'énergie doit donc répondre à des mesures de sécurité très exigeantes. Afin de définir ces principes de sécurité, une excellente compréhension des phénomènes physiques est nécessaire incluant les rejets non enflammés et leur dispersion, l'auto-allumage, les flammes jets, la déflagration et la détonation de mélange d'hydrogène.

Les jets fortement sous détendus jouent un rôle essentiel dans de nombreuses applications. Par exemple, les systèmes propulsifs équipant les véhicules hypersoniques ou bien

certains missiles les mettent en jeu. Ils interviennent aussi dans de nombreux cas de figure relevant de la sécurité industrielle tels que les explosions de jets (EXJET) associées à la rupture de conduites ou bien encore les ruptures de chambres de combustion d'aéronefs. Malheureusement, la connaissance des interactions choc / turbulence / mélange / combustion telles qu'elles se manifestent dans l'ensemble de ces situations reste aujourd'hui encore extrêmement imparfaite. Un des objectifs de ce travail de Thèse est donc de contribuer à l'améliorer. Les interactions choc / turbulence se produisant dans ce type de jet modifient profondément la nature du mélange turbulent et cela influe notablement sur l'allumage et l'éventuelle stabilisation de la combustion dans ce type d'écoulement. En particulier, cette étude vise à appréhender des configurations mettant en jeu des interactions fortes, en présence d'effets de courbure et de forte détente, susceptibles de conduire au développement d'instabilités particulières qui modifient significativement la dynamique classiquement observée dans les jets adaptés.

La simulation numérique directe ou DNS est un outil puissant de plus en plus employé à mesure que les puissances de calcul augmentent. Elle est capable de prédire complètement des écoulements turbulents grâce à la résolution de toutes les échelles caractéristiques de la turbulence. Ces simulations mettent donc en jeu des maillages conséquents et elles sont donc très coûteuses. Les chercheurs cherchent donc à développer des modélisations afin d'alléger ces coûts de calcul. Les calculs DNS servent également à vérifier ces modèles. La haute précision des schémas numériques employés dans ce travail est combinée à la description la plus détaillée des termes de transport moléculaire et des processus chimiques.

Ce manuscrit est décomposé en cinq chapitres. Le premier chapitre regroupe la présentation générale des différents phénomènes étudiés dans cette thèse avec notamment une description des jets compressibles analysés, une courte introduction au mélange scalaire ainsi qu'une présentation de la combustion de l'hydrogène dans l'air ou l'oxygène. Le deuxième chapitre est dédié à la description du code de calcul CREAMS. Il comprend la description des équations résolues et des algorithmes implémentés dans ce solveur. Il intègre également une section portant sur la vérification de cet outil numérique. Le chapitre trois est consacré à l'étude d'un jet fortement sous détendu d'air dans une atmosphère au repos. Le chapitre 5 concerne un jet tridimensionnelle d'hydrogène pur dans une atmosphère au repos et enfin le chapitre 6 les jets fortement sous détendus réactifs. Ce manuscrit se clôt par une conclusion générale de ces travaux ainsi que quelques perspectives pour de futures études.

Chapitre 2

Phénoménologie

2.1 Introduction

Ce premier chapitre présente de manière générale les principaux phénomènes physiques mis en jeu dans notre étude. Dans un premier temps, nous allons reprendre la description des jets compressibles avec une distinction des singularités propres à ce type d'écoulement. Ensuite, nous élaborerons une introduction au mélange de scalaires passifs. Finalement, nous exposerons quelques notions concernant l'allumage et la combustion dans les écoulements à grande vitesse.

2.2 Jets compressibles

2.2.1 Écoulement compressible

Le terme d'écoulement compressible sous entend un écoulement dans lequel des variations de densité peuvent se produire. Ces variations de densité résultent principalement d'inhomogénéités de la pression¹. Le taux de variation de la densité est un paramètre important dans l'étude des écoulements compressibles. Il est intimement lié à la vitesse de propagation d'une petite perturbation de pression, i.e. à la vitesse du son. Le "niveau" de compressibilité d'un écoulement est généralement quantifié à l'aide du nombre de Mach Ma . Celui-ci est défini comme le rapport entre la vitesse u et la célérité du son a

$$Ma = \frac{u}{a} \quad (2.1)$$

1. Rappelons qu'elles peuvent aussi être le fruit du mélange d'espèces de masses volumiques différentes ou bien de variations de température (ou les deux)

avec

$$a^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \quad (2.2)$$

et pour les gaz parfaits $a^2 = \gamma \frac{P}{\rho} = \gamma r T$. Le nombre de Mach doit être estimé avec la température locale de l'écoulement. Il varie évidemment en tout point de l'écoulement. Lorsque $Ma < 1$, l'écoulement reste subsonique, lorsque $Ma > 1$ l'écoulement devient supersonique, enfin l'écoulement est sonique lorsque $Ma = 1$. Un écoulement est incompressible lorsque le milieu est incompressible ou lorsque la vitesse est faible comparée à la vitesse locale du son. La limite des écoulements incompressibles se situe aux alentours de $Ma = 0.3$. Dans ces écoulements, les perturbations de pression se propagent uniformément dans toutes les directions. Lorsque la vitesse de l'écoulement est subsonique, les pulsations de pression se font sentir dans toutes les directions et tous les points de l'espace. Pour des vitesses supersoniques, la propagation des perturbations est complètement différente du cas subsonique. Celles-ci sont contenues dans un cône dont la source ponctuelle est le sommet. L'effet de la perturbation n'est pas ressenti en amont de la source de la perturbation. Ce cône est appelé "cône de Mach". Le demi angle α de celui-ci est relié au nombre de Mach par

$$\sin \alpha = \frac{1}{Ma} \quad (2.3)$$

2.2.2 Choc et détente

Formation des ondes de choc

Pour un écoulement supersonique, la structure de l'écoulement peut être totalement modifiée par l'apparition de zone de compression et de détente. En effet, pour des écoulements compressibles à grande vitesse, il existe des singularités où les caractéristiques de l'écoulement varient fortement et très rapidement afin de s'adapter aux contraintes. Ce sont les ondes de choc. Un choc est une zone très mince (de l'ordre de quelques libres parcours moyen moléculaire) de l'écoulement à travers laquelle les grandeurs physiques varient très rapidement. Cette onde de choc peut être normale à la direction de l'écoulement, on parle de choc droit, ou bien inclinée par rapport à la direction de l'écoulement, on parle alors de choc oblique. On introduit leur mode de formation en considérant une accumulation et une fusion (ou coalescence) d'ondes de compression infinitésimales. Ce comportement est exclusivement lié à la nature compressible des écoulements de fluide gazeux. Une perturbation ponctuelle d'une variable physique va se propager à la vitesse locale du son propageant ainsi un saut infinitésimal de toutes les variables physiques. En particulier, le passage d'une telle onde de compression va légèrement augmenter la température et donc la vitesse du son dans le milieu. Si la source de la perturbation est continue, chaque nouvelle onde de perturbation va se déplacer plus rapidement et "rat-

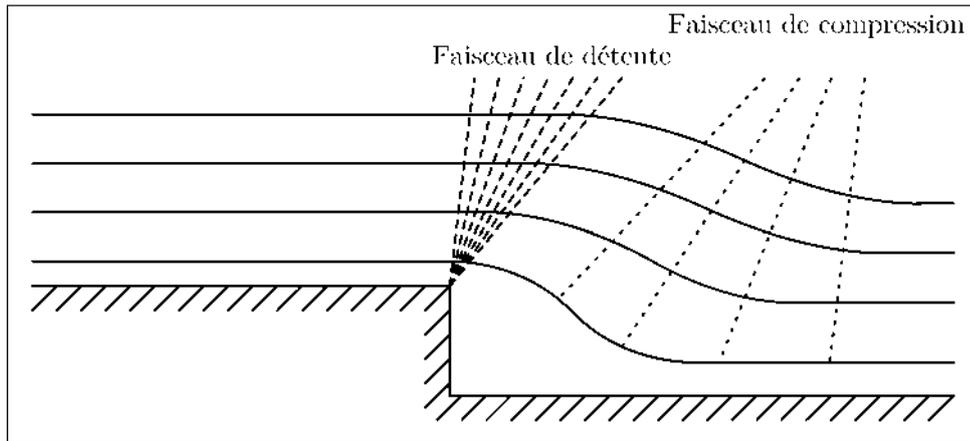


FIGURE 2.1 – Schéma de la formation de faisceaux de détente et de compression.

traper” l’onde précédente et coalescer en une onde dont la vitesse dépend du nouveau saut des grandeurs induit entre l’amont et l’aval du front de perturbation. Si la source de perturbation est suffisamment intense, l’onde de choc peut se former instantanément. Un bilan local de masse, de quantité de mouvement et d’énergie permet de déterminer les conditions de saut de Rankine-Hugoniot reliant le saut de chaque variable au nombre de Mach amont de l’écoulement ainsi que le nombre de Mach aval.

Faisceaux de détente et de compression

Dans un écoulement compressible où la vitesse n’est pas uniforme, les ondes de Mach produites vont soit diverger, accélérant et détendant l’écoulement, soit converger, comprimant et ralentissant l’écoulement (cf. figure 2.1). L’écoulement supersonique au niveau d’une marche descendante permet de visualiser et comprendre la formation de faisceau de détente et de compression. La singularité que représente l’élargissement brusque dû à la marche est à l’origine du faisceau de détente. La section de passage des lignes fluides augmente. L’écoulement supersonique accélère alors et la pression chute. La paroi inférieure de la marche modifie la courbure des lignes de courant induisant une convergence progressive des ondes de Mach. Il s’agit dès lors d’un faisceau d’ondes de compression.

2.2.3 Jets compressibles

Un jet est un écoulement issu d’un espace confiné jaillissant dans un espace ouvert. Dans un jet compressible (sonique ou supersonique), le fluide est soumis à trois phénomènes différents. Tout d’abord, la différence de pression avec le milieu extérieur modifie la vitesse et la trajectoire des particules fluides. Ensuite, le fluide est soumis à une inertie importante (proportionnelle à la vitesse au carré). Finalement, la viscosité du fluide amortit l’ensemble de ces phénomènes et tend à équilibrer le jet avec le milieu ambiant.

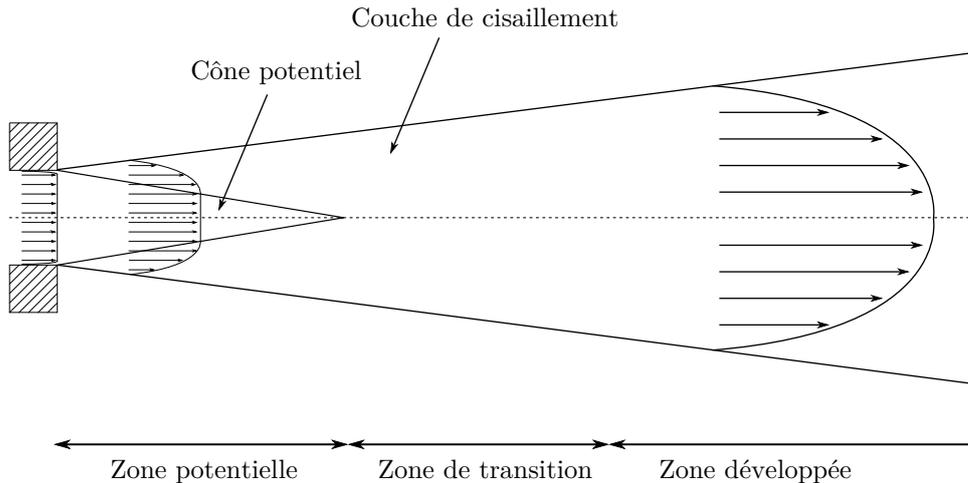


FIGURE 2.2 – Schéma du jet libre.

L'interaction de ces trois phénomènes régit la structure du jet. Schématiquement, la structure du jet supersonique axisymétrique se décompose en trois zones distinctes (suivant l'axe du jet) (voir figure 2.2)

- Le coeur potentiel qui débute à la section d'éjection (la section de sortie de la buse) et qui est le siège des phénomènes de détente et de re-compression (au travers d'ondes de choc). L'écoulement dans cette zone est isolé du milieu ambiant et les effets de viscosité y restent négligeables. En périphérie du coeur du jet se développe la couche de mélange. Elle est le siège d'un fort cisaillement entre le fluide injecté, qui s'écoule à haute vitesse et le milieu ambiant qui est au repos.
- La région de transition où la couche de cisaillement atteint l'axe du jet. L'augmentation du mélange entre le fluide injecté et le milieu ambiant tend à homogénéiser l'écoulement.
- La zone lointaine où le jet est globalement subsonique et la pression sensiblement identique à la pression du milieu ambiant.

La différence de pression à la sortie d'un jet compressible est un paramètre important influençant la structure du jet. Lorsque la pression à la sortie du jet est supérieure à la pression dans le milieu ambiant, le jet est dit "sous-détendu". Inversement lorsque la pression à la sortie est inférieure à la pression ambiante, le jet est dit "sur-détendu". Les différents jets étudiés dans ce travail correspondent à des jets sous-détendus.

2.2.4 Jets compressibles sous-détendus

Comme mentionné précédemment, la pression statique à l'ajutage d'un jet sous-détendu est supérieure à la pression statique du milieu ambiant dans lequel il se décharge. Le rapport entre la pression statique du fluide dans la section de sortie du jet et la pression

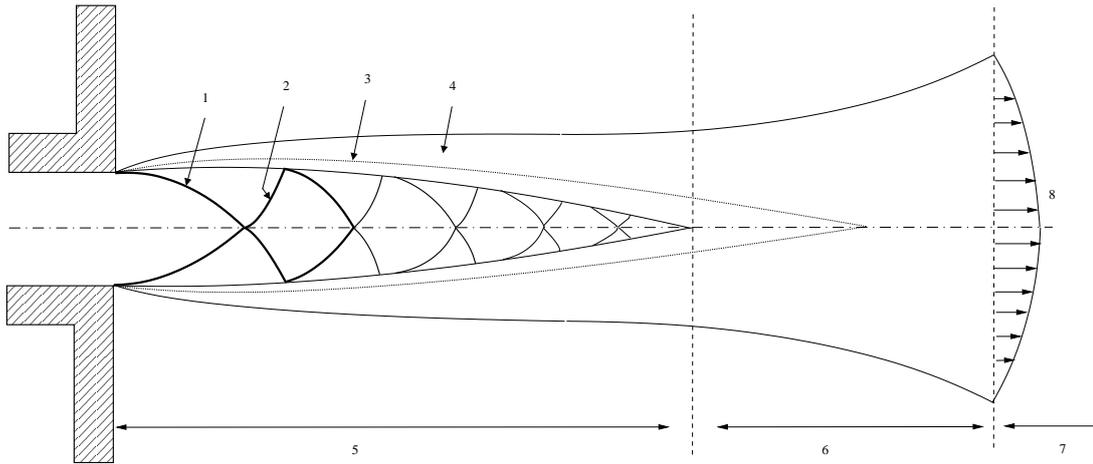


FIGURE 2.3 – Schéma du jet faiblement sous-détendu ($1.1 > NPR > 2.1$). **1** : Choc incident “en tonneau”, **2** : Choc réfléchi, **3** : Ligne isobare de la couche de cisaillement, **4** : Couche de cisaillement du jet, **5** : Zone potentielle, **6** : Zone de transition, **7** : Zone développée, **8** : Profil de similitude des champs de vitesse et de température (d’après Lehnasch [2])

statique du milieu dans lequel le fluide est injecté, noté NPR (Nozzle Pressure Ratio) est le paramètre primordial qui va déterminer la structure du jet. Nous allons passer ici en revue les différentes structures de jet pilotées par ce paramètre. Nous nous focalisons ici sur les valeurs de $NPR > 1$ qui correspondent aux cas des jets sous-détendus. De plus, nous concentrons notre description aux cas de jets soniques de fluide parfait.

Pour un rapport de pression compris entre 1,1 et 2,1 se développe un jet faiblement sous-détendu (cf. figure 2.3). La différence de pression à l’ajutage fait diverger les lignes de courant du jet ce qui induit l’apparition de faisceaux divergents d’ondes de détente. Ce faisceau d’ondes se réfléchit sur l’enveloppe isobare du jet (**3**) en faisceaux convergents d’ondes de compression. De la focalisation de ces ondes de compression résulte le choc incident (**1**) qui converge vers l’axe. C’est au niveau de l’axe que ce choc se réfléchit en un choc (**4** qui diverge jusqu’à la frontière du jet. Ce choc va à nouveau se réfléchir sur l’enveloppe isobare en un nouveau faisceau de détente convergent vers l’axe. Le rapport de pression n’étant pas très élevé, les faisceaux de détente restent relativement peu étendus. Ainsi, ils ne défléchissent l’enveloppe isobare que sur une courte distance. Les chocs apparaissent quasi-rectilignes. Ce schéma se répète faisant apparaître plusieurs cellules de choc. Le nombre de cellules de choc visible va dépendre du NPR mais également de la section d’entrée. La structure globale prend alors une forme dite “en diamants” typique des jets en sortie de tuyère. Dans ce cas, les réflexions de choc sont régulières. L’écoulement est successivement détendu et accéléré puis comprimé et ralenti, mais reste toujours supersonique (toutes les ondes de chocs traversées par l’écoulement sont obliques). Ce cas est assez simple et n’est essentiellement conditionné que par l’évolution de la couche

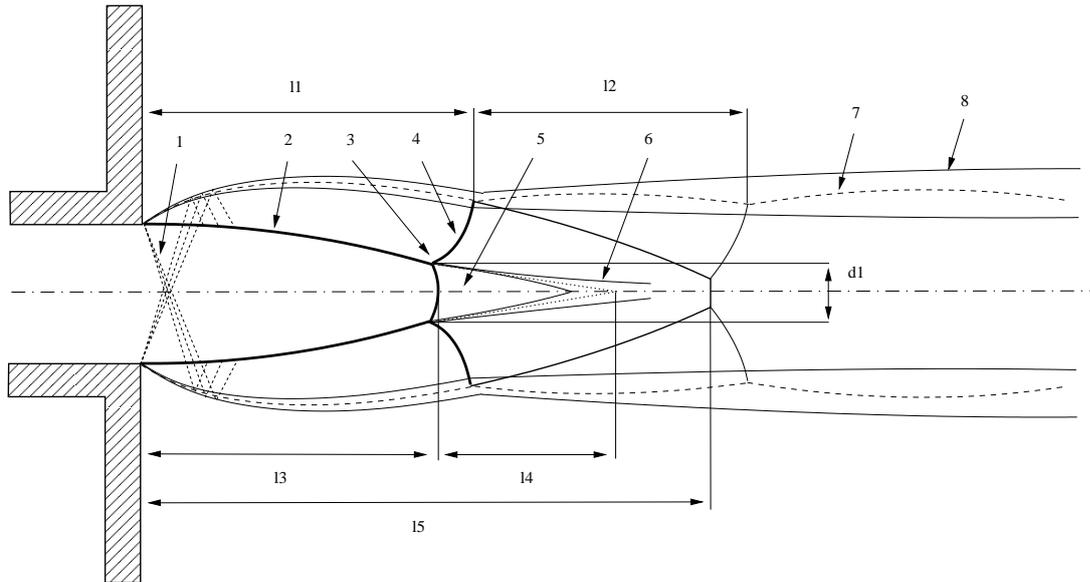


FIGURE 2.4 – Schéma du jet modérément sous détendu ($2.1 > NPR > 7$). **1** : Faisceau de détente, **2** : Choc incident “en tonneau”, **3** : Point triple, **4** : Choc réfléchi, **5** : Poche subsonique, **6** : Couche de mélange induite par le disque de Mach, **7** : Ligne isobare de la couche de cisaillement, **8** : Couche de cisaillement du jet, **11** : Longueur de la première cellule de choc, **12** : Longueur de la seconde cellule de choc, **13** : Distance entre l’ajutage et le disque de Mach, **14** : Longueur de la poche subsonique (d’après Lehnasch [2]).

de cisaillement externe qui, en se développant, va progressivement diffuser la quantité de mouvement du jet et dissiper les gradients de pression. Suivant l’évolution globale de la position de l’enveloppe isobare, le jet se comprime et se dilate radialement, perdant l’aspect classique qu’il aurait s’il était parfaitement détendu. L’enveloppe du jet apparaît alors ondulée dans la direction longitudinale. Pour un NPR compris entre 2,1 et 7, le régime du jet devient modérément sous détendu (cf. figure 2.4). La différence la plus notable est l’apparition d’un disque de Mach. Effectivement, la première réflexion de choc sur l’axe n’est plus régulière. Légèrement en amont du point de réflexion du choc sur l’axe que l’on observerait pour un jet faiblement sous détendu apparaît un choc droit. Il s’agit d’un “disque” ou “cône” de Mach. Les chocs suspendu (**2**) et réfléchi (**4**) se rattachent à ce disque au niveau du point triple (**3**). L’écoulement en aval du disque de Mach est subsonique (**5**) tandis que l’écoulement en aval du choc réfléchi (**4**) reste supersonique. Une couche de cisaillement (**6**) prend alors naissance à partir du point triple. Au point d’impact du choc réfléchi avec la frontière du jet naît un nouveau faisceau de détente. Celui-ci va infléchir la couche de cisaillement interne ce qui va restreindre la section de passage de l’écoulement subsonique. Cet effet “tuyère” va réaccélérer le fluide jusqu’à la vitesse sonique. La croissance de la couche de cisaillement finit d’homogénéiser la vitesse des deux écoulements concentriques. La longueur de cette zone subsonique est essentiellement liée à la taille du disque de Mach. Pour des valeurs du rapport de pression inférieurs

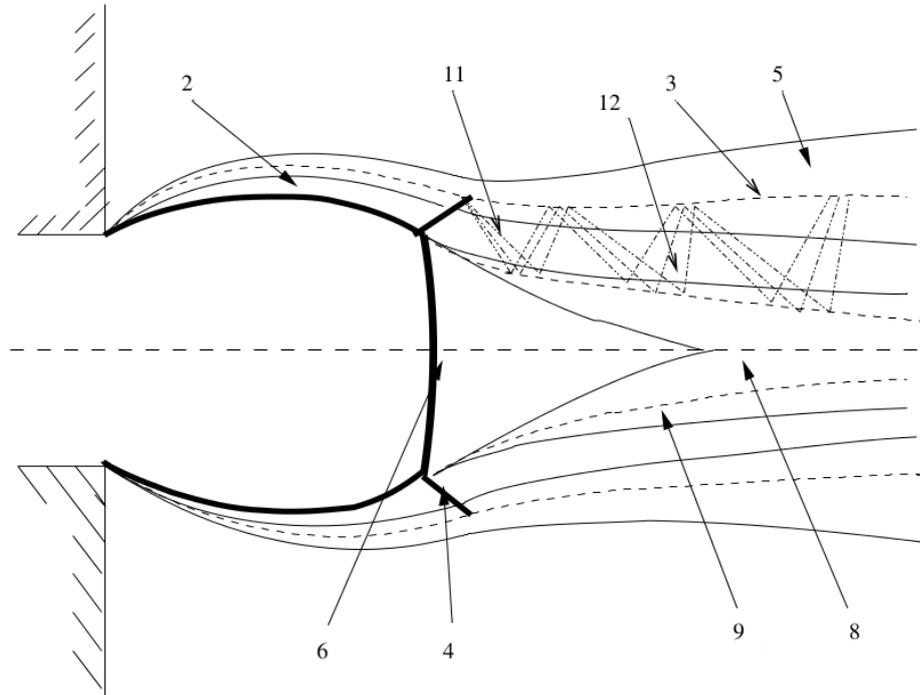


FIGURE 2.5 – Schéma de la structure du jet fortement sous détendu ($7 > NPR > 10$). **2** : Choc incident “en tonneau”, **3** : Ligne isobare de la couche de cisaillement, **4** : Choc réfléchi, **5** : Couche de cisaillement du jet, **6** : Disque de Mach, **8** : Couche de mélange du disque de Mach, **11** : Zone de détente supersonique, **12** : Zone de compression supersonique (d’après Lehnasch[2])

à 4,5, le jet possède encore deux cellules de choc. Au delà d’un NPR de 4,5, Dam et al. [11] observent que la zone subsonique (**5**) s’étend jusqu’à la seconde cellule. Les chocs ne subsistent plus que dans l’enveloppe externe supersonique et le deuxième disque de Mach disparaît. Une augmentation du NPR induit un étirement du diamètre du disque de Mach ainsi qu’un allongement et un élargissement radial de la zone subsonique. L’extension de la zone supersonique où résident les chocs obliques est ainsi rétrécie. La zone subsonique va s’allonger jusqu’à effacer complètement la seconde structure de choc. Pour des NPR supérieur à 7, le jet est fortement sous détendu et sa structure va encore évoluer. Ainsi, pour $NPR = 7$, Dam et al. [11] observent la disparition complète de la seconde cellule. Le choc incident est fortement courbé, on parle alors de “bouteille de Mach”. Nous pouvons néanmoins distinguer encore deux cas (les jets fortement sous détendu et très fortement sous détendu). Le premier pour lequel le disque de Mach bien que très large reste au sein de la zone dite potentielle (cf. figure 2.5). Dans ce cas, la zone subsonique devient suffisamment longue pour que la couche de cisaillement du disque de Mach interagisse en aval avec la couche de cisaillement externe, qui se développe entre le jet et l’ambient. Au delà de la première cellule, l’écoulement s’apparente alors à l’écoulement de deux jets annulaires concentriques à masse volumique fortement variable, l’un subsonique, l’autre

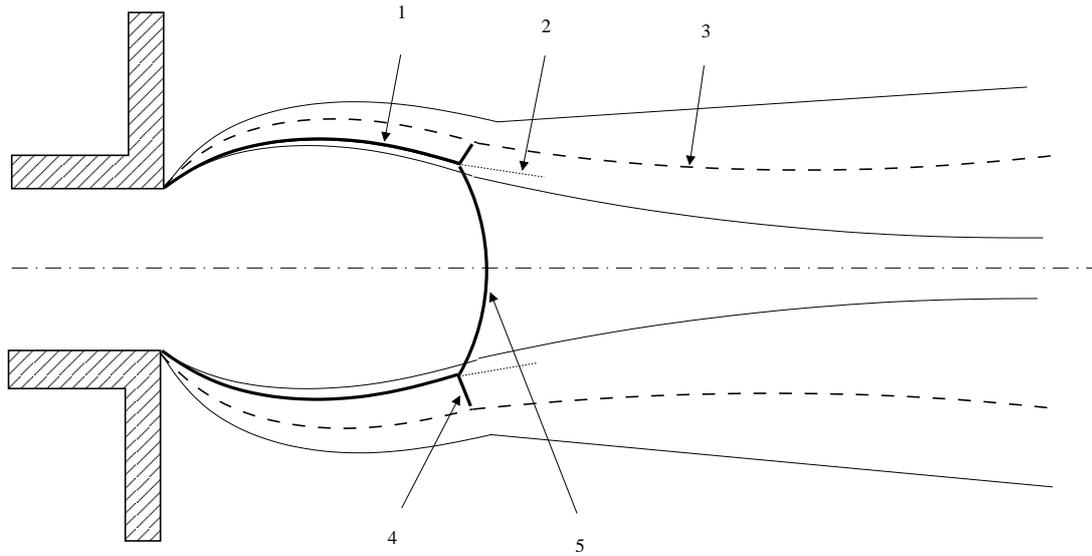


FIGURE 2.6 – Schéma de la structure du jet très fortement sous détendu ($NPR > 10$). **1** : Choc incident “en tonneau”, **2** : Couche de mélange, **3** : Ligne isobare de la couche de cisaillement, **4** : Choc réfléchi, **5** : Disque de Mach (d’après Lehnasch [2])

supersonique. L’écoulement en aval du choc réfléchi traverse alors un train de faisceaux d’ondes de Mach, et subit successivement des détentes et des compressions. Pour des NPR encore plus élevés ($NPR > 10$), le disque de Mach interagit directement avec la couche de cisaillement, déstabilisant complètement le jet en aval (voir figure 2.6). Aucune structure de choc stationnaire ne devient alors a priori identifiable au delà du disque de Mach. Le choc incident et le disque de Mach deviennent très courbés et la zone subsonique s’allonge en aval du disque de Mach. La problématique dans cette zone proche en aval du disque de Mach est alors celle d’une couche de mélange supersonique à masse volumique fortement variable comprise entre une couche externe au repos et un noyau subsonique interne fortement comprimé. Cette couche de cisaillement est soumise à une chute de pression totale différente à travers le choc droit et le choc oblique, ce qui semble induire un mélange accru et une forte déflexion de la zone interne de la couche vers l’axe. Cette configuration de jet très fortement sous-détendu correspond typiquement à celle que l’on devrait obtenir dans le cas particulier de percement d’une chambre de combustion ou de réservoirs à haute pression. Nous allons désormais examiner plus en détail ses caractéristiques.

2.2.5 Jets compressibles fortement sous-détendus

Nous nous plaçons donc dans la catégorie des jets fortement sous-détendus ($NPR > 10$). Nous avons vu que pour ces conditions, il ne subsiste plus qu’une seule cellule de choc délimitée en aval par un disque de Mach. Nous allons à présent étudier cette structure compressible et en définir les dimensions.

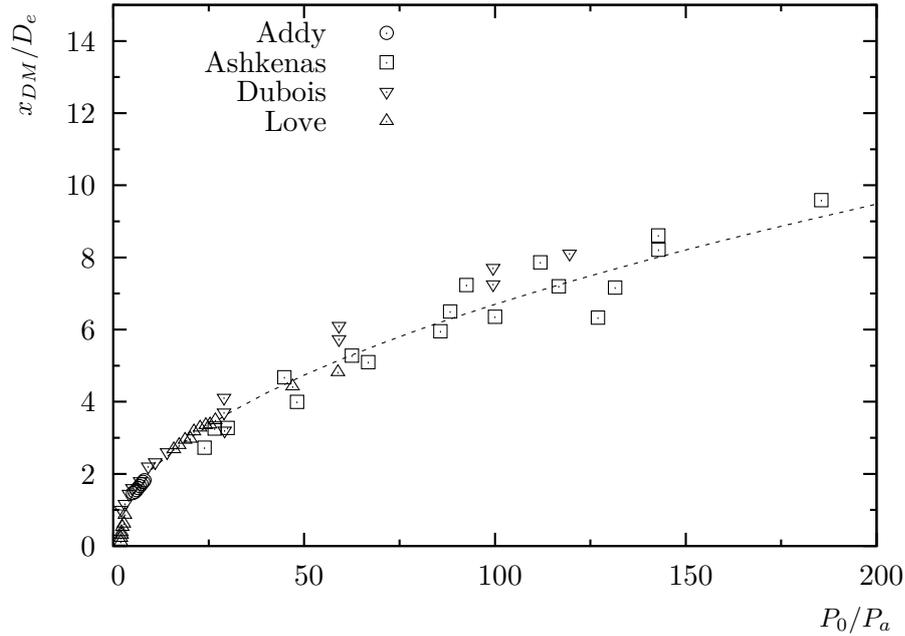


FIGURE 2.7 – Évolution de la position du disque de Mach en fonction de la pression totale (données de Addy [3] (\odot), Ashkenas [4] (\square), Dubois [5] (∇) et Love [6] (\triangle)). La courbe en pointillés correspond à la corrélation de Ashkenas et Sherman [4].

Evolution de la structure de choc en fonction du rapport des pressions statiques ou NPR

Position du disque de Mach Dans un premier temps, nous allons analyser la position du disque de Mach dans l'écoulement. Celui-ci est fortement courbé pour les grandes valeurs du rapport de pression. Nous définissons donc la position x_{DM} comme la distance entre l'injection et la position du choc sur l'axe du jet. Dans les années 1960, Ashkenas et Sherman [4] ont proposé une corrélation pour évaluer cette distance dans le cas de jet sonique axisymétrique en fonction du rapport entre la pression totale à l'injection et la pression ambiante :

$$\frac{x_{DM}}{D_e} = 0.67 \times \sqrt{\frac{P_0}{P_a}} \quad (2.4)$$

avec P_0 la pression totale à la sortie du jet, P_a la pression ambiante et D_e le diamètre d'injection. Cette corrélation est valable pour des rapports de pression allant jusqu'à 3.10^5 . La figure 2.7 montre la distance x_{DM}/D_e déterminée à l'aide de la corrélation de Ashkenas et Sherman [4] ainsi que plusieurs bases de données expérimentales [3, 4, 5, 6]. La corrélation donne une bonne estimation de la distance x_{DM} même pour les très grands rapports de pression.

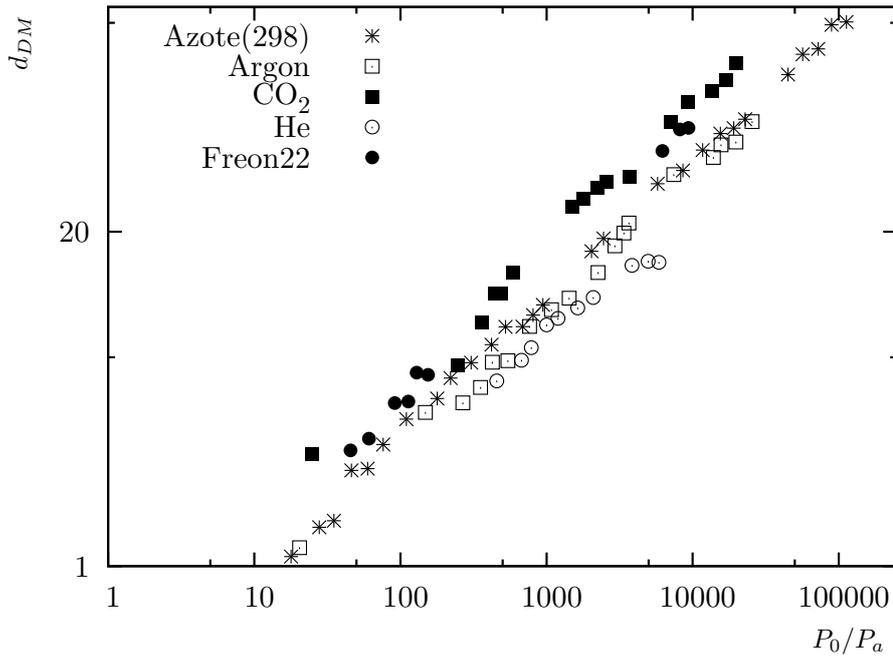


FIGURE 2.8 – Évolution du diamètre du disque de Mach en fonction de la pression totale (données de Crist et al. [7]).

Diamètre du disque de Mach Nous allons maintenant considérer le diamètre du disque de Mach. Dans le cas du jet sonique, le disque de Mach garde une allure de choc droit jusqu'à $NPR = 10$ environ. Lorsque le NPR augmente au delà de cette valeur, le disque de Mach se courbe, sa concavité étant orientée vers l'ajutage. La position du premier disque de Mach ne dépend essentiellement que du rapport des pressions statiques. En revanche, lorsque le rapport des chaleurs spécifiques diminue (entre 1,4 pour l'air dans les conditions standards et 1,25 par exemple pour des gaz brûlés à haute température), le faisceau de détente (Prandtl-Meyer) s'élargit. Il en résulte un accroissement de l'angle initial de la frontière du jet par rapport à l'axe, accompagné d'une augmentation de l'angle d'incidence du choc en tonneau avant réflexion, et donc du diamètre du disque de Mach (cf. figure 2.8). L'étude de Antsupov [12] permet d'estimer les principales caractéristiques des jets supersoniques jusqu'à $NPR = 30$. Il propose d'estimer le diamètre du disque de Mach par le biais de la corrélation suivante (vérifiée expérimentalement par visualisation Schlieren pour $NPR < 40$)

$$\frac{D_{DM}}{D_e} = \log \left(\left(\frac{P_e}{P_a} \right)^{5/2} \right) - \frac{3}{4} \quad (2.5)$$

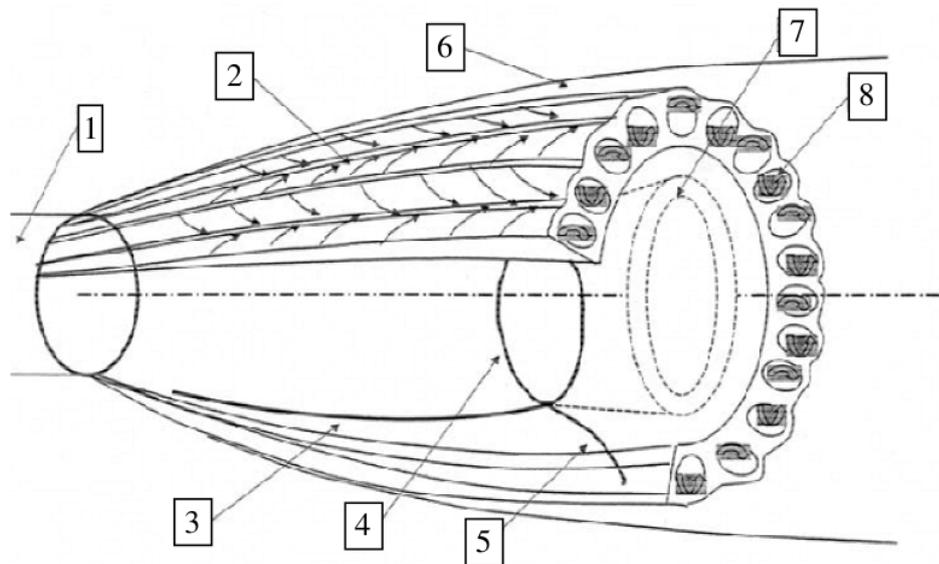


FIGURE 2.9 – Schéma de la structure proche d'un jet fortement sous-détendu. **1** : Buse d'injection, **2** : Choc incident "en tonneau", **3** : Disque de Mach, **4** : Choc réfléchi, **5** : Couche de cisaillement, **6** : Couche tourbillonnaire de structures longitudinales, **7** : Couche de mélange du disque de Mach, **8** : Tourbillon longitudinal de type Taylor-Görtler (d'après Lehnasch[2])

2.2.6 Caractéristiques instationnaires des jets fortement sous-détendus

Instationnarité de la couche de cisaillement

Les jets fortement sous-détendus présentent plusieurs zones de fort cisaillement notamment la périphérie du jet et les couches cisillées annulaires émanant du point triple. Toutes ces zones peuvent être le siège de développement d'instabilités. Les couches cisillées issues du point triple vont voir se développer des instabilités de type Kelvin-Helmholtz, structures tourbillonnaires dont la taille croît, par entraînement de l'air ambiant, lorsqu'elles sont convectées vers l'aval. Sur la périphérie du jet, les lignes de courant de l'écoulement sont fortement courbées. Cette courbure est due au phénomène de détente se produisant en sortie de buse d'injection. Ainsi, des effets de force centrifuge peuvent s'exercer sur la couche cisillée soumise à de forts gradients de vitesse et des instabilités peuvent naître sur cette surface. Il s'agit d'un type d'instabilités typiquement lié au cas du jet fortement sous-détendu : l'instabilité de Taylor-Görtler. Ces instabilités donnent naissance à des tourbillons longitudinaux qui sont plus couramment observés au sein de couches limites se développant sur parois courbes.

Description des tourbillons L’observation d’une structure stationnaire de tourbillons longitudinaux remonte à la fin des années 1970 [13]. Ces structures prennent naissance au sein de la couche de cisaillement entre le choc “en tonneau” et la frontière du jet. Elles se développent et se maintiennent dans la zone proche du jet fortement sous-détendu. D’après l’étude de Arnette et al. [14], des variations azimuthales de la pression statique peuvent être enregistrées pour un jet sonique et un NPR de 4, 1. Ces variations peuvent atteindre de forte amplitude en aval du disque de Mach. Buzyna et al. [13] ont effectué des coupes planes transversales à l’axe du jet à différentes distances de la buse par diffusion Rayleigh d’eau condensée. Ils illustrent ainsi le mécanisme de développement de ces structures dites en pétales qui prennent naissance au niveau de la buse. Ces instabilités vont croître et s’élargir atteignant leur taille maximale légèrement en aval du disque de Mach. Celles-ci vont ensuite fusionner et perdre leur caractère stationnaire en moyenne puis disparaître. Le nombre de structures semble globalement augmenter avec le niveau de détente mais les tourbillons longitudinaux se présentent toujours par paires de tourbillons contrarotatifs. En vérifiant que cette structure n’apparaît que dans le cas des jets fortement sous-détendus, Arnette et al. [14] associe cependant fortement l’apparition de cette structure à l’instabilité de Taylor-Görtler. Numériquement, plusieurs études montrent l’apparition de ces structures sur la périphérie du jet. C’est le cas notamment pour l’étude de Dauplain et al. [15] qui met en évidence l’apparition de sillons le long de la périphérie du jet.

Origine des tourbillons L’origine de ces tourbillons est ainsi dans un premier temps entièrement attribuée à la naissance et à l’amplification d’instabilités de type Taylor-Görtler [16]. Zapryagaev et Bobrikov [17] étudient d’ailleurs spécifiquement l’évolution longitudinale des taux de croissance des perturbations dans la couche de cisaillement d’un jet sonique sous-détendu ($NPR = 2,65$). Des spectres d’amplitude de pression sont déduits les taux de croissance entre chaque section transversale. Ils observent naturellement que le domaine d’instabilité se réduit à mesure que l’on s’éloigne vers l’aval, vérifiant directement le lien entre la disparition des structures tourbillonnaires longitudinales et la diminution de courbure de la couche de cisaillement. Cette étude ne permet cependant pas de conclure quant à la véritable origine des tourbillons. Novopashin et Perepelkin [18] repèrent la position des tourbillons dans leur jet sonique en identifiant une structure en “pétale”. Ils étudient l’impact de la rugosité de la buse d’injection sur le développement de ces instabilités. Ils associent le développement de ces instabilités à la présence d’une rugosité limite de leur buse d’injection. Ainsi, ils n’observent pas la structure particulière lorsque la rugosité est inférieure à $5\mu\text{m}$. Ils en concluent donc qu’une certaine rugosité de la buse est nécessaire à l’apparition des tourbillons. Par ailleurs, Buzyna et al. [13] observent cette structure tourbillonnaire pour des jets faiblement sous-détendus ($NPR = 5.1$), dé-

montrant ainsi que la forte courbure des lignes de courant n'est pas le seul ingrédient nécessaire au développement de ces structures longitudinales. King et al. [19] réussissent d'ailleurs à exciter ces tourbillons longitudinaux même pour des cas de détente idéale. Face à l'imprécision quant à l'origine de ces tourbillons, Krothapalli et al. [20] mènent finalement une étude plus complète sur le lien entre la structure et l'état de surface à l'intérieur de la buse. Ils constatent notamment par mesures micrométriques, que le pic d'ondulation de pression qu'ils observent dans un premier temps dans leur jet, correspond à un défaut d'usinage de la surface de leur buse convergente. En retravaillant l'état de surface, ils parviennent à faire disparaître globalement l'ensemble des tourbillons, même avec un jet fortement sous-détendu. Au contraire, en ajoutant de petits apex au niveau de la sortie d'une tuyère divergente adaptée ($Ma = 1,8$), ils parviennent à enregistrer une augmentation des ondulations de pression. Constatant que les plus gros tourbillons sont générés par des apex triangulaires et que des obstacles de forme rectangulaire n'induisent que très peu de mélange supplémentaire par rapport au cas sans obstacle, ils relient la présence des tourbillons longitudinaux à une génération initiale de vorticit  longitudinale au sein de la couche limite de la tuy re. Ainsi, l'instabilit  de Taylor-G rtler ne ferait qu'amplifier spatialement la vorticit  g n r e au sein de la couche limite. D'autres facteurs resteraient    tudier pour caract riser plus pr cis ment ces tourbillons, tels que le rapport des masses volumiques, la vitesse du jet ou encore du nombre de Mach convectif. On retiendra le r sultat de Krothapalli et al. [4] suivant : la rugosit  est susceptible de d clencher la naissance d'un tourbillon longitudinal si la hauteur relative de rugosit  sur le diam tre de la section de l'ajutage est sup rieure   environ $2/1000$ pour une buse convergente de diam tre de sortie de 22,6 mm (Novopashin et Perepelkin avaient trouv  0,0013 mais pour des buses plus petites de 0,5   4 mm). C'est donc en estimant l' paisseur de la couche limite et la rugosit  que l'on devrait *a priori* pouvoir pr dire l'apparition de tourbillons longitudinaux. Un d faut de surface  gal   un douzi me de l' paisseur de d placement de la couche limite semble suffisant pour d clencher l'apparition d'un tourbillon dans le jet.

Le d veloppement de telles structures est possible que lorsque le nombre de G rtler G d passe une certaine valeur [21] ($G = (U\theta/\nu)(\theta/R)^{1/2}$ avec U l' chelle de vitesse, θ l' paisseur de la couche limite   l'ajutage, R le rayon de courbure de la fronti re du jet et ν la viscosit  cin matique). En ce qui concerne les simulations num riques de jets sous-d tendus, Dauplain et al. [15] observent ces instabilit s le long de la p riph rie du jet dans leur calcul LES. De petites instabilit s prennent naissance aux bords de la buse d'injection. Ces perturbations sont amplifi es par l'instabilit  de Taylor-G rtler d clench e par la courbure du jet. L'apparition des perturbations initiales est engendr e par des singularit s g om triques. Concernant la simulation num rique de Dauplain, celles-ci peuvent provenir sans doute de singularit  dans le maillage. En effet, un maillage non-structur    base de

tétraèdres est utilisé pour ce calcul. Vuorinen et al. [22] ont effectué des simulations de jet sous détendu à l'aide de maillage non structuré à maille hexaédrale. Dans leur calcul, la turbulence se développe naturellement en aval du disque de Mach et ils n'observent pas d'instabilité le long de la périphérie du jet. Ils expliquent l'absence de structure instationnaire par l'absence de perturbation en sortie de buse. Ainsi, le développement de ces tourbillons dépendrait du niveau de turbulence en entrée.

2.3 Phénoménologie du mélange scalaire passif

2.3.1 Mélange scalaire

Scalaire passif

Nous notons ξ un scalaire passif. Celui-ci peut désigner indifféremment la concentration d'une espèce chimique inerte ou bien la température (à conditions que les variations correspondantes restent assez faibles). Ces différentes quantités ont un comportement similaire dans un fluide. Elles sont transportées par le fluide en mouvement et elles se diffusent à l'intérieur de celui-ci. L'étude du comportement de ces quantités se ramène donc à celle d'un champ scalaire ξ régi par l'équation de transport

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \quad (2.6)$$

où ρ représente la masse volumique, u_i la composante dans la direction i du champ de vitesse, ξ le scalaire passif et D la diffusivité moléculaire de ce scalaire ξ supposée constante. Si on se place dans un repère lié à une particule fluide, la variation de ξ associée à cette particule ne dépend plus que du Laplacien $\Delta\xi$. Si ce point représente un maximum local du champ scalaire (respectivement un minimum), le Laplacien est négatif (respectivement positif) et la valeur du champ scalaire ne peut que décroître (respectivement croître). Ainsi, une majoration du champ scalaire par ξ_{max} (respectivement une minoration par ξ_{min}) à un instant donné reste valable à tout instant. Dans quasiment toutes les situations physiques, le scalaire est donc borné par les conditions initiales. Ainsi, ces bornes restent valables à tout instant. De plus, le champ ξ peut être multiplié par une constante ou bien une constante peut lui être ajoutée sans modifier l'équation d'évolution. Ainsi, l'étude de tout scalaire borné peut se ramener à celle d'un champs scalaire dans un intervalle de travail arbitraire.

Écoulement turbulent

Le scalaire est dit passif si sa présence n'influence pas l'écoulement. Dans cette étude, nous nous plaçons dans le cas d'un fluide compressible de masse volumique ρ . Le mouvement du fluide est décrit par son champ de vitesse. Les équations qui gouvernent le comportement du fluide sont les équations de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t + p) u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \rho Y_\alpha V_{\alpha j}}{\partial x_j} + \rho \omega_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (2.10)$$

Nous reviendrons sur ces équations dans le chapitre 3 où elles seront présentées plus en détails. A grand nombre de Reynolds, le fluide présente un comportement turbulent. Dans le cas particulier d'une turbulence homogène et isotrope (THI), la turbulence a un comportement universel : les plus grosses structures sont fragmentées sous les effets d'inertie en structures plus petites, qui sont à leur tour divisées sans perte d'énergie notable. Les plus petites structures de l'écoulement sont ensuite dissipées par la viscosité [23]. L'énergie cinétique du fluide est donc dissipée aux petites échelles. L'échelle en dessous de laquelle on ne trouve plus de fluctuation de vitesse s'appelle l'échelle de Kolmogorov. Elle signe l'arrêt par la viscosité de la cascade turbulente des plus grandes vers les plus petites échelles. Cette échelle est donnée par la relation suivante :

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.11)$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide considéré et ϵ est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

Homogénéisation du scalaire

Moyenne du scalaire Le champ du scalaire peut être décomposé en une partie moyenne $\bar{\xi}$ et une fluctuation ξ' tel que $\xi = \bar{\xi} + \xi'$. C'est la décomposition de Reynolds. Dans les écoulements à masse volumique variable, un autre opérateur de moyenne est utilisé. Il s'agit de la moyenne de Favre qui revient à pondérer la moyenne de Reynolds par la masse volumique

$$\tilde{\xi} = \frac{\overline{\rho \xi}}{\bar{\rho}} \quad (2.12)$$

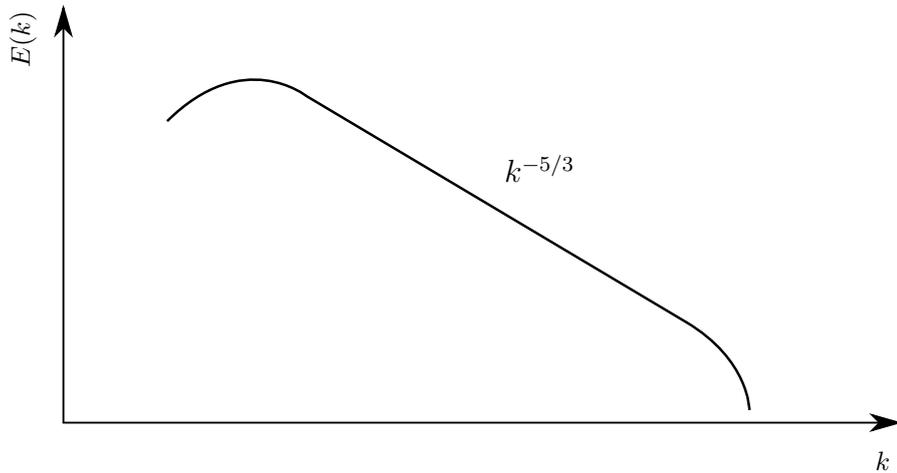


FIGURE 2.10 – Forme modèle du spectre d'énergie de la turbulence.

La décomposition devient $\xi = \tilde{\xi} + \xi''$. Nous définissons alors la moyenne du champ scalaire $\tilde{\xi}$ dans l'écoulement par

$$\bar{\rho}\tilde{\xi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \rho\xi dt \quad (2.13)$$

L'équation de transport de la valeur moyenne du scalaire ξ s'obtient simplement en moyennant l'équation de transport instantanée suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \quad (2.14)$$

Nous distinguons dans cette équation le terme d'accumulation, le terme de convection par le champ de vitesse et de diffusion. L'équation de transport de la valeur moyenne s'écrit alors

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \right) \quad (2.15)$$

Un terme de flux turbulent $\overline{\rho u_i'' \xi''}$ apparaît dans le membre de droite. Ce terme représente la convection du scalaire par les fluctuations du champ de vitesse.

Variance, énergie et dissipation du scalaire Nous étudions maintenant la variance du scalaire dans notre écoulement. La variance $\overline{\xi'^2}$ est une grandeur très importante puisqu'elle caractérise la dispersion des valeurs du scalaire autour de sa valeur moyenne. Son équation de transport exacte peut être obtenue à partir de l'équation de transport

instantanée du scalaire eq. (2.14) en effectuant la différence $\widetilde{\xi^2} - \xi^2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \xi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \xi''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \right) \\ &\quad - \overline{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - \overline{2\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} + \overline{2\xi'' \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \right)} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dans cette équation apparaissent un terme d'accumulation, un terme de convection dans le membre de gauche de l'équation et un terme de diffusion moléculaire dans le membre de droite. Les trois premiers termes du membre de droite représentent respectivement le transport moléculaire et turbulent, le terme de dissipation ainsi que le terme de production par le gradient moyen. On notera que la dernière contribution est souvent négligée. La production de variance reflète l'hétérogénéité du mélange local. En revanche, sa destruction caractérise l'action des processus moléculaires à travers la valeur moyenne du taux de dissipation scalaire (SDR) $N_\xi = D(\partial\xi/\partial x_k)(\partial\xi/\partial x_k)$ du scalaire passif, enfin plus exactement de sa principale contribution turbulente $\overline{\rho \widetilde{\epsilon}_\xi} = \overline{\rho D(\partial\xi''/\partial x_k)(\partial\xi''/\partial x_k)}$. Ce taux de dissipation détruit la variance tant qu'il ne s'annule pas, i.e. tant que le champ scalaire n'est pas uniforme. C'est ce processus d'homogénéisation du champ scalaire que représente le mélange.

Le mélange turbulent

Nous avons vu que le mélange était piloté par le taux de dissipation scalaire (SDR). Celui-ci est proportionnel au gradient du scalaire passif. Ainsi, le mélange est d'autant plus rapide qu'il existe des zones de fort gradient. Dans ces zones, la dissipation est forte et les flux scalaires dûs à la diffusion moléculaire sont importants. C'est toujours la diffusion qui permet le mélange (si on pose $D = 0$, la variance du scalaire reste constante).

L'influence du champ de vitesse sur le mélange est indirecte. Pour illustrer cette action, nous considérons la forme suivante de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire [24, 25, 26, 27] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{\epsilon}_\xi}}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \widetilde{u}_k \widetilde{\epsilon}_\xi})}_{II} &= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \epsilon_\xi}{\partial x_k}} \right)}_{III} - \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho u_k'' \epsilon_\xi}}{\partial x_k}}_{IV} - \underbrace{\overline{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}}}_{V} \\ &\quad - \underbrace{\overline{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}}}_{VI} - \underbrace{\overline{2\rho D u_k'' \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial^2 \widetilde{\xi}}{\partial x_k \partial x_i}}}_{VI-b} \\ &\quad - \underbrace{\overline{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i}}}_{VII} - \underbrace{\overline{2\rho D^2 \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k}}}_{VIII} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Le terme (IV) représente l'effet de la diffusion turbulente, le terme (V) la production par le gradient de la concentration moyenne, le terme (VI) la production par le gradient de la vitesse moyenne et le terme (VI-b) la courbure du champ de composition moyenne. Le terme (VII) correspond à l'effet d'étirement par la turbulence, le terme (VIII) représente la courbure locale. Pour les écoulements à grand nombre de Reynolds, les termes dominants sont (VII) et (VIII) (d'ordre $Re_t^{\frac{1}{2}}$) [26, 27]. Les termes (IV), (V) et (VI) sont d'ordre Re_t^0 tandis que le terme (VI-b) est lui d'ordre $Re_t^{-\frac{1}{2}}$. Le taux de dissipation scalaire $\tilde{\varepsilon}_\xi$ n'est pas une quantité conservée et pour comprendre comment elle se crée et disparaît, il faut considérer les deux termes source de l'équation précédente. Le premier, le terme (VIII), est forcément négatif. Il signifie que les zones de fort gradient où la dissipation est importante, comme la diffusion à tendance à détruire les gradients, la dissipation est elle-même dissipée lors du processus d'homogénéisation. Le second, le terme (VII), fait explicitement intervenir le champ de vitesse. Il s'agit du terme d'interaction entre la turbulence et le champ scalaire. Il représente la création de dissipation dans les zones de fort étirement. La turbulence, en étirant le fluide et le champ scalaire, crée des gradients importants et favorise ainsi l'homogénéisation du scalaire. C'est le mélange turbulent. Le rapport entre la viscosité (coefficient de diffusion de la quantité de mouvement) et le coefficient de diffusion du scalaire est essentiel. Ce rapport sans dimension est appelé nombre de Schmidt

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (2.18)$$

Il contrôle directement le rapport entre l'échelle de Kolmogorov et l'échelle de Batchelor. Cette échelle est celle en dessous de laquelle le scalaire ne présente plus de fluctuations notables et elle est définie par

$$l_B = \frac{l_\eta}{\sqrt{Sc}} \quad (2.19)$$

Dans ce travail, l'ordre de grandeur du nombre de Schmidt est de 1.

Étude du scalaire passif

Le scalaire passif a été et est toujours abondamment étudié. Nous pouvons mentionner les travaux de Batchelor [28], Bilger [29], Anselmet et al. [30] ou encore ceux de Sreenivasan [31] et de Warhaft [32]. Nous allons présenter ici la description la plus classique du comportement du scalaire passif. Il s'agit du point de vue développé par Corrsin et Obukhov dans le début des années 1950.

Approche de Corrsin et Obukhov L'approche la plus classique du scalaire passif est conceptuellement et chronologiquement très proche de l'approche de Kolmogorov concernant la turbulence. Elle a été proposée par Corrsin [33] et Obukhov [34]. Ils voient dans le

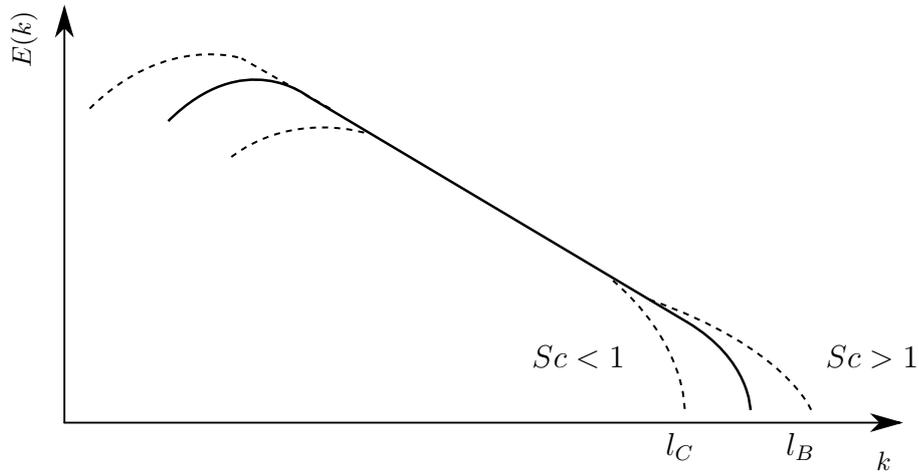


FIGURE 2.11 – Aspect des spectres d'énergie de la turbulence (trait plein) et d'un scalaire passif ξ en fonction de son nombre de Schmidt (traits pointillés).

mélange turbulent un phénomène de cascade. De leur point de vue, le mélange turbulent est dû à la division des structures du champ scalaire en structure plus petites, jusqu'à une échelle où ces structures peuvent être dissipées par la diffusion moléculaire. En suivant ce raisonnement analogue à celui de Kolmogorov, ils prédisent une loi puissance pour le spectre dans la zone inertielle du champ de vitesse. Cette loi de puissance a déjà été observée, y compris pour des valeurs du nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor Re_λ faibles en turbulence de grille alors que le champ de vitesse ne présentait pas encore de zone inertielle prédite par la théorie de Kolmogorov. Inversement, pour des écoulements qui ne sont pas aussi nettement homogènes et isotropes, le comportement ci-dessus ne semble se présenter que pour des grandes valeurs de Re_λ . Dans le cas des grands nombres de Schmidt, le spectre du scalaire s'étend au delà de l'échelle de Kolmogorov, jusqu'à l'échelle de Batchelor qui est dans ce cas nettement plus petite. A ces échelles, le scalaire n'est plus soumis au même type de mélange et Batchelor prédit un spectre du scalaire présentant un comportement en κ^{-1} .

Intermittence et modèle de l'advection turbulente Le spectre ne suffit cependant pas à décrire toutes les caractéristiques du scalaire dans un écoulement turbulent. Si on considérait par exemple un champ présentant un spectre en $\kappa^{-5/3}$ et des phases aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, alors la densité de probabilité de $\Delta\xi$ serait une gaussienne. Cela correspond à un comportement des moments de $\Delta\xi$ prédit par la théorie de Corrsin et Obukhov. Ce comportement n'est pas du tout observé et, en pratique, l'exposant des fonctions de structure croît beaucoup moins vite. Cela signifie que, pour des distances assez faibles, $\Delta\xi$ prend des grandes valeurs plus souvent que dans le cas gaussien. Cette apparition d'évènements violents moins rares qu'attendu est appelé intermittence et

il est bien établi que le champ de vitesse turbulent et le champ scalaire sont intermittents. On aurait pu penser que l'intermittence du scalaire était liée à celle du champ de vitesse. Kraichnan a développé un modèle pour le champ de vitesse turbulent où celui-ci est représenté par un champ gaussien (ne présentant donc pas d'intermittence) et décorrélé en temps. Les simulations numériques qui ont été menées avec ce modèle ont fait apparaître une intermittence importante du scalaire alors que le champ de vitesse ne présentait pas d'intermittence notable.

Anisotropie du scalaire L'échec de la théorie de Corrsin et Obukhov du mélange turbulent s'explique sans doute par l'anisotropie du scalaire à petite échelle. En effet, leur théorie est basée sur l'hypothèse qu'à petite échelle, les propriétés des champs de vitesse et du scalaire sont universelles et indépendantes des conditions aux limites. Or il semble bien que le scalaire connaisse une relaxation lente vers l'isotropie, c'est à dire que même aux temps longs et à petite échelle, il soit encore marqué par la façon dont il a été injecté. C'est en contradiction avec l'idée que les petites échelles du scalaire sont universelles. Le rôle comparé de la pression dans les équations du champ de vitesse et dans celles du champ scalaire n'est probablement pas négligeable ici.

Étude du terme d'interaction entre la turbulence et le champ scalaire

Le terme (VII) de l'équation (2.17) représente l'interaction qui se produit dans l'écoulement entre la turbulence et le champ scalaire. Il correspond au produit tensoriel entre le tenseur des taux de déformation et du gradient scalaire. Il a été intensément analysé pour l'étude de la combustion, en combustion pré-mélangée pour l'étude de la variable d'avancement de la réaction chimique et pour la combustion non pré-mélangée pour l'étude de la fraction de mélange [32, 35, 36, 37]. Ce terme peut être exprimé dans l'espace des vecteurs propres λ_i du tenseur des taux de déformations $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ (équation (2.20))

$$\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i}} = \overline{-\rho \epsilon_\xi (\lambda_1 \cos^2 e_1 + \lambda_2 \cos^2 e_2 + \lambda_3 \cos^2 e_3)} \quad (2.20)$$

Les λ_i sont les valeurs propres du tenseur des taux de déformation avec $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$. La valeur propre λ_1 correspond à la valeur propre d'étirement et λ_3 à la valeur propre de compression, enfin λ_2 est une valeur propre intermédiaire pouvant être négative ou positive. Les e_i représentent les angles entre les vecteurs propres du tenseur de taux de déformation et les gradients du scalaire passif. L'orientation relative du vecteur gradient scalaire ou de la normale unitaire associée ($n_\xi = \nabla \xi / \|\nabla \xi\|$) par rapport au vecteur propre du taux de déformation associé à λ_1 est noté e_1 . La nature du terme d'interaction entre la turbulence et le champ scalaire est déterminé par l'alignement entre le gradient sca-

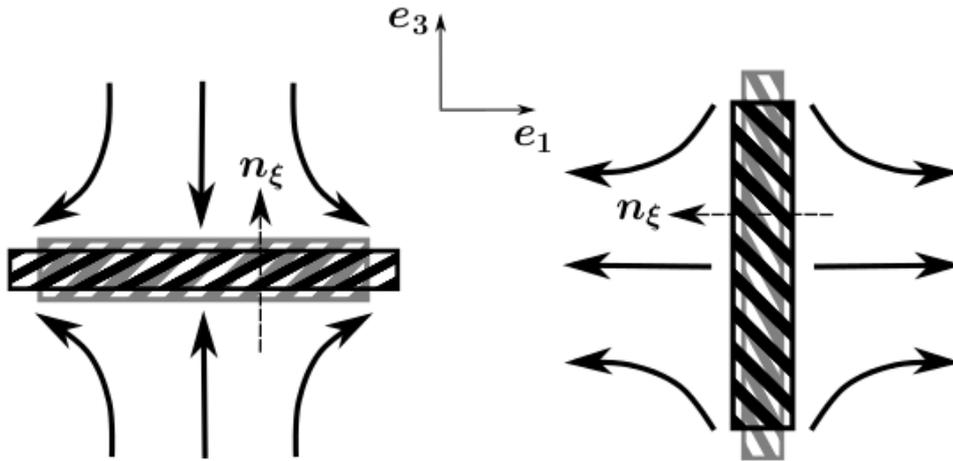


FIGURE 2.12 – Schéma bidimensionnel de l'interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire. Les directions e_1 et e_3 correspondent respectivement aux directions propres d'étirement et de compression.

laire et les vecteurs propres. Les travaux précédents montrent que dans le cadre d'une turbulence homogène isotrope (THI), le gradient du scalaire s'aligne préférentiellement avec les contraintes principales de compression [35]. Ceci fait du terme (VII) un terme de production de taux de dissipation scalaire. Lee et al. [38] ont étudié l'effet de la compressibilité sur les gradients de vitesse sur une gamme de Mach turbulent allant de 0.059 à 0.885. Ils ont montré que les effets de compressibilités sur l'amplitude des valeurs propres du tenseur des taux de déformations étaient minimales. Le schéma 2.12 illustre pour un cas bidimensionnel l'influence du champ de vitesse sur le champ scalaire. La direction e_1 correspond à la direction principale d'étirements et e_3 à la direction principale de compression. La bande hachurée représente le feuillet scalaire et les flèches montrent les lignes de courant. Lorsque le gradient scalaire est aligné avec la direction principale de compression e_3 , l'écoulement étire le feuillet scalaire et tend à accroître le gradient scalaire et par conséquent le mélange. Inversement, si le gradient scalaire s'oriente parallèlement avec la direction principale d'étirement e_1 , l'épaisseur du feuillet scalaire augmente, diminuant localement le gradient et donc le mélange. En d'autres termes, l'amplification des gradients scalaires est associée à une région où la compression prédomine.

2.4 Allumage et Combustion

L'hydrogène est un combustible de tout premier choix pour les applications liées à la propulsion aérospatiale. La chimie et, en conséquence, l'auto-allumage de l'hydrogène ont été largement étudiées dans la littérature. L'hydrogène possède des propriétés thermodynamique qui en font un combustible assez particulier notamment vis-à-vis des hydrocar-

bures. Sa grande diffusivité et sa faible énergie d'allumage en font le combustible avec la plage d'inflammation la plus importante. Le faible nombre de réactions élémentaires qui caractérisent sa cinétique en font une des plus simples en particulier lorsqu'on la compare à celles des hydrocarbures.

2.4.1 Chimie des mélanges d'hydrogène

La chimie de l'hydrogène représente sans doute la plus fondamentale et la plus importante part de la combustion. Elle a d'ailleurs été massivement étudiée et de nombreux mécanismes réactionnels ont été développés. Nous pouvons ainsi citer les travaux de Dryer [39] et Westbrook [40] ou encore ceux de Ó Conaire [1]. La plupart de ces schémas réactionnels possèdent huit espèces réactives (H_2 , O_2 , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 et H_2O). Un mécanisme réactionnel possède quatre types de réactions élémentaires : les réactions d'initiation, de ramification, de propagation et de terminaisons. Les réactions d'initiations ont pour rôle de fournir des radicaux consommés lors des réactions en chaîne. Ces réactions en chaîne se composent des réactions de ramification et de propagation qui s'amplifient avec l'augmentation de la température. Lorsque la température est très élevée, les réactions de terminaison se substituent aux autres. La présence d'un troisième corps dans les étapes d'initiation et terminaison est très importante. Celui-ci représente une espèce inerte intervenant à basse pression dans une réaction trimoléculaire pour évacuer l'excès d'énergie libérée lors de la recombinaison de deux espèces réactives. La concentration du radical hydroperoxyde (HO_2) joue également un rôle crucial dans le phénomène d'auto-allumage au travers de la température de croisement [41, 42]. Cette température T_c de l'ordre de 950 K à 1 atm, définit la température à partir de laquelle les réactions de ramification et de recombinaison de l'hydroperoxyde deviennent du même ordre de grandeur. Plus de détails sont donnés dans les références [43, 44].

2.4.2 Limites d'allumage des mélanges hydrogène/air

Les limites d'allumage représentent une propriété fondamentale d'un mélange hydrogène/air. Elles définissent les limites riche et pauvre d'un mélange. Les limites d'inflammabilité de l'hydrogène dans l'air ont été déterminées par Zabetakis [45]. Les richesses limites d'inflammabilité pour un mélange hydrogène/air et une température de 298.5 K et 1 atm sont de 0.1 et 7.14 (10% – 75% en volume). La plage d'inflammabilité est donc plus large pour l'hydrogène que pour n'importe quel autre hydrocarbure ou biofuel, ceci est en grande partie grâce à sa faible énergie d'allumage et sa grande diffusivité. Ceci a des conséquences directes sur les caractéristiques d'auto-allumage, de propagation de flamme, d'extinction ou encore de stabilité. Comme pour la vitesse de flamme, les limites d'inflammabilité dépendent de nombreuses variables. Par exemple, une augmentation de

la température élargit la plage d'inflammabilité (augmente la limite haute et diminue la limite basse). Un accroissement de la pression est susceptible de légèrement élargir la plage d'inflammabilité.

2.4.3 Auto-allumage des mélanges d'hydrogène

L'auto-allumage signifie l'établissement spontané d'une zone réactive entre deux réactifs mis en contact. Pour la plupart des mélanges, la réaction s'effectue seulement au dessus d'une température critique. Ce processus possède un caractère très local dans le mélange combustible/oxydant. Par exemple, dans un écoulement turbulent, c'est l'interaction entre la chimie et la turbulence qui détermine les zones les plus favorables à l'auto-allumage. Selon les travaux conduits dans [42, 46, 47], l'auto-inflammation a lieu dans des régions caractérisées par un faible taux de dissipation scalaire et pour une valeur de la fraction de mélange particulièrement réactive ξ_{mr} . Cette fraction de mélange est susceptible de différer de celle correspondant aux conditions stoechiométrique ξ_{st} .

L'auto-inflammation est un processus fortement non linéaire et très rapide. L'expression des vitesses de réaction basées sur une loi exponentielle d'Arrhenius en est la preuve. On parle souvent d'un processus d'emballement thermique ou "thermal runaway", un léger dégagement de chaleur augmentant la température amplifiera ce dégagement de chaleur déclenchant le processus d'auto-inflammation.

Dans le cas de réactifs non prémélangés, l'auto-inflammation est donc un phénomène local qui se déroule à une fraction de mélange ξ particulière notée MR ("Most Reactive" la plus réactive). Cette quantité peut être définie comme la valeur minimisant le temps de l'allumage. On comprend tout de suite que chaque écoulement possède sa propre valeur de ξ_{MR} . La détermination de celle-ci s'effectuent généralement grâce à des réacteurs adiabatiques parfaitement mélangés [48]. Les résultats de Echehki et Chen [49] ont montré l'existence des régions appelées "kernels" où l'auto-inflammation du mélange se produit à ξ_{MR} . Ces régions sont aussi caractérisées par une haute température, une richesse pauvre et des niveaux de dissipation scalaire très faibles.

D'après Mastorakos et al. [48], la turbulence est susceptible de diminuer le délai d'allumage par rapport au cas laminaire. La stabilisation des flammes résulte de la compétition entre le temps caractéristique du transport et le temps caractéristique de la chimie. Tandis que pour les écoulements subsoniques cette stabilisation peut être obtenue en créant une zone de recirculation des gaz brûlés à basses vitesses et hautes températures, le cas supersonique pose plus de difficultés dû à l'ordre de grandeur des vitesses impliquées [50]. L'auto-allumage peut se comporter comme un mécanisme stabilisateur des flammes non prémélangées. La stabilisation d'une "flamme jet" d'hydrogène-air fait l'objet de nombreuses études [51, 42]. En particulier, les résultats obtenus dans les travaux récents de

Yoo et al. [42] indiquent que le bilan entre la vitesse axiale locale et l'auto-allumage détermine la stabilisation de la flamme. Dans le cas d'une combustion supersonique et, notamment celle ayant lieu dans les chambres de combustion des superstatoréacteurs, la stabilisation de la combustion peut se faire à l'aide d'un système de chocs obliques. Dans des mélanges d'hydrogène et d'air, des inflammations locales peuvent être pilotées par des effets de compressibilité, de dissipation visqueuse et des fluctuations de température et de composition. L'allumage a lieu à l'intérieur des tourbillons, du côté du courant chaud, où les conditions locales le permettent [52] puisqu'elles correspondent à de hautes températures, de faibles niveaux de dissipation scalaire et à des temps d'induction faibles.

2.4.4 Auto-allumage dans les écoulements à haute vitesse

Lorsqu'un mélange s'auto-enflamme, la chaleur produite se diffuse dans un premier temps dans son milieu proche accompagnée par une légère dilatation de celui-ci. Lorsque la température atteint des niveaux suffisants, la réaction chimique entre le combustible et l'oxydant se met en place. L'emballement thermique qui en résulte propage le front de flamme. Dans les écoulements à grande vitesse, une compétition peut s'établir entre le transport des radicaux et de la chaleur sous l'effet du champ de vitesse turbulent et l'apport d'énergie dû à l'échauffement visqueux ainsi qu'au dégagement de chaleur issu de la réaction chimique.

Chapitre 3

Présentation de l’outil numérique

3.1 Introduction

Ce chapitre regroupe tous les aspects liés au développement et à la présentation du code de simulation numérique employé dans le cadre de cette étude. Dans un premier temps, nous allons rappeler brièvement les équations régissant les écoulements tridimensionnels compressibles et réactifs avec une présentation détaillée des différentes approches concernant le traitement des termes de transport ainsi que la prise en compte des termes sources chimiques. Ensuite, nous décrirons les schémas numériques ainsi que les conditions aux limites implémentées dans le code CREAMS. Enfin, nous exposerons quelques uns des nombreux cas tests préliminaires effectués avec le solveur.

3.2 Equations et modèles mathématiques

Cette partie présente les différentes équations utilisées pour modéliser des écoulements tridimensionnels compressibles de mélanges réactifs gazeux, notamment la description du traitement des termes de transport ainsi que le modèle cinétique basé sur un mécanisme réactionnel composé de plusieurs étapes réactionnelles élémentaires.

La section 3.2.1 présente les équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives pour un écoulement tridimensionnel décrivant un mélange de gaz réactifs. Les propriétés thermodynamiques du mélange sont exposées dans la section 3.2.2 tandis que les propriétés de transport détaillé et simplifié sont présentées, respectivement, dans les sections 3.2.3 et 3.2.4. Le modèle de cinétique chimique est étudié dans la section 3.2.5. La dernière partie de ce chapitre présente un récapitulatif des équations et modèles utilisés.

3.2.1 Equations de Navier-Stokes pour un mélange réactif de gaz

Nous considérons ici le système d'équations décrivant un écoulement tridimensionnel, instationnaire, compressible et visqueux composé de N espèces réactives, où les forces volumiques et le transfert d'énergie par rayonnement sont négligeables. Ce système de lois de conservation est basé sur les variables indépendantes suivantes (appelées aussi variables conservatives) : la masse volumique ρ , les trois composantes de la quantité de mouvement ρu_i , les fractions massiques d'espèces pondérées par la masse volumique ρY_i (ou masses volumiques partielles ρ_i) et enfin l'énergie spécifique totale pondérée par la masse volumique ρe_t . Il peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t + p) u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho Y_\alpha V_{\alpha j}}{\partial x_j} + \rho \dot{\omega}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.4)$$

La première équation du modèle de Navier-Stokes traduit la conservation de la masse totale du mélange. Les trois équations suivantes traduisent le principe fondamental de la dynamique, *i.e.*, la variation de la quantité de mouvement d'un système physique est due aux forces auxquelles il est soumis. La cinquième équation traduit le premier principe de la thermodynamique, *i.e.* la variation de l'énergie totale d'un système physique due à la somme des travaux de toutes les forces appliquées à ce système. Les N équations restantes traduisent la conservation de l'ensemble des espèces chimiques.

Les espèces chimiques, appelées scalaires actifs, modifient l'écoulement par le biais de la masse volumique du mélange (combinaison des différentes masses molaires des espèces) et également par les propriétés de transport, comme la viscosité et les coefficients de diffusion. La masse volumique ρ et la pression p sont reliées à la température T *via* l'équation d'état des gaz parfaits

$$p = \frac{\rho R T}{W}, \quad (3.5)$$

où $R = 8.314 \text{ J/molK}$ est la constante universelle des gaz parfaits et

$$W = \sum_{\alpha=1}^N X_\alpha W_\alpha = \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1}, \quad (3.6)$$

est la masse molaire du mélange, calculée à partir des masses molaires de chaque espèce W_α

et leur fractions molaires ou massiques, X_α ou Y_α respectivement. Les énergies spécifiques totale et interne de l'écoulement sont reliées par l'équation

$$e_t = e + \frac{u_i u_i}{2}, \quad (3.7)$$

où l'énergie spécifique interne, qui comporte une contribution chimique (liaisons entre les atomes) et sensible (agitation moléculaire en température), peut s'exprimer à partir de l'enthalpie spécifique du système comme

$$e = h - \frac{p}{\rho}. \quad (3.8)$$

L'écriture du bilan d'énergie (3.3) en terme d'énergie totale (énergie chimique, sensible et cinétique) est avantageux car aucun terme source associé aux processus chimiques n'apparaît de façon explicite dans ce bilan.

Afin de compléter la description du système (3.1)–(3.4), il est nécessaire de définir d'autres quantités telles que les propriétés thermodynamiques du mélange, le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} , les composantes du vecteur de flux de chaleur q_j , ainsi que les vitesses de diffusion et les taux de production de chaque espèce, $V_{\alpha j}$ et $\dot{\omega}_\alpha$ respectivement. Il s'agit de lois de comportement. En outre, le système (3.1)–(3.4) reste surdéterminé : il y a N fractions massiques à déterminer avec (3.4) et la conservation de la masse globale du système impose que la somme des fractions massiques doit être égale à l'unité, *i.e.* $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$. Néanmoins, lorsque les identités $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha V_{\alpha j} = 0$ et $\sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_\alpha = 0$ sont vérifiées, l'équation (3.1) est retrouvée. Ceci montre qu'il n'existe effectivement que N équations indépendantes. La résolution d'une équation pour le bilan de la masse totale (3.1) ou l'une des N équations (3.4) est donc inutile mais nous procéderons tout de même à cette résolution suivant l'argumentaire proposé dans [53].

3.2.2 Propriétés thermodynamiques

La valeur de l'enthalpie du mélange est nécessaire pour déterminer précisément l'énergie interne (3.8). L'enthalpie de chaque espèce est calculée à partir de l'expression suivante

$$\begin{aligned} h_\alpha(T) &= \Delta h_{f\alpha}^0 + \int_{T_0}^T c_{p\alpha}(T^*) dT^* \\ &= \frac{R}{W_\alpha} \left(a_{6\alpha} + a_{1\alpha} T + a_{2\alpha} \frac{T^2}{2} + a_{3\alpha} \frac{T^3}{3} + a_{4\alpha} \frac{T^4}{4} + a_{5\alpha} \frac{T^5}{5} \right), \end{aligned} \quad (3.9)$$

la chaleur spécifique à pression constante de chaque espèce étant exprimée de façon standardisée comme une fonction polynomiale

$$c_{p\alpha}(T) = \frac{R}{W_\alpha} \left(a_{1\alpha} + a_{2\alpha}T + a_{3\alpha}T^2 + a_{4\alpha}T^3 + a_{5\alpha}T^4 \right). \quad (3.10)$$

Les valeurs des coefficients $a_{n\alpha}$ sont données dans les tables de JANAF [54]. La constante d'intégration $a_{6\alpha}$ est choisie de façon à obtenir la valeur correcte de l'enthalpie de formation $\Delta h_{f\alpha}^0$ à la température $T^0 = 298.15$ K. L'enthalpie spécifique du mélange est obtenue à partir de la somme pondérée des enthalpies de chaque espèce par la fraction massique correspondante

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha. \quad (3.11)$$

La même procédure est utilisée pour retrouver la chaleur spécifique à pression constante du mélange

$$c_p = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha c_{p\alpha}, \quad (3.12)$$

tandis que la chaleur spécifique à volume constant du mélange est donnée par la relation

$$c_v = c_p - \frac{R}{W}. \quad (3.13)$$

D'après la relation (3.9), la dépendance non linéaire des chaleurs spécifiques à pression constante avec la température empêche le calcul direct de la température à partir de l'énergie totale (3.7). Cette dernière quantité étant fournie directement par les équations de Navier-Stokes, il est donc nécessaire d'utiliser un algorithme itératif permettant d'estimer la valeur de la température du mélange à partir de son énergie totale. Cet algorithme sera détaillé dans le chapitre suivant.

3.2.3 Propriétés de transport détaillé

Dans cette description détaillée, les coefficients de transport ne sont pas donnés explicitement par la théorie cinétique. En revanche, ils sont calculés à partir de la résolution de systèmes linéaires d'une taille considérable. Dans ce travail, ils sont évalués en suivant l'approche décrite par Ern et Giovangigli [55, 56]. Cette stratégie utilise une méthode itérative pour obtenir une solution approchée à ce système.

Ainsi, le tenseur des contraintes visqueuses est donné par

$$\tau_{ij} = \kappa S_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \left(S_{ij} - \frac{S_{kk}}{3} \delta_{ij} \right), \quad (3.14)$$

où κ et μ sont la viscosité volumique et dynamique, respectivement. δ_{ij} est le symbole de

Kronecker et S_{ij} est la partie symétrique du tenseur des gradients de vitesse

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.15)$$

Les flux de diffusion d'espèces est donné par

$$\begin{aligned} \rho Y_\alpha V_{\alpha j} &= - \sum_{\beta=1}^N \rho \tilde{D}_{\alpha\beta} d_{\beta j} - \rho Y_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \\ &= - \sum_{\beta=1}^N \rho \tilde{D}_{\alpha\beta} \left(d_{\beta j} + \frac{X_\beta \tilde{\chi}_\beta}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (3.16)$$

avec le vecteur de diffusion $d_{\beta j}$ défini comme

$$d_{\beta j} = \frac{\partial X_\beta}{\partial x_j} + \frac{X_\beta - Y_\beta}{p} \frac{\partial p}{\partial x_j}. \quad (3.17)$$

La variable $\tilde{D}_{\alpha\beta}$ représente les coefficients du flux de diffusion des composantes de $Y_\alpha D_{\alpha\beta}$. $\tilde{\chi}_\alpha$ est le rapport de la diffusion thermique normalisé ($\tilde{\chi}_\alpha = \chi_\alpha / X_\alpha$) de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce, défini de telle sorte que $D_{\alpha\beta} X_\beta \tilde{\chi}_\beta = \theta_\alpha$, avec θ_α étant le coefficient de diffusion thermique de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce. Les équations (3.16)–(3.17) ne considèrent pas seulement la diffusion provoquée par les gradients de fraction molaire des espèces, mais aussi l'effet de barodiffusion provoqué par les gradients de pression et de thermodiffusion dû aux gradients de température (communément appelé effet Soret). Finalement, les effets de diffusion différentielle sont bien pris en compte par $\tilde{D}_{\alpha\beta}$.

Le flux de chaleur peut s'exprimer comme

$$\begin{aligned} q_j &= -\lambda' \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha - p \sum_{\alpha=1}^N \theta_\alpha d_{\alpha j} \\ &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha + p \sum_{\alpha=1}^N \chi_\alpha V_{\alpha j} \\ &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} \left(h_\alpha + \frac{RT \tilde{\chi}_\alpha}{W_\alpha} \right), \end{aligned} \quad (3.18)$$

avec λ' la conductivité thermique partielle et λ la conductivité thermique du mélange. Le premier terme à droite de l'égalité est le transport de chaleur par diffusion. Le deuxième terme représente le transfert de chaleur par conduction. Finalement, le dernier terme est connu sous le nom d'effet Dufour.

Tous les coefficients de transport des équations précédentes, *i.e.* κ , μ , λ , $\tilde{D}_{\alpha\beta}$ et $\tilde{\chi}_\alpha$, sont calculés à l'aide de la librairie fortran EGLIB [56]. Dans la suite, cette description des termes de transport sera désignée par "transport détaillé".

3.2.4 Propriétés de transport simplifié

La description simplifiée des termes de transport que nous allons présenter maintenant néglige la viscosité volumique du tenseur des contraintes visqueuses (3.14) ainsi que les effets Soret et Dufour. Dans cette approche, les coefficients de transport de chaque espèce sont déterminés à l'aide des expressions issues de la théorie cinétique des gaz. Une formulation moyenne du mélange [57] est retenue pour la description des flux de diffusion d'espèces en remplaçant (3.16) par une version *modifiée* de l'approche de Hirschfelder et Curtiss [58]

$$\begin{aligned}\rho Y_\alpha V_{\alpha j} &= -\rho D_\alpha^m \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha V_c \\ &= -\rho D_\alpha^m \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha \sum_{\beta=1}^N D_\beta^m \frac{W_\beta}{W} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_j},\end{aligned}\quad (3.19)$$

le dernier terme correctif permet d'assurer la conservation de la masse globale du mélange [59], *i.e.* $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha V_{\alpha j} = 0$. Dans cette expression, la matrice des coefficients de diffusion binaires $\tilde{D}_{\alpha\beta}$ est remplacée par la matrice des coefficients de diffusion de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange, D_α^m , en négligeant les effets de diffusion différentielle.

Le flux de chaleur s'en retrouve également simplifié

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha. \quad (3.20)$$

Les expressions des coefficients de transport μ et λ varient par rapport à celles correspondantes à la description détaillée. Ceux-ci sont évalués, avec D_β^m , à l'aide de la librairie CHEMKIN [60, 57]. La description des termes de transport présentée dans cette section sera désignée dans la suite par "transport simplifié".

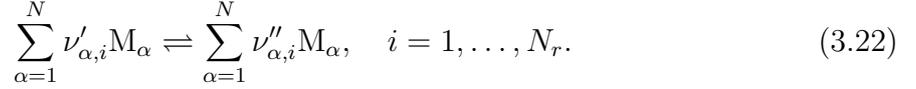
3.2.5 Cinétique chimique

Une réaction chimique, traduisant le bilan global d'un processus de combustion, peut être exprimée de la façon suivante



où ν'_c , ν'_o et ν''_p sont les coefficients stœchiométriques du combustible C, de l'oxydant O et des produits de combustion P, respectivement. Un système composé de N espèces qui

réagissent en suivant N_r réactions élémentaires est décrit par le mécanisme réactionnel



Dans cette expression, $\nu'_{\alpha,i}$ et $\nu''_{\alpha,i}$ sont les coefficients stœchiométriques direct (réactifs vers produits) et inverse (produits vers réactifs), respectivement, de l'espèce M_{α} intervenant dans la $i^{\text{ème}}$ réaction. Le taux global de la $i^{\text{ème}}$ réaction est donné par la théorie cinétique des gaz, à partir de la différence entre les taux de réactions directs et inverses

$$q_i = k_{f,i} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu'_{\alpha,i}} - k_{r,i} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu''_{\alpha,i}}, \quad (3.23)$$

$k_{f,i}$ et $k_{r,i}$ étant les constantes de vitesse de réaction directe et inverse, respectivement, et $[X_{\alpha}] = \rho Y_{\alpha} / W_{\alpha}$ étant la concentration molaire de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce. La vitesse de réaction directe est souvent modélisée en suivant une loi d'Arrhenius

$$k_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_{A_i}}{RT}\right), \quad (3.24)$$

où le facteur pré-exponentiel A_i , l'exposant de température β_i et l'énergie d'activation E_{A_i} sont des constantes qui dépendent de la réaction considérée mais qui sont supposés indépendants de la température. Les constantes de vitesse de réaction directe et inverse sont liées par la constante d'équilibre $k_{ci} = k_{fi}/k_{ri}$. Finalement, le taux de production de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce, $\dot{\omega}_{\alpha}$, est donné par la somme des taux globaux des réactions contenant cette espèce

$$\dot{\omega}_{\alpha} = \sum_{i=1}^{N_r} \dot{\omega}_{\alpha,i} = \sum_{i=1}^{N_r} (\nu''_{\alpha,i} - \nu'_{\alpha,i}) q_i, \quad (3.25)$$

et le taux de dégagement de chaleur est calculé comme

$$\dot{\omega}_0 = - \sum_{\alpha=1}^N \Delta h_{f\alpha}^0 \dot{\omega}_{\alpha}. \quad (3.26)$$

L'expression générale du taux de réaction (3.23) peut être modifiée en fonction du schéma cinétique considéré [60]. En effet, dans certaines applications, des études expérimentales montrent que le taux de réaction est proportionnel à la concentration d'une espèce élevée à une puissance arbitraire différente du coefficient stœchiométrique. De la même manière, certaines réactions peuvent faire intervenir un troisième corps et la concentration effective de cette nouvelle espèce doit être prise en compte dans l'expression (3.23).

Dans la littérature, il existe plusieurs schémas cinétiques permettant de modéliser les processus chimiques des mélanges d'hydrogène-air : Miller et al. [61], Westbrook et

TABLEAU 3.1 – Mécanisme réactionnel de Ó Conaire et al. [1]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en unités s-cm³-cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes : H₂, O₂, H, O, OH, HO₂, H₂O₂, H₂O, N₂.

N_r	Réaction	A	β	E_A
01	H + O ₂ ⇌ O + OH	1.91×10^{14}	0.00	16440
02	O + H ₂ ⇌ H + OH	5.08×10^4	2.67	6292
03	OH + H ₂ ⇌ H + H ₂ O	2.16×10^8	1.51	3430
04	O + H ₂ O ⇌ 2OH	2.97×10^6	2.02	13400
05	H ₂ + M ⇌ 2H + M ^a	4.58×10^{19}	-1.40	104400
06	O ₂ + M ⇌ 2O + M ^a	4.52×10^{17}	-0.60	118900
07	OH + M ⇌ O + H + M ^a	9.88×10^{17}	-0.70	102100
08	H ₂ O + M ⇌ H + OH + M ^b	1.91×10^{23}	-1.80	118500
09	H + O ₂ + M ⇌ HO ₂ + M ^c	1.48×10^{12}	0.60	0
10	HO ₂ + H ⇌ H ₂ + O ₂	1.66×10^{13}	0.00	823
11	HO ₂ + H ⇌ 2OH	7.08×10^{13}	0.00	295
12	HO ₂ + O ⇌ OH + O ₂	3.25×10^{13}	0.00	0
13	HO ₂ + OH ⇌ H ₂ O + O ₂	2.89×10^{13}	0.00	-497
14	H ₂ O ₂ + O ₂ ⇌ 2HO ₂	4.63×10^{16}	-0.30	50670
15	H ₂ O ₂ + O ₂ ⇌ 2HO ₂	1.43×10^{13}	-0.30	37060
16	H ₂ O ₂ + M ⇌ 2OH + M ^a	2.95×10^{14}	0.00	48430
17	H ₂ O ₂ + H ⇌ H ₂ O + OH	2.41×10^{13}	0.00	3970
18	H ₂ O ₂ + H ⇌ H ₂ + HO ₂	6.03×10^{13}	0.00	7950
19	H ₂ O ₂ + O ⇌ OH + HO ₂	9.55×10^6	2.00	3970
20	H ₂ O ₂ + OH ⇌ H ₂ O + HO ₂	1.00×10^{12}	0.00	0
21	H ₂ O ₂ + OH ⇌ H ₂ O + HO ₂	1.07×10^{13}	0.60	40450

^aEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2) = 2.50$, $k(\text{H}_2\text{O}) = 12$.

^bEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2) = 0.73$, $k(\text{H}_2\text{O}) = 12$.

^cEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2) = 1.30$, $k(\text{H}_2\text{O}) = 14$.

Dryer [62], Maas et Warnatz [63], etc. Le schéma cinétique retenu dans notre étude est celui de Ó Conaire et al. [1] qui comporte 21 réactions élémentaires et 9 espèces (cf. tableaux 3.1). Ce schéma, assez récent, est basé sur le mécanisme réactionnel de Mueller et al. [64] et a été conçu pour simuler la combustion des mélanges d'hydrogène-air dans une large gamme de température (298 K–2700 K), de pression (0.05 bar–87 bar) et de richesse (0.2–6.0). Il a été validé avec des données expérimentales en termes de délais d'auto-inflammation, de vitesses de flammes laminaires et de compositions de radicaux.

3.2.6 Récapitulatif

Les équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives pour un écoulement tridimensionnel décrivant un mélange des gaz réactifs ont été présentées. Les propriétés des

différentes espèces chimiques composant le mélange sont présentées sous forme polynomiale [54]. Les propriétés de transport détaillées sont calculées à l'aide de la librairie EGLIB [56] tandis que la librairie CHEMKIN [57] est utilisée pour évaluer les propriétés de transport simplifiées et la cinétique chimique considérée à partir des différents mécanismes réactionnels retenus.

3.3 Méthodes numériques

Les outils numériques utilisés dans ce travail sont présentés dans ce chapitre. Une partie des développements réalisés s'appuie sur les travaux de Shahab et al. [65], portant sur des écoulements inertes d'air. Ces outils ont été étendus et optimisés pour l'étude d'écoulements réactifs multi-espèces par Martinez [66]. Dans ce type d'écoulements, il existe des échelles temporelles très différentes associées aux différents phénomènes physiques et chimiques impliqués. Cela donne lieu à un système d'équations particulièrement raide. Une difficulté à prendre en compte est celle liée à la résolution simultanée des équations du mouvement et des espèces chimiques, en tenant compte de l'intégration des termes sources chimiques associés. La modélisation d'un problème instationnaire de convection-diffusion avec termes sources est décrite par l'équation aux dérivées partielles de la forme suivante

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} = \frac{\partial G_j}{\partial x_j} + S. \quad (3.27)$$

Cette équation comporte trois termes qui ont des propriétés mathématiques différentes : le terme convectif représenté par F_j , le terme diffusif représenté par G_j et le terme de production-consommation ou terme source représenté par S .

L'équation (3.27), présentée sous forme différentielle, est résolue numériquement par la méthode des différences finies. Le schéma numérique permettant la résolution de la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes est détaillé dans la section 3.3.1 tandis que celui utilisé pour évaluer les flux moléculaires est décrit dans la section 3.3.2. La section 3.3.3 présente l'intégration temporelle des contributions inertes et réactives de l'équation (3.27) tandis que les critères de stabilité numérique limitant le pas de discrétisation temporel sont donnés dans la section 3.4. Une méthode itérative est utilisée dans la section 3.4.1 pour la détermination de la température du mélange. Les conditions aux limites utilisées sont décrites dans la section 3.4.2. Finalement, la section 3.4.3 présente un récapitulatif des méthodes numériques utilisées.

3.3.1 Discrétisation spatiale des flux convectifs

Les flux convectifs correspondent à la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes, représentée par les équations d'Euler. Celles-ci décrivent le mouvement d'un fluide compressible non visqueux, sans termes de production. Par soucis de simplicité, nous considérons ici uniquement la première direction de l'espace pour écrire les équations. Dans cette direction, la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes (3.1)–(3.4) peut s'exprimer sous forme conservative comme

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (3.28)$$

où Q est le vecteur des variables conservatives

$$Q = (\rho, \rho u_1, \rho e_t, \rho Y_1, \dots, \rho Y_N)^t, \quad (3.29)$$

et $F = F(Q)$ est le vecteur des flux convectifs dans la direction $j = 1$ ($F \equiv F_1$ et $x \equiv x_1$)

$$F = u_1 Q + p(0, 1, u_1, 0, \dots, 0)^t. \quad (3.30)$$

L'équation (3.28) est résolue numériquement dans un domaine de calcul discrétisé régulièrement en N points, $x_i = i\Delta x$ pour $i = 1, \dots, N$, Δx étant le pas de discrétisation spatiale. L'approximation numérique Q_i de la solution exacte Q satisfait le système d'équations différentielles ordinaires

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = L(Q_i) = -\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}), \quad (3.31)$$

aussi appelée forme semi-discrète du système (3.28). Les quantités $\hat{f}_{i+1/2}$ et $\hat{f}_{i-1/2}$ sont les approximations numériques aux interfaces $i + 1/2$ et $i - 1/2$, respectivement, des flux eulériens $F(Q(x_{i+1/2}))$ et $F(Q(x_{i-1/2}))$. L'opérateur de discrétisation spatiale $L(Q_i)$ est évalué à l'aide d'un schéma WENO précis à l'ordre 7, désigné dans la suite par "WENO7". Le paragraphe suivant décrit la procédure utilisée pour la famille des schémas WENO. Pour ce qui concerne le développement des schémas WENO, on pourra se référer aux travaux de Crnjaric-Zic et al. [67], Shi et al. [68], Shu et al. [69], Titarev et Toro [70], Xu et Shu [71] et Zhang et al. [72] entre autres.

La famille des schémas ENO (*essentially non-oscillatory*) et WENO (*weighted essentially non-oscillatory*) a été développée dans le but de résoudre des écoulements complexes contenant de forts gradients, *e.g.* ondes de choc, discontinuités de contact, etc. Les schémas ENO, introduits dans [73], utilisent un algorithme local non linéaire pour sélectionner un et un seul stencil parmi plusieurs candidats afin d'éviter que celui-ci ne franchisse une

discontinuité dans les solutions lors de l'interpolation des flux numériques. Cet algorithme attribue à chaque stencil un poids en fonction du niveau de régularité locale de la solution. Plus le stencil est proche de la discontinuité, plus le poids attribué est faible. Les flux numériques calculés avec cette procédure n'introduisent pas d'oscillation non physique. Les schémas WENO, introduits par Liu et al. [74], constituent ainsi une amélioration des schémas ENO. L'évolution réside dans l'utilisation de tous les stencils disponibles pour l'interpolation des flux, au lieu d'un seul utilisé dans la procédure des schémas ENO. Par exemple, dans les régions de l'écoulement où il n'y a pas de discontinuité, tous les stencils sont utilisés pour effectuer l'interpolation, ce qui permet d'augmenter l'ordre du schéma. Néanmoins, au voisinage des discontinuités, certains stencils vont avoir un poids très faible ce qui va réduire l'ordre de précision du schéma. Cette ordre peut diminuer jusqu'à celui du schéma ENO équivalent dans le cas où un seul stencil est désigné par l'algorithme d'assignation des poids.

L'interpolation directe des flux des variables conservatives $\hat{f}_{i+1/2}$ et $\hat{f}_{i-1/2}$ dans (3.31) est possible ; cependant, pour éviter des oscillations en raison de la présence de discontinuités dans l'écoulement, il est recommandé d'interpoler les flux caractéristiques. Une fois que la procédure d'interpolation dans le champ caractéristique est réalisée, les flux conservatifs en sont déduits. Le système d'équations (3.28), exprimé sous forme conservative, peut être réécrit sous forme caractéristique. Pour ce faire, il suffit de multiplier le système (3.28) par la matrice des vecteurs propres du jacobien du flux R^{-1}

$$R^{-1} \frac{\partial Q}{\partial t} + R^{-1} \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F_s}{\partial x} = 0, \quad (3.32)$$

où W et F_s sont les vecteurs des variables et des flux caractéristiques, respectivement. Les expressions analytiques des matrices des vecteurs propres du système hyperbolique ainsi que sa procédure d'obtention sont détaillées dans la thèse de Martinez [66]. Le flux caractéristique est discrétisé selon

$$\frac{\partial F_s}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{s,i+1/2} - \hat{f}_{s,i-1/2} \right), \quad (3.33)$$

où $\hat{f}_{s,i+1/2}$ et $\hat{f}_{s,i-1/2}$ sont les approximations numériques aux interfaces $i + 1/2$ et $i - 1/2$ des flux caractéristiques $F_s(W(x_{i+1/2}))$ et $F_s(W(x_{i-1/2}))$ respectivement. La matrice de vecteurs propres à droite est aussi évaluée aux interfaces $i + 1/2$ et $i - 1/2$ à l'aide de la moyenne de Roe entre les points i et $i + 1$, et entre les points i et $i - 1$, respectivement. Ensuite, les flux caractéristiques sont décomposés en deux parties

$$F_s(W) = F_s^+(W) + F_s^-(W), \quad (3.34)$$

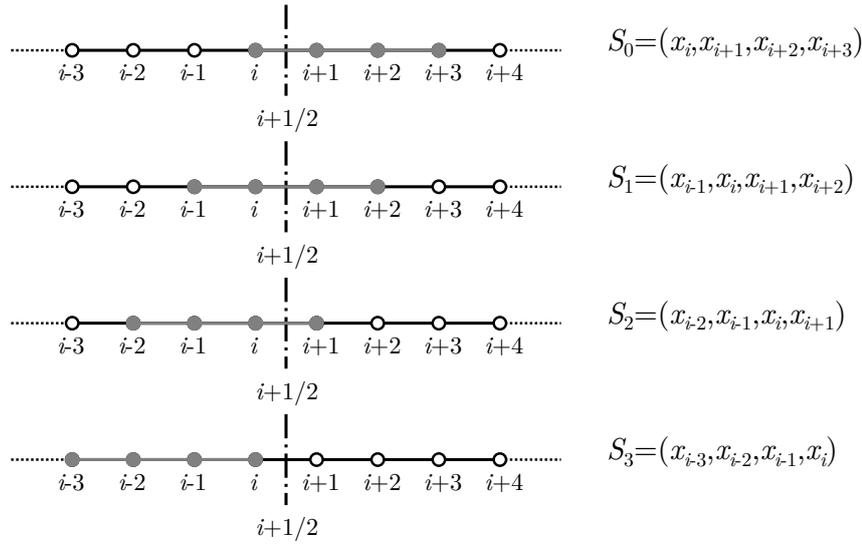


FIGURE 3.1 – Stencils candidats pour l'évaluation du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$ par interpolation essentiellement non oscillante du schéma WENO7.

de telle sorte que $dF_s^+(W)/dW \geq 0$ et $dF_s^-(W)/dW \leq 0$. Cette décomposition est effectuée selon la méthode locale de Lax-Friedrichs (LLF ou *local Lax-Friedrichs*)

$$F_s^\pm(W) = \frac{1}{2} (F_s(W) \pm \|\Lambda\|_{\max} W), \quad (3.35)$$

avec $\Lambda = dF_s(W)/dW$ la matrice des valeurs propres du système (3.28).

Les flux caractéristiques numériques correspondants, $\hat{f}_{s,i+1/2}^\pm$ et $\hat{f}_{s,i-1/2}^\pm$, sont reconstruits par interpolation essentiellement non oscillante sur les stencils candidats du schéma WENO7 (voir figure 3.1). Pour des raisons de simplicité, seule la procédure de calcul des flux $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$ sera considérée dans la suite. L'évaluation de $\hat{f}_{s,i+1/2}^-$ se fait symétriquement par rapport à l'interface $i + 1/2$. En outre, l'évaluation des flux numériques en $i - 1/2$ est similaire à celle en $i + 1/2$.

La procédure du schéma ENO4 d'ordre $r = 4$ retient un seul stencil parmi les r stencils candidats, $S_k = (x_{i-k}, x_{i-k+1}, \dots, x_{i-k+r-1})$ avec $k = 0, \dots, r - 1$, pour évaluer les flux numériques. Cependant, dans l'approche WENO7, d'ordre $2r - 1 = 7$, l'interpolation s'effectue sur les $r = 4$ stencils candidats

$$\hat{f}_{s,i+1/2}^+ = \sum_{k=0}^{r-1} \omega_k^r \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(k)}, \quad (3.36)$$

avec

$$\hat{f}_{s,i+1/2}^{+(k)} = \sum_{l=0}^{r-1} a_{kl}^r F_s^+(W(x_{i+k-r+1+l})). \quad (3.37)$$

Dans les régions où l'écoulement ne contient pas de discontinuité, les poids pondérant la

contribution du flux provenant de chaque stencil

$$\omega_k^r = \frac{\alpha_k^r}{\sum_{m=0}^{r-1} \alpha_m^r}, \quad (3.38)$$

avec

$$\alpha_k^r = \frac{d_k^r}{(\beta_k^r + \varepsilon)^p}, \quad (3.39)$$

tendent vers les valeurs optimales d_k^r , qui permettent d'aboutir à un schéma centré précis à l'ordre $2r - 1$. Pour $r = 4$, ces coefficients sont : $d_0^4 = 1/35$, $d_1^4 = 12/35$, $d_2^4 = 18/35$ et $d_3^4 = 4/35$. Le paramètre ε évite la division par zero dans (3.39). Il est pris ici égal à 10^{-10} . Les valeurs des coefficients a_{kl}^r sont données dans le tableau 3.2. Les coefficients β_k^r mesurent la continuité de la solution et ont pour expression

$$\beta_k^r = \sum_{m=1}^{r-1} \Delta x^{2m-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^m F_s^{+(k)}}{dx^m} \right)^2 dx. \quad (3.40)$$

Après intégration, ces coefficients peuvent s'exprimer sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \beta_0^4 &= F_{s,i-3}^+ (547F_{s,i-3}^+ - 3882F_{s,i-2}^+ + 4642F_{s,i-1}^+ - 1854F_{s,i}^+) \\ &+ F_{s,i-2}^+ (7043F_{s,i-2}^+ - 17246F_{s,i-1}^+ + 7042F_{s,i}^+) \\ &+ F_{s,i-1}^+ (11003F_{s,i-1}^+ - 9402F_{s,i}^+) \\ &+ F_{s,i}^+ (2107F_{s,i}^+), \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} \beta_1^4 &= F_{s,i-2}^+ (267F_{s,i-2}^+ - 1642F_{s,i-1}^+ + 1602F_{s,i}^+ - 494F_{s,i+1}^+) \\ &+ F_{s,i-1}^+ (2843F_{s,i-1}^+ - 5966F_{s,i}^+ + 1922F_{s,i+1}^+) \\ &+ F_{s,i}^+ (3443F_{s,i}^+ - 2522F_{s,i+1}^+) \\ &+ F_{s,i+1}^+ (547F_{s,i+1}^+), \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \beta_2^4 &= F_{s,i-1}^+ (547F_{s,i-1}^+ - 2522F_{s,i}^+ + 1922F_{s,i+1}^+ - 494F_{s,i+2}^+) \\ &+ F_{s,i}^+ (3443F_{s,i}^+ - 5966F_{s,i+1}^+ + 1602F_{s,i+2}^+) \\ &+ F_{s,i+1}^+ (2843F_{s,i+1}^+ - 1642F_{s,i+2}^+) \\ &+ F_{s,i+2}^+ (267F_{s,i+2}^+), \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \beta_3^4 &= F_{s,i}^+ (2107F_{s,i}^+ - 9402F_{s,i+1}^+ + 7042F_{s,i+2}^+ - 1854F_{s,i+3}^+) \\ &+ F_{s,i+1}^+ (11003F_{s,i+1}^+ - 17246F_{s,i+2}^+ + 4642F_{s,i+3}^+) \\ &+ F_{s,i+2}^+ (7043F_{s,i+2}^+ - 3882F_{s,i+3}^+) \\ &+ F_{s,i+3}^+ (547F_{s,i+3}^+). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Après le calcul des flux caractéristiques, $\hat{f}_{s,i+1/2} = \hat{f}_{s,i+1/2}^+ + \hat{f}_{s,i+1/2}^-$, la reconstruction

TABLEAU 3.2 – Valeurs du coefficient a_{kl}^r pour le schéma WENO7 ($r=4$).

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$k = 0$	-1/4	13/12	-23/12	25/12
$k = 1$	1/12	-5/12	13/12	1/4
$k = 2$	-1/12	7/12	7/12	-1/12
$k = 3$	1/4	13/12	-5/12	1/12

des flux conservatifs se fait par une opération inverse, en multipliant (3.32) par la matrice de vecteurs propres R

$$R \frac{\partial W}{\partial t} + R \frac{\partial F_s}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0. \quad (3.45)$$

Plusieurs versions modifiées du schéma WENO (WENO-M, WENO-Z...) ont été proposées dans la littérature [75, 76, 77]. Dans ce travail, la version utilisée du schéma WENO7 est celle proposée par Balsara et Shu [75]. Afin de diminuer la viscosité numérique introduite par le décentrage des stencils issu de la pondération non linéaire, le schéma a été modifié de façon à désactiver la pondération non-linéaire et donc forcer l'utilisation du schéma optimal dans les zones suffisamment régulières de l'écoulement. Cette opération est équivalente à la superposition des quatre stencils candidats du schéma WENO7 lorsque chaque stencil est évalué avec son poids optimal d_k^r . La détermination des discontinuités dans les solutions est réalisée à partir de l'évaluation des gradients normalisés locaux de pression et de masse volumique. Lorsque, dans un point du domaine de calcul, ces deux gradients normalisés dépassent une certaine valeur seuil, *e.g.* 5%, la région incluant ce point et définie par tous les autres points compris dans les différents stencils $S_k = (x_{i-k}, x_{i-k+1}, \dots, x_{i-k+r-1})$ avec $k = 0, \dots, r - 1$, est *marquée* comme une région discontinue. Ce critère, utilisé dans différentes configurations numériques avec présence des fortes discontinuités, a montré que la procédure de pondération du schéma WENO7 n'est appliquée que dans les régions englobant les discontinuités, tandis que dans le reste de l'écoulement le schéma centré du ENO7 est utilisé. D'autres hybridations du schéma WENO avec des schémas centrés, similaires à celle retenue dans ce travail, peuvent être trouvées dans la littérature [78, 79, 80].

3.3.2 Discrétisation spatiale des flux diffusifs

Les contributions moléculaires, incluant les termes visqueux et diffusifs du système (3.27), sont déterminées à l'aide d'un schéma centré d'ordre 8. Pour simplifier l'écriture des équations, nous ne considérons à nouveau que la première direction de l'espace ($G \equiv G_1$ et $x \equiv x_1$). Dans un domaine de calcul discrétisé régulièrement en N points, $x_i = i\Delta x$ pour $i = 1, \dots, N$, avec Δx le pas de discrétisation spatiale, l'approximation d'ordre 8 de la

dérivée est donnée par

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_8(g_{i-4} - g_{i+4}) + b_8(g_{i-3} - g_{i+3}) + c_8(g_{i-2} - g_{i+2}) + d_8(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.46)$$

avec $a_8 = -3/840$, $b_8 = 32/840$, $c_8 = -168/840$ et $d_8 = 672/840$. La précision numérique de la dérivée est progressivement diminuée en s'approchant des frontières physiques du domaine de calcul. Un schéma centré d'ordre 6 est employé aux points $i = 4$ et $i = N - 3$

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_6(g_{i-3} - g_{i+3}) + b_6(g_{i-2} - g_{i+2}) + c_6(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.47)$$

avec $a_6 = 1/60$, $b_6 = -9/60$ et $c_6 = 45/60$. Aux points $i = 3$ et $i = N - 2$, un schéma centré d'ordre 4 est utilisé

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_4(g_{i-2} - g_{i+2}) + b_4(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.48)$$

avec $a_4 = -1/12$ et $b_4 = 8/12$. Aux points $i = 2$ et $i = 1$, le même schéma d'ordre 4 est décentré. Pour $i = 2$, l'expression suivante est utilisée

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_{4l}g_{i-1} + b_{4l}g_i + c_{4l}g_{i+1} + d_{4l}g_{i+2} + e_{4l}g_{i+3}], \quad (3.49)$$

avec $a_{4l} = -3/12$, $b_{4l} = -10/12$, $c_{4l} = 18/12$, $d_{4l} = -6/12$ et $e_{4l} = 1/12$. De la même manière, l'expression de la dérivée au point $i = 1$ est donnée par

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_{4u}g_i + b_{4u}g_{i+1} + c_{4u}g_{i+2} + d_{4u}g_{i+3} + e_{4u}g_{i+4}], \quad (3.50)$$

avec $a_{4u} = -25/12$, $b_{4u} = 48/12$, $c_{4u} = -36/12$, $d_{4u} = 16/12$ et $e_{4u} = -3/12$. L'obtention des expressions des dérivées aux points $i = N - 1$ et $i = N$ se fait de manière symétrique par rapport aux points $i = 2$ et $i = 1$, respectivement.

La forme discrétisée des flux numériques convectifs et diffusifs présentée ci-dessus est obtenue sous l'hypothèse d'un domaine de calcul discrétisé régulièrement, *i.e.* avec un pas de discrétisation spatiale constant. Néanmoins, il est possible d'utiliser les expressions précédentes dans des maillages cartésiens non uniformes, permettant de resserrer des points de calcul dans certaines régions d'intérêt. Dans ce cas, une simple transformation de l'opérateur dérivée spatiale est appliquée. La dérivée d'une certaine quantité ϕ dans un domaine cartésien non uniforme composé de N points de calcul est donnée par

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi_i}{\partial \xi_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_i}, \quad (3.51)$$

avec $\xi_i = i$ pour $i = 1, \dots, N$ étant la nouvelle variable indépendante avec un pas de

discrétisation constante, $\Delta\xi_i = 1$ pour $i = 1, \dots, N$. L'expression $\partial\xi_i/\partial x_i$ est évaluée une seule fois dans le code de calcul à l'aide du schéma aux différences finies présenté dans cette section. Cette approche n'est valable que lorsque ϕ est une fonction continue de ξ . Dans la pratique, ceci se traduit par des taux d'étirements des mailles réguliers et modérés.

3.3.3 Intégration temporelle

Les écoulements réactifs qui sont considérés dans ce travail peuvent présenter des termes sources chimiques très raides. Ainsi, le temps caractéristique réactif peut être très faible par rapport aux temps caractéristiques convectif et diffusif. La stratégie adoptée ici utilise la méthode du *splitting* de Strang d'ordre 2 [81, 82]. Dans cette méthode explicite, après intégration de la partie inerte des équations du mouvement (termes convectifs et diffusifs), la résolution d'un ensemble d'équations différentielles ordinaires (ODE ou *ordinary differential equations*) concernant la partie réactive est effectuée. L'intégration de ces équations nécessite la connaissance des conditions initiales, qui sont les solutions obtenues après la résolution de la partie inerte des équations du mouvement. La mise à jour de la solution après un temps Δt donnée par la méthode de Strang s'écrit formellement :

$$Q^{n+1} = [L_r(\Delta t/2)L_i(\Delta t)L_r(\Delta t/2)] Q^n, \quad (3.52)$$

où L_r et L_i sont les opérateurs discrets correspondant à l'intégration du terme réactif et inerte, respectivement. Notons que, suivant les recommandations de Sportisse [83], l'intégration chimique est réalisée en deux fois sur un demi pas de temps.

L'opérateur d'intégration des termes inertes s'exprime sous la forme

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = L_i(Q(t)) = -\frac{\partial F_j}{\partial x_j} + \frac{\partial G_j}{\partial x_j}. \quad (3.53)$$

Dans le cas particulier d'un mélange multi-espèces (voir section 3.2.1), il correspond à

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j}, \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} = -\frac{\partial (\rho e_t + p) u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \rho Y_\alpha V_{\alpha j}}{\partial x_j}, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.57)$$

L'intégration de ces équations s'effectue à l'aide d'un schéma TVD (*total variation dimi-*

nishing) Runge-Kutta précis à l'ordre 3 [84]. L'avancement en temps du système (3.53) se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned} Q^{(1)} &= Q^n + \Delta t L_i(Q^n), \\ Q^{(2)} &= \frac{1}{4} [3Q^n + Q^{(1)} + \Delta t L_i(Q^{(1)})], \\ Q^{n+1} &= \frac{1}{3} [Q^n + 2Q^{(2)} + 2\Delta t L_i(Q^{(2)})], \end{aligned} \quad (3.58)$$

où Q^n est la valeur du vecteur de variables conservatives à l'instant n tandis que $Q^{(1)}$ et $Q^{(2)}$ sont des solutions intermédiaires. La solution de ce système à l'instant $n + 1$ peut s'écrire comme $Q^{n+1} = [L_i(\Delta t)]Q^n$.

L'opérateur d'intégration des termes réactifs s'exprime également sous la forme

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = L_r(Q(t)) = S, \quad (3.59)$$

et a l'expression suivante pour le cas d'un mélange multi-espèces

$$\frac{dT}{dt} = \frac{RT}{c_v} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\dot{\omega}_\alpha}{W_\alpha} - \frac{\sum_{\alpha=1}^N h_\alpha \dot{\omega}_\alpha}{c_v}, \quad (3.60)$$

$$\frac{dY_\alpha}{dt} = \dot{\omega}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (3.61)$$

Il correspond aux équations décrivant la combustion adiabatique à volume constant d'un mélange de gaz réactifs. L'équation (3.59) correspond à un système raide d'équations différentielles ordinaires, lequel est résolu à l'aide d'une méthode à coefficients variables disponible dans la sous-routine VODE [85]. Cet algorithme est très similaire à celui de Livermore, LSODE [86], et peut être appliqué à des systèmes raides et non raides. Une étude détaillée des solveurs d'ODE chimiques a été conduite par D'Angelo [87, 88].

La résolution du système (3.59) à l'instant $n + 1$, $Q^{n+1} = [L_r(\Delta t)]Q^n$, doit assurer la conservation de la masse du système : $\sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_\alpha = 0$. Pour ce faire, la fraction massique de l'espèce majoritaire est recalculée à partir de la contribution des autres espèces $Y_N = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N-1} Y_\alpha$. Un critère a été développé afin de déterminer les régions *suffisamment* réactives où effectuer l'intégration du système (3.59). Les régions composées exclusivement d'oxydant pur ou de combustible pur et donc où le terme de production minimum d'une espèce, $\dot{\omega}_\alpha$, est inférieur à 10^{-12} s^{-1} ne sont pas retenues par ce critère. Cette méthode permet d'évaluer (3.59) seulement dans les régions susceptibles de réagir et ainsi d'économiser d'importantes ressources de calcul.

Finalement, la solution du système complet s'obtient par application de la méthode de *splitting* de Strang (3.52) avec les étapes suivantes :

1. résolution du système (3.59) à partir des données initiales et un pas de temps $\Delta t/2$,

2. résolution du système (3.53) à partir de la solution obtenue dans (3.59) et un pas de temps Δt ,
3. résolution du système (3.59) à partir de la solution obtenue dans (3.53) et un pas de temps $\Delta t/2$.

3.4 Critères de stabilité numérique

Le solveur développé est explicite. La restriction sur le pas de temps liée à la partie convective est donnée par le critère CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) défini par

$$\text{CFL} = \max \left[(\sqrt{u_i u_i} + c) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right], \quad (3.62)$$

Le schéma numérique est stable pour les valeurs du critère CFL inférieur à 0.9. Le pas de temps obtenu est alors

$$\Delta t_{\text{CFL}} = \text{CFL} \times \min \left(\frac{\Delta x}{\sqrt{u_i u_i} + c} \right) \quad (3.63)$$

La restriction associée à la partie visqueuse est imposée par le nombre de Fourier, Fo, défini par

$$\text{Fo} = \max \left[D_{m\alpha} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \frac{\lambda \Delta t}{\rho c_p \Delta x^2} \right], \quad (3.64)$$

avec $\text{Fo} \lesssim 0.1$.

$$\Delta t_{\text{Fo}} = \text{Fo} \times \min \left[\frac{\Delta x^2}{D_{m\alpha}^m}, \frac{\rho c_p \Delta x^2}{\lambda} \right] \quad (3.65)$$

En dépit du fait que le schéma utilisé pour l'intégration des termes sources chimiques soit stable, un critère basé sur la chimie est appliqué à chaque itération. Ce critère additionnel permet de réduire le pas de discrétisation temporel pour capturer l'évolution de la composition de certaines espèces chimiques dont le temps caractéristique est inférieur au pas de temps imposé par les processus convectifs et diffusifs. Ce critère est très utile dans des processus transitoires ou d'auto-inflammation. Il est basé sur la température maximale atteinte dans la résolution de (3.59), ΔT_{max} , sur le pas temporel associé à la restriction du CFL, Δt_{CFL} , et celui du nombre de Fourier, Δt_{Fo} . Il s'exprime sous la forme

$$\Delta t_{\text{R}} = \frac{\Delta T_{\text{permis}}}{\Delta T_{\text{max}}} \min [\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Fo}}] \quad (3.66)$$

Dans la pratique, on retiendra des valeurs de ΔT_{permis} de l'ordre de 10K.

3.4.1 Température du mélange

Comme indiqué dans la section 3.2.2, la dépendance non linéaire avec la température des chaleurs spécifiques à pression constante empêche le calcul direct de cette quantité. La valeur de la température du mélange est donc obtenue par la racine de

$$f(T) = e_t + \frac{RT}{W} - h(T) - \frac{u_i u_i}{2}. \quad (3.67)$$

La dérivée de cette fonction par rapport à la température donne

$$f'(T) = \frac{df(T)}{dT} = -\frac{R}{W} \times \frac{1}{\gamma(T) - 1}, \quad (3.68)$$

qui est une fonction décroissante de la température. L'équation (3.67) est résolue avec la méthode itérative de Newton-Raphson [89]

$$T^{n+1} = T^n - \frac{f(T^n)}{f'(T^n)}, \quad (3.69)$$

où T^1 est la température initiale, supposée connue. Dans la plupart des applications considérées ensuite, un nombre d'itérations inférieur à 5 suffit pour obtenir la convergence du calcul de la température. Cette convergence est atteinte lorsque, pour chaque point du maillage, la relation $|T^{n+1} - T^n| < 10^{-6}$ K est vérifiée. Dans le code de calcul développé, cet algorithme est optimisé de façon à évaluer simultanément la température et la chaleur spécifique à pression constante du mélange ainsi que les enthalpies de toutes les espèces.

3.4.2 Conditions aux limites

Dans cette section, le traitement des conditions aux limites d'entrée et de sortie d'un écoulement réactif est présenté. Pour des raisons de simplicité, une seule direction de l'espace sera considérée ($x_1 \equiv x$). L'extension aux autres dimensions spatiales est obtenue de manière analogue. Le type de conditions aux limites employé dépend de la nature même de l'écoulement. Pour des écoulements subsoniques, la méthode utilisée est la méthode *NSCBC* (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions) basée sur la considération des ondes caractéristiques au bord du domaine. Cette méthode a d'abord été introduite par Thompson [90] pour des écoulements non visqueux (notées *ECBC* pour Euler Characteristic Boundary Conditions). Elle a ensuite été généralisée aux équations de Navier-Stokes par Poinot et Lele [91]. Ces développements ont ensuite été étendus par Baum et al. [92] aux écoulements multi-espèces, pour permettre l'étude des écoulements réactifs. Ces conditions reposent sur l'hypothèse que l'écoulement à la frontière est localement monodimensionnel. Les différentes amplitudes des ondes franchissant la frontière sont alors

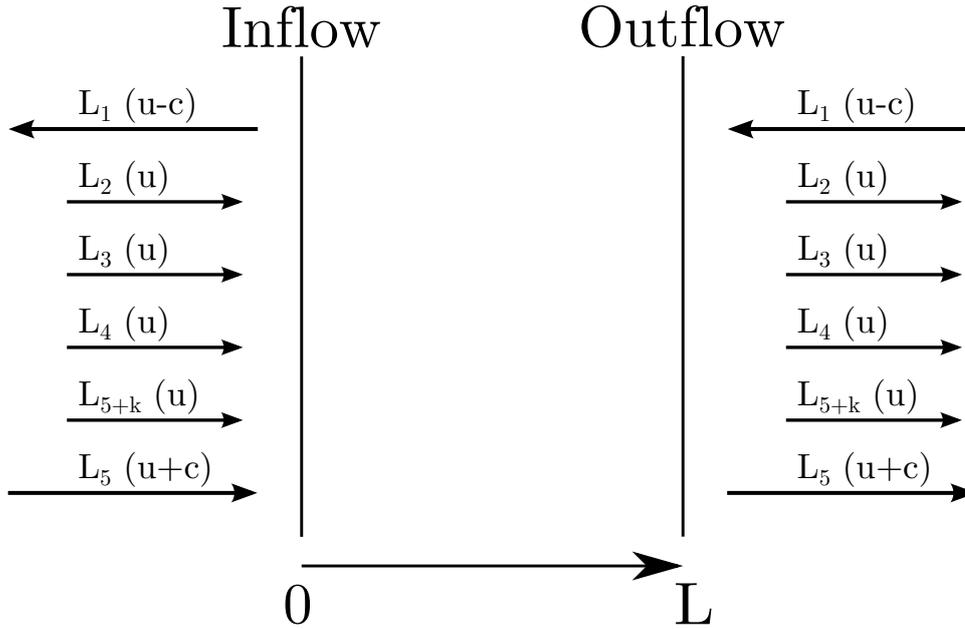


FIGURE 3.2 – Schéma des ondes caractéristiques entrant et sortant du domaine selon l'axe x pour des vitesses subsoniques.

déterminées à l'aide du système *LODI* (Local One Dimensional Inviscid). Ces relations sont issues des équations de Navier-Stokes écrites pour les variables primitives sous forme caractéristique. Plus récemment, Yoo et al. [93] ont ajouté la prise en compte des termes transversaux dans le traitement de la conditions aux limites, termes jusque là négligés. Lodato [94] a étendu ces conditions avec la prise en compte des effets de convection et de gradient de pression dans le plan de sorti. Il a également apporté une attention particulière pour le traitement des bords et des coins du domaine de calcul. Enfin, Albin et al. [95] introduisent par ailleurs un changement de repère pour appliquer le traitement NSCBC lorsque l'écoulement moyen n'est pas perpendiculaire à la frontière. Ils choisissent de décomposer les ondes caractéristiques dans un repère local lié aux lignes de courant franchissant la frontière.

D'un point de vue général, le principe de cette méthode consiste à déterminer l'amplitude des ondes caractéristiques sur la frontière du domaine. La figure 3.2 montre ces ondes caractéristiques ainsi que leur vitesse respective en entrée du domaine ($x = 0$) et en sortie du domaine ($x = L$). Nous nous plaçons en sortie du domaine ($x = L$). Toutes les ondes caractéristiques L_i sortent du domaine sauf L_1 . Les ondes sortantes sont calculées exactement par le schéma numérique à l'aide des informations issues de l'intérieur. En revanche, l'onde L_1 issue de l'extérieur du domaine, ne peut pas être calculée par le schéma numérique. Elle doit être imposée. Cette valeur imposée constitue la condition limite dite physique. Le paragraphe suivant présente l'obtention des expressions des ondes caractéristiques mentionnées précédemment.

Dans un premier temps, les termes hyperboliques des équations de Navier-Stokes sont exprimés sous leur forme caractéristique. Cette étape est réalisée à l'aide de l'analyse caractéristique développée par Thompson [90]. Dans un souci de concision, nous nous limitons ici à la définition des ondes sur la frontière de sortie $x_1 = L$. Le système d'équations de Navier-Stokes modifié devient

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3) = 0 \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^3 u_k^2 \right) d_1 + \frac{d_2}{\gamma - 1} + \rho u_1 d_3 + \rho u_2 d_4 + \rho u_3 d_5 \\ & + \frac{\partial}{\partial x_2} [u_2 (\rho e_s + P)] + \frac{\partial}{\partial x_3} [u_3 (\rho e_s + P)] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \tau_{ij}) + \omega_T \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \rho u_1}{\partial t} + u_1 d_1 + \rho d_3 + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2 u_1) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3 u_1) = \frac{\partial \tau_{1j}}{\partial x_j} \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial \rho u_2}{\partial t} + u_2 d_1 + \rho d_4 + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3 u_2) + \frac{\partial P}{\partial x_2} = \frac{\partial \tau_{2j}}{\partial x_j} \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial \rho u_3}{\partial t} + u_3 d_1 + \rho d_5 + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2 u_3) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3 u_3) + \frac{\partial P}{\partial x_3} = \frac{\partial \tau_{3j}}{\partial x_j} \quad (3.74)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + Y_k d_1 + \rho d_{5+k} + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2 Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3 Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) - \omega_k \quad (3.75)$$

pour $k = 1, \dots, N$. Les termes de ce nouveau système d'équations contiennent des dérivées normales à la frontière x_1 (elles sont notées d_1 à d_6), des dérivées parallèles à cette même frontière ainsi que des termes visqueux. Ce vecteur \mathbf{d} est également fourni par l'analyse caractéristique [90].

$$d_1 = \frac{1}{c^2} \left(L_2 + \frac{1}{2} (L_5 + L_1) \right) \quad (3.76)$$

$$d_2 = \frac{1}{2} (L_5 + L_1) \quad (3.77)$$

$$d_3 = \frac{1}{2\rho c} (L_5 - L_1) \quad (3.78)$$

$$d_4 = L_3 \quad (3.79)$$

$$d_5 = L_4 \quad (3.80)$$

$$d_{5+k} = L_{5+k} \quad (3.81)$$

Les amplitudes des variations des différentes ondes caractéristiques L_i sont alors détermi-

nées à partir du système suivant :

$$L_1 = \lambda_1 \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} - \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \quad (3.82)$$

$$L_2 = \lambda_2 \left(c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial P}{\partial x_1} \right) \quad (3.83)$$

$$L_3 = \lambda_3 \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \quad (3.84)$$

$$L_4 = \lambda_4 \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \quad (3.85)$$

$$L_5 = \lambda_5 \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} + \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \quad (3.86)$$

$$L_{5+k} = \lambda_{5+k} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x_1} \right) \quad (3.87)$$

avec $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_{5+k} = u$ et $\lambda_5 = u + c$. Les quantités λ_1 et λ_5 sont les vitesses des ondes acoustiques respectivement montante et descendante, λ_2 est la vitesse de l'onde entropique, λ_3 , λ_4 et λ_{5+k} sont les vitesses d'advection de la vitesse v , de la vitesse w et de la fraction massique Y_k de l'espèce k dans la direction x_1 . Ces relations expriment la conservation de certaines quantités (les invariants de Riemann généralisés) le long des lignes caractéristiques $x + \lambda_i t$. Par exemple, la première correspond aux variations $dp - \rho c du = dA_1$ qui sont nulles le long de la caractéristique $x + \lambda_1 t$ (L_1) dont la vitesse est $\lambda_1 = u - c$. A ce niveau, on peut réécrire le problème comme

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} + \lambda_1 \frac{\partial A_1}{\partial x_1} = 0 \quad (3.88)$$

ou encore

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} + L_1 = 0 \quad (3.89)$$

Le système LODI

Le système LODI est déduit du nouveau système d'équations de Navier-Stokes modifié en négligeant les termes perpendiculaires à la frontière ainsi que les termes visqueux :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \left[L_2 + \frac{1}{2} (L_1 + L_5) \right] = 0 \quad (3.90)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} (L_1 + L_5) = 0 \quad (3.91)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2\rho c} (L_5 - L_1) = 0 \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + L_3 = 0 \quad (3.93)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + L_4 = 0 \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + L_{5+k} = 0 \quad (3.95)$$

Condition de sortie partiellement non réfléchissante

Dans le cas d'une sortie subsonique, on constate qu'il n'y a qu'une seule onde caractéristique entrant dans le domaine de calcul (cf. Fig. 3.2). Pour obtenir une condition limite purement non réfléchissante, il suffit de forcer l'amplitude de cette onde à 0. Néanmoins, cette méthode induit une dérive des grandeurs physiques au cours du temps. Afin de pallier ce problème de dérive, Poinot et Lele [91] suggère de fixer l'amplitude de cette onde en fonction de la différence de pression entre la sortie et l'infini (éq. 3.96).

$$L_1 = K (p - p_\infty) \quad (3.96)$$

Rudy et Strikwerda [96] ont défini le paramètre K par :

$$K = \sigma (1 - M^2) \frac{c}{L} \quad (3.97)$$

où σ représente une constante comprise entre 0 et 1, M le nombre de Mach de l'écoulement, c la vitesse du son et L une longueur caractéristique du domaine de calcul. Lorsque $K = 0$, l'amplitude de l'onde L_1 est imposée à 0 ce qui rend la condition parfaitement non-réfléchissante. Lorsque la pression à la frontière est proche de la pression à l'infini, l'amplitude L_1 est également proche de 0. La frontière devient dès lors non réfléchissante. Au contraire, si l'écart entre les pressions est important, des ondes vont être réfléchies à l'intérieur du domaine pour rétablir la pression à l'infini.

Vérification de la condition de sortie partiellement non réfléchissante

Nous avons réalisé quelques tests afin de s'assurer du bon comportement de cette condition aux limites implémentée par nos soins. Dans un premier temps, nous avons analysé la traversée d'un tourbillon à travers cette nouvelle frontière [94]. Dans un second temps, nous avons simulé le développement d'une couche de mélange bidimensionnelle incompressible [97].

Tourbillon Le cas test d'un tourbillon traversant une condition aux limites est un cas classique dans la littérature. Il apparaît régulièrement dans les vérifications de conditions de sortie. En effet, ce type de structure tourbillonnaire est représentatif de celles rencontrées dans des écoulements turbulents. Ainsi, un tourbillon est superposé à un écoulement constant unidirectionnel. Le tourbillon est alors advecté dans cette direction et franchit la frontière. L'écoulement est initialisé à l'aide d'une fonction de courant (éq. (3.98)).

$$\Psi = C_c \exp\left(-\frac{r^2}{2R_c^2}\right) + U_0 y \quad (3.98)$$

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial y} \quad (3.99)$$

$$v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (3.100)$$

C_c représente l'intensité du tourbillon, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ la distance du centre du tourbillon et R_c le rayon du tourbillon. La vitesse U_0 est celle de l'écoulement uniforme à sa périphérie. La pression, la masse volumique ainsi que la température sont obtenues à partir d'une solution analytique. En fixant la température à T_0 , les champs de pression et de masse volumique sont définis par :

$$p(r) = p_\infty \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \left(\frac{C_c}{cR_c}\right)^2 \exp\left(\frac{r^2}{R_c^2}\right)\right] \quad (3.101)$$

$$\rho(r) = \frac{p(r)}{RT_0} \quad (3.102)$$

avec $c = \sqrt{\gamma RT_0}$. Les paramètres de simulations sont reportés dans le tableau 3.3. Le domaine de calcul est un carré de longueur $L = 0,013$ m avec une condition inflow U_0 à droite, des conditions latérales périodiques et la condition partiellement non réfléchissante à droite. Les résultats seront observés en fonction d'un temps adimensionné $t^* = t/(L/u)$. Le paramètre σ de relaxation de la condition partiellement non réfléchissante est pris égal à 0,28 ce qui correspond à la valeur optimale proposée par Rudy et Strikwerda [96]. Le maillage cartésien utilisé comporte 81 x 81 points. Ce test, a aussi été retenu par

TABLEAU 3.3 – Paramètres pour le tourbillon

C_c	5.10^{-3}
R_c (m)	0,0013
Longitudinal velocity U_0 (m/s)	200
Transversal velocity V_0 (m/s)	0,0
Pressure P_∞ (atm)	1,0
Temperature T_∞ (K)	300
Y_{O_2} (-)	0,233
Y_{N_2} (-)	0,767

Lodato [94], pour comparer une condition NSCBC simple avec son extension 3D-NSCBC. Dans la vérification présente, nous comparerons la condition NSCBC simple avec notre propre implémentation de la condition NSCBC.

$$P^*(x, t) = \frac{p(x, t) - p_\infty}{p(0, 0) - p_\infty} \quad (3.103)$$

La pression est examinée en fonction de sa valeur relative par rapport à la pression du champ lointain et adimensionnée par la pression initiale du centre du tourbillon (éq. (3.103)). La figure 3.3 montre l'advection du tourbillon dans le domaine de calcul au travers des iso-valeurs de vitesses longitudinales. Nous remarquons que ces iso-lignes ne sont pas déformées au passage de la frontière. Par contre, le champs P^* est fortement perturbé lors de la sortie du tourbillon. Les extrema apparaissent lorsque le centre du tourbillon quitte le domaine de calcul ($t^* = 0.5$). A cet instant, la différence ($p - p_\infty$) est la plus grande et donc l'amplitude des ondes réfléchies à l'intérieur du domaine de calcul est la plus importante. Le même type de perturbations est observé pour la condition NSCBC simple testé dans la référence [94].

Couche de mélange incompressible Cette section est consacrée à l'étude d'une couche de mélange incompressible afin de déterminer l'efficacité de cette nouvelle condition aux limites. La configuration de couche de mélange simulée est similaire à celle proposée par Bogey [97]. La vitesse de chaque écoulement est fixée à $U_1 = 100m/s$ et $U_2 = 50m/s$ et l'épaisseur de vorticit  initiale à $\delta_{\omega,0} = 1.6 \times 10^{-3} m$. Le nombre de Reynolds initial est fixé à $Re_{\omega,0} = 5333$ et le nombre de Mach convectif vaut $M_c = 0.074$. Il s'agit donc d'une couche de mélange incompressible d  au tr s faible nombre de Mach convectif. Les dimensions du domaine de calcul bidimensionnel sont $L_1 = 320\delta_{\omega,0}$ et $L_2 = 198\delta_{\omega,0}$. Ce domaine est uniform ment discr tis  dans la direction longitudinale avec 1000 points de calcul et une taille constante de maille $\Delta x_1 = 0.32\delta_{\omega,0}$. Dans la direction transversale, $N_{x_2} = 281$, les mailles sont progressivement  tir es avec un taux de 1.8%   partir du centre du domaine, o  la taille de maille est fix e   $\Delta x_2 = 0.16\delta_{\omega,0}$. A l'entr e du domaine

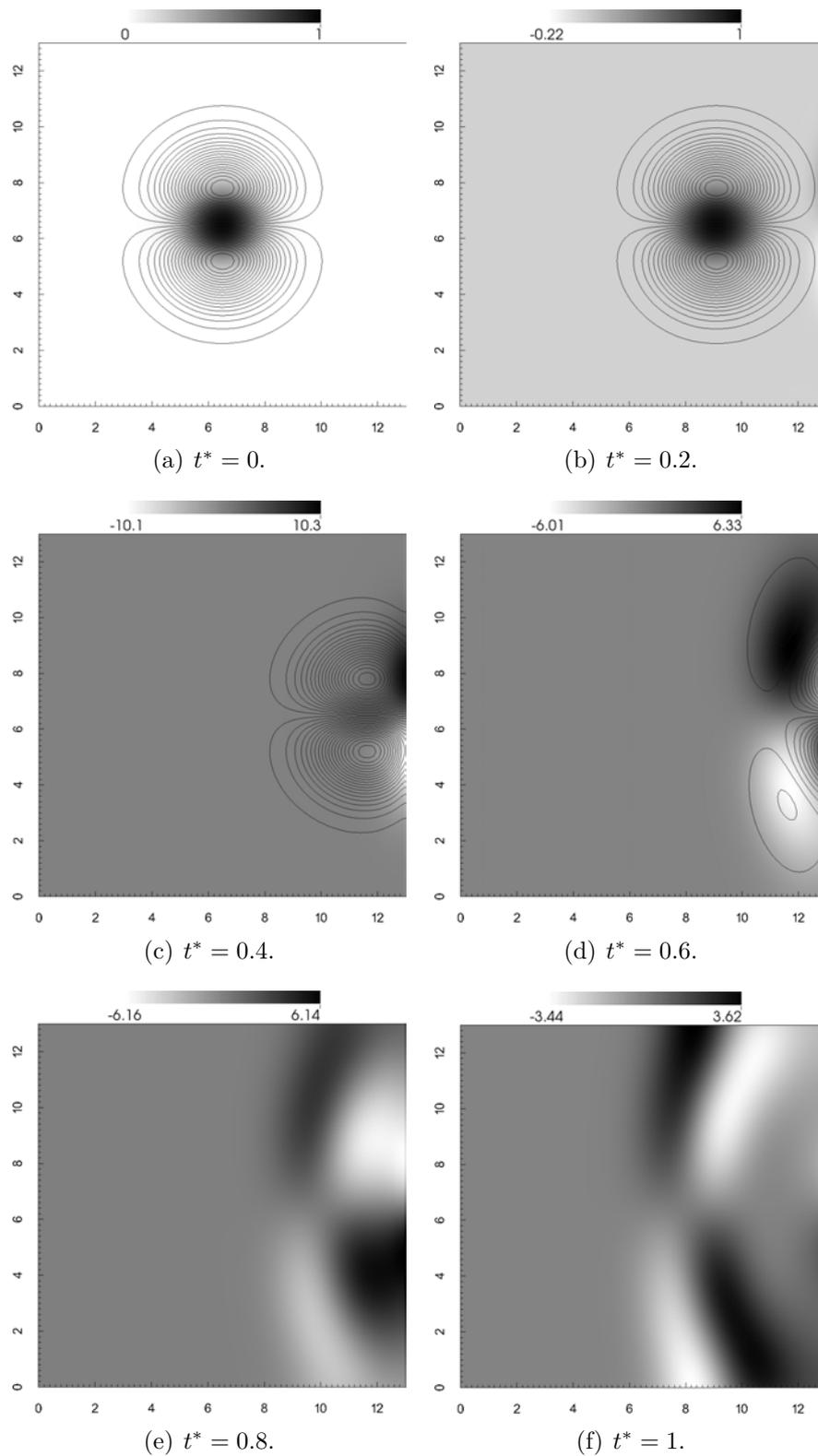
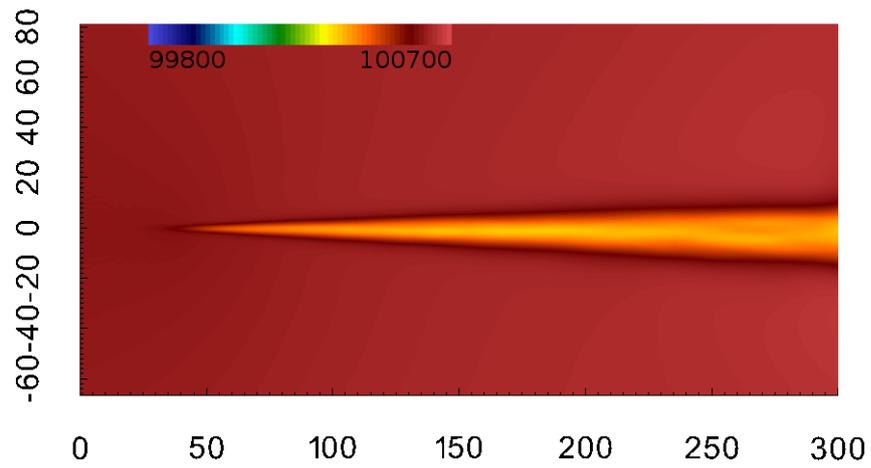
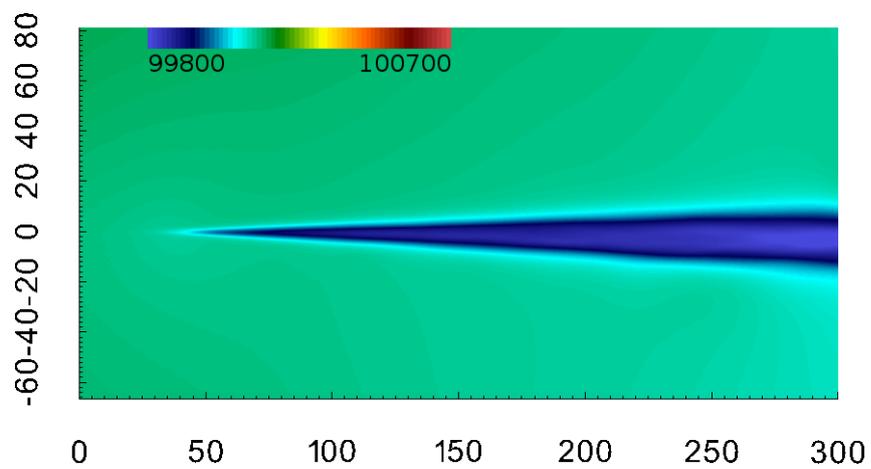


FIGURE 3.3 – Iso-contours de la vitesse longitudinale superposés au champs de P^* pour six instants différents.



(a) Pression moyenne avec la condition parfaitement non réfléchissante



(b) Pression moyenne avec la condition NSCBC

FIGURE 3.4 – Champs des pressions moyennes pour une couche de mélange subsonique.

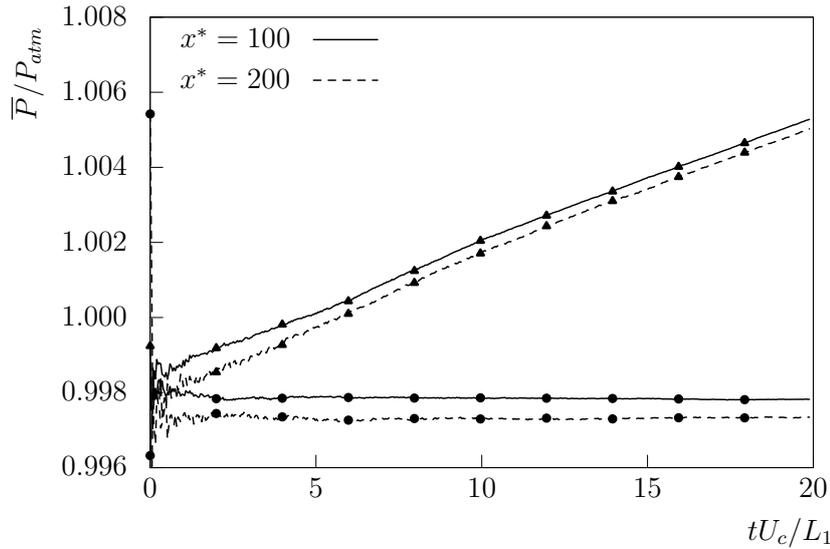


FIGURE 3.5 – Evolution de la pression moyenne au cours du temps en deux points de calcul pour la condition parfaitement non réfléchissante (▲) et la condition NSCBC (●).

de calcul, une condition de type Dirichlet est imposée. Une condition partiellement non réfléchissante est utilisée en sortie et des conditions parfaitement non réfléchissantes en bas et en haut du domaine. Pour initialiser le calcul, l'air est défini à partir d'un mélange d'oxygène-azote (21%O₂ + 79%N₂) de masse volumique $\rho = 1.22 \text{ kg/m}^3$ à pression $p = 1 \text{ bar}$. La vitesse longitudinale suit le profil en tangente hyperbolique (3.104) tandis que la vitesse transversale est fixée à une valeur nulle. Les calculs sont conduits avec une description simplifiée des termes de transport moléculaire, un nombre de CFL de 0.75 et un nombre de Fourier égal à 0.1.

$$u_1 = \frac{U_1 + U_2}{2} + \frac{U_1 - U_2}{2} \tanh\left(\frac{2x_2}{\delta_{\omega,0}}\right), \quad (3.104)$$

La figure 3.4 montre les champs de pression moyen en régime établi avec une condition de sortie parfaitement non réfléchissante et pour une condition de sortie de type NSCBC avec $\sigma = 0.25$. La figure 3.5 présente le profil de pression adimensionnée par la pression atmosphérique en deux points de calcul : $x = 100\delta_{\omega,0}$ et $x = 200\delta_{\omega,0}$ pour les deux types de conditions aux limites. Nous observons bien la dérive de la pression en fonction du temps pour la condition aux limites parfaitement non réfléchissante. En revanche, la condition améliorée corrige cette dérive de la pression.

3.4.3 Récapitulatif

Les méthodes numériques permettant de calculer les équations de Navier-Stokes portant sur des mélanges de gaz réactifs ont été décrites dans cette section. Le code de calcul

massivement parallèle développé dans le cadre de ce travail de thèse utilise des schémas numériques de haute précision. La partie hyperbolique des équations est résolue à l'aide d'un schéma hybride WENO-centré précis à l'ordre 7 tandis que la partie visqueuse est calculée à l'aide d'un schéma d'ordre 8. L'intégration temporelle s'effectue à l'aide de la méthode *splitting* de Strang en utilisant un schéma Runge-Kutta d'ordre 3 pour la partie inerte des équations (hyperbolique et visqueuse) et une méthode à coefficients variables pour la partie réactive. En outre, des critères de stabilité numérique ont été définis et, en particulier, un critère permettant de capturer des processus chimiques extrêmement rapides a été introduit. L'algorithme itératif de Newton-Raphson a été choisi pour calculer la température du mélange en fonction des variables conservées de l'écoulement. Finalement, les conditions limites utilisées ont été présentées. L'implémentation de condition non réfléchissante au sein du code de calcul a aussi fait l'objet d'une discussion spécifique. Dans la suite, elle sera utilisée en conjonction avec l'emploi de zones tampons et de techniques de filtrage numérique appropriées pour les écoulements compressibles que nous considérons ici [98].

3.5 Vérifications numériques du code CREAMS

Cette section vise à présenter quelques éléments de la vérification de l'outil numérique à l'aide de plusieurs cas test élémentaires. Cette partie exposera également le critère de détection de choc permettant l'hybridation du schéma WENO. Une vérification exhaustive du solveur peut être consultée dans la référence [53].

La section 3.5.1 présente le cas classique du tube à choc de Sod permettant d'évaluer les performances du schéma WENO7 en comparant la solution obtenue à la solution exacte de ce problème. La section 3.5.2 présente une étude du taux de convergence global du solveur numérique et la section 3.5.3 présente une étude du taux de convergence du schéma WENO7 seul. La section 3.5.4 est consacrée à la vérification du code pour un mélange de gaz.

Les résultats généraux issus de cette étude de vérification sont résumés à la fin du chapitre.

3.5.1 Tube à choc de Sod

Le premier test de validation est le tube à choc (test de Sod). Il s'agit d'un problème classique pour vérifier le comportement du solveur en présence de chocs forts. Il a été proposé initialement par Sod [8].

Le tube de Sod consiste à résoudre les équations d'Euler monodimensionnelles ($x \equiv x_1$ et $u \equiv u_1$) décrivant un écoulement compressible non visqueux dans lequel se propage un

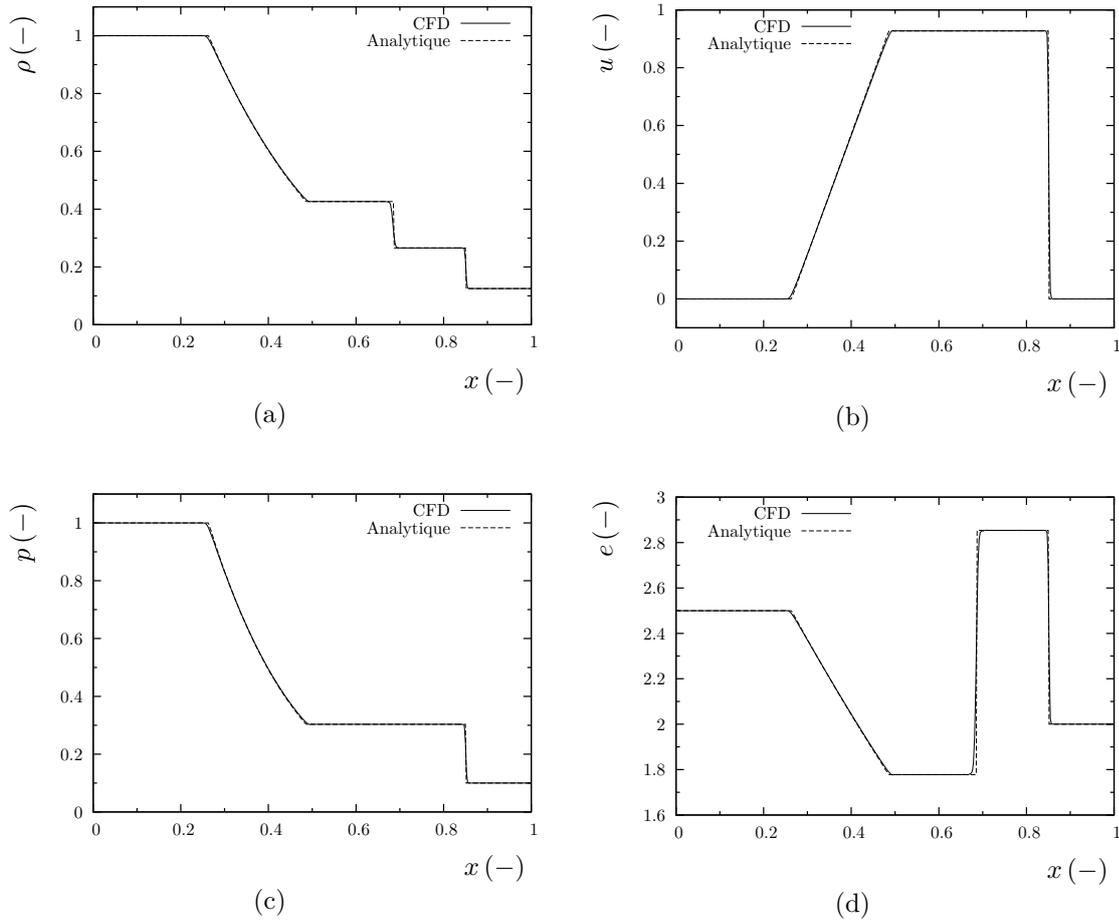


FIGURE 3.6 – Tube à choc de Sod [8]. Comparaison entre les solutions numériques (CFD) et analytiques de la masse volumique (a), la vitesse (b), la pression (c) et l'énergie spécifique interne (d). $t = 0.2$, 400 points de calcul, CFL=0.5.

choc, un faisceau de détente et une discontinuité de contact. La longueur du tube est égale à l'unité et les conditions initiales correspondent au problème de Riemann suivant :

$$Q(x, t = 0) = \begin{cases} Q_L & x \leq 0.5, \\ Q_R & x > 0.5, \end{cases} \quad (3.105)$$

avec $Q_L = (\rho_L, u_L, p_L) = (1, 0, 1)$ et $Q_R = (\rho_R, u_R, p_R) = (0.125, 0, 0.1)$. Le domaine de calcul considéré est composé de 400 points et la valeur retenue pour le CFL est égale à 0.5. La solution de ce problème pour $t > 0$ se réduit à une onde de choc se propageant vers la droite, une discontinuité de contact se propageant dans le même sens à une vitesse inférieure à celle du choc, et enfin un faisceau de détente se propageant vers la gauche. Les solutions analytiques et numériques (CFD) à $t = 0.2$ de la masse volumique, la vitesse, la pression et l'énergie spécifique interne sont reportées dans la figure 3.6.

La solution numérique obtenue avec le schéma WENO7 reste assez proche de la solution exacte pour la discrétisation spatiale retenue. Cependant, nous observons une légère diffusion de la solution dans la région de la discontinuité de contact. Ce phénomène bien connu a fait l'objet d'études précises. Plusieurs auteurs ont proposé des méthodes particulières pour réduire ces effets [75, 99, 100]. Nous pouvons citer notamment la méthode de compression artificielle (ACM ou *artificial compression method*) initialement développée par Harten [101] puis affinée par Yang [102], ou encore la méthode de résolution sous-cellule de Harten [103]. Dans certains problèmes où la propagation très précise des discontinuités est fortement souhaitée, il est préférable de les laisser propager de manière *naturelle* sur un nombre de points plus élevé en conservant une précision importante plutôt que de propager les discontinuités *artificiellement* sur un nombre de points réduit en dégradant la précision du schéma (Balsara et Shu [75]). Ceci est particulièrement important lors de la simulation d'écoulements turbulents où la précision de la propagation de l'information dans l'écoulement influence de manière significative les résultats. Pour cette raison, aucune des méthodes évoquées ci-dessus n'a été retenue dans le cadre de ce travail.

3.5.2 Taux de convergence global

Le test précédent a montré que la résolution de la propagation de choc est satisfaisante. Cette section a pour objectif de déterminer le taux de convergence global du code CFD. Des tests comparables de convergence pour les schémas WENO4 et WENO5 ont été présentés par Jiang et Shu [99] tandis que Henrick et al. [76] ont étudié l'influence du paramètre ε (voir équation (3.39)) dans l'ordre de convergence du schéma WENO5 et sa version "mappée" : WENO5M. Balsara et Shu [75] ont estimé l'ordre de convergence des schémas WENO7 et WENO7M couplé avec la stratégie ACM utilisée pour éviter la diffusion de la solution proche des discontinuités de contact. Shen et Zha [77] ont comparé l'ordre de convergence des versions WENO7-BS (Balsara et Shu) avec leur version améliorée WENO-Z7 basée sur l'extension de Borges et al. [104] pour le schéma WENO5. Dans cette partie, un tourbillon isentropique déjà étudié dans les références [105, 106, 107] sera utilisé pour l'étude de la convergence. Ce test consiste à résoudre un écoulement bidimensionnel uniforme non visqueux à l'intérieur duquel un tourbillon isentropique est créé à l'aide de la perturbation suivante :

$$(\delta u_1, \delta u_2) = \frac{\Gamma}{2\pi} \exp\left(\frac{1-r^2}{2}\right) (-\bar{x}_2, \bar{x}_1), \quad (3.106)$$

$$\delta T = -\frac{(\gamma-1)\Gamma^2}{8\gamma\pi} \exp\left(\frac{1-r^2}{2}\right), \quad (3.107)$$

TABLEAU 3.4 – Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma centré.

N	Δx	$\mathcal{E}_{\tau,h}$ (1C)	r_e (1C)	q (1C)	$\mathcal{E}_{\tau,h}$ (10C)	r_e (10C)	q (10C)
20	0.5263	4.73×10^{-3}	–	–	1.11×10^{-2}	–	–
40	0.2564	2.02×10^{-4}	1.37	4.55	1.58×10^{-3}	0.85	2.81
80	0.1266	7.94×10^{-6}	1.41	4.67	6.86×10^{-5}	1.36	4.53
160	0.0629	8.07×10^{-7}	0.99	3.30	6.80×10^{-6}	1.00	3.33
320	0.0313	1.08×10^{-7}	0.87	2.90	8.37×10^{-7}	0.91	3.02
640	0.0156	2.68×10^{-8}	0.61	2.01	1.13×10^{-7}	0.87	2.89

TABLEAU 3.5 – Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma WENO7.

N	Δx	$\mathcal{E}_{\tau,h}$ (1C)	r_e (1C)	q (1C)	$\mathcal{E}_{\tau,h}$ (10C)	r_e (10C)	q (10C)
20	0.5263	1.09×10^{-2}	–	–	3.56×10^{-2}	–	–
40	0.2564	5.31×10^{-4}	1.31	4.36	2.93×10^{-3}	1.08	3.60
80	0.1266	3.26×10^{-5}	1.21	4.03	8.47×10^{-5}	1.54	5.11
160	0.0629	8.28×10^{-7}	1.60	5.30	7.04×10^{-6}	1.08	3.59
320	0.0313	1.08×10^{-7}	0.88	2.94	8.38×10^{-7}	0.92	3.07
640	0.0156	2.68×10^{-8}	0.61	2.01	1.13×10^{-7}	0.87	2.89

où $\Gamma = 5$ est la circulation du tourbillon, $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (x_1 - x_{1,0}, x_2 - x_{2,0})$ avec $(x_{1,0}, x_{2,0})$ les coordonnées initiales du centre du tourbillon et $r = \sqrt{\bar{x}_1^2 + \bar{x}_2^2}$ le rayon du tourbillon. Les conditions initiales du problème sont définies par $u_1 = u_{1\infty} + \delta u_1$, $u_2 = u_{2\infty} + \delta u_2$, $(u_{1\infty}, u_{2\infty}) = (1, 0)$, $T = T_\infty + \delta T$ et $\rho = T^{\frac{1}{\gamma-1}}$.

Pour chaque point (i, j, k) du domaine de calcul, la variable $\phi_{(i,j,k)}^h$ est définie comme étant la valeur discrète d'une variable ϕ d'intérêt, *e.g.* la masse volumique, les composantes de la vitesse, la pression ou la température, obtenue sur un maillage de pas caractéristique h . La variable $\phi_{(i,j,k)}^e$ représente la valeur exacte de la solution. Nous définissons l'erreur relative numérique de la solution, notée $\mathcal{E}_{\tau,h}$, pour quantifier l'erreur numérique pour des valeurs décroissantes de la taille caractéristique du maillage, notée h . En utilisant la norme L_2 , l'erreur associée à la solution discrète peut s'exprimer sous la forme

$$\mathcal{E}_{\tau,h} = L_2(\phi_{(i,j,k)}^h) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i,j,k} (\phi_{(i,j,k)}^h - \phi_{(i,j,k)}^e)^2}, \quad (3.108)$$

avec N le nombre total de points de calcul et τ le pas de temps caractéristique. Nous définissons le rapport d'erreurs $r_e = \log(\mathcal{E}_{\tau,2h}/\mathcal{E}_{\tau,h})$ avec $\mathcal{E}_{\tau,2h}$ l'erreur obtenue sur un maillage de taille caractéristique $2h$. En suivant la nomenclature utilisée dans les références [108, 109] l'ordre de précision de la solution numérique est donné par $q = r_e/\log(2)$. Cette quantité ne décroît pas nécessairement de façon monotone au fur et à mesure que le maillage est raffiné et peut présenter des oscillations [109].

A $t = 0$, le tourbillon de rayon $r = 5$ se trouve au centre d'un domaine de calcul carré

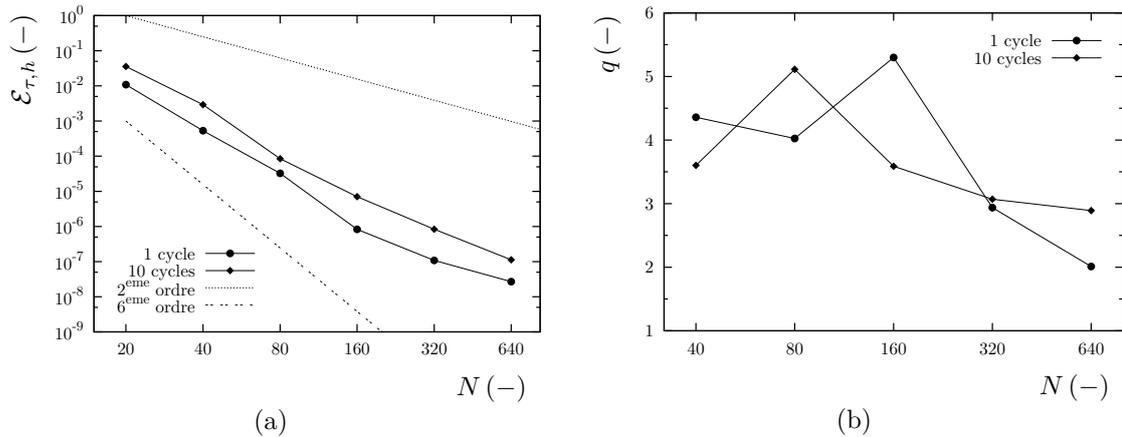


FIGURE 3.7 – Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondant (b).

de côté 10. Des conditions aux limites périodiques sont imposées aux frontières du domaine et la valeur du CFL est fixée à 0.8. A $t = 10$ (1 cycle) et à $t = 100$ (10 cycles), l'erreur relative de la solution ainsi que l'ordre de précision du code de calcul sont évaluées, en se basant sur le champ de masse volumique. Les tableaux 3.4–3.5 montrent, respectivement, les résultats obtenus avec le schéma centré et avec le schéma WENO7. La figure 3.7(a) montre la norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique. Comme attendu, la valeur correspondante augmente avec le nombre de cycles. Cependant, la pente de décroissance ne semble pas être affectée par le nombre de cycles, ce qui est confirmé par la figure 3.7(b). L'ordre de précision global du solveur numérique s'approche ici de la valeur 3, correspondant à la précision du schéma d'intégration temporelle Runge-Kutta. Finalement, la figure 3.8 confirme la qualité de la solution numérique obtenue après 10 cycles qui ne présentent pas de différences notables avec la solution initiale.

3.5.3 Taux de convergence du schéma WENO7

Dans cette partie, nous souhaitons évaluer le taux de convergence du schéma WENO7. Pour ce faire, nous conservons le même tourbillon isentropique définie dans la section précédente. L'erreur globale du solveur numérique peut être définie par $\epsilon_{\tau,h} = C'\tau^p + Ch^q$ avec C et C' deux constantes, $\tau = \Delta t$ et $h = \Delta x$. Afin de s'affranchir de la dépendance en temps de l'erreur ($C'\tau^p$), nous avons d'abord effectué une convergence en temps de l'advection du tourbillon (cf. fig.3.9). Le tableau 3.6 ainsi que la figure 3.10(a) montrent la norme L_2 de l'erreur numérique spatiale. Comme pour l'étude précédente, l'amplitude de l'erreur est plus importante lorsque le tourbillon est advecté dix fois. L'ordre de précision du schéma spatial s'approche de 6. C'est légèrement plus faible que la valeur théorique.

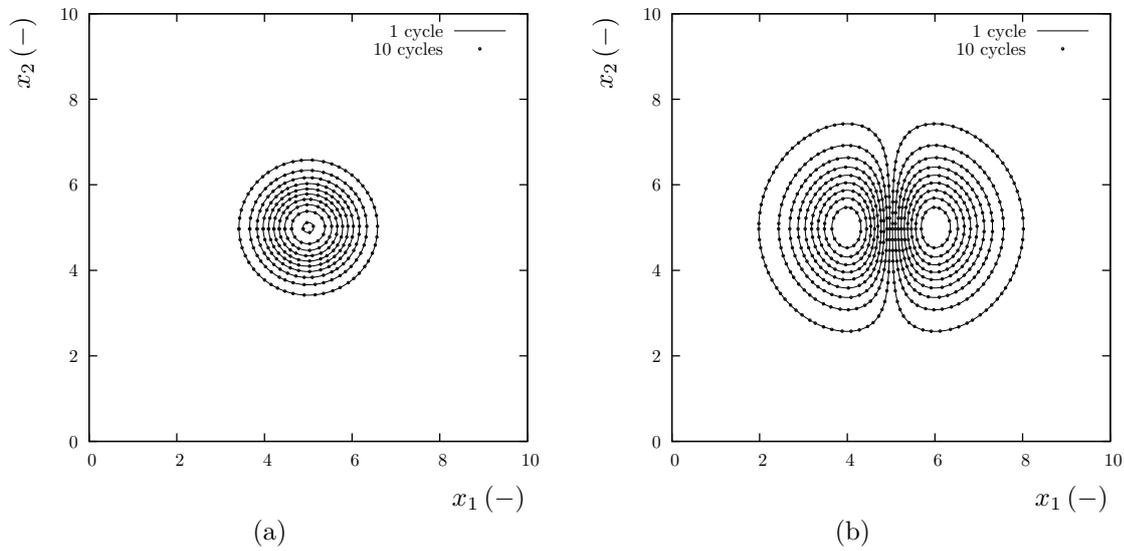


FIGURE 3.8 – Isolignes de masse volumique (a) et de la composante transversale de vitesse (b) à deux instants différents. $N = 160$.

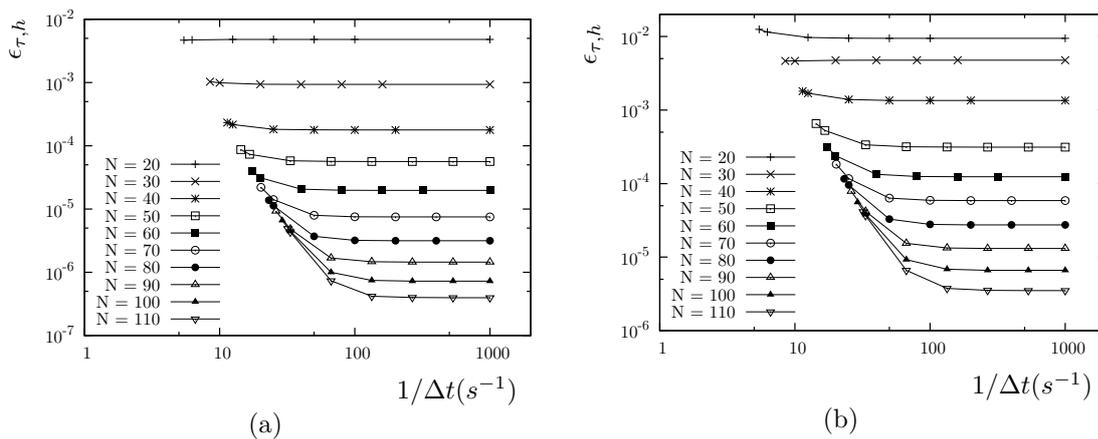
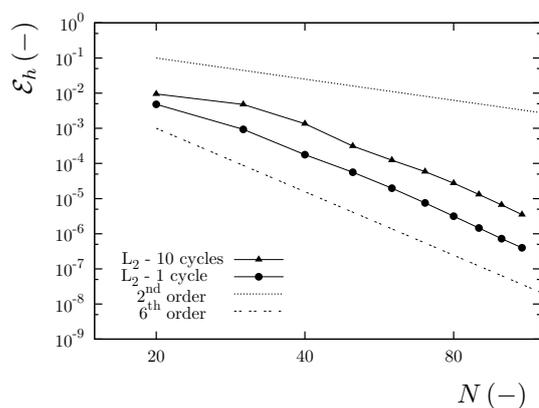


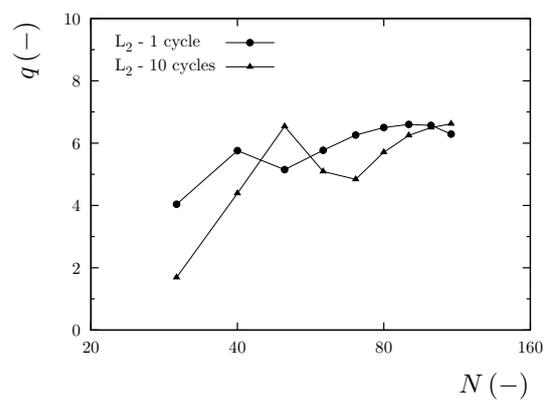
FIGURE 3.9 – Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique obtenue après 1 cycle (a) et 10 cycles (b) en fonction de l'inverse du pas de temps pour différents niveaux de résolution.

TABLEAU 3.6 – Analyse de convergence du schéma WENO7

N	Δx	L_2 (1C)	q_2 (1C)	L_2 (10C)	q_2 (10C)
20	0.5263	4.73×10^{-3}	–	9.46×10^{-3}	–
30	0.3448	9.34×10^{-4}	4.04	4.77×10^{-3}	1.69
40	0.2564	1.78×10^{-4}	5.76	1.35×10^{-3}	4.39
50	0.2041	5.64×10^{-5}	5.15	3.13×10^{-4}	6.54
60	0.1695	1.97×10^{-5}	5.77	1.24×10^{-4}	5.09
70	0.1449	7.51×10^{-6}	6.26	5.87×10^{-5}	4.84
80	0.1266	3.15×10^{-6}	6.50	2.74×10^{-5}	5.71
90	0.1124	1.45×10^{-6}	6.60	1.31×10^{-5}	6.25
100	0.1010	7.25×10^{-7}	6.57	6.61×10^{-6}	6.50
110	0.0917	3.98×10^{-7}	6.29	3.51×10^{-6}	6.62



(a)



(b)

FIGURE 3.10 – Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondante (b).

3.5.4 Tube à choc multi-espèces inerte

Ce test permet de vérifier le couplage entre le terme convectif des équations de Navier-Stokes et la librairie thermodynamique des mélanges multi-espèces, ainsi que la robustesse du schéma WENO7 en présence de fortes discontinuités. Il s'agit d'une version modifiée du tube à choc de Sod étudié dans la section 3.5.1, étendue aux mélanges multi-espèces. Plusieurs auteurs ont étudié différentes versions de ce problème [110, 111, 112]. Le test considéré ici a été proposé par Fedkiw et al. [111] et consiste à résoudre les équations d'Euler monodimensionnelles pour un mélange multi-espèces inerte. Il s'agit d'un mélange de $H_2/O_2/Ar$ de rapport molaire 2/1/7. La condition initiale correspond au problème de Riemann suivant : $(T_L, p_L) = (400 \text{ K}, 8000 \text{ Pa})$ et $(T_R, p_R) = (1200 \text{ K}, 80000 \text{ Pa})$.

A l'instant $t = 0$, les mélanges du côté gauche (L) et droit (R) sont séparés au milieu du domaine de calcul de 10 cm de longueur discrétisé en 400 points. La valeur du CFL est fixée à 0.5. Les solutions obtenues pour les profils de masse volumique, vitesse, température et rapport de chaleurs spécifiques à $t = 40 \mu s$ sont reportées dans la figure 3.11. Ces solutions sont en excellent accord avec celles de Fedkiw et al. [111] montrant les mêmes positionnements du choc, de la discontinuité de contact et enfin du faisceau de détente, à l'instant considéré.

3.5.5 Scalabilité de CREAMS

Ce test de scalabilité consiste en un jet d'hydrogène dans l'air en trois dimensions. Le code est ici utilisé dans sa configuration non réactive. Le maillage comprend $1077 \times 637 \times 637$ points. Ces calculs sont effectués sur la machine *THOR* de l'institut Pprime. Le calcul est lancé successivement sur 250, 500, 1000 et 2000 processeurs ce qui correspond respectivement à $1,75 \cdot 10^6$, $8,75 \cdot 10^5$, $4,37 \cdot 10^5$ et $2,78 \cdot 10^5$ points par bloc. La figure 3.12 représente le temps de calcul divisé par le temps de référence (le temps de référence correspond au calcul lancé sur 250 processeurs), la droite idéale est en trait plein et les résultats du code de calcul en trait pointillé. L'axe des abscisses indique le nombre de processeurs utilisés. On obtient un excellent niveau de performances du code CREAMS (speed up de 92% sur l'intégralité de la machine). Les performances devraient encore croître lorsque le calcul des termes sources chimiques sera pris en compte : ce problème est, par essence, très bien parallélisable puisque les termes sources chimiques ne dépendent que de la composition locale.

3.6 Récapitulatif

Un ensemble de tests élémentaires permettant de vérifier le fonctionnement correct du code de calcul CREAMS a été présenté dans ce chapitre. Quelques tests ont été choisis

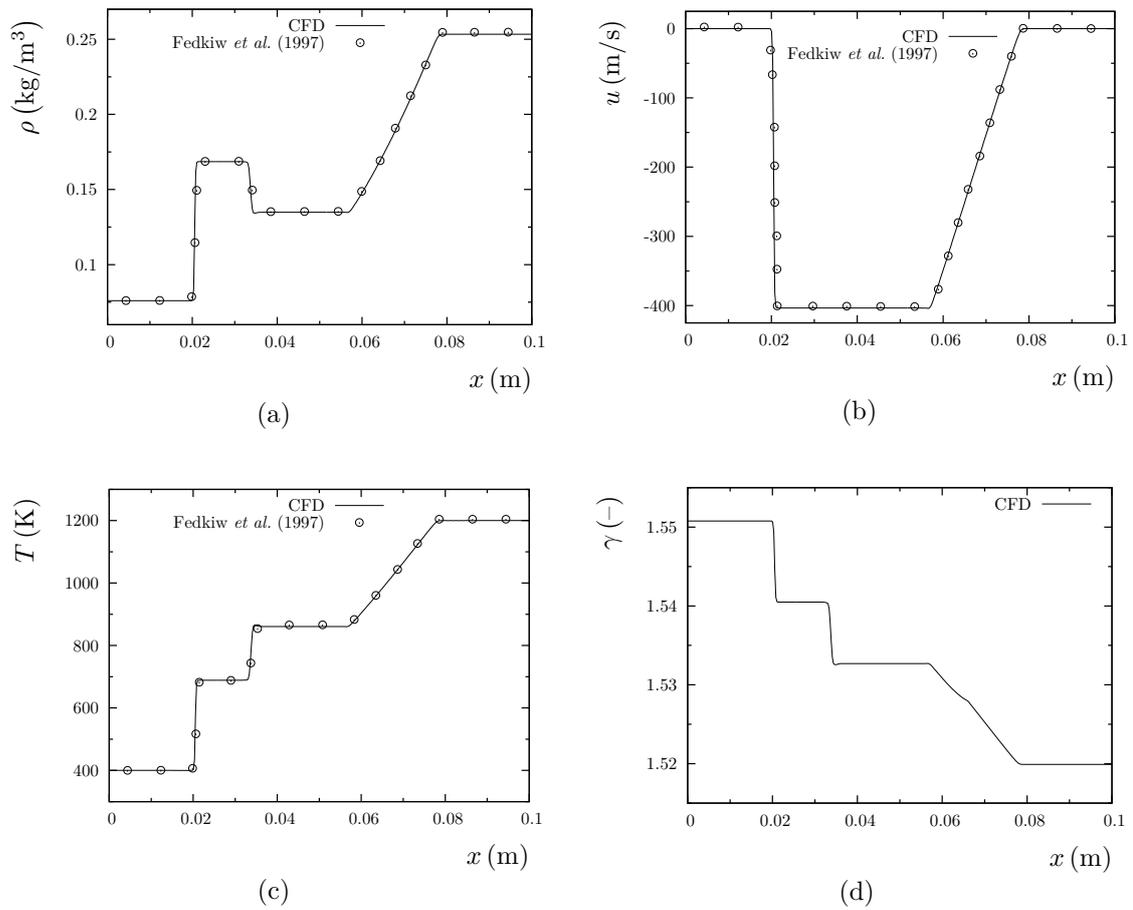


FIGURE 3.11 – Tube à choc multi-espèces inerte. Profils de masse volumique (a), vitesse (b), température (c) et rapport des chaleurs spécifiques (d). $t = 40 \mu\text{s}$, 400 points de calcul, CFL=0.5.

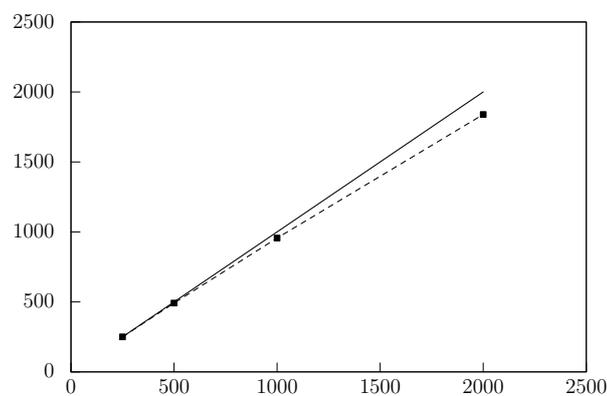


FIGURE 3.12 – Résultats de scalabilité pour le code CREAMS. La droite idéale est représenté en trait plein et les résultats du code de calcul sont présentés en trait pointillé.

de façon à vérifier des parties indépendantes du code numérique : flux convectifs, flux diffusifs, sources réactives ainsi que la librairie thermodynamique des mélanges de gaz. D'autres tests combinant plusieurs composantes du code ont aussi été présentés et, finalement, un test portant sur une flamme de prémélange laminaire d'hydrogène-oxygène a permis de vérifier l'intégralité du code de calcul [53]. Enfin, un dernier test effectué sur la machine THOR de l'Institut P' a montré le bon parallélisme du code de calcul, qui a été confirmé lors du passage aux supercalculateurs Curie du TGCC et Turing (Blue Gene/Q) de l'IDRIS.

Chapitre 4

Simulation de jets fortement sous-détendus d'air

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons caractériser un jet compressible fortement sous-détendu d'air dans une atmosphère au repos. Cette géométrie est par exemple représentative du percement d'un réservoir d'air à haute pression. Dans un premier temps, l'analyse de ce premier écoulement va permettre de définir la structure complexe qui se développe juste en aval de l'injection de ce type de jet. Dans un deuxième temps, nous examinerons la croissance des instabilités et de la turbulence dans les couches cisailées en développement. Nous clôturerons ce chapitre par l'étude plus approfondie du mélange dans le sillage de la structure compressible. Enfin, ce jet constitue aussi une première référence pour effectuer des comparaisons ultérieures.

4.2 Description des configurations étudiées

Cette première section va être consacrée à la description des configurations retenues pour les simulations d'un jet axisymétrique fortement sous-détendu d'air dans une atmosphère au repos. Deux calculs avec injection d'air à haute pression ont été réalisés. Le premier cas est basé sur un maillage comprenant près de 35 millions de points, dénommé dans la suite du manuscrit par "jet-1". Le second est basé sur un maillage plus raffiné comportant 177 millions de points, dénommé par la suite par "jet-2". Les différents paramètres caractérisant ces deux maillages sont repris dans le tableau 4.1. Le calcul "jet-1" est réalisé dans un domaine de calcul cartésien. Les dimensions complètes de ce domaine sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 16D \times 14D \times 14D$ (les indices 1, 2, 3 signifient x, y, z et D est le diamètre de l'ajutage). Ce domaine est discrétisé avec $N_1 \times N_2 \times N_3 = 488 \times 271 \times 271$

TABLEAU 4.1 – Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul (**sans les zones tampons**) a pour dimensions $L'_1 \times L'_2 \times L'_3$. Il est constitué d'un nombre de points $N' = N'_1 \times N'_2 \times N'_3$. Le diamètre d'injection D est utilisé comme longueur de référence.

Cas	L'_1/D	L'_2/D	L'_3/D	N'_1	N'_2	N'_3	N	Δx (m)
jet-1	14	6	6	425	199	199	17×10^6	3.125×10^{-5}
jet-2	14	6	6	850	399	399	135×10^6	1.667×10^{-5}

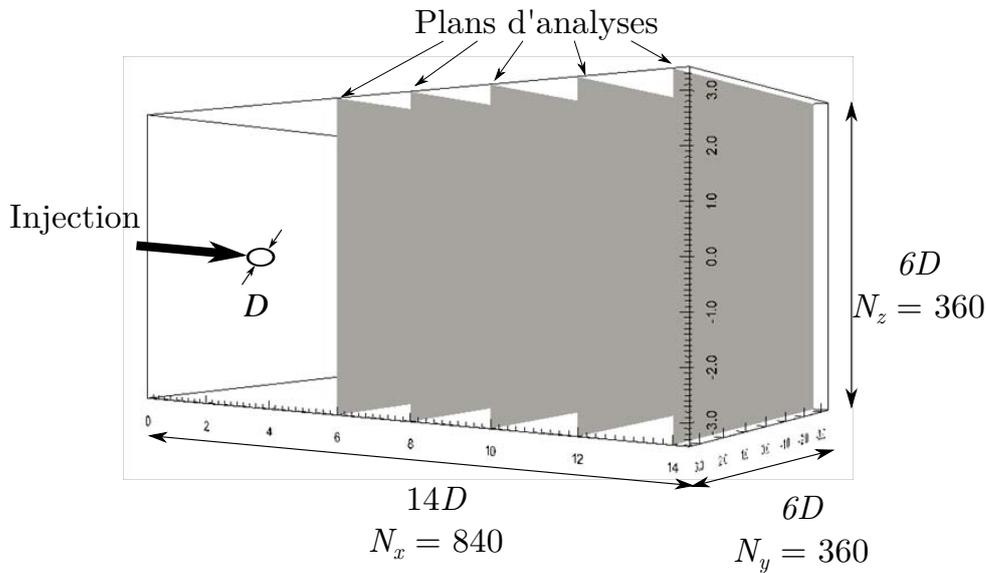


FIGURE 4.1 – Domaine de calcul : définition des plans d'analyse.

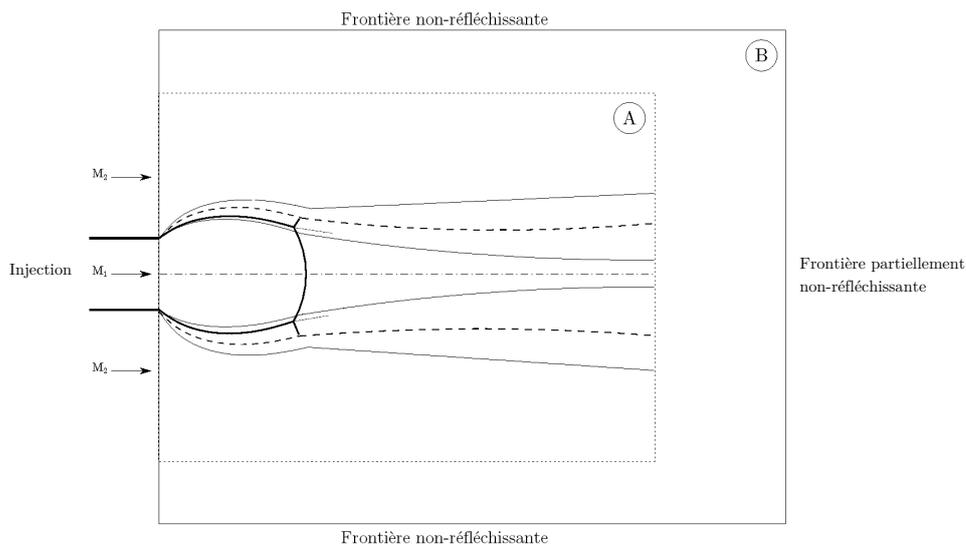


FIGURE 4.2 – Domaine de calcul : conditions aux limites retenues.

points avec une résolution dans la zone d'intérêt de $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 = D/32$. Des zones tampons ont été ajoutées sur toutes les sorties du domaine (i.e sur les frontières situées à gauche, en bas, en haut, en avant et en arrière) (cf. figure 4.2). Les dimensions du domaine sans ces zones tampons se réduit à $L_1 \times L_2 \times L_3 = 14D \times 6D \times 6D$. Le second calcul est également réalisé dans un domaine de calcul cartésien dont les dimensions complètes sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 16D \times 14D \times 14D$. Ce domaine est discrétisé avec $N_1 \times N_2 \times N_3 = 880 \times 449 \times 449$ points avec un niveau de résolution dans la zone d'intérêt de $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 = D/60$. Il contient aussi des zones tampons (la géométrie utilisée est la même que celle du calcul précédent figurant sur la figure 4.2). Les dimensions du domaine sans celles-ci sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 14D \times 6D \times 6D$. Il est à noter que la taille des mailles est maintenue constante dans tout le domaine résolu. L'étirement du maillage est opéré uniquement dans les zones tampons. Le schéma 4.1 donne un aperçu du domaine de calcul où figurent également les plans transversaux dans lesquels nous allons effectuer l'analyse statistique.

La géométrie étudiée correspond à un jet d'air issu d'un réservoir à haute pression dans une atmosphère au repos. L'air est ici considéré comme un mélange binaire d'oxygène O_2 et d'azote N_2 . Ce mélange est décrit avec des capacités calorifiques variables tout comme les propriétés de transport. Ceci permet d'éviter l'hypothèse simplificatrice d'un rapport de capacités calorifiques γ constant. La vitesse du jet est de 630 m/s dans le plan de sortie (ce qui correspond à une sortie sonique). Le domaine de calcul est initialisé avec les caractéristiques de l'air à une pression de 1 atm et 300 K . Le diamètre d'injection est fixé à $D = 0,001 \text{ m}$. Le nombre de Reynolds initial basé sur le diamètre d'injection est $Re = 77500$. Les grandeurs physiques utilisées pour ces deux simulations sont identiques et reportées dans le tableau 4.2. Un léger *co-flow* d'air est ajouté dans le but d'améliorer la stabilité et la convergence des calculs. Le profil de vitesse imposé en entrée est donné par la relation :

$$u = \frac{u_{cf} + u_{inj}}{2} + \left(\frac{u_{cf} - u_{inj}}{2} \right) \tanh \left(\frac{r - r_0}{\delta} \right) \quad (4.1)$$

avec $\delta = D/25$ et $r_0 = D/2$. Les conditions retenues correspondent à un jet libre fortement sous-détendu avec un rapport de pression totale NPR égal à 28.4. Nous imposons des conditions de non réflexion *parfaite* sur toutes les autres frontières du domaine à l'exception de la sortie droite où nous imposons une condition partiellement non réfléchissante de type NSCBC [96, 90, 91].

Les deux simulations considérées dans ce chapitre ont été réalisées sur deux supercalculateurs. Le premier supercalculateur est le "TGCC Curie" du CEA. Il s'agit d'une machine proposant trois types de ressources de calcul différents et basée sur une architecture x86-64. Elle offre une puissance de calcul crête globale de 2 Pflops. La partie utilisée ici est équipée de 80640 cœurs cadencés à 2.7 GHz. La deuxième machine est le cluster

TABLEAU 4.2 – Paramètres de l'écoulement.

	Injection	Co-courant
P (atm)	15.0	1.0
T (K)	1000.0	300.0
Ma	1.0	0.05
u (m/s)	630.0	20.0
Y_{O_2}	0.233	0.233
Y_{N_2}	0.767	0.767

“MC2P” de l’Institut P’. Il possède 108 noeuds de calcul bi-processeurs AMD Opteron 4, soit 864 cœurs de calcul, et une puissance totale d’environ 8.5 Tflops. La simulation sur maillage fin (“jet-2”) a été exécutée sur Curie Thin nodes avec 1024 processus MPI nécessitant 160 000 heures CPU tandis que la seconde (“jet-1”) a été lancée sur le cluster de l’Institut P’ en utilisant 288 processus MPI nécessitant 25 000 heures CPU. Ces deux simulations ont le même temps physique simulé (1.15 ms). Ces temps de calcul ne prennent pas en compte les transitoires des calculs.

4.3 Vérification des calculs

Cette deuxième section va être consacrée à plusieurs types d’analyses permettant de jauger la qualité des simulations numériques effectuées. Nous allons dans un premier temps étudier la convergence de la base de données “jet-2”, ensuite nous nous pencherons sur la résolution spatiale de celle-ci.

4.3.1 Convergence des statistiques

Cette partie consiste à vérifier que la base de donnée obtenue pour le calcul du jet d’air est bien convergée en temps. Dans cette optique, nous visualisons la convergence de la moyenne de la vitesse longitudinale cumulée ($\Delta\tilde{u} = (\tilde{u}(t) - \tilde{u}(t_{fin}))/\tilde{u}(t_{fin}) \times 100$) et de sa variance ($\Delta\tilde{u}''^2 = (\tilde{u}''^2(t) - \tilde{u}''^2(t_{fin}))/\tilde{u}''^2(t_{fin}) \times 100$). La convergence de la pression moyenne ($\Delta\bar{P} = (\bar{P}(t) - \bar{P}(t_{fin}))/\bar{P}(t_{fin}) \times 100$) est également tracée. Ce calcul est effectué en $x/D = 14$ et $r/D = 2$ ce qui correspond à un point localisé dans la zone de turbulence développée de la couche de cisaillement. La figure 4.3 montre la convergence des moments d’ordre un et deux de la vitesse longitudinale en fonction du temps de simulation normalisé par un temps de référence. Ce temps de référence est défini par $t_{ref} = L_{ref}/U_{ref}$ avec $L_{ref} = 14D$ et U_{ref} représentant la vitesse moyenne sur l’axe du jet entre l’injection et $x = L_{ref}$ ($U_{ref} = (1/L_{ref}) \int_0^{L_{ref}} u(x) dx$). La valeur obtenue est $t_{ref} = 2.71 \cdot 10^{-5} s$. Nous remarquons que le taux de convergence de la moyenne de la

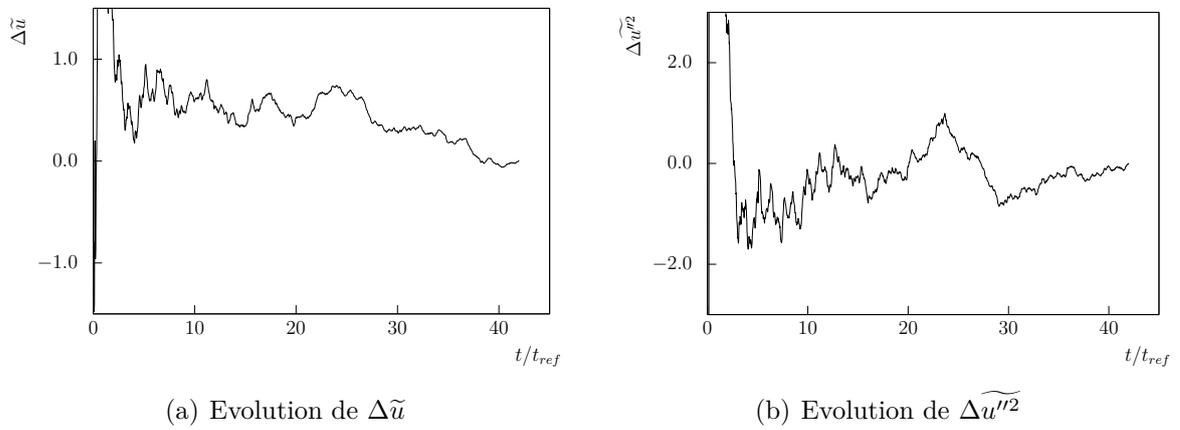


FIGURE 4.3 – Étude de la convergence de base de donnée (vitesse longitudinale).

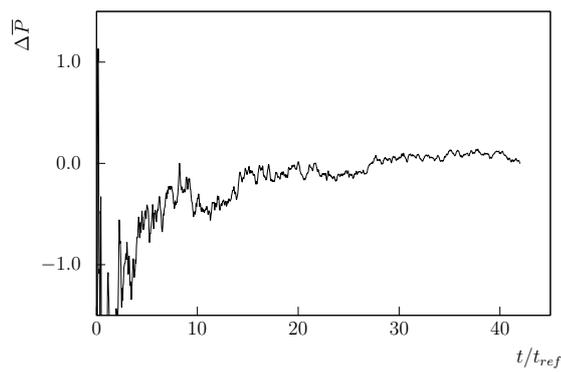
FIGURE 4.4 – Étude de convergence du signal de pression mesuré au voisinage du dernier plan d'analyse $x/D = 14$.

TABLEAU 4.3 – Caractérisation de la résolution de la simulation (les nombres de Reynolds ainsi que les longueurs caractéristiques sont évaluées à $x/D = 14$ et $r/D = 1.75$).

$D/\Delta x$	$l_\lambda/\Delta x$	$l_\eta/\Delta x$	$t_\eta/\Delta t$	IQ_η
60	4.69	0.162	37.0	88.9

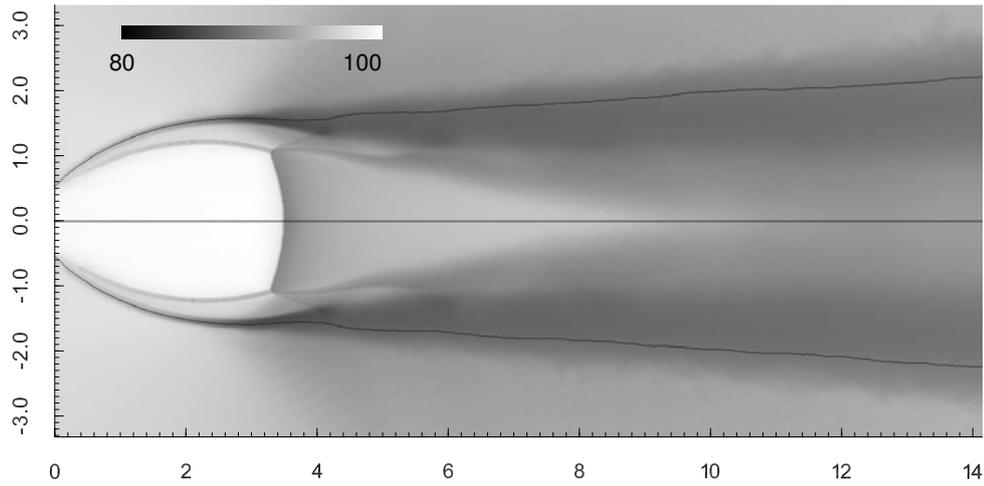
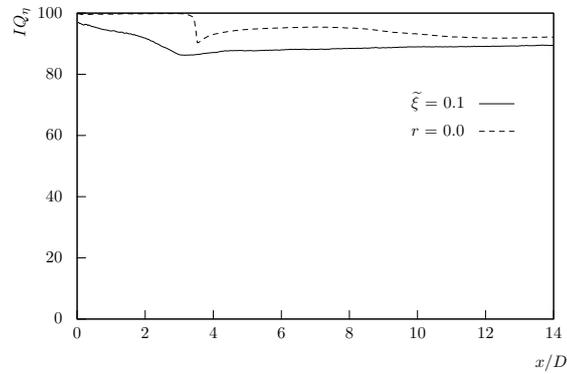
vitesse longitudinale atteint 0.5% tandis que le taux de convergence de sa variance est inférieur à 2%. On notera aussi que la pression (cf. figure 4.4) atteint un état stationnaire. Nous pouvons ainsi considérer que la base de donnée est suffisamment convergée.

4.3.2 Vérification de la résolution spatiale

La résolution spatiale est quantifiée à partir de plusieurs indicateurs déterminés *a posteriori*. Concernant cette vérification, nous nous concentrons sur le cas le plus résolu, i.e. le cas “jet-2”. Dans un premier temps, les différentes échelles de longueur et de temps de la turbulence sont estimées et reportées dans le tableau 4.3. L'échelle de Kolmogorov l_η est estimée à l'aide de la relation $l_\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ et la micro échelle de Taylor l_λ elle est estimée à partir de $l_\lambda = \sqrt{10\nu k/\epsilon}$ avec k l'énergie cinétique turbulente, ϵ son taux de dissipation et ν la viscosité cinématique du fluide. L'échelle de temps de Kolmogorov t_η est déterminée par $t_\eta = (\nu/\epsilon)^{1/2}$. Dans cet écoulement transitionnel, la turbulence se développe naturellement. Il est donc attendu que les plus petites échelles ne soient pas encore créées tandis que la gamme d'échelles dynamiquement actives sont correctement capturées. Les plus petites échelles présentes sont donc susceptibles d'être bien capturées par le maillage. L'échelle de temps de Kolmogorov est clairement capturée par le pas de temps. Par ailleurs, la réelle représentativité de l'échelle spatiale de Kolmogorov vis à vis des processus dissipatifs reste aujourd'hui encore le sujet de discussion. Le niveau de résolution de la simulation vient d'être analysé du point de vue des différentes échelles caractéristiques de la turbulence. Il existe d'autres mesures de la résolution de simulation numérique pour des écoulements turbulents telles que les indices de qualité proposés par Klein [113] ou bien par Celik et al. [114]. Nous avons donc étudié un indice basé sur la résolution du maillage et l'échelle de Kolmogorov noté IQ_η . L'expression de cet indice est donnée par la relation suivante [114] :

$$IQ_\eta = \frac{1}{1 + \alpha_\eta \left(\frac{l_\eta}{\Delta}\right)^{-m}} \times 100 \quad (4.2)$$

où $\alpha_\eta = 0.05$ et $m = 0.5$. Δ est le pas du maillage et l_η l'échelle de Kolmogorov. La figure 4.5(a) montre le champ de l'index de qualité et la figure 4.5(b) représente deux

(a) Champ de l'index de qualité IQ_η 

(b) Profils de l'index de qualité

FIGURE 4.5 – Champ de l'index de qualité IQ_η superposé aux iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.1$ et $r = 0.0$ (a) et profils de IQ_η sur les iso-lignes $r = 0.0$ et $\xi = 0.1$ (b).

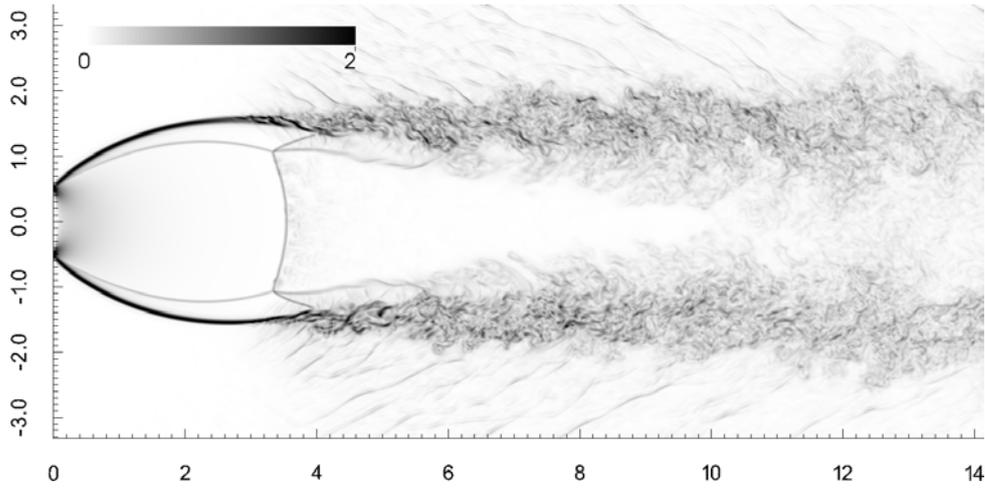
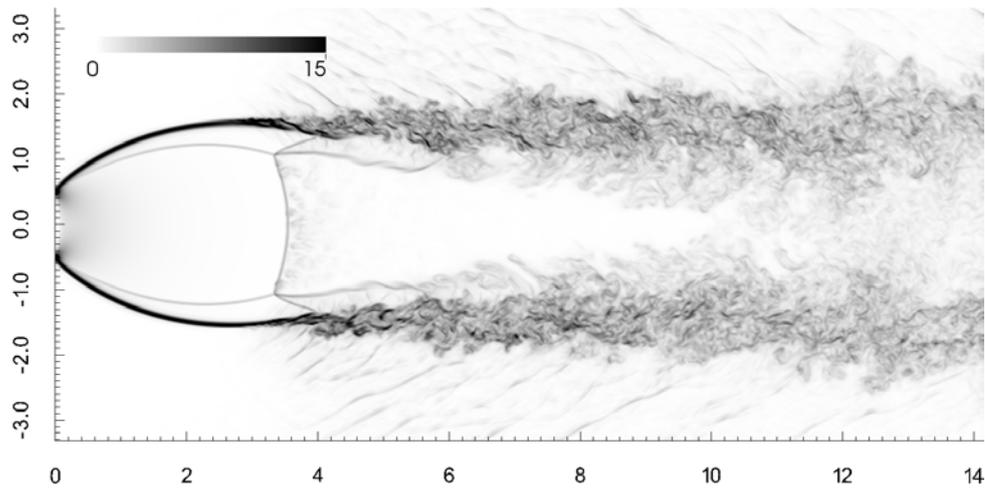
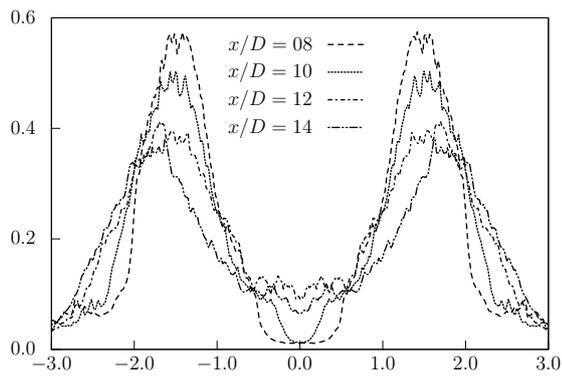
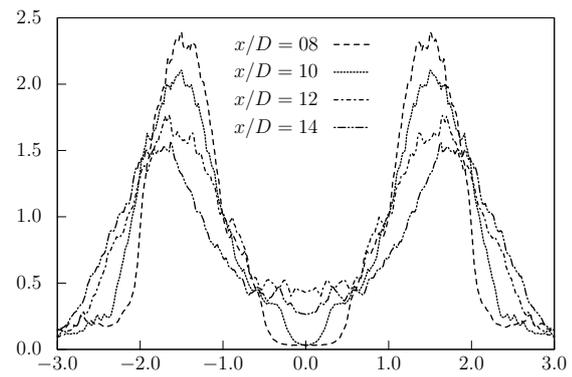
(a) Champ de la viscosité ν_{SGS}^{SG}/ν (Smagorinsky).(b) Champ de la viscosité ν_{SGS}^{SF}/ν (Fonction de structure).(c) Profils radiaux de la viscosité ν_{SGS}^{SG}/ν .(d) Profils radiaux de la viscosité ν_{SGS}^{SF}/ν .

FIGURE 4.6 – Champs estimés a posteriori du rapport de la viscosité de sous-maille et de la viscosité moléculaire ν_{SGS}/ν obtenus avec le modèle de Smagorinsky (a) et avec le modèle fonction de structure (b) ainsi que des profils de ce même rapport obtenus à différentes distances de l'injection pour le modèle de Smagorinsky (c) et pour le modèle à fonction de structure (d).

profils longitudinaux l'un obtenu pour $r/D = 0$ et l'autre sur l'iso-ligne $\tilde{\xi} = 0.1$. Par construction, la valeur de cet indicateur reste limitée entre 0 et 100. Plus la valeur de celui-ci est élevée, plus la résolution de la simulation est importante. Pour notre simulation, cet indice est systématiquement supérieur à 85. Ce qui correspond à des niveaux de résolution extrêmement importants. Notons également que la valeur de IQ_η qui serait associée à $\Delta = l_\eta$ n'est que de 95.

Nous procédons ensuite à une analyse *a posteriori* de la résolution spatiale en évaluant une possible contribution de sous maille négligée via le calcul d'une viscosité turbulente par post-traitement. Pour cela, nous utilisons deux modèles de sous-maille. Le premier modèle utilisé est le modèle classique défini par Smagorinsky : $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SG}}(\mathbf{x}, t) = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij}}$. La constante C_s du modèle est prise égale à 0.1 (valeur usuelle pour des écoulements compressibles cisaillés). Ensuite, nous utilisons le modèle élaboré par Métails et Lesieur basé sur la fonction de structure d'ordre deux [115]. Ce modèle repose sur la relation entre le spectre d'énergie locale et la fonction de structure de la vitesse du deuxième ordre $F_2(\mathbf{x}, t) = \langle ||u(\mathbf{x}, t) - u(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t)||^2 \rangle$. Il peut être interprété comme un modèle basé sur l'énergie à la coupure exprimé dans l'espace physique. La viscosité turbulente modélisée prend la forme $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SF}} = 0.105K_0^{-3/2}\Delta\sqrt{F_2(\mathbf{x}, t)}$ avec $K_0 = 1.4$ la constante de Kolmogorov. La figure 4.6(a) montre le champ du rapport $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SG}}/\nu$ et la figure 4.6(b) celui de $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SF}}/\nu$. La figure 4.6(c) montre les profils radiaux du rapport $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SG}}/\nu$ et la figure 4.6(d) ceux de $\nu_{\text{SGS}}^{\text{SF}}/\nu$. En ce qui concerne la performance de cette fermeture basée sur la fonction de structure, il a été montré qu'il est moins dissipatif que le modèle de Smagorinsky pour les écoulements isentropiques. Ceci se traduit par une prédiction plus précise de la zone inertielle de la turbulence comme indiqué par la référence [115]. Par contre, pour les écoulements cisaillés comme ceux considéré dans cette étude, il est communément admis qu'il peut aussi être excessivement dissipatif [116] de telle sorte qu'il a été modifié pour aboutir au modèle de fonction de structure filtrée (FSF), qui améliore son comportement dans les écoulements cisaillés turbulents [117]. Le rapport ν_{SGS}/ν est suffisamment faible pour statuer que les caractéristiques moléculaires sont correctement restituées par notre simulation numérique.

Enfin, une analyse spectrale est réalisée. Dans ce but, nous définissons la fonction des corrélations croisées $R_{ij}(\mathbf{x}) = u_i(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x} + \mathbf{dx})$ et $E_{ij}(\boldsymbol{\kappa})$ la transformée de Fourier de $R_{ij}(\mathbf{x})$. Par définition, on a :

$$E_{ij}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{x}} R_{ij}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (4.3)$$

avec $\boldsymbol{\kappa}$ le vecteur des nombres d'ondes, et inversement, on peut exprimer la corrélation croisée de la manière suivante :

$$R_{ij}(\mathbf{x}) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{+i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{x}} E_{ij}(\boldsymbol{\kappa}) d\boldsymbol{\kappa} \quad (4.4)$$

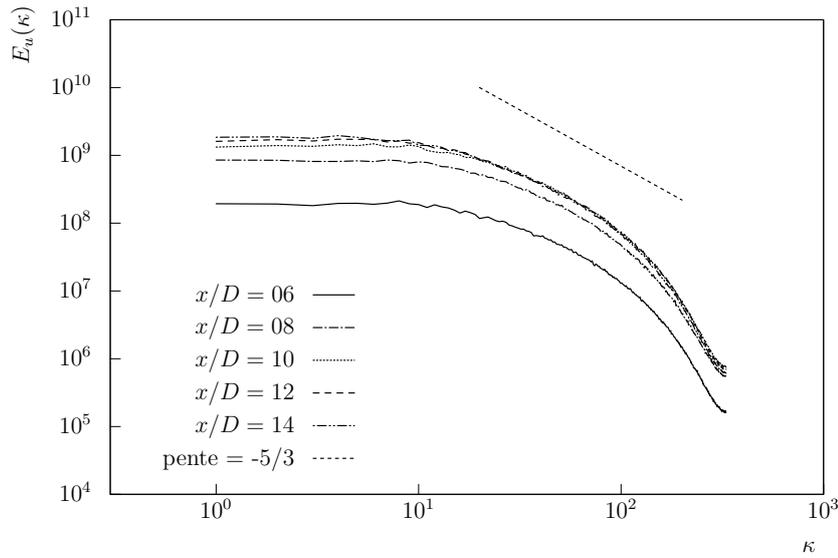


FIGURE 4.7 – Spectre de l'énergie cinétique turbulente tracé en fonction du nombre d'onde κ [m^{-1}].

Maintenant, si nous prenons $i = j$ et $\mathbf{x} = 0$, nous obtenons l'énergie cinétique de turbulence

$$k = \frac{1}{2}R_{ii}(0) = \frac{1}{2}\overline{u'_i u'_i} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}E_{ii}(\boldsymbol{\kappa})d\boldsymbol{\kappa} \quad (4.5)$$

Néanmoins, cette expression dépend toujours de la direction. Afin de supprimer cette dépendance à l'orientation des modes de Fourier, nous intégrons $\boldsymbol{\kappa}$ sur la surface d'une sphère $S(\boldsymbol{\kappa})$:

$$k = \int_{-\infty}^{+\infty} \oint \frac{1}{2}E_{ii}(\boldsymbol{\kappa})DS(\boldsymbol{\kappa})d\boldsymbol{\kappa} \quad (4.6)$$

avec

$$E(\boldsymbol{\kappa}) = \oint \frac{1}{2}E_{ii}(\boldsymbol{\kappa})DS(\boldsymbol{\kappa}) \quad (4.7)$$

Finalement,

$$k = \frac{1}{2}\overline{u'_i u'_i} = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\boldsymbol{\kappa})d\boldsymbol{\kappa} \quad (4.8)$$

$E(\boldsymbol{\kappa})$ représente la fonction de répartition de l'énergie pour une certaine valeur du nombre d'onde $\boldsymbol{\kappa}$. La figure 4.7 affiche les spectres d'énergie cinétique turbulente calculées à plusieurs positions longitudinales de l'écoulement et dans la couche du cisaillement. Tous les spectres présentent un comportement attendu de jet transitionnel à Reynolds modéré avec une pente comprise entre -1 et -2 couvrant un peu moins de deux décades dans le domaine inertiel. On observe par ailleurs l'absence d'accumulation d'énergie artificielle aux plus petites échelles résolues.

La figure 4.8 présente un champ instantané des régions où les différents schémas sont activés pour le maillage le plus fin par le critère de détection de choc présenté dans la

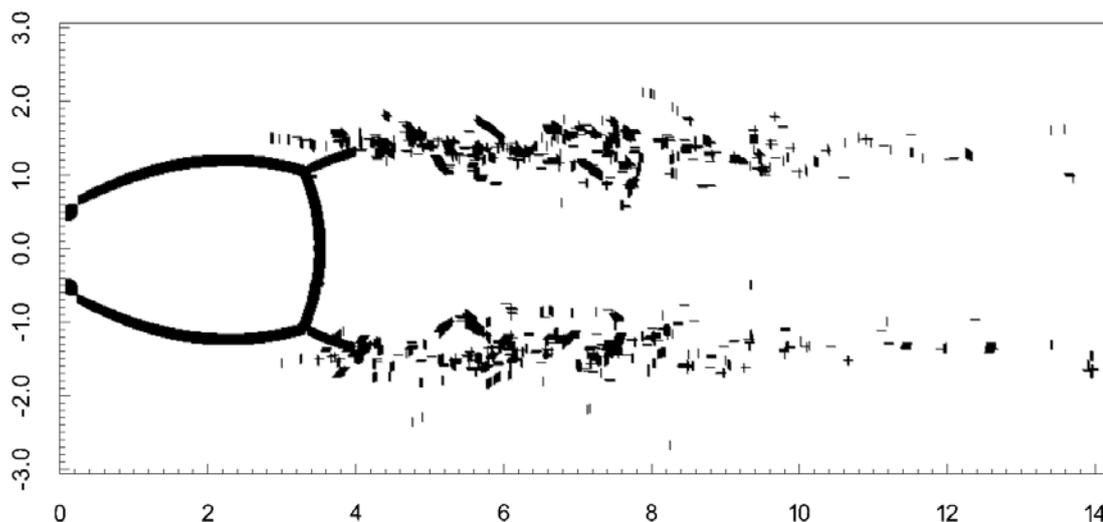


FIGURE 4.8 – Visualisation instantanée de la zone d’activation de la pondération non linéaire du schéma WENO.

partie [3.3.1]. Le schéma servant à capturer les chocs s’active principalement le long du choc *en tonneau*, autour du disque de Mach ainsi que sur le choc réfléchi. Il ne s’active que sporadiquement dans la zone de fort cisaillement qui contient la couche de cisaillement externe ainsi que celle issue du point triple. La pondération non-linéaire du schéma WENO7 ne se déclenche quasiment plus à partir de l’abscisse $x/D = 10$. L’influence de ce critère sur la robustesse de la simulation a été étudiée. La valeur retenue est celle permettant de minimiser le déclenchement du schéma WENO7 afin de minimiser la viscosité numérique introduite par le schéma tout en conservant la plus grande robustesse possible.

4.4 Comparaison des deux niveaux de résolution

Nous allons ici comparer les deux niveaux de résolution “jet-1” et “jet-2”. Nous rappelons ici que le maillage du cas “jet-1” comprend 35 millions de points alors que celui du cas “jet-2” en compte 177 millions. Le deuxième calcul correspond à un raffinement d’environ deux de la taille de maille. Tous les paramètres concernant les deux niveaux de raffinement sont exposés dans le tableau 4.1.

La figure 4.9 compare entre eux différents champs instantanés (nombre de Mach, pseudo-schlieren basé sur la masse volumique et la vorticit ). Les parties supérieures des champs correspondent au maillage fin et les parties inférieures au maillage plus grossier. Ces figures permettent, dans un premier temps, d’observer qualitativement les diff rences entre les deux maillages utilis s.

Sur le champ de Mach 4.9(a) ainsi que sur le schlieren 4.9(b), nous constatons que la structure de choc en amont  volue peu lorsque le maillage est raffini . Le maillage “jet-1”

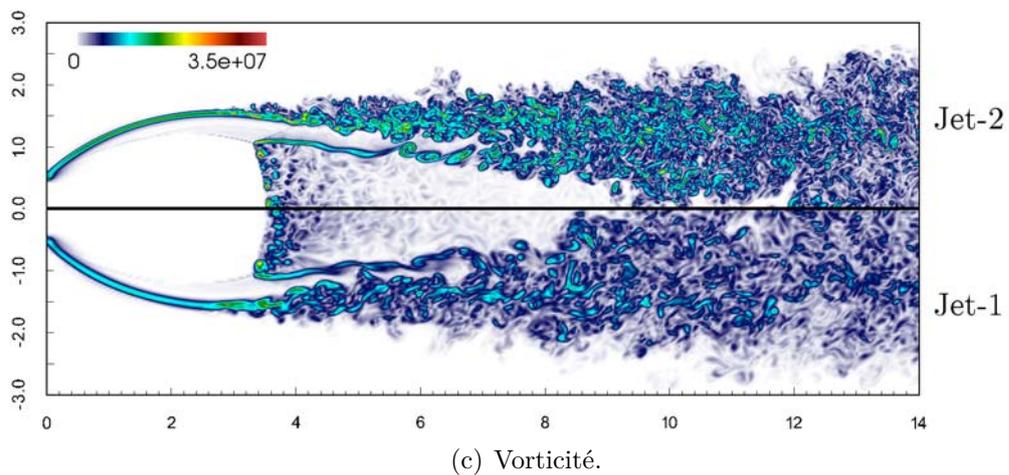
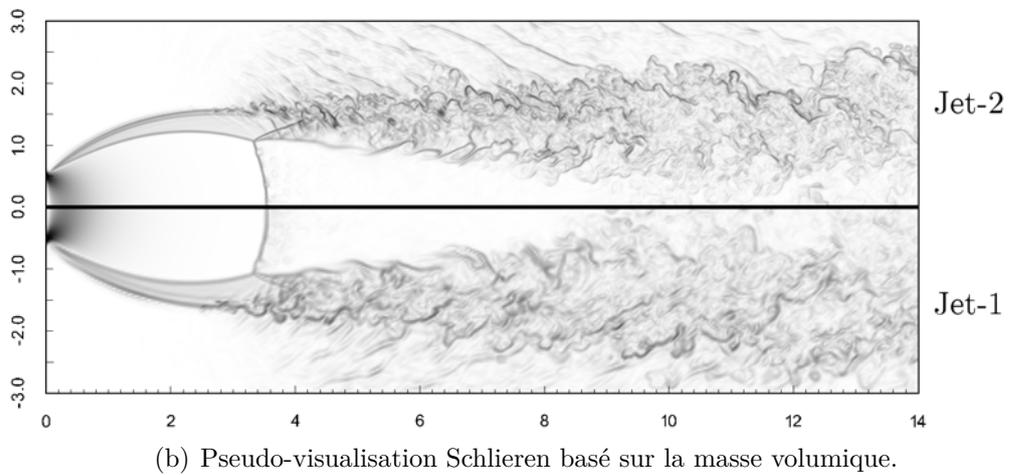
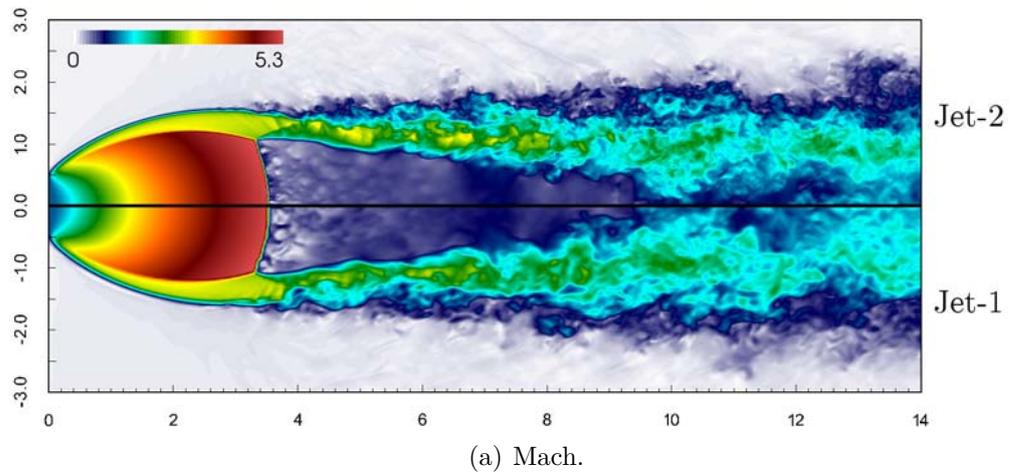


FIGURE 4.9 – Analyse de l’influence du niveau de résolution sur la structure du jet : cartographie des champs instantanés du nombre de Mach (a), d’un schlieren basé sur la masse volumique (b) et de la vorticité (c). Les parties supérieures correspondent au “jet-2” et les parties inférieures au “jet-1”.

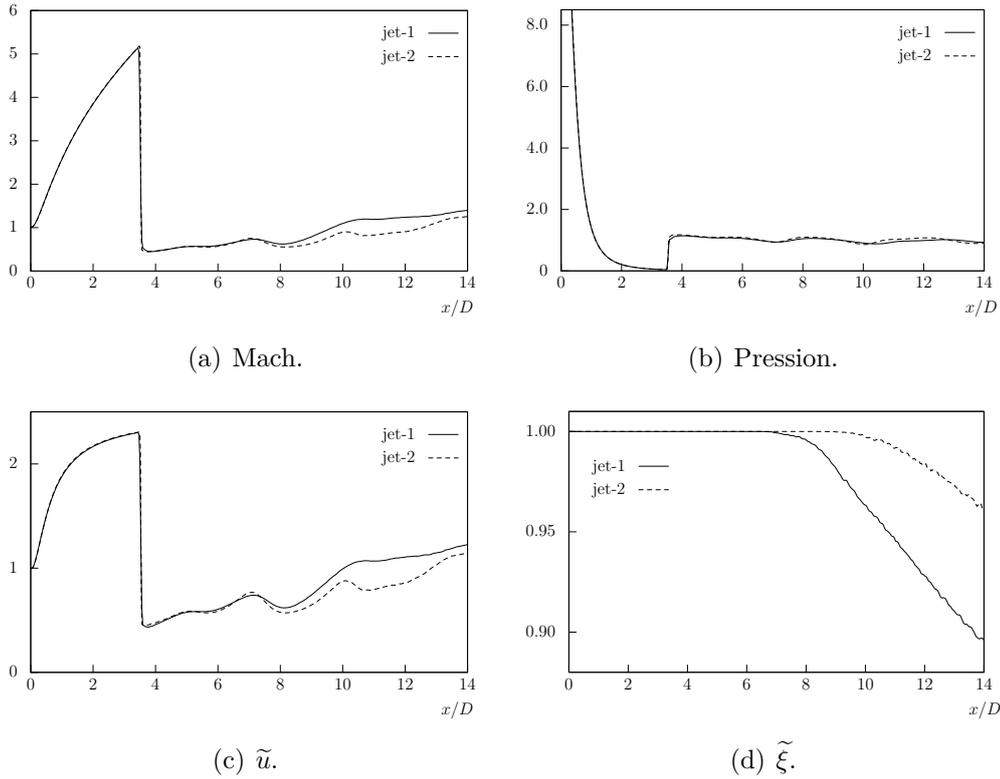


FIGURE 4.10 – Analyse de l’influence du niveau de résolution sur la structure du jet : profils moyens axiaux du nombre de Mach (a), de la pression adimensionnée $P^* = P/P_{amb}$ (b), de la vitesse adimensionnée $\tilde{u}^* = \tilde{u}/u_{inj}$ (c) et de la fraction de mélange $\tilde{\xi}$ (d).

la capture très bien (notamment la position et la hauteur du disque de Mach qui sont identiques pour les deux simulations). Au niveau du disque de Mach, la seule différence notable est l’épaisseur visuelle de celui-ci. En revanche, en aval du disque de Mach, les différences sont plus remarquables, en particulier au niveau de la couche de mélange issue du point triple. Celle-ci atteint l’axe du jet plus tardivement dans le cas du maillage fin.

La figure 4.9(b) compare un schlieren basé sur la masse volumique. Cette grandeur est basée sur les gradient de masse volumique. La différence entre ces deux champs vient exclusivement du fait que les gradients sont mieux capturés par le maillage fin. Ce qui procure au schlieren issu du maillage fin une impression de plus grande netteté vis à vis de celui issu du maillage plus grossier. C’est notamment visible sur le choc réfléchi et sur le choc *en tonneau*. C’est également perceptible au niveau des grosses structures dans le sillage du disque de Mach.

La figure 4.9(c) permet de distinguer un plus large panel de structures résolues ainsi que des différences de niveaux de vorticit  sur la p riph rie externe du jet. A cet endroit, la turbulence commence   se d velopper. Celle-ci est mieux captur e sur le maillage fin. Cet effet a des r percussions sur toute la turbulence en aval. La figure 4.10 montre les profils

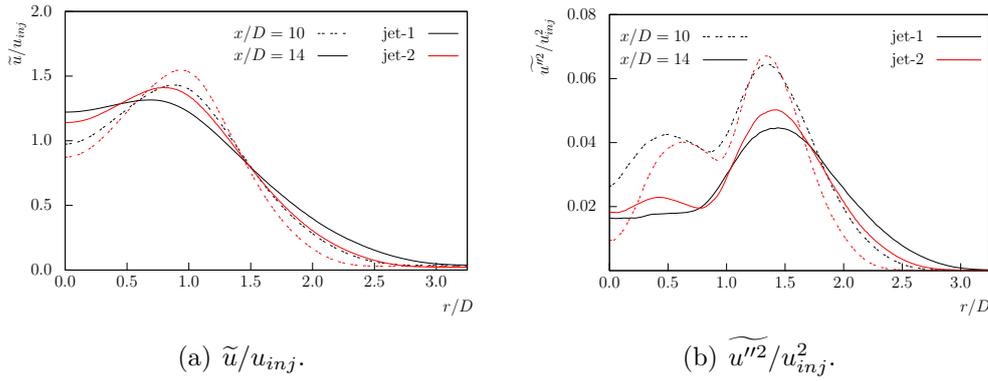


FIGURE 4.11 – Analyse de l’influence du niveau de résolution sur la structure du jet : profils moyens radiaux de la vitesse longitudinale adimensionnée $\tilde{u}^* = \tilde{u}/u_{inj}$ (a) et de la variance adimensionnée de la vitesse longitudinale \tilde{u}'^2/u_{inj}^2 (b).

moyens axiaux du nombre de Mach 4.10(a), de la pression adimensionnée 4.10(b), de la vitesse longitudinale adimensionnée 4.10(c) ainsi que d’un scalaire passif transporté 4.10(d). Les profils de pression obtenus pour les deux niveaux de résolution sont très similaires. La pression ne semble pas être impactée par le niveau de résolution du calcul. En revanche, ce n’est pas le cas de la vitesse ni du nombre de Mach. En effet, la longueur de la poche subsonique en aval du disque de Mach est plus longue dans le cas du maillage fin. La fin de la poche subsonique correspond à une distance $x/D = 13$ pour le maillage fin alors que l’écoulement redevient supersonique à une distance de $x/D = 11$ pour la simulation conduite sur le maillage plus grossier. Comme mentionné précédemment, ceci vient du fait que la couche de mélange issue du point triple rejoint l’axe plus loin dans le cas du maillage fin. C’est également visible sur le profil du scalaire passif. La décroissance de ce scalaire commence à partir de $x/D = 9$ pour le cas “jet-2”, alors qu’elle intervient à $x/D = 7$ pour le cas “jet-1” (cf. fig. 4.10(d)).

La figure 4.11 compare les profils moyens radiaux de la vitesse longitudinale et de sa variance à différentes distances de l’injection. Une des premières observations que nous pouvons faire est la réduction de l’épaisseur des couches cisailées interne et externe. Sur le graphe 4.11(a), nous observons cet effet dans le plan $x/D = 10$. Par contre, cet effet n’est quasiment plus perceptible pour le plan $x/D = 14$. Au niveau de la variance, les effets les plus importants se trouvent proche de l’axe du jet pour la distance $x/D = 10$. Ces niveaux redeviennent du même ordre de grandeur au delà de $x/D = 14$.

Nous venons de comparer deux niveaux de résolution pour le jet fortement sous-détendu d’air dans l’atmosphère. La structure de choc en amont du disque de Mach est bien capturée par les deux maillages. Une différence notable est observé en terme de capture des instabilités le long de la périphérie du jet, soulignée par le champ de vorticit . La croissance de ces instabilit s pilote le d veloppement de la turbulence dans le domaine

en aval du disque de Mach. L'effet le plus visible de la différence dans la capture du développement de ces instabilités est la réduction de la longueur de la poche subsonique pour le cas "jet-1". Nous allons dorénavant nous concentrer sur la résolution "jet-2" pour caractériser cet écoulement.

4.5 Etude de la structure globale du jet

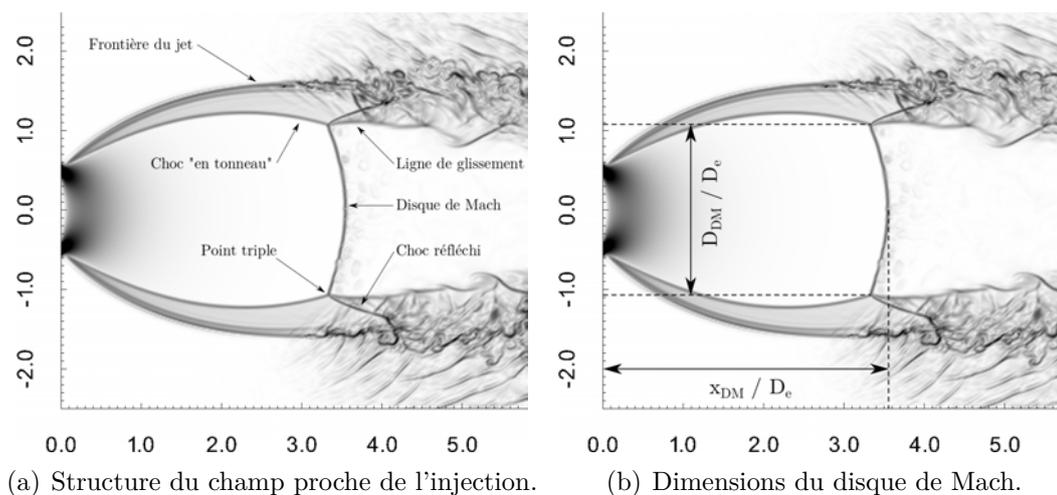


FIGURE 4.12 – Configuration du champ proche.

Nous allons étudier dans cette partie la structure du jet fortement sous-détendu axisymétrique se développant à travers un orifice dans une atmosphère de repos. Celle-ci est présentée sur la figure 4.12(a). Toute la structure compressible est clairement identifiée [118]. Le développement des instabilités sur la frontière du jet et leurs interactions avec le choc réfléchi sont également observables dans la figure 4.12(a). La différence de pression entre le jet issu du réservoir et l'atmosphère au repos fait que l'écoulement va se détendre et s'accélérer (Fig. 4.13(a) et 4.13(d)). Les ondes de détente naissant au niveau de l'injection se réfléchissent à la périphérie du jet en ondes de compression. Ces ondes de compression coalescent créant le choc dit *en tonneau* délimitant une zone supersonique. La réflexion de ce choc incident n'est pas régulière et un disque de Mach apparaît dans le champ proche du jet. Juste en aval du disque de Mach, l'écoulement est subsonique, alors qu'il reste supersonique en aval du choc réfléchi. Le point triple relie diverses discontinuités et devient l'origine d'une nouvelle ligne de glissement, ce qui donne naissance à une couche de cisaillement supersonique. En raison de la détente du gaz, la pression (Fig. 4.13(a)) et la température (Fig. 4.13(b)) diminuent de manière significative tandis que la vitesse et le nombre de Mach augmentent (Fig. 4.13(c) et Fig. 4.13(d)).

La chute du nombre de Mach sur la figure 4.13(c) permet de déterminer l'emplacement

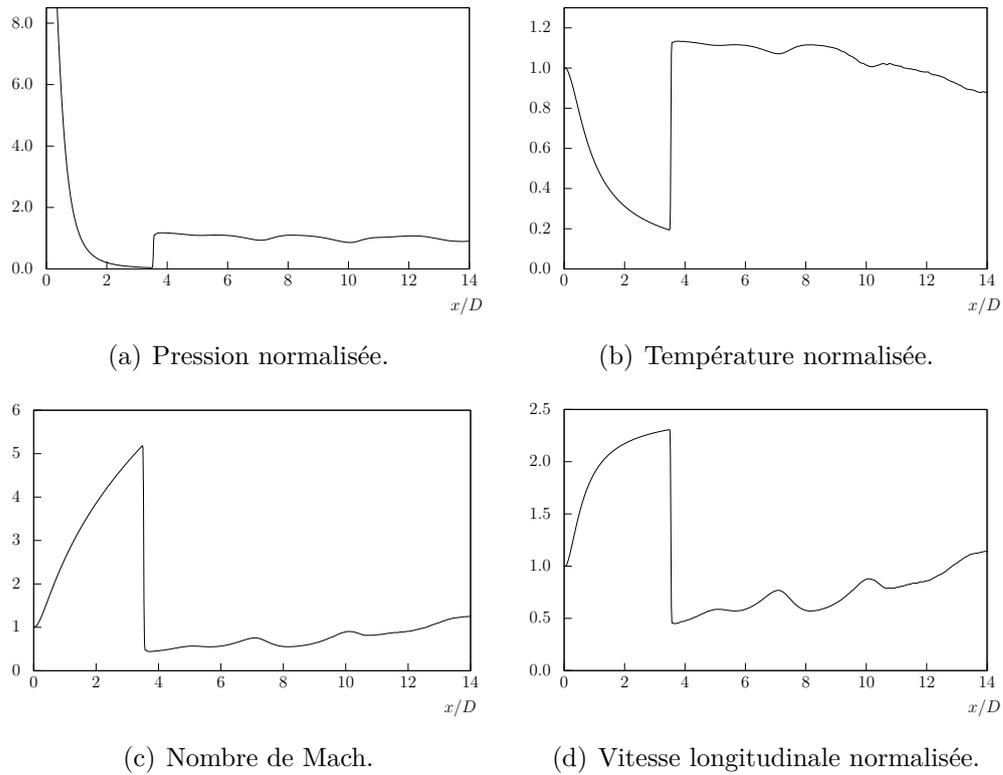


FIGURE 4.13 – Profils axiaux de la pression normalisée, de la température normalisée, du nombre de Mach et de la vitesse axiale normalisée.

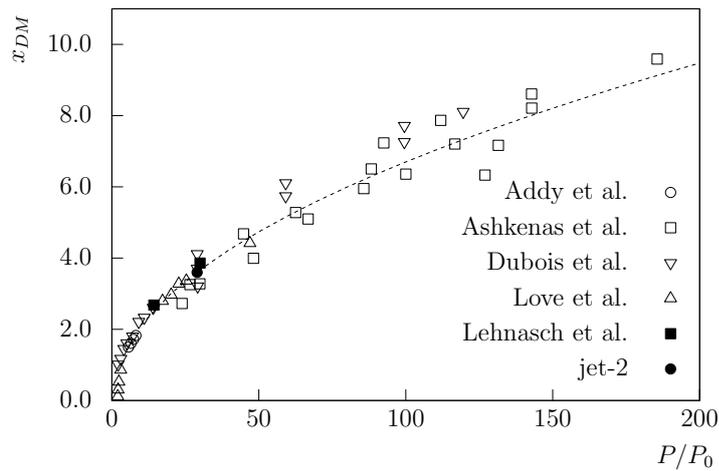


FIGURE 4.14 – Position adimensionnée du disque Mach, la courbe en pointillé correspond à la corrélation empirique de Ashkenas et Sherman [4].

du disque de Mach à environ $x/D = 3,55$. Cette position du disque de Mach est comparée avec la valeur obtenue à l'aide de la corrélation empirique de Ashkenas et Sherman [4] $x_{DM}/D = 0,67\sqrt{P_0/P_a}$. Celle-ci conduit à une estimation similaire : $x_{DM}/D = 3,60$. La figure 4.14 regroupe les positions du disque de Mach issues de plusieurs études expérimentales et numériques de jets fortement sous-détendus. Celle-ci confirme le bon accord entre nos résultats numériques et les résultats antérieurs. La hauteur du disque de Mach est également estimée à l'aide de la corrélation de Antsupov [12] donnant $d_{DM}/D = 2,2$. Les résultats numériques sont là aussi très proches des données issues de la corrélation.

Nous avons également évalué l'angle que fait le choc réfléchi au point triple avec l'axe du jet. Il est mesuré à $\beta = 27^\circ$. Vuorinen et al. [22] ainsi que Hamzehloo et al. [119] observent des angles β du même ordre de grandeur dans leurs simulations. Hamzehloo et al. [119] précisent également que l'angle du choc réfléchi décroît en fonction du NPR jusqu'à atteindre une valeur limite de $\beta = 28^\circ$ pour un NPR supérieur à 10. Nous avons également évalué l'épaisseur de la couche de cisaillement δ définie par la hauteur entre le choc réfléchi et la ligne de glissement issue du point triple (cf. figure 4.12(b)). Nous trouvons une épaisseur $\delta/D = 0.23$. Il est établi dans la littérature que cette grandeur décroît lorsque le NPR augmente [22, 119].

En aval du disque de Mach, la pression se stabilise autour de la pression atmosphérique tandis que l'écoulement réaccélère progressivement et redevient supersonique à une distance à l'injecteur voisine de $x/D = 13$. La figure 4.16 reporte des comparaisons de profils de vitesse longitudinale de l'écoulement le long de l'axe du jet avec des données expérimentales et numériques [120, 121, 122, 123]. Compte tenu des difficultés liées aux mesures des grandes vitesses dans ce type d'écoulement notamment entre l'injection et le disque de Mach, le profil de vitesse obtenu affiche un accord satisfaisant avec les données expérimentales.

L'adaptation du niveau de la pression statique dans le jet est principalement assurée par le phénomène de forte détente initiale, nous observons ainsi que le jet redevient quasiment isobare au delà du disque de Mach avec un niveau proche de la pression ambiante (cf. figure 4.13(a)). En revanche, les niveaux de pression totale en aval du choc réfléchi sont plus importants (environ 170 000 Pa) qu'en aval du disque de Mach (environ 120 000 Pa) (cf. figure 4.15(d)). En aval du choc réfléchi, nous observons une série de détentes et de compressions successives. Ce comportement, similaire à celui des jets faiblement sous-détendus, est visible sur le champ de la vitesse longitudinale (cf. 4.15(a)).

La figure 4.15(b) illustre l'intensité des effets de masse volumique variable dans la couche de cisaillement et en aval du disque de Mach. Ces effets sont les plus importants dans la couche de mélange naissant du point triple.

La figure 4.17 montre les profils de vitesse adimensionnée longitudinale, radiale et azimutale pour différentes valeurs du paramètres x/D . L'étude des profils de la composante

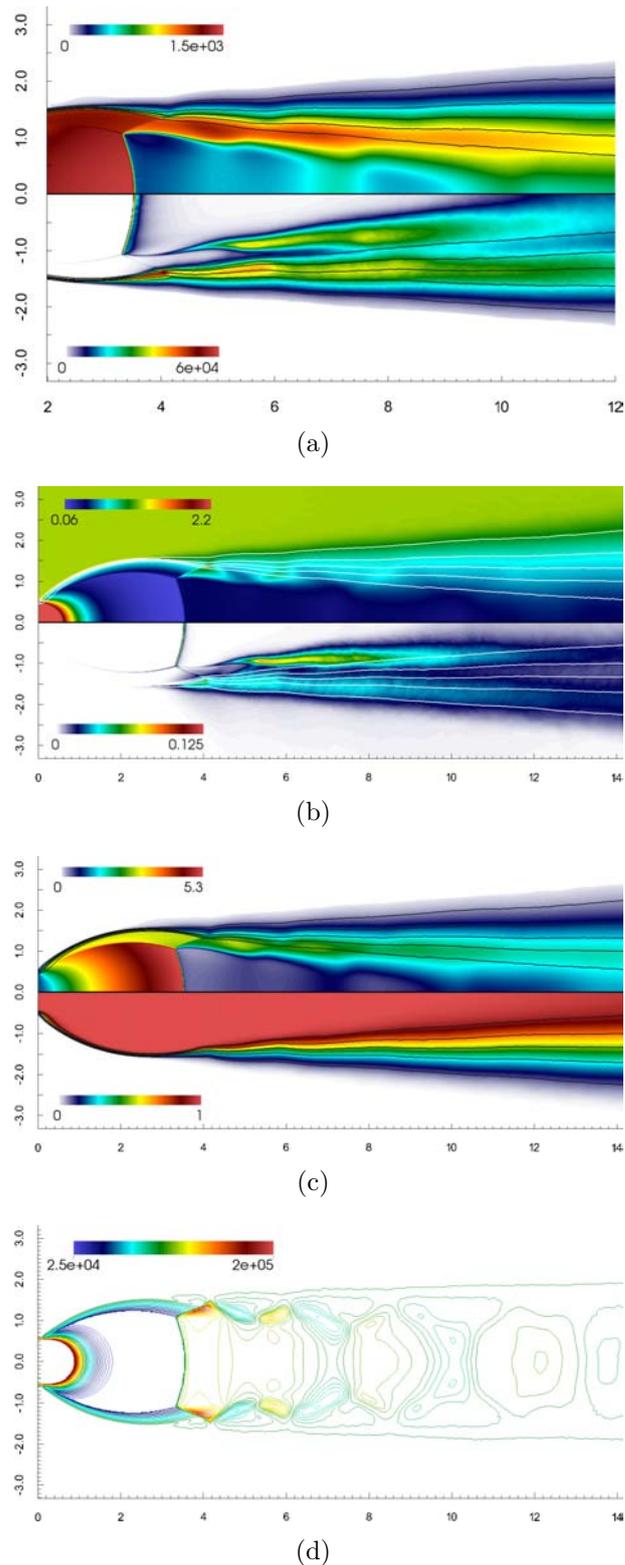


FIGURE 4.15 – Structure moyenne de l'écoulement. (a) : champ moyen de la composante longitudinale de la vitesse \tilde{u} ($m.s^{-1}$) (partie supérieure) et champ de l'énergie cinétique turbulente k ($m^2.s^{-2}$) (partie inférieure); (b) : champ moyen de la masse volumique $\bar{\rho}$ ($kg.m^{-3}$) (partie supérieure) et champ de la variance normalisée $\overline{\rho'^2}/\bar{\rho}^2$ (partie inférieure); (c) : champ moyen de nombre de Mach (partie supérieure) et champ moyen de la fraction de mélange ξ (partie inférieure); (d) : iso-contours de la pression (50 niveaux pris entre 2500 Pa et 2.10^5 Pa).

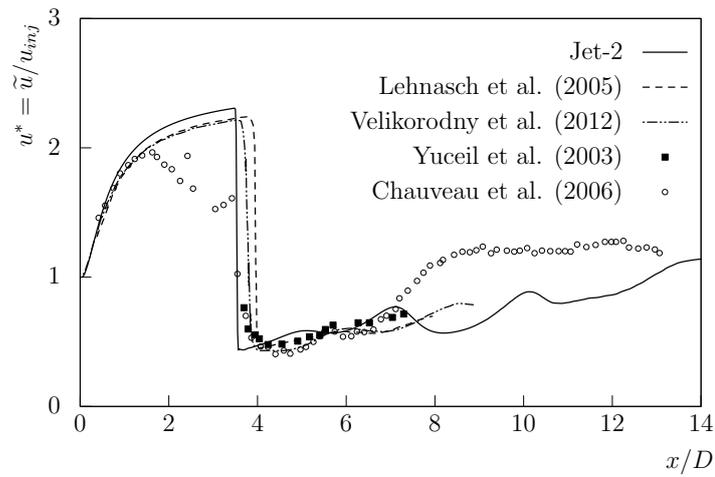
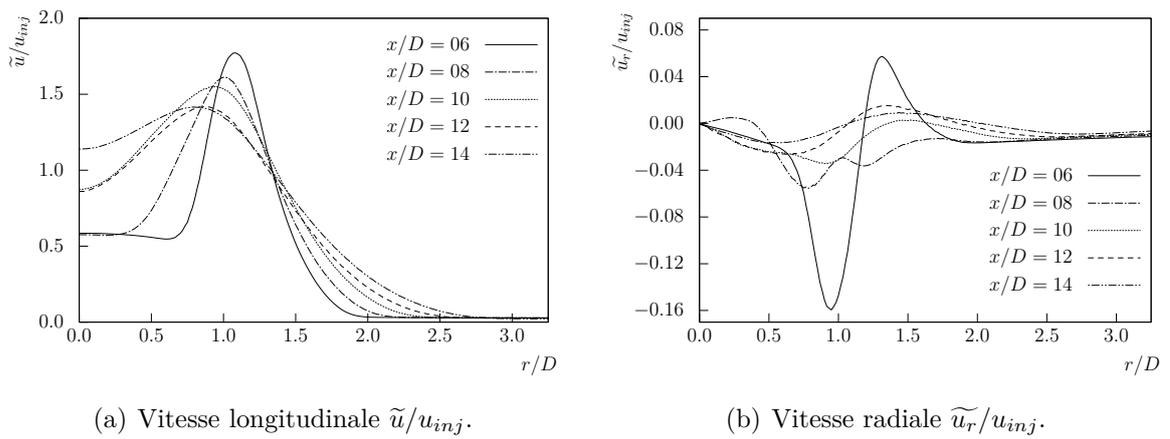
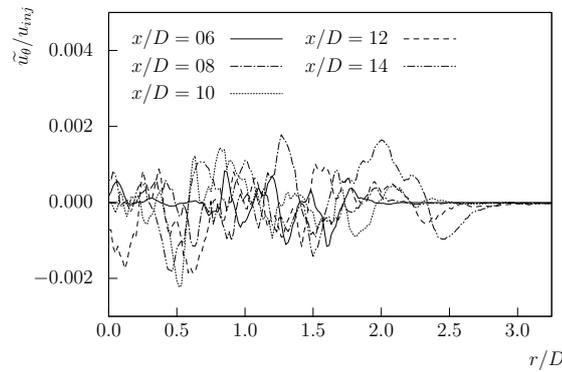


FIGURE 4.16 – Profils axial de la vitesse normalisée $u^* = \tilde{u}/u_{inj}$ sur l'axe du jet, u_{inj} représente la vitesse d'injection du jet.



(a) Vitesse longitudinale \tilde{u}/u_{inj} .

(b) Vitesse radiale \tilde{u}_r/u_{inj} .



(c) Vitesse azimutale \tilde{u}_θ/u_{inj} .

FIGURE 4.17 – Profils radiaux des composantes moyennes de vitesse adimensionnées.

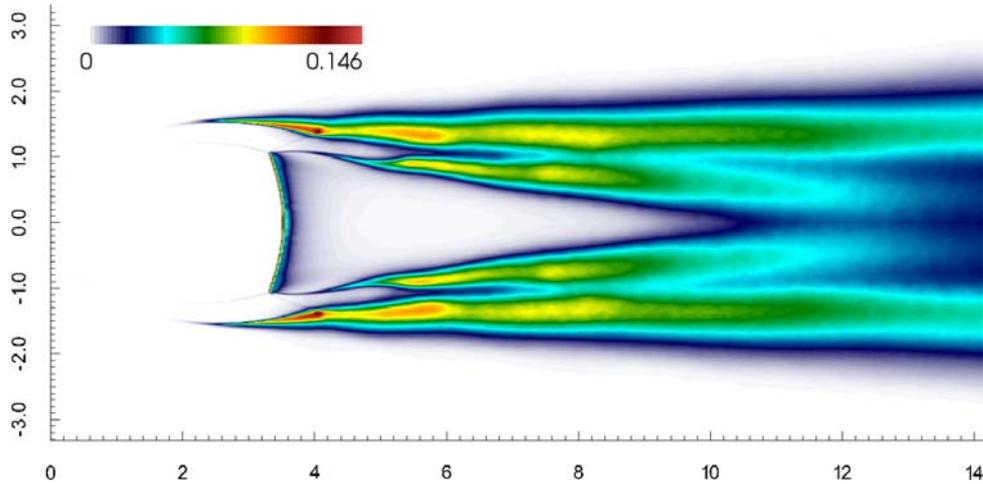


FIGURE 4.18 – Champ de l'énergie cinétique turbulente k/u_{inj}^2 .

longitudinale 4.17(a) nous permet de suivre l'évolution des couches cisillées dans le sillage du disque de Mach. Nous observons deux couches cisillées : la première est la couche de cisaillement externe entre l'atmosphère ambiante et le jet ; la seconde est issue du point triple. Juste en aval du disque de Mach, i.e. $x/D = 6$, les deux couches de mélange sont bien distinctes. Leurs évolutions sont encore décorréées. La couche de mélange interne se situe entre $r/D = 0.75$ et $r/D = 1.1$ tandis que la couche de cisaillement externe se trouve entre $r/D = 1.1$ et $r/D = 2$. Lorsque que l'on s'éloigne du disque de Mach, le point de regroupement des deux couches mélanges, i.e. le point de vitesse longitudinale maximale, se décale vers l'intérieur du jet et l'épaisseur des couches de cisaillement croît. La vitesse azimutale est quasi-nulle en moyenne 4.17(c).

Le développement de la couche de cisaillement extérieure et celui de la couche de cisaillement issue du point triple sont découplés en moyenne jusqu'à une distance de $x/D = 8$, ceci est ainsi visible sur la figure 4.18. L'énergie cinétique turbulente est la plus élevée au niveau de l'impact du choc réfléchi sur la couche de mélange externe. Ceci représente l'un des effets les plus significatifs de l'interaction onde de choc / turbulence à savoir l'amplification des fluctuations turbulentes au travers d'une onde de choc. Un phénomène de génération de vorticit  est  galement observ    la travers  du disque de Mach. Sur cette figure, nous observons  galement une diminution de l' nergie cin tique de turbulence en fonction de la distance   l'injection.

La figure 4.19 reporte les termes diagonaux du tenseur de Reynolds. Nous pouvons dans un premier temps remarquer que les amplitudes ainsi que les profils des contraintes sont diff rents. Cela r v le le caract re anisotrope de la turbulence dans le sillage du disque de Mach. De plus, les niveaux des fluctuations diminuent lorsque l'on s' loigne de l'injection. Les amplitudes sont divis es par deux entre le plan $x/D = 6$ et le plan $x/D = 14$. Enfin, la pr sence des deux couches cisill es est bien d celables sur les deux

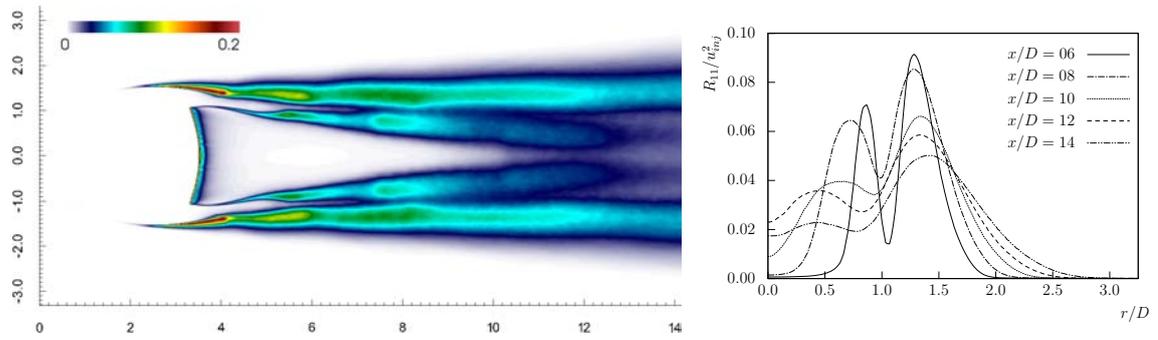
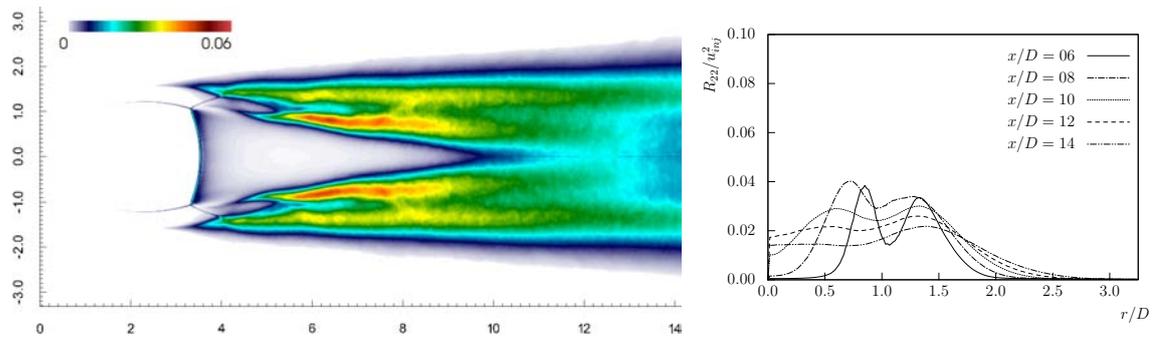
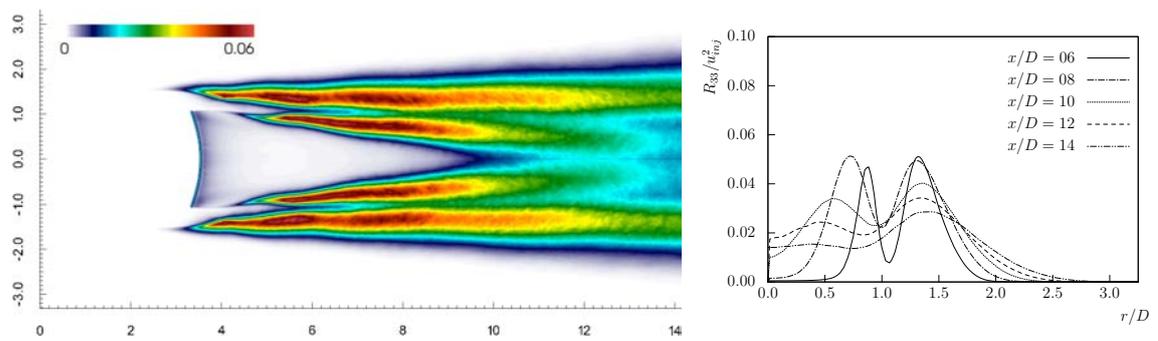
(a) Composante principale longitudinale du tenseur de Reynolds adimensionnée R_{11}^* .(b) Composante principale radiale du tenseur de Reynolds adimensionnée R_{22}^* .(c) Composante principale azimutale du tenseur de Reynolds adimensionnée R_{33}^* .

FIGURE 4.19 – Composantes principales du tenseur de Reynolds adimensionnées.

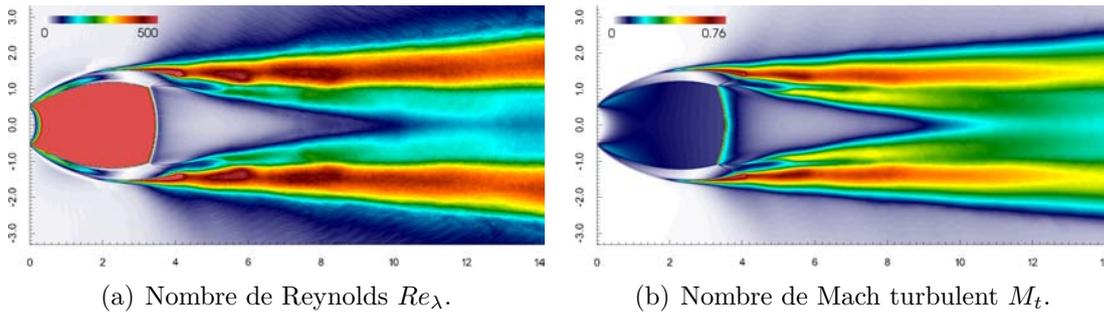


FIGURE 4.20 – Champs des nombres de Reynolds turbulent et de Mach turbulent.

premiers plans d'analyse, *i.e.* $x/D = 6$ et $x/D = 8$. La turbulence est plus intense dans la couche de mélange externe que dans celle issue du point triple. En effet, l'amplitude de R_{11} est toujours plus importante dans la couche externe que dans la couche issue du point triple. Les fluctuations longitudinales sont presque 20% supérieures dans la première comparativement à la seconde dans le plan $x/D = 6$. Néanmoins, la distinction claire entre ces deux couches devient moins visible dans les trois derniers plans d'analyses. En effet, nous n'observons plus deux pics distincts caractérisant les deux couches. Nous pouvons estimer qu'elles ne sont plus découplées dans ces trois derniers plans.

La figure 4.20 révèle le champ du nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor ($Re_\lambda = 2k\sqrt{5}/(\nu\epsilon)$) ainsi que le champ du nombre de Mach turbulent ($M_t = \sqrt{u'_i u'_i}/c$). Le premier nous renseigne sur le degré de développement de la turbulence. Il est à noter que ce nombre de Reynolds est plus important dans la couche cisailée externe que dans la couche de mélange issue du point triple. Le second nous informe sur le degré de compressibilité de la turbulence. Ce dernier peut être interprété comme le rapport entre un temps acoustique τ_a et un temps caractéristique de la turbulence τ_t . L'écoulement étudié ici présente des zones où existent de forts effets de compressibilité. Ils sont surtout présents dans la couche de mélange externe avec des valeurs très élevées atteignant 0.76. Cette compressibilité reste importante jusqu'en sortie du domaine d'étude.

Les profils de l'échelle de Taylor L_λ et de l'échelle de Kolmogorov L_η sont reportés sur la figure 4.21. La micro échelle de Taylor est considéré comme la frontière entre le domaine inertiel et le domaine dissipatif. Nous remarquons que cette échelle est plus faible au centre de la couche de mélange ce qui constitue la zone où la turbulence est la plus développée. Nous constatons également que le pas du maillage est bien inférieur à cette échelle. Celle-ci est donc capturé par le maillage. L'échelle de Kolmogorov définie la plus petite échelle présente dans les écoulements turbulents. A cette échelle, la viscosité du fluide dissipe complètement les tourbillons transformant leur énergie cinétique en chaleur. Concernant cette seconde échelle, elle est également la plus faible au centre de la zone cisailée.

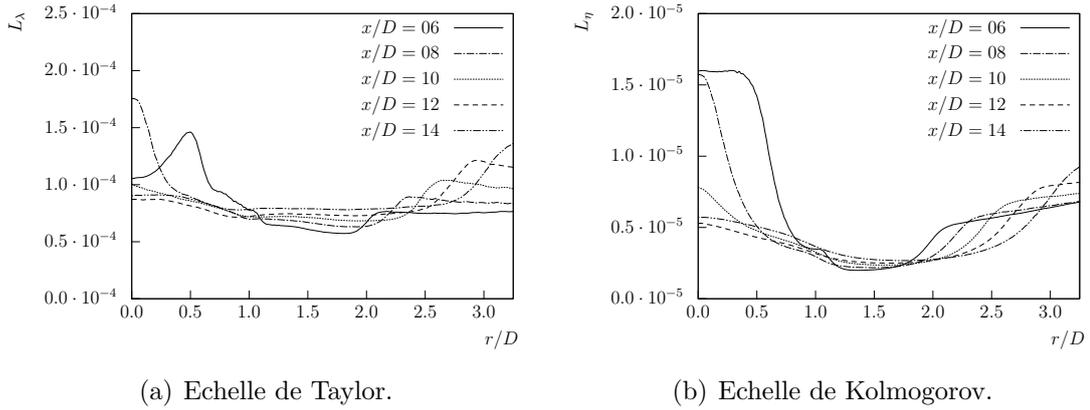


FIGURE 4.21 – Profils des échelles caractéristiques de la turbulence.

La figure 4.22(a) présente une iso-surface du traceur passif ξ qui montre une vue d'ensemble du mélange en aval du disque de Mach. Elle permet également de visualiser le développement des instabilités sur la périphérie de jet. Les iso-surfaces instantanées de scalaire passif sont caractérisées par des niveaux de plissements importants.

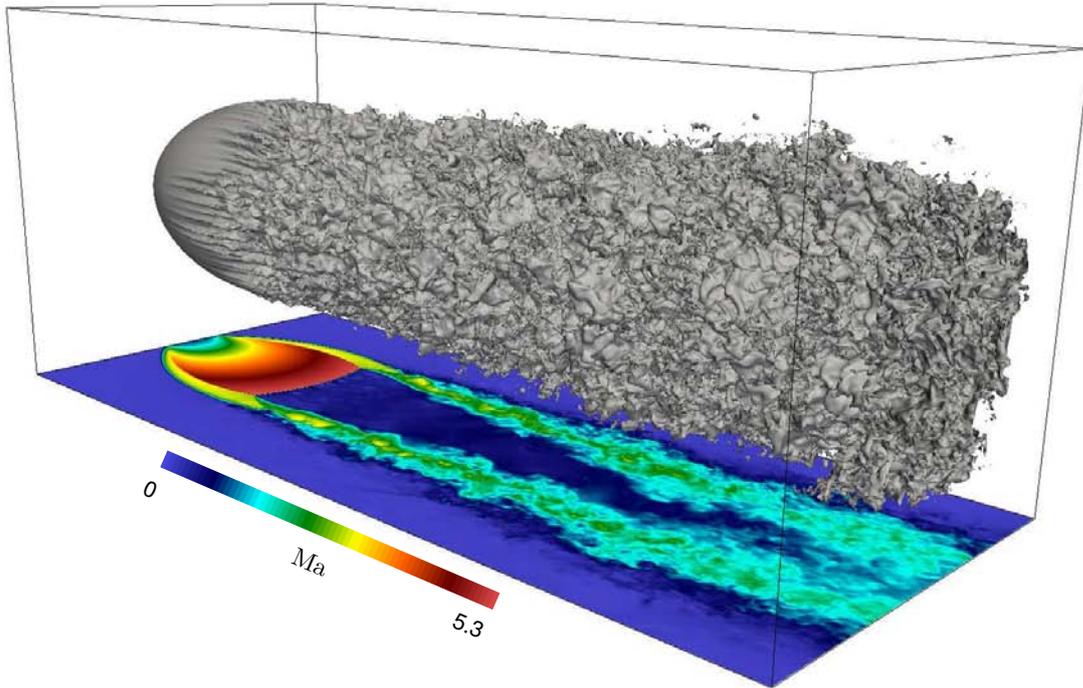
La figure 4.22(b) représente une iso-surface du critère Q . Ce critère souligne la richesse topologique de l'écoulement ainsi que l'activité de la turbulence dans cette région. Il révèle également un écoulement turbulent complexe présentant des structures turbulentes ressemblant à des vers tourbillonnaires (“worms”).

4.5.1 Etude de l'anisotropie du jet

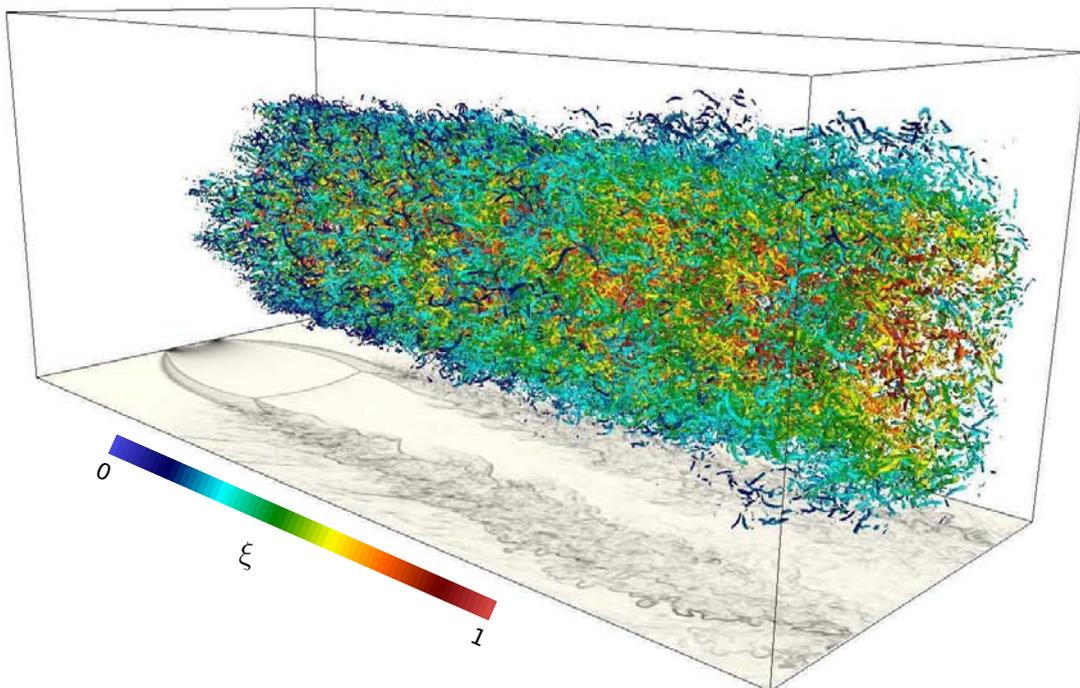
Nous allons ici nous intéresser à l'anisotropie de la turbulence dans ce type de jet compressible. Pour cela, nous définissons le tenseur déviateur du tenseur des contraintes de Reynolds :

$$\tilde{b}_{ij} = \frac{\overline{\rho u_i'' u_j''}}{\overline{\rho u_i'' u_i''}} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (4.9)$$

Ce tenseur, classiquement nommé tenseur d'anisotropie, mesure le degré d'anisotropie des contraintes de Reynolds. La cartographie des invariants de ce tenseur illustre la dynamique des écoulements complexes liée aux chocs et leurs interactions avec les couches cisillées et la turbulence. Par construction, le premier invariant de ce tenseur, *i.e.* sa trace, noté I_b , est nul. Ce tenseur peut donc être étudié à l'aide de ces seuls invariants d'ordre 2 ($II_b = b_{ij} b_{ji}$) et d'ordre 3 ($III_b = b_{ik} b_{kj} b_{ji}$). Le domaine de variation des valeurs des invariants du tenseur \tilde{b}_{ij} est borné dans le plan (II_b, III_b) . Cette caractéristique a été démontrée par Lumley [124] dans le plan (II_b^*, III_b^*) avec $II_b^* = -II_b/2$ et $III_b^* = III_b/3$. Dans ce nouveau repère, les couples (II_b^*, III_b^*) sont restreints à l'intérieur d'un triangle dit de Lumley. Les frontières de ce triangle décrivent les différents états du tenseur des contraintes turbulentes. L'origine de ce plan représente l'état de turbulence isotrope. Le



(a) Iso-surface du scalaire passif ($\xi = 0.5$) superposée à un champ de Mach.



(b) Iso-surface du critère Q ($Q = 0.1 \times Q_{max}$) superposée à un Schlieren numérique basé sur la masse volumique.

FIGURE 4.22 – Vue d'ensemble du mélange en aval du disque de Mach.

segment (PQ) correspond à une turbulence à deux composantes (une des trois valeurs propres est nulle). Cette trajectoire est déterminée par la relation $1 - 9II_b^* + 27III_b^* = 0$. Les segments (OP), correspondant à $III_b^* = 2(II_b^*/3)^{(3/2)}$, et (OQ), $III_b^* = -2(II_b^*/3)^{(3/2)}$, représentent une turbulence axisymétrique (deux valeurs propres égales). La distinction entre ces deux comportements est liée au signe du troisième invariant. Lorsque celui-ci est positif, la valeur propre axiale est prépondérante par rapport au deux autres composantes qui sont égales. On parle alors de structure en *cigare*. En revanche, lorsque III_b^* est négatif, ce sont les composantes radiales qui sont prépondérantes devant la composante axiale. On parle alors de structure en *disque*. Par soucis de visibilité, nous représentons les invariants dans le repère (II_b^*, III_b^*) avec $II_b^* = -II_b/2$ et $III_b^* = III_b/3$ ainsi que dans le repère (η, ξ) avec $\eta^2 = II_b^*/3$ et $\xi^3 = III_b^*/2$.

La figure 4.23 montre les invariants du tenseur d'anisotropie dans le repère (II_b^*, III_b^*) tandis que la figure 4.24 les reporte dans le plan (η, ξ) . La figure 4.23 souligne que les résultats numériques évoluent bien dans les limites données par le triangle de Lumley. Les diagrammes sont tracés pour différentes abscisses x/D . Les trajectoires ainsi représentées vont du centre du jet ($r/D = 0$) vers la périphérie du jet ($r/D = 3$). Pour les positions se trouvant en amont du disque de Mach (cf. figures 4.23(a) et 4.23(b)), les échantillons se situent majoritairement au voisinage de la ligne OP qui correspond à une turbulence axisymétrique à une composante. Les deux termes diagonaux sont égaux et inférieurs à la troisième composante. Cet état est également rencontré dans les écoulements supersonique en conduite [125]. Juste en aval du disque de Mach (cf. figure 4.23(c)), nous observons une transition des états quasi-axisymétriques à une composante vers des états quasi-axisymétriques à deux composantes représentés par la courbe OQ . Dans ce dernier état, deux éléments diagonaux sont quasiment identiques et supérieurs au troisième qui est négligeable. Dans le sillage de la structure compressible (cf. figures 4.23(d), 4.23(e), 4.23(f), 4.23(g) et 4.23(h)), l'anisotropie évolue peu et tend vers un état de turbulence axisymétrique à deux composantes.

Nous venons de caractériser la topologie globale de l'écoulement avec un regard particulier concernant l'anisotropie de la turbulence. Nous allons maintenant nous pencher sur le mélange scalaire à petite échelle avec notamment l'étude du modèle de fermeture *LRM* (Linear Relaxation Model) pour la dissipation scalaire.

4.6 Champ scalaire : mélange turbulent

Nous étudions maintenant le mélange scalaire dans notre configuration d'écoulement compressible. Pour ce faire, nous résolvons une équation de transport supplémentaire pour un scalaire passif ξ (équ. (4.10)) qui est advecté avec un nombre de Lewis unitaire. La diffusivité de ce scalaire est égale à la diffusivité thermique. Les effets de Lewis et ceux

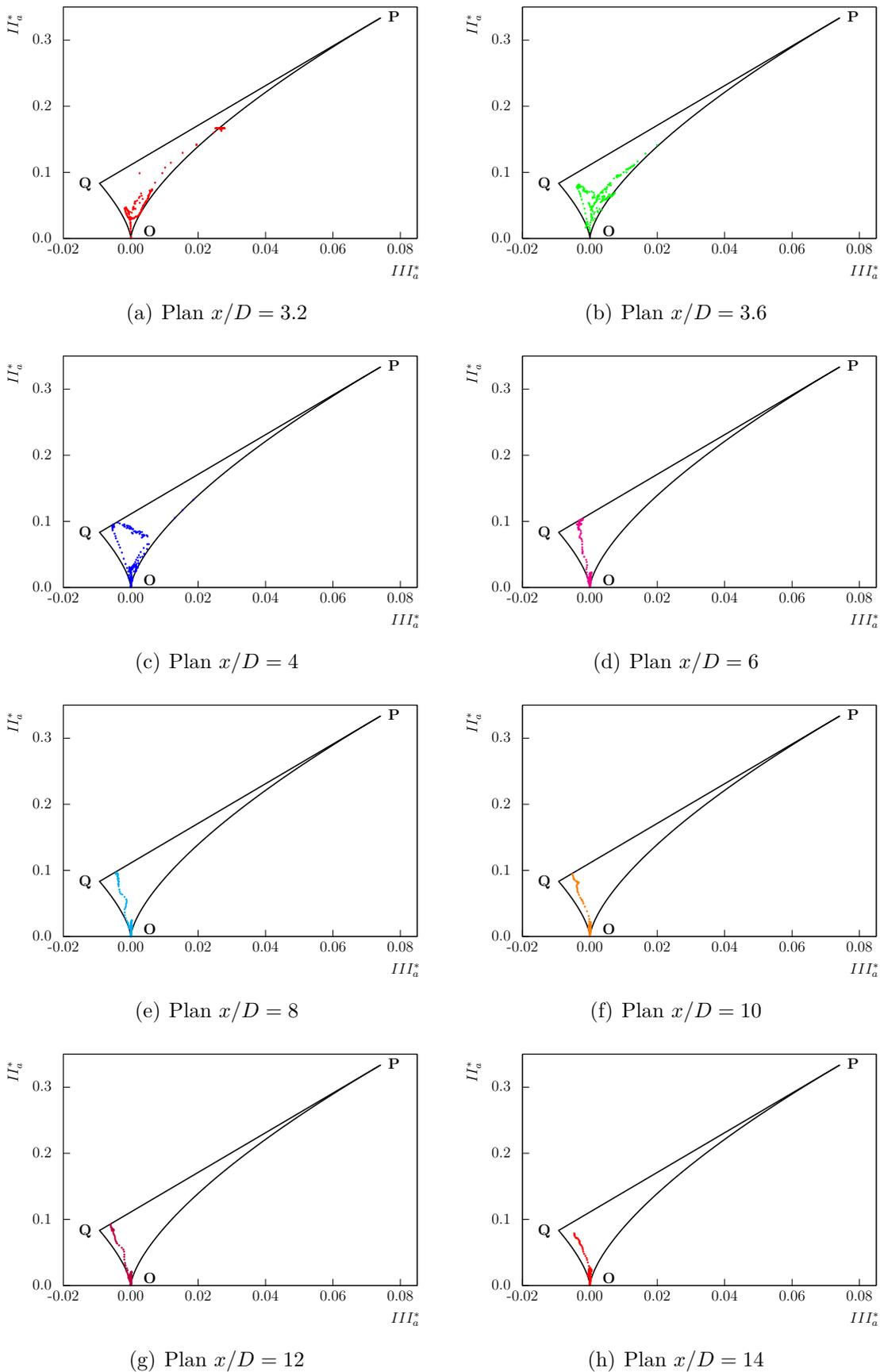
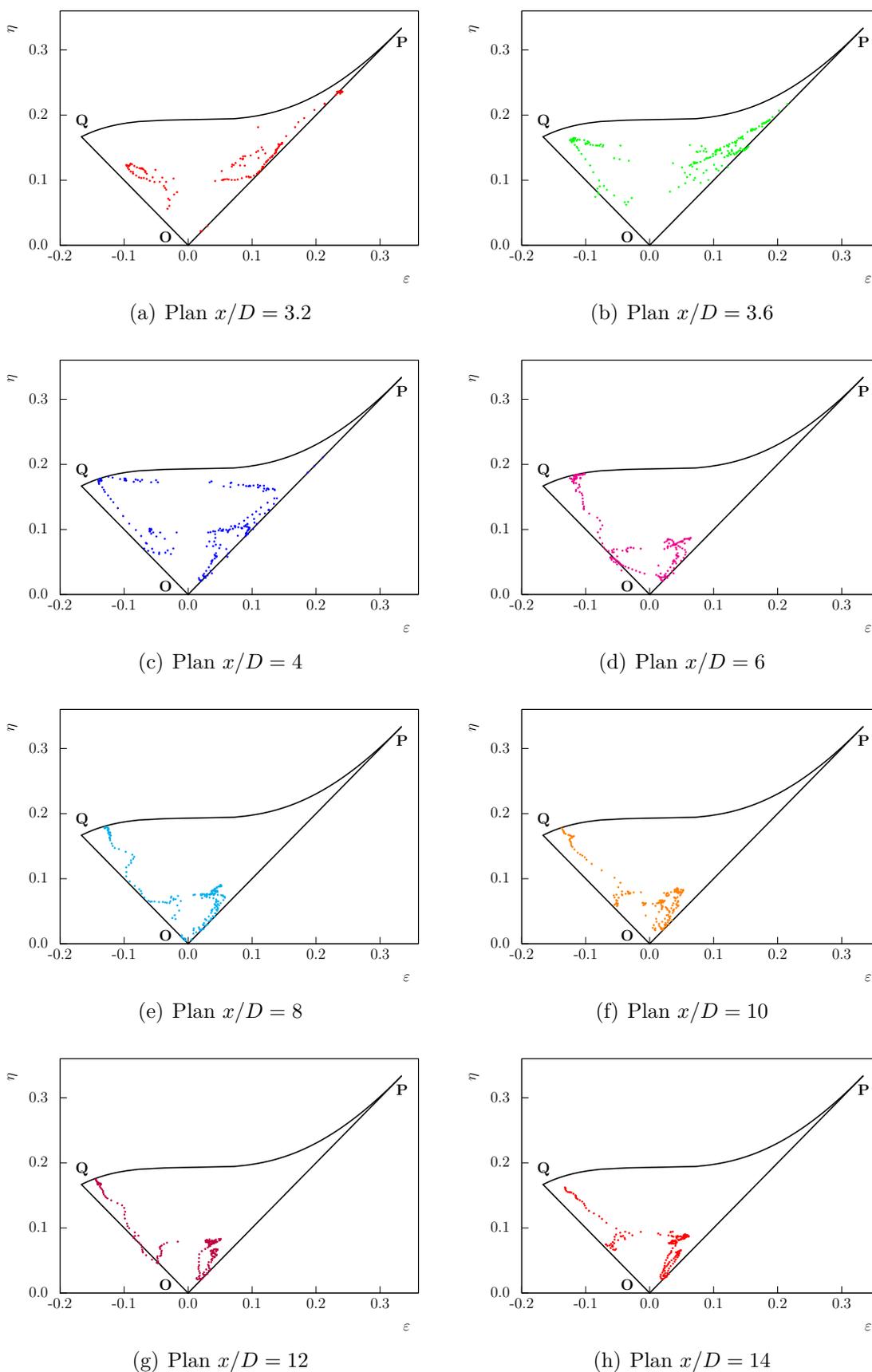


FIGURE 4.23 – Plans des invariants (II_a^*, III_a^*) pour différentes sections de l'écoulement.

FIGURE 4.24 – Plans des invariants (η, ξ) pour différentes sections de l'écoulement.

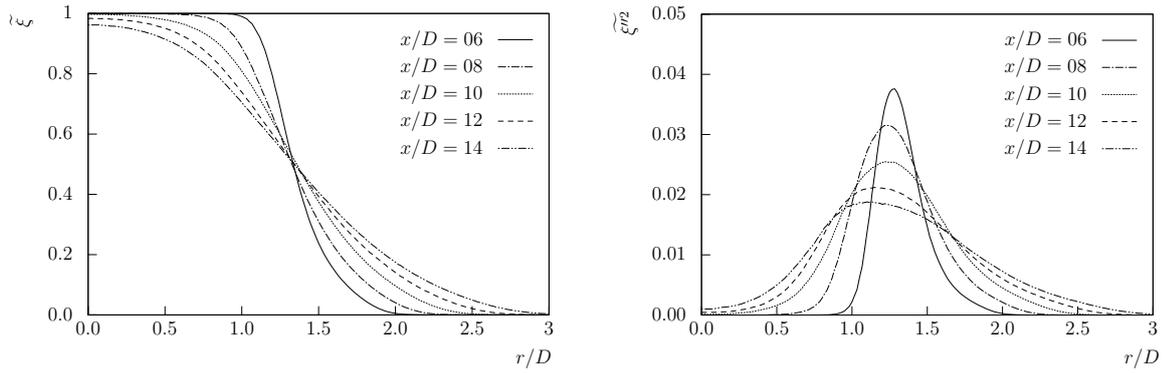
(a) Profils radiaux de $\tilde{\xi}$.(b) Profils radiaux de $\tilde{\xi}''^2$.

FIGURE 4.25 – Profils radiaux des deux premiers moments du scalaire passif.

associés à la diffusion différentielle ne sont donc pas pris en compte ici. Ce traceur ξ est défini avec une valeur unitaire à l'intérieur du jet et nulle ailleurs.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \quad (4.10)$$

La figure 4.15(c) présentant le champ du nombre de Mach moyen a été superposée avec quatre iso-lignes de $\tilde{\xi}$ (0.1; 0.4; 0.7; 0.95). La périphérie du jet en champ proche se comporte comme une membrane imperméable. Le milieu extérieur et le jet ne se mélangent pas. Dans cette configuration, la turbulence se développe sur cette limite et dans les couches de cisaillements supersoniques. Les figures 4.25(a) et 4.25(b) affichent les profils radiaux de la valeur moyenne et de la variance du scalaire passif à différentes sections du jet. La quantité $\tilde{\xi}''^2$ est gouvernée par l'équation de transport (4.11). Elle caractérise la dispersion du scalaire autour de sa valeur moyenne.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \xi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k \xi''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \right) \\ &\quad - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2 \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} + 2 \xi'' \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}} \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

La production de variance reflète ainsi l'hétérogénéité du mélange local. En revanche, sa destruction caractérise l'action des processus moléculaires à travers la valeur moyenne du taux de dissipation scalaire (SDR) $N_\xi = D(\partial\xi/\partial x_k)(\partial\xi/\partial x_k)$ du traceur passif. On définit également $\tilde{\varepsilon}_\xi$ le taux de dissipation scalaire moyen des fluctuations de ξ . Il est défini par :

$$\rho \tilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} \quad (4.12)$$

Pour des valeurs du nombre de Reynolds suffisamment élevées, on montre que ce terme est comparable au taux de dissipation scalaire moyen \widetilde{N}_ξ :

$$\rho \widetilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} = \overline{\rho} \widetilde{N}_\xi - \overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \approx \overline{\rho} \widetilde{N}_\xi \quad (4.13)$$

Le mélange scalaire a lieu dans les couches cisillées supersoniques comme indiqué dans la figure 4.25(b). Nous pouvons remarquer que pour $x/D = 12$, la valeur de $\widetilde{\xi}$ sur l'axe de symétrie ($r/D = 0$) est inférieur à l'unité. Les couches cisillées internes se coupent en effet sur l'axe du jet à cette distance de $x/D \approx 12$, ce qui correspond approximativement à la longueur de la poche subsonique. La figure 4.25(b) illustre l'homogénéisation du mélange et la destruction de la variance entre le plan $x/D = 6$ et le plan $x/D = 14$. La variance $\widetilde{\xi''^2}$ est également tracée en fonction de la valeur moyenne $\widetilde{\xi}$ sur la figure 4.26. Les profils obtenus peuvent ainsi être comparés à la valeur maximale de la variance définie par $\widetilde{\xi''^2}_{max} = \widetilde{\xi}(1 - \widetilde{\xi})$. Pour les positions prises entre $x/D = 6$ et $x/D = 14$, la valeur maximale de la ségrégation, i.e. $S_\xi = \widetilde{\xi''^2}/\widetilde{\xi}(1 - \widetilde{\xi})$ se trouve autour de 0.17 à $x/D = 6$ et décroît progressivement pour atteindre 0.07 à $x/D = 14$. Les figures 4.28(a) et 4.28(c) représentent respectivement la variance $\widetilde{\xi''^2}$ et le taux de dissipation scalaire \widetilde{N}_ξ suivant les iso-contours de $\widetilde{\xi}$ définis précédemment. Pour $x/D \leq 3$, les profils de N_ξ sont peu représentatifs. Les gradients scalaires sont très grands et il y a peu d'échantillons dans cette zone pour pouvoir restituer correctement la dynamique de l'écoulement. Ceci permet d'expliquer la persistance d'oscillations résiduelles sur les profils. Le pic sur les deux courbes de $\widetilde{\xi''^2}$ et de \widetilde{N}_ξ à $x/D \approx 4$ perceptible sur les iso-lignes $\widetilde{\xi} = 0.4, 0.7$ et 0.95 s'expliquent par l'effet de l'onde de choc réfléchie sur le mélange dans cette zone. L'iso-contour $\widetilde{\xi} = 0.1$, qui ne traverse pas l'onde de choc réfléchie, ne présente pas de pic particulier. Ce résultat est cohérent avec d'autres études conduites qui soulignent l'amélioration du mélange par des ondes de choc grâce (i) à la déviation des lignes de courant par le choc et (ii) la génération de structures tourbillonnaires dans ces régions [126]. Ceci pourrait d'ailleurs être conforté par l'analyse détaillée du bilan de vorticit .

Nous  tudions ici les fonctions densit  de probabilit  (PDFs) de ξ . Celles-ci sont pr sent es sur la figure 4.27. Ces PDFs sont  valu es sur les iso-lignes de $\widetilde{\xi}$ pour diff rentes valeurs de x/D . La forme de la PDF, en fonction de leur position dans le jet, sont compatibles avec les formes attendues [29]. Sur les fronti res externe et interne de la couche de m lange induite par le jet, soit pour $\widetilde{\xi} = 0.1$ et $\widetilde{\xi} = 0.95$, l'influence des effets de m lange mol culaire sur ξ est peu appr ciable. Les PDFs pr sentent toutes un pic au niveau de la valeur moyenne et  voluent tr s peu en fonction de la position longitudinale. En revanche,   l'int rieur de la couche de cisaillement, soit pour $\widetilde{\xi} = 0.4$ et $\widetilde{\xi} = 0.7$, les PDFs se concentrent autour de la valeur moyenne. Sur l'iso-ligne $\widetilde{\xi} = 0.7$, elle pr sente  galement des poches de traceur passif unitaire   $x/D = 6$ et $x/D = 8$. Dans cette r -

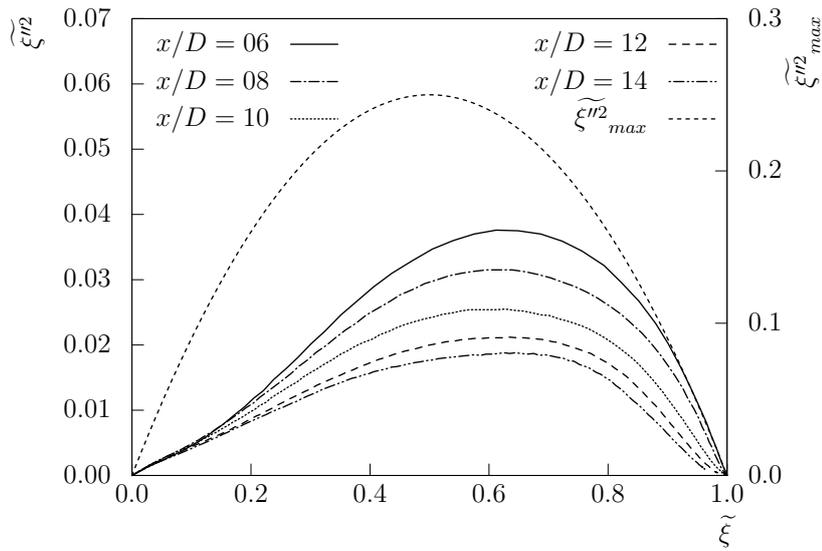


FIGURE 4.26 – Variance scalaire en fonction de $\tilde{\xi}$.

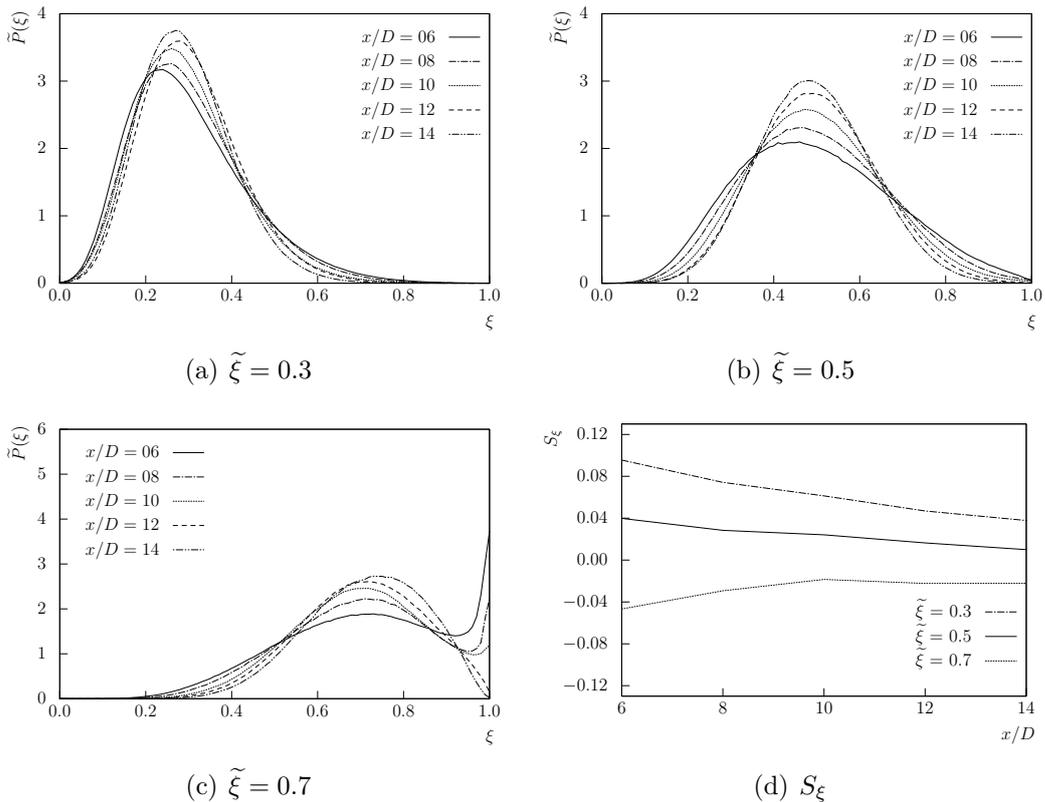


FIGURE 4.27 – Fonctions densité de probabilité $\tilde{P}(\xi)$ situées à $x/D = 6, 8, 10, 12$ et 14 le long des iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.3$ (a), $\tilde{\xi} = 0.5$ (b) et $\tilde{\xi} = 0.7$ (c). Évolution du skewness S_ξ associé à ces fonctions (d).

gion, le processus de mélange moléculaire ne s'est pas encore totalement développé. Le skewness $S_\xi = \widetilde{\xi'^3}/(\widetilde{\xi'^2})^{3/2}$ mesure l'asymétrie de ces distributions. Pour les valeurs négatives de S_ξ (*i.e.* $\widetilde{\xi} = 0.7$), les distributions sont légèrement en pente vers la gauche de leur valeur moyenne, tandis qu'à droite elles sont plus raides. La somme des fluctuations négatives élevée à la puissance 3 sera ainsi supérieure à la somme des cubes des déviations positives. Au contraire, si la somme des cubes de fluctuations positives est supérieure à celui obtenu pour des fluctuations négatives, le skewness sera positif. La figure 4.27(d) expose ce coefficient pour les trois jeux de PDF présentés. On note un coefficient positif pour les iso-lignes $\xi = 0.3$ et $\xi = 0.5$. La valeur positive pour l'iso-ligne $\xi = 0.5$ confirme que le processus de mélange moléculaire et le taux de dissipation scalaire associé est plus efficace pour les faibles valeurs de la fraction de mélange plutôt qu'au voisinage de la fraction de mélange unitaire. Ceci est en contraste avec la valeur négative de S_ξ obtenu pour $\xi = 0.7$. Le long de cette iso-ligne spécifique, le skewness croît dans un premier temps vers zéro (entre $x/D = 6$ et $x/D = 10$). Il décroît ensuite entre $x/D = 10$ et $x/D = 14$. Ce comportement est lié à la définition même du coefficient d'asymétrie, dont l'évolution de la valeur normalisé $\Delta S_\xi/S_\xi$ est pilotée par la différence entre les évolutions normalisées des moments d'ordre deux et trois, *i.e.* $\Delta \widetilde{\xi'^3}/\widetilde{\xi'^3} - (3/2)\Delta \widetilde{\xi'^2}/\widetilde{\xi'^2}$. Pendant les premières étapes du processus de mélange, l'évolution de S_ξ semble être dominée par la diminution du moment d'ordre trois normalisé, ce qui conduit à l'accroissement de S_ξ alors qu'on constate qu'il diminue plus en aval. Ce comportement spécifique reflète l'influence de la propagation des niveaux élevés de probabilité associées à la persistance de poche de fraction de mélange unitaire entre $x/D = 6$ et $x/D = 10$. Il convient également de remarquer l'évolution particulière du maximum local de la probabilité (situé entre $\xi = 0.6$ et $\xi = 0.8$). Dans un premier temps, ce maximum décroît entre $x/D = 6$ et $x/D = 10$ puis il augmente entre $x/D = 10$ et $x/D = 14$. Il semble important de noter que, pour $x/D = 14$, sa valeur est légèrement supérieure à la valeur moyenne $\widetilde{\xi} = 0.7$.

L'analyse du taux de dissipation scalaire \widetilde{N}_ξ joue un rôle crucial pour la combustion non prémélangée. En effet, le mélange des réactifs à l'échelle moléculaire est une condition nécessaire pour que se produise la réaction chimique. Comme mentionné précédemment, sa valeur moyenne $\widetilde{N}_\xi \approx \widetilde{\varepsilon}_\xi$ impose le niveau de la variance scalaire. Celui-ci apparaît alors comme un terme puits dans le membre de droite de l'équation de transport de la variance scalaire. Ce terme fait apparaître des gradients de scalaire locaux au carré et ce terme requiert une fermeture spécifique. Dans le domaine de la modélisation de la combustion turbulente, le taux de dissipation scalaire moyen - qui apparaît dans la partie droite de l'équation de transport de la variance scalaire (4.11) - est dans la plupart des cas fermé en invoquant une hypothèse de similitude entre le spectre du scalaire passif et celui de la turbulence. Il en résulte l'approximation classique $\tau_\xi \simeq C_\xi \tau_t$ avec C_ξ une constante de modélisation. Cela conduit à la définition du modèle de relaxation linéaire

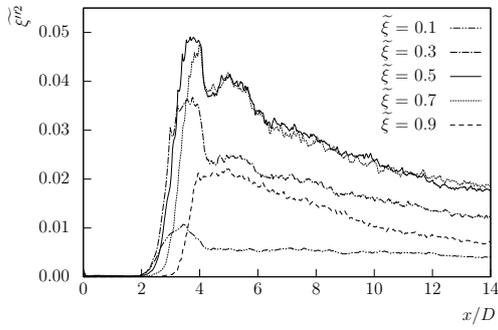
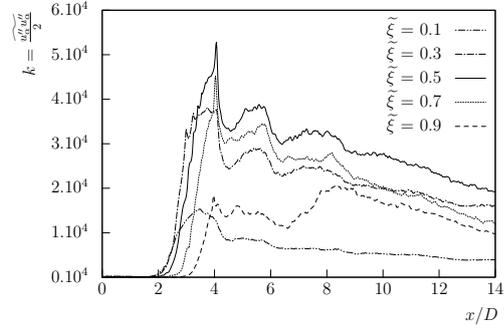
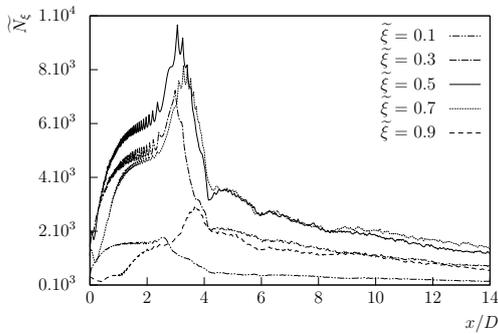
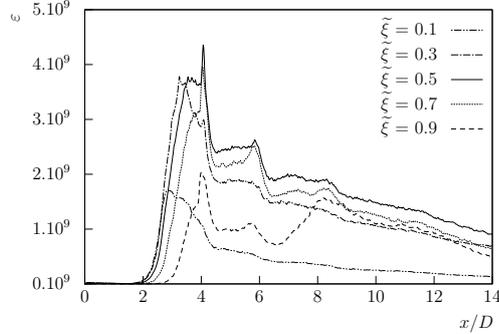
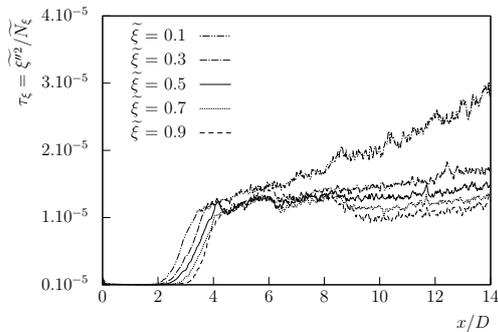
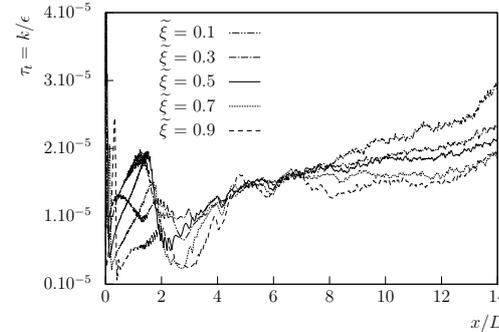
(a) Profils de la variance ξ'^2 .(b) Profils de l'énergie cinétique de turbulence k .(c) Profils du taux de dissipation \widetilde{N}_ξ .(d) Profils du taux de dissipation ε .(e) Profils du temps de mélange τ_ξ .(f) Profils du temps turbulent τ_t .

FIGURE 4.28 – Échelles caractéristiques de temps de la turbulence et du mélange scalaire obtenues à partir de l'énergie cinétique de turbulence et de la variance du scalaire passif et leur taux de dissipation respectif. En suivant l'équation (4.13), le taux de dissipation scalaire moyen $\widetilde{\varepsilon}_\xi$ est approximé par \widetilde{N}_ξ .

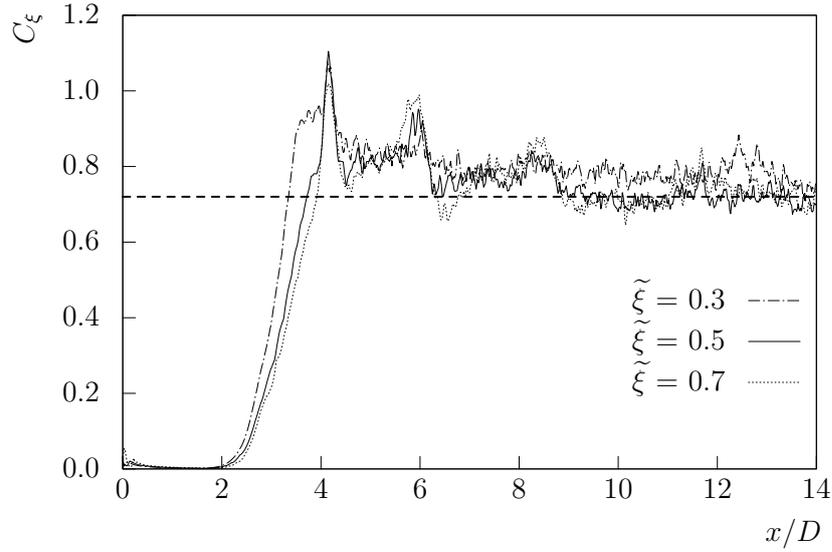


FIGURE 4.29 – Profils de la constante $C_\xi = \tau_\xi/\tau_t$ le long de différentes iso-lignes de $\tilde{\xi}$.

(ou LRM pour Linear Relaxation Model) qui se traduit par l'estimation du SDR suivante : $\tilde{\varepsilon}_\xi = \tilde{\xi}''^2/\tau_\xi \simeq \tilde{\xi}''^2/C_\xi\tau_t$.

La validité de cette fermeture simplifiée est analysée en déterminant la constante de proportionnalité entre τ_ξ et τ_t ($C_\xi = \tau_\xi/\tau_t$) dans notre configuration [127, 128]. La figure 4.28(e) représente l'échelle de temps du mélange scalaire défini par $\tau_\xi = \tilde{\xi}''^2/\tilde{\varepsilon}_\xi$ le long des iso-lignes de $\tilde{\xi}$ et la figure 4.28(f) représente elle l'échelle de temps de la turbulence définie comme $\tau_t = k/\varepsilon$ également le long des iso-lignes de $\tilde{\xi}$. La quantité k est l'énergie cinétique turbulente et ε représente son taux de dissipation. La figure 4.29 montre le profil du rapport entre le temps scalaire et le temps turbulent caractérisant la constante du modèle LRM. Dans cette figure, il convient de noter que l'impact des ondes de choc sur la couche de mélange n'affecte pas de manière significative la valeur de la constante C_ξ . En outre, il est également remarquable que, dans des situations très compressibles telles que celles prises en considération ici, l'hypothèse d'une valeur constante, comme le laisse entendre la fermeture fournie par le modèle LRM, est assez bien vérifiée et n'est pas significativement modifiée par les effets de compressibilité. Enfin, la valeur obtenue pour C_ξ , qui est d'ordre unité, est consistante avec les données de la littérature [127, 128, 129].

Nous allons dorénavant regarder l'interaction entre le champ de vitesse et le champ de scalaire à travers l'étude d'un terme communément appelé terme d'Interaction Turbulence-Scalaire (ITS).

4.7 Interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire

L'obtention de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire (ou SDR) est donnée dans la partie 2.3.1. L'analyse d'ordre de grandeur de cette équation de transport confirme que cette quantité est principalement régie par deux termes dominants (i) la contribution dissipative et (ii) la corrélation du 3^{ème} ordre entre le tenseur des gradients de vitesse et le tenseur d'anisotropie des petites échelles [26, 27]. Le terme (i) inclut l'influence de l'étirement turbulent qui tend à accroître la valeur du gradient local $g_\xi = (\mathbf{g}_\xi \cdot \mathbf{g}_\xi)^{1/2}$ et donc le taux de dissipation $N_\xi = D \cdot g_\xi \cdot g_\xi$. L'efficacité du mélange scalaire semble être contrôlée par cette dernière quantité qui est souvent nommée terme d'interaction Turbulence-Scalaire. Il peut être établi que seule la partie symétrique S_{ij} du tenseur des gradients de vitesse contribue à ce terme. Dès lors, il est classique d'analyser la contribution de ce terme dans l'espace des vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} [37, 130]. Ce terme a été étudié de manière extensive dans le contexte de la combustion turbulente qu'elle soit pré-mélangée ou non à travers l'analyse de la variable d'avancement pour les conditions pré-mélangées [131] ou de la fraction de mélange pour les conditions non pré-mélangées [32, 35, 37, 132]. La figure 4.30 illustre, dans un cas bidimensionnel, l'influence de ces orientations sur l'amplitude du gradient du scalaire passif. Le vecteur \mathbf{e}_1 correspond à la direction principale d'étirement et \mathbf{e}_3 à la direction principale de compression. Lorsque le gradient scalaire est aligné avec la direction principale de compression \mathbf{e}_3 , l'épaisseur caractéristique de la couche de scalaire diminue ce qui entraîne l'augmentation du gradient ainsi que du SDR. Inversement, si le gradient scalaire s'aligne avec la direction principale d'étirement, la norme du gradient décroît. Autrement dit, l'amplification du gradient scalaire par le champ de vitesse requiert un alignement préférentiel avec la direction principale de compression. Une fois exprimé dans l'espace des vecteurs propres du tenseur des taux de déformation S_{ij} , le terme d'interaction Turbulence-Scalaire devient :

$$-2\rho D \nabla \xi \cdot \mathbf{S} \cdot \nabla \xi = -2\rho N_\xi \sum_{i=1}^3 \lambda_i \cos^2 \theta_i, \quad (4.14)$$

où les quantités λ_i représentent les valeurs propres du tenseur des taux de déformation avec $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$. Dans un écoulement turbulent incompressible, la trace du tenseur S_{ij} est nulle c'est à dire que la somme des trois valeurs propres est nulle. La valeur λ_1 correspond à la direction principale d'étirement la plus importante tandis que λ_3 est associé à la direction principale de compression la plus importante. La valeur propre intermédiaire est notée λ_2 . La variable θ_i correspond à l'angle entre la direction principale \mathbf{e}_i et la direction normale aux iso-lignes de ξ , *i.e* $\mathbf{n}_\xi = \mathbf{g}_\xi / g_\xi$. Il est évident, d'après

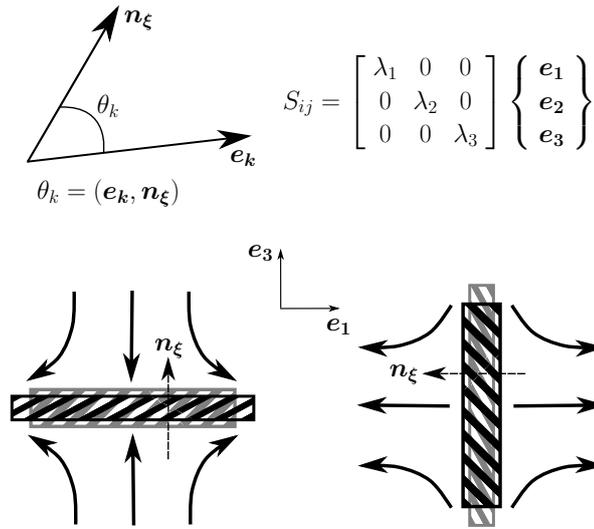


FIGURE 4.30 – Schématisation de l'action du champ de vitesse sur le champ scalaire.

l'équation (4.14), que le signe de la contribution associée à l'Interaction Turbulence–Scalaire dépendra des orientations θ_i et des valeurs propres λ_i associées. La figure 4.31(a) montre la fonction densité de probabilité des valeurs propres λ_1 (lié à l'étirement) et λ_3 (lié à la compression) de \mathbf{S} obtenues dans le plan $x/D = 14$ et pour différentes positions radiales. La figure 4.31(b) présente les PDFs de ces mêmes quantités adimensionnées par ν/η^2 . En fonction de la position radiale, l'amplitude des valeurs propres λ_i n'est pas constante tandis que les amplitudes des valeurs propres adimensionnées λ_i^* le sont.

Il a été mis en évidence que pour une turbulence homogène incompressible [35], le gradient scalaire s'aligne préférentiellement avec la direction principale de compression. Ceci entraîne donc le terme $-2\rho D \nabla \xi \cdot \mathbf{S} \cdot \nabla \xi$ à donner une contribution positive au bilan du taux de dissipation scalaire. Ces orientations sont analysées à travers les fonctions densité de probabilité de $\cos^2 \theta_i$. Ces PDFs sont obtenues pour $g_\xi \in [g_\xi^{min}; g_\xi^{max}]$ avec $g_\xi^{max} = 0.2/\Delta$ et $g_\xi^{min} = 0.01g_\xi^{max}$. La figure 4.32(a) montre l'orientation entre le gradient du scalaire et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformation et la figure 4.32(b) montre les PDFs des valeurs propres du tenseur des taux de déformation dans le champ lointain du jet ($x/D = 14$). Le gradient scalaire est aligné avec la direction principale de compression \mathbf{e}_3 tandis que les autres directions principales (étirement et intermédiaire) sont orientées perpendiculairement. Cet alignement des vecteurs est le même dans toute la région située en aval du disque de Mach ($x/D = 6$ à 14). Si l'on revient à l'équation (4.14), nous avons donc $\cos \theta_1 = \cos \theta_2 = 0$ et $\cos \theta_3 = 1$. La valeur λ_3 est définie négative; ce résultat conduit donc à la positivité du terme d'interaction Turbulence–Scalaire.

Au contraire, dans la région proche de l'injection, l'orientation entre le gradient du scalaire et le gradient de la vitesse évolue (cf. figure 4.33(a)). Le gradient scalaire n'est pas aligné avec la direction principale de compression mais prend un angle d'environ quarante

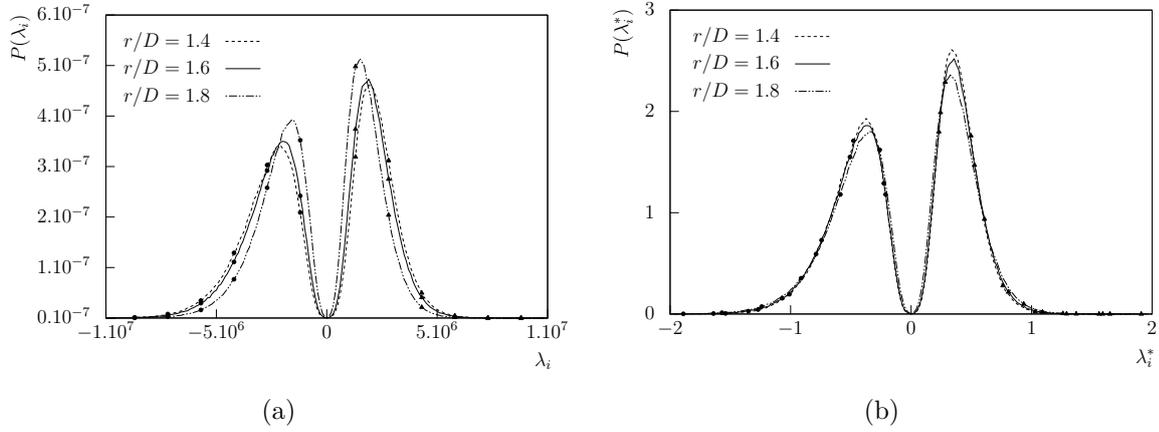
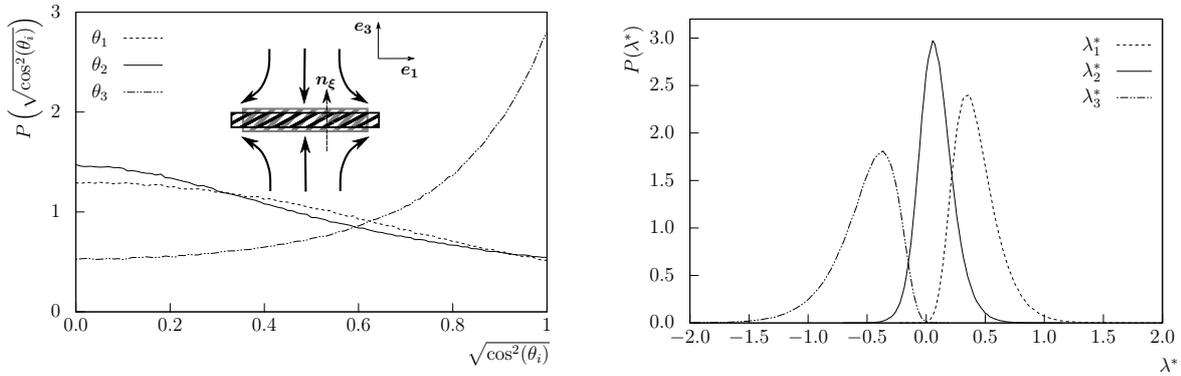
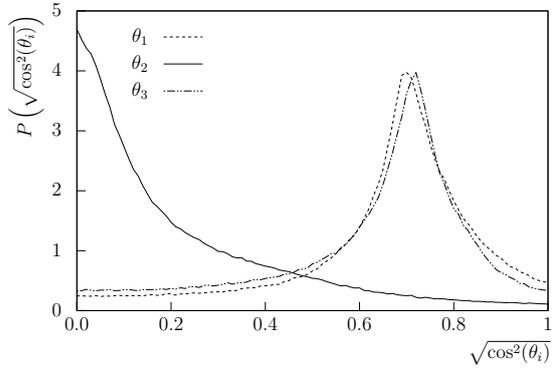


FIGURE 4.31 – Pdf des valeurs propres d’étirement (▲) et de compression (●) non adimensionnées (a) et adimensionnées par (ν/η^2) (b) pour trois différents rayons et $x/D = 14$.

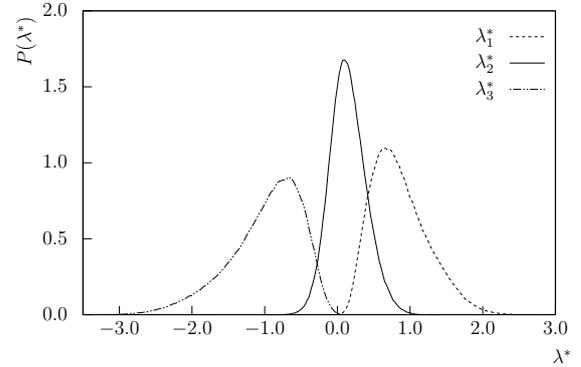


(a) Pdf du cosinus de l’angle entre le gradient scalaire et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} pour $x/D = 14$. (b) Pdf des valeurs propres normalisées du tenseur S_{ij} pour $x/D = 14$.

FIGURE 4.32 – Orientations entre le gradient scalaire et les gradients de vitesse dans le champ lointain.

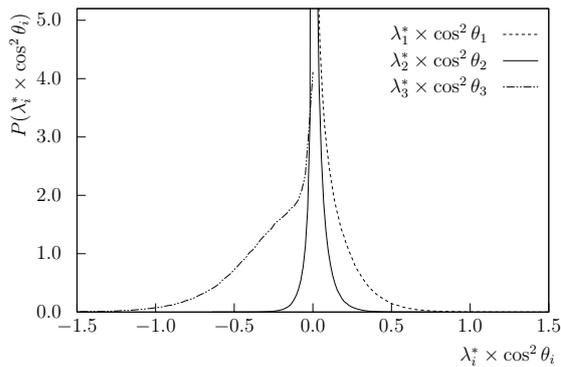


(a) Pdf du cosinus de l'angle entre le gradient scalaire et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} dans la région proche du choc réfléchi.

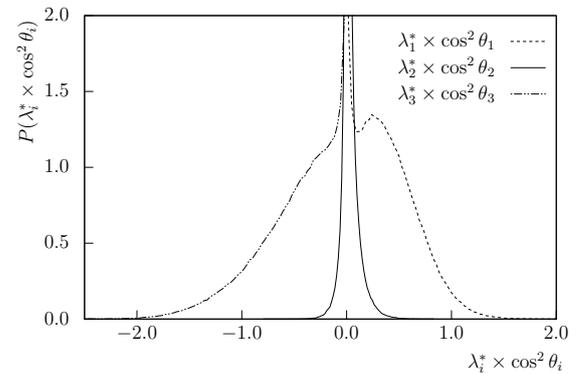


(b) Pdf des valeurs propres normalisées du tenseur S_{ij} dans la région proche du choc réfléchi.

FIGURE 4.33 – Orientations entre le gradient scalaire et les gradients de vitesse dans la région proche du choc réfléchi.



(a) Pdf du produit de la valeur propre normalisée du tenseur S_{ij} et du cosinus de l'angle entre le gradient scalaire et du vecteur propre associé pour $x/D = 14$.



(b) Pdf du produit de la valeur propre normalisée du tenseur S_{ij} et du cosinus de l'angle entre le gradient scalaire et du vecteur propre associé dans la zone proche du choc réfléchi.

FIGURE 4.34 – Pdf de chacune des contributions au produit $\lambda_i \times \cos^2 \theta_i$.

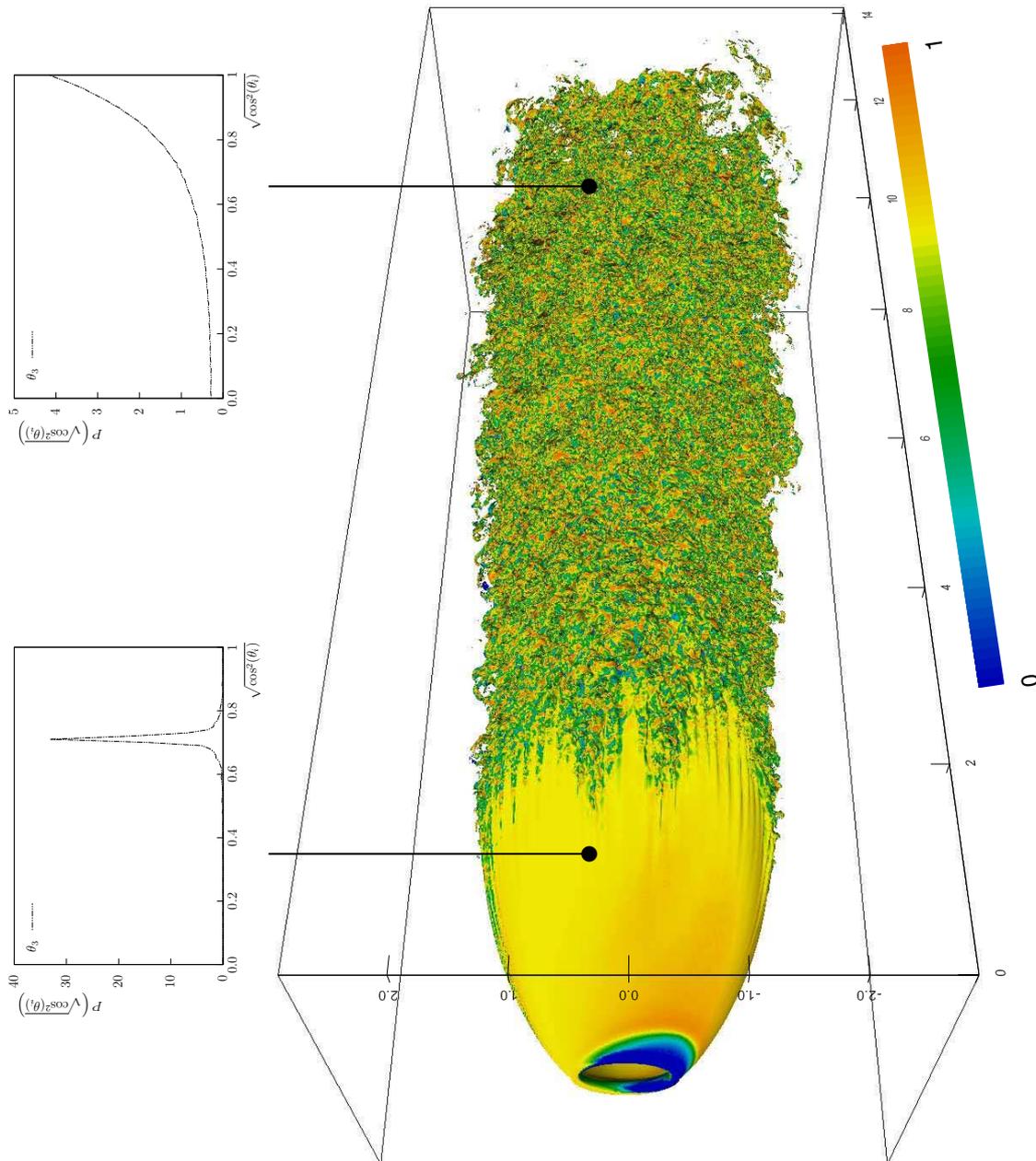


FIGURE 4.35 – Iso-surface instantanée du gradient scalaire ($\nabla\xi = \nabla\xi_{tres}$) coloriée par le cosinus de l'angle ($\mathbf{n}_\xi, \mathbf{e}_3$) entre le gradient scalaire et la direction principale de compression du tenseur S_{ij} .

cinq degrés à la fois avec la direction principale de compression et la direction principale d'étirement. Par contre, il est toujours perpendiculaire à la direction principale intermédiaire. Par conséquent, les contributions $\lambda_1 \cos^2 \theta_1$ et $\lambda_3 \cos^2 \theta_3$ tendent à s'annuler. La valeur propre λ_2 et l'angle associé $\cos^2 \theta_2$ sont approximativement nuls ce qui minimise la contribution de ce terme. Dans cette région, l'éventuelle production du taux de dissipation scalaire ne résultera donc pas du terme d'interaction Turbulence–Scalaire qui est proche de zéro.

Enfin, la figure 4.35 présente (i) une iso-surface instantanée du gradient scalaire ($g_\xi = 0.4g_\xi^{max}$) dans l'ensemble du domaine de calcul et (ii) deux PDFs conditionnelles de $\cos^2 \theta_3$ pour $x/D = 2.3$ et $x/D = 14$. L'iso-surface est colorée par la valeur de l'angle entre le gradient scalaire et la direction principale de compression, *i.e.* de $\cos \theta_3 = \cos(\mathbf{n}_\xi, \mathbf{e}_3)$. Dans le champ lointain, la prédominance de la valeur unitaire confirme l'orientation préférentielle de gradient scalaire avec la direction principale de compression. Ce comportement diffère totalement de celui observé en champ proche le long de la frontière du jet.

4.8 Influence des termes à masse volumique variable.

Cette section est consacrée à l'étude des termes supplémentaires liés aux variations de masse volumique présents dans l'équation de transport du taux de dissipation scalaire. Nous rappelons ici cette équation (4.15).

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\rho \tilde{\epsilon}_\xi}}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k \tilde{\epsilon}_\xi})}_{II} &= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\epsilon}_\xi}{\partial x_k}} \right)}_{III} - \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho u_k'' \tilde{\epsilon}_\xi}}{\partial x_k}}_{IV} - \underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}}_V \\
&\quad - \underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i}}_{VI} - \underbrace{2\rho D u_k'' \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial^2 \tilde{\xi}}{\partial x_k \partial x_i}}_{VI-b} \\
&\quad - \underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i}}_{VII} - \underbrace{2\rho D^2 \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k}}_{VIII} \\
&\quad - \underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \omega_\xi}{\partial x_i}}_{IX} \\
&\quad + \underbrace{2D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right)}_X \\
&\quad + \underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right)}_{XI}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

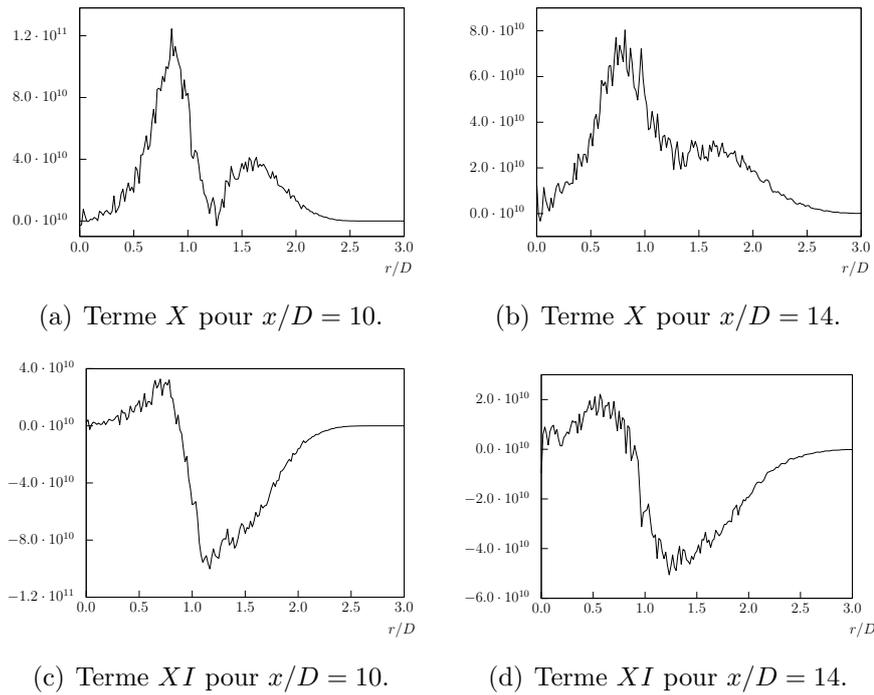


FIGURE 4.36 – Profils radiaux de la contribution des termes associés aux variations de masse volumique dans l'équation de transport du SDR.

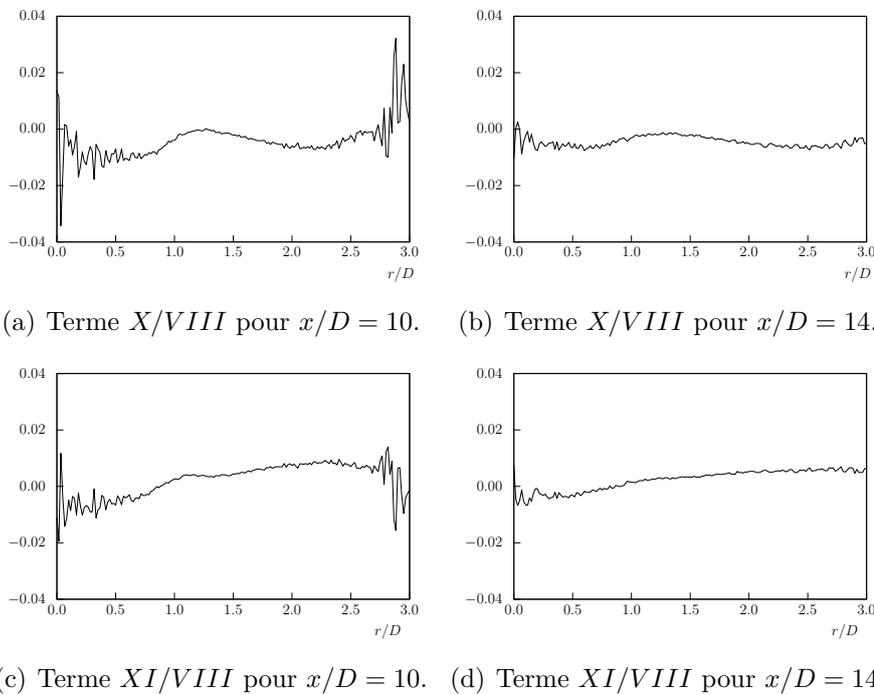


FIGURE 4.37 – Profils radiaux des rapports entre les termes (X) et ($VIII$) et entre les termes (XI) et ($VIII$) de l'équation de transport du SDR.

Il s'agit des termes numérotés (X) et (XI). Ces termes faisant intervenir le gradient de la masse volumique sont souvent négligées dans la plupart des simulations numériques. La figure 4.36 montre les profils de ces deux termes pour une distance $x/D = 10$ (fig. 4.36(a) et fig. 4.36(c)) et $x/D = 14$ (fig. 4.36(b) et fig. 4.36(d)) de l'injection. Le terme (X) apparaît comme un terme de production de taux de dissipation scalaire. L'allure de ce terme est cohérente avec les profils précédemment observés. Les minima locaux apparaissent au centre du jet ($r/D = 0$) et à l'extérieur du jet ($r/D > 2.5$). A ces positions, les gradients de scalaire passif sont nuls. Il y a un troisième minimum local pour $r/D \approx 1.25$. Ce point correspond au point d'inflexion du profil de scalaire passif. La dérivée seconde du scalaire passif est donc nulle en ce point. Le terme (XI) lui apparaît d'abord comme un terme de production au centre du jet puis comme un terme de dissipation lorsque l'on s'éloigne de l'axe ($r/D \approx 1.0$). Nous avons ensuite calculé le rapport entre les termes (X) et ($VIII$) ainsi que le rapport entre (XI) et ($VIII$) pour les mêmes distances à l'injection que précédemment. Ceux-ci sont reportés sur la figure 4.37. L'amplitude de ces deux termes est clairement négligeable devant l'amplitude du terme ($VIII$), ce dernier étant au minimum cent fois supérieurs aux deux autres termes.

4.9 Conclusion

Un jet fortement sous détendu d'air a été considéré dans ce chapitre. Deux niveaux de résolution ont été comparés. La structure compressible est bien capturée sur les deux maillages considérés. Par contre, la topologie de l'écoulement en aval du disque de Mach diffère sensiblement suivant que l'on considère l'un ou l'autre des deux niveaux de résolution, le maillage le plus fin permettant une meilleure capture du développement des instabilités. La structure globale du jet a ensuite été étudiée plus profondément sur le maillage le plus fin. Le développement de la turbulence ainsi que son anisotropie ont été caractérisés. Ensuite, le mélange turbulent a été analysé avec une attention particulière accordée au mélange à petite échelle. Nous avons ainsi pu vérifier le comportement correct du modèle de relaxation linéaire (LRM) dans notre configuration. L'examen de l'interaction entre le champ turbulent et le champ scalaire a montré un comportement différent du terme d'Interaction Turbulence–Scalaire dans le champ proche de l'injection et dans le champ plus lointain. Finalement, la faible amplitude des termes supplémentaires, liés aux variations de masse volumique, présents dans l'équation de transport du taux de dissipation scalaire a été mis en évidence. Nous allons caractériser dans le chapitre suivant le même type de jet mais avec une injection d'hydrogène.

Chapitre 5

Simulations de jets inertes d'hydrogène fortement sous-détendus

5.1 Introduction

Nous allons ici étudier un jet d'hydrogène pur fortement sous détendu dans une atmosphère d'air au repos. Cette géométrie peut être rencontrée lors de la décharge accidentelle d'hydrogène d'un réservoir de stockage à haute pression. Nous allons effectuer une analyse comparative entre ce jet de combustible et le jet d'air étudié dans le chapitre précédent. Nous mettrons ainsi en évidence les effets du changement de fluide injecté ainsi que les effets de masse volumique variable. Nous observerons également le mélange aux petites échelles. Enfin, nous terminerons ce chapitre par la comparaison des deux méthodes implémentées dans CREAMS pour déterminer les propriétés du transport moléculaire.

5.2 Description de la configuration

Cette première section va être consacrée à la description des configurations retenues pour les simulations de jets axisymétriques fortement sous-détendus d'hydrogène dans une atmosphère d'air au repos. Deux calculs avec injection d'hydrogène à haute pression ont été réalisés. Le premier est basé sur une représentation simplifiée des termes de transport basée sur l'approximation de Hirschfelder et Curtiss [58], il est dénommé "jet-3" dans la suite du manuscrit. Le second est basé sur une représentation détaillée des termes de transport avec l'utilisation de la librairie EGLIB développée par Ern et Giovangigli [56], il sera dénommé "jet-4" par la suite. Ces deux simulations sont conduites sur un même maillage dont les caractéristiques sont reportées dans le tableau 5.1.

TABLEAU 5.1 – Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul (sans les zones tampons) a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitué d'un nombre total de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. Le diamètre d'injection D est utilisé comme longueur de référence.

L_1/D	L_2/D	L_3/D	N_1	N_2	N_3	N	Δx
14	8	8	850	480	480	195×10^6	1.667×10^{-5}

TABLEAU 5.2 – Paramètres de l'écoulement.

	Injection	Co-courant
P (atm)	15.0	1.0
T (K)	1000.0	300.0
Ma	1.0	0.05
u (m/s)	2410.0	20.0
Y_{H_2}	1.0	0.0
Y_{O_2}	0.0	0.233
Y_{N_2}	0.0	0.767

Le domaine de calcul est cartésien et ses dimensions complètes sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 16D \times 20D \times 20D$ (les indices 1, 2, 3 correspondent aux directions x, y, z). Ce domaine est discrétisé avec $N_1 \times N_2 \times N_3 = 880 \times 547 \times 547$ points, ce qui représente un nombre total de points de calcul supérieur à 260 millions. Des zones tampons ont été ajoutées sur certaines frontières du domaine de la même manière que pour le jet d'air exposé dans le chapitre précédent. Les dimensions du domaine sans ces zones tampons se réduisent à $L_1 \times L_2 \times L_3 = 14D \times 8D \times 8D$. La taille des mailles est, pour ces cas aussi, maintenue constante dans tout le domaine résolu avec un étirement des mailles appliqué uniquement dans les zones tampons. Le nombre de Reynolds initial basé sur le diamètre d'injection est $Re = 45000$. Les grandeurs physiques utilisées pour ces deux simulations sont identiques et reportées dans le tableau 5.2.

Les deux simulations considérées dans ce chapitre ont été réalisées sur le supercalculateur "Turing" de l'IDRIS. Il s'agit d'une machine IBM Blue Gene/Q équipée de 98304 cœurs PowerPC A2 avec une puissance en crête totale de 1,258 Pflops.

5.3 Vérification des deux cas de calcul

Comme pour l'étude du jet d'air, cette section préliminaire va être consacrée à plusieurs types d'analyses permettant d'estimer la qualité des simulations numériques effectuées. Nous allons dans un premier temps étudier la convergence des bases de données, ensuite nous nous pencherons sur la résolution spatiale de celles-ci.

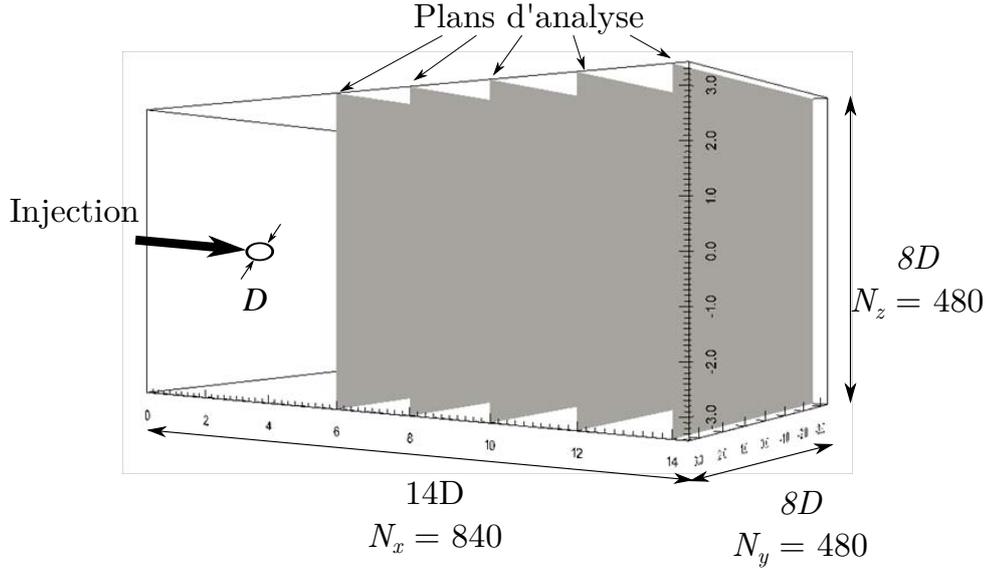


FIGURE 5.1 – Description de la géométrie utilisée pour les jets d'hydrogène.

5.3.1 Convergence des bases de données.

L'étude de la convergence des bases de données pour le calcul du jet d'hydrogène inerte a la même base que celle explicitée dans le chapitre précédent. Nous visualisons donc ici aussi la convergence de la moyenne de la vitesse longitudinale cumulée ($\Delta\tilde{u} = (\tilde{u}(t) - \tilde{u}(t_{fin}))/\tilde{u}(t_{fin}) \times 100$) et de sa variance ($\Delta\tilde{u}^{\prime 2} = (\tilde{u}^{\prime 2}(t) - \tilde{u}^{\prime 2}(t_{fin}))/\tilde{u}^{\prime 2}(t_{fin}) \times 100$) ainsi que la convergence de la pression moyenne ($\Delta\bar{P} = (\bar{P}(t) - \bar{P}(t_{fin}))/\bar{P}(t_{fin}) \times 100$). Nous rappelons ici à toutes fins utiles que $\tilde{u}(t) = (1/t) \int_0^t u(t)dt$ et $\tilde{u}(t_{fin}) = (1/t_{fin}) \int_0^{t_{fin}} u(t)dt$. Nous nous plaçons également à la même position que celle utilisée pour le jet d'air, à savoir $x/D = 14$ et $r/D = 2$. La figure 5.2 montre la convergence de la moyenne et de la variance de la vitesse longitudinale en fonction du temps de simulation normalisé par

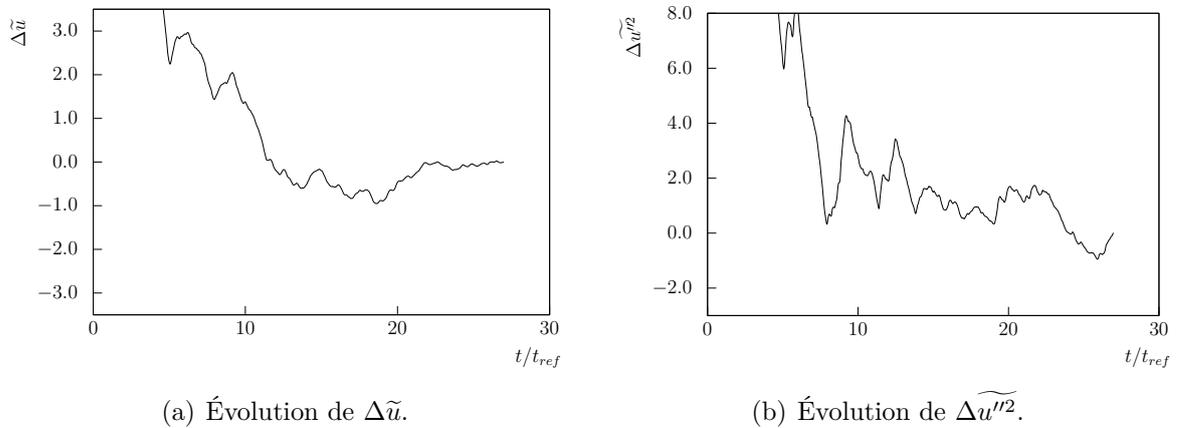


FIGURE 5.2 – Étude de la convergence de base de données (vitesse longitudinale).

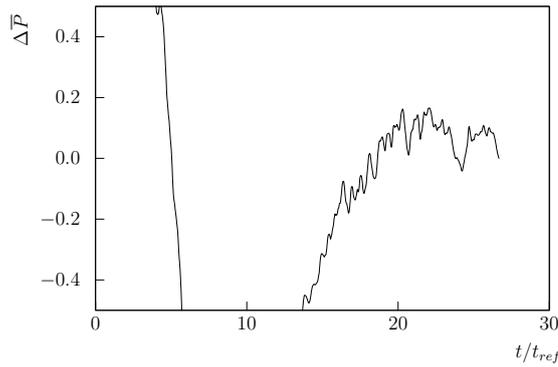


FIGURE 5.3 – Étude de convergence du signal de pression mesuré au voisinage du dernier plan d'analyse $x/D = 14$.

TABLEAU 5.3 – Caractérisation de la résolution de la simulation (les nombres de Reynolds ainsi que les longueurs caractéristiques sont évalués à $x/D = 14$ et $r/D = 1.75$).

	Re	$D/\Delta x$	$l_\lambda/\Delta x$	$l_\eta/\Delta x$	Re_λ
“jet-2”	77500	60	4.69	0.162	381
“jet-3”	45000	60	5.23	0.267	180

le temps de référence défini dans la section (4.3.1) ($t_{ref} = L_{ref}/U_{ref}$ avec $L_{ref} = 14D$ et $U_{ref} = \int_0^{L_{ref}} u(x)dx/L_{ref}$). La valeur ainsi obtenue est $t_{ref} = 6.75 \cdot 10^{-6} s$. Nous remarquons que le taux de convergence de la moyenne de la vitesse longitudinale est de l'ordre du 1% tandis que le taux de convergence de sa variance est d'environ 4%. On notera aussi que la pression (cf. figure 5.3) atteint tout juste un état stationnaire. On notera ici que les vitesses mises en jeu dans ce calcul sont plus importantes que celles correspondant au cas du jet d'air. On considérera par la suite que cette base de données est convergée.

5.3.2 Résolution spatiale

La quantification de la résolution spatiale est réalisée en conservant les mêmes indicateurs que pour le chapitre précédent. Dans un premier temps, les différentes échelles de longueur et de temps de la turbulence sont estimées et reportées dans le tableau 5.3. Les définitions des différentes échelles ont été explicitées dans la partie (4.3.2).

Nous avons ensuite tracé les spectres de l'énergie cinétique de turbulence (cf. figure 5.4) ainsi que celui pour le traceur passif (figure 5.5) à plusieurs positions longitudinales de l'écoulement et dans la couche de cisaillement. Les spectres présentent le comportement attendu pour ce type de jet transitionnel à Reynolds modéré avec une pente comprise entre -1 et -2 couvrant un peu moins de deux décades dans le domaine inertiel. On observe par

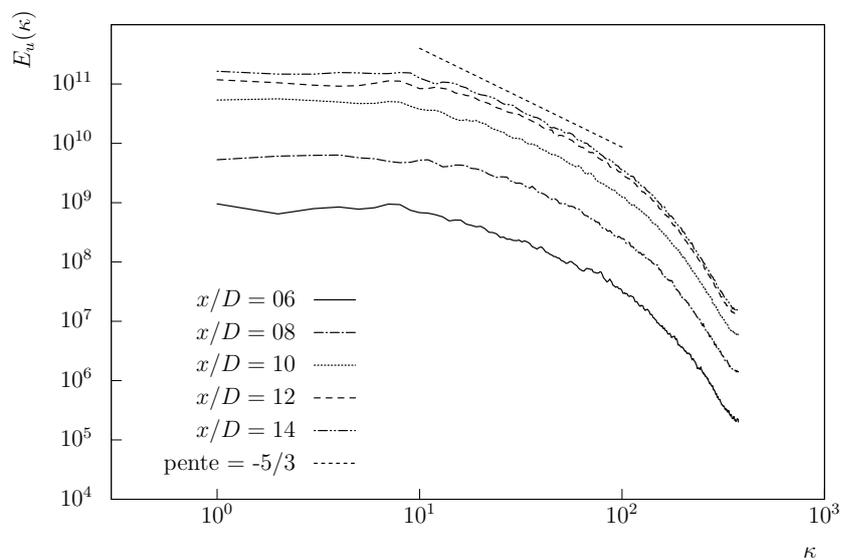


FIGURE 5.4 – Spectre de l'énergie cinétique turbulente $E_u(\kappa)$ tracé en fonction du nombre d'onde κ [m^{-1}] à différentes abscisses.

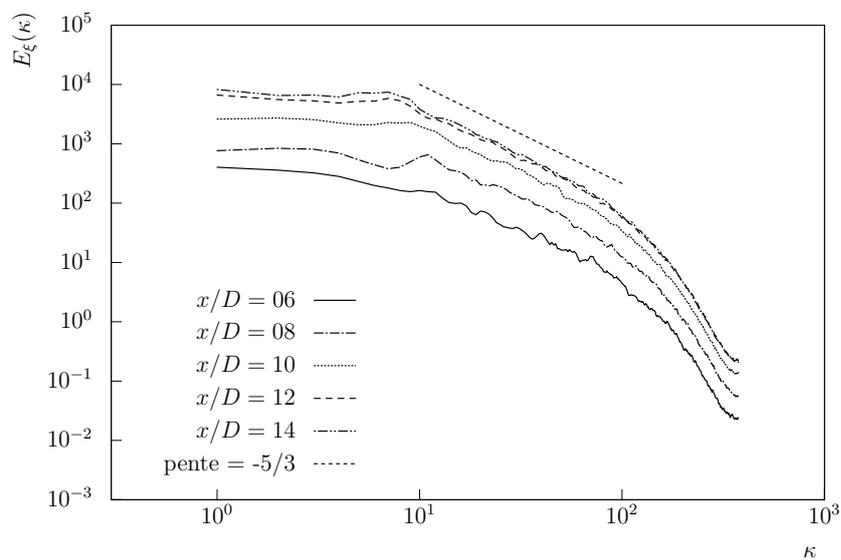


FIGURE 5.5 – Spectre du traceur passif $E_\xi(\kappa)$ tracé en fonction du nombre d'onde κ [m^{-1}] à différentes abscisses.

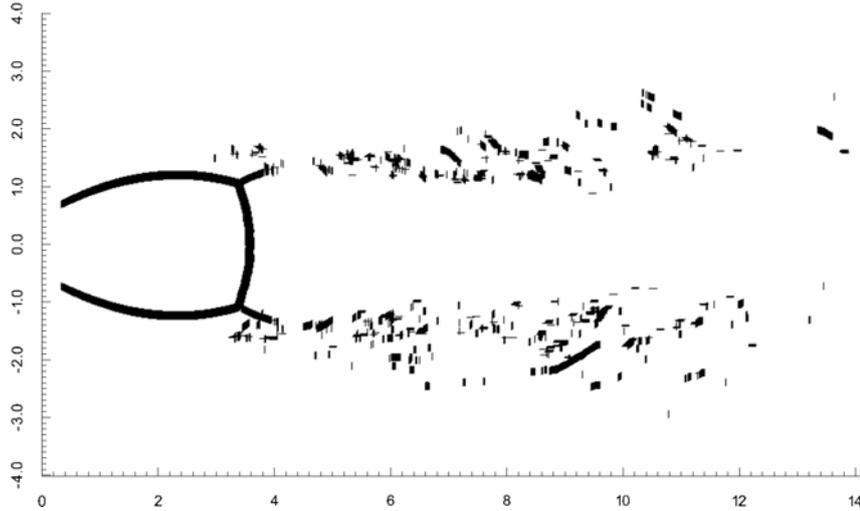


FIGURE 5.6 – Cartographie des zones de déclenchement de la pondération non-linéaire du schéma WENO7.

ailleurs l'absence d'accumulation d'énergie artificielle aux plus petites échelles résolues.

La figure 5.6 présente les zones où le décentrage lié au schéma WENO s'opère. Le déclenchement du schéma WENO s'effectue principalement le long du choc “en tonneau”, autour du disque de Mach ainsi que le long du choc réfléchi. En aval du disque de Mach, il ne se déclenche quasiment plus. Cette figure permet donc de confirmer le faible niveau résiduel de diffusion numérique présent dans cette simulation.

5.4 Étude de la structure macroscopique du jet

5.4.1 Influence du changement de fluide injecté

Cette partie va être consacrée à l'étude de la structure du jet d'hydrogène “jet-3”. Pour cela, nous allons procéder à une comparaison de celui-ci avec le jet d'air “jet-2” étudié dans le chapitre (4). Les deux simulations ont été effectuées avec le même NPR et la même température totale à l'injection. Nous pourrions ainsi étudier l'influence du changement de fluide injecté sur la structure d'un jet fortement sous-détendu et sur les différents paramètres physiques. La nature du fluide injecté impacte directement le rapport entre la masse volumique à l'injection et la masse volumique de l'atmosphère ambiante $s_\rho = \rho_{inj}/\rho_{amb}$. Dans le cas du jet d'air, ce rapport vaut 4.49 alors qu'il n'est que de 0.315 dans le cas du présent jet d'hydrogène.

Nous nous intéressons dans un premier temps au champ proche de ce jet. La figure 5.7 présente un schlieren basé sur la masse volumique ainsi qu'un champ instantané de vorticités adimensionnées. Le premier champ 5.7(a) nous permet de comparer visuellement la structure compressible se développant juste en aval de l'injection. Ainsi, nous pouvons

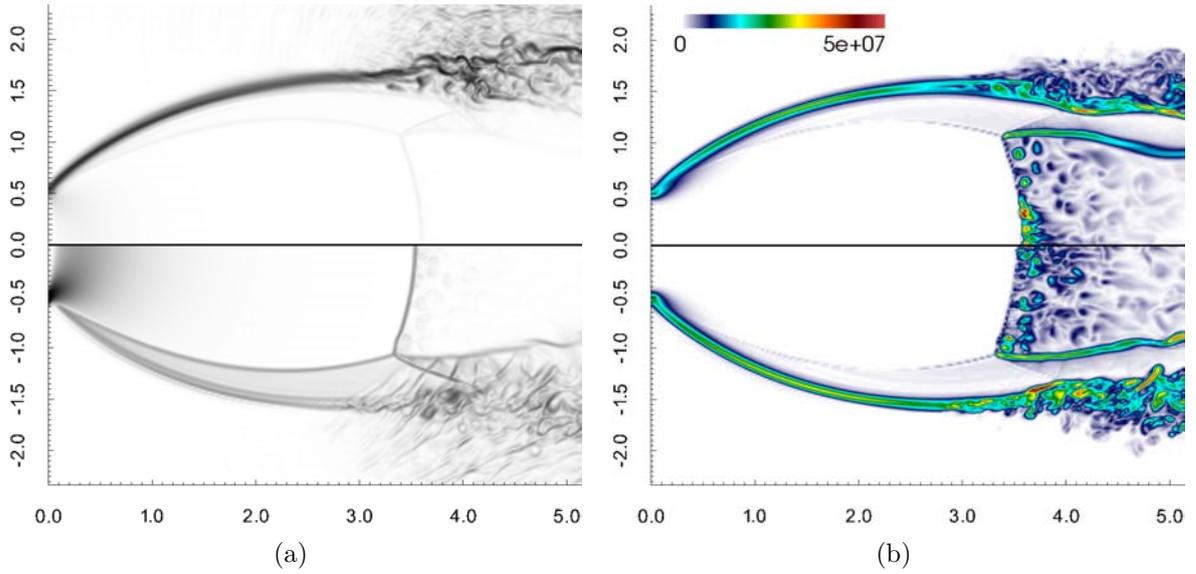


FIGURE 5.7 – Comparaison en champ proche entre le jet d’air “jet-2” et le jet d’hydrogène “jet-3” : schlieren basé sur la masse volumique (a) et vorticit  adimensionn e par (U_{inj}/D) (b). Les parties sup rieures correspondent au cas hydrog ne et les parties inf rieures au cas air.

remarquer que la position du disque de Mach est l g rement d cal e vers l’aval pour le jet d’hydrog ne. Nous avons vu que le d veloppement de la structure de ce jet est principalement pilot e par le rapport des capacit s calorifiques γ . Dans le cas pr sent, le rapport γ de l’hydrog ne est proche de celui de l’air. Nous ne devrions donc pas observer de changements importants (du moins macroscopiquement). La position du disque de Mach est essentiellement pilot e par le NPR et le rapport des capacit s calorifique γ . L’air et l’hydrog ne ont des valeurs de γ voisines et les conditions de pression sont conserv es entre les deux simulations, il est donc normal que les param tres du disque de Mach n’ voluent que tr s peu. Nous constatons en premier lieu que la position du disque de Mach n’a que l g rement recul , se positionnant   $x_{DM}/D = 3.605$ (compar    $x_{DM}/D = 3.55$ pour le jet d’air), soit une  volution de 1.5%. Le diam tre du disque de Mach s’en retrouve  galement l g rement modifi  avec une valeur $D_{DM}/D = 2.16$. Ce rapport  tait de 2.2 pour le jet d’air. Ce qui correspond   une  volution de 1.8%. Comme attendu, les modifications des caract ristiques du disque de Mach sont donc tr s faibles voire tout   fait n gligeables. Concernant la comparaison de l’angle du choc r fl chi et de l’ paisseur δ (d finis dans le paragraphe 4.5 comme  tant la hauteur entre le choc r fl chi et la ligne de glissement issue du point triple), la valeur du premier est approximativement de 28° ce qui est tr s proche de l’angle mesur  pour le cas air ($\beta_{air} \approx 27^\circ$). La valeur de la deuxi me grandeur est de $\delta/D = 0.257$. La comparaison des δ/D pour les cas consid r s ici laisse appara tre une diff rence d’environ 10%. Il est difficile d’attribuer cette diff rence non n gligeable

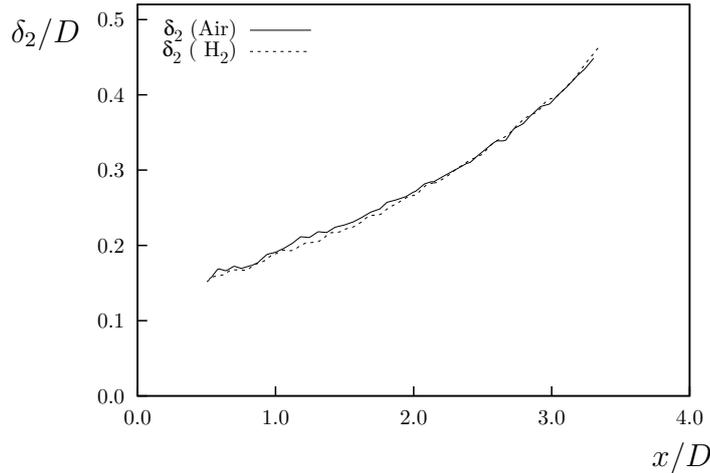


FIGURE 5.8 – Évolution de l'épaisseur δ_2 de la couche supersonique entre le choc *en tonneau* et la périphérie du jet.

aux seuls effets de changement de fluide tant cette propriété est complexe à bien définir et estimer.

Mis à part cette légère différence, les deux jets présentent les mêmes caractéristiques de jet fortement sous détendu déjà présentées précédemment. La partie droite de la figure 5.7(b) expose un champ instantané de la vorticit . Dans le champ proche, les niveaux de vorticit  atteints sont comparables. La comparaison des niveaux de vorticit  obtenus dans le champ proche de l'injection (figure 5.7(b)) met en  vidence des structures comparables. La production de vorticit  appara t notamment au niveau de la fronti re externe du jet, au niveau du point triple ainsi qu'au point d'impact du choc r fl chi sur la couche de m lange externe. Les amplitudes de la vorticit  adimensionn e g n r es par les diff rentes structures sont du m me ordre de grandeur dans les deux cas consid r s ici.

La figure 5.8 reporte l' volution de l' paisseur de la couche supersonique δ_2 . Cette  paisseur repr sente la distance entre le choc "en tonneau" et la p riph rie externe du jet. Nous observons que les deux profils se superposent parfaitement. Ceci confirme que le champ proche du jet fortement sous d tendu d pend principalement du rapport entre la pression   l'injection et l'atmosph re ambiante (NPR) et du rapport des capacit s calorifiques. Le rapport entre la densit    l'injection et la densit  ambiante n'a pratiquement aucun impact sur la topologie (champ proche) du jet.

Nous allons maintenant visualiser et comparer le jet d'air et le jet d'hydrog ne sur l'ensemble du domaine de calcul. La figure 5.9 montre un champ de nombre de Mach moyen (a), un champ de la temp rature moyenne (b) ainsi qu'un champ de variance de la masse volumique moyenne (c). La figure 5.10 expose les profils axiaux du nombre de Mach (a), de la vitesse longitudinale moyenne adimensionn e \tilde{u}/u_{inj} (b), de la temp rature normalis e \bar{T}/T_{inj} (c) et du traceur passif $\tilde{\xi}$ (d).

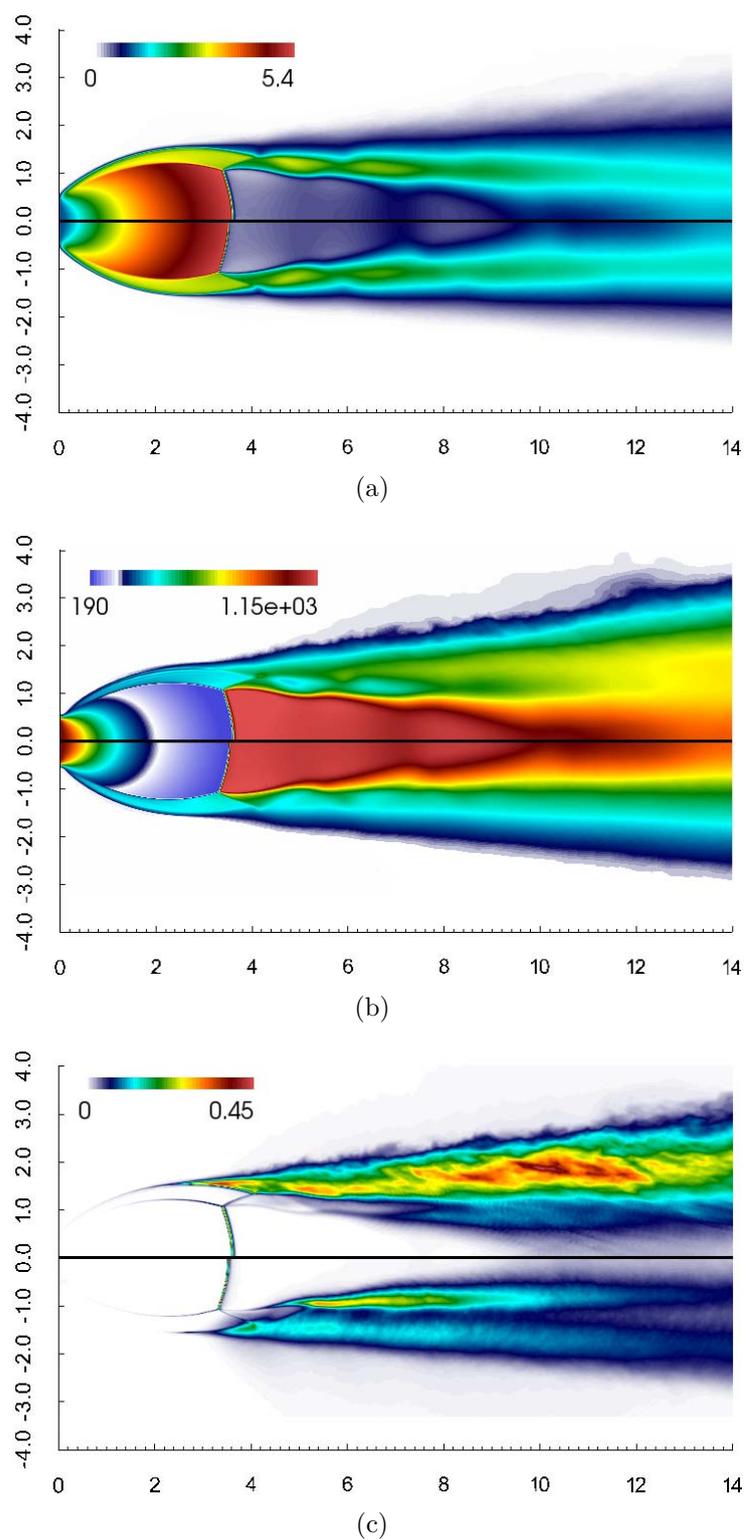


FIGURE 5.9 – Comparaison entre le jet d’air “jet-2” et le jet d’hydrogène “jet-3” : nombre de Mach (a), température (en K) (b) et rapport $\bar{\rho}'^2/\bar{\rho}^2$ (c). Les parties supérieures de chacune des trois figures correspondent au cas hydrogène et les parties inférieures au cas air.

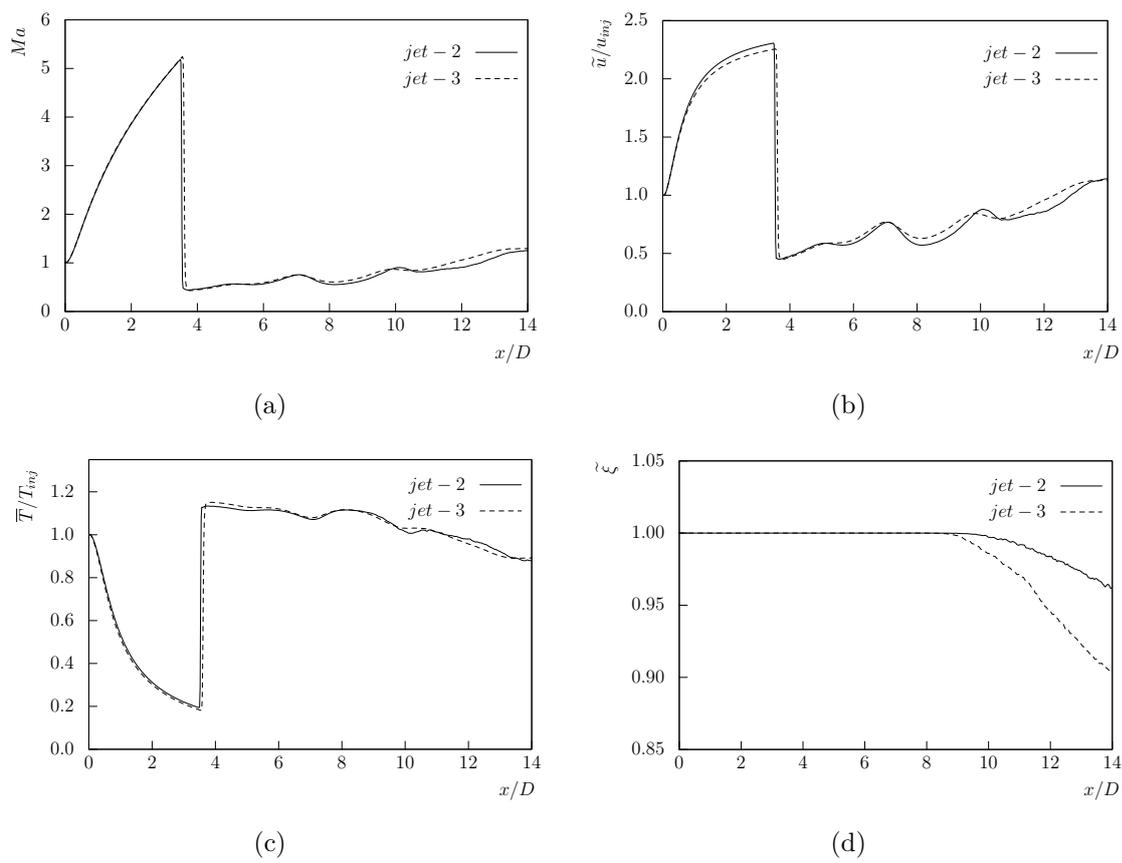


FIGURE 5.10 – Structure du jet d'hydrogène : profils axiaux du nombre de Mach moyen (a), de la vitesse axiale normalisée \tilde{u}/u_{inj} (b), de la température normalisée \bar{T}/T_{inj} (c) et du traceur passif $\tilde{\xi}$ (d).

Sur l'évolution du nombre de Mach dans le jet (cf. figures 5.9(a), 5.10(a) et 5.11(a)), nous pouvons relever l'absence de différence majeure entre les simulations conduites avec les deux fluides (air ou hydrogène). Les nombres de Mach atteints en amont du disque de Mach sont similaires. L'évolution de la poche subsonique en aval du disque de Mach est en revanche notablement impactée par le changement de fluide injecté. En effet, dans le cas du jet d'air sa longueur est de $L_{s2} = 9.03D$. La poche subsonique du jet d'hydrogène est bien plus courte mesurant $L_{s3} = 8.05D$. Nous pouvons également noter l'expansion radiale plus importante pour le cas simulant le jet d'hydrogène.

La température moyenne est présentée sur les figures 5.9(b), 5.10(c) et 5.11(b). Les différences les plus remarquables sur ce champ sont observées en aval du choc réfléchi au niveau des zones de compression et détente successives. Le jet d'hydrogène développe une zone plus chaude que dans le cas du jet d'air. Cet excédent de température comparative-ment à la simulation avec de l'air est bien visible sur les profils 5.11(b). En $x/D = 6$, la différence de température entre l'air et l'hydrogène s'observe entre $r/D = 1.2$ et $r/D = 2.0$ avec notamment une "bosse" bien perceptible. Dans le plan $x/D = 14$, les profils de température diffèrent notablement de $r/D = 0.5$ à $r/D = 3.5$. Cette différence de température est due au cisaillement beaucoup plus fort pour le jet d'hydrogène que pour le jet d'air. Les vitesses mises en jeu dans le jet d'hydrogène sont bien plus importantes que dans le jet d'air, la vitesse d'injection de l'hydrogène est quatre fois plus élevée que la vitesse d'injection de l'air. De plus, les deux couches en contact possèdent des masses volumiques très différentes dans le jet d'hydrogène (une couche d'hydrogène pur rapide et une couche d'air pur lente) alors que les différences de masse volumique dans le jet d'air ne sont dues qu'à la différence de température entre la couche rapide et la couche lente d'air pur. L'échauffement par cisaillement du jet d'hydrogène est donc bien présent ici alors qu'il n'était quasiment pas observé pour la simulation conduite avec de l'air.

La figure 5.9(c) expose la variance adimensionnée de la masse volumique. Les variations sont uniquement dues aux variations de température et de pression pour le cas du jet d'air tandis qu'elles sont également dues aux variations de compositions (espèces chimiques en présence) pour le cas du jet d'hydrogène. Ainsi, les différences observées pour les fluctuations de masse volumique sont nettement visibles. La première zone concernée par ces disparités se trouve au niveau de la frontière du jet. Les fluctuations de masse volumiques sont beaucoup plus importantes dans le cas de l'hydrogène et cela résulte de la grande différence de densité entre le jet interne et l'atmosphère ambiante. Cette zone de fortes fluctuations reflète le mélange entre l'hydrogène et l'air ambiant. Pour le cas de l'air, la différence de densité entre l'air ambiant et l'air issu du jet est bien moins importante. En aval du disque du Mach, les zones de fortes fluctuations sont situées dans la partie interne du jet pour le jet d'air alors qu'elles sont situées plus dans la partie externe du jet dans le cas du jet d'hydrogène. Nous retrouvons ici les mêmes causes que celles mentionnées ci-

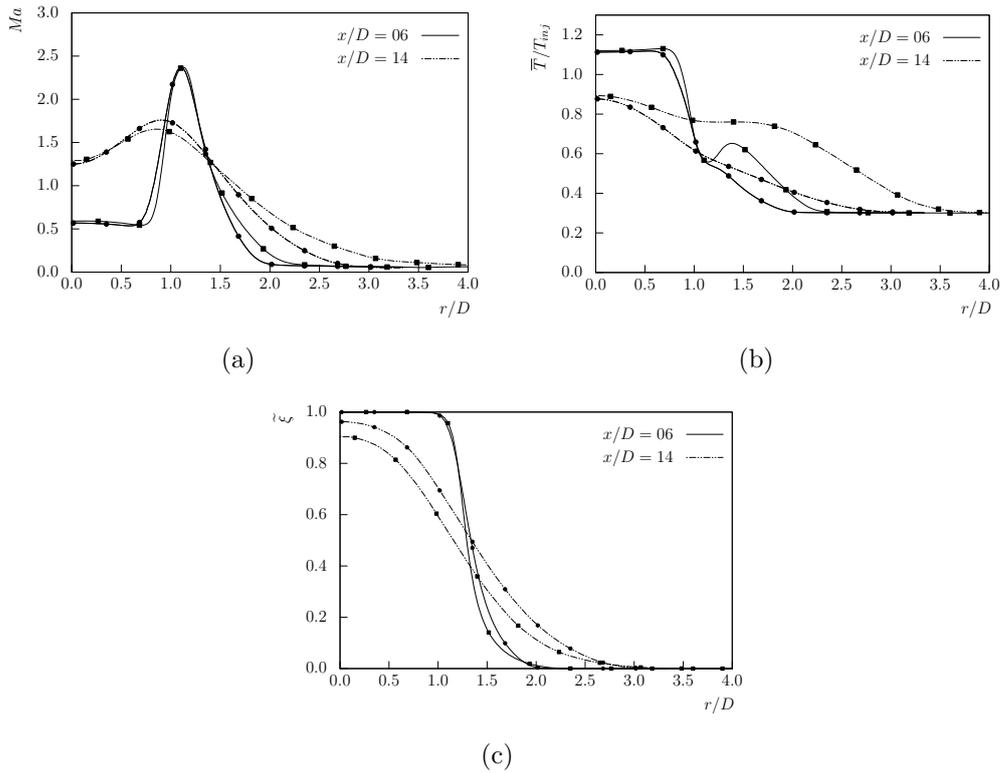


FIGURE 5.11 – Structure du jet d'hydrogène : profils radiaux du nombre de Mach moyen (a), de la température normalisée \bar{T}/T_{inj} (b) et du traceur passif ξ (c). Les symboles (●) correspondent au jet d'air “jet-2” et les symboles (■) au jet d'hydrogène “jet-3”.

dessus. Le mélange des deux milieux de masses volumiques très différentes, en l'occurrence l'hydrogène et l'air, est le mécanisme prépondérant de production de variance de masse volumique dans cette zone.

Nous nous intéressons ensuite au mélange à proprement parler en étudiant l'évolution du scalaire passif injecté dans chacun des deux jets. La figure 5.12 reprend ainsi le champ du scalaire passif moyen ξ (a), la variance de ce traceur passif ξ'^2 (b) et enfin le taux de ségrégation basé sur ce scalaire passif (c). Le champ de ξ ne permet pas de mettre en évidence de différence remarquable entre les deux jets. Nous notons simplement l'expansion radiale légèrement plus importante pour le jet d'hydrogène. En revanche, des différences bien plus importantes sont observées sur le profil axial (cf. figure 5.10(d)). La quantité de traceur disponible sur l'axe diminue beaucoup plus rapidement pour le cas dans le jet d'hydrogène. Cette diminution intervient aux alentours de $x/D = 9$ alors qu'elle apparaissait plutôt au voisinage de $x/D = 10$ pour le jet d'air. Nous constatons également que le mélange est plus intense pour le jet d'hydrogène. La valeur axiale à la frontière du domaine est bien plus faible pour le jet d'hydrogène (0.89) que pour le jet d'air (0.95). Ce comportement est provoqué par le fait que la poche subsonique est plus courte dans le jet d'hydrogène ce qui indique que la couche cisailée atteint l'axe du jet plus tôt. La

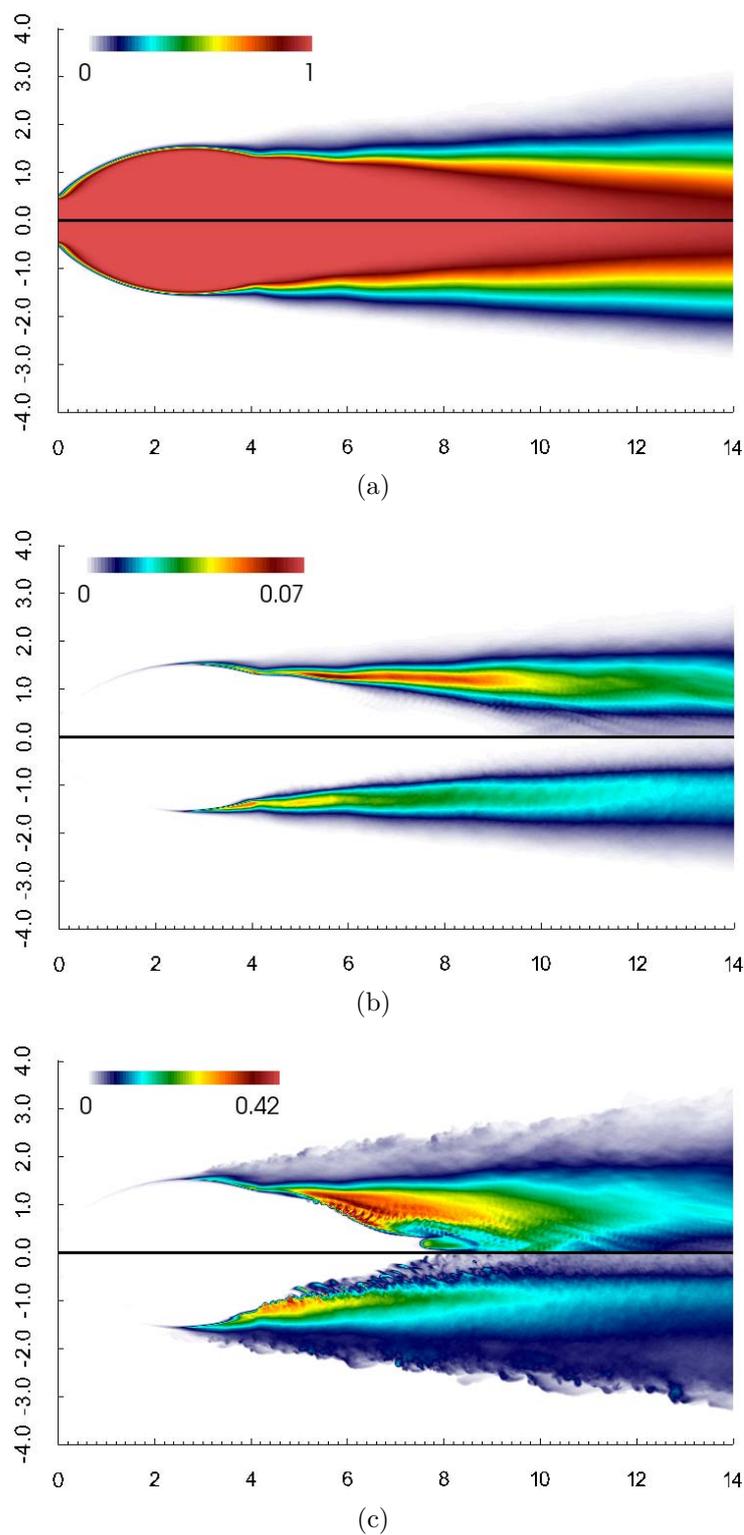


FIGURE 5.12 – Comparaison entre le jet d’air “jet-2” et le jet d’hydrogène “jet-3” : scalaire passif $\tilde{\xi}$ (a), variance du scalaire passif $\tilde{\xi}'^2$ (b) et taux de ségrégation (c). Les parties supérieures correspondent au cas hydrogène et les parties inférieures au cas air.

topologie du champ de la variance du traceur passif est, là aussi, assez similaire entre les deux jets. Les différences résident essentiellement dans les valeurs prises par la grandeur étudiée. La variance pour le jet d'hydrogène prend des valeurs beaucoup plus importantes. Cette différence est à relier aux différences de vitesse en les deux jets considérés. Le mélange moléculaire est plus long à se mettre en place. C'est également visible sur le taux de ségrégation représenté sur la figure 5.12(c). La ségrégation reste importante dans le jet d'hydrogène comparé au jet d'air où celle-ci est rapidement détruite.

Hormis le profil de scalaire passif, tous les profils axiaux sont semblables. Les différences apparaissent sur les profils radiaux, notamment au niveau de la température et de l'ouverture de jet.

Nous nous intéressons maintenant aux caractéristiques de l'écoulement turbulent. Les profils d'énergie cinétique turbulente k dans les plans $x/D = 6$ et 14 sont comparés pour le jet d'air et le jet d'hydrogène. Ils sont reportés dans la figure 5.14(a). Les courbes présentent la même allure. Dans les deux jets considérés, nous relevons la présence de deux pics de fluctuations à l'intérieur des couches cisailées aux niveaux des profils pris dans le plan $x/D = 6$. Les profils dans le champ lointain (*i.e.* $x/D = 14$) sont également similaires avec un seul pic au niveau de la couche de mélange subsistante et un degré de fluctuation non négligeable au centre du jet. Cependant, malgré les similitudes constatées, nous notons aussi certaines disparités pour l'amplitude des maxima et leurs positions respectives. En effet, nous observons pour les pics d'énergie cinétique de turbulence un écart au voisinage du centre du jet dans le cas du jet d'hydrogène et ce quelle que soit la position considérée. De plus, un déficit de fluctuation (environ 30%) au centre de la couche de mélange interne et un niveau de turbulence plus élevé (environ 45%) dans la seconde couche de mélange sont remarqués pour le jet d'hydrogène. Ces caractéristiques sont également étudiées sur les profils des composantes principales des fluctuations (composante longitudinale 5.14(b), radiale 5.14(c) et azimutale 5.14(d)). La composante longitudinale R_{11} présente des niveaux de fluctuations bien plus élevés dans le jet d'hydrogène alors que les fluctuations transversales sont plus faibles et ne montrent quasiment pas de maximum pour la couche cisailée interne. Les niveaux d'énergie cinétique turbulente plus élevés dans la couche de mélange externe pour le jet d'hydrogène sont intégralement dus aux fluctuations plus importantes de la vitesse longitudinale. La présence de fluctuations de masse volumique, importantes dans cette région, est responsable de cette production de turbulence. La couche cisailée externe est également affectée par le mélange de deux fluides de masse volumique différente (l'hydrogène et l'air) alors que la couche interne ne résulte que du différentiel de vitesse entre les deux courants d'hydrogène.

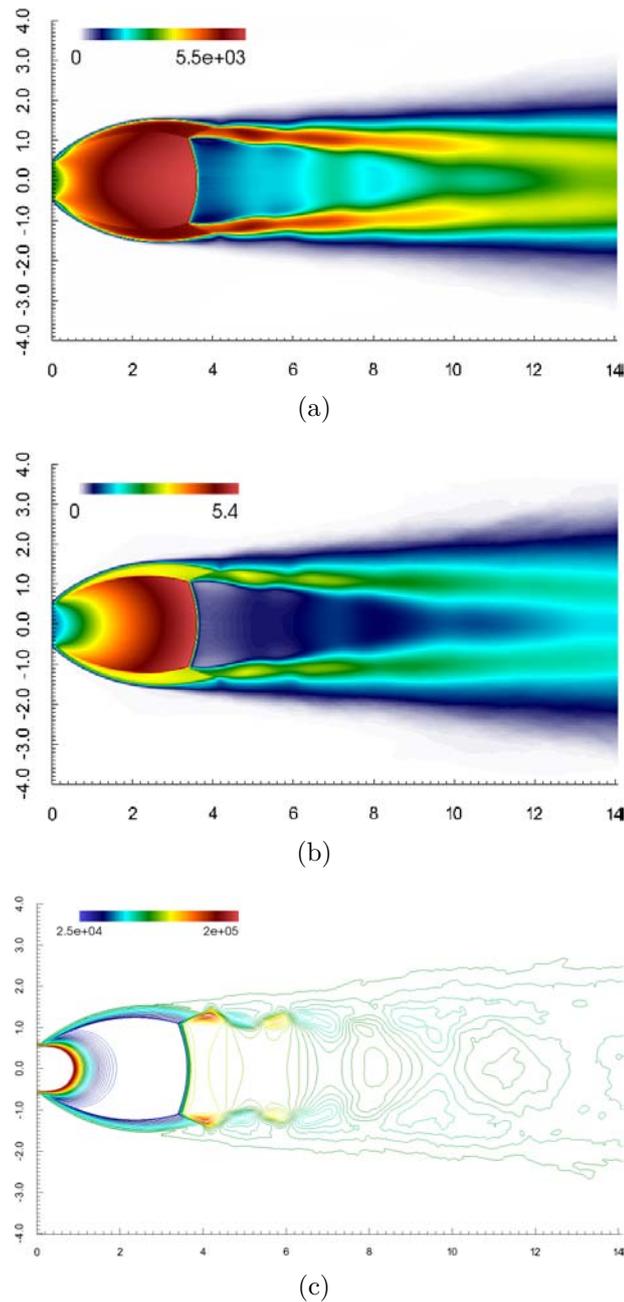


FIGURE 5.13 – Structure du jet d’hydrogène : champ de la composante longitudinale de la vitesse moyenne \tilde{u} ($m.s^{-1}$) (a), champ de nombre de Mach moyen (b) et iso-contours de la pression moyenne (Pa) (c).

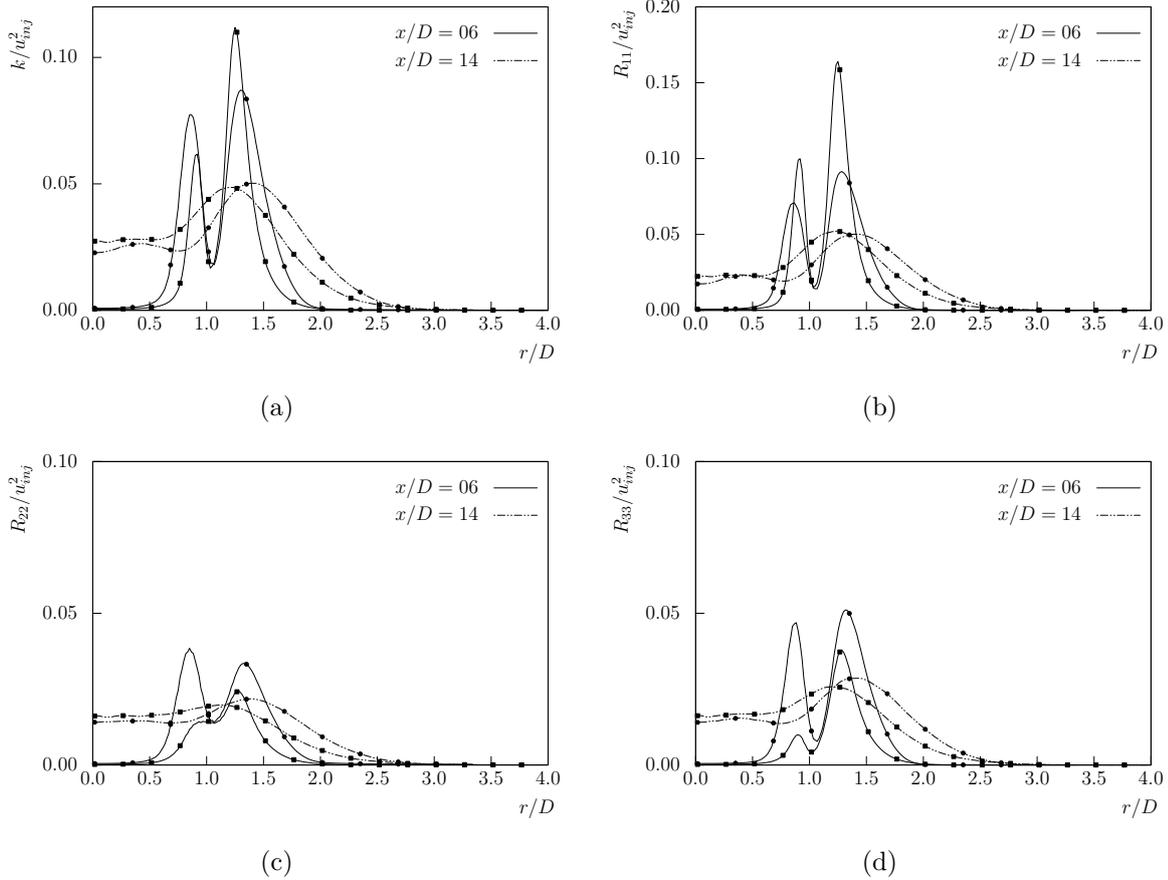


FIGURE 5.14 – Structure du jet d'hydrogène : comparaisons des profils radiaux de l'énergie cinétique turbulente (a) et des tensions turbulentes adimensionnées R_{11} , R_{22} et R_{33} (composantes longitudinale (b), radiale (c) et azimutale (d)). Les symboles (●) correspondent au jet d'air "jet-2" et les (■) au jet d'hydrogène "jet-3".

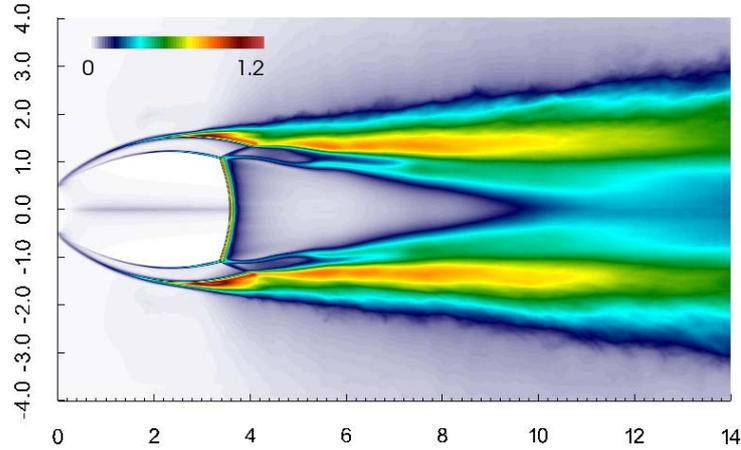


FIGURE 5.15 – Champ du nombre de Mach turbulent $M_t = \sqrt{u'_i u'_i} / c$.

5.4.2 Effet de masse volumique variable

Nous allons étudier dans cette partie les différents effets induits par un écoulement à masse volumique variable. Les résultats exposés sont issus du jet d'hydrogène inerte simulé avec les propriétés de transport calculées à l'aide de la méthode de Hirschfelder et Curtiss [58]. Il est important de distinguer les différentes sources qui peuvent faire varier la masse volumique. Celles-ci peuvent être séparées en deux catégories principales : les effets de compressibilité associés au changement de volume de la particule fluide et ceux résultant des variations de composition ou de volume dues au dégagement de chaleur [133]. Ces deux types de variations sont rencontrés dans notre situation. La compressibilité du jet étudié ici est caractérisée par le nombre de Mach turbulent (cf. figure 5.15). Celui-ci prend en compte les effets locaux de la compressibilité. On observe sur la figure 5.15 que le nombre de Mach turbulent décroît en s'éloignant de l'injection. Ce comportement est lié à la diminution progressive des fluctuations turbulentes. Néanmoins, il présente des valeurs élevées confirmant l'ampleur des effets de compressibilité dans ce type de jet.

Nous allons à présent considérer les fluctuations des variables thermodynamiques. La partie supérieure de la figure 5.16 montre le champ de $\overline{\rho'^2} / \overline{\rho}^2$ tandis que la partie inférieure présente le champ de $\overline{P'^2} / \overline{P}^2$. La figure 5.17 reprend les profils des fluctuations adimensionnées des variables thermodynamiques dans trois plans transversaux. La prédominance des fluctuations de densité par rapport aux fluctuations de pression est évidente. Les pics de la variance adimensionnée de la masse volumique atteignent des valeurs proches de 25% alors que les maxima observés pour la pression sont de l'ordre de environ 7.5%. Il est également à noter que les pics de variance de masse volumique restent à un niveau élevé dans toute la zone de fort cisaillement du plan $x/D = 6$ au plan $x/D = 14$ alors que la variance de pression diminue fortement en s'éloignant de l'injection. Enfin, nous constatons un déplacement vers l'extérieur du jet du pic de variance de masse volumique

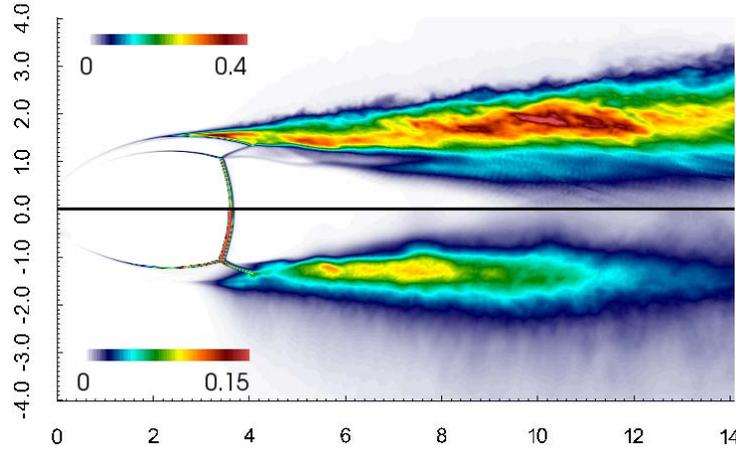


FIGURE 5.16 – Champs de fluctuations des variables thermodynamique. La partie supérieure correspond au champ de $\overline{\rho'^2}/\overline{\rho^2}$ et la partie inférieure représente le champ de $\overline{P'^2}/\overline{P^2}$.

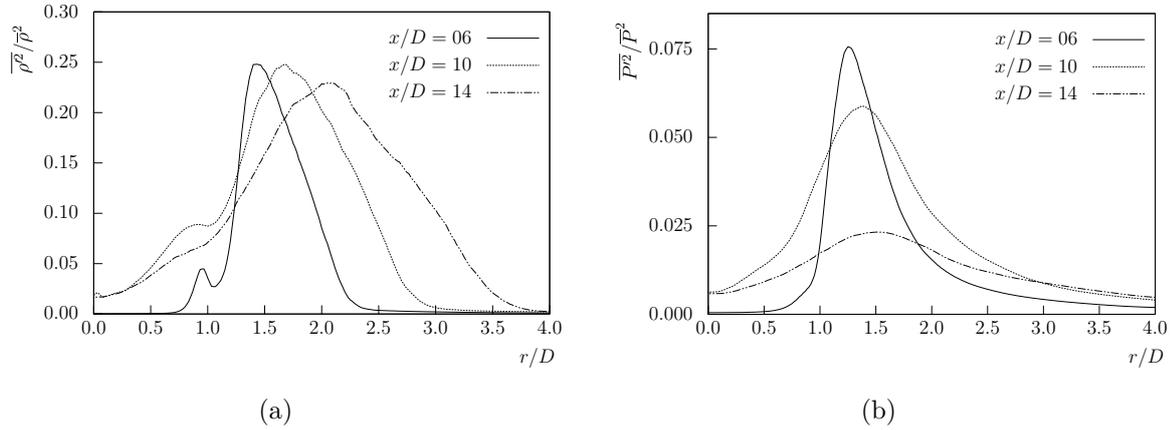


FIGURE 5.17 – Profils des fluctuations adimensionnées des variables thermodynamiques : masse volumique $\overline{\rho'^2}/\overline{\rho^2}$ (a) et pression $\overline{P'^2}/\overline{P^2}$ (b).

(de r/D environ égal à 1.5 pour le plan $x/D = 6$ à r/D environ égal à 2.25 pour le plan $x/D = 14$) à l'endroit où les pics de variance pour la pression sont quasiment toujours situés à $r/D = 1.5$.

Nous allons ensuite étudier plus précisément les fluctuations de masse volumique en les décomposant en partie acoustique et entropique. Cette approche, fréquemment utilisée pour les écoulements compressibles, permet de séparer les fluctuations thermodynamiques (masse volumique, température et pression) en partie acoustique et entropique afin de distinguer les fluctuations de densité provoquées par des fluctuations de pression de celles provoquées par des fluctuations de composition. La définition d'une telle décomposition n'est pas unique. Nous retenons dans cette étude la définition introduite par Kovaszny [134]. Les fluctuations de pression sont associées aux modes acoustique. Les

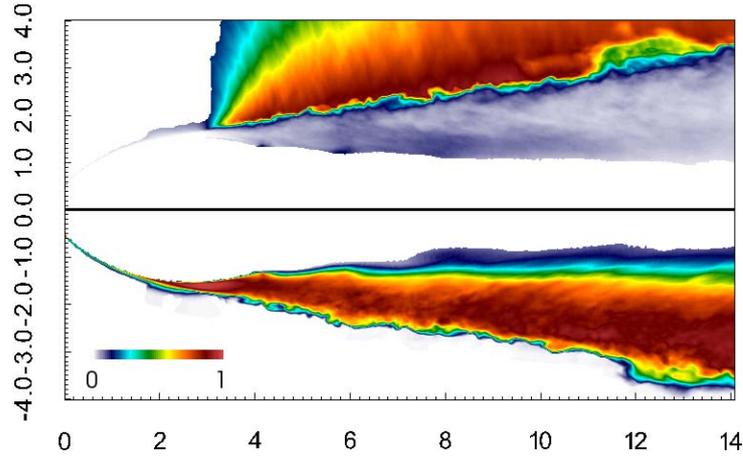


FIGURE 5.18 – Champ des contributions des modes acoustique (partie supérieure) et entropique (partie inférieure) dans les fluctuations de masse volumique.

fluctuations isentropiques de masse volumique et de température sont également associées aux modes acoustique. Explicitement, la décomposition est définie par :

$$P'_{ac} = P' \quad (5.1)$$

$$\rho'_{ac} = \frac{P'_{ac}}{\bar{c}^2} = \frac{P'}{\bar{c}^2} \quad (5.2)$$

tandis que la partie entropique est définie par :

$$P'_{en} = 0 \quad (5.3)$$

$$\rho'_{en} = \rho' - \rho'_{ac} \quad (5.4)$$

On vérifie bien que $\overline{P'_{ac}} = 0$, $\overline{P'_{ent}} = 0$, $\overline{\rho'_{ac}} = 0$ et $\overline{\rho'_{ent}} = 0$. La figure 5.19 montre les valeurs de la décomposition de la masse volumique dans deux plans longitudinaux ($x/D = 6$ et $x/D = 14$). Dans le plan $x/D = 6$ (a), nous pouvons distinguer deux types de comportement. Pour la partie interne du jet, *i.e.* $r/D < 2.0$, la majorité des fluctuations de masse volumique est associée au mode entropique. Dans cette région, les fluctuations de densité sont essentiellement dues aux effets de mélange. Pour la partie externe du jet, *i.e.* $r/D > 2.0$, la tendance s'inverse. De façon attendu, le mode acoustique domine largement dans la zone externe du jet. On vérifie néanmoins qu'il est bien négligeable dans la zone cisillée. C'est donc bien le comportement thermique du jet et les fluctuations d'échauffement par cisaillement qui semblent a priori piloter au premier ordre les fluctuations de masse volumique et le mélange associé à petite échelle. La figure 5.20 présente les coefficients de corrélation entre la masse volumique et le scalaire passif 5.20(a) puis entre la

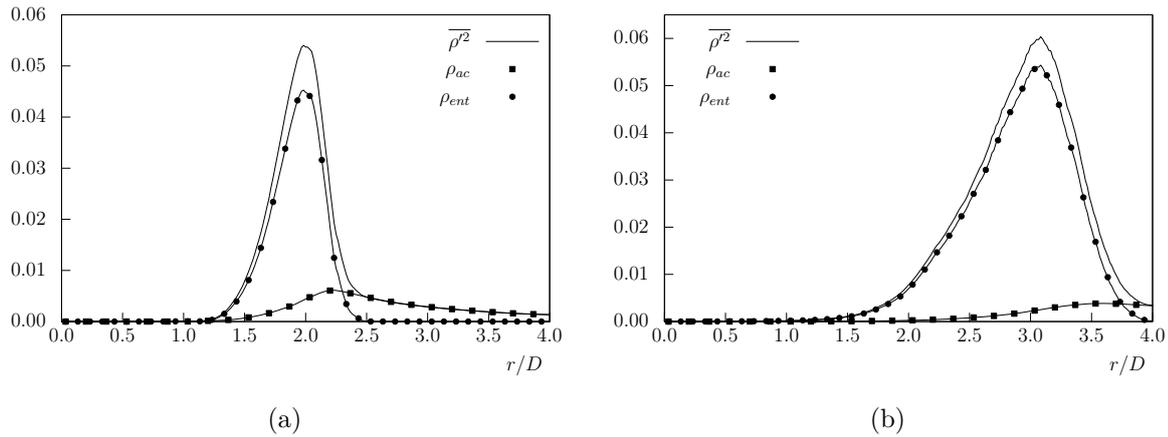


FIGURE 5.19 – Contribution des modes acoustique et entropique dans les fluctuations de masse volumique pour différentes distances de l'injection ($x/D = 6$ (a) et $x/D = 14$ (b)).

masse volumique et la pression 5.20(b). Ces coefficients de corrélation sont définis par :

$$R(\rho, \xi) = \frac{\overline{\rho' \xi'}}{\rho_{rms} \xi_{rms}} \quad (5.5)$$

$$R(\rho, P) = \frac{\overline{\rho' P'}}{\rho_{rms} P_{rms}} \quad (5.6)$$

Une des premières observations que nous pouvons faire sur le coefficient de corrélation entre la masse volumique et le scalaire passif (cf. figure 5.20(a)) est qu'il est négatif. Ce résultat déjà observé dans les investigations de Sautet [135] est la conséquence du rapport de densité inférieur à l'unité pour ce jet d'hydrogène. Ainsi, une diminution du scalaire passif conduit à une augmentation de la masse volumique. Ceci s'explique par le fait que le scalaire passif suit l'évolution de la teneur en hydrogène ($\xi = 1$ correspond ici à $Y_{H_2} = 1$) qui est le gaz le plus léger dans nos simulations. Ceci entraîne donc une augmentation de la masse volumique lorsque le scalaire passif diminue. Ensuite, nous notons que le coefficient $R(\rho, \xi)$ est proche de l'unité dans la partie centrale du jet pour les distances de l'injection supérieures à $10D$. Pour le plan $x/D = 6$, la corrélation entre la masse volumique et le traceur passif n'apparaît que dans la zone où le cisaillement est le plus important, *i.e.* pour une valeur du rayon adimensionné comprise entre 1.0 et 2.5. En ce qui concerne le coefficient $R(\rho, P)$, nous constatons que les fluctuations de la densité et de la pression sont corrélées à l'extérieur des zones de cisaillement dans les différents plans présentés sur la figure 5.20(b). Cela signifie que les fluctuations de densité sont exclusivement associées au mode acoustique. De plus, il est intéressant de remarquer que les profils des coefficients de corrélation sont quasiment opposés.

Enfin, nous allons étudier la production d'entropie dans le jet et plus spécifique-

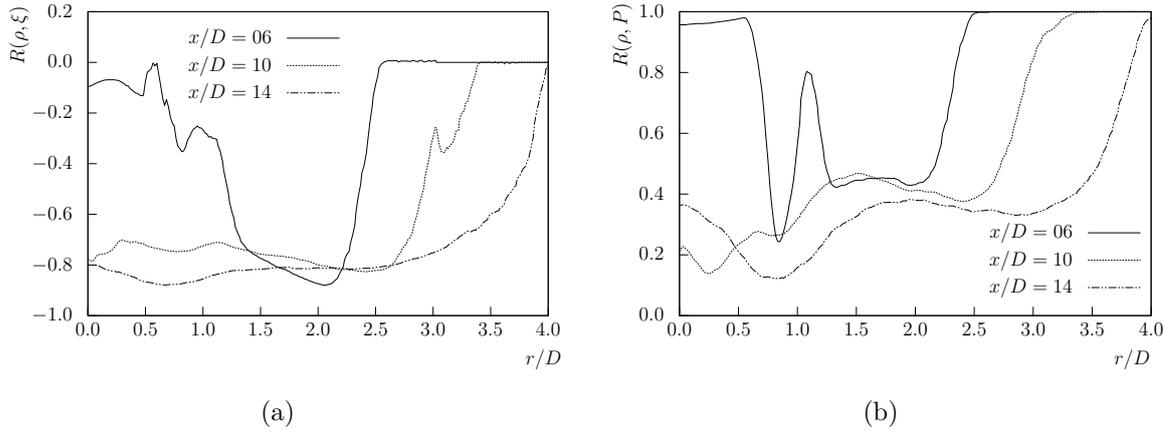


FIGURE 5.20 – Corrélation entre les fluctuations de masse volumique et de scalaire passif (a) ainsi qu'entre les fluctuations de masse volumique et de pression (b).

ment dans le sillage du disque de Mach. L'étude de la génération de vorticit  et donc de la production d'ensrophie est particuli rement int ressante pour un  coulement   masse volumique variable tel que celui consid r  ici. Afin d' tudier la dynamique de l'ensrophie, nous consid rons la forme simplifi e suivante de l' quation de transport pour cette quantit  :

$$\begin{aligned} \frac{D(\overline{\omega_i \omega_i})}{Dt} = & \overline{2\omega_i \omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \overline{2\omega_i \omega_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j}} \\ & + 2\epsilon_{ijk} \omega_i \overline{\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial P}{\partial x_k}} + 2\epsilon_{ijk} \omega_i \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{km}}{\partial x_m} \right)} \end{aligned} \quad (5.7)$$

o  ϵ_{ijk} correspond au symbole de Levi-Civita d fini par $\epsilon_{ijk} = (i - j)(j - k)(k - i)/2$. Les quatre termes du second membre de l' quation (5.7) d crivent, respectivement, l' tirement tourbillonnaire, l'expansion volumique (dilatation/compression), le couple barocline et les effets visqueux. Dans un  coulement incompressible   masse volumique constante, le membre de droite se r duit au premier et dernier terme. La production / destruction d'ensrophie r sulte uniquement des processus d' tirement tourbillonnaire et des effets mol culaires. Pour les  coulements   masse volumique variable apparaissent deux m canismes suppl mentaires dans la dynamique de la vorticit  prenant part   la production d'ensrophie : le terme de dilatation et le couple barocline. Le deuxi me terme d pend de la variation de volume de la particule fluide au travers de la divergence du vecteur vitesse. Le couple barocline est sp cifique aux  coulements   masse volumique variable qu'ils soient compressibles ou non. Il repr sente la g n ration de vorticit  induite par l'interaction entre les gradients de masse volumique et les gradients de pression. Ce terme est pr sent lorsque ces deux vecteurs ne sont pas colin aires. Le terme de dilatation vo-

luminique peut devenir très important dans les écoulements réactifs où les variations de masse volumique dépendent fortement du dégagement de chaleur.

La figure 5.21 expose un champ moyen de vorticit   ainsi qu'un champ moyen d'enstrophie. Nous retrouvons les zones de forte vorticit   au niveau du point triple et au niveau de l'impact du choc r  fl  chi avec la p  riph  rie du jet. Les amplitudes restent importantes dans les couches de m  langes supersoniques mais elles diminuent rapidement au fur et    mesure que le m  lange s'installe. En aval du disque de Mach, nous voyons appara  tre quelque trace de production de vorticit   de faible amplitude g  n  r  e par ce dernier mais elles sont tr  s rapidement d  truites.

La figure 5.22 reprend les deux termes caract  ristiques des   coulements    masse volumique variable : le terme de dilatation (partie sup  rieure) et le couple barocline (partie inf  rieure). Le disque de Mach correspond    une r  gion de forte production d'enstrophie par la dilatation et par le couple barocline. La production de vorticit   en aval d'un choc courbe est d  j   bien   tablie. Concernant le couple barocline, il peut s'av  rer producteur ou destructeur de vorticit   en fonction du rayon de courbure du choc et de la direction du champ de vitesse en aval de celui-ci [136]. La production par la dilatation est   galement tr  s pr  sente    la p  riph  rie du jet en aval du point d'impact du choc r  fl  chi. En amont de celui-ci, ce terme devient destructeur au niveau de la zone de d  tente et dans la couche de m  lange issue du point triple. Il redevient positif (production) dans la couche de cisaillement issue du point triple. A partir du point triple et jusqu'   une distance de huit diam  tres de l'injection, se succ  dent des zones de compression et de d  tente dans la couche de m  lange supersonique. Dans cette r  gion, le terme de dilatation alterne entre production et destruction d'enstrophie devenant tant  t n  gatif dans les zones de d  tente et tant  t positif dans les zones o   la compression domine. Dans le champ lointain o   ne subsistent plus ces successions de d  tente et de compression, il contribue    faire d  cro  tre l'enstrophie. La topologie du couple barocline est l  g  rement diff  rente. Tout d'abord, l'amplitude du couple barocline est globalement inf  rieure, d'un ordre de grandeur, au terme de dilatation. En revanche, les deux termes   tudi  s dans ce cas pr  sentent de tr  s faibles amplitudes au niveau du "choc en tonneau".

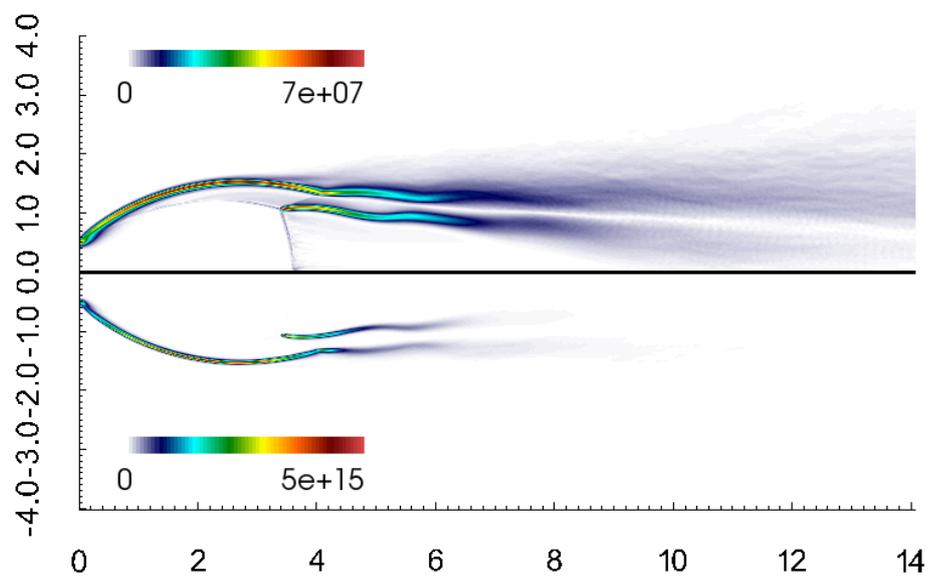


FIGURE 5.21 – Champ moyen de vorticité (s^{-1}) (partie supérieure) et d'ensrophie (s^{-2}) (partie inférieure).

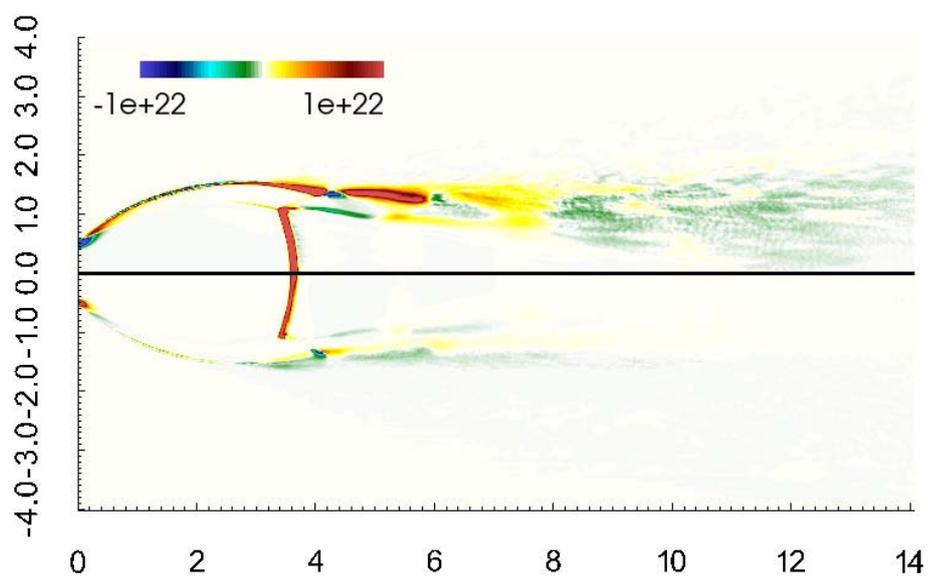


FIGURE 5.22 – Production d'ensrophie. Comparaison entre le terme barocline (s^{-3}) et le terme de dilatation (s^{-3}) de l'ensrophie. La partie supérieure correspond au terme de dilatation et la partie inférieure au couple barocline.

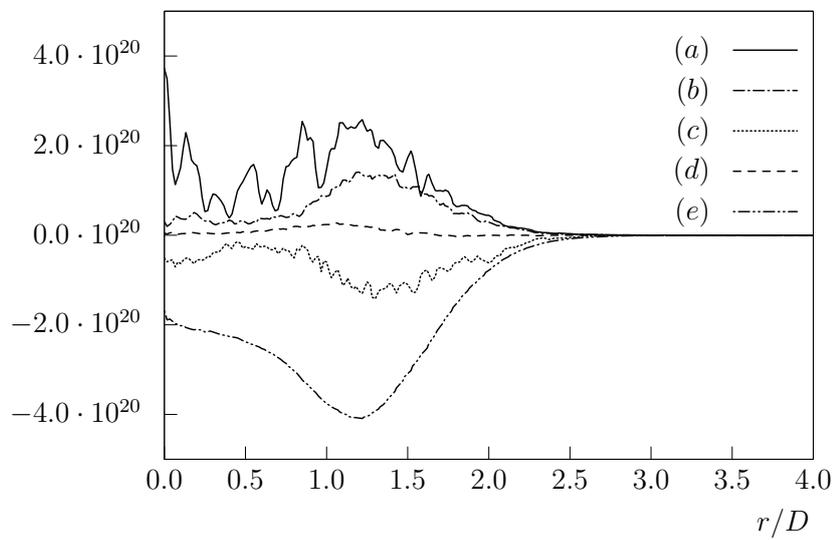


FIGURE 5.23 – Bilan de l'enstrophie dans le plan de sortie du domaine ($x/D = 14$) : (a) terme de convection, (b) étirement tourbillonnaire, (c) expansion volumique, (d) couple barocline et (e) diffusion visqueuse.

5.5 Analyse du mélange aux petites échelles

5.5.1 Évolution du gradient scalaire

Nous allons évaluer, dans cette section, le gradient scalaire et son évolution dans le jet. Dans cette partie, nous utilisons une nouvelle définition pour les scalaires passifs basée sur les éléments chimiques (atomes) et non plus sur les espèces chimiques (molécules). Sutherland et al. [137] définissent cette fraction de mélange par le biais de l'équation de transport suivante :

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \nabla \cdot (\rho D_\phi \nabla \phi) \quad (5.8)$$

avec ρ la masse volumique du mélange, D_ϕ le coefficient de diffusivité de ϕ et $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ est la dérivée particulaire.

L'équation de transport de l'espèce i peut être écrite sous la forme :

$$\rho \frac{DY_i}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + W_i \dot{\omega}_i \quad (5.9)$$

avec Y_i la fraction massique de l'espèce i , \mathbf{j}_i est le flux de masse de cette espèce, W_i sa masse molaire et $\dot{\omega}_i$ son taux de production chimique.

La définition de leur scalaire passif est basée sur le fait que, dans une réaction chimique, si les différentes fractions massiques d'espèces ne sont pas conservées, les fractions massiques des éléments chimiques le sont. Ceci nous amène à la définition des fractions massiques élémentaires Z_l définies par :

$$Z_l = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{l,i} W_l}{W_i} Y_i \quad (5.10)$$

où N_s représente le nombre d'espèces dans le mélange, $a_{l,i}$ est le nombre d'atomes de l'élément l dans l'espèce i , W_l est la masse molaire de l'élément l et W_i est la masse molaire de l'espèce i . Ainsi, nous pouvons écrire N_e équations de conservation de fractions massiques d'éléments :

$$\rho \frac{DZ_l}{Dt} = - \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{l,i} W_l}{W_i} \nabla \cdot \mathbf{j}_i \quad (5.11)$$

Cette nouvelle définition nous permet d'obtenir trois nouvelles fractions massiques basées sur les trois éléments chimiques présents dans les simulations (Z_H , Z_O et Z_N).

Ensuite, nous pouvons définir trois nouvelles fractions de mélanges basées sur ces fractions massiques élémentaires :

$$\xi_l = \frac{Z_l - Z_l^{ox}}{Z_l^c - Z_l^{ox}} \quad (5.12)$$

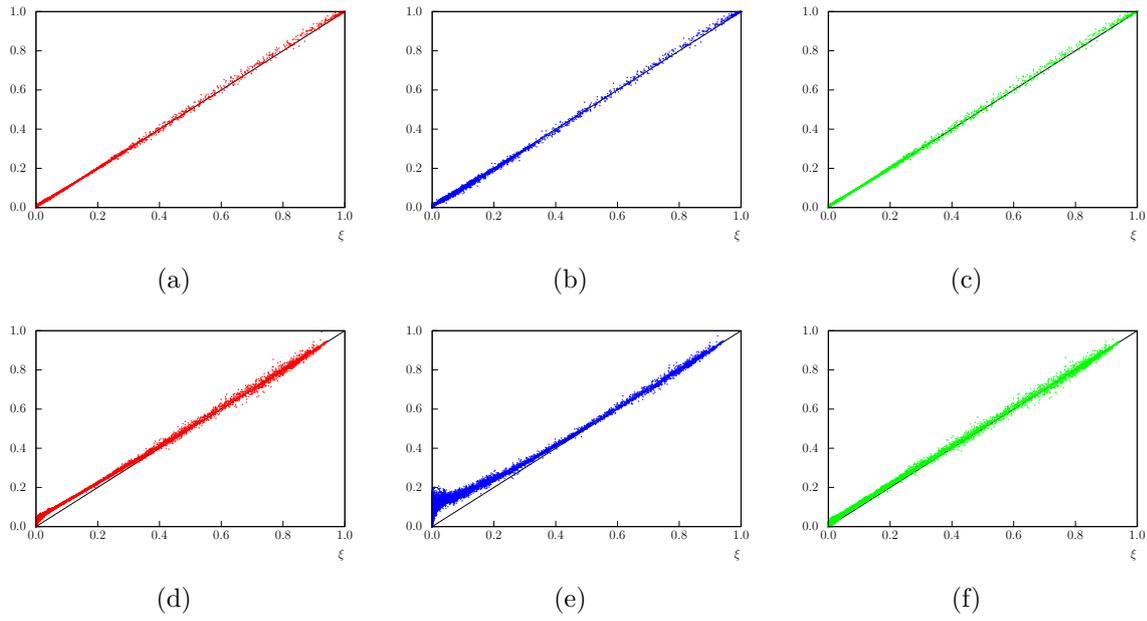


FIGURE 5.24 – *Scatterplots* des fractions de mélange basées sur les fractions massiques d'éléments Z_H (en rouge), Z_O (en bleu) et Z_N (en vert) en fonction du scalaire passif transporté ξ pour différentes positions longitudinales. Les figures (a), (b) et (c) sont positionnées à $x/D = 06$ tandis que les figures (d), (e) et (f) sont positionnées à $x/D = 14$.

Ce type de définition est aussi retenue dans l'étude récente de Gomet et al. [138]. Il est à noter, que pour le cas présent, le jet est non réactif et les espèces chimiques impliquées ne partagent pas d'élément chimique. Cette nouvelle définition basée sur les éléments chimiques est donc ici strictement équivalente à la définition basée sur les espèces chimiques. En revanche, la définition introduite ci-dessus prend une importance essentielle lorsque les simulations prennent en compte la réaction chimique. En effet, lorsque la réaction chimique intervient, les fractions massiques élémentaires seront les seules grandeurs strictement conservées.

La figure 5.24 reporte des *scatterplots* des fractions de mélange élémentaires ξ_i (ξ_H , ξ_O et ξ_N) en fonction du traceur passif transporté ξ . Pour la position longitudinale la plus en amont, *i.e.* $x/D = 06$, les trois fractions élémentaires suivent assez bien la première bissectrice. Les points de mesure sont répartis de manière homogène autour de la droite $\xi_i = \xi$. En revanche, lorsqu'on s'éloigne de l'injection, nous voyons apparaître quelques différences. Ces différences sont plutôt concentrées au voisinage des faibles ξ et sont visibles surtout sur la fraction de mélange basée sur l'élément oxygène et, dans une moindre mesure, sur celle basée sur l'élément hydrogène. En effet, sur la figure 5.24(e), les points présentés pour ξ inférieur à 0.4 se distinguent notablement de la première bissectrice. La fraction de mélange basée sur l'élément azote ne semble pas impactée.

Nous visualisons ensuite les profils des gradients moyens de l'élément hydrogène à

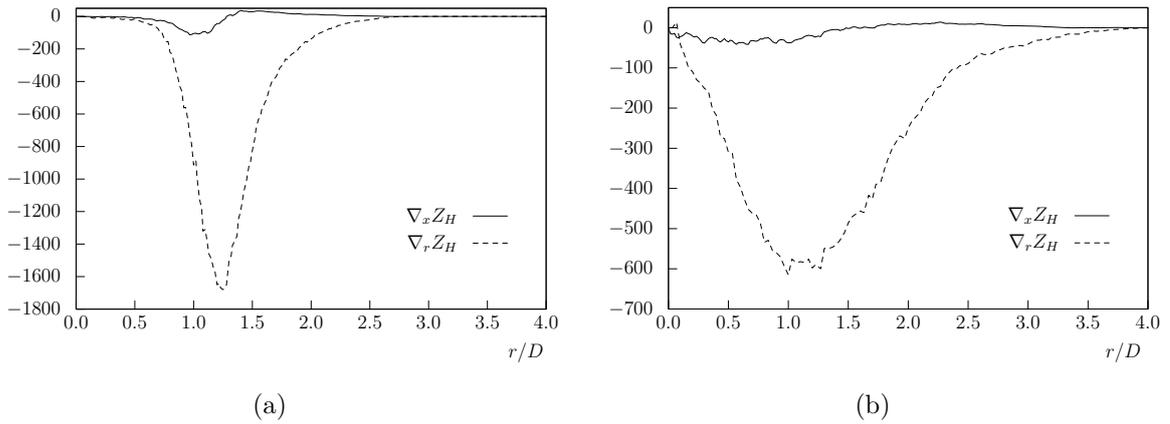


FIGURE 5.25 – Evolution du gradient moyen de fraction massique d’élément hydrogène en fonction de la direction radiale. Nous représentons ici le gradient dans la direction longitudinale ∇_x et radiale ∇_r . Ces gradients moyens sont évalués pour une position longitudinale $x/D = 8$ (a) et $x/D = 14$ (b).

deux positions différentes (cf. figure 5.25). Nous évaluons les gradients dans la direction longitudinale (∇_x) ainsi que dans la direction radiale (∇_r). Le gradient dans la direction azimutale est nul. La première observation est que le gradient dans la direction radiale est largement dominant par rapport au gradient longitudinal quelle que soit la position considérée. Ensuite, nous constatons que le gradient (dans la direction radiale mais également dans la direction longitudinale) s’atténue en s’éloignant de l’injection. Ceci confirme la destruction du gradient sous l’effet du mélange moléculaire.

Les quantités conditionnées sont souvent utilisées dans le domaine de la combustion turbulente afin d’axer les études sur des conditions particulières (notamment au voisinage du front de flamme). Ces grandeurs sont également utilisées dans certaines techniques de modélisation notamment l’approche CMC (Conditional Moment Closure) développée par Kilimenko [139] et Bilger [140]. Le gradient conditionné, noté $\langle |\nabla\phi| |\phi^* \rangle$, est lié au taux de dissipation scalaire $\chi_\xi = 2D|\nabla\phi|^2$. La figure 5.26 présente l’évolution du gradient de fraction de mélange conditionné par le traceur passif ξ . Nous remarquons tout de suite que le gradient n’est pas symétrique par rapport à la fraction de mélange transportée. Le gradient est nul aux bords du domaine. Il croît progressivement en partant de $\xi = 0$ lorsque la fraction de mélange croît atteignant un maximum. Ce maximum est positionné entre $\xi = 0.6$ et $\xi = 0.8$ pour nos simulations. Il diminue ensuite brusquement pour redevenir nul en $\xi = 1$. La position du gradient conditionné maximum évolue en fonction de la position dans le jet. Juste en aval du disque de Mach (pour $x/D = 6$), ce maximum se positionne aux environs de $\xi = 0.8$. Il va ensuite évoluer pour se positionner vers $\xi = 0.6$ dans le champ lointain du jet, *i.e.* $x/D = 14$. Nous notons également une atténuation du gradient en s’éloignant de l’injection.

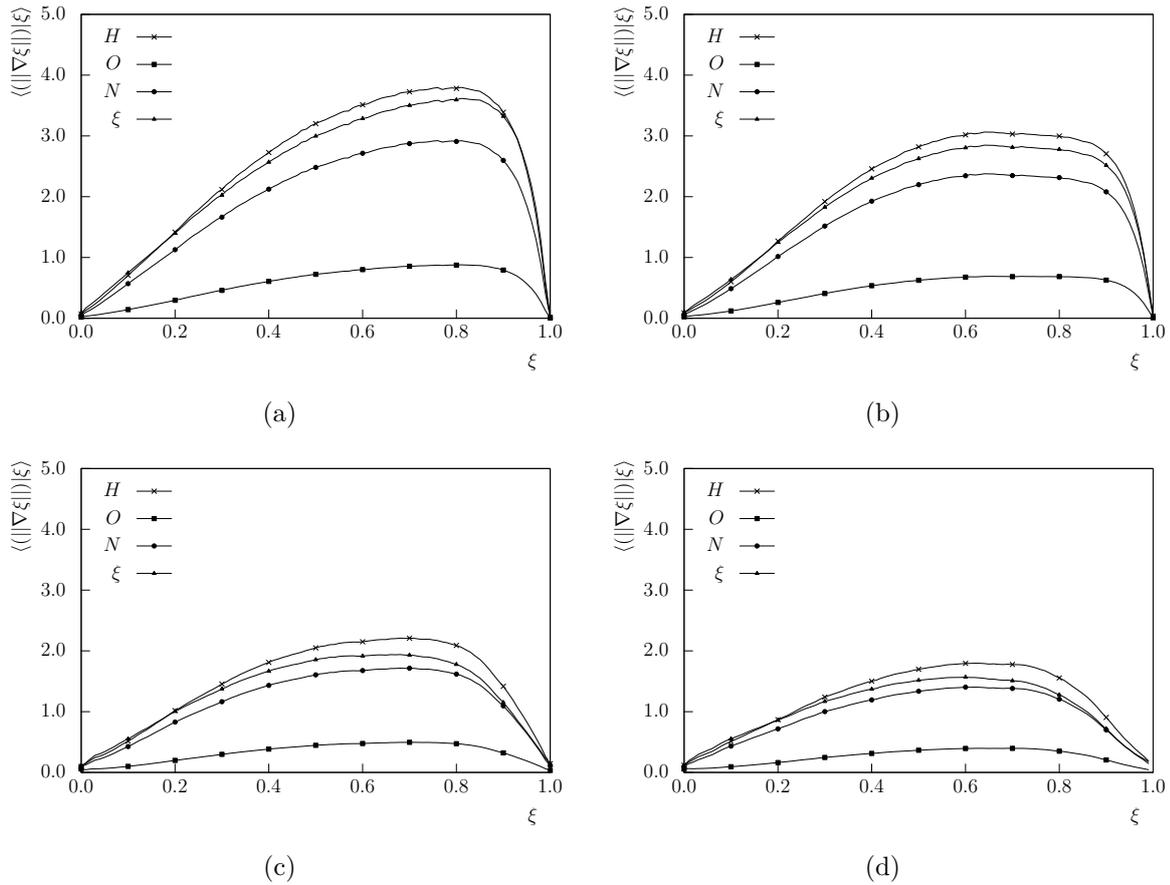


FIGURE 5.26 – Évolution de la norme du gradient de fraction massique d'espèce conditionnée par le scalaire passif transporté ξ . Les gradients conditionnés sont basés sur les fractions massiques élémentaires. Les données sont représentées pour différentes distances de l'injection : $x/D = 6$ (a), $x/D = 8$ (b), $x/D = 12$ (c) et $x/D = 14$ (d).

5.5.2 Étude de la dynamique du gradient scalaire

Nous allons nous concentrer dans cette partie sur l'étude de la diffusion différentielle. Pour cela, nous allons définir une mesure de celle-ci basée sur le gradient de flux de masse et observer son importance relative dans nos simulations.

La diffusion différentielle est présente dès lors que différentes espèces d'un mélange ne diffusent pas avec le même coefficient. Une tentative de quantification de cette diffusion différentielle est donnée par Sutherland et al. [137] et Chabane et al. [141]. Elle consiste à reconstruire une variable ϕ à partir des fractions massiques d'espèces transportées. On détermine ensuite le gradient de flux de masse de cette variable $\nabla \cdot (\rho D_\phi \nabla \phi)$. On compare ensuite ce gradient de flux de masse au gradient du flux de masse d'une fraction de mélange ξ qui diffuse avec une certaine diffusivité D_ξ . Dans ce but, il est nécessaire de préciser plusieurs paramètres : le modèle utilisé pour le transport des flux de diffusion \mathbf{j}_i des espèces i et l'approximation utilisée pour le coefficient de diffusion D_ξ pour la fraction de mélange transportée.

Nous avons défini dans le paragraphe précédent une fraction de mélange basée sur les éléments atomiques plutôt que sur les espèces chimiques. Pour ce cas aussi, étudier les fractions massiques d'élément ou les fractions massiques d'espèce est strictement équivalent. En effet, les espèces présentes (H_2 , O_2 et N_2) pour ces simulations ne partagent aucun élément entre elles. Dans le cas où deux espèces partageraient un même élément, le coefficient de diffusion de cet élément serait dépendant des coefficients de diffusion de ces deux espèces. Il serait alors nécessaire de passer par la fraction massique d'élément pour bien prendre en compte les effets de diffusion différentielle considérés ici. Le flux pour l'élément l est alors déterminé par l'expression $-\sum_{i=1}^{N_s} (a_{li} W_i) / (W_l) \nabla \cdot \mathbf{j}_i$ avec $\mathbf{j}_i = -\rho D_i \nabla Y_i$ le flux diffusif de l'espèce i .

Nous choisissons d'étudier les effets de la diffusion différentielle à l'aide d'un traceur passif ξ dont le coefficient de diffusion est pris égal à la diffusion thermique, *i.e.* un nombre de Lewis égal à l'unité, et la fraction massique d'hydrogène dont le coefficient de diffusion est estimé avec la méthode de Hirschfelder et Curtiss (Cas "jet-3"). Nous déterminons ainsi deux grandeurs : $\gamma_{ex} = \nabla \cdot (\rho D_{H_2} \nabla Y_{H_2})$ le gradient de flux de masse d'hydrogène et $\gamma_{ap} = \nabla \cdot (\rho D_\xi \nabla \xi)$ le gradient de flux de masse du scalaire passif.

Ces deux termes sont extraits de nos simulations en les conditionnant une première fois à la valeur moyenne du traceur passif. Nous obtenons ainsi ces quantités pour cinq valeurs de $\tilde{\xi}$ (0.1 ; 0.3 ; 0.5 ; 0.7 ; 0.9). Nous déterminons ensuite la moyenne conditionnelle de ces termes en fonction du scalaire passif. La figure 5.27 expose les résultats obtenus dans le plan $x/D = 6$ et la figure 5.28 dans le plan $x/D = 14$. La différence entre les deux tracés représente l'effet de la diffusion différentielle. Ces courbes coupent toutes les deux l'axe des abscisses au niveau de la valeur moyenne $\tilde{\xi}$ quelle que soit la position longitudinale

dans le jet et quelle que soit la valeur moyenne du scalaire passif. Les effets de diffusion différentielle sont plus importants juste en aval du disque de Mach qu'en champ lointain. De surcroît, plus la valeur du traceur est éloignée de la valeur moyenne et plus l'influence de la diffusion différentielle est grande.

Méthode de la PDF transportée

Dans cette section, nous allons étudier le micro-mélange dans le sillage du disque de Mach. On se propose dans cette partie de considérer un modèle de micro-mélange particulier dans notre configuration : le modèle IEM/LMSE. Il s'agit du plus simple que l'on puisse imaginer. Dans un premier temps, je vais rappeler brièvement la méthode de la PDF transportée et présenter le modèle étudié, *i.e* IEM/LMSE. Dans un second temps, les résultats obtenus pour notre configuration seront exposés.

L'équation de transport de la PDF jointe de la vitesse et de la composition \tilde{P} s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{P}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} V_i \tilde{P}] = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial V_i} [\bar{\rho} \langle A_i | V, \psi \rangle \tilde{P}] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\bar{\rho} \langle \Theta_\alpha | V, \psi \rangle \tilde{P}] \quad (5.13)$$

avec :

$$A_i = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho F_i \right] \quad (5.14)$$

$$\Theta_\alpha = \frac{1}{\rho} \left[- \frac{\partial \mathcal{J}_j^\alpha}{\partial x_j} + \rho \dot{\omega}_\alpha \right] \quad (5.15)$$

Les termes présents à l'intérieur des "chevrons" correspondent à des moyennes conditionnelles. Nous pouvons expliciter les termes de transport dans l'espace des vitesses et dans celui des compositions :

$$\bar{\rho} \langle A_i | V, \psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} | V, \psi \right\rangle - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - \left\langle \frac{\partial p'}{\partial x_i} | V, \psi \right\rangle + \langle \rho F_i | V, \psi \rangle \quad (5.16)$$

$$\bar{\rho} \langle \Theta_\alpha | V, \psi \rangle = - \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}_j^\alpha}{\partial x_j} | V, \psi \right\rangle + \langle \rho \dot{\omega}_\alpha | V, \psi \rangle \quad (5.17)$$

L'équation (5.13) peut être intégrée dans l'espace des vitesses, conduisant à la forme

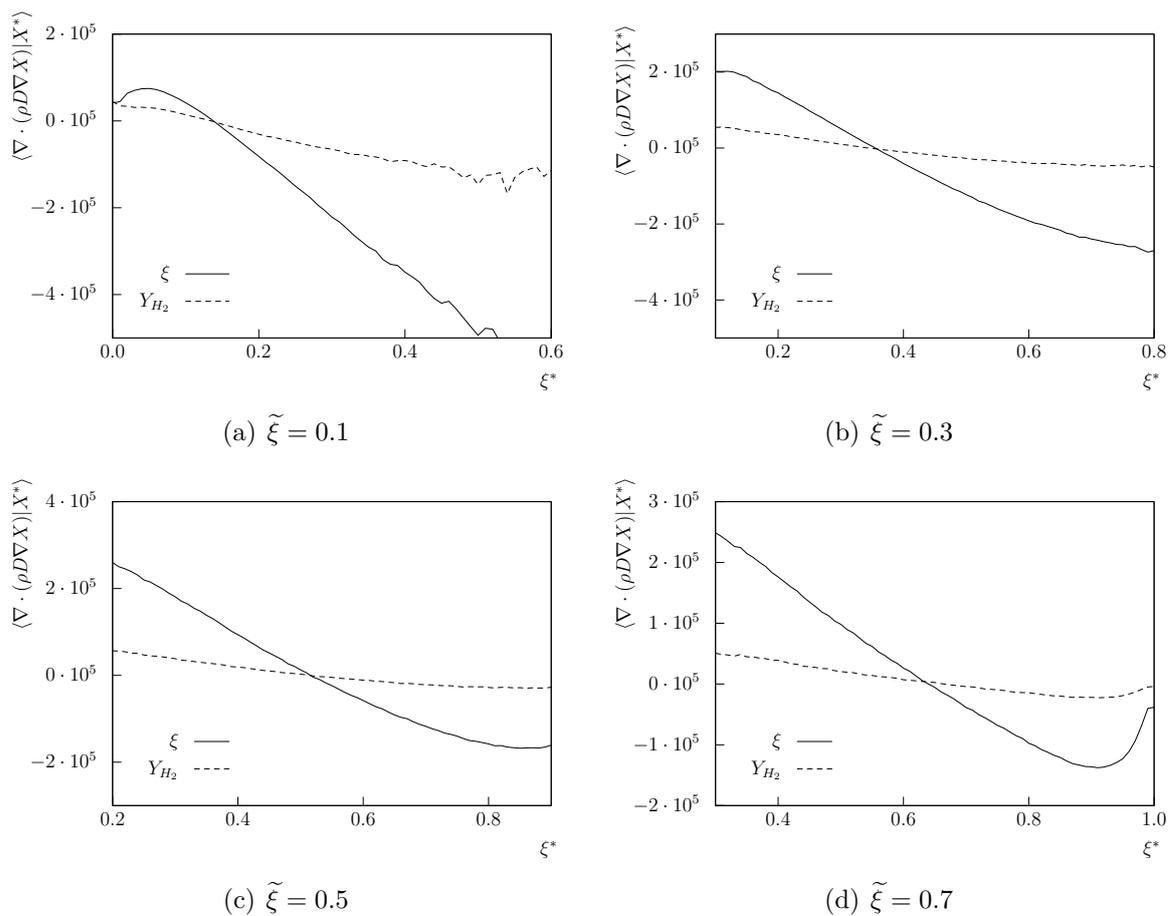


FIGURE 5.27 – Comparaisons entre les profils de diffusion conditionné de $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla X) | X^* \rangle$ pour $X = \xi$ et $X = Y_{H_2}$ dans le plan $x/D = 6$ pour les valeurs de $\tilde{\xi} = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7 .

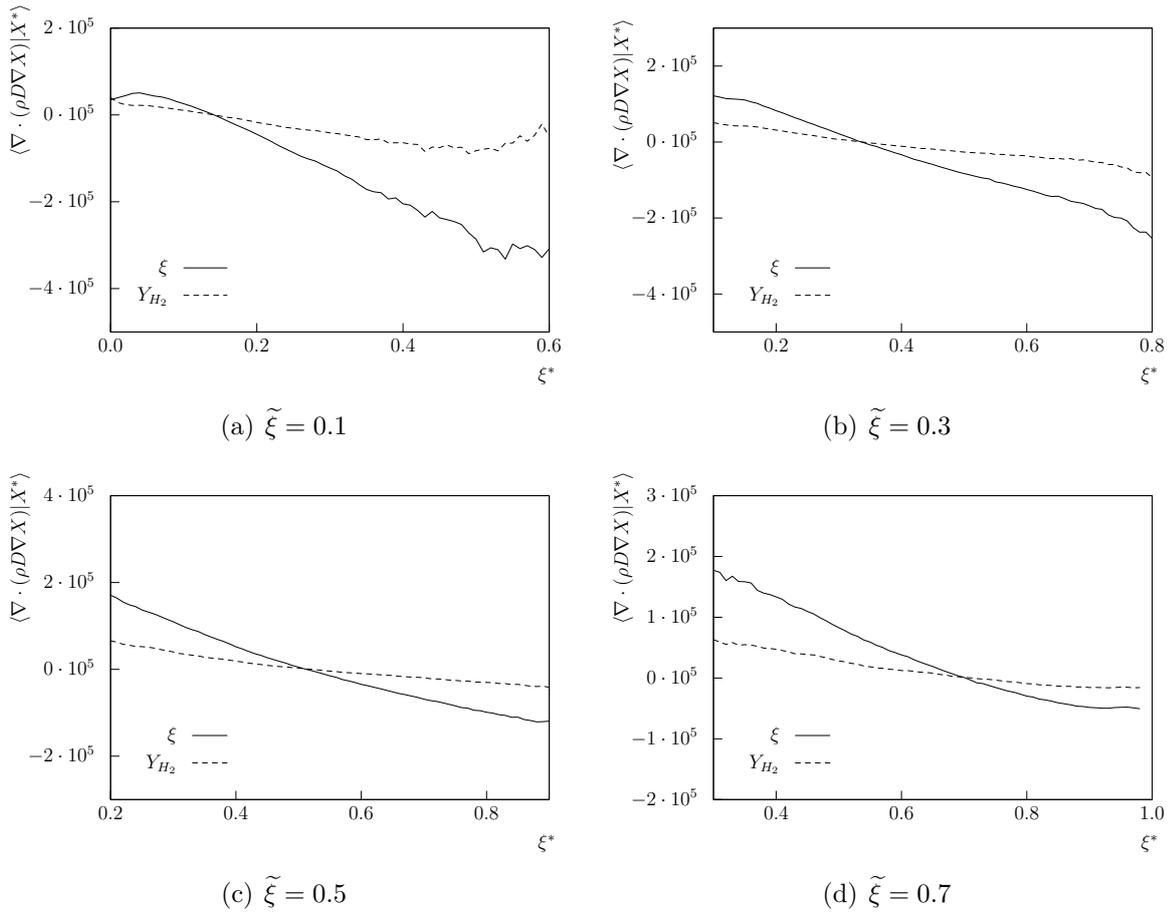


FIGURE 5.28 – Comparaisons entre les profils de diffusion conditionné de $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla X) | X^* \rangle$ pour $X = \xi$ et $X = Y_{H_2}$ dans le plan $x/D = 14$ pour les valeurs de $\tilde{\xi} = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7 .

simplifiée suivante¹ :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{P}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{P}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} \right) \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \langle u_i'' | \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{P}) \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} (\bar{\rho}(\boldsymbol{\psi}) \dot{\omega}_\alpha(\boldsymbol{\psi}) \tilde{P}) \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^{\alpha=N} \sum_{\beta=1}^{\beta=N} \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left(\bar{\rho} \left\langle D \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \middle| \boldsymbol{\psi} \right\rangle \tilde{P} \right)
\end{aligned} \tag{5.18}$$

où on a décomposé la moyenne conditionnelle de la vitesse en $\tilde{u}_i + \langle u_i'' | \boldsymbol{\psi} \rangle$.

En pratique, la méthode la plus couramment utilisée pour estimer \tilde{P} consiste à en présumer la forme à partir de ses premiers moments. Cette méthode est essentiellement applicable aux cas où la PDF d'une seule variable est considérée. Son extension à des PDFs multi-variables, sans recourir à des hypothèses trop restrictives d'indépendance statistique entre les différents scalaires considérés est particulièrement délicate. Néanmoins, une méthode de PDFs partielles limitant l'emploi de cette hypothèse à des portions réduites de l'espace des compositions a été introduite par Mura et Borghi [143]; ce qui permet de la rendre moins restrictive. Il existe également des méthodes permettant d'évaluer cette PDF sans recourir à aucune hypothèse *a priori* concernant sa forme. Celle-ci est déterminée directement à partir de son équation de transport.

Nous définissons alors la PDF jointe de la vitesse, de la dissipation visqueuse et des scalaires (réactifs ou non). Cette équation de transport a été proposée par Frost [144] puis son utilisation a été généralisée par Pope [145]. Cette équation ne contenant pas d'information sur le temps du mélange lié aux gradients scalaires, Dopazo [146] suggéra l'emploi d'une PDF jointe de la vitesse, des gradients de vitesse, des scalaires réactifs mais aussi de leurs gradients.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{P}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{P}) + (\bar{\rho} g - \nabla \bar{p}) \cdot \nabla_v \tilde{P} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial \psi_i} (\bar{\rho} \omega_i \tilde{P}) &= \\
\nabla_v \cdot \left[\langle -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \nabla p' | \mathbf{u}, \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{P} \right] + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left[\langle \nabla \cdot (\rho D \phi_i) | \mathbf{u}, \boldsymbol{\psi} \rangle \tilde{P} \right]
\end{aligned} \tag{5.19}$$

le symbole ∇_v fait référence à l'opérateur divergence par rapport aux trois composantes de la vitesse. Les chevrons correspondent à des moyennes conditionnelles, conditionnées

1. pour simplifier les écritures, nous considérons ici une forme classique, le lecteur intéressé pourra se référer à Delarue et Pope [142] pour les aspects plus spécifiques dues à la nature compressible des écoulements à grandes vitesses

à des valeurs de u et ψ . Dans ces conditions, tous les termes du membre de gauche font intervenir des variables données par la PDF. Ainsi, cette approche ne fait aucune hypothèse quant aux termes sources chimiques ce qui est le grand avantage de cette méthode. Il reste donc deux termes qui nécessitent une modélisation particulière. Le premier terme du membre de droite faisant intervenir la vitesse conditionnelle correspond au transport de la PDF dans l'espace des vitesses induits par les contraintes visqueuses et le gradient de pression. La fermeture de l'équation de transport de la PDF nécessite aussi l'emploi d'un modèle pour le terme de mélange moléculaire. La qualité de cette méthode va fortement dépendre de la qualité de cette modélisation. Nous allons considérer ici le modèle d'Interaction par Echange avec la Moyenne (IEM) ou bien LMSE (Linear Mean Square Estimation).

Modèle IEM/LMSE

Ce modèle sert à représenter le terme de micro-mélange présent dans l'équation de transport de la PDF. Le modèle *IEM* (Interaction by Exchange with the Mean) a été introduit par Villermaux et Devillon [147]. Il est également connu sous le nom de modèle *LMSE* (Linear Mean Square Estimation model) [148, 149]. Dans cette fermeture, les effets moléculaires sont représentés par le biais d'une relaxation vers la valeur moyenne, ce qui conduit au modèle Lagrangien suivant

$$\frac{d\psi_i^j}{dt} = -\frac{\psi_i^j - \tilde{\psi}_i^j}{\tau_i} \quad (5.20)$$

La quantité τ_i représente l'échelle caractéristique du temps de mélange associé au scalaire ψ_i . Par construction, ce modèle ne modifie pas la valeur moyenne et produit une décroissance de la variance du scalaire. En dépit de sa simplicité, ce modèle traduit deux caractéristiques essentielles du mélange aux petites échelles, le mélange est d'autant plus efficace que l'intensité de turbulence est élevée et la diffusion est d'autant plus importante que l'on s'éloigne de la valeur moyenne locale. L'inconvénient majeur de ce modèle est son comportement au voisinage des bornes $\xi = 0$ et $\xi = 1$ pour lesquelles il prédit un mélange maximal alors qu'il devrait s'annuler compte tenu que les gradients scalaires tendent eux-mêmes vers zéro.

Analyse a priori du comportement du modèle IEM

Nous allons discuter ici les résultats obtenus pour la simulation du jet d'hydrogène réalisée avec transport simplifié. Nous avons caractérisé le comportement du terme $\nabla \cdot (\rho D \nabla \xi)$ à différentes distances de l'injection. La figure 5.29 expose les termes $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) | \xi \rangle$ pour une distance $x/D = 6$ de l'injection et pour trois valeurs distinctes de $\tilde{\xi}$. La figure 5.30

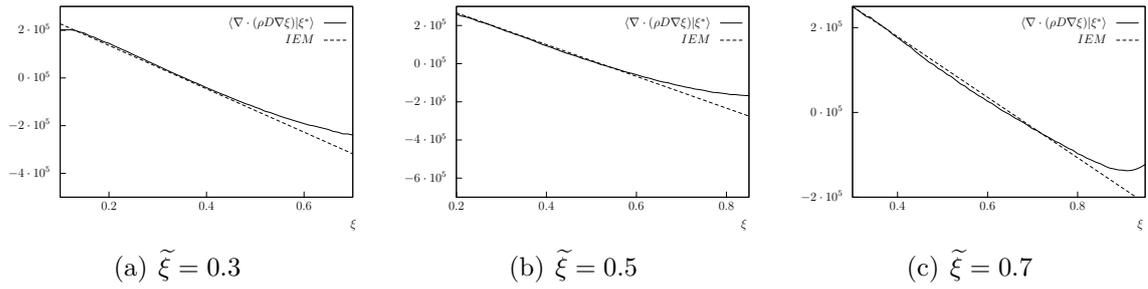


FIGURE 5.29 – Profils des gradients conditionnés $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \rangle$ en fonction du traceur passif superposés aux droites *IEM* pour le plan $x/D = 6$.

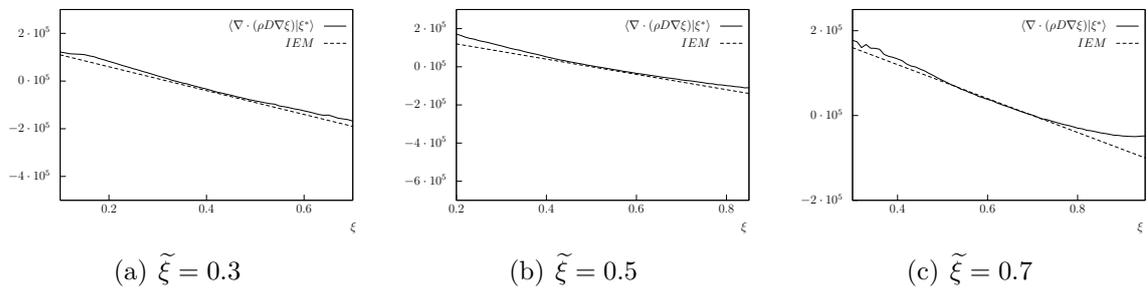


FIGURE 5.30 – Profils des gradients conditionnés $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \rangle$ en fonction du traceur passif superposés aux droites *IEM* pour le plan $x/D = 14$.

fait de même mais dans le plan $x/D = 14$. Comme mentionné précédemment, nous retrouvons bien les tendances attendues avec des courbes qui coupent l'axe des ordonnées au niveau de la valeur moyenne avec un comportement linéaire ou quasi-linéaire entre les deux maxima locaux. Cette partie linéaire va particulièrement nous intéresser ici. En effet, cette droite correspond à l'approximation considérée dans le modèle IEM. La pente de cette droite devrait donc correspondre au temps caractéristique du mélange associé à cette modélisation. Nous pouvons déjà remarquer que les pentes des droites sont bien négatives. Un premier aspect important pour pouvoir évaluer un temps caractéristique positif. De plus, les pentes des parties linéaires sont différentes en fonction de la position étudiée. Elles évoluent également légèrement avec la valeur moyenne considérée. Globalement, la pente diminue lorsque la valeur moyenne augmente ainsi que lorsqu'on s'éloigne de l'injection. Nous retrouvons également le défaut du modèle IEM mentionné plus haut, à savoir une estimation du mélange maximum aux bornes de l'espace de la fraction de mélange. En effet, ce modèle ne prend pas en compte la décroissance des gradients vers 0 pour $\xi = 0$ et $\xi = 1$. Il s'agit ensuite de relier le temps caractéristique de mélange du modèle étudié à un temps de mélange dépendant des grandeurs déterminées lors du calcul. Nous avons déterminé une relation dans la section (4.6) permettant de définir un temps de mélange scalaire en reliant la variance du scalaire passif transporté et son taux de dissi-

TABLEAU 5.4 – Comparaison des temps de mélange obtenus à l'aide du modèle *IEM* (τ_{IEM}) et basé sur le transport d'un scalaire passif ($\tau_\xi = \widetilde{\xi''^2}/\widetilde{\varepsilon}_\xi$) et estimation de la constante $C_{IEM} = \tau_\xi/\tau_{IEM}$.

x/D	$\widetilde{\xi}$	τ_{IEM}	τ_ξ	C_{IEM}
6	0.3	$2.00 \cdot 10^{-6}$	$3.40 \cdot 10^{-6}$	1.70
	0.5	$2.50 \cdot 10^{-6}$	$3.36 \cdot 10^{-6}$	1.34
	0.7	$2.60 \cdot 10^{-6}$	$3.51 \cdot 10^{-6}$	1.35
14	0.3	$1.12 \cdot 10^{-6}$	$2.38 \cdot 10^{-6}$	2.13
	0.5	$1.25 \cdot 10^{-6}$	$2.94 \cdot 10^{-6}$	2.35
	0.7	$1.47 \cdot 10^{-6}$	$3.68 \cdot 10^{-6}$	2.50

pation scalaire $\tau_\xi = \widetilde{\xi''^2}/\widetilde{\varepsilon}_\xi$. Nous allons donc comparer le temps de mélange τ_{IEM} obtenu à l'aide du modèle *IEM* au temps τ_ξ basé sur la fraction de mélange transportée et définir une constante C_{IEM} comme le rapport entre τ_ξ et τ_{IEM} . Les résultats ainsi obtenus sont exposés dans le tableau 5.4. La constante de proportionnalité entre les temps de mélange est proche de 2.0. Cette valeur est en bon accord avec les données de la littérature.

5.5.3 Etude des PDFs de scalaires passifs

Nous allons considérer maintenant les PDFs de fraction de mélange transportée ξ pour le cas “jet-3”. L'intérêt ici est de confronter les résultats obtenus avec la fraction de mélange transportée et ceux obtenus avec la fraction massique d'hydrogène afin d'évaluer les erreurs commises en conduisant des simulations pour lesquelles n'est résolue qu'une équation de transport pour la fraction de mélange, économisant ainsi la résolution des équations de transport des différentes espèces chimiques mises en jeu.

La figure 5.31 reporte les PDFs du traceur passif dans les différents plans d'étude et pour différentes valeurs moyennes de ce scalaire. Concernant la dynamique du scalaire passif dans ce type de jet, nous constatons que les PDFs concernant le jet d'hydrogène sont sensiblement les mêmes que celles obtenues pour le jet fortement sous détendu d'air “jet-2”. Nous retrouvons notamment les poches unitaires résiduelles dans les plans $x/D = 6$ et 8 au niveau de la valeur moyenne $\widetilde{\xi} = 0.7$. Les PDFs obtenues avec la fraction massique d'hydrogène sont quasiment identiques à celles obtenues pour le scalaire passif. Les différences ne sont pas perceptibles, nous ne les faisons donc pas apparaître ici. Si on compare par exemple les coefficients de dissymétrie (ou skewness) $S_\xi = \widetilde{\xi''^3}/(\widetilde{\xi''^2})^{3/2}$, on constate que celui basé sur l'hydrogène n'est que très légèrement supérieur à celui basé sur ξ (cf. figure 5.32). Cet écart est le plus élevé pour la valeur moyenne la plus faible. Lorsque l'on se rapproche du centre du jet, *i.e.* lorsque la valeur moyenne augmente, la différence

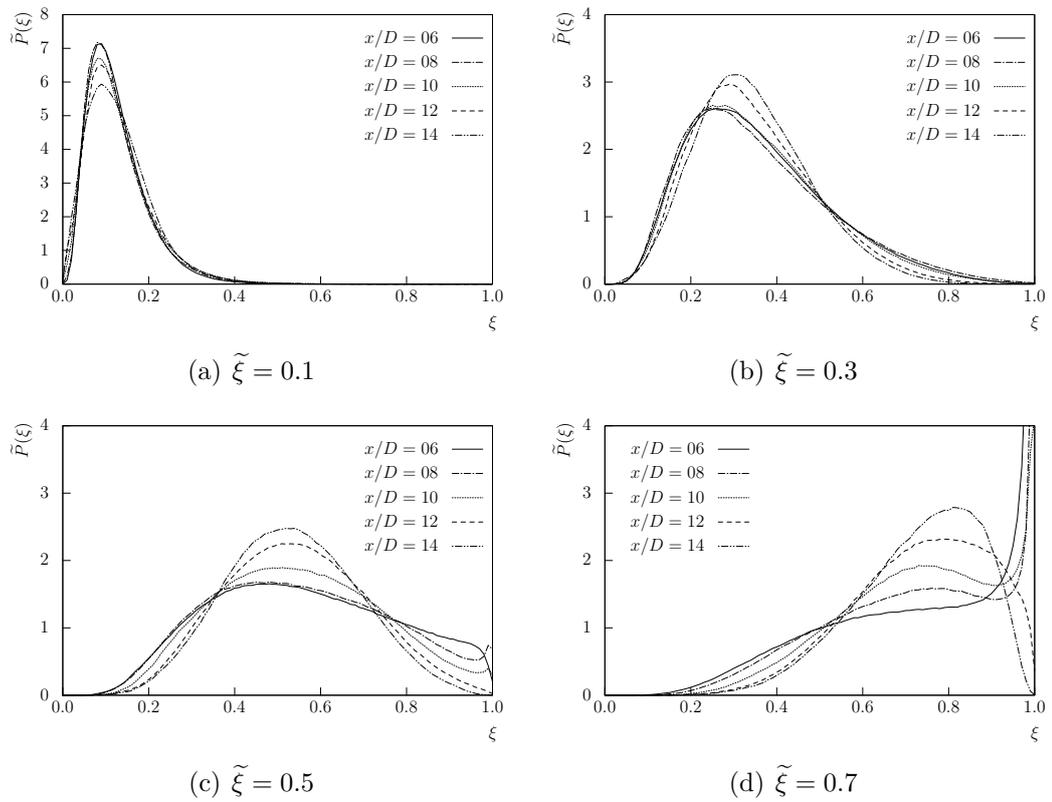


FIGURE 5.31 – PDF de ξ suivant les iso-lignes $\tilde{\xi} = 0.1$ (a), $\tilde{\xi} = 0.3$ (b), $\tilde{\xi} = 0.5$ (c) et $\tilde{\xi} = 0.7$ (d).

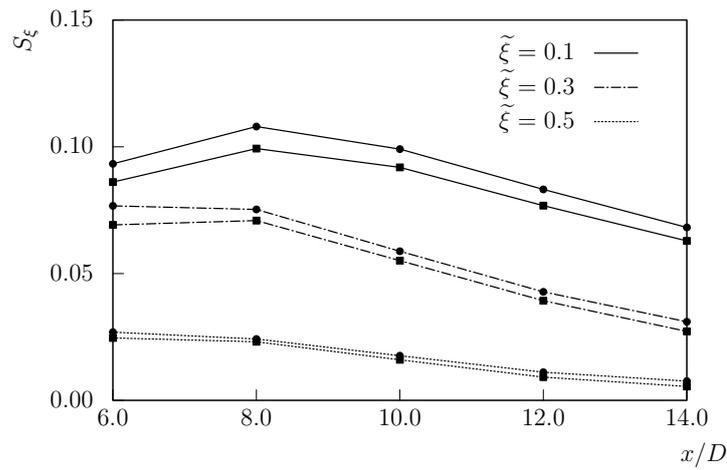


FIGURE 5.32 – Comparaison des skewness des fonctions densité de probabilité de ξ (■) et de Y_{H_2} (●) pour trois valeurs moyennes du scalaire passif $\tilde{\xi}$.

entre les deux courbes comparées diminue. Cela signifie que les PDFs sont plus similaires au centre du jet que vers l'extérieur. Cela conforte dans la conclusion que l'influence de la diffusion différentielle de l'hydrogène est donc plus importante pour les faibles valeurs de sa fraction massique.

Nous venons juste de comparer les statistiques de la fraction de mélange et de la fraction massique d'hydrogène au sein de la même simulation. Pour cela, nous nous sommes penchés sur l'étude des fonctions densité de probabilité de chacune d'elles. Nous avons préalablement distingué la dynamique aux petites échelles à travers le gradient scalaire et le gradient moléculaire. Nous avons ainsi déterminé les effets de la diffusion différentielle présents au sein de notre écoulement. Nous allons maintenant caractériser ces différences induites par le transport moléculaire en comparant de manière plus globale les simulations conduites sous les approximations de transport simplifié avec celles réalisées avec les termes de transport détaillé.

5.6 Effet de la prise en compte des termes de transport détaillés

Nous allons ici étudier plus globalement les différences observées en considérant l'une et l'autre des deux approches pour les termes de transport. Nous rappelons que les deux approches étudiées dans le cadre de ce travail sont l'approximation de Hirschfelder et Curtiss [58] et une représentation plus détaillée du transport via l'utilisation de la librairie EGLIB de Ern et Giovangigli [56].

Nous allons ainsi visualiser qualitativement ces différences à travers différents champs moyen. Dans un second temps, nous allons tenter de quantifier les effets du changement de traitement des termes de transport.

La figure 5.33 montre le champ moyen du nombre de Mach pour les méthodes de transport utilisées. Comme attendu, la structure du jet ne semble globalement pas être influencée par la méthode de transport utilisée. Le disque de Mach se positionne à la même abscisse. Une différence visible sur ce champ est la différence du nombre de Mach moyen juste en amont du disque de Mach. Le nombre de Mach maximum atteint en amont du disque de Mach est plus élevé dans le cas "jet-3". Ce comportement est provoqué par la différence de température dans la zone juste en aval de l'injection. En effet, la figure 5.34(b) montre que, dans le champ proche, la composante longitudinale de la vitesse est strictement égale pour les deux jets considérés alors que le profil de température (figure 5.34(c)) est légèrement différent avec une température plus élevée dans le cas du transport détaillé. Une différence peu visible mais quantifiée se trouve au niveau de la position du point triple qui est légèrement modifiée. Il s'est éloigné de $0.02D$ de l'injection

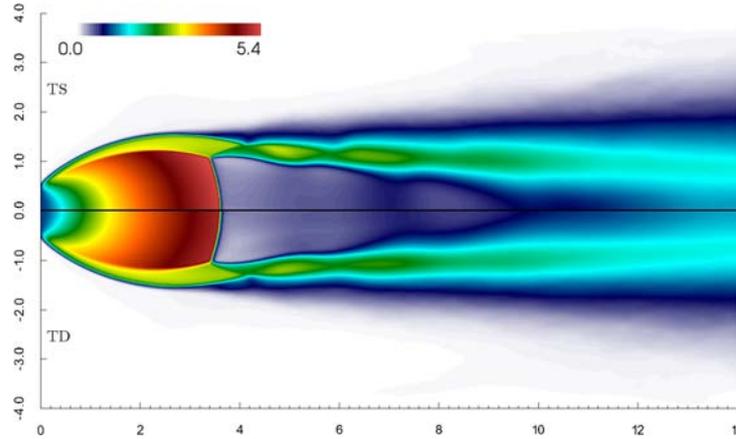


FIGURE 5.33 – Comparaison entre le champ moyen du nombre de Mach pour le cas transport simplifié (TS) et le cas transport détaillé (TD).

et de $0.06D$ de l'axe du jet. La poche subsonique mesurée est plus courte passant de $8.05D$ pour la simulation “jet-3” à $7.46D$ pour la simulation “jet-4” (cf. fig. 5.34(a)). Nous notons également une évolution dans le profil axial de la composante longitudinale de la vitesse dans le champ lointain. Nous observons deux bosses dans le cas “jet-3” alors qu'il n'y en a plus qu'une dans le cas “jet-4”. Concernant la fraction de mélange, les figures 5.34(d) et 5.35(c) montrent que la précision apportée par la prise en compte des termes de baro- et thermo-diffusion n'a qu'un impact réduit sur l'évolution de celle-ci. Les différences observées sur les profils transversaux restent assez imperceptibles et celles constatées sur les profils longitudinaux sont aussi très faibles. La température en particulier ne présente aucune modification notable sur les profils transversaux.

L'observation des coefficients de transports permet d'appréhender plus directement ces effets. La figure 5.36 compare la viscosité dynamique (transport de la quantité de mouvement) et la conductivité thermique (transport de la chaleur) pour les deux représentations des termes de transport. Cette figure montre d'un côté les champs des quantités et de l'autre côté deux profils transversaux pour $x/D = 6$ et $x/D = 14$. Le champ de viscosité dynamique 5.36(a) ne présente pas de changement important entre les deux simulations. Nous remarquons juste la persistance de faibles valeurs de μ au milieu de la couche de mélange aux environs de $x/D = 12$ pour le cas utilisant le transport détaillé. Les profils de viscosité présentent effectivement des disparités au centre de la couche de cisaillement (entre $r/D = 1$ et $r/D = 3$). Celles-ci sont plus importantes dans le champ lointain ($x/D = 14$) qu'en aval du disque de Mach. Ces différences ne peuvent pas être imputées à la différence de température, celle-ci étant la même pour les deux simulations. La valeur obtenue pour le transport simplifié est plus élevée que celle atteinte par la simulation avec le transport détaillé. Les écarts concernant la conductivité thermique sont notés dans une zone plus proche du centre du jet (entre $r/D = 0.7$ et $r/D = 2$).

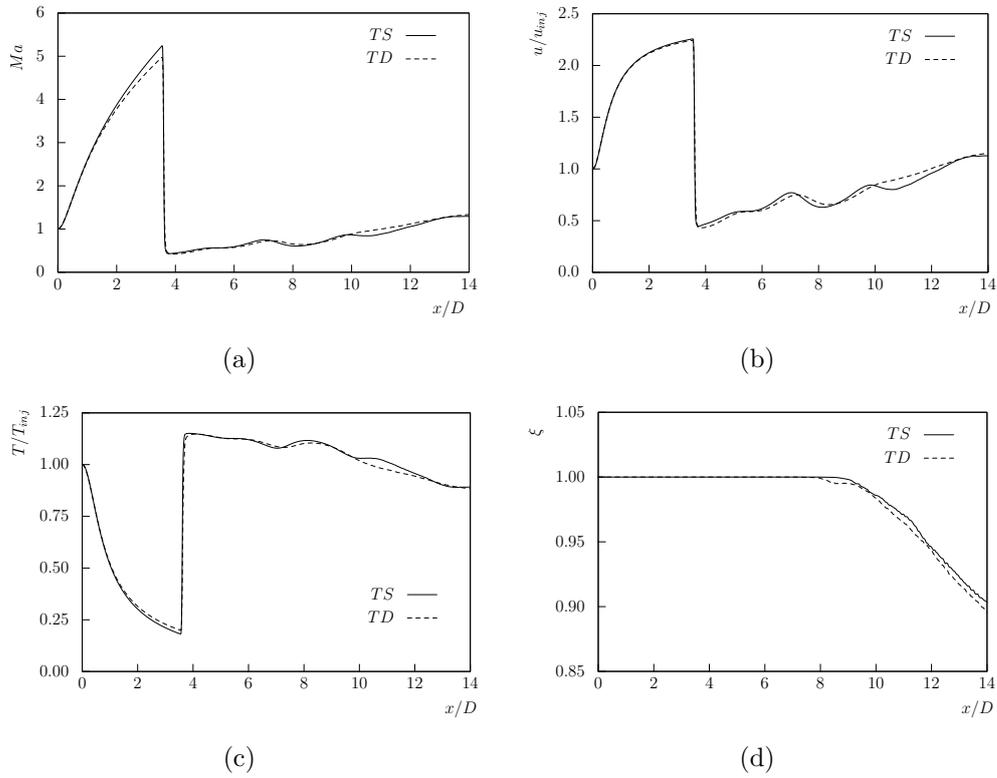


FIGURE 5.34 – Effets de la prise en compte des termes de transport détaillé. Profils axiaux du nombre de Mach (a), de la vitesse axiale adimensionnée (b), de la température adimensionnée (c) et du traceur passif (d).

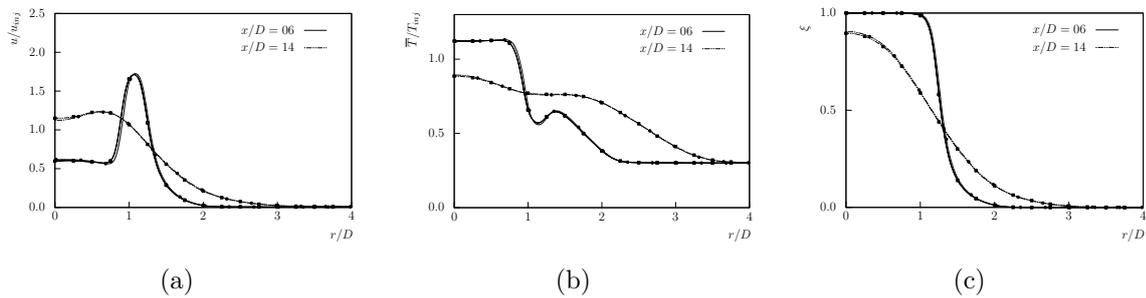


FIGURE 5.35 – Effets de la prise en compte des termes de transport détaillé. Profils radiaux de la vitesse axiale adimensionnée (a), de la température adimensionnée (b) et du traceur passif (c). Les symboles (\bullet) correspondent à la simulation “jet-3” et les symboles (\blacksquare) au jet d’hydrogène “jet-4”.

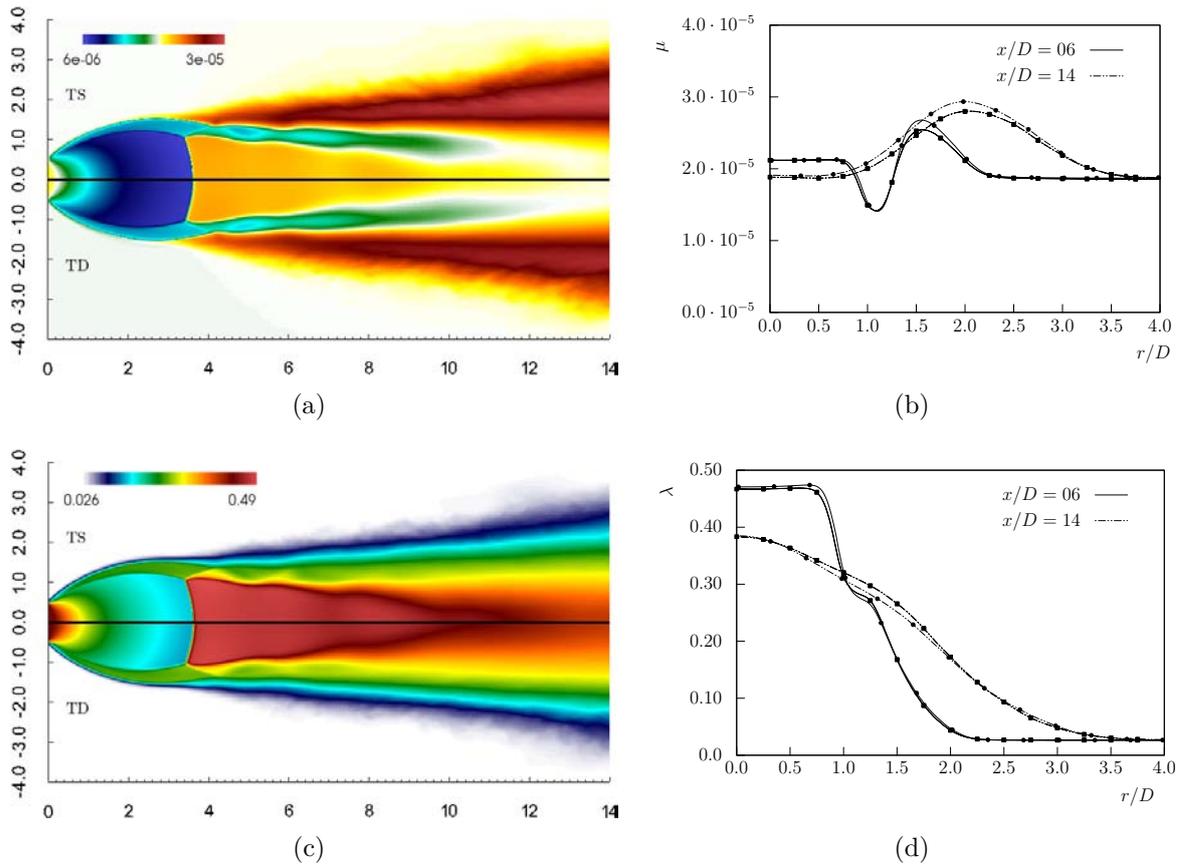


FIGURE 5.36 – Effets de la prise en compte du transport détaillé sur le coefficient de viscosité dynamique μ ($kg/(m.s)$) (a) et (b) et de conductivité thermique λ ($W/(m.K)$) (c) et (d). Pour les champs présentés, les parties supérieures correspondent à la simulation “jet-3” et les parties inférieures à la simulation “jet-4”. Pour les profils, les symboles (●) correspondent au transport simplifié tandis que les symboles (■) correspondent au transport détaillé.

Cependant, pour cette quantité, les rapports se sont inversés. En effet, la conductivité thermique est plus grande dans le cas du transport détaillé.

Enfin, nous concluons l’analyse comparée des cas “jet-3” et “jet-4” par l’étude des gradients moléculaires $\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{H_2}) \rangle$. La figure 5.37 expose les gradients moléculaires dans le plan $x/D = 6$ pour deux valeurs de \tilde{Y}_{H_2} et la figure 5.38 dans le plan $x/D = 14$. Les différentes courbes présentent dans ces figures coïncident relativement bien. L’effet de la prise en compte de la viscosité volumique du tenseur des contraintes visqueuses ainsi que des effets Soret et Dufour reste négligeable dans une large portion de l’écoulement étudié.

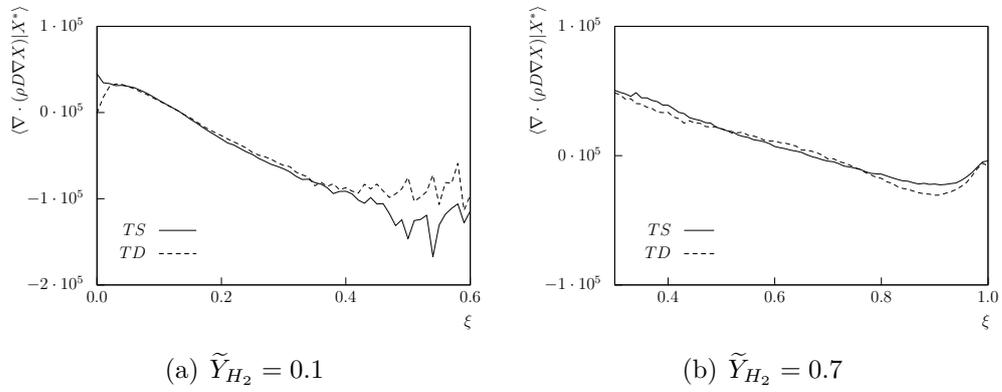


FIGURE 5.37 – Effets de la prise en compte du transport détaillé sur les gradients de flux de masse dans le plan $x/D = 6$.

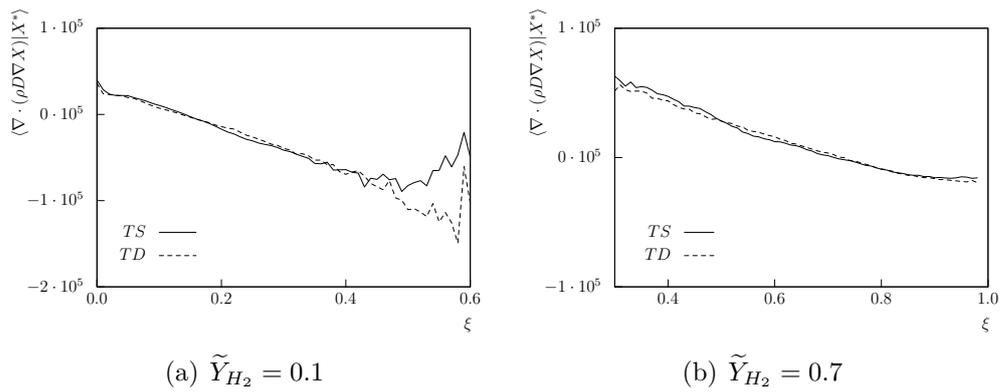


FIGURE 5.38 – Effets de la prise en compte du transport détaillé sur les gradients de flux de masse dans le plan $x/D = 14$

5.7 Conclusion

L'étude d'un jet d'hydrogène fortement sous détendu a été conduite. L'influence du changement de fluide injecté a été analysée avec notamment une augmentation du cisaillement ayant pour conséquence des phénomènes d'échauffement locaux. Un accroissement des effets de masse volumique variable dus aux effets de variation de composition en plus de ceux résultant de la compressibilité a été observé ce qui nous a conduit à approfondir l'analyse de ces effets et en particulier celui du couple barocline dans le bilan d'enstrophie. Finalement, le mélange aux petites échelles a aussi été examiné avec une attention particulière accordée aux phénomènes de diffusion différentielle. Il semble que la prise en compte du transport détaillé ne soit pas nécessaire dans ce cas particulier. Nous nous dirigeons maintenant vers la partie réactive avec l'application à deux configurations d'écoulement réactif.

Chapitre 6

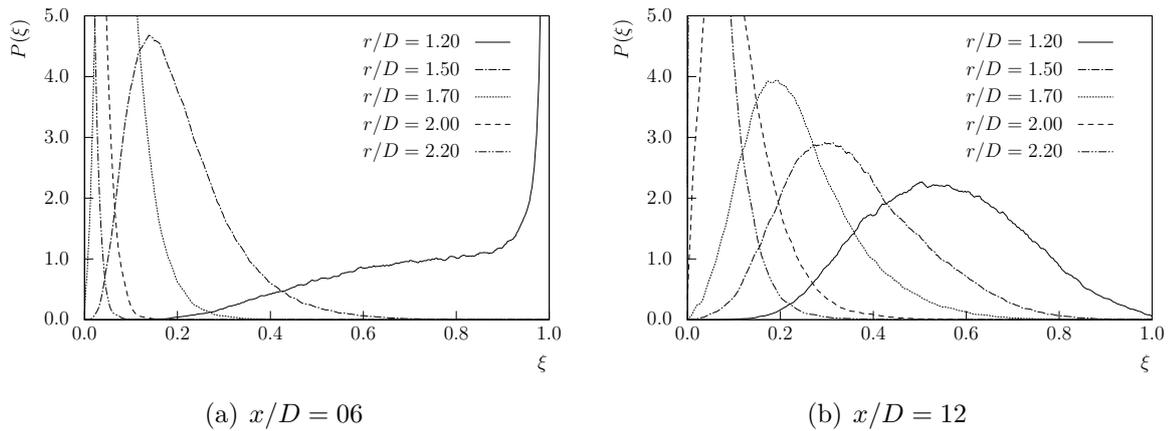
Allumage et combustion de jets d'hydrogène fortement sous détendus

6.1 Introduction

Ce chapitre traite des écoulements réactifs. Nous allons nous intéresser à deux configurations différentes. La première correspond au jet d'hydrogène fortement sous détendu considéré dans le chapitre précédent. Il s'agit ici de caractériser la propension de ce jet à l'allumage. Cette étude sera limitée au champ proche du jet car l'extension du domaine de calcul reste encore assez réduite. La deuxième géométrie envisagée est représentative de celle qui peut être rencontrée au niveau d'un allumeur central de moteur fusée. La topologie de l'écoulement est ici légèrement plus compliquée que celle du jet sous détendu : il s'agit ici d'une injection centrale oxydante composée d'oxygène et de vapeur d'eau, à sa périphérie est injecté de l'hydrogène pur. Pour finir, il est important de souligner ici que, compte tenu de l'indisponibilité de modélisation de sous maille dans la version de CREAMS que nous utilisons, mais aussi des niveaux de résolution des simulations réalisées, celles-ci sont conduites en négligeant la possible influence de fluctuations de composition à l'échelle non résolue.

6.2 Propension du jet d'hydrogène à l'allumage

Ce paragraphe peut être considéré comme un préambule au cas réactif que nous traiterons dans le paragraphe suivant. Nous allons caractériser dans cette partie les probabilités d'auto-allumage du jet d'hydrogène étudié dans le chapitre précédent. Cette étude consiste à déterminer des zones où l'auto-allumage est le plus susceptible d'apparaître. Elle repose sur l'observation de PDFs d'allumage ainsi que sur plusieurs caractéristiques physiques de l'écoulement.

FIGURE 6.1 – PDF de ξ pris en différents rayons du jet d'hydrogène.

6.2.1 Probabilité d'allumage du jet d'hydrogène

Le mélange d'un combustible et d'un oxydant ne peut réagir que dans un domaine restreint de composition. Ces mélanges sont dits inflammables si une flamme peut s'y propager. Le mélange le plus dilué définit la limite inférieure d'inflammabilité, ou limite pauvre du mélange tandis que le mélange le plus concentré en combustible définit la limite supérieure, ou limite riche d'inflammabilité. Dans la pratique, les limites d'inflammabilité d'un système particulier sont affectées par la température, la pression, la direction de propagation de la flamme ou encore par la force du champ gravitationnel [45]. Les limites sont obtenues expérimentalement par la détermination des compositions limitant les mélanges inflammables et inflammables. Dans la pratique, les valeurs obtenues dépendent des conditions opératoires et les essais et procédures correspondants sont donc normalisés. Nous déterminons ici les probabilités d'allumage P_{inf} . Celles-ci correspondent à la probabilité que l'écoulement s'allume au point considéré du seul point de vue du mélange réactif en présence. Ces probabilités sont donc basées uniquement sur les PDFs de fraction massique d'hydrogène. La probabilité d'allumage est définie de la manière suivante :

$$P_{inf} = \int_{\xi_{ign}^-}^{\xi_{ign}^+} P(\xi^*) d\xi^* \quad (6.1)$$

Les bornes d'intégration correspondent aux teneurs en hydrogène minimale et maximale entre lesquelles un mélange est susceptible de s'enflammer. Par exemple, la limite inférieure d'inflammabilité à 25 °C et à la pression atmosphérique pour un mélange d'hydrogène et d'air est de l'ordre de 4% en volume. La limite supérieure est d'environ 75% en volume [45]. Les fractions de mélange limites correspondantes sont donc de $\xi_{ign}^- = 0.003$ et $\xi_{ign}^+ = 0.167$. Une fois les bornes d'intégration définies, la probabilité d'allumage se détermine en intégrant les fonctions densité de probabilité de la fraction massique d'hydrogène

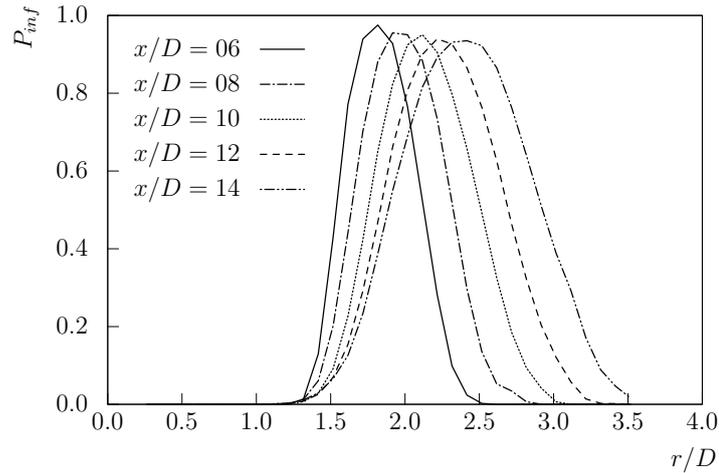


FIGURE 6.2 – Probabilité d’allumage en fonction du rayon du jet pour différentes valeurs de x/D .

entre ces deux bornes. La figure 6.1 présente les PDFs de fraction massique d’hydrogène pour cinq rayons différents et deux positions longitudinales ($x/D = 6$ et $x/D = 12$). L’intégration de ces PDFs entre les limites d’inflammabilité de l’hydrogène dans l’air définies précédemment fournit la probabilité d’inflammation de l’écoulement. Une probabilité d’inflammation grande correspond donc à une forte probabilité de la fraction massique d’hydrogène de se trouver entre les bornes d’inflammabilité et donc une PDF comprise entre ces bornes. La figure 6.2 cartographie la probabilité d’allumage en fonction du rayon du jet pour différentes positions longitudinales dans le jet. Toutes les courbes ont une allure “gaussienne” plus ou moins large. La probabilité la plus importante se trouve dans le plan $x/D = 6$ pour un rayon adimensionné $r/D = 1.75$. Nous remarquons que la probabilité la plus importante se décale vers l’extérieur du jet lorsque la distance au plan d’injection augmente. Cela s’explique par le fait que le jet s’ouvre radialement lorsqu’on s’éloigne de l’injection et que les faibles valeurs des fractions massiques d’hydrogène se trouvent à l’extérieur du jet. De plus, cette probabilité diminue légèrement en fonction de la position du plan longitudinal. Nous remarquons également que l’intégrale sous ces courbes augmentent en s’éloignant de l’injection. Les zones favorables à l’inflammation du mélange ainsi définies correspondent à des couronnes comprises entre les rayons de la figure 6.2. L’épaisseur de cette couronne augmente en s’éloignant de l’injection.

6.2.2 Détermination des zones favorables à l’allumage

Nous venons de déterminer les zones favorables à l’inflammation du seul point de vue de la composition du mélange. Nous allons maintenant nous intéresser à la température dans ces zones pour mieux caractériser la propension à l’allumage de ce jet fortement

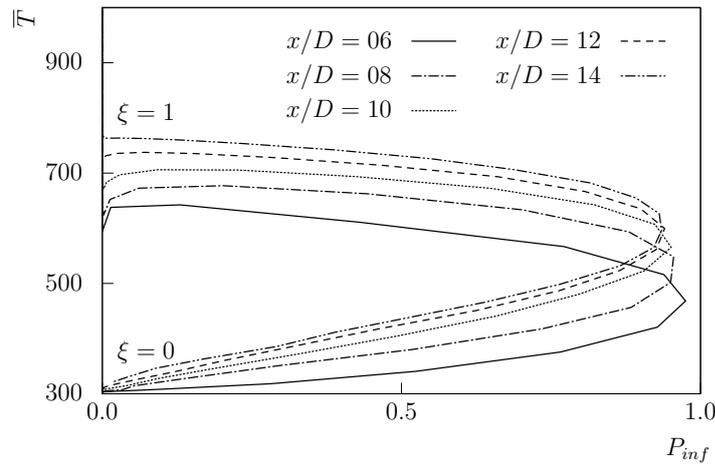


FIGURE 6.3 – Probabilité d’allumage P_{inf} et température moyenne du jet pour plusieurs valeurs de x/D .

sous détendu. Suivant la référence [45], à pression atmosphérique la température d’auto-inflammation de l’hydrogène est de l’ordre de 850K. La figure 6.3 expose la température moyenne de l’écoulement en fonction de la probabilité d’allumage déterminée précédemment. Dans ces conditions, les courbes s’apparentent plus à des paraboles qu’à des courbes gaussiennes. La partie de la parabole correspondant à la zone la plus chaude de l’écoulement coïncide avec l’intérieur du jet. Nous remarquons que les températures moyennes atteintes pour les probabilités d’allumage non nulles sont très en dessous de la température d’auto-inflammation de l’hydrogène. La température maximale associée à une probabilité P_{inf} non nulle se trouve en $x/D = 14$ du côté interne de la couche de mélange supersonique. Elle est d’environ 760K. La prise en compte de la température dans l’étude de la propension de ce jet à l’allumage n’est donc guère optimiste. En effet, dans ces conditions, la probabilité que le jet d’hydrogène s’allume spontanément est effectivement quasiment nulle. Néanmoins, ces conclusions sont basées sur les températures moyennes de l’écoulement. Nous allons donc maintenant nous intéresser à un champ instantané de température représentatif de ce jet.

La figure 6.4 montre un champ instantané de la fraction massique d’hydrogène prise entre les limites d’inflammabilité ξ_{ign}^- et ξ_{ign}^+ coloré par la température et superposé à un schlieren basé sur la masse volumique. Le schlieren de densité permet de mieux se repérer dans la structure du jet en visualisant ses structures compressibles caractéristiques. Cette figure nous permet de mieux visualiser les zones favorables à l’auto-inflammation du jet à un instant donné. Ces zones se situent effectivement à l’intérieur de la couche de mélange externe du jet. Les niveaux de température au sein de cet instantané sont plus encourageants quant à l’auto-allumage éventuel de ce jet. En effet, nous visualisons des zones où le mélange atteint des concentrations en hydrogène susceptibles de conduire

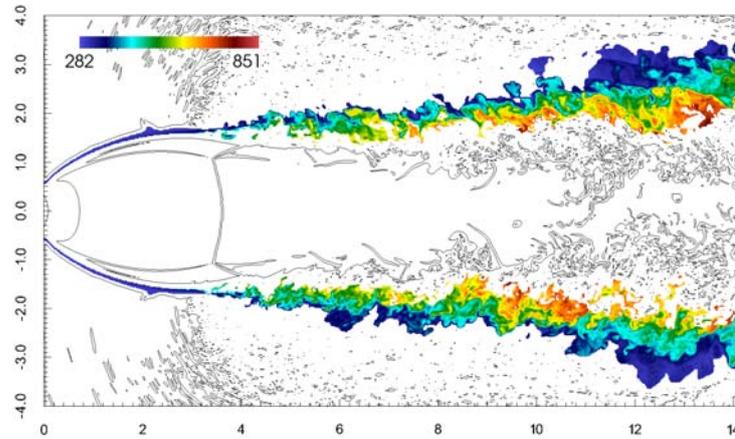


FIGURE 6.4 – Limite d'auto-inflammation du mélange hydrogène/air : champ instantané de la fraction massique d'hydrogène prise entre les limites d'inflammabilité ξ_{ign}^- et ξ_{ign}^+ coloré par la température et superposé à un schlieren basé sur la masse volumique.

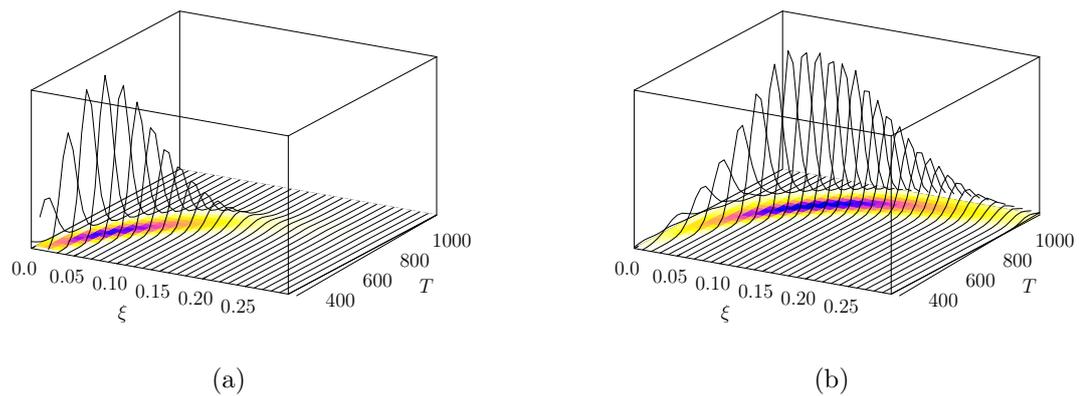


FIGURE 6.5 – Fonction densité de probabilité jointe de la température et du traceur passif dans le plan $x/D = 6$ (a) et dans le plan $x/D = 14$ (b).

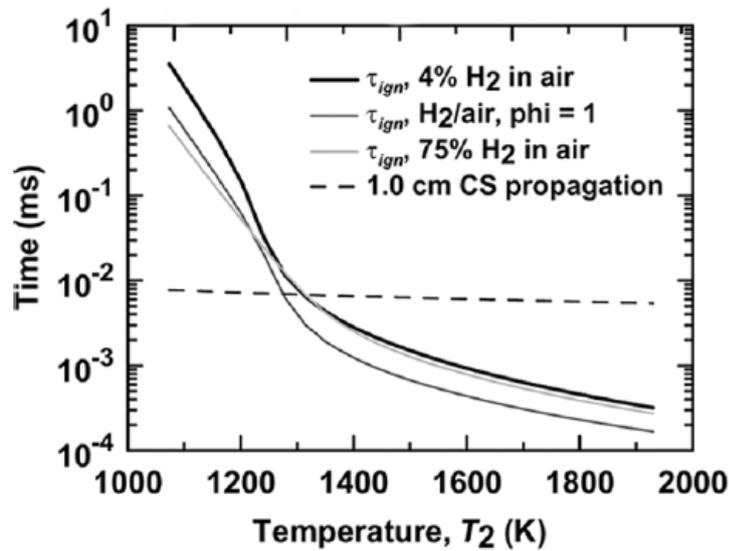


FIGURE 6.6 – Délais d’auto-allumage d’un mélange hydrogène-air en fonction de la température (mélange stoechiométrique, mélange 4% H_2 et 75% H_2) (figure issue de la référence [9]).

à l’inflammation ainsi qu’une température proche de la température d’auto-allumage. Il s’agit dorénavant d’examiner les délais d’auto-inflammation pour déterminer s’ils sont compatibles avec notre domaine de simulation (de longueur réduite) et les vitesses mises en jeu.

Nous constatons sur la figure 6.6 que les délais d’auto-allumage sont de l’ordre de la milliseconde pour des mélanges à 1100K. En comparaison des temps de séjour correspondants, ces délais sont donc rédhitoires vis à vis de l’auto-allumage de notre jet fortement sous détendu. Le temps que la particule fluide réagisse, elle est déjà sortie du domaine de calcul.

La probabilité d’auto-inflammation du jet d’hydrogène fortement sous détendu étant quasiment nulle, nous décidons de forcer l’allumage dans la couche de mélange supersonique par l’ajout d’un noyau d’auto-allumage.

6.3 Allumage forcé du jet d'hydrogène central

Cette partie est consacrée à l'étude du jet d'hydrogène fortement sous détendu réactif. Nous avons déterminé et vérifié dans la partie précédente que ce jet ne peut pas s'allumer spontanément. Nous allons donc utiliser une source de chaleur externe afin de forcer l'allumage de ce jet. Nous allons donc dans un premier temps décrire la configuration étudiée pour ensuite étudier la réaction chimique dans cette situation.

6.3.1 Description de la configuration

Cette section va décrire la configuration étudiée notamment le schéma cinétique utilisé ainsi que les principales caractéristiques du noyau d'auto-allumage utilisé pour forcer l'inflammation du jet.

Cette configuration reprend le jet d'hydrogène fortement sous détendu avec une approche détaillée des termes de transport étudié dans le chapitre précédent pour lequel nous considérons maintenant les termes sources chimiques.

Nous rappelons ici quelques caractéristiques du jet déjà mentionnées dans la section 5.2. Le calcul met en place un jet d'hydrogène pur de diamètre $D = 0.001$ m à très haute pression (15 *atm*) dans une atmosphère au repos. La résolution de celui-ci est basée sur une approche détaillée des termes de transport avec l'utilisation de la librairie EGLIB développée par Ern et Giovangigli [56]. Le domaine de calcul est cartésien et ses dimensions complètes sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 16D \times 20D \times 20D$. Ce domaine est discrétisé avec $N_1 \times N_2 \times N_3 = 880 \times 547 \times 547$ points (260 millions). Cette simulation a été réalisée sur le supercalculateur "Turing" de l'IDRIS pour un temps de calcul d'environ 300 000 heures CPU.

La résolution du terme source chimique est effectuée à l'aide du schéma cinétique détaillé de Ó Conaire et al. [1]. Ce schéma réactionnel comprend 21 étapes et 9 espèces. Il a été validé en terme de délai d'auto-allumage pour la combustion supersonique et convient particulièrement bien à notre situation.

Le noyau d'allumage est une région du domaine dans laquelle nous forçons la réaction chimique. Dans cette région, l'approximation de Burke et Schumann est utilisée pour transformer localement les réactifs en produits de combustion. Ainsi, l'hydrogène et l'oxygène sont transformés en vapeur d'eau ce qui a pour conséquence d'augmenter localement la température. Ce noyau d'allumage est représenté par une sphère de rayon R_{sp} localisée en (x_{sp}, y_{sp}, z_{sp}) .

6.3.2 Étude de la propagation de la réaction chimique

Nous allons étudier ici l'écoulement en présence d'un spot d'allumage localisé en $(4.85D, 1.75D, 0D)$. Différents essais faisant varier le temps de maintien du noyau d'allumage ont été effectués. Ceux-ci n'ont pas conduit à un maintien des niveaux de température suffisants pour permettre à la réaction chimique de se développer. Une étude plus systématique aurait pu être conduite en faisant varier les dimensions du noyau d'allumage (rayon critique) en suivant les travaux de Champion, Deshaies et Kinoshita [150] mais elle n'a pas pu être envisagée faute de temps. Nous avons donc décidé de maintenir le noyau d'allumage tout au long de la simulation prise en compte ici. L'observation de l'évolution de l'écoulement va s'effectuer en trois instants différents tous séparés de $t_{int} = 10^{-6} s$. Le premier instant pris en compte intervient une quinzaine de t_{int} après le début de l'allumage forcé. La figure 6.7 reporte les trois champs de température autour du spot d'allumage. Le spot d'allumage est représenté par la sphère blanche. Nous observons bien que la température s'est élevée autour du spot d'allumage atteignant des niveaux supérieurs à $2000K$ à certains endroits. Nous constatons également la diffusion de celle-ci dans son entourage proche permettant à l'écoulement de s'auto-enflammer dans ces régions. On note que la propagation de la réaction ne s'effectue que dans le sens de l'écoulement. Les vitesses à cet endroit sont beaucoup trop importantes pour permettre à la réaction chimique de se propager à contre-courant.

La figure 6.8 affiche le dégagement de chaleur dans cet écoulement. Le noyau d'allumage est représenté par une sphère bleue dans cette figure. Le dégagement de chaleur dans le spot d'allumage est nul. Le dégagement de chaleur est uniquement dû à l'auto-allumage dans le sillage du noyau. Il est relativement intermittent.

Le taux de dissipation scalaire instantané est présenté sur la figure 6.9. Nous constatons que la réaction chimique et donc le dégagement de chaleur est présent dans les zones où le taux de dissipation scalaire est suffisamment faible.

La figure 6.10 montre les champs de fraction massique du radical hydroxyle OH. Cette espèce chimique est caractéristique des zones d'oxydation et permet donc de définir le front de flamme. Dans notre cas, la fraction massique de ce radical reste très faible. Elle prend des valeurs relativement élevées juste en aval de la zone de forçage, notamment pour les temps t_3 , mais ces niveaux diminuent très rapidement dans le sillage. Il n'y a donc pas à proprement parler de développement d'un front de flamme dans cet écoulement, on visualise plutôt quelques zones plus ou moins réactives dispersées.

Nous nous intéressons maintenant plus en détail aux espèces chimiques. Comme indiqué précédemment, l'auto-inflammation dans les conditions considérées dans cette étude est caractérisée par l'accumulation de radicaux avant toute libération de chaleur importante. Cette accumulation de radicaux est le résultat de la concurrence entre les réactions

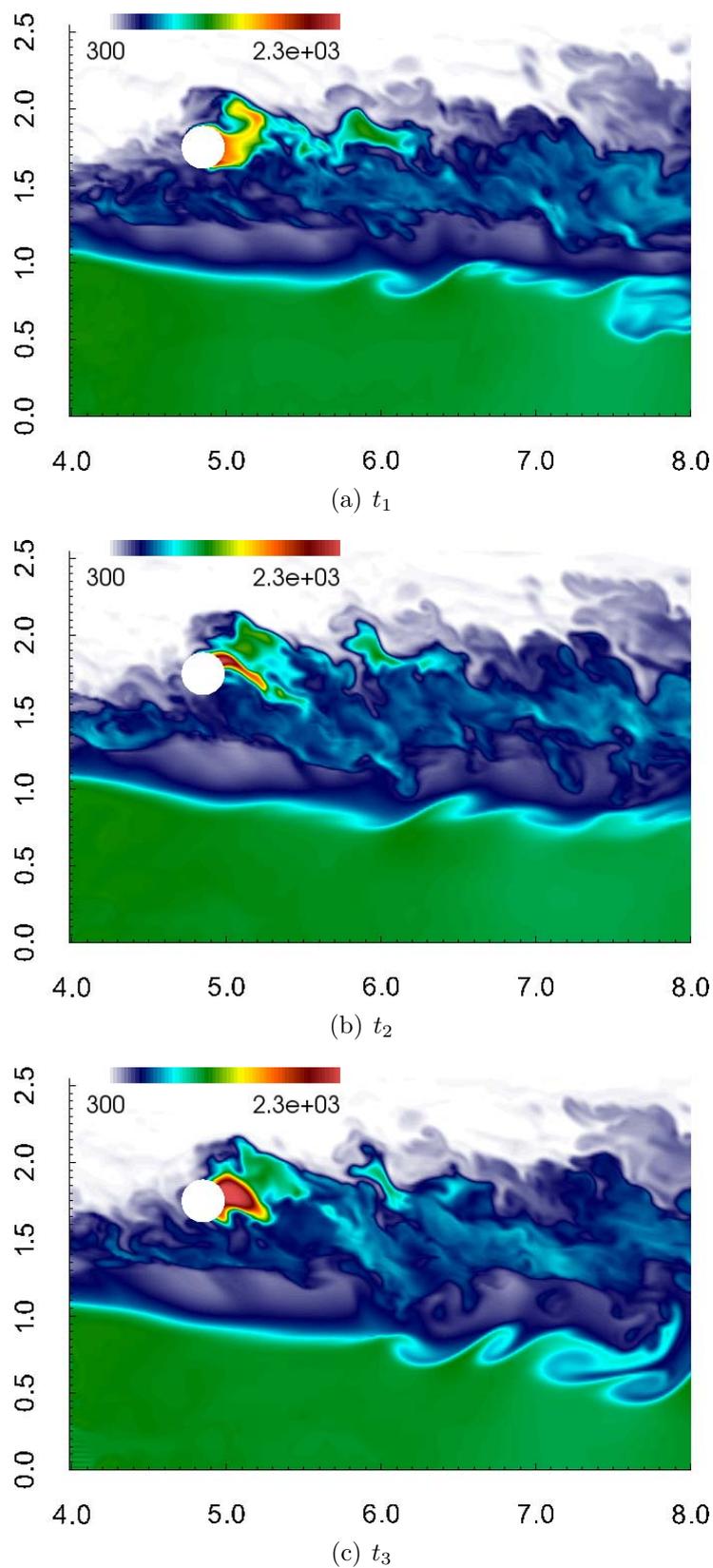


FIGURE 6.7 – Champs de température (en K) autour du noyau d'allumage en trois instants.

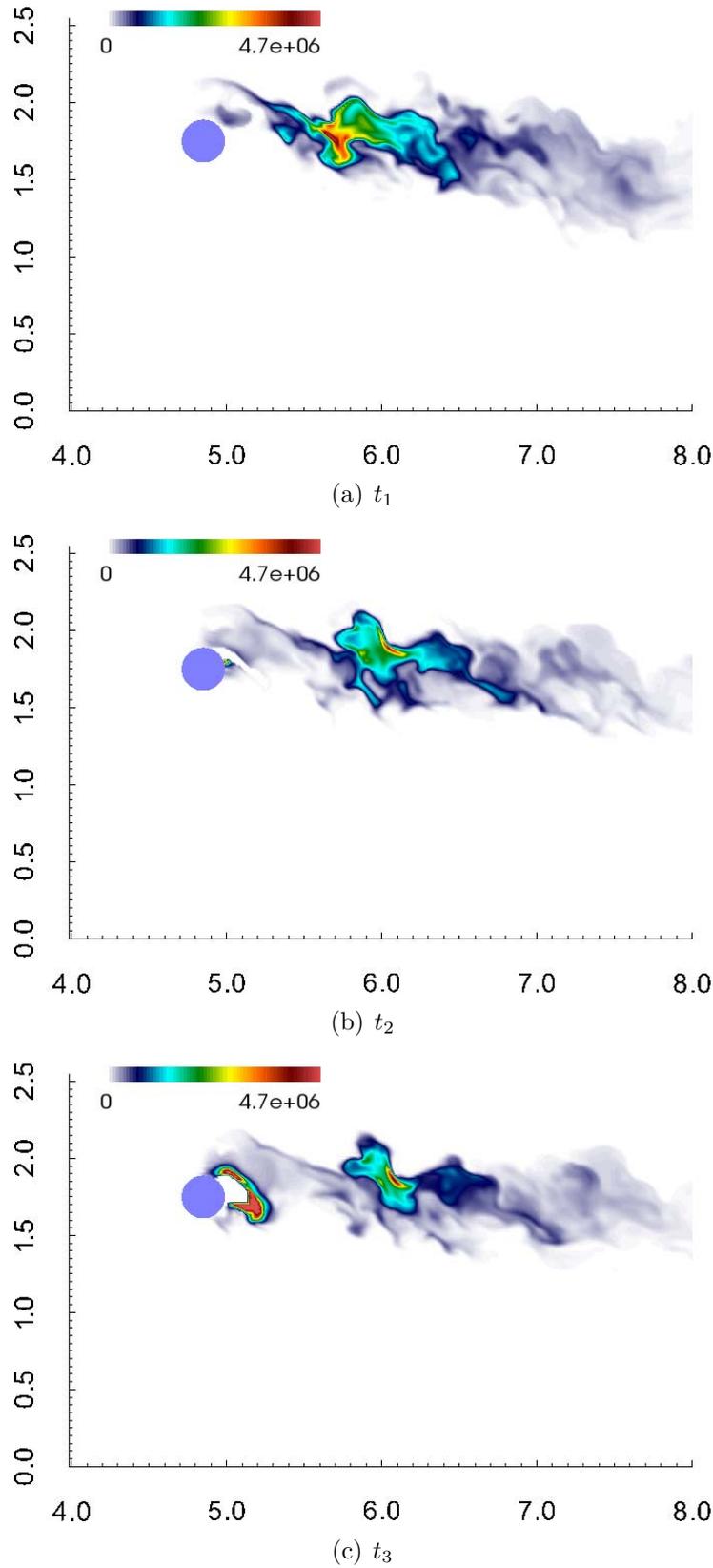


FIGURE 6.8 – Champs du taux de dégagement de chaleur ω_0 ($m^2.s^{-3}$) autour du noyau d'allumage en trois instants.

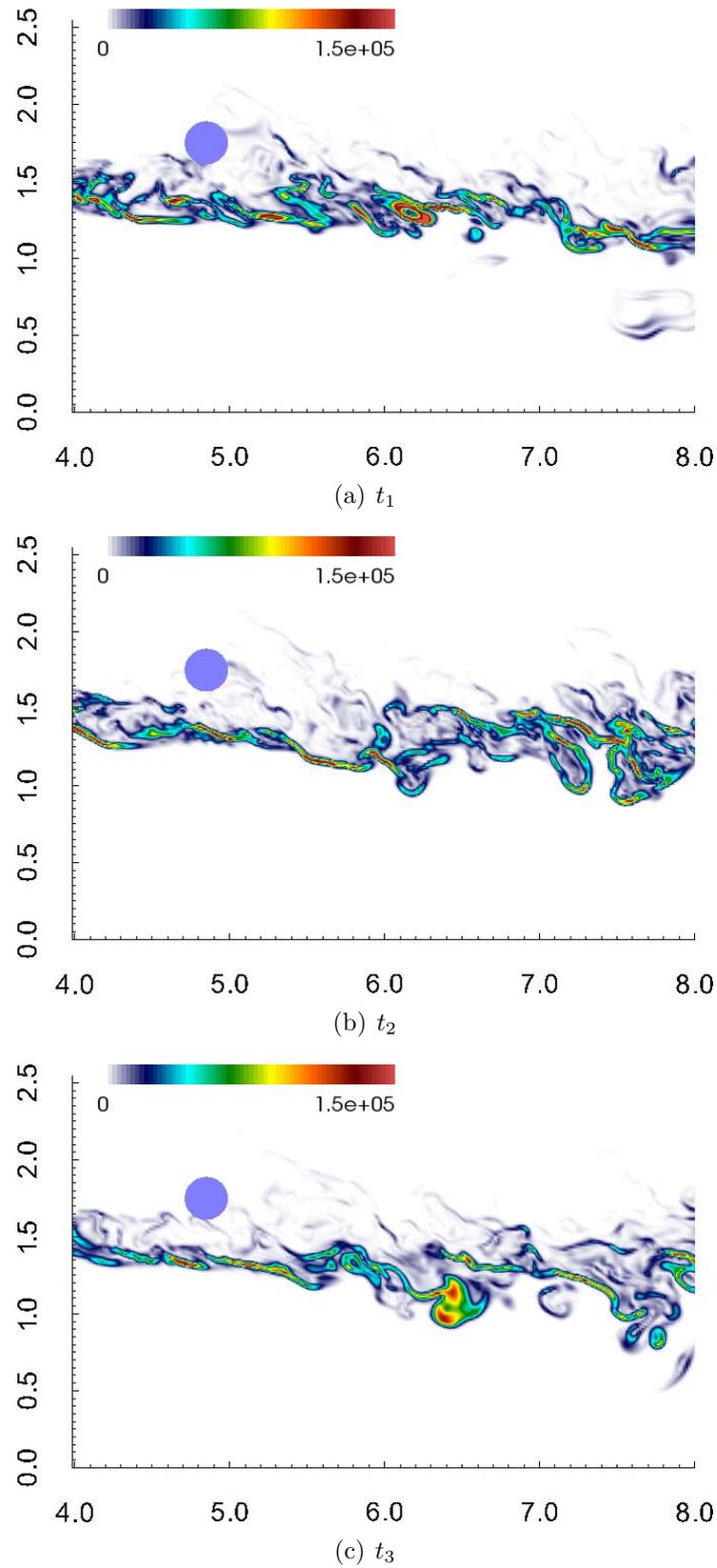


FIGURE 6.9 – Champs du taux de dissipation scalaire autour du noyau d'allumage en trois instants.

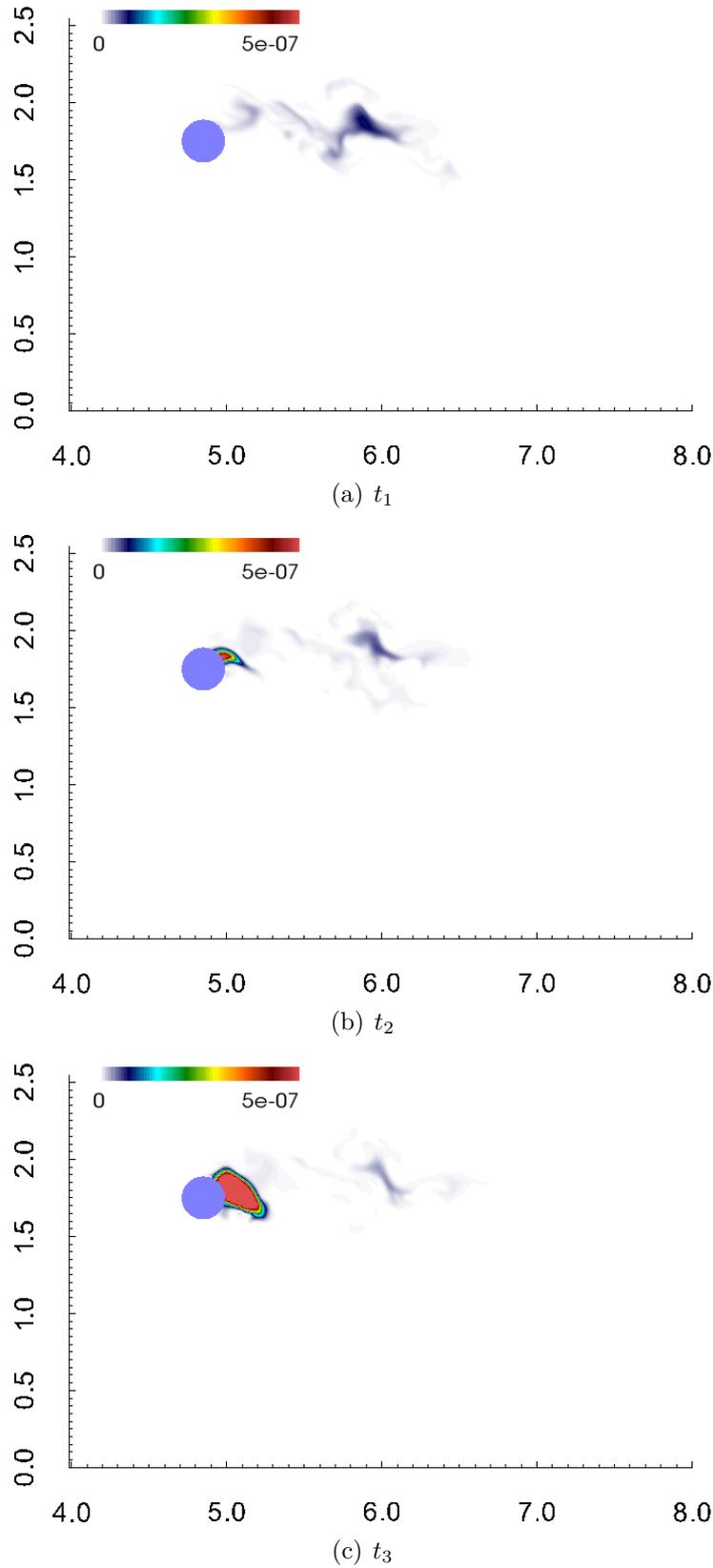


FIGURE 6.10 – Champs de la fraction massique du radical OH autour du noyau d'allumage en trois instants.

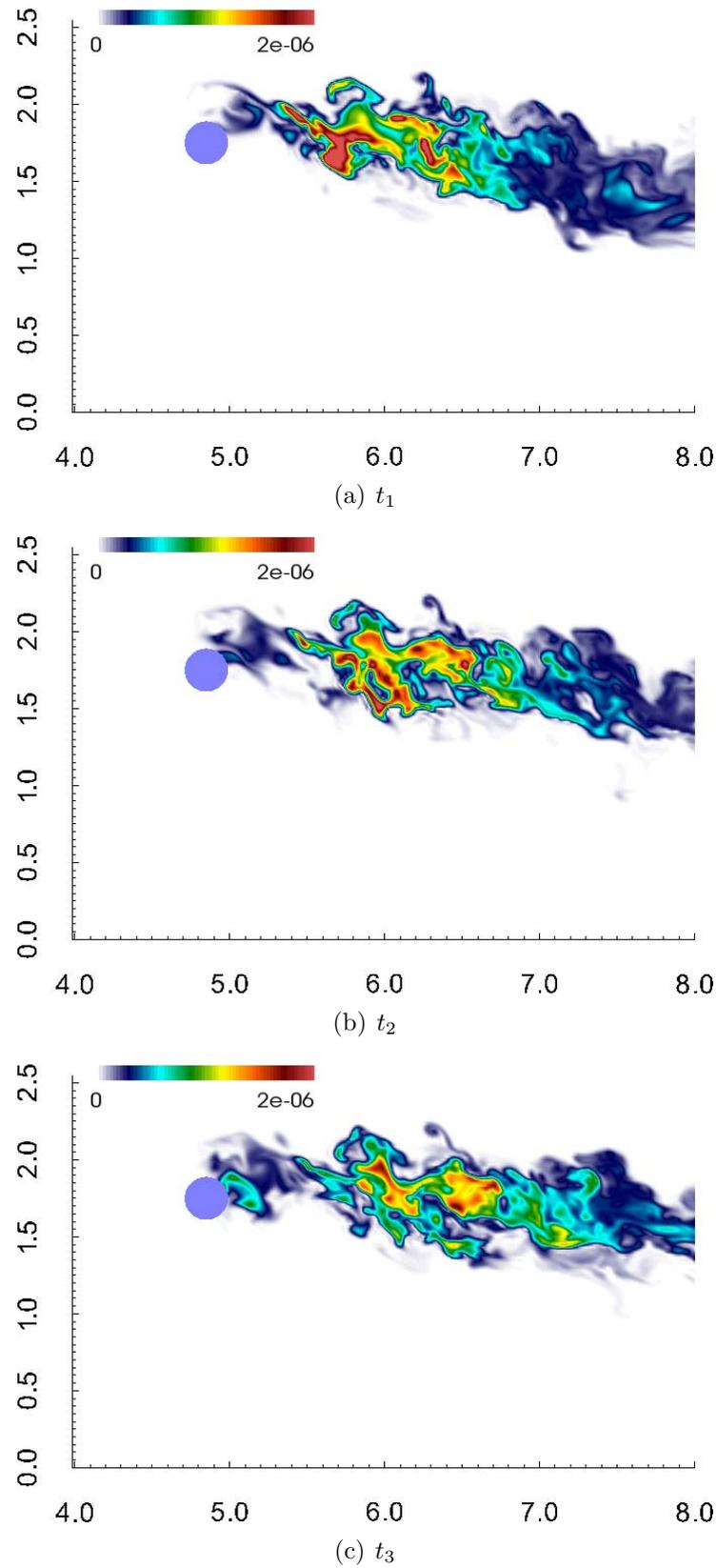


FIGURE 6.11 – Champs de la fraction massique du radical HO_2 autour du noyau d'allumage en trois instants.

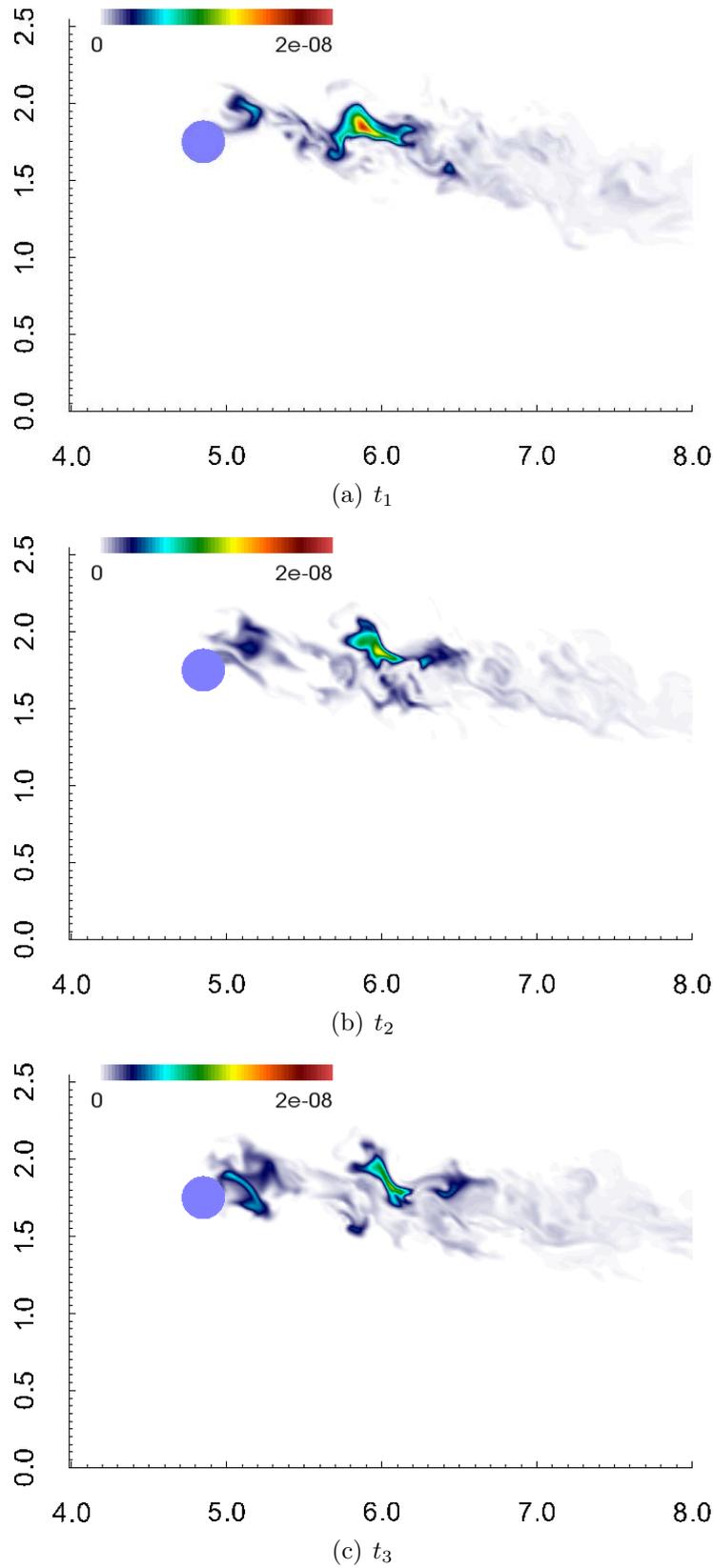


FIGURE 6.12 – Champs de la fraction massique du radical H_2O_2 autour du noyau d'allumage en trois instants.

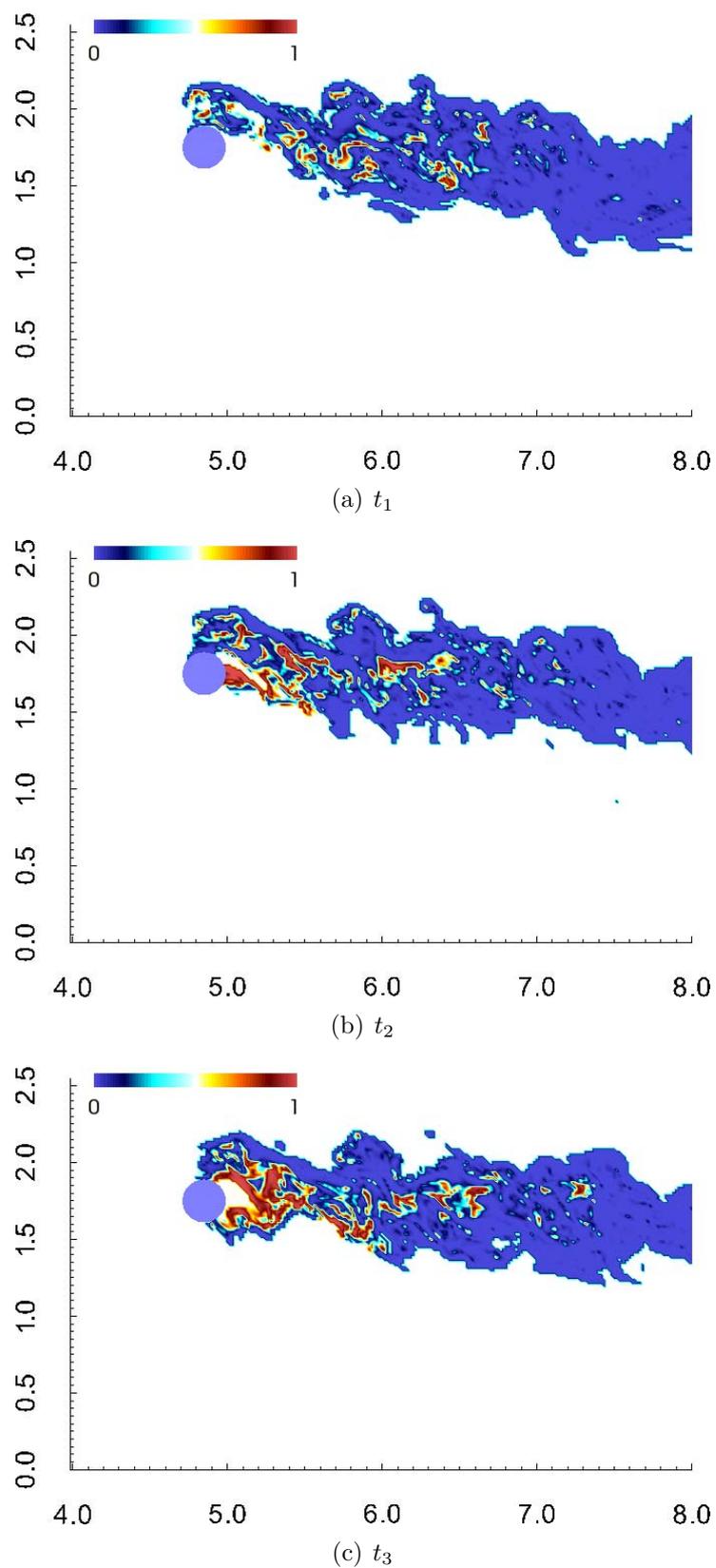


FIGURE 6.13 – Champs de l'indice de Takeno dans le sillage du noyau d'allumage pour les trois instants considérés.

de ramification de chaîne et les réactions de terminaison de chaîne. Les espèces intermédiaires tels que HO_2 et H_2O_2 peuvent servir d'abord comme "puits" pour les radicaux par étapes de terminaison de chaîne ; puis, à la fin de la période d'induction, ils sont partiellement convertis en radicaux dans les étapes qui stimulent le processus de ramification de chaîne.

Nous étudions ici un index permettant de distinguer les zones pré-mélangées des zones non pré-mélangées. Cette étude est basée sur l'indice de Takeno [151] défini par :

$$G = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nabla Y_c \cdot \nabla Y_o}{\|\nabla Y_c\| \|\nabla Y_o\|} \right) \quad (6.2)$$

où les indices C et O désignent, respectivement, le combustible et l'oxydant. La relation (6.2) représente le cosinus de l'angle entre les gradients de fractions massiques de combustible et d'oxydant de telle sorte que des valeurs de G proches de l'unité correspondent à des gradients alignés (associés à une combustion plutôt pré-mélangée), tandis que des valeurs proches de 0 correspondent à des gradients opposés (flammes non pré-mélangées). La détermination de cette indice n'est effectuée que dans les zones où le dégagement de chaleur est non nul et donc dans les zones où l'auto-allumage se produit. Nous constatons sur la figure 6.13 qu'au premier instant, l'essentiel du dégagement de chaleur s'effectue dans des zones où les gradients sont opposés et donc plutôt associées à des flammes non pré-mélangées avec tout de même la présence de quelques poches pré-mélangées. En revanche, à mesure que le temps avance, nous visualisons des poches pré-mélangées qui subsistent en aval du domaine. Les résultats obtenus confirment que l'auto-inflammation de l'écoulement a lieu dans des régions où les gradients de combustible et d'oxydant sont majoritairement opposés.

Nous divisons maintenant le domaine en deux zones d'études distinctes (cf. figure 6.14) afin d'obtenir des résultats locaux. La zone 1 se trouve juste en aval du noyau d'allumage tandis que la zone 2 est repoussée en aval de la zone 1. Nous allons étudier la température et les fractions massiques d'hydrogène, de vapeur d'eau et de radical hydroxyl OH en fonction du traceur passif transporté pour deux intervalles de temps (temps 1 correspond à l'intervalle entre t_1 et t_2 et temps 2 correspond à l'intervalle entre t_2 et t_3).

La figure 6.15 reporte les quatre *scatterplots* de la température en fonction de ξ . La courbe noire correspond à la stoechiométrie. Les températures dans la zone 2 ne présentent pas de valeur supérieure à 1000K. Nous pouvons donc supposer que le dégagement de chaleur est bien trop faible dans la seconde zone. En revanche, on trouve des températures plus élevées dans la zone 1. Pour le deuxième intervalle de temps, nous constatons que les températures les plus élevées se trouvent au niveau de la stoechiométrie. Alors que pour le premier intervalle de temps, elles se trouvent bien au delà de la stoechiométrie.

La figure 6.16 reporte les quatre *scatterplots* de la fraction massique d'hydrogène en

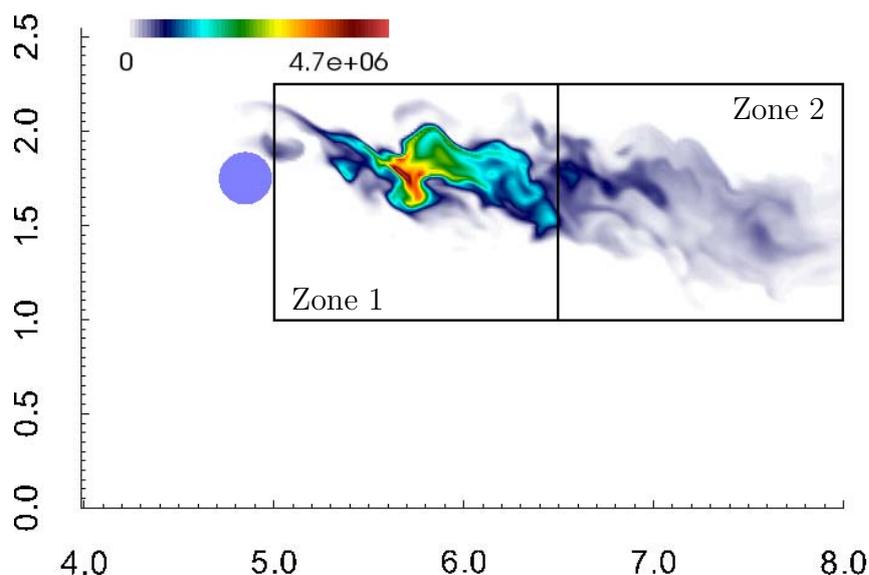


FIGURE 6.14 – Définitions des deux zones d'études

fonction de la fraction de mélange ξ . La courbe noire correspond ici à la première bissectrice. Les fractions massiques sont globalement sous la première bissectrice pour les faibles valeurs de ξ . Cette tendance s'inverse lorsque ξ augmente avec de plus en plus de valeurs au dessus de la droite lorsque ξ est supérieur à 0.2. Nous avons déjà observé ces effets de Lewis lors de l'étude du jet d'hydrogène. Pour le cas du jet d'hydrogène, ces effets étaient les plus importants pour les faibles valeurs de la fraction de mélange.

Nous observons également la fraction massique de vapeur d'eau (cf. figure 6.17). La courbe noire correspond à la valeur maximale que peut prendre la fraction de mélange d'eau si la réaction chimique était infiniment rapide. Il est à noter la très grande différence entre les valeurs prises dans la zone 1 et dans la zone 2. Dans la zone 2, les niveaux atteints par cette quantité sont de nouveau très faibles. On en déduit qu'il n'y a pas création de vapeur d'eau à ce niveau et que celle créée en amont est déjà diluée dans l'écoulement. En revanche, au niveau de la zone aval, nous observons des valeurs bien plus importantes proches de la valeur obtenue avec une chimie infiniment rapide. Les valeurs les plus grandes sont placées légèrement avant la stoechiométrie comme pour la température.

La figure 6.18 montre les mêmes *scatterplots* concernant la fraction massique du radical hydroxyl OH . La présence de ce radical dans la seconde zone est très faible. Les quantités de celui-ci dans la première zone sont environ vingt fois supérieures avec un pic toujours en aval de la stoechiométrie. Le noyau d'allumage ne produit pas de radicaux. Ceux-ci résultent donc uniquement de la réaction chimique en présence dans cette zone. Le noyau d'allumage permet donc à l'écoulement de s'auto-allumer légèrement dans la première zone. Par contre, nous pouvons conclure que la réaction chimique ne se maintient pas dans le domaine, elle est totalement absente dans la seconde zone.

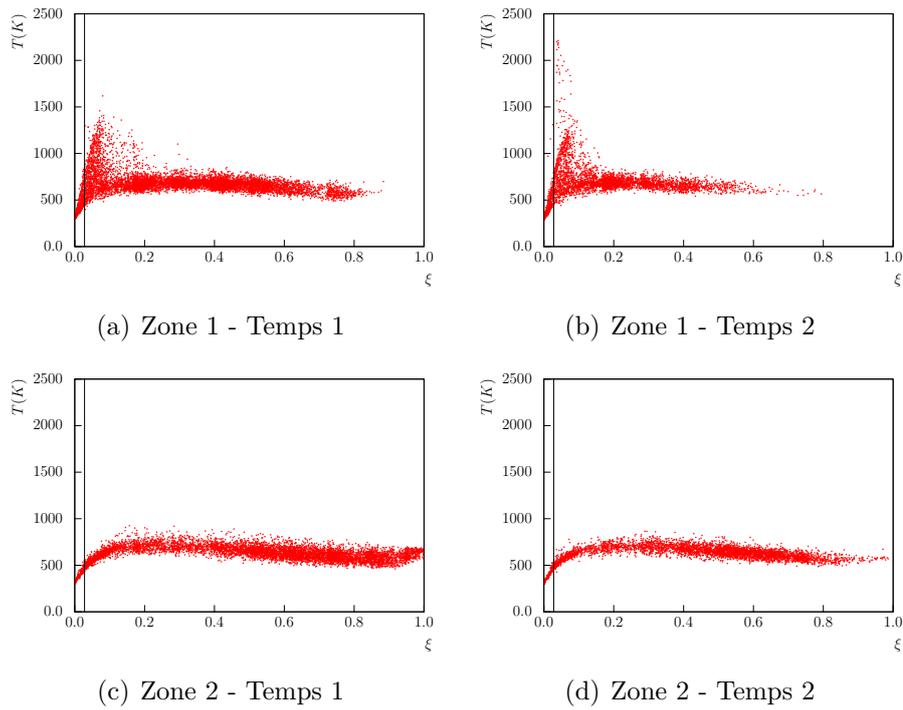


FIGURE 6.15 – *Scatterplots* de la température dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.

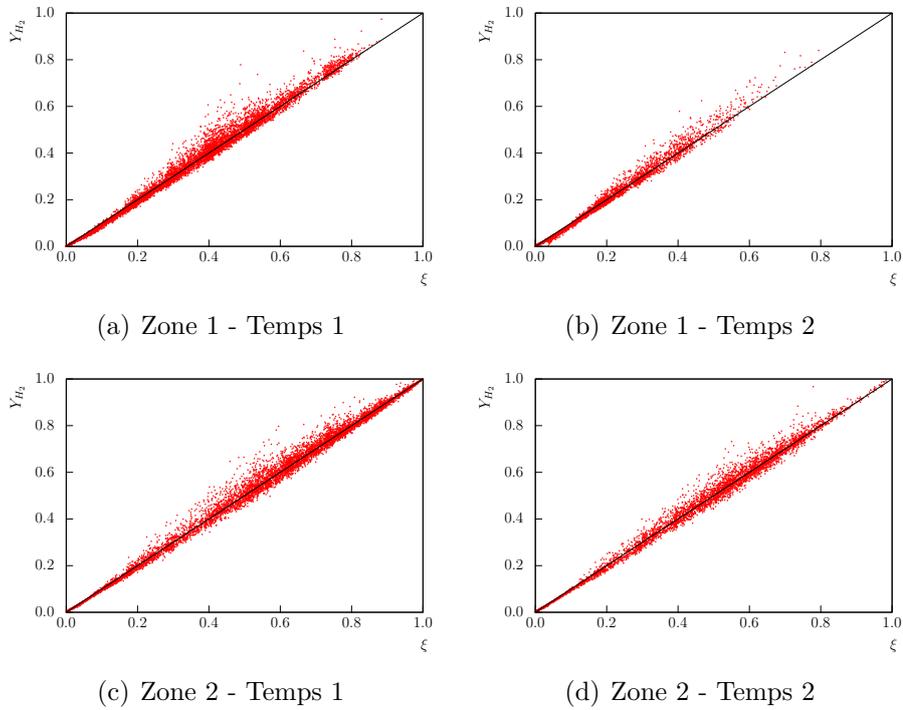


FIGURE 6.16 – *Scatterplots* de la fraction massique d' H_2 dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.

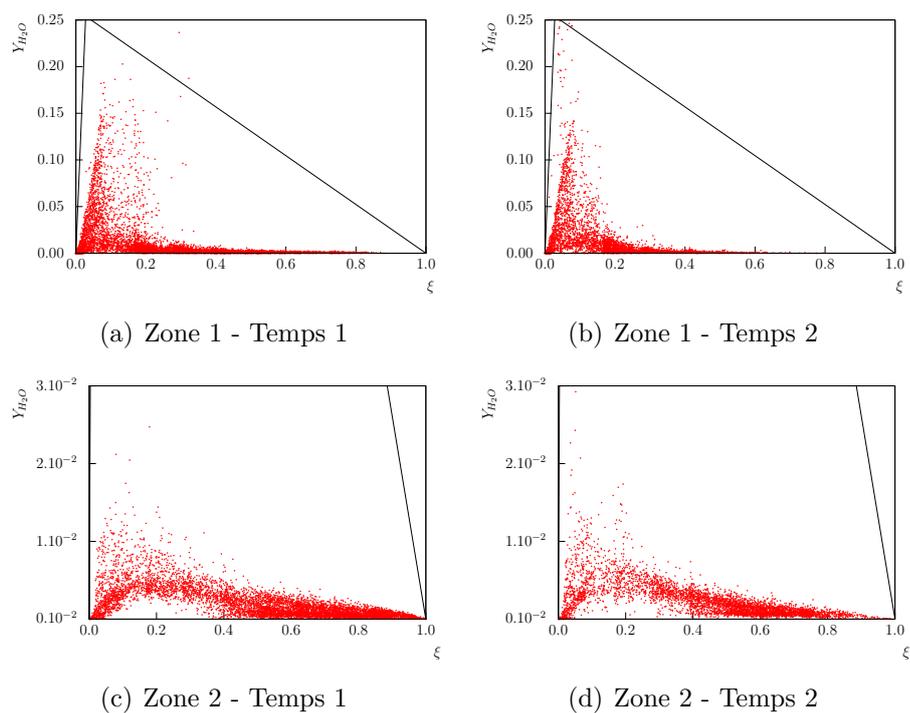


FIGURE 6.17 – *Scatterplots* de la fraction massique d' H_2O dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps. La courbe noire correspond à l'approximation de chimie infiniment rapide (limite de Burke et Schumann).

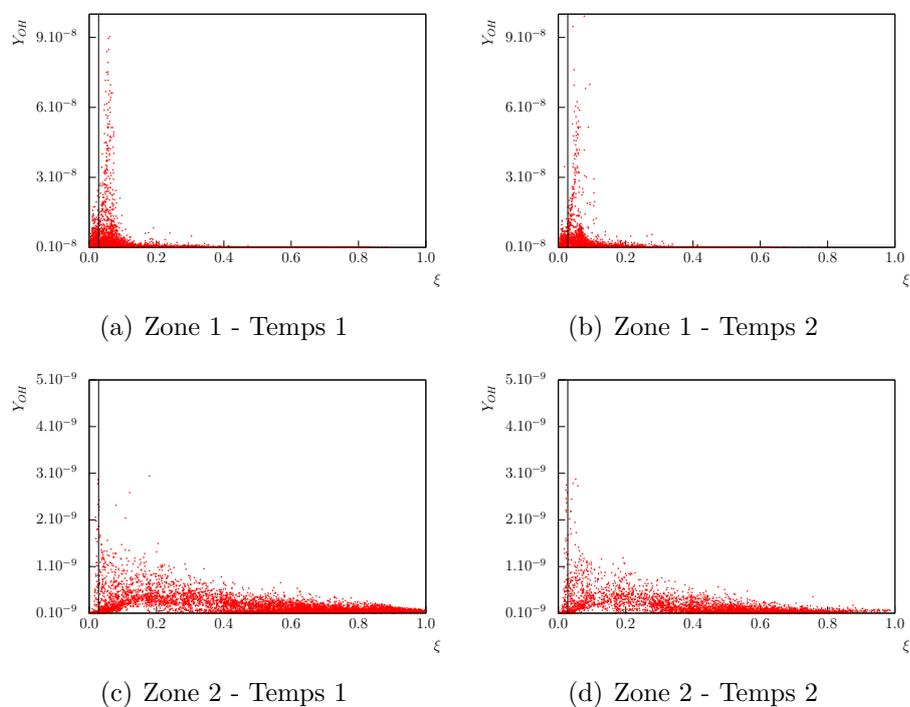
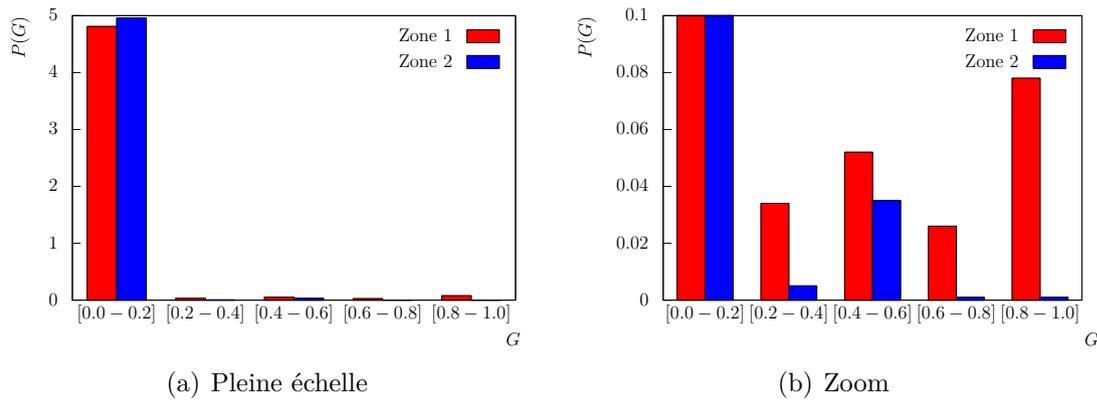


FIGURE 6.18 – *Scatterplots* de la fraction massique d' OH dans les deux zones d'études pour les deux intervalles de temps.

FIGURE 6.19 – Fonction densité de probabilité de l'index de Takeno G .

Nous avons vu précédemment sur des champs instantanés (cf. fig. 6.13) que le critère permettant de distinguer les zones où la réaction chimique est plutôt prémélangées des zones où elle est plutôt non prémélangées montrait une prédominance de zones réactives non prémélangées. Néanmoins, nous avons tout de même déterminé la fonction densité de probabilité de cet indice dans les deux sous domaines définis précédemment (cf. figure 6.19). On s'aperçoit effectivement que la probabilité d'avoir des gradients opposés est prépondérante. Nous trouvons qu'une légère trace de gradients alignés dans cet écoulement. L'absence de zones pré-mélangées pénalise le développement et le maintien de la réaction chimique. Dans cette configuration où la vitesse est très élevée, la combustion ne peut pas se développer. Nous avons également étudié quelques grandeurs moyennes conditionnées par la fraction de mélange. Le profil de température moyenne conditionnée (cf. fig. 6.20(a)) confirme bien la présence d'un pic de température dans la première zone. Ce pic résulte à la fois de la présence du noyau d'allumage juste en amont de cette zone et du dégagement de chaleur par la réaction chimique. L'impact principal est sans doute à mettre au crédit du noyau d'allumage. On remarque que dans la zone aval, le profil de la température moyenne est au dessus de la courbe de température de la zone 1. On constate que les niveaux moyens de température obtenus pour les valeurs de ξ inférieures à 0.17 sont très inférieurs dans la zone 2 par rapport à la zone 1 alors que, pour les valeurs de ξ supérieures, la tendance s'inverse et la température est plus élevée. Nous avons également considéré le taux de dissipation scalaire moyen (cf. fig. 6.20(b)). Les profils observés dans chaque zone sont assez similaires. Nous notons toutefois un taux de dissipation plus faible dans la seconde zone sous l'effet du mélange. Son étude revêt un intérêt particulier dans l'étude de l'auto-allumage dans la mesure où l'auto-inflammation d'un écoulement se produit préférentiellement dans les zones où le taux de dissipation scalaire est plutôt faible [46]. Pour les faibles valeurs du traceur passif, nous constatons que le taux de dissipation scalaire est bien plus faible que pour les valeurs élevées. Ceci est

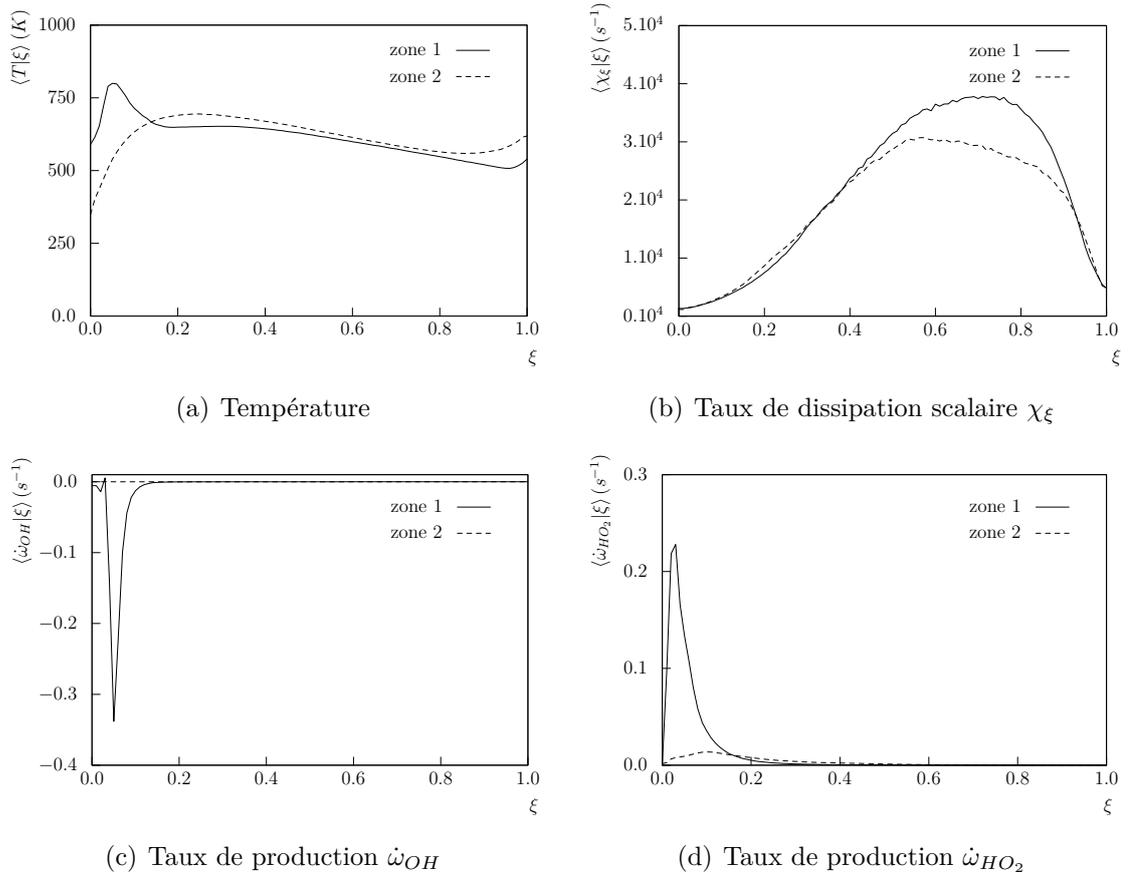


FIGURE 6.20 – Grandeurs moyennes conditionnées par la fraction de mélange transportée.

favorable à la formation de noyau d'auto-allumage dans cette région. Les figures suivantes reportent les taux de production moyen du radical OH (figure 6.20(c)) et du radical HO_2 (figure 6.20(d)). Nous nous apercevons à nouveau que la seconde zone est complètement dépourvue de production ou destruction de radicaux. En revanche, la première zone est un lieu de production de radicaux HO_2 et de destruction de radicaux OH .

Si on regarde le profil de température moyen conditionné, le fait que la température augmente dans la seconde zone est probablement un signe de l'efficacité du noyau d'allumage. En maintenant le noyau d'allumage et en augmentant légèrement sa taille, on aurait peut être pu observer un maintien de la réaction chimique après extinction de ce noyau. Néanmoins, le coût de la simulation aurait été vraiment trop important sans avoir de garantie d'observer effectivement la réaction chimique prendre le relais du noyau d'allumage. Nous avons donc décidé d'étudier l'auto-allumage et la combustion en écoulement rapide dans une configuration plus favorable.

6.4 Allumage de type moteur fusée

Cette partie va être consacrée à l'étude de l'auto-inflammation dans une configuration plus particulière de jet fortement sous détendu. Dans un premier temps, nous définirons tous les paramètres de cette nouvelle configuration. Ensuite, nous décrirons la topologie de l'écoulement. Enfin, nous étudierons l'auto-allumage dans le sillage de ce jet fortement sous détendu.

6.4.1 Description de la configuration

Nous allons tout d'abord prendre le temps de bien décrire la configuration simulée. Cette configuration s'apparente à un allumeur de moteur fusée.

Nous allons étudier ici une injection centrale de gaz chauds composés d'oxygène et de vapeur d'eau pouvant être considérés comme les gaz brûlés issus d'un mélange préalable présentant un excès d'oxygène. En périphérie de cette injection centrale, on va considérer un jet co-courant d'hydrogène pur. Les deux injections s'opèrent à pression élevée. La pression d'injection du jet d'oxygène et de vapeur d'eau sera de 15 *atm* tandis que celle du jet d'hydrogène pur sera de 6 *atm*. Nous avons choisi de considérer la pression interne de la chambre de combustion, initialement remplie d'azote inerte, à une atmosphère. Ceci conduit à des rapports de pression de 15 pour le jet central et de 6 pour le jet périphérique. Le jet central sera donc fortement sous détendu tandis que le jet périphérique sera faiblement sous détendu. Le diamètre d_c de l'injecteur central est fixé à 0.001 m ce qui est bien plus faible que la dimension d'un injecteur réel. L'épaisseur de la couronne d'injection périphérique correspond quant à elle à $1/8^{\text{ème}}$ du diamètre de l'injecteur central. Enfin, les deux injections sont séparées d'une distance équivalente à $1/4$ du diamètre central.

Le calcul est toujours réalisé dans un domaine de calcul cartésien dont les dimensions complètes sont $L_1 \times L_2 \times L_3 = 15.3D \times 18D \times 18D$. Il est discrétisé avec $N_1 \times N_2 \times N_3 = 1077 \times 637 \times 637$ points avec une résolution dans la zone d'intérêt de $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 =$

TABLEAU 6.1 – Paramètres de l'écoulement.

	Injection centrale	Injection périphérique
P (atm)	15.0	6.0
T (K)	2000.0	325.0
Ma	1.0	1.0
u (m/s)	890.0	1060.0
Y_{H_2}	0.0	1.0
Y_{O_2}	0.7698	0.0
$Y_{\text{H}_2\text{O}}$	0.2302	0.0

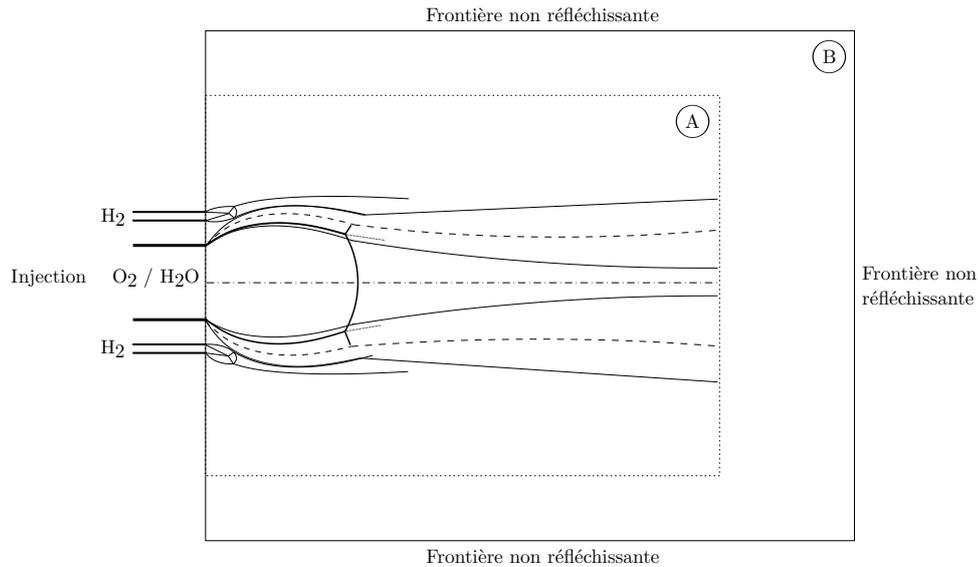


FIGURE 6.21 – Schéma de la configuration utilisée pour étudier l’auto-allumage dans le sillage d’un jet fortement sous détendu.

$D/74$. Ce qui représente un nombre total de points de calcul de près de 440 millions. Des zones tampons ont été ajoutées sur toutes les sorties du domaine de calcul, *i.e* sur les frontières à gauche, en bas, en haut, avant et arrière (cf. figure 6.21). Les dimensions du domaine sans ces zones tampons se réduisent à $L_1 \times L_2 \times L_3 = 14D \times 8D \times 8D$.

La simulation présentée ici a été conduite sur le supercalculateur “Turing” de l’IDRIS. Elle a nécessité environ 3.5 millions d’heures CPU en utilisant 65536 processus MPI.

Les grandeurs physiques utilisées pour les deux injections de cette simulation sont reportées dans le tableau (6.1). Les termes de production chimique ne sont considérés qu’après que l’écoulement se soit établi et que les structures compressibles se soient développées.

6.4.2 Description de la structure du jet

Champ proche

La structure du jet principal est significativement modifiée par la présence du coflow d’hydrogène. Celui-ci modifie en effet les conditions de vitesse et de pression à la périphérie du jet principal (effet de confinement), modifiant le taux de déflexion initial des lignes de courant au sein du jet principal (et donc le taux de détente associé) par rapport au cas sans coflow. Ceci conduit ainsi à une structure de choc incident en tonneau (a) plus étroite que celle observée précédemment. Ce choc (a) se réfléchit de façon irrégulière sur l’axe et est connecté à un disque de Mach et un choc réfléchi principal (b). L’écoulement de coflow, étant lui-même en situation initiale de forte détente, est fortement accéléré avant d’être

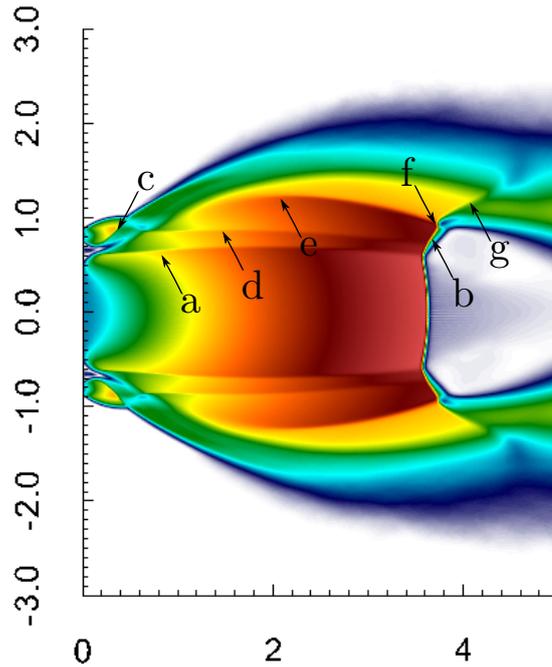


FIGURE 6.22 – Champ du nombre de Mach dans le champ proche de l'injection illustrant la complexité de la topologie de l'écoulement compressible issu de ces deux jets co-courants.

recomprimé à travers un premier choc courbe (c). Cette structure s'apparente en fait à celle qui serait rencontrée dans le cas d'un jet supersonique impactant une paroi inclinée. La condition d'équilibre pression/direction d'écoulement découlant de la rencontre de la zone externe de l'écoulement principal et interne de l'écoulement de coflow conduit alors à la formation d'un second choc incident en tonneau (d). Ce choc ne semble avoir qu'une faible incidence sur la structure de l'écoulement principal et ne semble induire qu'un changement mineur de la direction du choc réfléchi (b). On note finalement qu'un dernier choc incident (e) se forme par focalisation d'ondes de compression associées à l'épanouissement de la couche de mélange externe du coflow. Il interagit fortement avec le choc réfléchi (b) du jet principal en formant une structure complexe de type "cap shock", ressemblant aux structures de choc en chapeau rencontrées en configuration d'écoulement de tuyère supersonique en régime de décollement restreint [152]. Cette interaction conduit d'ailleurs à la formation d'un léger effet de Mach (f), connecté à un nouveau choc réfléchi (g). En aval du choc réfléchi (b), l'écoulement est fortement défléchi vers l'extérieur du jet avant de s'infléchir au contraire vers l'axe du jet au sein de la zone de détente observée dans la couronne supersonique entourant la poche subsonique formée en aval du disque de Mach. On note à ce niveau que la courbure du disque de Mach près du point triple conduit initialement à un écoulement localement convergent vers l'axe du jet principal. Cette situation d'écoulement prenant localement des orientations très différentes est propice à la formation de zone de recirculation. La formation d'une telle poche de recirculation en

aval du disque de Mach est détectable par le tracé (non-reporté) de lignes de courant, à une distance radiale proche de celle du point triple.

Définition de la fraction de mélange

Pour ce dernier jet simulé, nous n'avons pas résolu d'équation de transport pour la fraction de mélange. Nous avons donc dû chercher une grandeur passive caractérisant l'entrée de combustible. La difficulté réside dans le fait que ce jet contient plus de deux entrées car à l'instant initial le domaine de calcul ne contient que de l'azote (un balayage de N_2 a été réalisé). Finalement, la première entrée correspond au jet central contenant de l'oxygène O_2 et de la vapeur d'eau H_2O , la seconde au coflow d'hydrogène pur et la troisième à l'atmosphère inerte constitué d'azote N_2 (cette entrée ne débite plus à partir de $t = 0$). Il nous faut donc trouver plusieurs grandeurs passives capables de suivre le degré de mélange entre ces trois entrées. La fraction massique élémentaire d'hydrogène Z_H n'est pas un bon candidat. En effet, l'élément hydrogène est présent à la fois dans le coflow d'hydrogène pur ainsi que dans l'injection centrale de dioxygène O_2 et de vapeur d'eau H_2O . Nous devons donc trouver d'autres quantités pour discriminer les différentes entrées. La première grandeur utile va être la fraction massique d'azote Y_{N_2} . En effet, cette grandeur n'est présente que dans l'atmosphère au repos et est de plus inerte. La seconde grandeur que nous avons sélectionnée est la fraction massique élémentaire d'oxygène Z_O . Cet atome n'est présent que dans l'injection centrale et va ainsi pouvoir caractériser cette entrée. La quantité Z_O est basée sur l'élément oxygène et nous avons vu précédemment qu'elle est passive par construction. Finalement, l'entrée combustible peut donc être complètement caractérisée par la quantité ξ définie par :

$$\xi = 1 - Y_{N_2} - \xi_O \quad (6.3)$$

avec $\xi_O = Z_O/Z_O^\infty$ le traceur de l'entrée oxydante, la valeur de Z_O^∞ étant la fraction massique élémentaire de l'atome O prise dans l'entrée oxydante. La fraction de mélange ξ définie par (6.3) est bien un scalaire passif, elle est unitaire dans le courant de combustible et nulle dans l'azote pur.

L'injection de combustible est bien caractérisée et suivie par ce traceur passif comme l'illustre les figures 6.23 qui reportent un champ instantané et un champ moyen de la fraction de mélange.

Topologie globale

Nous venons de voir que la topologie du champ proche est très fortement modifiée par la présence du coflow d'hydrogène. Qu'en est-il du champ lointain ? Les modifications observées dans le champ lointain sont dues à la fois à la présence du coflow et à la présence

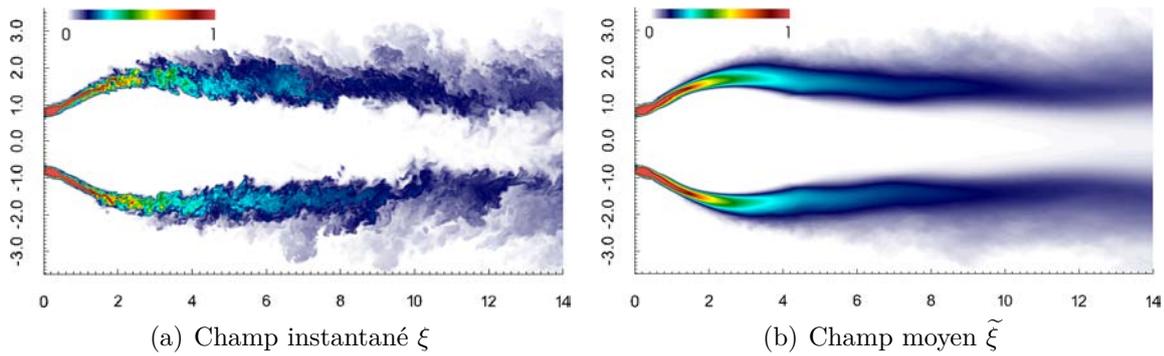


FIGURE 6.23 – Champ instantané (a) et champ moyen (b) de la fraction de mélange ξ reconstruite à partir de la fraction massique d'azote Y_{N_2} et de la fraction de mélange élémentaire basée sur l'élément oxygène ξ_O .

de la réaction chimique et du dégagement de chaleur qui en résulte. La figure 6.24(a) expose le champ du nombre de Mach moyen. La géométrie en aval du disque de Mach conserve les mêmes caractéristiques avec une couronne supersonique entourée par deux zones subsoniques donnant ainsi naissance à deux couches de mélange supersonique : une première avec la poche subsonique interne et la seconde avec l'atmosphère extérieure au repos. La topologie globale de l'écoulement reste qualitativement similaire. En revanche, ses caractéristiques géométriques sont considérablement impactées. Tout d'abord, la longueur de la poche subsonique est bien plus faible que dans le cas sans coflow. Sur le profil longitudinal du nombre de Mach moyen, nous déterminons la longueur de la poche subsonique à $L_s/D = 4.76$, ce qui est près de deux fois inférieure à celle du jet d'hydrogène pur (qui était de 8.05). La figure 6.24(b) présente le profil longitudinal de la température moyenne le long de l'axe du jet. Pour le cas non réactif, nous constatons que la température diminuait constamment dans le champ lointain, or dans le cas présent, la température diminue jusqu'à un palier vers ($x/D \approx 9.5$) remontant même légèrement avant de diminuer à nouveau à partir de $x/D = 13$. Ce comportement est à mettre au crédit de la réaction chimique et du dégagement de chaleur. L'ouverture du jet semble aussi être impactée par le dégagement de chaleur et la dilatation qu'il produit. Celle-ci est plus prononcée au niveau de la sortie du domaine (entre $x/D = 12$ et $x/D = 14$).

La figure 6.25 présente les profils radiaux des espèces majoritairement présentes dans cet écoulement. Sur la figure 6.25(a), les courbes avec les symboles correspondent aux profils de la fraction de mélange $\tilde{\xi}$ tandis que les courbes sans symboles correspondent aux profils de fraction massique d'hydrogène \widetilde{Y}_{H_2} . La différence entre $\tilde{\xi}$ et \widetilde{Y}_{H_2} correspond à la consommation d'hydrogène par la réaction chimique. Nous y observons notamment la destruction de l'oxygène à partir de $x/D = 12$ et la production de vapeur d'eau dans cette même région. Les profils de la fraction massique d'azote soulignent l'entraînement du milieu extérieur dans le jet. En effet, l'azote n'est initialement présent que dans l'atmosphère

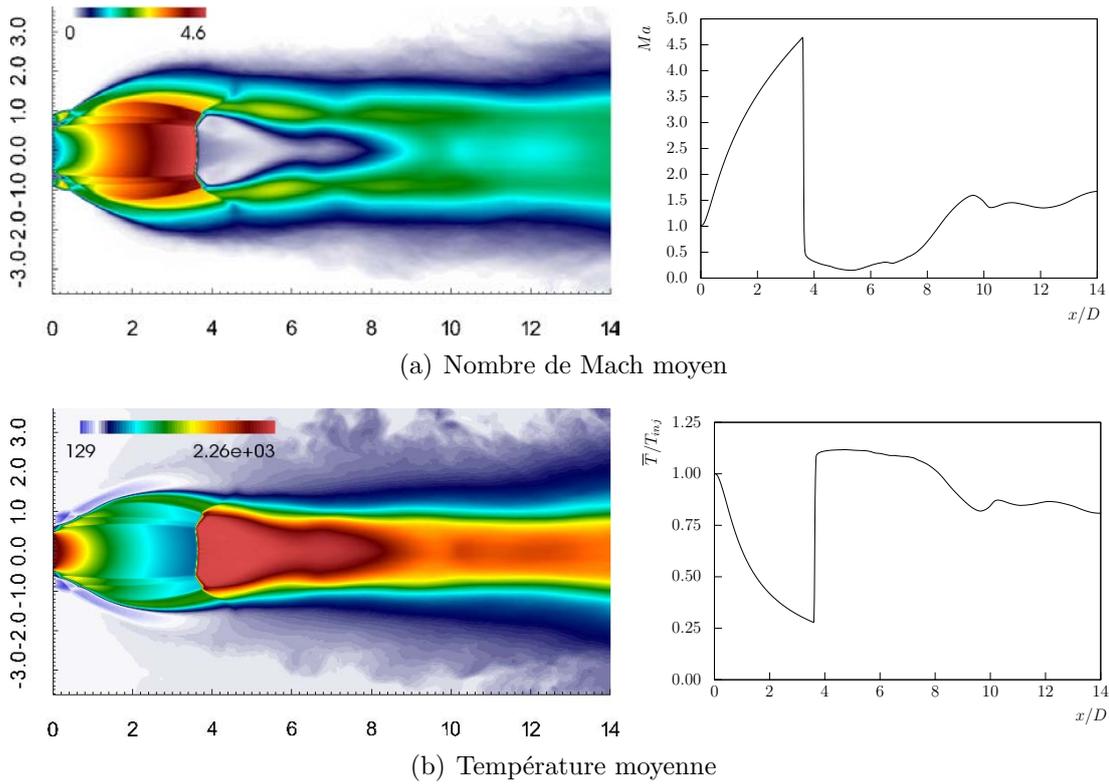


FIGURE 6.24 – Champ et profil axial du Nombre de Mach moyen (a) et champ de la température moyenne (K) et profil axial de la température moyenne normalisée (b).

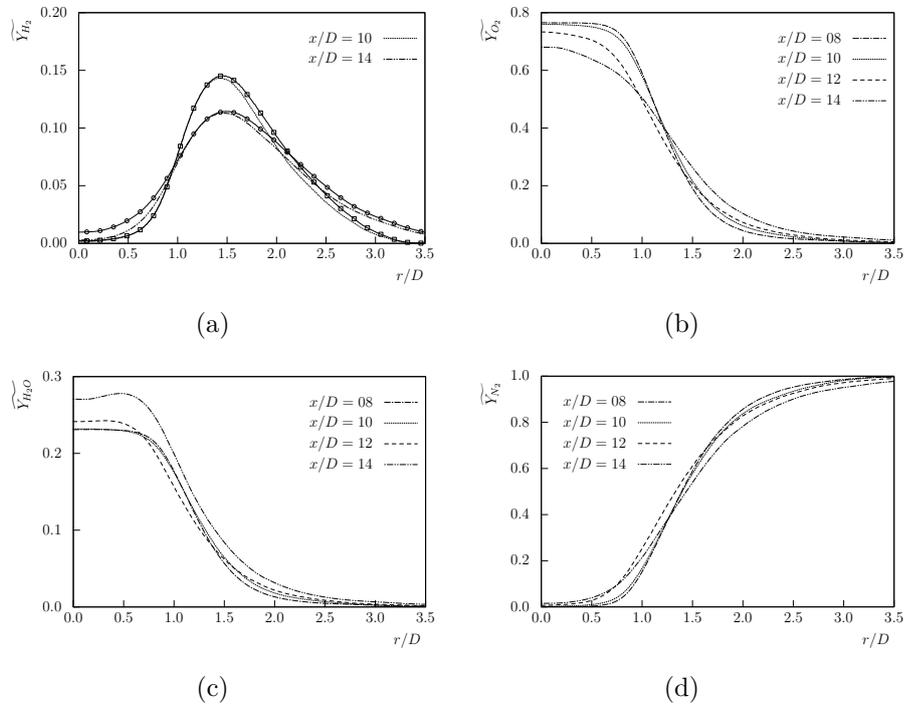


FIGURE 6.25 – Profils radiaux des espèces principales de l'écoulement : H_2 (a), O_2 (b), H_2O (c) et N_2 (d).

externe au jet. Nous constatons que l'azote est aussi présent dans la partie centrale du jet.

6.4.3 Énergie cinétique de turbulence

La figure 6.26 visualise un champ de l'énergie cinétique de turbulence k ainsi que des profils radiaux à différentes positions longitudinales x/D du jet. La distribution de l'énergie cinétique turbulente de ce jet particulier s'effectue de la même manière pour le jet d'air étudié précédemment. La turbulence se développe dans les deux zones cisillées de l'écoulement, la couche cisillée présente à la périphérie du jet et la couche de mélange issue du point triple. Ces deux zones de turbulence sont discernables sur les profils radiaux par la présence de deux pics de k dans la direction radiale. A la périphérie du jet, la turbulence se développe le long de la frontière du jet central atteignant son maximum en amont du choc réfléchi. Elle décroît ensuite dans le sillage de la structure compressible. En ce qui concerne la seconde zone, la turbulence se développe à partir du point triple. Elle atteint son maximum vers $x/D = 6$ puis décroît. Elle se dissipe dans cette zone beaucoup plus rapidement que dans la zone externe du jet (ce qui avait déjà été observé dans le cas du jet d'air). Par contre, en comparant avec le jet d'air, il apparaît qu'elle se dissipe plus rapidement également dans cette zone.

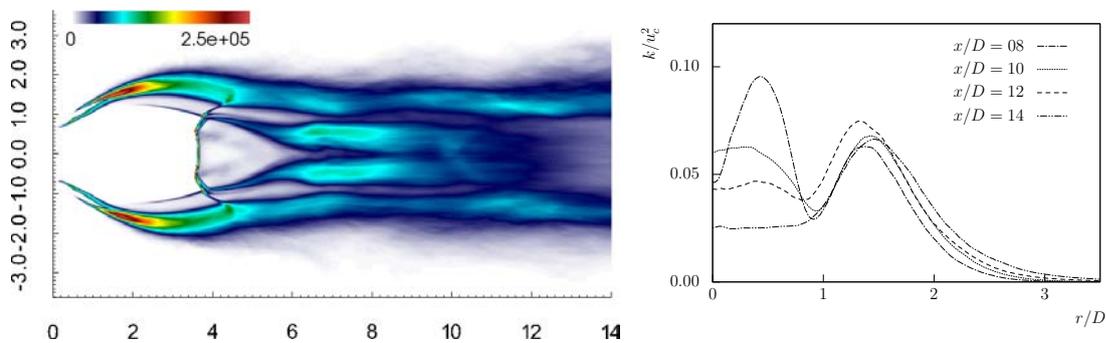


FIGURE 6.26 – Visualisation du champ de l'énergie cinétique turbulente k ($m^2.s^{-2}$) et des profils radiaux de k normalisés.

6.4.4 Etude de l'auto-allumage

Nous allons maintenant nous intéresser à la combustion du jet et plus particulièrement à l'auto-allumage de celui-ci. La figure 6.27(a) montre l'évolution du dégagement de chaleur. Nous constatons que la partie du centrale du jet est le lieu privilégié de la réaction chimique avec un taux de dégagement de chaleur maximum dans cette partie (principalement à l'intérieur de la zone délimitée par le rayon $r/D = 1$). La combustion

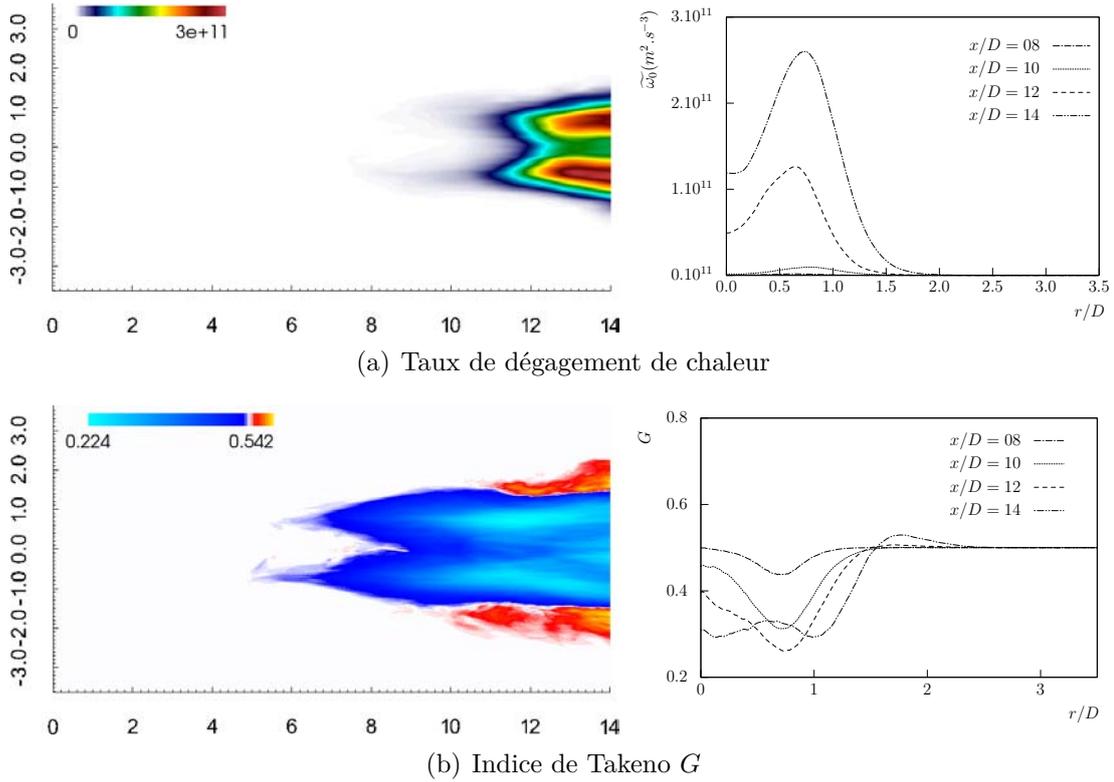


FIGURE 6.27 – Champ et profils radiaux du dégagement de chaleur ω_0 ($m^2.s^{-3}$) (a) et champ et profils radiaux de l'indice de Takeno G (b).

ne se développe pas juste en aval du disque de Mach. Elle apparaît très légèrement à partir de $x/D = 8$ et devient vraiment importante à partir de $x/D = 12$.

La figure 6.27(b) propose une cartographie des zones plus ou moins prémélangées à l'aide du critère de Takeno G dont on visualise l'évolution moyenne. La partie centrale du jet montre une zone largement dominée par des gradients opposés correspondant à des régions plutôt non prémélangées. En revanche, nous observons également des secteurs possédant des gradients alignés synonyme de zones plutôt prémélangées (entre $r/D = 1.5$ et $r/D = 2.1$). La présence de cette dernière diffère radicalement de l'observation faite pour le cas du jet pur d'hydrogène. Dans ce dernier, aucune région prémélangée n'avait été observée.

La figure 6.28 présente deux champs de la fraction massique du radical OH superposée à un schlieren de la masse volumique. Ce radical est largement utilisé pour identifier les fronts de flamme lors de la combustion de mélanges réactifs. Dans le cas présent, nous remarquons une première production de radical en aval du choc réfléchi. Cette zone est une région de température très élevée dans laquelle co-existent de l'oxygène pur et de la vapeur d'eau. On remarque que les étapes (8f) et (4f)-(6f) peuvent conduire à l'apparition de radicaux OH en l'absence d'hydrogène pur. Ce qui est une caractéristique du fait

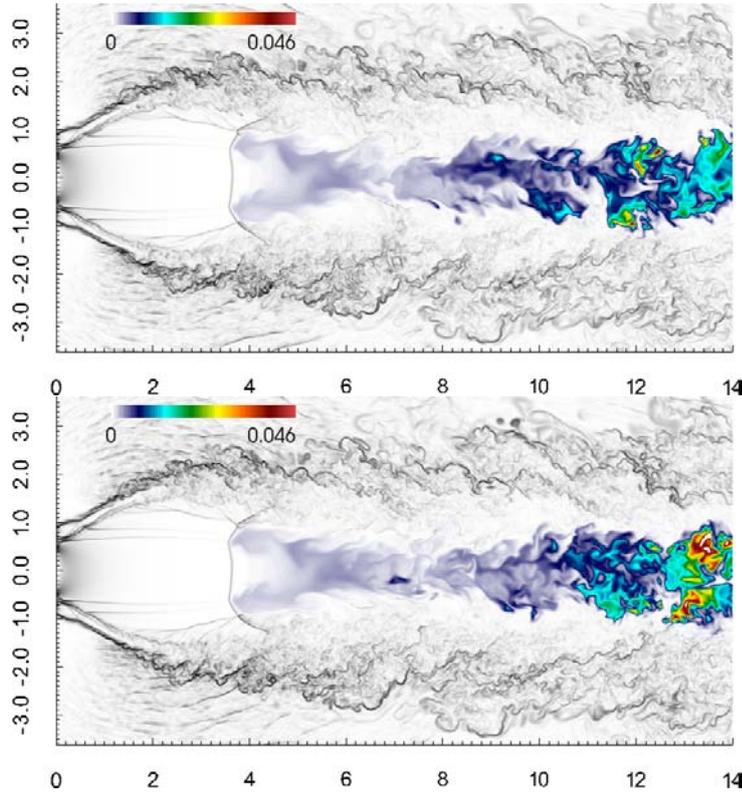


FIGURE 6.28 – Champs instantanés de la fraction massique du radical OH superposés à une visualisation pseudo-Schlieren.

d'employer une chimie complexe. Néanmoins, cette production reste très limitée et la véritable production de radicaux se trouve bien en aval de cette région à la limite de la sortie du domaine. On note également une influence très faible des ondes de compressions sur la réaction chimique. La compressibilité ne joue pas un rôle essentiel dans la chimie de ce jet. L'écoulement est naturellement influencé par les ondes de choc mais ce sont bien les processus d'emballage thermique qui assurent l'essentiel de l'auto-allumage.

La figure 6.29 représente les moyennes conditionnelles de la température et du taux de dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange. Ces valeurs sont déterminées pour un rayon inférieur à 1.5 diamètre. On remarque l'élévation de la température pour les faibles valeurs de ξ lorsque l'on s'éloigne de l'injection. On obtient également la fraction de mélange ayant le dégagement de chaleur le plus important : $\xi \approx 0.05$, cette valeur serait à rapprocher de la valeur ξ_{MR} pour ces conditions. Dans les conditions considérées, la valeur stoechiométrique de la fraction de mélange est d'environ 0.09.

La figure 6.30 regroupe également différents profils moyens conditionnés par la fraction de mélange. Ceux-ci concernent les fractions massiques de l'hydrogène, du radical OH et de la vapeur d'eau. Le profil conditionné de l'hydrogène met en évidence les régions préférentielles de consommation de l'hydrogène dans l'espace de la fraction de mélange. Ainsi, il est exclusivement transformé pour $\xi < 0.1$. La fraction massique du radical OH

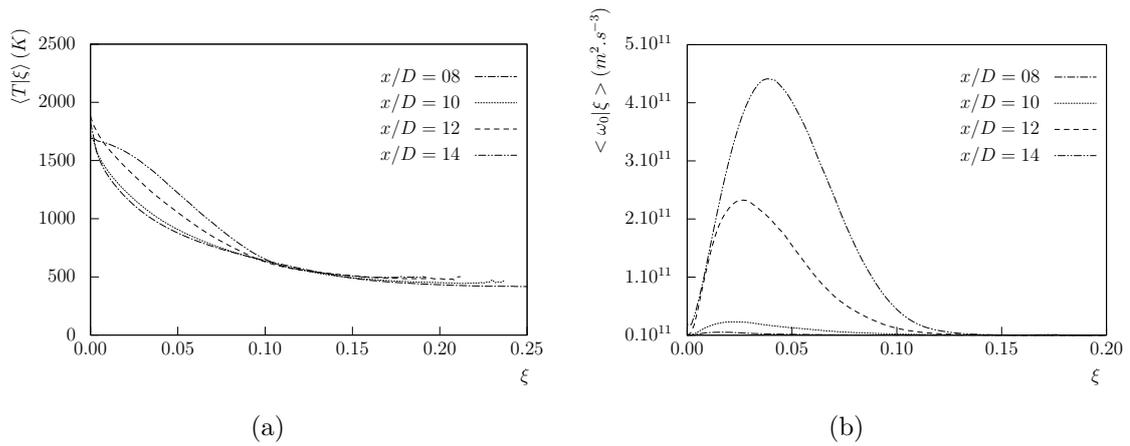


FIGURE 6.29 – Moyenne conditionnelle de la température et du taux de dégagement de chaleur.

présente un pic au niveau de $\xi = 0.02$.

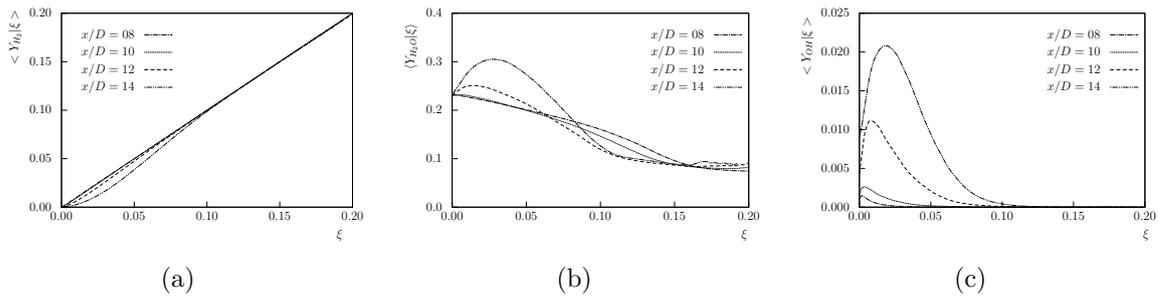


FIGURE 6.30 – Fractions massiques moyennes conditionnées par la fraction de mélange pour les espèces réactives H_2 , H_2O et OH .

Étude de la dynamique de l'auto-allumage

La dynamique de l'auto-allumage est analysée à l'aide de *scatterplots* obtenus pour les abscisses $x/D = 8$, $x/D = 10$, $x/D = 12$ et $x/D = 14$ et pour les rayons présentant le taux de dégagement de chaleur maximum. La première série de *scatterplots* (figure 6.31) montre les valeurs prises par la température aux différentes abscisses du jet. On visualise bien l'effet du dégagement de chaleur pour les abscisses au delà de $x/D = 12$. L'effet le plus important se produit à l'abscisse $x/D = 14$ avec un échauffement de l'écoulement le plus fort correspondant à la zone de stabilisation de la combustion. Dans un deuxième temps, la figure 6.32 permet d'examiner la fraction massique de vapeur d'eau. La production de vapeur d'eau par la réaction chimique commence à l'abscisse $x/D = 12$ et se poursuit au moins jusqu'à $x/D = 14$. Ensuite, nous examinons la fraction massique du radical OH (figure 6.33). Les observations sont les mêmes que précédemment. L'absence de

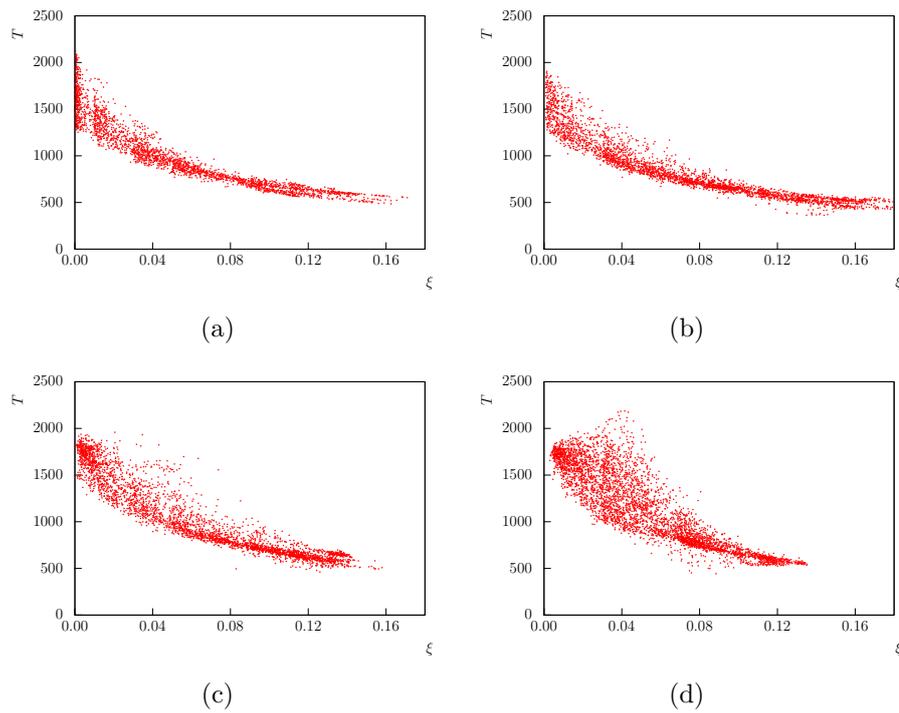


FIGURE 6.31 – *Scatterplots* de la température obtenus en quatre abscisses du jet. La figure (a) correspond à l'abscisse $x/D = 8$, (b) correspond à l'abscisse $x/D = 10$, (c) correspond à l'abscisse $x/D = 12$ et (d) correspond à l'abscisse $x/D = 14$.

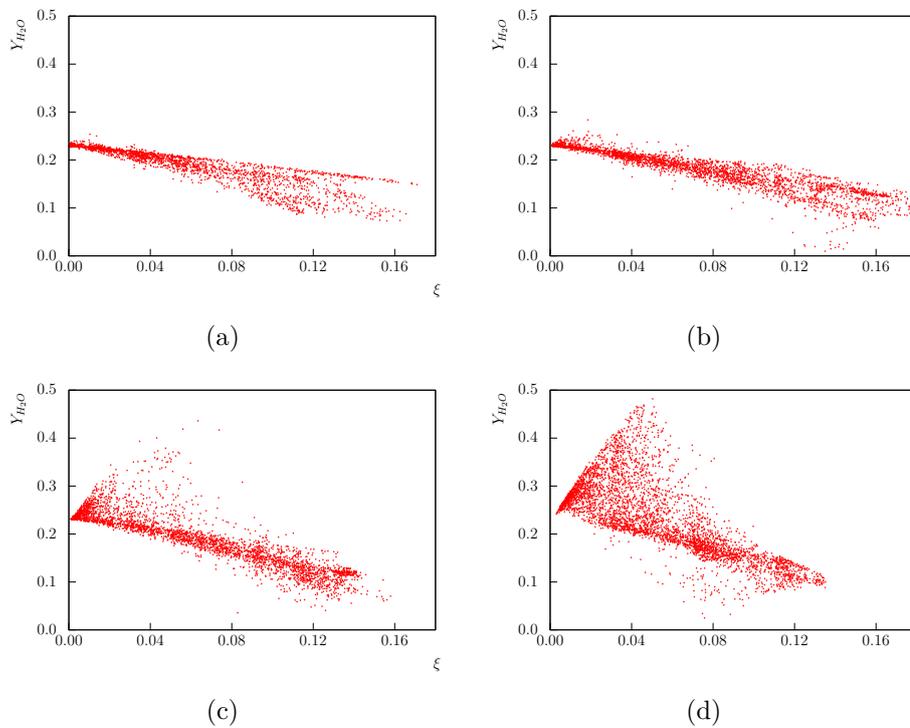


FIGURE 6.32 – *Scatterplots* de la fraction massique de vapeur d'eau obtenus en quatre abscisses du jet.

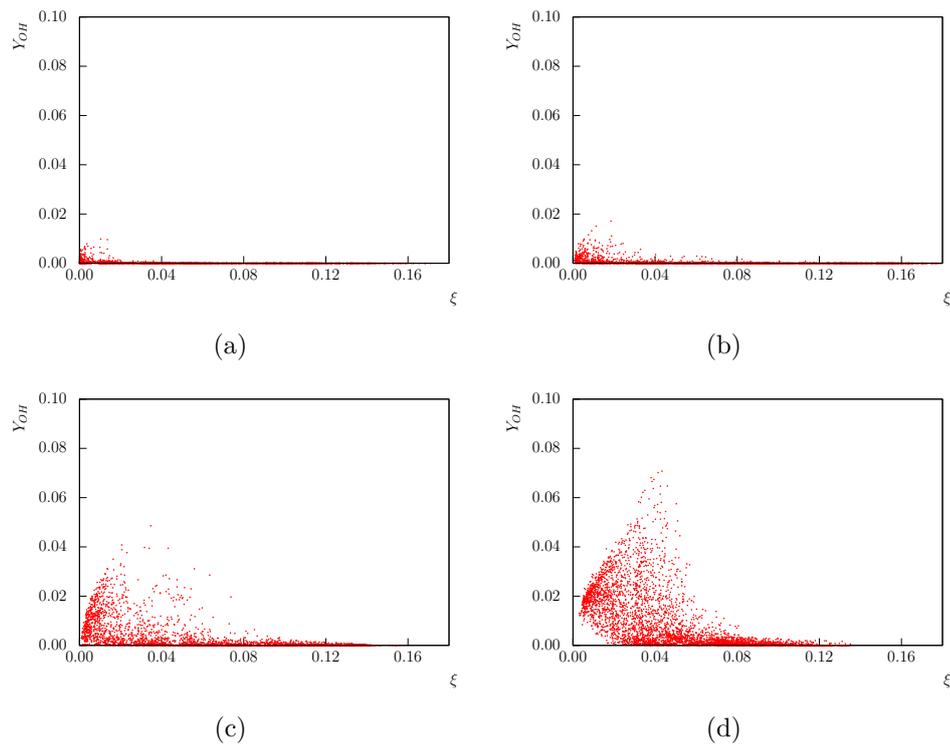


FIGURE 6.33 – *Scatterplots* de la fraction massique du radical OH obtenus en quatre abscisses du jet.

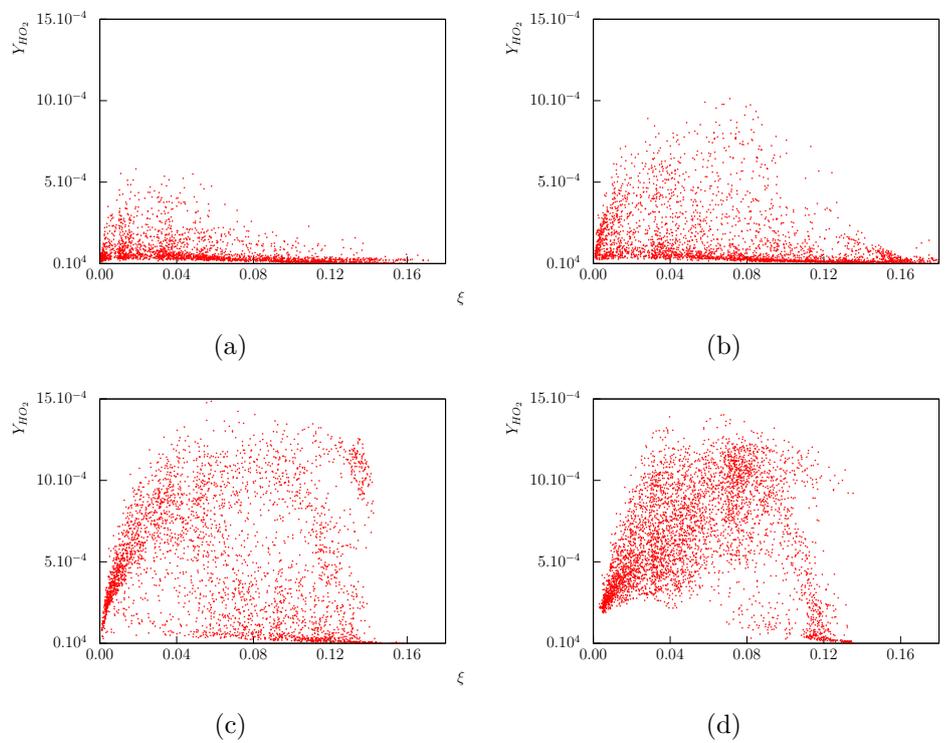


FIGURE 6.34 – *Scatterplots* de la fraction massique du radical HO_2 obtenus en quatre abscisses du jet.

dégagement de chaleur pour les abscisses inférieures à $x/D = 12$ est directement corrélée à l'absence de radicaux OH dans cette région. Inversement, le dégagement de chaleur est maximum dans les zones où ce radical est très présent. Finalement, la figure 6.34 affiche la fraction massique du radical HO_2 . Contrairement aux quantités évoquées précédemment, ce radical est largement existant dès les premières abscisses mentionnées ici. Cette constatation souligne le caractère précurseur du radical HO_2 dans la dynamique de la réaction chimique.

Étude de la réactivité du milieu

La réactivité λ a été introduite par Boivin et al. [153]. Elle représente la valeur propre réelle et positive, entre trois, caractérisant la dynamique d'un mécanisme cinétique chimique réduit minimal pour décrire l'évolution du système $H_2 - O_2$. L'étude de ce système chimique réduit met en évidence le paramètre λ associé à la consommation des radicaux H , O et OH . Ce paramètre atteint un maximum au voisinage de la stoechiométrie.

Son expression est donnée par la relation suivante :

$$\lambda = 2k_{1f}C_{O_2}\Lambda \quad (6.4)$$

avec

$$\Lambda = \frac{(1 + 2B)^{1/2} - 1}{B} \quad (6.5)$$

et

$$B = \frac{4k_{1f}C_{O_2}(k_{1f}C_{O_2} + k_{2f}C_{H_2} + k_{3f}C_{H_2})}{k_{2f}k_{3f}C_{H_2}^2} \quad (6.6)$$

L'apparition de l'auto-allumage peut être repérée par le taux de production du radical HO_2 . En effet, le radical HO_2 est considéré comme un excellent traceur de l'auto-allumage des mélanges contenant de l'hydrogène. L'étude du paramètre λ s'effectue dans les zones où l'auto-allumage est présent. Pour cela, nous traçons un second paramètre α ($\text{Prod}HO_2 - \text{Dest}HO_2 / \text{Prod}HO_2$) identifiant les zones d'étude basé sur la production de radical HO_2 . La figure 6.35 montre deux champs du paramètre α .

La figure 6.36 expose la réactivité dans les zones délimitées par $0.05 < \alpha < 0.95$. Nous avons superposé aux champs de λ un schlieren basé sur la masse volumique pour visualiser correctement l'écoulement. Nous constatons que les valeurs les plus élevées de la réactivité sont corrélées avec la zone où la stabilisation de la combustion s'opère ce qui confirme une nouvelle fois la bonne représentativité de ce critère et la bonne restitution de la dynamique de l'auto-allumage par ce schéma réduit à trois étapes [153]. La perspective

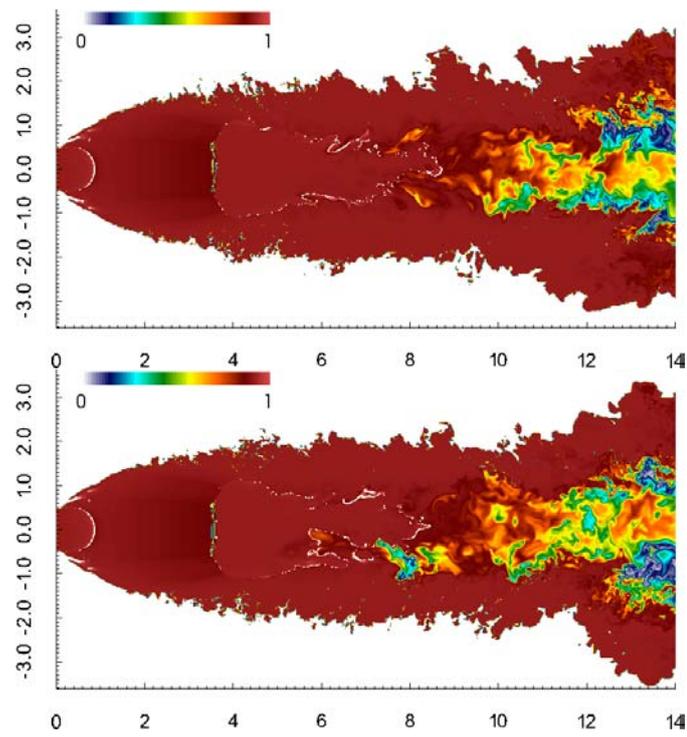


FIGURE 6.35 – Visualisation en deux instants distincts du critère α de détection des zones de production du radical HO_2 .

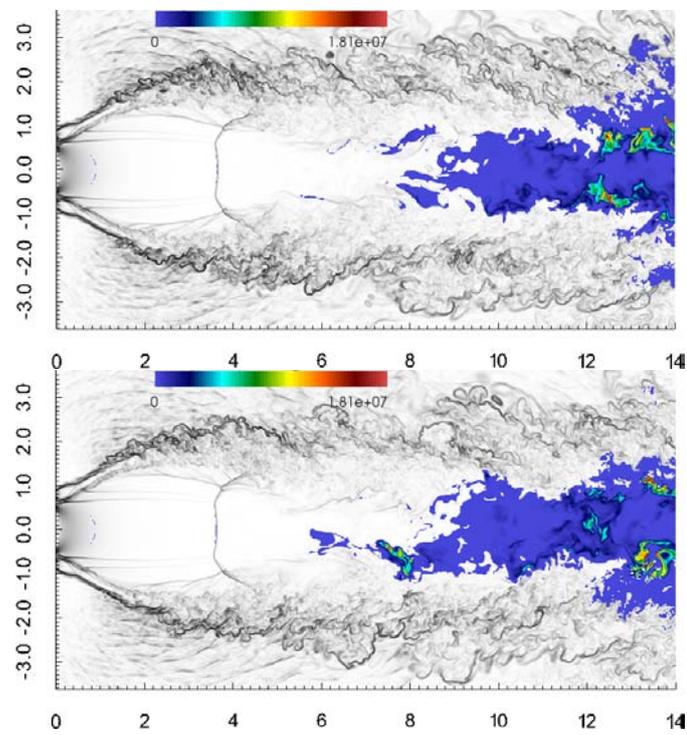


FIGURE 6.36 – Visualisation de la réactivité λ en deux instants distincts dans les zones délimitées par $0.05 < \alpha < 0.95$.

de simulation sans schéma cinétique complet mais avec un schéma réduit de ce type est donc aussi à prendre en compte.

6.5 Conclusion

Ce chapitre a présenté deux simulations réactives qui caractérisent l'allumage dans des situations non pré-mélangées. La probabilité d'auto-allumage du premier a été déterminée. Celle-ci s'est révélée très faible. Un noyau d'allumage a donc été ajouté afin d'observer le maintien et la stabilisation d'une zone réactive dans cet écoulement. Ce jet n'a pas présenté de telle zone et nous avons fait face à l'extinction totale de la réaction après l'arrêt du noyau d'allumage. Le second jet a permis de visualiser et caractériser le phénomène d'auto-allumage dans des conditions représentatives de celles rencontrées dans un allumeur central de moteur fusée. Avec l'emploi d'une cinétique chimique complexe, l'étude des radicaux a pu être effectuée avec la confirmation du rôle précurseur du radical HO_2 dans la dynamique de l'auto-allumage. L'analyse jointe de l'index de Takeno et de la teneur en radical OH dans la zone de stabilisation confirme la prédominance d'un mode de combustion non-prémélangé.

Chapitre 7

Conclusion et perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse sont consacrés à la simulation numérique directe de jets fortement sous détendus. Ces jets ont été abordés dans des cas inertes mais également réactifs. Les interactions entre la turbulence, la compressibilité et la réaction chimique ont été analysées ainsi que leur influence sur le mélange et l'auto-inflammation de ces écoulements. Sur le plan de la modélisation numérique, les équations résolues sont celles de Navier-Stokes en formulation compressible, multi-espèces, réactives, munie d'une loi des gaz parfaits. Les coefficients de transport des différentes espèces sont déterminés soit par l'approche de Hirschfelder et Curtiss [58] soit par l'approche décrite par Ern et Giovangigli [55]. Le travail de développement numérique, nécessaire pour mener à bien ces études, a notamment consisté à l'extension des conditions aux limites dans le code de calcul CREAMS et à une amplification des capacités du programme de post-traitement des données POSTCREAMS. Le fonctionnement et la précision de l'outil de simulation ont été contrôlés à l'aide d'une série de tests élémentaires de référence. Plusieurs simulations ont ensuite été réalisées. Un premier jet fortement sous détendu d'air a permis d'acquérir un premier support avant d'obtenir une base de données concernant ce type de jet mettant en jeu de l'hydrogène pur. Finalement, deux cas réactifs, représentatifs du percement d'un réservoir haute pression et de la phase d'allumage d'un moteur fusée, ont été exécutés.

La simulation du jet fortement sous détendu d'air permet la construction d'une première base de données de référence inerte. L'organisation globale de ce type de d'écoulement a été étudiée avec notamment la description du champ proche présentant une structure compressible particulièrement complexe ainsi que la croissance des instabilités et le développement de la turbulence. Le mélange scalaire à petite échelle a fait l'objet d'une attention particulière avec la validation d'une fermeture simplifiée du taux moyen de dissipation scalaire dans notre configuration puis l'observation du terme d'interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire et enfin les contributions à masse volumique

variable.

Le calcul d'un jet fortement sous détendu d'hydrogène contient en plus un aspect applicatif dans la sécurité industrielle dans la mesure où il est représentatif d'une fuite accidentelle d'une canalisation ou d'un réservoir à haute pression. Le premier cas inerte permet principalement de suivre le mélange et la dispersion de l'hydrogène dans une atmosphère au repos avec l'approfondissement de la dynamique du mélange scalaire. Il met également en évidence les effets de masse volumique variable dus aux effets de compressibilité et ceux résultant des variations de composition. L'influence du changement de fluide injecté en comparant le jet d'air et celui d'hydrogène a aussi été abordé. Ensuite, le modèle *IEM* a été examiné dans cette configuration compressible montrant une constante de proportionnalité entre le temps caractéristique de mélange du modèle et un temps de mélange dépendant des grandeurs déterminées lors du calcul en bon accord avec celle utilisée dans la littérature. Enfin, les effets de diffusion différentielle ont été observés. La prise en compte du transport détaillé (viscosité de volume, effets Soret et Dufour) ne semble pas nécessaire dans ce cas particulier.

La dernière partie traite des écoulements réactifs. L'analyse de l'auto-inflammation dans le sillage de la structure compressible est considérée au travers de deux configurations caractéristiques d'applications industrielles (le percement d'une conduite et l'allumage d'un moteur fusée). Dans la première, l'absence de zone où la combustion se maintient et se stabilise est une information importante concernant la sécurité industrielle. Néanmoins, la taille réduite du domaine de calcul ne nous permet de conclure catégoriquement que ce type de jet accidentel ne peut pas s'auto-enflammer. La seconde configuration a permis de caractériser les processus d'auto-allumage dans un allumeur de moteur fusée. Celle-ci a confirmé les caractéristiques d'allumage des mélanges d'hydrogène avec notamment le rôle précurseur dans le développement de la combustion du radical HO_2 ainsi que la forte présence du radical OH dans la zone de stabilisation de la réaction chimique. L'étude de la réactivité a montré une bonne représentativité de ce critère avec la perspective de pouvoir, dans certaines conditions, utiliser un schéma cinétique réduit à la place d'un schéma plus détaillé.

Les perspectives et les futurs travaux liés aux simulations de ce type de jets fortement sous détendus sont étroitement associés au futur de la filière hydrogène. Le transport de l'hydrogène pour les applications terrestres nécessite un stockage gazeux à très haute pression. La détermination de l'inflammabilité et la cartographie de la dispersion de l'hydrogène à partir d'un jet issu de tel réservoir est d'une importance capitale pour que le grand public accepte cette nouvelle énergie. Un calcul avec un domaine au minimum deux fois long serait intéressant dans l'optique d'étudier le mélange et l'allumage dans le champ plus lointain du jet. Les bases de données générées pourraient également être réutilisées pour examiner plus en détail le développement des instabilités de type Taylor-Görtler le

long de la périphérie du jet pour les cas air et hydrogène pur et ainsi caractériser leur croissance.

Annexe A

Approximation de Burke et Schumann

Nous rappelons ici l'approximation de Burke et Schumann [10] concernant l'évolution de la composition d'un mélange sous l'effet de la réaction chimique. Cette démarche repose sur l'hypothèse que la réaction chimique est infiniment rapide et irréversible. Dans ces conditions, dès lors que l'oxydant est en présence de combustible, la réaction chimique se produit jusqu'à consommation totale de l'une des deux espèces. Il est alors possible de suivre l'évolution de la composition du milieu en fonction de la fraction de mélange. La figure A.1 présente les domaines accessibles aux fractions massique de l'hydrogène A.1(a) et de l'oxygène A.1(b) en fonction de la fraction de mélange.

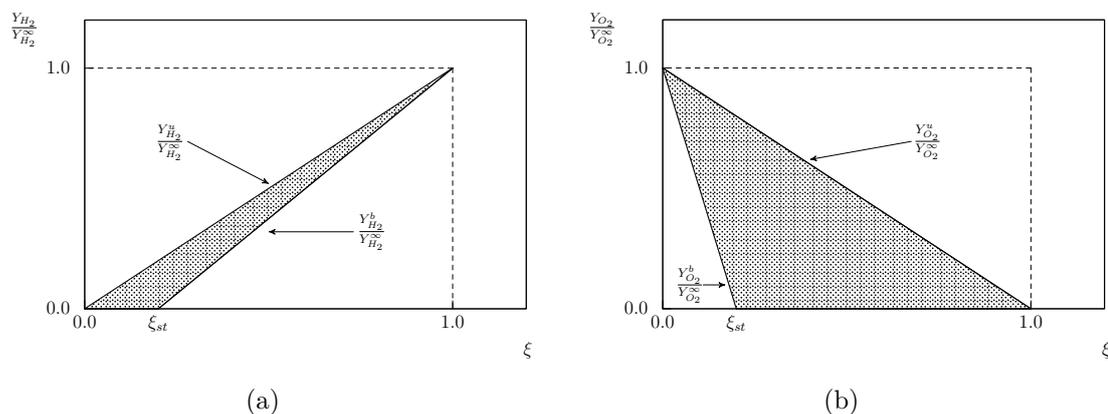


FIGURE A.1 – Variation de la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} (a) et d'oxygène Y_{O_2} (b) en fonction de la fraction de mélange avec l'approximation de Burke et Schumann [10].

Les droites signalées par $Y_{H_2}^u/Y_{H_2}^\infty$ et $Y_{O_2}^u/Y_{O_2}^\infty$ forment les droites de mélange pur. Les droites signalées par $Y_{H_2}^b/Y_{H_2}^\infty$ et $Y_{O_2}^b/Y_{O_2}^\infty$ représentent la trajectoire de Burke et Schumann avec les fractions massiques d'hydrogène et d'oxygène après la réaction chimique en fonction de la fraction de mélange. La trajectoire de Burke et Schumann est complètement

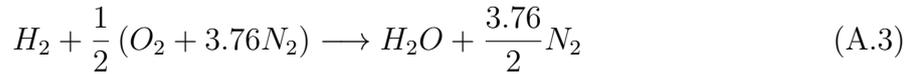
définie par la connaissance de la valeur de la fraction de mélange stoechiométrique ξ_{st} . Les équations des droites de mélange sont :

$$\begin{aligned}\frac{Y_{H_2}^u}{Y_{H_2}^\infty} &= \xi \\ \frac{Y_{O_2}^u}{Y_{O_2}^\infty} &= 1 - \xi \\ \frac{Y_{N_2}^u}{Y_{N_2}^\infty} &= 1 - \xi\end{aligned}\tag{A.1}$$

Les équations des droites de la trajectoire Burke et Schumann sont :

$$\begin{aligned}\frac{Y_{H_2}^b}{Y_{H_2}^\infty} &= \begin{cases} 0 & \text{si } \xi \leq \xi_{st} \\ \frac{\xi - \xi_{st}}{1 - \xi_{st}} & \text{si } \xi \geq \xi_{st} \end{cases} \\ \frac{Y_{O_2}^b}{Y_{O_2}^\infty} &= \begin{cases} 1 - \frac{\xi}{\xi_{st}} & \text{si } \xi \leq \xi_{st} \\ 0 & \text{si } \xi \geq \xi_{st} \end{cases} \\ \frac{Y_{N_2}^b}{Y_{N_2}^\infty} &= 1 - \xi\end{aligned}\tag{A.2}$$

Détermination de la fraction de mélange stoechiométrique Nous nous plaçons dans le cas de la combustion de l'hydrogène dans l'air.



On introduit la fraction de mélange ξ :

$$\xi = \frac{\phi \frac{Y_{H_2}}{Y_{H_2}^\infty} - \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2}^\infty} + 1}{\phi + 1}\tag{A.4}$$

avec $\phi = r_{st} \cdot \frac{Y_{H_2}^\infty}{Y_{O_2}^\infty}$. r_{st} correspond au rapport stoechiométrique massique. Ici,

$$r_{st} = \frac{1 M_{O_2}}{2 M_{H_2}} = 8\tag{A.5}$$

Les fractions massiques de O_2 et de N_2 présentent dans l'air correspondent à :

$$Y_{O_2}^\infty = \frac{1 \times M_{O_2}}{1 \times M_{O_2} + 3.76 \times M_{N_2}} = 0.233\tag{A.6}$$

$$Y_{N_2}^\infty = \frac{3.76 \times M_{N_2}}{1 \times M_{O_2} + 3.76 \times M_{N_2}} = 0.767\tag{A.7}$$

La fraction de mélange stoechiométrique est donnée par la relation :

$$\xi_{st} = \frac{1}{1 + \phi} = \frac{1}{1 + r_{st} \cdot \frac{Y_{H_2}^\infty}{Y_{O_2}^\infty}} = 0.028 \quad (\text{A.8})$$

Annexe B

A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier-Stokes solver



Computers & Fluids

journal homepage: www.elsevier.com/locate/complfluid



A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier–Stokes solvers



Pedro José Martínez Ferrer, Romain Buttay, Guillaume Lehnasch, Arnaud Mura*

Institut Pprime UPR 3346 CNRS, ISAE – ENSMA and University of Poitiers, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 8 April 2013
Received in revised form 1 October 2013
Accepted 10 October 2013
Available online 30 October 2013

Keywords:
Compressible flows
Combustion
Detonation
High-order schemes
High-resolution methods
Direct numerical simulation
Under-expanded jet flames

ABSTRACT

The present manuscript reports a numerical verification study based on a series of tests that allows to evaluate the numerical performance of a compressible reactive multicomponent Navier–Stokes solver. The verification procedure is applied to a density-based finite difference numerical scheme suited to compressible reactive flows representative of either combustion in high speed flows or detonation. The numerical algorithm is based on a third-order accurate Total Variation Diminishing (TVD) Runge Kutta time integration scheme. It employs a seventh-order accurate Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) scheme to discretize the non-linear advective terms while an eighth-order accurate centered finite difference scheme is retained for the molecular viscous and diffusive terms. These molecular contributions are evaluated with the library EGLIB that accounts for detailed multicomponent transport including Soret and Dufour effects. The developed numerical solver thus offers an interesting combination of existing methods suited to the present purpose of studying combustion in high speed flows and/or detonations. The numerical solver is verified by considering a complete procedure that gathers eight elementary verification subsets including, among others, the classical Sod's shock tube problem, the ignition sequence of a multi-species mixture in a shock tube, the unsteady diffusion of a smoothed concentration profile and a one-dimensional laminar premixed flame. Such verification analyses are seldom reported in the literature but constitute an important part of computational research activities. It is presently completed with the application of the verified finite difference scheme to the numerical simulation of (i) shock (reactive) mixing layer interaction and (ii) combustion ignition downstream of a highly under-expanded jet. The corresponding results shed some light onto the robustness (stability) and performance of the numerical scheme, and also provide some very valuable insights onto the complex physics that prevails in the development of chemical reactions in such situations, which are considered as representative of the discharge or accidental release of high pressure flammable mixtures into the atmosphere.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The direct numerical simulation (DNS) and large-eddy simulation (LES) of compressible turbulent reactive flows require the use of highly accurate numerical schemes, which must be capable of capturing shock waves, describing multicomponent mixtures as well as detailed chemical kinetics, and resolving a broad range of length scales. The final objective associated with the present development of such a numerical scheme is to perform numerical simulations of combustion in supersonic flows, which is fundamentally different from combustion in the subsonic regime. Ignition and flame stabilization processes in supersonic combustion

devices may indeed differ significantly from those observed in the subsonic regime [1–3] and their description raise some specific issues [4,5].

Combustion in supersonic flows covers a broad range of potential applications. For instance, the success of future hypersonic propulsion systems will be largely dependent on efficient injection, mixing and combustion processes inside the supersonic combustion chamber [3,6]. Mixing and combustion efficiency in the supersonic flow regime is of great concern since the growth and entrainment rates of compressible shear layers are known to be much smaller than those of incompressible flows at the same velocity and density ratios. Other practical questions related to combustion in high speed flows concern for instance explosion hazards. A wide variety of process gases that are manufactured and used in the chemical and power industries are stored and transported at high pressure levels. One such process gas attracting commercial interest over the years is syngas, a mixture containing

* Corresponding author.
E-mail addresses: pedro.martinezferrer@ensma.fr (P.J. Martínez Ferrer), romain-buttay@ensma.fr (R. Buttay), guillaume.lehnasch@ensma.fr (G. Lehnasch), arnaud-mura@ensma.fr (A. Mura).

Computer & Fluids (2014). <http://www.journals.elsevier.com/computers-and-fluids/>
DOI:10.1016/j.compfluid.2013.10.014

Annexe C

Analysis of small-scale scalar mixing processes in highly under-expanded jets

Analysis of small-scale scalar mixing processes in highly under-expanded jets

Romain Buttay · Guillaume Lehnasch · Arnaud Mura

Abstract In the present study, we numerically investigate turbulent scalar mixing taking place downstream of highly underexpanded jets. The focus is placed on two inter-related issues: (i) the closure of the mean scalar dissipation rate (SDR) and (ii) the turbulence-scalar interaction term. It is indeed commonly admitted that the former, i.e., the SDR, which is defined as the product of the scalar diffusivity with the squared scalar gradient, provides a good measure of the mixing efficiency. In turbulent flows, the mean (turbulent) SDR requires a specific closure to be settled. It is generally obtained within the approximation of a linear relaxation of scalar fluctuations or linear relaxation model (LRM). We will first evaluate herein the performance of this widely-used closure. The analysis is further developed thanks to the consideration of the mean SDR transport equation which shows that, in gaseous conditions, the SDR is mainly driven by two terms: (i) a dissipation contribution and (ii) the third-order correlation between the velocity gradient tensor and small-scale scalar anisotropy tensor. The scalar mixing efficiency thus appears to be controlled by the later quantity, which is often denoted as the turbulence-scalar interaction (TSI) term. It can be shown that only the symmetric part (rate of strain) of the velocity gradient tensor contributes to this term; the anti-symmetric part indeed does modify the orientation of the scalar gradient but not its magnitude. It is therefore classical to analyze this contribution in the eigenframe of the rate of strain tensor. Such analyses show that, in homogeneous isotropic turbulence (HIT), the scalar gradient tends to align with the most compressive direction,

thus leading to SDR production. However, the present conditions, which are far from homogeneity and involve strong density variations may modify this classical picture. The present study analyzes this possible influence.

Keywords Underexpanded jets · Compressible flows · Scalar mixing · Scalar dissipation rate

List of symbols and acronyms

C_K	: Kolmogorov constant ($C_K = 1.4$)
C_S	: Smagorinsky constant ($C_S = 0.1$)
D	: injection diameter
\mathcal{D}	: inlet tracer molecular diffusivity
$\mathcal{D}_{\alpha\beta}$: diffusion matrix
$E(\kappa)$: energy spectrum function
e_i	: principal direction
e_t	: total energy
F_2	: second-order velocity structure function
g^{ξ}	: mixture fraction (tracer) gradient
g^{ξ}	: norm of the tracer gradient
h_{α}	: enthalpy of the α th species
IQ_{η}	: quality index
\mathcal{J}_i	: i -component of the heat flux
k	: turbulence kinetic energy
m	: parameter in the IQ_{η} definition
Ma	: Mach number
\mathbf{n}_{ξ}	: scalar gradient unit vector
N_{sp}	: total number of species
N_{ξ}	: scalar dissipation rate (SDR)
N_{x_i}	: number of nodes along direction i
p	: pressure
PDF	: probability density function
$\tilde{P}(\xi)$: Favre-averaged PDF of ξ
\mathbf{q}	: conservative vector
r	: radial coordinate ($r = \sqrt{x_2^2 + x_3^2}$)
\mathcal{R}	: universal gas constant

Correspondence to Arnaud Mura (arnaud.mura@isae-ensma.fr), Institut Pprime UPR 3346 CNRS, ISAE-ENSMA Poitiers, Téléport 2, 1 Avenue Clément Ader, BP 40109, 86961 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France.

Bibliographie

- [1] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *Int. J. Chem. Kin.*, 36 :603–622, 2004.
- [2] G. Lehnasch. *Contribution à l'étude numérique des jets supersoniques sous-détendus*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2005.
- [3] A.L. Addy. Effects of axisymmetric sonic nozzle geometry on Mach disk characteristics. *AIAA Journal*, 19 :121–122, 1981.
- [4] H. Ashkenas and F.S. Sherman. Structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnels. *Rarefied Gas Dynamics*, 2 :84–105, 1966.
- [5] J. Dubois, M. Amielh, F. Anselmet, and O. Gentilhomme. Investigation of axisymmetric underexpanded air and helium jets by background oriented schlieren. *Journal of visualization*, 12(3) :192–192, 2009.
- [6] E.S. Love, C.E. Grigsby, and L.P. Lee. Experimental and theoretical studies of axisymmetric free jets. Technical report, Langley Research Center, 1959.
- [7] S. Crist, D.R. Glass, and P.M. Sherman. Study of the highly underexpanded sonic jet. *AIAA Journal*, 4(1) :68–71, 1966.
- [8] G.A. Sod. Survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 27 :1–31, 1978.
- [9] F.L. Dryer, M. Chaos, Z. Zhao, J.N. Stein, J.Y. Alpert, and C.J. Homer. Spontaneous ignition of pressurized releases of hydrogen and natural gas into air. *Combustion science and technology*, 179(4) :663–694, 2007.
- [10] S.P. Burke and T.E.W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial & Engineering Chemistry*, 20(10) :998–1004, 1928.

- [11] N.J. Dam, M. Rodenburg, R.A.L Tolboom, G.G.M Stoffels, P.M. Huisman-Kleinherenbrink, and J.J. Ter Meulen. Imaging of an underexpanded nozzle flow by UV Laser rayleigh scattering. *Experiments in fluids*, 24(2) :93–101, 1998.
- [12] A.V. Antsupov. Properties of underexpanded and overexpanded supersonic gas jets. *Soviet Physics and Technical Physics*, 19 (2) :234–238, 1974.
- [13] G. Buzyna, A. Krothapalli, and L. Lourenco. Streamwise vortices in an underexpanded axisymmetric jet. *Physics of Fluids*, 3 :1848–1851, 1991.
- [14] M. Samimy, S.A. Arnette, and G.S. Elliot. On streamwise vortices in high Reynolds number supersonic axisymmetric jets. *Physics of Fluids A*, 1 :187–202, 1993.
- [15] A. Dauplain, B. Cuenot, and L.Y.M. Gicquel. Large eddy simulation of stable supersonic jet impinging on flat plate. *AIAA Journal*, 48(10) :2325–2338, 2010.
- [16] V.I. Zapryagaev and A.V. Solotchin. Three dimensional structure of flow in a supersonic underexpanded jet. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 4 :42–47, 1992.
- [17] V.I. Zapryagaev and N.G. Bobrikov. Investigation of the streamwise vortices in a shear layer of the initial region of the supersonic underexpanded jet. *Turbulence in high speed compressible flows*, pages 63–72, 1999.
- [18] S.A. Novopashin and A.L. Perepelkin. Axial symmetry loss of a supersonic preturbulent jet. *Physics Letters A*, 135(4) :290–293, 1989.
- [19] C.J. King, A. Krothapalli, and P.J. Strykowski. Streamwise vorticity generation in supersonic jets with minimal thrust loss. *AIAA Paper*, 94-0661, 1994.
- [20] A. Krothapalli, P.J. Strykowski, and C.J. King. Origin of streamwise vortices in supersonic jets. *AIAA Journal*, 36(5) :869–872, 1998.
- [21] P.G. Drazin and W.H. Reid. *Hydrodynamic Stability*. Cambridge university press, 2004.
- [22] V. Vuorinen, J. Yu, S. Tirunagari, O. Kaario, M. Larmi, C. Duwig, and B.J. Boersma. Large-eddy simulation of highly underexpanded transient gas jets. *Physics of Fluids*, 25(1) :016101–1–016101–22, 2013.
- [23] A.N. Kolmogorov. Local turbulence structure in incompressible viscous fluid at very high Reynolds numbers. *Dokl. AN SSSR*, 30 :299–303, 1941.

- [24] G.R. Newman, B.E. Launder, and J.L. Lumley. Modelling the behaviour of homogeneous scalar turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 111 :217–232, 1981.
- [25] W.P. Jones and P. Musonge. Closure of the reynolds stress and scalar flux equations. *Physics of Fluids*, 31(12) :3589–3604, 1988.
- [26] T. Mantel and R. Borghi. A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flame*, 96(4) :443–457, 1994.
- [27] A. Mura and R. Borghi. Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion. *Combustion and flame*, 133(1) :193–196, 2003.
- [28] G.K. Batchelor. Small-scale variation of convected quantities like temperature in a turbulent field. part 1 general discussion and the case of small conductivity. *Journal of Fluid Mechanics.*, 5 :113, 1959.
- [29] R.W. Bilger. Turbulent flows with nonpremixed reactants. In *Turbulent reacting flows*, pages 65–113. Springer, 1980.
- [30] F. Anselmet, H. Djeridi, and L. Fulachier. Joint statistics of a passive scalar and its dissipation in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 280 :173–197, 1994.
- [31] K.R. Sreenivasan. The passive scalar spectrum and the Obukhov-Corrsin spectrum. *Phys. Fluids*, 8 :189–196, 1996.
- [32] Z. Warhaft. Passive scalar in turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 32 :203–240, 2000.
- [33] S. Corrsin. On the spectrum of isotropic temperature fluctuations in isotropic turbulence. *Journal of Applied Physics*, 22 :469–473, 1951.
- [34] A.M. Obukhov. Structure of the temperature field in turbulent flow. *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Geogr. Geofiz*, 13 :58–69, 1949.
- [35] W.T. Ashurst, A.R. Kerstein, R.M. Kerr, and C.H. Gibson. Alignment of vorticity and scalar gradient with strain rate in simulated Navier-Stokes turbulence. *Phys. Fluids*, 30 :2343, 1987.
- [36] P.E. Dimotakis. The mixing transition in turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 409 :69–98, 2000.
- [37] A. Tsinober. *An Informal Conceptual Introduction to Turbulence*, volume 92. Springer, 2009.

- [38] K. Lee, S.S. Girimaji, and J. Kerimo. Effect of compressibility on turbulent velocity gradients and small-scale structure. *Journal of Turbulence*, 10 :1–18, 2009.
- [39] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(1) :1–57, 1984.
- [40] C.K. Westbrook. Hydrogen oxidation kinetics in gaseous detonations. *Combustion Science and Technology*, 29(1-2) :67–81, 1982.
- [41] C.N. Markides. Autoignition in turbulent flows. Technical report, Cambridge University, 2003.
- [42] C.S. Yoo, R. Sankaran, and J.H. Chen. Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated coflow : flame stabilization and structure. *Journal of Fluid Mechanics*, 640 :453–481, 2009.
- [43] T.G. Kreutz and C.K. Law. Ignition in nonpremixed counterflowing hydrogen versus heated air : Computational study with skeletal and reduced chemistry. *Combustion and flame*, 114(3) :436–456, 1998.
- [44] B. Lewis and G. Von Elbe. *Combustion, flames and explosions of gases*. Elsevier, 2012.
- [45] M.G. Zabetakis. Flammability characteristics of combustible gases and vapors. Technical report, DTIC Document, 1965.
- [46] E. Mastorakos. Ignition of turbulent non-premixed flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(1) :57–97, 2009.
- [47] J. Doom and K. Mahesh. Direct numerical simulation of auto-ignition of a hydrogen vortex ring reacting with hot air. *Combustion and Flame*, 156(4) :813–825, 2009.
- [48] E. Mastorakos, T.A. Baritaud, and T.J. Poinso. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. *Combustion and Flame*, 109(1) :198–223, 1997.
- [49] T. Echekki and J.H. Chen. Direct numerical simulation of autoignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures. *Combustion and Flame*, 134(3) :169–191, 2003.
- [50] M. Barrère and A. Mestre. Stabilisation de la flamme en combustion supersonique. *La recherche aérospatiale*, 1 :1–13, 1988.
- [51] R.L. Gordon, A.R. Masri, S.B. Pope, and G.M. Goldin. A numerical study of autoignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated co-flow. *Combustion Theory and Modelling*, 11(3) :351–376, 2007.

- [52] S.S Vorontsov, V.A. Zabaikin, A.A Smogolev, and P.K. Tret'yakov. Vortex structures in combustion of hydrogen in a supersonic cocurrent air stream. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 39(2) :119–123, 2003.
- [53] P.J. Martínez Ferrer, R. Buttay, G. Lehnasch, and A. Mura. A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier-Stokes solvers. *Computers & Fluids*, 89 :88–110, 2014.
- [54] D.R. Stull and H. Prophet. *JANAF Thermochemical Tables, Second Edition*. NSRDS-NBS 37, U.S. Department of Commerce/National Bureau of Standards, 1971.
- [55] A. Ern and V. Giovangigli. Fast and accurate multicomponent transport property evaluation. *J. Comput. Physics*, 120 :105–116, 1995.
- [56] A. Ern and V. Giovangigli. Eglib : A general-purpose fortran library for multicomponent transport property evaluation. Technical report, CERMICS, 2004.
- [57] R.J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M.E. Coltrin, J.A. Miller, and H.K. Moffat. A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase multicomponent transport properties. Technical report, Sandia National Laboratories, 1996.
- [58] J.O. Hirschfelder and C.F. Curtiss. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [59] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion, Second Edition*. Edwards, 2005.
- [60] R.J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M.E. Coltrin, J.A. Miller, and H.K. Moffat. CHEMKIN-III : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. Technical report, Sandia National Laboratories, 1996.
- [61] J.A. Miller, R.E. Mitchell, M.D. Smooke, and R.J. Kee. Toward a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene : comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 19, pages 181–196, 1982.
- [62] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Chemical kinetic modelling of hydrocarbon combustion. *Prog. Energ. Combust.*, 10 :1–57, 1984.
- [63] U. Maas and J. Warnatz. Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures. *Combust. Flame*, 74, 1988.

- [64] M.A. Mueller, R.A. Yetter, and F.L. Dreyer. Flow reactor studies and kinetic modeling of the H_2/O_2 reaction. *Int. J. Chem. Kinet.*, 31 :113–125, 1999.
- [65] M.F. Shahab, G. Lehnasch, T.B. Gatski, and P. Comte. Statistical evaluation of the shock wave boundary layer interaction phenomenon. *Flow Turbul. Combust.*, 86 :369–397, 2011.
- [66] P.J. Martínez Ferrer. *Etude par simulation numérique de l'auto-allumage en écoulement turbulent cisailé supersonique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2013.
- [67] N. Crnjaric-Zic, S. Vukovic, and L. Sopta. On different flux splittings and flux functions in WENO schemes for balance laws. *J. Comput. Phys.*, 35 :1074–1092, 2005.
- [68] J. Shi, Y.T. Zhang, and C.W. Shu. Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures. *J. Comput. Phys.*, 186 :690–696, 2003.
- [69] C.W. Shu, T.A. Zang, G. Erlebacher, D. Whitaker, and S. Osher. High-order ENO schemes applied to two- and three-dimensional compressible flow. *Applied Num. Math.*, 9 :75–71, 1992.
- [70] V. A. Titarev and E. F. Toro. Finite-volume WENO schemes for three-dimensional conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 201 :238–260, 2004.
- [71] Z. Xu and C.-W. Shu. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference WENO schemes. *J. Comput. Phys.*, 205 :458–485, 2005.
- [72] S. Zhang, S. Jiang, and C.-W. Shu. Improvement of convergence to steady state solutions of Euler equations with the WENO schemes. *J. Sci. Comput.*, 47 :216–238, 2010.
- [73] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *J. Comput. Phys.*, 71 :231–303, 1987.
- [74] X.D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.*, 115 :200–212, 1994.
- [75] D. S. Balsara and C.-W. Shu. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *J. Comput. Phys.*, 106 :405–452, 2000.

- [76] A.K. Henrick, T.D. Aslam, and J.M. Powers. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes : achieving optimal order near critical points. *J. Comput. Phys.*, 207 :542–567, 2005.
- [77] Y. Shen and G. Zha. Improved seventh-order WENO scheme. *AIAA Pap. 2010–1451*, 2010.
- [78] D.J. Hill and D.I. Pullin. Hybrid tuned center-difference-WENO for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *J. Comput. Phys.*, 194 :435–450, 2004.
- [79] S. Pirozzoli. Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction. *J. Comput. Phys.*, 178 :81–117, 2002.
- [80] J. L. Ziegler, R. Deiterding, J. E. Shepherd, and D. I. Pullin. An adaptive high order hybrid scheme for compressive, viscous flows with detailed chemistry. *J. Comput. Phys.*, 230 :7598–7630, 2011.
- [81] R.P. Fedkiw, B. Merriman, and S. Osher. High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry. *J. Comput. Phys.*, 132 :175–190, 1997.
- [82] J.C. Strikwerda. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Wadsworth, Belmont, 1989.
- [83] B. Sportisse. *Contribution à la modélisation des écoulements réactifs : réduction des modèles de cinétique chimique et simulation de la pollution atmosphérique*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 1999.
- [84] S. Gottlieb and C.W. Shu. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Math. Comput.*, 67 :73–85, 1998.
- [85] P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh. VODE : a variable-coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10 :1038–1051, 1989.
- [86] A.C. Hindmarsh. LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers. *ACM SIGNUM Newsletter*, 15 :10–11, 1980.
- [87] Y. D’Angelo. *Analyse et simulation numérique de phénomènes liés à la combustion supersonique*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1994.
- [88] Y. D’Angelo and B. Larrouturou. Comparison and analysis of some numerical schemes for stiff complex chemistry problems. *RAIRO-Modélisation mathématique et analyse numérique*, 29(3) :259–301, 1995.
- [89] K. E. Atkinson. *An introduction to numerical analysis*. Wiley, New York, 1989.

- [90] K.W. Thompson. Time dependant boundary conditions for hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.*, 68 :1–24, 1987.
- [91] T.J. Poinso and S.K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101 :104–139, 1992.
- [92] M. Baum, T. Poinso, and D. Thévenin. Accurate boundary conditions for multi-component reactive flows. *J. Comput. Phys.*, 116 :247–261, 1995.
- [93] C. Yoo, Y. Wang, A. Trouvé, and H. Him. Characteristic boundary conditions for direct simulations of turbulent couterflow flames. *Combustion Science and Technology*, 9 :617–646, 2005.
- [94] G. Lodato, P. Domingo, and L. Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 227 :5105–5143, 2008.
- [95] E. Albin, Y. D’Angelo, and L. Vervisch. Flow streamline based Navier-Stokes characteristic boundary conditions : Modeling for transverse and corner outflows. *Computers & Fluids*, 51 :115–126, 2011.
- [96] D.H. Rudy and J.C. Strikwerda. A non-reflecting outflow boundary condition for subsonic Navier-Stokes calculations. *J. Comput. Phys.*, 36 :55–70, 1980.
- [97] C. Bogey. *Calcul direct du bruit aérodynamique et validation de modèles acoustiques hybrides*. PhD thesis, Ecole Centrale Lyon, 2000.
- [98] D.J. Bodony. Analysis of sponge zones for computational fluid mechanics. *Journal of Computational Physics*, 212(2) :681–702, 2006.
- [99] G.S. Jiang and C.W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comput. Phys.*, 126 :202–228, 1996.
- [100] C.W. Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Technical report, ICASE, 1997.
- [101] A. Harten. The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities. I. Single conservation laws. *Commun. Pur. Appl. Math.*, 30 :611–638, 1977.
- [102] H. Yang. An artificial compression method for ENO schemes : the slope modification method. *J. Comput. Phys.*, 89 :125–160, 1990.

- [103] A. Harten. ENO schemes with subcell resolution. *J. Comput. Phys.*, 83 :148–184, 1989.
- [104] R. Borges, M. Carmona, B. Costa, and W. S. Don. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 227 :3191–3211, 2008.
- [105] F. Davoudzadeh, H. McDonald, and B. E. Thompson. Accuracy evaluation of unsteady CFD numerical schemes by vortex preservation. *Comput. Fluids*, 24 :883–895, 1995.
- [106] D.K. Ngomo Otogo. *Modélisation des écoulements réactifs dans les microsystèmes énergétiques*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2010.
- [107] H. C. Yee, M. Vinokur, and M. J. Djomehri. Entropy splitting and numerical dissipation. *J. Comput. Phys.*, 162 :33–81, 2000.
- [108] K. Salari and P. Knupp. Code verification by the method of manufactured solutions. Technical report, SAND2000-1444, 2000.
- [109] J. M. Vedovoto, A. Silveira Neto, A. Mura, and L. F. Figueira da Silva. Application of the method of manufactured solutions to the verification of a pressure-based finite-volume numerical scheme. *Comput. Fluids*, 51 :89–99, 2011.
- [110] R. Deiterding. A parallel adaptive method for simulating shock-induced combustion with detailed chemical kinetics in complex domains. *Comput. Struct.*, 87 :769–783, 2009.
- [111] R.P. Fedkiw, B. Merriman, and S. Osher. Numerical methods for a mixture of thermally perfect and/or calorically perfect gaseous species with chemical reactions. Technical report, UCLA CAM 96-1, 1996.
- [112] E.S. Oran, T.R. Young, and J.P. Boris. Weak and strong ignition. I. Numerical simulations of shock tube experiments. *Combust. Flame*, 48 :135–148, 1982.
- [113] M. Klein. An attempt to assess the quality of large eddy simulations in the context of implicit filtering. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75(1-4) :131–147, 2005.
- [114] I.B. Celik, Z.N. Cehreli, and I. Yavuz. Index of resolution quality for large eddy simulations. *J. Fluids Eng.*, 127 :949–958, 2005.
- [115] O. Métais and M. Lesieur. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 256 :156–173, 1992.

- [116] U. Piomelli. Large-eddy simulation : achievements and challenges. *Progress in Aerospace Sciences*, 35(4) :335–362, 1999.
- [117] F. Ducros, P. Comte, and M. Lesieur. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *Journal of Fluid Mechanics*, 326 :1–36, 1996.
- [118] B.C.R. Ewan and K. Moodie. Structure and velocity measurements in under-expanded jets. *Combustion Science and Technology*, 45 :275–288, 1986.
- [119] A. Hamzehloo and P.G. Aleiferis. Large eddy simulation of highly turbulent under-expanded hydrogen and methane jets. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39 :21275–21296, 2014.
- [120] K.B. Yuceil, M.V. Otugen, and E. Arik. Interferometric rayleigh scattering and piv measurements in the near-field of under-expanded sonic jets. In *41st Aerospace Science Meeting and Exhibit, Reno, Nevada*, 2003.
- [121] C. Chauveau, D.M. Davidenko, B. Sarh, I. Gokalp, V. Avrashkov, and C. Fabre. Piv measurements in an under-expanded hot free jet. In *10th International Symposium on Application of Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal*, 2006.
- [122] G. Lehnasch and P. Bruel. A robust methodology for RANS simulations of highly underexpanded jets. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56 :2179–2205, 2008.
- [123] A. Velikorodny and S. Kudriakov. Numerical study of the near-field of highly under-expanded turbulent gas jet. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37 :17390–17399, 2012.
- [124] J.L. Lumley. Computational modeling of turbulent flows. *Advances in Applied Mechanics*, 18 :123–176, 1978.
- [125] B. Frohnafel, P. Lammers, J. Jovanović, and F. Durst. Interpretation of the mechanism associated with turbulent drag reduction in terms of anisotropy invariants. *Journal of Fluid Mechanics*, 577 :457–466, 2007.
- [126] H. Huh and J.F. Driscoll. Shock-wave-enhancement of the mixing and the stability limits of supersonic hydrogen-air jet flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 2933–2939. Elsevier, 1996.
- [127] C. Béguier, L. Deskeyser, and B.E. Launder. Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence. *Physics of Fluids A*, 21 :307–310, 1978.

- [128] 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*, 184 :1471–1501, 2012.
- [129] R.S. Cant and E. Mastorakos. Flows with non-premixed reactants. In *An introduction to turbulent reacting flows*, pages 63–86. Imperial College Press, World Scientific Publishing Co. Pte. td. (London, UK), 2008.
- [130] R. Betchov. An inequality concerning the production of vorticity in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(05) :497–504, 1956.
- [131] N. Chakraborty, M. Champion, A. Mura, and N. Swaminathan. Scalar dissipation rate approach. *Lean Premixed Combustion*, Cambridge University Press, 2011.
- [132] P.J. Diamessis and K.K. Nomura. Interaction of vorticity, rate-of-strain, and scalar gradient in stratified homogeneous sheared turbulence. *Physics of Fluids (1994-present)*, 12(5) :1166–1188, 2000.
- [133] S.K. Lele. Compressibility effects on turbulence. *Annual review of fluid mechanics*, 26(1) :211–254, 1994.
- [134] L.S.G Kozsaznay. Turbulence in supersonic flow. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 20(10), 1953.
- [135] J.C. Sautet. *Effets des différences de densité sur le développement scalaire et dynamique des jets turbulents*. PhD thesis, Université de Rouen, 1992.
- [136] S. Kida and S.A. Orszag. Enstrophy budget in decaying compressible turbulence. *Journal of Scientific Computing*, 5(1) :1–34, 1990.
- [137] J.C. Sutherland, P.J. Smith, and J.H. Chen. Quantification of differential diffusion in nonpremixed systems. *Combustion Theory and Modelling*, 9 :365–383, 2005.
- [138] L. Gomet, V. Robin, and A. Mura. A multiple-inlet mixture fraction model for nonpremixed combustion. *Combustion and Flame*, 162(3) :668–687, 2015.
- [139] A.Y. Klimenko. Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow. *Fluid Dynamics*, 25(3) :327–334, 1990.
- [140] R.W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 5(2) :436–444, 1993.
- [141] A.M. Chabane, K. Truffin, A. Nicolle, F. Nicoud, O. Cabrit, and C. Angelberger. Direct numerical simulation of combustion near a carbonaceous surface in a quiescent flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 84 :130–148, 2015.

- [142] B.J. Delarue and S.B. Pope. Application of pdf methods to compressible turbulent flows. *Physics of Fluids*, 9(9) :2704–2715, 1997.
- [143] A. Mura and R. Borghi. Introducing a new partial pdf approach for turbulent combustion modeling. *Combustion and flame*, 136(3) :377–382, 2004.
- [144] V.A. Frost. Mathematical model of turbulent combustion. In *Proc. of the 3rd All-Union Symp. on Combust. Theory, Izd-vo AN SSSR, Moscow*, pages 121–125, 1960.
- [145] S.B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11(2) :119–192, 1985.
- [146] C. Dopazo. Recent developments in pdf methods. *Turbulent reacting flows*, pages 375–474, 1994.
- [147] J. Villermaux and J.C. Devillon. Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d’interaction phénoménologique. In *Proceedings of the 2nd International symposium on chemical reaction engineering*, pages 1–13, 1972.
- [148] C. Dopazo. Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. centerline evolution. *Physics of Fluids*, 18(4) :397, 1975.
- [149] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 14(4) :245–292, 1988.
- [150] M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, and K. Kinoshita. Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane air mixtures. *Combustion and flame*, 65(3) :319–337, 1986.
- [151] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 27–34. Elsevier, 1996.
- [152] A. Shams. *Contribution à la simulation numérique des décollements turbulents induits par choc : application à l’écoulement sur-détendu de tuyère supersonique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2010.
- [153] P. Boivin, C. Jiménez, A.L. Sánchez, and F.A. Williams. An explicit reduced mechanism for h₂–air combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :517–523, 2011.

Résumé

Cette Thèse de Doctorat est consacrée à l'étude des écoulements cisailés réactifs supersoniques et plus particulièrement à la dynamique des jets compressibles fortement sous détendus. Ce type d'écoulement est rencontré dans un certain nombre d'applications relatives, par exemple, à l'injection d'hydrogène dans les superstatoréacteurs ou bien à l'allumage de moteurs fusées. Il est aussi représentatif du percement de réservoirs à haute pression. Ce travail s'appuie sur l'emploi d'un outil de simulation numérique haute fidélité : CREAMS (Compressible REActive Multi-species Solver). Ce code de calcul met en oeuvre des schémas numériques d'ordre élevé : schéma d'intégration d'ordre 3 en temps et une combinaison de schémas centrés et WENO d'ordre 7 et 8 pour l'intégration en espace. Il s'appuie sur une description des termes de transport moléculaire et des termes sources chimiques la plus précise possible (transport détaillé et chimie complexe). Les simulations réalisées dans des conditions inertes permettent de caractériser l'importance des interactions choc/turbulence avec une attention particulière accordée au mélange turbulent à petite échelle. Les simulations réactives de jets fortement sous détendus d'hydrogène montrent les difficultés d'allumage et de stabilisation de la combustion pour ce type de conditions, même en présence d'un apport externe d'énergie. Enfin, l'analyse d'un jet représentatif d'un allumeur de moteur fusée révèle certaines spécificités de l'auto-allumage dans ces conditions non-prémélangées rapides.

Mots clés : Ecoulement cisailé / Compressibilité / Mélange / Aérodynamique supersonique / Allumage / Turbulence / Simulation numérique

Abstract

This dissertation is devoted to the study of sheared supersonic reactive flows and more specifically the dynamics of highly underexpanded jets. Such complex compressible turbulent flow conditions are of practical interest for scramjets as well as rocket engines applications. Similar conditions may also be found during the accidental releases of flammable substances into the atmosphere during high pressure vessel rupture or venting. This work is conducted with a high fidelity computational solver : CREAMS (Compressible Multi-reactive species Solver). It uses high precision numerical schemes : third-order Runge Kutta scheme for time integration, plus a combination of seventh and eighth-order centered and WENO schemes for spatial integration. The molecular transport terms and chemical sources terms are handled with the most accurate descriptions, i.e., including detailed transport and chemistry. Inert flow simulations allow to characterize the importance of shock/turbulence interactions with a special emphasis placed on the small-scale scalar mixing. Highly under-expanded reactive hydrogen jet simulations underline the specific difficulties associated to ignition and combustion stabilization even in the presence of an external deposit of energy. Finally, the analysis of the rocket engine igniter jet reveals some specific features of self-ignition phenomena in such non-premixed conditions.

Key words : Shear flow / Compressibility / Mixing / Supersonic, Aerodynamics / Ignition / Turbulence / Computer simulation