



HAL
open science

Étude par simulation numérique de l'auto-allumage en écoulement turbulent cisailé supersonique

Pedro José Martinez Ferrer Martínez Ferrer

► **To cite this version:**

Pedro José Martinez Ferrer Martínez Ferrer. Étude par simulation numérique de l'auto-allumage en écoulement turbulent cisailé supersonique. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2013. Français. NNT : 2013ESMA0018 . tel-00937313

HAL Id: tel-00937313

<https://theses.hal.science/tel-00937313v1>

Submitted on 28 Jan 2014

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 :

Pedro José Martínez Ferrer

Etude par simulation numérique de l'auto-allumage en écoulement turbulent cisailé supersonique

Directeur de thèse : **Arnaud Mura**

Co-encadrant : **Guillaume Lehnasch**

Soutenue le 18 décembre 2013

devant la commission d'examen

Jury

M.	V. Giovangigli	Directeur de Recherche au CNRS	Rapporteur
M.	A. Hadjadj	Professeur INSA de Rouen	Rapporteur
M.	J. P. Bonnet	Directeur de Recherche au CNRS	Examineur
Mme.	B. Cuenot	Chercheur haut-niveau CERFACS	Examineur
M.	P. Haldenwang	Professeur LRM-M2P2	Examineur
M.	G. Lehnasch	Maître de conférences à l'ISAE-ENSMA	Examineur
M.	A. Mura	Chargé de Recherche au CNRS	Examineur
M.	V. A. Sabel'nikov	Directeur de Recherche à l'ONERA	Examineur

*Je me demande, dit-il,
si les étoiles sont éclairées
afin que chacun puisse un jour
retrouver la sienne*

Antoine de Saint-Exupéry, "Le Petit Prince"

A mes parents, ma sœur et mon frère

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire s'est effectué au sein de 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 Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche.

Je souhaiterais remercier M. Arnaud Mura, qui m'a offert la possibilité d'accomplir cette étude au sein de l'Institut P', ainsi que M. Guillaume Lehnasch, pour ses conseils, sa patience et son regard critique. Qu'ils soient assurés de ma plus profonde gratitude pour la confiance qu'ils m'ont accordée et pour la mise à disposition de l'environnement matériel nécessaire à la réalisation de ce travail durant les trois ans de thèse.

Je tiens à remercier aussi MM. Vincent Giovangigli et Abdellah Hadjadj pour avoir bien voulu supporter la charge de rapporteur de ce mémoire de thèse.

Je voudrais remercier le GENCI-IDRIS pour avoir mis à ma disposition la bourse 2013-x20132a0912, qui m'a permis d'utiliser le supercalculateur Turing de l'IDRIS, nécessaire pour le calcul des simulations réalisées dans ce travail.

Je suis très reconnaissant envers MM. Muhammad Farrukh Shahab (CEAT), Julien Réveillon (CORIA-UMR 6614), Alexandre Ern et Vincent Giovangigli (CERMICS), pour la mise à disposition des outils numériques SWBLI, ASPHODELE et EGLIB.

Il m'est difficile de mentionner au sein de l'Institut Pprime tous ceux qui m'ont été d'un grand soutien. J'adresse ma plus sincère reconnaissance à mes collègues Laurent Gomet, Romain Buttay et Sylvain Serra. Je remercie également à Jocelyne Bardeau pour sa gentillesse et sa bienveillance. Je tiens à remercier aussi à tous mes collègues doctorants et stagiaires des autres départements de l'Institut P' ainsi que les différentes personnes avec lesquelles j'ai passé des très bons moments à Poitiers.

Finalement, je voudrais remercier à ma famille, et tout spécialement mes parents, pour leur soutien pendant ce travail.

Poitiers, 18 décembre 2013
Pedro José Martínez Ferrer

Table des matières

Remerciements	i
Table des matières	iii
Liste des tableaux	vii
Table des figures	ix
Liste des symboles	xxi
1 Introduction	1
2 Equations et modèles mathématiques	5
2.1 Introduction	5
2.2 Equations de Navier-Stokes pour un mélange réactif de gaz	5
2.3 Propriétés thermodynamiques	7
2.4 Propriétés de transport détaillé	8
2.5 Propriétés de transport simplifié	9
2.6 Cinétique chimique	10
2.7 Récapitulatif	12
3 Méthodes numériques	13
3.1 Introduction	13
3.2 Discrétisation spatiale des flux convectifs	14
3.3 Discrétisation spatiale des flux diffusifs	18
3.4 Intégration temporelle	19
3.5 Critères de stabilité numérique	21
3.6 Température du mélange	22
3.7 Conditions aux limites	22
3.7.1 Entrée	23
3.7.2 Sortie	23
3.7.3 Paroi	23
3.7.4 Onde de choc oblique	24
3.7.5 Périodicité	25
3.8 Récapitulatif	26

4	Vérifications numériques du code de calcul CREAMS	27
4.1	Introduction	27
4.2	Tube à choc de Sod	27
4.3	Taux de convergence global	28
4.4	Tube à choc multi-espèces inerte	31
4.5	Test de diffusion multi-espèces	33
4.6	Propagation d'une onde acoustique	34
4.7	Réacteur parfaitement prémélangé	35
4.8	Tube à choc multi-espèces réactif	38
4.9	Flamme laminaire prémélangée d'hydrogène et oxygène	40
4.10	Critère de détection de discontinuités	41
4.11	Critère de détection des zones réactives	43
4.12	Scalabilité du code de calcul	44
4.13	Récapitulatif	44
5	Simulations bidimensionnelles de couches de mélange	47
5.1	Introduction	47
5.2	Propriétés générales des couches de mélange	49
5.3	Couche de mélange incompressible	52
5.4	Couches de mélange compressibles inertes	55
5.4.1	Description du mélange retenu	56
5.4.2	Paramètres de simulation	59
5.4.3	Structure des couches de mélange	61
5.4.4	Etat d'autosimilarité	63
5.5	Equilibre énergétique	66
5.6	Couches de mélange compressibles réactives	67
5.6.1	Structure des couches de mélange	68
5.6.2	Etat d'autosimilarité	71
5.7	Equilibre énergétique	77
5.8	Production de vorticit�e	77
5.9	Couches de mélange impact�ees par un choc oblique	79
5.10	R�ecapitulatif	84
6	Simulations tridimensionnelles inertes	87
6.1	Introduction	87
6.2	Description des configurations �etudi�ees	89
6.3	V�erification des simulations	90
6.4	Structure des couches de mélange	97
6.4.1	$M_c = 0.35$	97
6.4.2	$M_c = 0.70$	99
6.4.3	$M_c = 1.10$	103
6.5	Etat d'autosimilarit�e	104
6.6	Effet de la compressibilit�e sur la turbulence	108

6.6.1	Variables moyennes	108
6.6.2	Variables thermodynamiques fluctuantes	110
6.6.3	Nombres de Mach	113
6.6.4	Equation de transport de l'enstrophie	115
6.6.5	Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente	115
6.6.6	Equations de transport des composantes du tenseur de Reynolds	116
6.7	Effet de la compressibilité sur le mélange scalaire	124
6.7.1	Variables moyennes et fluctuantes	124
6.7.2	Pdfs des variables scalaires	127
6.7.3	Equation de transport de la variance d'un scalaire	132
6.7.4	Flux scalaires	134
6.8	Etude des shocklets	137
6.9	Récapitulatif	142
7	Simulations tridimensionnelles réactives	145
7.1	Introduction	145
7.2	Description des configurations étudiées	148
7.3	Vérification des simulations	149
7.4	Auto-inflammation de la couche de mélange	154
7.5	Structure des couches de mélange	169
7.5.1	$M_c = 0.35$	169
7.5.2	$M_c = 0.70$	172
7.5.3	$M_c = 1.10$	175
7.6	Etat d'autosimilarité	178
7.7	Effet de la compressibilité sur la turbulence	181
7.7.1	Variables moyennes	181
7.7.2	Variables thermodynamiques fluctuantes	186
7.7.3	Nombres de Mach	189
7.7.4	Equation de transport de l'enstrophie	190
7.7.5	Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente	191
7.7.6	Equations de transport des composantes du tenseur de Reynolds	193
7.8	Effet de la compressibilité sur le mélange scalaire	200
7.8.1	Variables moyennes et fluctuantes	200
7.8.2	Pdfs des variables scalaires	205
7.8.3	Equation de transport de la variance d'un scalaire	209
7.8.4	Flux scalaires	214
7.9	Etude des shocklets	214
7.10	Récapitulatif	214
8	Conclusions générales et perspectives	223
A	Adimensionnement des équations de Navier-Stokes	227

B	Forme caractéristique des équations de Navier-Stokes	229
C	Mécanismes réactionnels	235
C.1	Mécanisme réactionnel de Marinov <i>et al.</i>	235
C.2	Mécanisme réactionnel de Ó Conaire <i>et al.</i>	236
C.3	Mécanismes réactionnels de Kee <i>et al.</i>	237
	Bibliographie	239

Liste des tableaux

3.1	Valeurs du coefficient a_{kl}^r pour le schéma WENO7 (r=4).	17
4.1	Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma centré d'ordre 7.	31
4.2	Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma WENO7.	32
4.3	Valeurs de température et fractions massiques dans le côté combustible (C) et oxydant (O) correspondantes à une version simplifiée de la configuration de Cabra <i>et al.</i> [25].	34
5.1	Compilation de résultats adimensionnels obtenus pour différentes couches de mélange incompressibles.	54
5.2	Configuration du mélange retenu pour les couches cisillées inertes et réactives.	57
5.3	Paramètres de simulation des couches cisillées pour différents nombres de Mach convectifs. L'indice 1 correspond à l'injection du courant d'oxydant et l'indice 2 correspond à l'injection du courant de combustible.	59
5.4	Caractérisation des couches de mélange bidimensionnelles inertes. Le nombre de Reynolds est calculé en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$	64
5.5	Températures maximales instantanées et moyennes des couches de mélanges bidimensionnelles.	71
5.6	Caractérisation des couches de mélange bidimensionnelles réactives. Le nombre de Reynolds est calculé en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$	72
5.7	Paramètres de simulation de la couche de mélange impactée par choc oblique. L'indice 1 correspond à l'injection de l'oxydant et l'indice 2 correspond à l'injection du combustible.	80
5.8	Résultats des couches de mélange bidimensionnelles impactées par un choc oblique. Le nombre de Reynolds est calculé en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$	82
6.1	Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitué d'un nombre de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. L'épaisseur de vorticit� initiale $\delta_{\omega,0}$, utilis�e comme longueur de r�f�rence, est calcul�e � partir de $Re_{\omega,0} = 640$	89
6.2	Echelles int�grales pour les simulations inertes.	93

6.3	Compilation de résultats obtenus pour différentes couches de mélange incompressibles.	97
6.4	Caractérisation des couches de mélange tridimensionnelles inertes. Les nombres de Reynolds et les échelles caractéristiques sont calculés en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas I-3D-TD-0.35 et I-3D-TS-0.70) et $x_1 = 375\delta_{\omega,0}$ (cas I-3D-TS-1.10), au centre du domaine de calcul.	107
6.5	Composantes de vitesse instantanée mesurées par les sondes.	140
7.1	Paramètres géométriques correspondant aux simulations réactives. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitué d'un nombre de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. L'épaisseur de vorticit� initiale $\delta_{\omega,0}$, utilis�e comme longueur de r�f�rence, est calcul�e � partir de $Re_{\omega,0} = 640$	149
7.2	Echelles int�grales pour les simulations r�actives.	151
7.3	Caract�risation des couches de m�lange tridimensionnelles r�actives. Les nombres de Reynolds et les �chelles caract�ristiques sont calcul�es en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.35) et $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.70), au centre du domaine de calcul.	177
7.4	R�duction des termes sources principaux des contraintes du tenseur de Reynolds par effet du d�gagement de chaleur.	197
C.1	M�canisme r�actionnel de Marinov <i>et al.</i> (1995) [102]. Les coefficients de r�action sont exprim�s sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en s-cm ³ -cal-mol-K. Les esp�ces consid�r�es sont les suivantes : H ₂ , O ₂ , H ₂ O.	235
C.2	M�canisme r�actionnel de � Conaire <i>et al.</i> (2004) [119]. Les coefficients de r�action sont exprim�s sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en unit�s s-cm ³ -cal-mol-K. Les esp�ces consid�r�es sont les suivantes : H ₂ , O ₂ , H, O, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , H ₂ O, N ₂	236
C.3	M�canisme r�actionnel de Kee <i>et al.</i> (1993) [85]. Les coefficients de r�action sont exprim�s sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en unit�s s-cm ³ -cal-mol-K. Les esp�ces consid�r�es sont les suivantes : H ₂ , O ₂ , H, O, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , H ₂ O.	237
C.4	M�canisme r�actionnel de Kee <i>et al.</i> (1996) [86]. Les coefficients de r�action sont exprim�s sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en unit�s s-cm ³ -cal-mol-K. Les esp�ces consid�r�es sont les suivantes : H ₂ , H, O ₂ , O, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , H ₂ O, N, N ₂ , NO.	238

Table des figures

2.1	Vitesse de flamme laminaire de prémélange en fonction de la richesse mesurée expérimentalement (Kwon & Faeth [89]) et calculée à partir de différents schémas cinétiques [102, 119] à l'aide de la librairie CHEMKIN.	11
3.1	Stencils candidats pour l'évaluation du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$ par interpolation essentiellement non oscillante du schéma WENO7.	16
3.2	Schéma d'un choc oblique formant un angle β par rapport à la direction de l'écoulement. Le nombre 1 désigne l'état de l'écoulement avant le choc et le nombre 2 l'état après le choc.	24
3.3	Exemple de découpage en deux sous-domaines de calcul ($1, \dots, e_x$ et s_x, \dots, N , avec $e_x + 1 = s_x$) d'un domaine cartésien mono-dimensionnel composé de N points de calcul. Les carrés sont points virtuels où s'effectuent les communications entre les sous-domaines. Les triangles correspondent à des points fantômes, constituant les frontières physiques du domaine, nécessaires pour mettre en oeuvre les stencils du schéma WENO7.	25
4.1	Tube à choc de Sod. 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. . .	29
4.2	Norme L_2 de l'erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondante (b).	31
4.3	Isolignes de masse volumique (a) et de la composante transversale de vitesse (b) à deux instants différents. $N = 160$	32
4.4	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.	33
4.5	Test de diffusion multi-espèces. Solutions numériques des profils de température (a) et fraction massique de CH_4 (b) calculés avec transport détaillé (TD) et simplifié (TS). $t_1 = 0.05 \text{ s}$, $t_2 = 0.5 \text{ s}$, 200 points de calcul, CFL=0.5, Fo=0.1.	35
4.6	Propagation d'une onde acoustique. Evolution temporelle de la vitesse (a), la masse volumique (b), la pression (c) et la température (d) en $x = 0 \text{ m}$, calculée avec transport détaillé (TD) et simplifié (TS). 200 points de calcul, CFL=0.5, Fo=0.1.	36

4.7	Réacteur parfaitement prémélangé. Comparaison entre la solution CFD et celle de référence (CK) pour la température (a) et le taux de dégagement de chaleur (b). CFL=0.5.	37
4.8	Réacteur parfaitement prémélangé. Comparaison entre la solution CFD (avec deux critères pour restreindre le pas de discrétisation temporelle) et celle de référence (CK). Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur (a) et de la fraction massique de HO ₂ (b). CFL=0.5, $\Delta T_{\text{permis}} = 15$ K.	38
4.9	Tube à choc multi-espèces inerte. Profils de température (a), vitesse (b), rapport des chaleurs spécifiques (c) et fraction massique de H (d) à trois instants différents. 400 points de calcul, CFL=0.5, Fo=0.1.	39
4.10	Flamme laminaire de prémélange d'hydrogène-oxygène. Comparaison entre les solutions obtenues avec PREMIX (symboles) et le code de calcul (CFD) utilisant une description simplifiée (TS) et détaillée (TD) des termes de transport. Les quantités sont tracées en fonction de la variable de progrès $c = (T - T_f)/(T_b - T_f)$. CFL=0.7, Fo=0.1, $\Delta T_{\text{max}} = 15$ K. Unités SI.	41
4.11	Critère de détection de chocs (lignes blanches), superposé au champ instantané du gradient normalisé de pression (niveaux de gris). Simulation I-3D-TD-0.48.	42
4.12	Critère de détection de régions réactives (lignes blanches), superposé aux champs instantanés du taux de dégagement de chaleur et température (niveaux de gris). Simulation R-3D-TD-0.70.	43
4.13	Résultats obtenus dans le test de scalabilité sur le cluster de l'Institut P'. La courbe de scalabilité idéale est une droite de pente -1 . Simulation I-3D-ST-110.	44
5.1	Schéma du développement spatial de la couche cisailée à l'issue d'une plaque séparatrice.	49
5.2	Isolignes de vorticit� instantan�e (a) et de vitesse longitudinale moyenne (b).	53
5.3	Evolutions spatiales des �paisseurs de vorticit� et de quantit� de mouvement normalis�es par leurs valeurs initiales respectives.	54
5.4	Profils de la vitesse longitudinale moyenne et vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds, normalis�s et montr�s � diff�rentes abscisses.	55
5.5	Temp�rature adiabatique du m�lange (a) et temps d'auto-inflammation (b) en fonction de la fraction de m�lange correspondant au m�lange consid�r� et autres m�langes report�s dans la litt�rature.	57
5.6	Evolution de la taille de maille dans le sens longitudinal pour la simulation des couches de m�lange.	60
5.7	Test de diffusion correspondant � une section de la couche de m�lange inerte. Comparaison des solutions obtenues avec transport d�taill� (symboles) et transport simplifi� (TS) � $t = 80 \mu\text{s}$. 369 points de calcul, CFL=0.75, Fo=0.1. Unit�s SI.	61

5.8	Isolignes de vorticit� pour les couches de m�lange inertes.	62
5.9	Champ instantan� de la fraction massique d'hydrog�ne. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$	62
5.10	Evolution spatiale des �paisseurs normalis�es de vorticit� (a) et de quantit� de mouvement (b).	63
5.11	Profils de vitesse longitudinale moyenne au sens de Favre (a) et Reynolds (b) normalis�s, trac�s � diff�rentes abscisses : $x_1/\delta_{\omega,0} = 150$ (+), 200 (\times), 250 ($*$) et 300 (\square). $M_c = 0.35$ (—) et $M_c = 0.70$ (- -).	64
5.12	Profils de vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds � diff�rents abscisses. Les symboles et les lignes sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 5.11.	65
5.13	Bilan de l'�quation de transport de l'�nergie cin�tique turbulente, normalis� par $\Delta U^3/\delta_\omega$	66
5.14	Test de diffusion correspondant � une section de la couche de m�lange r�active utilisant une chimie d�taill�e. Comparaison des solutions obtenues avec transport d�taill� (symboles) et transport simplifi� (TS) � $t = 80 \mu s$. 369 points de calcul, CFL=0.75, Fo=0.1. Unit�s SI.	68
5.15	Isolignes de vorticit� pour les couches de m�lange r�actives.	69
5.16	Champs instantan�s de temp�rature normalis�e pour diff�rentes couches de m�lange. Isolignes du taux de d�gagement de chaleur.	70
5.17	Evolution spatiale des �paisseurs de vorticit� normalis�es avec chimie d�taill�e (a) et chimie globale (b).	71
5.18	Evolution spatiale des �paisseurs de quantit� de mouvement normalis�es avec chimie d�taill�e (a) et chimie globale (b).	72
5.19	Taux de croissance normalis�s en fonction du nombre de Mach convectif pour diff�rentes simulations et �tudes exp�rimentales.	73
5.20	Profils de vitesse longitudinale normalis�e moyenn�e au sens de Favre et de Reynolds avec chimie d�taill�e (figures (a) et (c)) et chimie globale (figures (b) et (d)), respectivement. Les symboles et les lignes sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 5.11.	74
5.21	Profils de vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds � diff�rents abscisses avec chimie d�taill�e (figures (a), (c) et (e)) et chimie globale (figures (b), (d) et (f)). Les symboles et les lignes sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 5.11.	75
5.22	Bilan de l'�quation de transport de l'�nergie cin�tique turbulente, normalis� par $\Delta U^3/\delta_\omega$	76
5.23	Terme de dilatation du bilan de l'�quation de transport de l'enstrophie normalis� par $(\Delta U \delta_\omega)^3$	78
5.24	Terme barocline du bilan de l'�quation de transport de l'enstrophie normalis� par $(\Delta U \delta_\omega)^3$	78
5.25	Terme de diffusion visqueuse du bilan de l'�quation de transport de l'enstrophie normalis� par $(\Delta U \delta_\omega)^3$	78

5.26	Schéma du développement d'une couche cisailée impactée par une onde de choc oblique.	79
5.27	Champ instantané de température. Isolignes du gradient de pression (noires) et du taux de dégagement de chaleur (blanches) pour le cas R-2D-SW. Unités SI.	81
5.28	Evolution spatiale de l'épaisseur de vorticit� normalis�e.	81
5.29	Bilan de l'�quation de transport de l'�nergie cin�tique turbulente (a) normalis� par $\Delta U^3/\delta_\omega$, et de l'enstrophie (b) normalis� par $(\Delta U\delta_\omega)^3$, en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$. Cas R-2D-SW-0.48 (—) et I-2D-SW-0.48 (- -). Figure (a) : terme de production (+), de dissipation (\times), de transport turbulent (*) de pression-dilatation (\square) et du flux massique (\blacksquare). Figure (b) : terme barocline (+), de dilatation (\times) et de diffusion visqueuse (*).	82
5.30	Cas R-2D-SW-0.48. Schlieren num�rique de la masse volumique avec isolignes du taux de d�gagement de chaleur (a). Champ instantan� de fraction massique de HO ₂ (tons noirs) avec superposition du champ instantan� du gradient de pression (tons blancs) et isolignes de fraction massique de OH (b). Unit�s SI.	83
6.1	Convergence des moments d'ordre 2.	91
6.2	Corr�lations en deux points.	92
6.3	Composante longitudinale de vitesse.	93
6.4	Cas I-3D-TD-0.35. Profils de vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds normalis�s par ΔU	94
6.5	Cas I-3D-TS-0.70. Profils de vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds normalis�s par ΔU	95
6.6	Cas I-3D-TS-1.10. Profils de vitesses rms d�duites du tenseur de contraintes de Reynolds normalis�s par ΔU	96
6.7	Cas I-3D-TD-0.35. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$	98
6.8	Cas I-3D-TD-0.35. Champs instantan�s de masse volumique correspondant � des plans x_2 - x_3 situ�s � diff�rentes abscisses. Unit�s SI.	99
6.9	Cas I-3D-TD-0.35. Champs instantan�s de fraction massique d'hydrog�ne correspondant � plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).	100
6.10	Cas I-3D-TS-0.70. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$	101
6.11	Cas I-3D-TS-0.70. Champs instantan�s de masse volumique correspondant � des plans x_2 - x_3 situ�s � diff�rentes abscisses. Unit�s SI.	101
6.12	Cas I-3D-TS-0.70. Champs instantan�s de fraction massique d'hydrog�ne correspondant � plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).	102
6.13	Cas I-3D-TS-1.10. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$	103
6.14	Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantan�s de masse volumique correspondant � des plans x_2 - x_3 situ�s � diff�rentes abscisses. Unit�s SI.	104

6.15	Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantanés de fraction massique d'hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{\text{H}_2} = 0.005$ et $Y_{\text{H}_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).	105
6.16	Evolution spatiale des épaisseurs normalisées de vorticit� (a) et de quantit� de mouvement (b).	106
6.17	Profils de vitesses rms d�duites de la contrainte de Reynolds R_{12} � diff�rentes abscisses.	107
6.18	Taux de croissance normalis�s en fonction du nombre de Mach convectif pour diff�rentes simulations et �tudes exp�rimentales.	108
6.19	Profils de vitesse longitudinale normalis�e moyenn�e au sens de Favre (a) et de Reynolds (b).	109
6.20	Profils moyens de masse volumique (a), temp�rature (b), pression (c) et masse molaire (d).	109
6.21	Profils rms de masse volumique (a), temp�rature (b), pression (c) et masse molaire (d).	110
6.22	Fluctuations des variables thermodynamiques int�gr�es dans la direction transversale.	111
6.23	D�composition des profils rms de masse volumique (a) et temp�rature (b) en partie acoustique (—) et entropique (- -). Les symboles sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 6.21.	112
6.24	Coefficient de corr�lation entre la masse volumique et la pression (a) et entre la masse volumique et la masse molaire (b).	112
6.25	Nombre de Mach turbulent (a) et Mach de gradient (b).	113
6.26	Evolution du nombre de Mach turbulent en fonction du nombre de Mach de gradient.	114
6.27	Bilan de l'�quation de transport de l'enstrophie normalis� par $\Delta U^3/\delta_\omega^3$. Figure (a) : terme d'�tirement (—) et de diffusion (- -). Figure (b) : terme de dilatation (—) et couple barocline (- -). Les symboles sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 6.26.	114
6.28	Energie cin�tique turbulente normalis�e par $\rho_0\Delta U^2$	115
6.29	Bilan de l'�quation de transport de l'�nergie cin�tique turbulente normalis� par $\rho_0\Delta U^3/\delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport turbulent (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques � ceux utilis�s dans la figure 6.28.	116
6.30	Rapports des quantit�s int�grales correspondant au bilan de l'�quation de transport de l'�nergie cin�tique turbulente.	117
6.31	Contraintes de Reynolds normalis�es par $\rho_0\Delta U^2$	117
6.32	Anisotropies.	118

6.33	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{11}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.32.	119
6.34	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{22}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33. . .	120
6.35	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{33}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33. . .	120
6.36	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{12}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33. . .	121
6.37	Quantités intégrales correspondant à l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds.	122
6.38	Analyse du comportement des quantités qui composent le terme de pression-dilatation Π_{11}	123
6.39	Profils moyens des espèces.	125
6.40	Profils de variance des espèces.	126
6.41	Cas I-3D-TD-0.35. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.1 (+), 0.2 (\times), 0.3 (*), 0.4 (\square), 0.5 (\blacksquare), 0.6 (\circ), 0.7 (\bullet), 0.8 (\triangle), 0.9 (\blacktriangle)$	127
6.42	Cas I-3D-TS-0.70. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.41.	128
6.43	Cas I-3D-TS-1.10. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.41.	130
6.44	Pdf des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.3$ (—), 0.5 (- -), et différents $M_c = 0.35$ (\square), 0.70 (\circ), 1.10 (\triangle).	131
6.45	Bilan de l'équation de transport de la variance d'un scalaire, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production (—), de transport (- -), de diffusion ($\cdot \cdot \cdot$) et de dissipation (---). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.	132
6.46	Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_{Y_α} , normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Contribution instantanée (—) et moyenne (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.	133
6.47	Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.	134
6.48	Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 6.47.	135
6.49	Profil de flux scalaire de la variable de mélange z , normalisé par $\rho_0 \Delta U$ et tracé en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 6.47.	135
6.50	Corrélations intervenant dans le flux scalaire de la variable de mélange. . .	136

6.51	Vérification de la loi gradient. Composante longitudinale de flux (a) : $\langle u_1'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_1) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$. Composante transversale de flux (b) : $\langle u_2'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_2) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$	139
6.52	Champs instantanés de dilatation normalisés par $\Delta U / \delta_{\omega,0}$ avec superposition des isolignes de pression (figures (a), (c) et (e)) et champs instantanés de gradient normalisé de pression (figures (b), (d) et (f)).	139
6.53	Cas I-3D-TS-1.10. Champ de dilatation normalisé par $\Delta U / \delta_{\omega,0}$ avec superposition des vecteurs de vitesse.	140
6.54	Sonde placée dans le courant d'oxydant. Variation de la pression (a), température (b), masse volumique (c), vorticité (d), gradient normalisé de pression (e) et dilatation (f) à la traversée de la discontinuité.	141
6.55	Sonde placée dans le courant de combustible. Mêmes courbes que pour la figure 6.54.	143
7.1	Convergence des moments d'ordre 2.	150
7.2	Corrélations en deux points.	150
7.3	Composante longitudinale de vitesse.	151
7.4	Cas R-3D-TD-0.35. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU	152
7.5	Cas R-3D-TS-0.70. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU	153
7.6	Cas R-3D-TD-0.35. Isocontours de HO_2 (a) et OH (b). Unités SI.	154
7.7	Cas R-3D-TD-0.70. Isocontours de HO_2 (a) et OH (b). Unités SI.	155
7.8	Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés avec superposition des isolignes de z_{mr} (blanche) et de z_{st} (noire). Région d'auto-inflammation (gauche) et fin du domaine de calcul (droite). Unités SI.	157
7.9	Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés avec superposition des isolignes de $z_{\text{mr}} = 0.23$ (blanche) et de $z_{\text{st}} = 0.41$ (noire). Région d'auto-inflammation (gauche) et fin du domaine de calcul (droite). Unités SI.	158
7.10	Température (—) et taux de dégagement (- -) maximum moyennés au sens de Reynolds et tracés en fonction de la coordonnée longitudinale. Cas R-3D-TD-0.35 (■) et R-3D-TD-0.70 (●).	159
7.11	Cas R-3D-DT-0.35. Profils de température et des réactions élémentaires de HO_2 (a)–(b) et OH (c)–(d) à différentes abscisses.	160
7.12	Cas R-3D-TD-0.70. Profils de température et des réactions élémentaires de HO_2 (a)–(b) et OH (c)–(d) à différentes abscisses.	161
7.13	Profils moyens et rms du taux de dégagement de chaleur (a)–(b), taux de dissipation scalaire (c)–(d), nombre de Damköhler (e)–(f) et indice de Takeno (g)–(h).	163
7.14	Moyenne conditionnelle du taux de dégagement de chaleur pour les cas R-3D-TD-0.35 (a) et cas R-3D-TD-0.70 (b).	164
7.15	Moyenne conditionnelle et valeurs rms pour différentes variables. Cas R-3D-TD-0.35 (■) : $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$ (—) et $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (- -). Cas R-3D-TD-0.70 (●) : $x_1 = 200\delta_{\omega,0}$ (—) et $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (- -).	166

7.16	Pdfs du taux de dissipation scalaire (a)–(b) et du nombre de Damköhler (c)–(d) pour $\langle z \rangle_f = z_{mr}$ et $\langle z \rangle_f = z_{st}$, respectivement. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.15.	167
7.17	Moyennes et pdfs conditionnelles du taux de dégagement de chaleur. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.15. . .	168
7.18	Cas R-3D-TD-0.35. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,min}$	170
7.19	Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2-x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.	170
7.20	Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).	171
7.21	Cas R-3D-TD-0.70. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,min}$	172
7.22	Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2-x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.	173
7.23	Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).	174
7.24	Cas I-3D-TS-1.10. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,min}$	175
7.25	Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2-x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.	176
7.26	Champs instantanés de taux de dégagement de chaleur correspondant à différents plans x_2-x_3 situés à $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.35), $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.70) et $x_1 = 375\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-1.10). Unités SI.	176
7.27	Evolution spatiale des épaisseurs normalisées de vorticité (a) et de quantité de mouvement (b).	177
7.28	Profils de vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} à différentes abscisses.	179
7.29	Profils de vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} à différentes abscisses.	180
7.30	Taux de croissance normalisés en fonction du nombre de Mach convectif pour différentes simulations et études expérimentales.	180
7.31	Profils de vitesse longitudinale normalisée moyennée au sens de Favre (—) et de Reynolds (- -) pour $M_c = 0.35$ (a) et $M_c = 0.70$ (b). Cas R-3D-TD-0.35 (■), R-3D-TD-0.70 (●), I-3D-TD-0.35 (□) et I-3D-TS-0.70 (○).	181
7.32	Profils moyens de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).	182

7.33	Evolution de la différence entre la température moyenne totale (—) et statique (- -) et leurs valeurs respectives au plan d'injection, en fonction de l'abscisse $x_1/\delta_{\omega,0}$. Simulations R-3D-TD-0.35 (■), R-3D-TD-0.70 (●), I-3D-TD-0.35 (□), I-3D-TS-0.70 (○) et I-3D-TS-1.10 (△). Figure (a) : courant d'oxydant ($x_2 = -25\delta_{\omega,0}$ pour R-3D-TD-0.35 et I-3D-TD-0.35; $x_2 = -40\delta_{\omega,0}$ pour R-3D-TD-0.70, I-3D-TS-0.70 et I-3D-TS-1.10). Figure (b) : courant de combustible (cordonnées symétriques par rapport à $x_2 = 0$). Unités SI.	184
7.34	Composante transversale de vitesse.	185
7.35	Profils rms de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).	186
7.36	Fluctuations des variables thermodynamiques intégrées dans la direction transversale.	187
7.37	Décomposition des profils rms de masse volumique (a) et température (b) en partie acoustique (—) et entropique (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.35.	188
7.38	Coefficient de corrélation entre la masse volumique et la pression (a) et entre la masse volumique et la masse molaire (b).	188
7.39	Nombre de Mach turbulent (a) et Mach de gradient (b).	189
7.40	Profils moyens de la vitesse du son (a) et du rapport de chaleurs spécifiques (b).	189
7.41	Evolution du nombre de Mach turbulent en fonction du nombre de Mach de gradient.	190
7.42	Bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega^3$. Figure (a) : terme d'étirement (—) et de diffusion (- -). Figure (b) : terme de dilatation (—) et couple barocline (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.41.	191
7.43	Energie cinétique turbulente normalisée.	192
7.44	Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente normalisé par $\rho_0\Delta U^3/\delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport turbulent (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique (· · ·). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.43.	193
7.45	Rapports des quantités intégrales correspondantes au bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente.	194
7.46	Contraintes de Reynolds normalisées par $\rho_0\Delta U^2$	194
7.47	Anisotropies.	195
7.48	Bilan de l'équation de transport de $\langle\rho\rangle R_{11}$ normalisé par $\rho_0\Delta U^3/\delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique (· · ·). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.47.	195

7.49	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{22}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.	196
7.50	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{33}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.	196
7.51	Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{12}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.	196
7.52	Quantités intégrales correspondantes à l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds.	198
7.53	Analyse du comportement des quantités qui composent le terme de pression-dilatation Π_{11}	199
7.54	Cas R-3D-TD-0.35. Valeur moyenne (a) et variance (b) de la fraction de mélange transportée (■) et la variable de mélange calculée (◇). Moyenne au sens de Favre (—) et au sens de Reynolds (- -).	200
7.55	Cas R-3D-TD-0.70. Valeur moyenne (a) et variance (b) de la variable de mélange calculée (●). Moyenne au sens de Favre (—) et au sens de Reynolds (- -).	201
7.56	Profils moyens des espèces.	203
7.57	Profils de variance des espèces.	204
7.58	Cas R-3D-TD-0.35. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.1 (+)$, $0.2 (\times)$, $0.3 (*)$, $0.4 (\square)$, $0.5 (\blacksquare)$, $0.6 (\circ)$, $0.7 (\bullet)$, $0.8 (\triangle)$, $0.9 (\blacktriangle)$	206
7.59	Cas R-3D-TD-0.70. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.58.	207
7.60	PDFs de la fraction de mélange (a) et la variable de mélange (b) dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.58.	208
7.61	PDF de la fraction de mélange (cas R-3D-TD-0.35) et la variable de mélange (cas R-3D-TD-0.70) fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.3$ (—), 0.5 (- -), et différents $M_c = 0.35$ (■), 0.70 (●).	208
7.62	Bilan de l'équation de transport de la variance d'un scalaire, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production (—), de transport (- -), de diffusion ($\cdot \cdot \cdot$) et de dissipation (---). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.	210
7.63	Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_{Y_α} normalisée par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Contribution instantanée (—) et moyenne (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.	211
7.64	Bilan de l'équation de transport de la variance de la fraction et la variable de mélange, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production (—), de transport (- -), de diffusion ($\cdot \cdot \cdot$) et de dissipation (---). Figure (a) : fraction de mélange transportée (■) et variable de mélange calculée (◇). Figure (b) : variable de mélange calculée (●).	213

7.65	Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_z , normalisé par $\rho_0\Delta U/\delta_\omega$. Figures (a)–(b) : terme I (—) et II (- -). Figures (c)–(d) : terme III (—), IV (- -) et V ($\cdot\cdot\cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.64.	213
7.66	Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0\Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot\cdot\cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.	215
7.67	Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0\Delta U$ et tracés en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 7.66.	216
7.68	Profils de flux scalaires de la fraction et la variable de mélange, normalisés par $\rho_0\Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale et la vari- able de mélange. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot\cdot\cdot$). Figures (a)–(b) : fraction de mélange transportée (■) et variable de mélange calculée (\diamond). Figures (c)–(d) : variable de mélange calculée (\bullet).	217
7.69	Vérification de la loi gradient. Composante longitudinale de flux (a) : $\langle u_1''z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_1) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$. Composante transversale de flux (b) : $\langle u_2''z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_2) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$	218
7.70	Champs instantanés de dilatation normalisés par $\Delta U / \delta_{\omega,0}$ avec superposi- tion des isolignes de pression (figures (a) et (c)) et champs instantanés de gradient normalisé de pression (figures (b) et (d)).	218

Liste des symboles

Abréviations

ACM	<i>Artificial compression method</i>
BDF	<i>Backward differentiation formula</i>
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CG	Chimie globale
CREAMS	<i>Compressible reactive multi-species solver</i>
CD	Chimie détaillée
CPU	Central processing unit
DNS	<i>Direct numerical simulation</i>
ENO	<i>Essentially non-oscillatory</i>
F ₀	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
I	Inerte
LES	<i>Large eddy simulation</i>
LLF	<i>Local Lax-Friedrichs</i>
MPI	<i>Message passing interface</i>
M _α	α ^{ème} espèce
N ₂	Symbole chimique du diazote
NO	Symbole chimique du monoxyde d'azote

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 hydroxyde
ODE	<i>Ordinary differential equation</i>
Pdf	<i>Probability density function</i>
PSR	<i>Perfectly stirred reactor</i>
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier-Stokes</i>
R	Réactif
Rms	<i>Root mean square</i>
RK	Runge-Kutta
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

α_z	Coefficient de diffusion de la fraction de mélange
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
ΔU	Différence de vitesse des écoulements d'entrée de la couche de mélange
Δx_i	Pas de discrétisation spatiale dans la $i^{\text{ème}}$ direction
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
δ_θ	Epaisseur de quantité de mouvement
δ_ω	Epaisseur de vortacité
ϵ	Terme de dissipation de k
ϵ_{ij}	Terme de dissipation de $\langle \rho \rangle R_{ij}$

ε	Paramètre du schéma WENO7 évitant la division par zéro
η	Rapport de vitesses de la couche de mélange
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
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
Π	Terme de pression-dilatation de k
Π_{ij}	Terme de pression-dilatation de $\langle \rho \rangle R_{ij}$
ρ	Masse volumique du mélange
Σ	Terme de couplage du flux massique de k
Σ_{ij}	Terme de couplage du flux massique de $\langle \rho \rangle R_{ij}$
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
ϕ	Richesse
χ	Taux de dissipation scalaire
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
Da	Nombre de Damköhler
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)
M_c	Nombre de Mach convectif
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	Terme de production de k
P_{ij}	Terme de production de $\langle \rho \rangle R_{ij}$
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
$R_{i,f}$	Corrélation en deux points de la quantité f dans la $i^{\text{ème}}$ direction
R_{ij}	Tenseur de contraintes de Reynolds
Re_λ	Nombre de Reynolds de la micro-échelle de Taylor
Re_ω	Nombre de Reynolds basé sur δ_ω et Δu
S	Vecteur de termes sources
Sc	Nombre de Schmidt
s_L	Vitesse de flamme laminaire
T	Température (ou terme de transport de k)
T_{ij}	Terme de transport de $\langle \rho \rangle R_{ij}$
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
z	Fraction (ou variable) de mélange

Autres notations

$\langle \bullet \rangle$	Moyenne au sens de Reynolds
$\langle \bullet \rangle_f$	Moyenne au sens de Favre
\bullet'	Fluctuation de Reynolds
\bullet''	Fluctuation de Favre

Indices

C	Combustible
f	Etat de formation
mr	<i>Most reactive</i>
O	Oxydant
P	Produits
ref	Etat de référence
s	Forme caractéristique
st	Stœchiométrique
1	Ecoulement rapide de la couche de mélange
2	Ecoulement lent de la couche de mélange
∞	Etat à l'infini

Exposants

*	Forme adimensionnelle
0	Valeur à $T^0 = 298 \text{ K}$ et $p^0 = 101325 \text{ Pa}$

Chapitre 1

Introduction

Un moteur scramjet ou superstatoréacteur est une variante du moteur ramjet (statoréacteur) dans lequel la combustion a lieu dans un écoulement supersonique. Les engins propulsés par ce type de moteur peuvent opérer à des vitesses de vol très importantes avec une bonne efficacité. Théoriquement, ces vitesses correspondent à des plages de Mach 12 et Mach 24. Ainsi, une chambre de combustion scramjet est complètement différente des chambres conventionnelles actuelles où le combustible est brûlé à faible vitesse (approximativement Mach 0.2). Ces vitesses très faibles permettent un bon mélange entre le combustible et l'oxydant, ce qui se traduit par un bon rendement de la combustion. Au fur et à mesure que la vitesse de vol augmente, la vitesse de l'écoulement dans la chambre de combustion augmente aussi. Le ramjet permet la combustion subsonique en vol supersonique par décélération de l'écoulement d'air en entrée de la chambre de combustion. Cependant, ce processus de ralentissement dans les chambres combustion des moteurs ramjet provoque, entre autres, des pertes de pression qui réduisent significativement la poussée et l'efficacité des moteurs. Le scramjet remplace le ramjet comme solution de vol hypersonique.

Tandis que le concept du moteur scramjet est en réalité très simple, la mise en œuvre actuelle est très limitée due à différentes contraintes technologiques. Le vol hypersonique dans l'atmosphère génère une traînée très importante, ce qui peut augmenter considérablement la température des avions équipés avec ce propulseur. Des autres problèmes sont liés à l'établissement précis d'un bilan propulsif. De plus, pour entretenir un processus de combustion supersonique, il est nécessaire d'injecter, mélanger et brûler le mélange dans des temps de l'ordre de la milliseconde. Ainsi, même si la conception des moteurs scramjet a débuté dans les années cinquante, seul de récents scramjets ont réalisé le vol hypersonique propulsé. Quelques exemples sont : le superstatoréacteur RESTM12, la première démonstration du projet HYSHOT (2002) ou le vol de l'engin NASA X-43 (2004). Néanmoins, beaucoup de difficultés doivent être résolues avant que la mise en fonctionnement commerciale de ces engins soit possible.

Le combustible de référence pour les superstatoréacteurs est l'hydrogène. Une des raisons principales est due à 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. En outre, l'hydrogène présente des temps d'auto-ignition très faibles. La combustion entre l'hydrogène et l'air est donc un processus déterminant pour les performances propulsives d'un moteur scramjet. Comme la combustion requiert le mélange efficace des réactifs à l'échelle moléculaire (micro-mélange), la stratégie à suivre pour améliorer la combustion supersonique est la compréhension des mécanismes fondamentaux mis en jeu dans ce processus. Dans les moteurs ramjet et scramjet, des couches de mélange se développent entre l'écoulement de carburant (hydrogène) injecté dans la chambre de combustion et l'écoulement d'oxydant (air). L'interaction entre les processus chimiques, la turbulence et la compressibilité modifie la structure classique des couches de mélange. Dans ce type d'écoulements, les conditions locales permettent au mélange de s'auto-inflammer, ou bien l'allumage peut s'initier aussi par augmentation de température issue d'un impact par choc, si l'écoulement est suffisamment compressible.

La simulation numérique directe ou DNS est un outil très puissant capable de prédire complètement les écoulements turbulents. Ceci est possible lorsque toutes les échelles caractéristiques de la turbulence sont résolues. Ces simulations sont donc très coûteuses et, dans la plus grande majorité des situations, des simplifications sont introduites afin d'alléger les calculs. Néanmoins, nous avons tenté de les limiter pour les simulations conduites dans ce travail. Ainsi, la haute précision des schémas numériques employés est combinée à la description la plus détaillée des termes de transport moléculaire et des processus chimiques. Ceci est possible grâce à l'élaboration d'algorithmes originaux permettant d'augmenter le rendement des simulations sans dégrader la qualité des solutions. Les simulations numériques réactives tridimensionnelles ainsi obtenues font partie d'un récent groupe de simulations dénommées "terascale high-performance computing".

Ce travail a tout d'abord consisté à développer et valider un outil de calcul numérique permettant d'effectuer des simulations numériques directes de mélanges compressibles multi-espèces réactifs. La principale contribution de ce travail a alors été l'étude des couches de mélange inertes et réactives, bidimensionnelles et tridimensionnelles, sur la base d'une description précise des termes de transport moléculaire et d'une cinétique chimique simplifiée ou détaillée, à l'aide des simulations numériques directes. Un phénomène déjà bien connu est la diminution du taux de croissance des couches de mélange avec la compressibilité, c'est-à-dire avec l'augmentation de la différence de vitesse entre les deux écoulements composant la couche de mélange. Ce mécanisme est étudié en détail dans ce travail. De la même manière, l'influence du taux de dégagement de chaleur sur la turbulence considérant deux types de chimie et, notamment l'influence sur le taux de croissance, sont aussi analysées à partir des bases de données issues des simulations.

Des études expérimentales et numériques portant sur le développement des couches de mélanges compressibles à haute vitesse, inertes et réactives, peuvent être trouvées dans la littérature. De manière générale, ces travaux ont été consacrés à l'influence de la compressibilité et du taux de dégagement de chaleur sur le développement des couches. Cependant, même les simulations numériques les plus récentes ne sont pas capables de reproduire fidèlement certaines caractéristiques de ce type d'écoulements. Ces écarts peuvent être associées aux différentes types d'hypothèses simplificatrices introduites : développe-

ment temporel, emploi d'une chimie globale ou encore lois de transport simplifiées. Un des objectifs de ce travail est de valider les résultats obtenus, en utilisant une description physique des équations la plus complète possible, par rapport à ceux issues des expériences en laboratoire ainsi que de mettre en évidence les différences observées par rapport à d'autres simulations introduisant des simplifications.

En dehors de cette introduction très générale, qui constitue le premier chapitre de thèse, ce manuscrit est décomposé en quatre parties articulées sur sept chapitres. La première partie de cette thèse, regroupant les chapitres 2–3, est dédiée à la description des équations à résoudre et les algorithmes numériques implémentés dans le code de calcul CREAMS développé dans le cadre de cette thèse. La deuxième partie, intégrée dans le chapitre 4, est consacrée à la vérification rigoureuse de cet outil, qui est utilisé dans la suite. Le chapitre 5 (troisième partie) est dédié à l'étude des couches de mélanges compressibles bidimensionnelles, inertes et réactives. La dernière partie est constituée des chapitres 6–7. Le chapitre 6 concerne les couches de mélange compressibles tridimensionnelles inertes et, le chapitre 7, les couches de mélange compressibles tridimensionnelles réactives. En dehors d'un récapitulatif à la fin de chaque chapitre, le chapitre 8 recueille finalement les conclusions générales de ces travaux ainsi que les perspectives portant sur de futures études.

Chapitre 2

Equations et modèles mathématiques

2.1 Introduction

Ce chapitre traite les différentes équations utilisées pour la modélisation des écoulements tridimensionnels compressibles des mélanges réactifs des gaz. La description détaillée et simplifiée des termes de transport est présentée, tandis que le modèle cinétique est basé sur un mécanisme réactionnel composé des différentes étapes réactionnelles élémentaires.

La section 2.2 présente les équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives pour un écoulement tridimensionnel décrivant un mélange des gaz réactifs. Les propriétés thermodynamiques du mélange sont étudiées dans la section 2.3 tandis que les propriétés de transport détaillé et simplifié sont présentées, respectivement, dans les sections 2.4 et 2.5. Le modèle de cinétique chimique est étudié dans la section 2.6. La dernière partie de ce chapitre présente un récapitulatif des équations et modèles utilisés.

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

Le système d'équations décrivant un écoulement tridimensionnel, instationnaire, compressible, turbulent et visqueux composé de N espèces réactives, où les forces volumiques et le transfert d'énergie par rayonnement sont négligeables, est considéré dans cette section. Ce système de lois de conservation est basé sur les variables indépendantes suivantes (appelées aussi variables conservées) : la masse volumique ρ , les quantités de mouvement ρu_i , les fractions massiques d'espèces pondérées par la masse volumique ρY_i et enfin l'énergie spécifique totale pondérée par la masse volumique ρe_t . Il peut s'écrire sous la forme

suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t + p) u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho Y_\alpha V_{\alpha j}}{\partial x_j} + \rho \dot{\omega}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (2.4)$$

La première équation du modèle de Navier-Stokes traduit la conservation de la masse 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 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 des espèces.

Dans la suite, la convention de sommation d'Einstein est appliquée aux coordonnées spatiales et pas aux indices grecs (α, β, \dots) qui désignent les différentes espèces. Ces espèces, appelées également scalaires actifs, ne modifient pas seulement l'écoulement par le biais de sa masse volumique en conséquence de leurs différentes masses molaires, mais aussi par ses 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 d'un mélange des gaz idéaux

$$p = \frac{\rho RT}{W}, \quad (2.5)$$

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

$$W = \sum_{\alpha=1}^N X_\alpha W_\alpha = \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1}, \quad (2.6)$$

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

$$e_t = e + \frac{u_i u_i}{2}, \quad (2.7)$$

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

$$e = h - \frac{p}{\rho}. \quad (2.8)$$

L'écriture du bilan d'énergie (2.3) 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 (2.1)–(2.4), 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. En outre, le système (2.1)–(2.4) reste surdéterminé : il y a N fractions massiques à déterminer avec (2.4) 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 (2.1) est retrouvée. Ceci montre qu'il n'existe effectivement que N équations indépendantes et, donc, soit le bilan de la masse totale (2.1), soit une équation parmi les N relations (2.4) est inutile.

Finalement, le système d'équations (2.1)–(2.4) est adimensionné dans le code de calcul qui sera décrit dans le chapitre suivant. Plus de détails concernant cette adimensionnement sont donnés dans l'annexe A.

2.3 Propriétés thermodynamiques

La valeur de l'enthalpie du mélange est nécessaire pour un calcul correct de l'énergie interne (2.8). L'enthalpie de chaque espèce est calculée à partir de l'expression suivante

$$\begin{aligned} h_\alpha(T) &= \Delta h_{f\alpha}^0 + \int_{T_0}^T c_{p\alpha}(T^*) dT^* \\ &= \frac{R}{W_\alpha} \left(a_{6\alpha} + a_{1\alpha}T + a_{2\alpha}\frac{T^2}{2} + a_{3\alpha}\frac{T^3}{3} + a_{4\alpha}\frac{T^4}{4} + a_{5\alpha}\frac{T^5}{5} \right), \end{aligned} \quad (2.9)$$

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

$$c_{p\alpha}(T) = \frac{R}{W_\alpha} \left(a_{1\alpha} + a_{2\alpha}T + a_{3\alpha}T^2 + a_{4\alpha}T^3 + a_{5\alpha}T^4 \right). \quad (2.10)$$

Les valeurs des coefficients $a_{n\alpha}$ sont données dans les tables de JANAF [162]. 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

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha. \quad (2.11)$$

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

$$c_p = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha c_{p\alpha}, \quad (2.12)$$

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

$$c_v = c_p - \frac{R}{W}. \quad (2.13)$$

D'après la relation (2.9), 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 (2.7). 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.

2.4 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 [46, 47]. Cette stratégie utilise une méthode itérative pour obtenir une solution approchée aux systèmes de transport linéaires.

Le tenseur des contraintes visqueuses est donné par

$$\tau_{ij} = \kappa S_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \left(S_{ij} - \frac{S_{kk}}{3} \delta_{ij} \right), \quad (2.14)$$

où κ et μ sont la viscosité dynamique et volumique, respectivement. δ_{ij} est le symbole de Kronecker et S_{ij} est la partie symétrique du tenseur de taux de déformation

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.15)$$

Les flux de diffusion d'espèces est donné par

$$\begin{aligned} \rho Y_\alpha V_{\alpha j} &= - \sum_{\beta=1}^N \rho \tilde{D}_{\alpha\beta} d_{\beta j} - \rho Y_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \\ &= - \sum_{\beta=1}^N \rho \tilde{D}_{\alpha\beta} \left(d_{\beta j} + \frac{X_\beta \tilde{\chi}_\beta}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

avec le vecteur de diffusion défini comme

$$d_{\beta j} = \frac{\partial X_\beta}{\partial x_j} + \frac{X_\beta - Y_\beta}{p} \frac{\partial p}{\partial x_j}. \quad (2.17)$$

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 (2.16)–(2.17) 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

$$\begin{aligned} q_j &= -\lambda' \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha - p \sum_{\alpha=1}^N \theta_\alpha d_{\alpha j} \\ &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha + p \sum_{\alpha=1}^N \chi_\alpha V_{\alpha j} \\ &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} \left(h_\alpha + \frac{RT \tilde{\chi}_\alpha}{W_\alpha} \right), \end{aligned} \quad (2.18)$$

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 [47]. Dans la suite, cette description des termes de transport sera désignée par "transport détaillé".

2.5 Propriétés de transport simplifié

Cette description simplifiée des termes de transport néglige la viscosité volumique du tenseur des contraintes visqueuses (2.14) ainsi que les effets Soret et Dufour. Dans cette approche, les coefficients de transport de chaque espèce sont déterminés explicitement à l'aide des expressions issues de la théorie cinétique des gaz. Une formulation moyenne du mélange [87] est retenue pour la description des flux de diffusion d'espèces en remplaçant (2.16) par une version *modifiée* de l'approche de Hirschfelder et Curtiss [77]

$$\begin{aligned} \rho Y_\alpha V_{\alpha j} &= -\rho D_{m\alpha} \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha V_c \\ &= -\rho D_{m\alpha} \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha \sum_{\beta=1}^N D_{m\beta} \frac{W_\beta}{W} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

qui compte avec le dernier terme correctif pour assurer la conservation de la masse globale du mélange [133], *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, $D_{m\alpha}$, en négligeant les effets de diffusion différentielle.

Le flux de chaleur est simplifié à l'expression

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N \rho Y_\alpha V_{\alpha j} h_\alpha. \quad (2.20)$$

Les expressions des coefficients de transport μ et λ varient par rapport à celles correspondantes à la description détaillée. Ceux-ci sont évalués, avec $D_{m\beta}$, à l'aide de la librairie CHEMKIN. Les expressions de ces quantités peuvent être retrouvées dans les références [86, 87]. La description des termes de transport présentée dans cette section sera désignée dans la suite par “transport simplifié”.

2.6 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

$$\sum_{\alpha=1}^N \nu'_{\alpha,i} M_{\alpha} \rightleftharpoons \sum_{\alpha=1}^N \nu''_{\alpha,i} M_{\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_r. \quad (2.22)$$

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

$$q_i = k_{f,i} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu'_{\alpha,i}} - k_{r,i} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu''_{\alpha,i}}, \quad (2.23)$$

$k_{f,i}$ 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

$$k_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_{A_i}}{RT}\right), \quad (2.24)$$

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 supposées indépendantes de la température. Les constantes de vitesse de réaction directe et inverse sont liées par la constante d'équilibre $k_{ci} = k_{f,i} / k_{r,i}$. 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

$$\dot{\omega}_{\alpha} = \sum_{i=1}^{N_r} \dot{\omega}_{\alpha,i} = \sum_{i=1}^{N_r} (\nu''_{\alpha,i} - \nu'_{\alpha,i}) q_i, \quad (2.25)$$

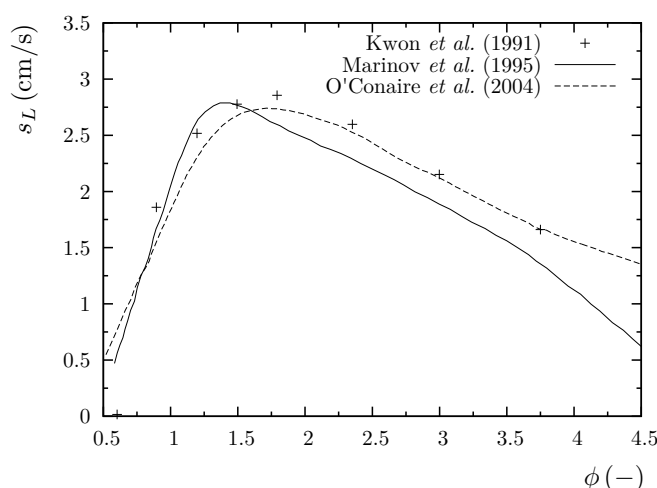


FIGURE 2.1 – Vitesse de flamme laminaire de prémélange en fonction de la richesse mesurée expérimentalement (Kwon & Faeth [89]) et calculée à partir de différents schémas cinétiques [102, 119] à l’aide de la librairie CHEMKIN.

et le taux de dégagement de chaleur est calculé comme

$$\dot{\omega}_0 = - \sum_{\alpha=1}^N \Delta h_{f\alpha}^0 \dot{\omega}_\alpha. \quad (2.26)$$

L’expression générale du taux de réaction (2.23) peut être modifiée en fonction du schéma cinétique considéré [86]. 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 (2.23).

Dans la littérature, ils existent plusieurs schémas cinétiques permettant de modéliser des processus chimiques des mélanges d’hydrogène-air : Miller *et al.* [109], Westbrook & Dryer [174], Maas & Warnatz [99], etc. . . Deux schémas cinétiques ont été retenus pour la simulation numérique des couches de mélange réactives. Le premier est le schéma cinétique global de Marinov *et al.* [102], composé d’une seule étape réactionnelle globale faisant intervenir 4 espèces. Ce schéma simplifié a été validé avec des données expérimentales (voir figure 2.1) en ajustant les coefficients de réaction pour obtenir des vitesses de flamme laminaire représentatives des expériences [5, 41, 43, 89, 165]. En particulier, il montre des bons résultats de vitesses de flamme à 1 bar et des valeurs de richesse comprises entre 0.6 et 1.1. Le schéma de Marinov peut être considéré comme une référence parmi les différents schémas globaux utilisés pour étudier la combustion d’hydrogène-air. Il continue à être utilisé dans la littérature la plus récente [2, 7, 56, 182]. Le deuxième schéma cinétique retenu est celui de Ó Conaire *et al.* [119] qui comporte 21 réactions élémentaires et 10 espèces. Ce schéma assez récent est basé sur le mécanisme réactionnel de Mueller *et al.* [114] 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.

Les description détaillée des schémas cinétiques utilisés dans ce travail est présentée dans l'annexe C.

2.7 Récapitulatif

Les équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives pour un écoulement tridimensionnel décrivant un mélange des gaz réactifs ont été présentées. Ces équations ont été adimensionnées dans l'annexe A. Les propriétés des différentes espèces chimiques composant le mélange sont présentées sous forme polynomiale [162]. Les propriétés de transport détaillé sont calculées à l'aide de la librairie EGLIB [47] tandis que la librairie CHEMKIN [87] est utilisée pour évaluer les propriétés de transport simplifié et la cinétique chimique considérée à partir des différents mécanismes réactionnels retenus, montrés dans l'annexe C.

Chapitre 3

Méthodes numériques

3.1 Introduction

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.* (2011) [149], portant sur des écoulements inertes d'air. Ces outils ont été étendus et optimisés pour l'étude d'écoulements réactifs multi-espèces. 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 chimiques est décrite par l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} = \frac{\partial G_j}{\partial x_j} + S. \quad (3.1)$$

Cette équation comporte trois termes qui ont des propriétés mathématiques très 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 (3.1), 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 3.2 tandis que celui utilisé pour évaluer les flux moléculaires est décrit dans la section 3.3. La section 3.4 détaille l'intégration temporelle des contributions inertes et réactives de (3.1) tandis que les critères de stabilité numérique limitant le pas de discrétisation temporel sont donnés dans la section 3.5. Une méthode itérative est utilisée dans la section 3.6 pour la détermination de la température du mélange. Les conditions aux limites utilisées sont décrites dans la section 3.7. Finalement, la section 3.8 présente un récapitulatif des méthodes numériques utilisées.

3.2 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. Pour simplifier l'écriture des équations, seule la première direction de l'espace sera considérée. Dans cette direction, la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes (2.1)–(2.4) peut s'exprimer sous forme conservative comme

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (3.2)$$

où Q est le vecteur des variables conservées

$$Q = (\rho, \rho u_1, \rho e_t, \rho Y_1, \dots, \rho Y_N)^t, \quad (3.3)$$

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

$$F = u_1 Q + p(0, 1, u_1, 0, \dots, 0)^t. \quad (3.4)$$

L'équation (3.2) est résolue numériquement dans un domaine de calcul discrétisé régulièrement en N points, $x_i = i\Delta x$ pour $i = 1, \dots, N$, avec Δx étant le pas de discrétisation spatiale. L'approximation numérique Q_i de la solution exacte Q satisfait le système d'équations différentielles ordinaires

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = L(Q_i) = -\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}), \quad (3.5)$$

aussi appelée forme semi-discrète du système (3.2). 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. Des travaux qui ont été d'une grande importance pour le développement du schéma WENO présenté dans ce manuscrit sont : Crnjaric-Zic *et al.* [30], Shi *et al.* [151], Shu *et al.* [153], Titarev & Toro [164], Xu & Shu [176] et Zhang *et al.* [181] entre autres.

La famille des schémas ENO (*essentially non-oscillatory*) et WENO (*weighted essentially non-oscillatory*) d'ordre élevé a été développée dans le but de résoudre des écoulements complexes comportants de forts gradients, *e.g.* ondes de choc, discontinuités de contact, etc. Les schémas ENO, introduits par Harten *et al.* [69], utilisent un algorithme local non linéaire pour choisir un stencil candidat évitant ainsi les possibles discontinuités dans les solutions lors de l'interpolation des flux numériques. Selon que le stencil est proche ou plus éloigné d'une discontinuité, un poids très faible ou plus fort lui sera respectivement associé par cet algorithme. Les flux numériques calculés avec cette procédure n'introduisent pas d'oscillation non physique. Les schémas WENO, introduits par Liu *et al.* [94], constituent une amélioration des schémas ENO car ils utilisent une

superposition de tous les stencils candidats pour l'interpolation des flux, au lieu d'un seul stencil utilisé dans la procédure des schémas ENO. Ceci veut dire que 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, proche des discontinuités, l'ordre de précision du schéma est réduit. Cette ordre peut diminuer jusqu'à celui du schéma ENO équivalent dans le cas où un seul stencil candidat est choisi 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 (3.5) est possible ; cependant, pour éviter des oscillations en raison des discontinuités présentes 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 (3.2), exprimé sous forme conservative, peut être réécrit sous forme caractéristique. Pour ce faire, il suffit de multiplier le système (3.2) par la matrice des vecteurs propres à droite R^{-1} du jacobien du flux

$$R^{-1} \frac{\partial Q}{\partial t} + R^{-1} \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F_s}{\partial x} = 0, \quad (3.6)$$

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 l'annexe B. Le flux caractéristique est discrétisé selon

$$\frac{\partial F_s}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{s,i+1/2} - \hat{f}_{s,i-1/2}), \quad (3.7)$$

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

$$F_s(W) = F_s^+(W) + F_s^-(W), \quad (3.8)$$

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*)

$$F_s^\pm(W) = \frac{1}{2} (F_s(W) \pm \|\Lambda\|_{\max} W), \quad (3.9)$$

avec $\Lambda = dF_s(W)/dW$ étant la matrice des valeurs propres du système (3.2).

Les flux caractéristiques numériques correspondant, $\hat{f}_{s,i+1/2}^\pm$ 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 $r = 4$ re-

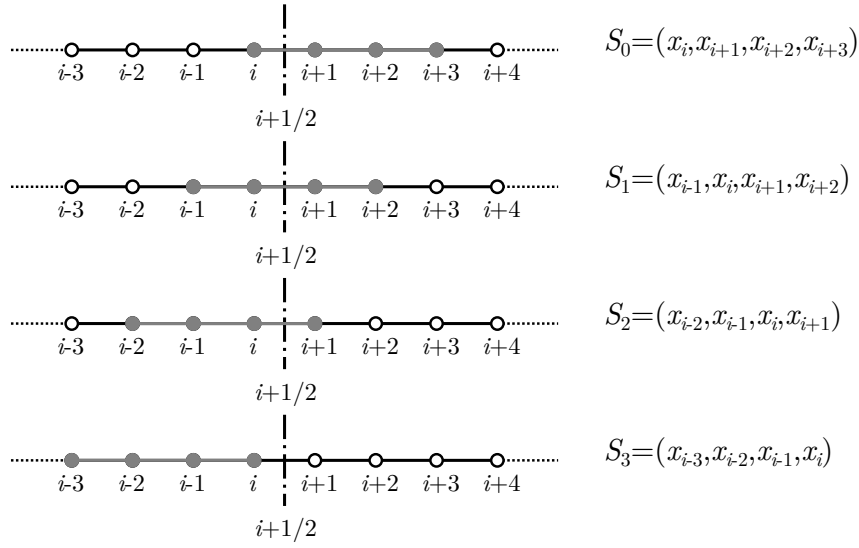


FIGURE 3.1 – Stencils candidats pour l'évaluation du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$ par interpolation essentiellement non oscillante du schéma WENO7.

tient un seul stencil parmi les r stencils candidats, $S_k = (x_{i+k-r+1}, x_{i-k+r+2}, \dots, x_{i+k})$ 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 tous les stencils candidats

$$\hat{f}_{s,i+1/2}^+ = \sum_{k=0}^{r-1} \omega_k^r \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(k)}, \quad (3.10)$$

avec

$$\hat{f}_{s,i+1/2}^{+(k)} = \sum_{l=0}^{r-1} a_{kl}^r F_s^+(W(x_{i+k-r+1+l})). \quad (3.11)$$

Dans les régions où l'écoulement ne contient pas de discontinuité, les poids pondérant la contribution du flux provenant de chaque stencil

$$\omega_k^r = \frac{\alpha_k^r}{\sum_{m=0}^{r-1} \alpha_m^r}, \quad (3.12)$$

avec

$$\alpha_k^r = \frac{d_k^r}{(\beta_k^r + \varepsilon)^p}, \quad (3.13)$$

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 vont : $d_0^4 = 1/35$, $d_1^4 = 12/35$, $d_2^4 = 18/35$ et $d_3^4 = 4/35$. Le paramètre ε évite la division par zéro dans (3.13) et il est pris égal à 10^{-10} dans ce travail, sauf indication contraire. Les valeurs des coefficients a_k^r sont données dans le tableau 3.1. Les coefficients β_k mesurent la continuité de la solution et son expression analytique est donnée par

$$\beta_k^r = \sum_{m=1}^{r-1} \Delta x^{2m-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^l F_s^{+(k)}}{dx^m} \right)^2 dx. \quad (3.14)$$

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

$$\begin{aligned}\beta_0^4 &= F_{s,i-3}^+(547F_{s,i-3}^+ - 3882F_{s,i-2}^+ + 4642F_{s,i-1}^+ - 1854F_{s,i}^+) \\ &\quad + F_{s,i-2}^+(7043F_{s,i-2}^+ - 17246F_{s,i-1}^+ + 7042F_{s,i}^+) \\ &\quad + F_{s,i-1}^+(11003F_{s,i-1}^+ - 9402F_{s,i}^+) \\ &\quad + F_{s,i}^+(2107F_{s,i}^+),\end{aligned}\tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}\beta_1^4 &= F_{s,i-2}^+(267F_{s,i-2}^+ - 1642F_{s,i-1}^+ + 1602F_{s,i}^+ - 494F_{s,i+1}^+) \\ &\quad + F_{s,i-1}^+(2843F_{s,i-1}^+ - 5966F_{s,i}^+ + 1922F_{s,i+1}^+) \\ &\quad + F_{s,i}^+(3443F_{s,i}^+ - 2522F_{s,i+1}^+) \\ &\quad + F_{s,i+1}^+(547F_{s,i+1}^+),\end{aligned}\tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}\beta_2^4 &= F_{s,i-1}^+(547F_{s,i-1}^+ - 2522F_{s,i}^+ + 1922F_{s,i+1}^+ - 494F_{s,i+2}^+) \\ &\quad + F_{s,i}^+(3443F_{s,i}^+ - 5966F_{s,i+1}^+ + 1602F_{s,i+2}^+) \\ &\quad + F_{s,i+1}^+(2843F_{s,i+1}^+ - 1642F_{s,i+2}^+) \\ &\quad + F_{s,i+2}^+(267F_{s,i+2}^+),\end{aligned}\tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}\beta_3^4 &= F_{s,i}^+(2107F_{s,i}^+ - 9402F_{s,i+1}^+ + 7042F_{s,i+2}^+ - 1854F_{s,i+3}^+) \\ &\quad + F_{s,i+1}^+(11003F_{s,i+1}^+ - 17246F_{s,i+2}^+ + 4642F_{s,i+3}^+) \\ &\quad + F_{s,i+2}^+(7043F_{s,i+2}^+ - 3882F_{s,i+3}^+) \\ &\quad + F_{s,i+3}^+(547F_{s,i+3}^+).\end{aligned}\tag{3.18}$$

Après le calcul des flux caractéristiques numériques, $\hat{f}_{s,i+1/2} = \hat{f}_{s,i+1/2}^+ + \hat{f}_{s,i+1/2}^-$, la reconstruction des flux conservatifs numériques se fait par une opération inverse, en multipliant (3.6) par la matrice de vecteurs propres à gauche R

$$R \frac{\partial W}{\partial t} + R \frac{\partial F_s}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0.\tag{3.19}$$

Plusieurs versions modifiées du schéma WENO (WENO-M, WENO-Z...) ont été proposées par différents auteurs [6, 71, 150]. Dans ce travail, la version utilisée du schéma WENO7 est celle proposée par Balsara & Shu [6]. Afin de diminuer la viscosité numérique introduite par le décentrage des stencils issue de la pondération non linéaire, une stratégie hybride a été retenue. Dans les régions de l'écoulement où il n'y a pas de discontinuité, le stencil centré du schéma ENO7 remplace le schéma WENO7 lors de l'évaluation des flux

TABLEAU 3.1 – 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

numériques. 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 . La détermination des discontinuités dans les solutions est réalisée à partir de l'évaluation des gradients normalisés locaux de pression et de masse volumique. Quand dans un point du domaine de calcul ces deux gradients normalisés dépassent une certaine valeur, *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 d'interpolation 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. Des différentes hybridations du schéma WENO avec des schémas centrés similaires à celle retenue dans ce travail peuvent être retrouvées dans la littérature [75, 130, 183].

3.3 Discrétisation spatiale des flux diffusifs

Les contributions moléculaires, incluant les termes visqueux et diffusifs du système (3.1), 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 étant le pas de discrétisation spatiale, l'approximation d'ordre 8 de la dérivée est donnée par

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_8(g_{i-4} - g_{i+4}) + b_8(g_{i-3} - g_{i+3}) + c_8(g_{i-2} - g_{i+2}) + d_8(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.20)$$

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 proche de frontières physiques du domaine de calcul. Un schéma centré d'ordre 6 est employé aux points $i = 4$ et $i = N - 3$

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_6(g_{i-3} - g_{i+3}) + b_6(g_{i-2} - g_{i+2}) + c_6(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.21)$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_4(g_{i-2} - g_{i+2}) + b_4(g_{i-1} - g_{i+1})], \quad (3.22)$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_{4l}g_{i-1} + b_{4l}g_i + c_{4l}g_{i+1} + d_{4l}g_{i+2} + e_{4l}g_{i+3}], \quad (3.23)$$

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

$$\frac{\partial G}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x} [a_{4u}g_i + b_{4u}g_{i+1} + c_{4u}g_{i+2} + d_{4u}g_{i+3} + e_{4u}g_{i+4}], \quad (3.24)$$

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 constante. Néanmoins, il est possible d'utiliser les expressions précédentes dans des maillages cartésiens non uniformes, permettant de concentrer 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

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi_i}{\partial \xi_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_i}, \quad (3.25)$$

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 lorsque ϕ est une fonction continue de ξ . Dans la pratique, ceci se traduit par des taux d'étirements des mailles réguliers et modérés.

3.4 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 caractéristique convectif et diffusif. La stratégie adoptée ici utilise la méthode *splitting* de Strang d'ordre 2 [50, 161]. Dans cette méthode explicite, après l'intégration de la partie inerte des équations du mouvement (termes convectifs et diffusifs), il est nécessaire de résoudre un ensemble d'équations différentielles ordinaires (ODE ou *ordinary differential equations*) concernant la partie réactive. 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 comme

$$Q^{n+1} = [L_r(\Delta t/2)L_i(\Delta t)L_r(\Delta t/2)] Q^n, \quad (3.26)$$

où L_r et L_i sont les opérateurs discrets correspondant à l'intégration du terme réactif et inerte, respectivement.

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

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

Dans le cas particulier d'un mélange multi-espèces (voir section 2.2), il peut s'écrire comme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j}, \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} = -\frac{\partial (\rho e_t + p) u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \rho Y_\alpha V_{\alpha j}}{\partial x_j}, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.31)$$

L'intégration des équations précédentes s'effectue à l'aide d'un schéma TVD (*total variation diminishing*) Runge-Kutta précis à l'ordre 3 [63]. L'avancement en temps du système (3.27) se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned} Q^{(1)} &= Q^n + \Delta t L_i(Q^n), \\ Q^{(2)} &= \frac{1}{4} [3Q^n + Q^{(1)} + \Delta t L_i(Q^{(1)})], \\ Q^{n+1} &= \frac{1}{3} [Q^n + 2Q^{(2)} + 2\Delta t L_i(Q^{(2)})], \end{aligned} \quad (3.32)$$

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

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = L_r(Q(t)) = S, \quad (3.33)$$

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

$$\frac{dT}{dt} = \frac{RT}{c_v} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\dot{\omega}_\alpha}{W_\alpha} - \frac{\sum_{\alpha=1}^N h_\alpha \dot{\omega}_\alpha}{c_v}, \quad (3.34)$$

$$\frac{dY_\alpha}{dt} = \dot{\omega}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (3.35)$$

et correspond aux équations décrivant la combustion adiabatique à volume constant d'un mélange de gaz réactifs. L'équation (3.33) 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 [22]. Cet algorithme est très similaire à celui de Livermore, LSODE [76], et peut être appliqué à des systèmes raides et non raides.

La résolution du système (3.33) 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 $Y_N = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N-1} Y_\alpha$. En outre, un double critère a été développé afin de déterminer les régions *suffisamment* réactives où effectuer l'intégration du système (3.33). Ainsi, les régions composées exclusivement d'oxydant pur ou combustible pur où le terme de production minimum d'une espèce, $\dot{\omega}_\alpha$, est inférieur à 10^{-12} s^{-1} ne sont pas prises en compte par ce critère. Cette méthode permet d'économiser d'importantes ressources de calcul car elle permet d'évaluer (3.33) seulement dans les régions susceptibles de réagir.

Finalement, la solution du système complet s'obtient par application de la méthode *splitting* de Strang (3.26) dans les étapes suivantes :

1. résolution du système (3.33) à partir des données initiales et un pas de temps $\Delta t/2$,
2. résolution du système (3.27) à partir de la solution obtenue dans (3.33) et un pas de temps Δt ,
3. résolution du système (3.33) à partir de la solution obtenue dans (3.27) et un pas de temps $\Delta t/2$.

3.5 Critères de stabilité numérique

Le solveur développé étant explicite, la restriction sur les pas de temps liée à la partie convective est assurée par le critère CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) défini comme

$$\text{CFL} = \max \left[(\sqrt{u_i u_i} + c) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right], \quad (3.36)$$

avec une valeur maximale fixée dans notre cas à $\text{CFL} \lesssim 0.9$, tandis que la restriction associée à la partie visqueuse est assurée par le nombre de Fourier, Fo, défini comme

$$\text{Fo} = \max \left[D_{m\alpha} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \frac{\lambda \Delta t}{\rho c_p \Delta x^2} \right], \quad (3.37)$$

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

Malgré le 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 et il est basé sur la température maximale atteinte dans la résolution de (3.33), ΔT_{max} , sur le pas temporel associé à la restriction du CFL, Δt_{CFL} , et celui du Fo, Δt_{Fo} . Il s'exprime sous la forme

$$\Delta T_{\text{permis}} = \Delta t \frac{\Delta T_{\text{max}}}{\min [\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Fo}}]}, \quad (3.38)$$

avec $\Delta T_{\text{permis}} \lesssim 20 \text{ K}$. Cette valeur est suffisamment faible pour capturer les processus

associés aux temps caractéristiques chimiques. Cependant, dans certains cas particuliers, le pas de discrétisation temporel donné par (3.38), Δt_R , peut être considérablement réduit en rendant les simulations irréalisables. Afin d'éviter cette situation, la valeur ΔT_{permis} peut être augmentée. La stratégie adoptée dans ce travail consiste à définir un pas temporel global minimum équivalent à celui qui aurait été obtenu avec les valeurs $\text{CFL} = 0.1$ et $\text{Fo} = 0.05$:

$$\Delta t = \max \left[\Delta t_{\text{CFL}} \frac{0.1}{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Fo}} \frac{0.05}{\text{Fo}}, \Delta t_R \right]. \quad (3.39)$$

3.6 Température du mélange

Comme indiqué dans la section 2.3, 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 obtenue par la racine de

$$f(T) = e_t + \frac{RT}{W} - h(T) - \frac{u_i u_i}{2}. \quad (3.40)$$

La dérivée de cette fonction par rapport à la température donne

$$f'(T) = \frac{df(T)}{dT} = -\frac{1}{\gamma(T) - 1}, \quad (3.41)$$

qui est une fonction décroissante de la température. L'équation (3.40) peut être résolue avec la méthode itérative de Newton-Raphson [3]

$$T^{n+1} = T^n - \frac{f(T^n)}{f'(T^n)}, \quad (3.42)$$

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.

3.7 Conditions aux limites

Dans cette section, le traitement des conditions aux limites d'entrée et de sortie, de paroi et périodiques 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. Il faut noter que, dans certains cas, cette restriction à une seule direction de l'espace constitue en elle-même une approximation [97].

3.7.1 Entrée

Selon la nature de l'écoulement, subsonique ou supersonique, différentes conditions aux limites d'entrée peuvent être envisagées. La méthode généralement utilisée est celle basée sur le signe des ondes caractéristiques, obtenu à partir des valeurs propres de la matrice jacobienne du système (voir annexe B). Pour des écoulements réactifs subsoniques, la méthode NSBSC (*Navier-Stokes characteristic boundary conditions*) [133] a été développée. Dans ce travail, des conditions d'entrée et de sortie supersoniques ont été retenues.

A l'entrée d'un écoulement supersonique, toutes les valeurs propres sont positives. Toutes les ondes caractéristiques associées à ces valeurs propres se propagent dans le sens de l'écoulement et les variables conservatives sont spécifiées en entrée du domaine, $i = 1$ et sur les points fantômes, $i = 0, \dots, -3$. Ces quatre points fantômes sont nécessaires lors de la procédure de calcul des poids des stencils du schéma WENO7 (voir section 3.2).

3.7.2 Sortie

La condition de sortie traitée dans les simulations présentées dans ce travail est celle correspondante à une sortie purement non réfléchissante. Comme pour les conditions d'entrée, cette condition est basée sur les ondes caractéristiques du système d'équations [163]. La méthode originale de Thompson [163] a été largement améliorée et étendue dans les cas tridimensionnelles [97, 133]. Le traitement de ces conditions est facilité par la décomposition caractéristique des flux convectifs dans la procédure de calcul adoptée par le schéma WENO7 (voir section 3.2 et l'annexe B). Pour mettre en place cette condition, il suffit d'annuler les amplitudes des ondes caractéristiques dont les valeurs propres associées sont négatives :

$$F_{s,m}^- = 0 \text{ si } \Lambda_m \leq 0, \quad m = 1, \dots, N + 5, \quad (3.43)$$

avec m étant l'indice des variables conservatives. Sur les points fantômes correspondant à cette frontière, des valeurs arbitraires sont appliquées au vecteur des variables conservées de manière à forcer le décentrage du schéma WENO7 vers les points intérieurs du domaine [152].

3.7.3 Paroi

En fonction du type de paroi considérée, glissante ou non, les conditions d'adhérence du fluide sont appliquées. Pour une paroi non glissante, ces conditions se traduisent par une vitesse nulle à la paroi, $u = 0$, alors que pour une paroi glissante, la condition $\partial u / \partial x = 0$ est utilisée. Des conditions de non-adsorption à la paroi sont utilisées pour les espèces chimiques, $\partial Y_\alpha / \partial x = 0$. La paroi étant considérée adiabatique, le flux thermique normal est nul, ce qui se traduit par $\partial T / \partial x = 0$ (la condition de non-adsorption des espèces étant également prise en compte). La pression, dont le gradient normal à la paroi est nul $\partial p / \partial x = 0$ (hypothèse de couche limite), amène à un gradient nul de la masse volumique à la paroi $\partial \rho / \partial x = 0$.

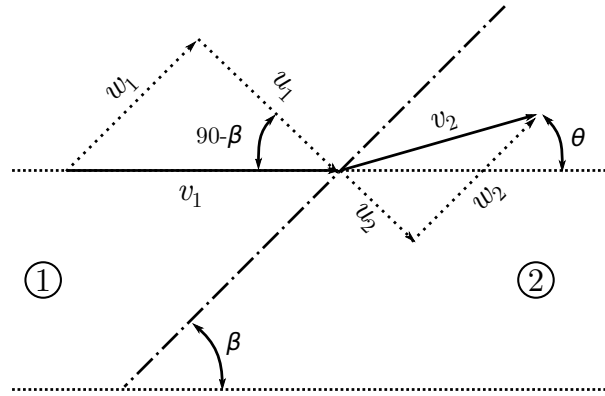


FIGURE 3.2 – Schéma d'un choc oblique formant un angle β par rapport à la direction de l'écoulement. Le nombre 1 désigne l'état de l'écoulement avant le choc et le nombre 2 l'état après le choc.

Dans la discrétisation spatiale du schéma WENO7, qui évalue les flux convectifs aux noeuds $i + 1/2$ et $i - 1/2$, voir l'équation (3.5), une paroi située au début du domaine de calcul se trouve désormais à l'interface $i = 1/2$. Ceci se traduit par l'imposition des variables conservatives suivantes aux points fantômes ($i = 0, \dots, -3$) : $\rho_i = \rho_1$, $(\rho u)_i = -(\rho u)_1$, $(\rho e_t)_i = (\rho e_t)_1$ et $(\rho Y_\alpha)_i = (\rho Y_\alpha)_1$. De la même manière, lors de l'évaluation des flux diffusifs au point $i = 1$ par le stencil décentrée d'ordre 4 (relation (3.24)), les conditions d'adhérence, non-adsorption et d'adiabacité sont appliquées.

3.7.4 Onde de choc oblique

Considérons une onde de choc oblique, avec un angle incident θ par rapport à la direction de l'écoulement, qui se propage de la droite vers la gauche à une vitesse moyenne v_1 (voir figure 3.2). En utilisant l'équation d'état des gaz parfaits, les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans le repère du choc à l'état stationnaire :

$$p_1/\rho_1 T_1 = p_2/\rho_2 T_2, \quad (3.44)$$

$$w_1 = w_2, \quad (3.45)$$

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2, \quad (3.46)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2, \quad (3.47)$$

$$h_1 + u_1^2/2 = h_2 + u_2^2/2, \quad (3.48)$$

avec $u_1 = v_1 \sin \beta$, $u_2 = v_2 \sin(\beta - \theta)$ et $\theta = \beta - \tan^{-1}(u_2 \tan \beta / u_1)$, il est possible de calculer l'état thermodynamique de l'écoulement après le passage de l'onde. Pour un mélange des gaz parfaits, le système d'équations précédente se réduit à calculer la racine de l'équation

$$f(\phi) = h_1 - h_2 + \frac{u_1^2}{2} \left(1 - \frac{\phi^2}{\psi^2} \right), \quad (3.49)$$

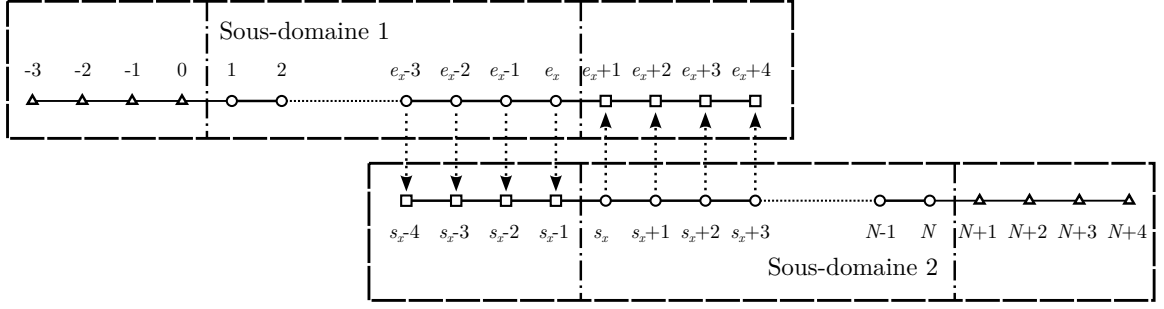


FIGURE 3.3 – Exemple de découpage en deux sous-domaines de calcul ($1, \dots, e_x$ et s_x, \dots, N , avec $e_x + 1 = s_x$) d'un domaine cartésien mono-dimensionnel composé de N points de calcul. Les carrés sont points virtuels où s'effectuent les communications entre les sous-domaines. Les triangles correspondent à des points fantômes, constituant les frontières physiques du domaine, nécessaires pour mettre en oeuvre les stencils du schéma WENO7.

avec $\phi = T_2/T_1$ et

$$\psi = \frac{p_2}{p_1} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} + \sqrt{\left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right)^2 - 4\alpha \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1}} \right). \quad (3.50)$$

L'équation (3.49) peut être résolue avec la méthode itérative de Newton-Raphson [3], de forme similaire au calcul de la température du mélange (voir section 3.6),

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \frac{f(\phi^n)}{f'(\phi^n)}, \quad (3.51)$$

où ϕ^1 est la valeur initiale, estimée à partir des relations de Rankine-Hugoniot pour un écoulement d'air pur avec des propriétés thermodynamiques indépendantes de la température, et

$$f'(\phi) = u_1^2 \left(\phi^2 \psi \psi' - \frac{\phi}{\psi^2} \right), \quad (3.52)$$

avec

$$\psi' = - \frac{\rho_1 u_1^2 / p_1}{\sqrt{\left(1 + \rho_1 u_1^2 / p_1 \right)^2 - 4\alpha \rho_1 u_1^2 / p_1}}. \quad (3.53)$$

3.7.5 Périodicité

Des conditions périodiques sont appliquées dans la direction de l'envergure de l'écoulement pour les simulations tridimensionnelles en configuration plane. Ces conditions sont prises en compte de façon automatique par l'implémentation MPI (*message passing interface*), nécessaire pour effectuer des calculs numériques parallèles. La figure 3.3 présente le schéma de communication entre deux sous-domaines de calcul utilisé par MPI. A l'aide de cette librairie, il est aussi possible de communiquer les points physiques du début du domaine ($i = 1, i = 2, i = 3$ et $i = 4$) et fin du domaine ($i = N, i = N - 1, i = N - 2$ et $i = N - 3$) avec les points fantômes du fin de domaine ($i = N + 1, i = N + 2, i = N + 3$ et

$i = N + 4$) et début du domaine ($i = 0$, $i = -1$, $i = -2$ et $i = -3$), de façon à considérer des conditions de périodicité.

3.8 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, concernant les termes de production chimiques. 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 ainsi que leur implémentation au sein du code de calcul.

Chapitre 4

Vérifications numériques du code de calcul CREAMS

4.1 Introduction

Cette section est consacrée à la vérification de cet outil par le biais de plusieurs *benchmarks* qui permettent d'évaluer indépendamment, puis conjointement, les différents termes des équations de Navier-Stokes : convectif, diffusif et réactif, ainsi que la librairie thermodynamique des mélanges multi-espèces. Une autre batterie de tests est proposée afin de vérifier certaines fonctionnalités développées dans ce travail de thèse qui permettent d'optimiser le rendement du solveur numérique.

La section 4.2 présente le populaire tube à choc de Sod pour évaluer les performances du schéma WENO7 face à la solution exacte de ce problème. La section 4.3 présente une étude du taux de convergence global du solveur numérique. Les sections 4.4–4.8 sont consacrées à la vérification indépendante de chacun des termes des équations de Navier-Stokes pour un mélange de gaz réactifs. L'étude d'une flamme laminaire de prémélange, où la contribution de chacun de ces termes est importante, est effectuée dans la section 4.9. Des vérifications concernant le critère de détection des discontinuités, employé dans l'approche hybride des flux convectifs, ainsi que la détection des régions réactives, lors de l'intégration implicite des termes réactifs, sont portées dans les sections 4.10 et 4.11, respectivement. Enfin, un test de scalabilité du code de calcul est présenté dans la section 4.12. Les résultats généraux issus de cet étude de vérification sont résumés à la fin du chapitre.

4.2 Tube à choc de Sod

Le premier test de validation est le populaire tube à choc de Sod. Il s'agit d'un problème standard pour vérifier le calcul correct de chocs forts, proposé initialement par Sod (1978) [155], et qui reste largement utilisé dans la communauté scientifique. Néanmoins, d'autres tests sont employés pour vérifier le comportement des schémas ENO et WENO d'ordre élevé comme celui concernant l'interaction choc-onde entropique [152]. Une liste

exhaustive des tests pour la vérification des performances du schéma WENO (et d'autres schémas de différences finies) a été élaborée par Liska & Wendroff [93]. Le but de cette section est de présenter uniquement un cas analytique pour vérifier les performances du schéma WENO7, hérité du code de calcul utilisé par Shahab *et al.* [149].

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 propagent un 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 :

$$Q(x, t = 0) = \begin{cases} Q_L & x \leq 0.5, \\ Q_R & x > 0.5, \end{cases} \quad (4.1)$$

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 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 4.1.

La solution numérique discrétisée, donnée par le schéma WENO7, reste assez proche de la solution exacte pour la discrétisation spatiale retenue. Cependant, un léger étalement de la solution est observable dans la région de la discontinuité de contact. Ce phénomène étant déjà bien connu, plusieurs auteurs ont proposé des méthodes pour réduire ces effets [6, 83, 152] comme la méthode de compression artificielle (ACM ou *artificial compression method*) initialement développée par Harten [67] et puis raffinée par Yang [178], ou bien la méthode de résolution sous-cellule de Harten [68]. En suivant les indications de Balsara & Shu [6], dans certains problèmes où la propagation très précise des discontinuités est fortement souhaitée, il semble préférable de les laisser propager de manière *naturelle* sur un nombre de points plus élevé en gardant une haute précision en phase plutôt que de propager les discontinuités *artificiellement* sur un nombre de points réduit en compromettant la précision en phase du schéma. Ceci est particulièrement important lors de la simulation des écoulements turbulents, où la qualité de la propagation de l'information dans l'écoulement influence de manière significative la précision des résultats. Pour cette raison, aucune des méthodes évoquées ci-dessus n'a été retenue dans ce travail.

4.3 Taux de convergence global

Le test précédent a démontré que, malgré quelques limitations associées à la représentation des discontinuités de contact, des résultats tout à fait satisfaisants peuvent être obtenus si le degré de résolution reste suffisant. Cette section a pour objectif de déterminer le taux de convergence global du code CFD. Des tests comparables de convergence pour le schémas WENO4 et WENO5 ont été présentés par Jiang & Shu [83] tandis que Henrick

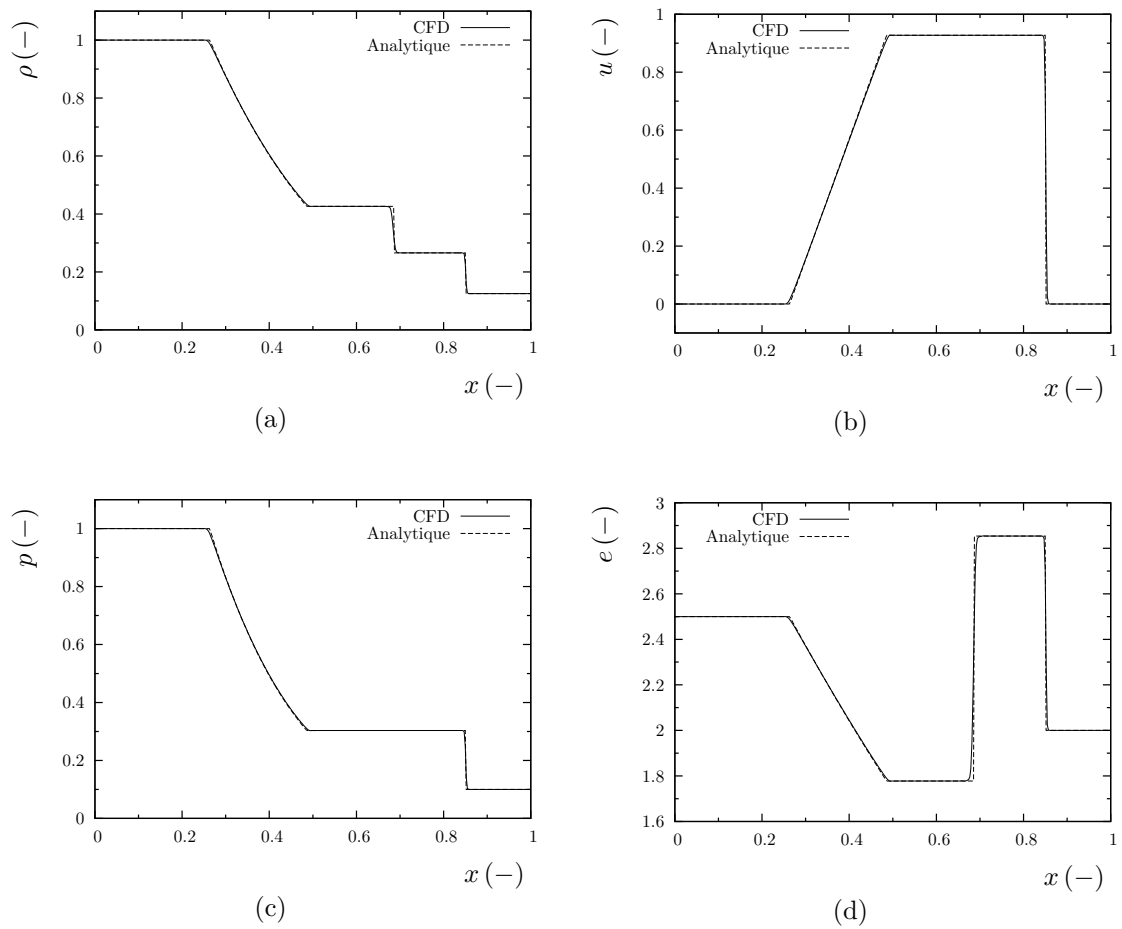


FIGURE 4.1 – Tube à choc de Sod. Comparaison entre les solutions numériques (CFD) et analytiques de la masse volumique (a), la vitesse (b), la pression (c) et l'énergie spécifique interne (d). $t = 0.2$, 400 points de calcul, CFL=0.5.

et al. [71] ont étudié l'influence du paramètre ε (voir équation (3.13)) dans l'ordre de convergence du schéma WENO5 et sa version "mappée" : WENO5M. Balsara & Shu [6] ont estimé l'ordre de convergence des schémas WENO7 et WENO7M couplé avec la stratégie ACM utilisée pour éviter l'étalement de la solution proche des discontinuités de contact. Shen & Zha [150] ont comparé l'ordre de convergence des versions WENO7-BS (Balsara & Shu) avec leur version améliorée WENO-Z7 basée sur l'extension de Borges *et al.* [18] pour le schéma WENO5. Dans le cadre de ce travail, le tourbillon isentropique proposé dans [31, 117, 179] sera utilisé pour l'étude de 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 :

$$(\delta u_1, \delta u_2) = \frac{\Gamma}{2\pi} \exp\left(\frac{1-r^2}{2}\right) (-\bar{x}_2, \bar{x}_1), \quad (4.2)$$

$$\delta T = -\frac{(\gamma-1)\Gamma^2}{8\gamma\pi} \exp\left(\frac{1-r^2}{2}\right), \quad (4.3)$$

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

La mesure du degré de précision du code de calcul est effectuée en comparant la masse volumique au centre du tourbillon à un instant donné, à sa valeur initiale. Pour chaque point (i, j, k) du domaine de calcul et pour un niveau donné de résolution numérique, la variable $\phi_{(i,j,k)}^h$ dénote la valeur discrète d'une variable ϕ d'intérêt, *e.g.* la masse volumique, les composants des vitesses, la pression ou la température. La variable $\phi_{(i,j,k)}^e$ dénote la valeur exacte de la solution. L'erreur relative numérique de la solution, définie par \mathcal{E}_h , est utilisée pour quantifier le taux d'erreur numérique obtenue pour des valeurs décroissantes de la taille caractéristique du maillage, dénotée par h . En utilisant la norme L_2 , l'erreur associée à la solution discrète peut s'exprimer sous la forme

$$\mathcal{E}_h = L_2(\phi_{(i,j,k)}^h) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i,j,k} (\phi_{(i,j,k)}^h - \phi_{(i,j,k)}^e)^2}, \quad (4.4)$$

avec N le nombre total de points de calcul. On définit le rapport d'erreurs comme $r_e = \log(\mathcal{E}_{2h}/\mathcal{E}_h)$ où \mathcal{E}_{2h} est l'erreur obtenue sur un maillage de taille caractéristique $2h$. En suivant la nomenclature utilisée dans les références [140, 166], 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 [166].

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

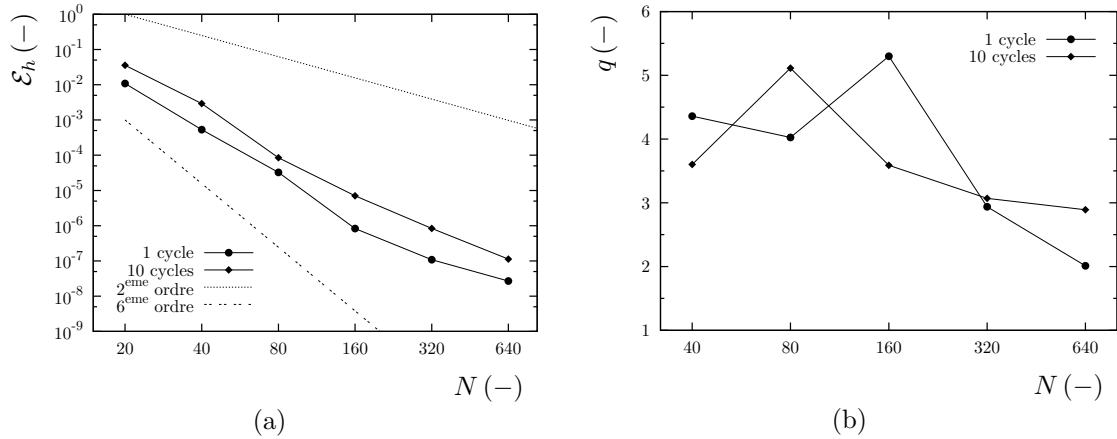


FIGURE 4.2 – Norme L_2 de l’erreur numérique basée sur le champ de masse volumique (a) et ordre de précision correspondante (b).

évaluées, en se basant sur le champ de masse volumique. Les tableaux 4.1–4.2 montrent, respectivement, les résultats obtenus avec le schéma centré d’ordre 7 et le schéma WENO7 utilisés dans l’approche hybride des flux convectifs. La figure 4.2(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 4.2(b). [L’ordre de précision globale du solveur numérique s’approche ici de la valeur $q \approx 3$, correspondant à la précision du schéma d’intégration temporelle Runge-Kutta incorporé. La précision temporelle de ce schéma est donc le facteur qui limite ici l’ordre de convergence globale du solveur numérique.] Finalement, la figure 4.3 confirme la haute qualité des solutions numériques obtenues après 10 cycles, indistinguables de la solution initiale.

4.4 Tube à choc multi-espèces inerte

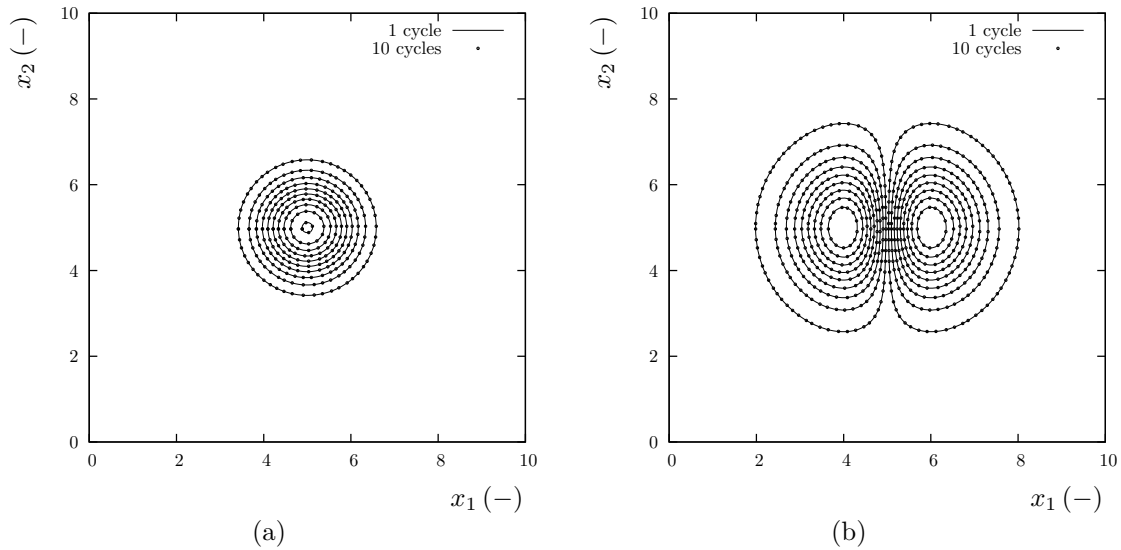
Ce test permet de vérifier le couplage entre le terme convectif des équations de Navier-Stokes et la librairie thermodynamique des mélanges multi-espèces, ainsi que la robustesse du schéma WENO7 en présence de fortes discontinuités. Il s’agit d’une version modifiée du tube à choc de Sod étudié dans la section 4.2, étendue aux mélanges multi-espèces.

TABLEAU 4.1 – Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma centré d’ordre 7.

N	Δx	\mathcal{E}_h (1C)	r_e (1C)	q (1C)	\mathcal{E}_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 4.2 – Analyse de convergence globale du code de calcul avec le schéma WENO7.

N	Δx	\mathcal{E}_h (1C)	r_e (1C)	q (1C)	\mathcal{E}_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

FIGURE 4.3 – Isolignes de masse volumique (a) et de la composante transversale de vitesse (b) à deux instants différents. $N = 160$.

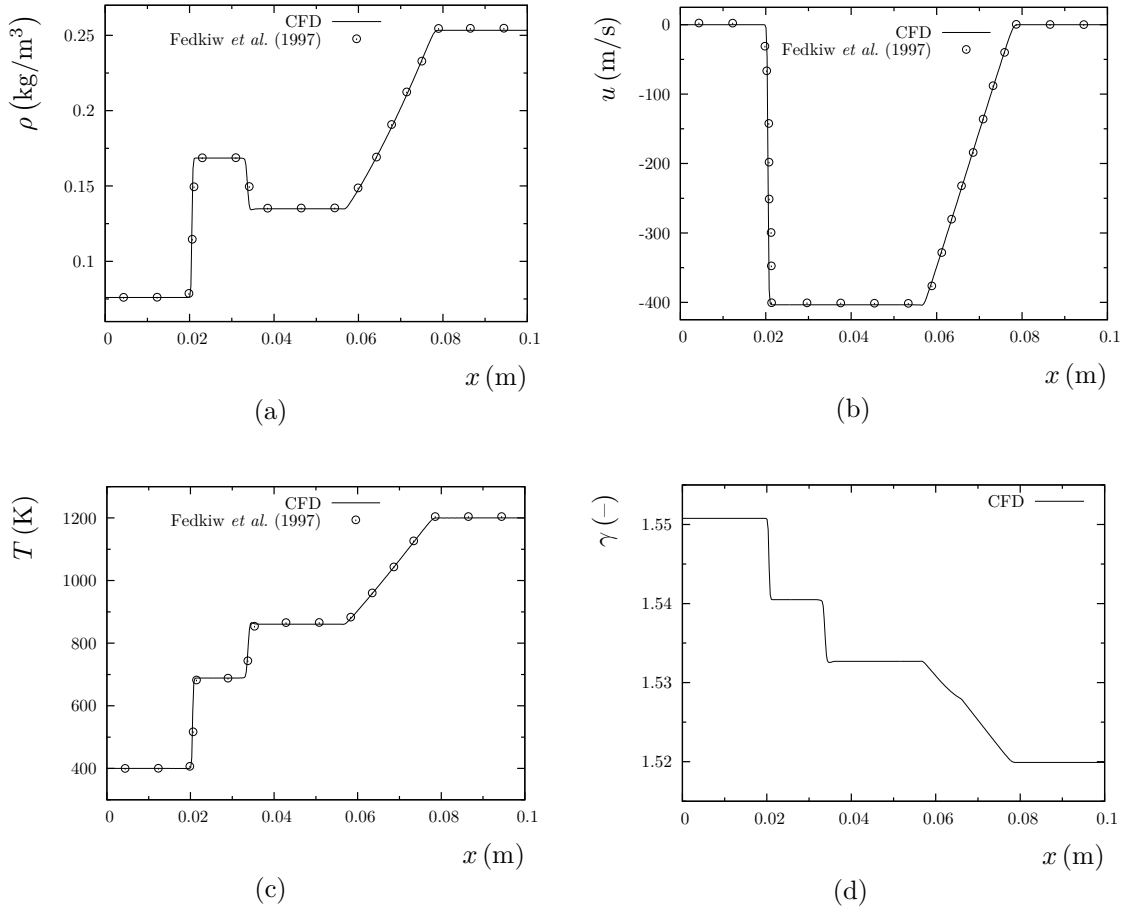


FIGURE 4.4 – Tube à choc multi-espèces inerte. Profils de masse volumique (a), vitesse (b), température (c) et rapport des chaleurs spécifiques (d). $t = 40 \mu\text{s}$, 400 points de calcul, CFL=0.5.

Plusieurs auteurs ont étudié différentes versions de ce problème [36, 49, 122]. Le test considéré ici a été proposé par Fedkiw *et al.* [49] et consiste à résoudre les équations d'Euler monodimensionnelles pour un mélange multi-espèces inerte. Il s'agit d'un mélange de $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$ 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 $t = 0$, 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 $t = 40 \mu\text{s}$ sont reportées dans la figure 4.4. Ces solutions sont en excellent accord avec celles de Fedkiw *et al.* [49] montrant le même positionnement de choc, discontinuité de contact et faisceau de détente, à l'instant considéré.

4.5 Test de diffusion multi-espèces

Ce test permet de vérifier le couplage entre le terme diffusif des équations de Navier-Stokes avec la librairie thermodynamique des mélanges multi-espèces. Le manque des

solutions analytiques nous conduit à comparer les solutions numériques avec celles reportées précédemment par Vicquelin (2010) [167], obtenues sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire pour toutes les espèces, *i.e.* $D_\alpha = D = \lambda/(\rho c_p)$. Ce test de diffusion est effectué dans un domaine de calcul monodimensionnel de 0.05 m de longueur discrétisé en 200 points. Le CFL est fixé à 0.5 et le nombre de Fourier, Fo, est égal à 0.1. Des conditions aux limites périodiques ont été choisies et la solution initiale est donnée par $u = 0$ m/s et $p = 1$ atm, tandis que la température et les fractions massiques sont initialisées de la manière suivante :

$$T_\alpha(x) = T_o + (T_c - T_o)f(x), \quad (4.5)$$

$$Y_\alpha(x) = Y_{\alpha_o} + (Y_{\alpha_c} - Y_{\alpha_o})f(x), \quad \alpha = \text{O}_2, \text{N}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CH}_4, \quad (4.6)$$

avec $f(x) = 1 - \exp(-(x - x_0)^2/d^2)$, $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$ m et $x_0 = 25 \cdot 10^{-3}$ m. Les valeurs de température et fractions massiques des espèces du côté combustible (C) et oxydant (O), reportées dans le tableau 4.3, correspondent à une version simplifiée de la configuration de flamme de Cabra *et al.* [25].

Les solutions numériques obtenues avec transport simplifié (TS) sont en très bon accord avec les résultats obtenus précédemment par Vicquelin [167], pour les instants considérés. Dans ce cas particulier, la solution obtenue avec transport détaillé (TD) reste très similaire aux deux autres en montrant que les effets de thermodiffusion et barodiffusion ainsi que la diffusion différentielle ont une influence négligeable.

4.6 Propagation d'une onde acoustique

Le test présenté dans cette section est similaire à celui étudié par Vicquelin *et al.* [168] et a pour but de vérifier le couplage entre les termes de transport convectif et diffusif et la librairie thermodynamique. Le mélange d'étude est à nouveau basé sur la configuration de Cabra *et al.* [25] (voir tableau 4.3).

L'onde acoustique se propage au sein d'un domaine monodimensionnel ($x \equiv x_1$ et $u \equiv u_1$) périodique de longueur $L = 0.05$ m, dans un mélange composé strictement d'oxydant. La solution initiale est donnée par

$$u = 0.01a_0 \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{d^2}\right), \quad (4.7)$$

TABLEAU 4.3 – Valeurs de température et fractions massiques dans le côté combustible (C) et oxydant (O) correspondantes à une version simplifiée de la configuration de Cabra *et al.* [25].

	T (K)	Y_{O_2} (-)	Y_{N_2} (-)	$Y_{\text{H}_2\text{O}}$ (-)	Y_{CH_4} (-)
Combustible	320	0.195	0.591	0.0	0.214
Oxydant	1350	0.142	0.758	0.1	0.0

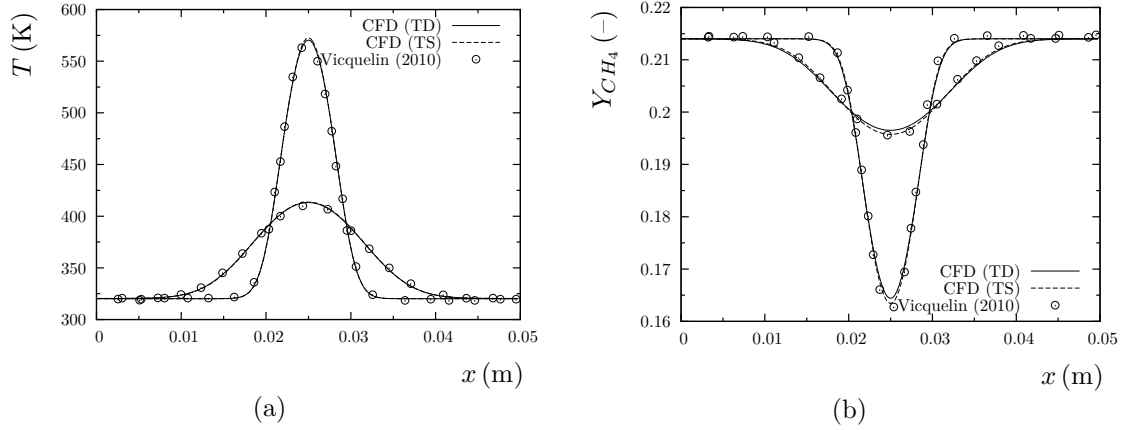


FIGURE 4.5 – Test de diffusion multi-espèces. Solutions numériques des profils de température (a) et fraction massique de CH_4 (b) calculés avec transport détaillé (TD) et simplifié (TS). $t_1 = 0.05$ s, $t_2 = 0.5$ s, 200 points de calcul, $\text{CFL}=0.5$, $\text{Fo}=0.1$.

où $P = P_0 + \rho_0 a_0 u$ et $\rho = \rho_0 + \rho_0 u/a_0$. $\rho_0 = 0.24 \text{ kg/m}^3$, $a_0 = 734.6 \text{ m/s}$ et $P_0 = 1 \text{ atm}$ sont, respectivement, la masse volumique, la vitesse du son et la pression de l'écoulement initial non perturbé. Les valeurs $d = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ et $x_0 = 25 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ sont retenues. Le domaine de calcul est discrétisé en 200 points, la valeur du CFL est fixée à 0.5 et le nombre de Fourier, Fo , est égal à 0.1. En $x = 0 \text{ m}$, l'évolution temporelle de la vitesse, la masse volumique, la pression et la température est reportée dans la figure 4.6. La comparaison entre la simulation actuelle avec transport simplifié et la solution de référence (avec $Le = 1$) est en très bon accord. Cependant, lorsque une description détaillée des termes de transport moléculaire est retenue, la diffusion de l'onde acoustique devient plus importante en démontrant que les effets Soret et Dufour ne sont pas négligeables pour ce problème inerte.

4.7 Réacteur parfaitement prémélangé

Afin de vérifier le solveur chimique qui a été intégré dans le code CFD, un test numérique supplémentaire permettant de simuler un réacteur parfaitement prémélangé a été réalisé. Il s'agit de résoudre les équations décrivant la combustion adiabatique à volume constant d'un mélange de gaz réactifs. Ces équations, présentées précédemment dans la section 3.4, sont rappelées ici :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{RT}{c_v} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\dot{\omega}_\alpha}{W_\alpha} - \frac{\sum_{\alpha=1}^N h_\alpha \dot{\omega}_\alpha}{c_v}, \quad (4.8)$$

$$\frac{dY_\alpha}{dt} = \dot{\omega}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (4.9)$$

Un autre objectif de ce test est de permettre de vérifier l'algorithme de restriction du pas de discrétisation temporelle basé sur un critère chimique, qui est retenu dans ce

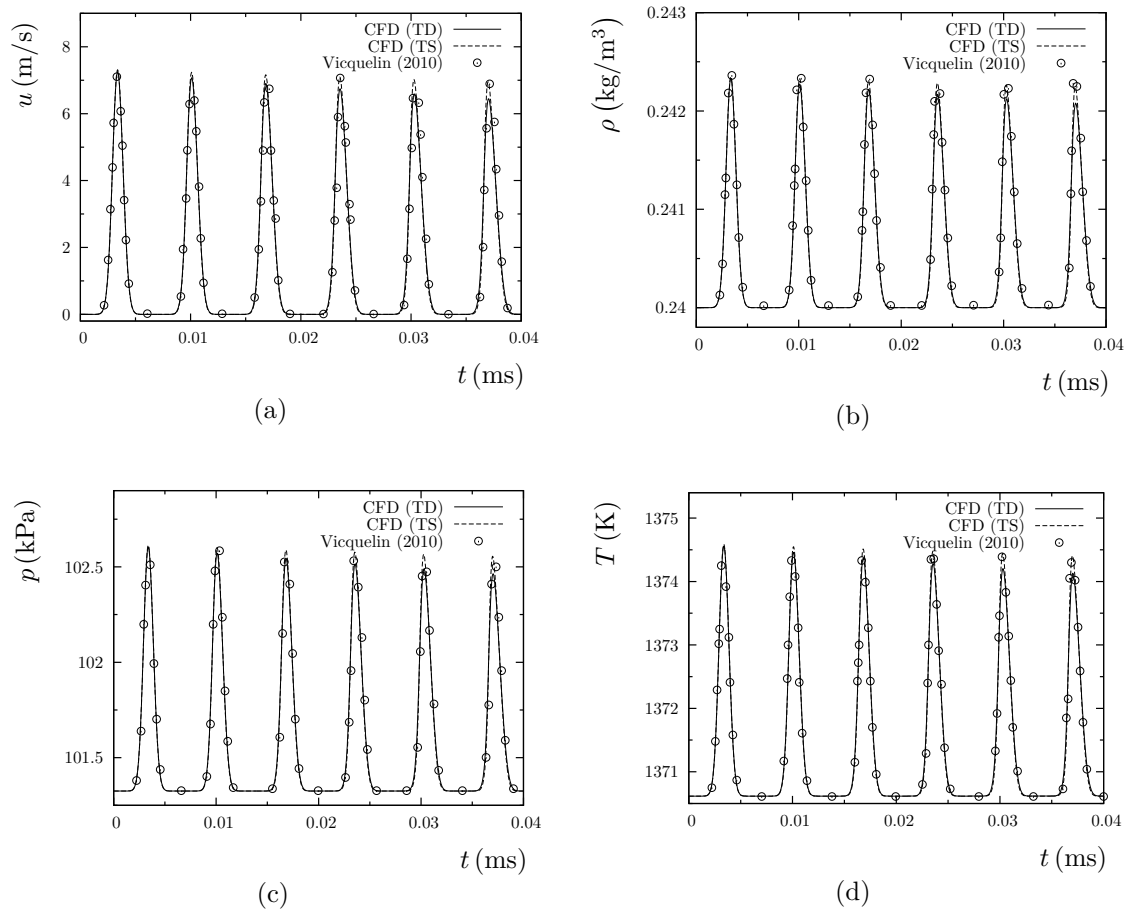


FIGURE 4.6 – Propagation d’une onde acoustique. Evolution temporelle de la vitesse (a), la masse volumique (b), la pression (c) et la température (d) en $x = 0$ m, calculée avec transport détaillé (TD) et simplifié (TS). 200 points de calcul, CFL=0.5, Fo=0.1.

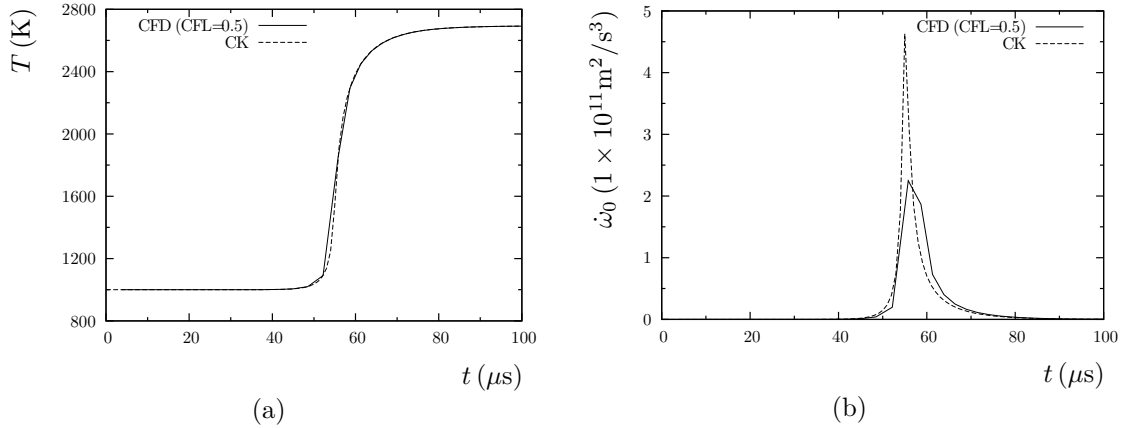


FIGURE 4.7 – Réacteur parfaitement prémélangé. Comparaison entre la solution CFD et celle de référence (CK) pour la température (a) et le taux de dégagement de chaleur (b). CFL=0.5.

travail. Pour ce faire, la solution obtenue avec le code CFD est comparée à une solution de référence issue du module PSR de la librairie CHEMKIN [86] ou le logiciel Cantera [61]. Les conditions initiales ainsi que le schéma réactionnel correspondent à ceux proposés par Kee *et al.* [86]. Il s'agit d'un mélange réactif de $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ de rapport molaire 1/3/0.1, soumis à une température de 1000 K et une pression de 1 atm. Le schéma cinétique employé est détaillé dans le tableau C.4, fourni en annexe. Ce mécanisme réactionnel comporte 11 espèces chimiques et 23 réactions élémentaires. Les simulations numériques sont conduites jusqu'à $t = 0.12$ ms. La solution de référence CHEMKIN est obtenue avec un pas de discrétisation temporelle fixé à $1 \mu\text{s}$. Dans un premier temps, la solution CFD est obtenue avec un pas de temps qui est relié uniquement au CFL, *i.e.* à la célérité du son. La valeur du CFL est fixée à 0.5 (une échelle de référence $\Delta x = 5$ mm est choisie pour ce faire), ce qui restreint le pas temporel à des valeurs comprises entre $t = 2.48 \mu\text{s}$ et $t = 3.73 \mu\text{s}$, supérieures à celui de $1 \mu\text{s}$ employé pour obtenir la solution de référence.

La figure 4.7 illustre l'évolution temporelle de la température et du taux de dégagement de chaleur. La première est en très bon accord avec la solution de référence. Néanmoins, l'évolution du taux de dégagement de chaleur pendant le processus d'inflammation est moins précise dans la solution CFD dû au pas de discrétisation temporelle relativement grand. Néanmoins, il est important de remarquer que l'évolution temporelle de la plupart des variables d'intérêt, comme la température, ne sont pas affectées de manière significative. Ceci est possible grâce à la méthode implicite intégrée dans le solveur VODE [22] et incorporée dans le code CFD. Pour l'étude des problèmes concernant l'auto-inflammation, dans lequel l'intérêt principal est de capturer en détail les processus d'évolution du taux de dégagement de chaleur ainsi que la formation des espèces intermédiaires, *e.g.* radicaux, un *critère additionnel chimique* peut être envisagé pour réduire davantage le pas de discrétisation temporel. Dans ce travail, ce critère est basé sur une variation de température donnée par les relations (3.38)–(3.39). La figure 4.8 montre l'évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur et la fraction massique du radical hydroperoxyde (HO_2) avec ce

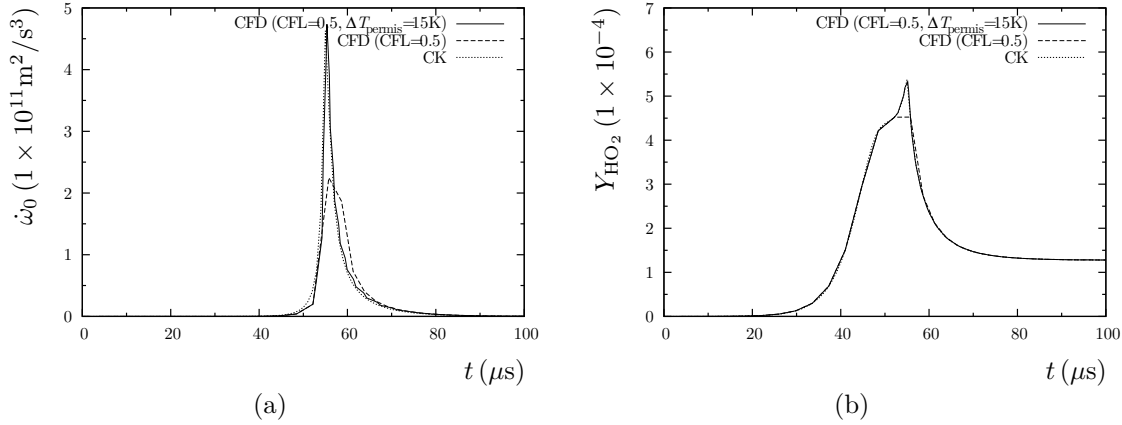


FIGURE 4.8 – Réacteur parfaitement prémélangé. Comparaison entre la solution CFD (avec deux critères pour restreindre le pas de discrétisation temporelle) et celle de référence (CK). Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur (a) et de la fraction massique de HO_2 (b). CFL=0.5, $\Delta T_{\text{permis}} = 15 \text{ K}$.

nouveau critère, basé sur un incrément maximum permis de température de 15 K. Cette condition permet de capturer en détail l'évolution rapide de la concentration de ce radical, avec la création d'un pic, ainsi que le taux de dégagement de chaleur.

4.8 Tube à choc multi-espèces réactif

Etant vérifiées de manière indépendante les parties convective, diffusive et réactive des équations de Navier-Stokes intégrées dans le code CFD, il est intéressant d'effectuer maintenant un test de vérification portant sur le couplage des contributions convective et réactive. Un problème similaire à celui étudié dans la section 4.4 est proposé. Celui-ci consiste à calculer les conditions thermodynamiques générées par un choc après sa réflexion sur une paroi. Ces conditions sont propices à l'auto-inflammation du mélange considéré et, en conséquence, une onde de réaction se crée en se déplaçant dans la même direction que celle du choc réfléchi. Ce problème à celui proposé par Fedkiw *et al.* [50].

Le mélange de $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$ de rapport molaire 2/1/7 est considéré. Les équations d'Euler monodimensionnelles ($x \equiv x_1$ et $u \equiv u_1$) correspondantes à un mélange multi-espèces réactif sont résolues. La condition initiale correspond au problème de Riemann suivant : $(\rho_L, u_L, p_L) = (0.072 \text{ kg/m}^3, 0 \text{ m/s}, 7173 \text{ Pa})$ et $(\rho_R, u_R, p_R) = (0.18075 \text{ kg/m}^3, -487.34 \text{ m/s}, 35594 \text{ Pa})$. Initialement, les mélanges du côté gauche (L) et droite (R) sont séparés au milieu d'un domaine de calcul de 12 cm de longueur, discrétisé en 400 points. Une condition limite de paroi non glissante est appliquée en $x = 0 \text{ cm}$ tandis qu'une condition limite parfaitement non réfléchissante est appliquée en $x = 12 \text{ cm}$. La valeur du CFL est fixée à 0.5 et le schéma cinétique employé correspond à celui de Kee *et al.* [85], détaillé dans le tableau C.3 fourni en annexe, considérant 9 espèces chimiques et 18 étapes réactionnelles élémentaires.

La figure 4.9 montre les résultats numériques obtenus pour différentes variables d'in-

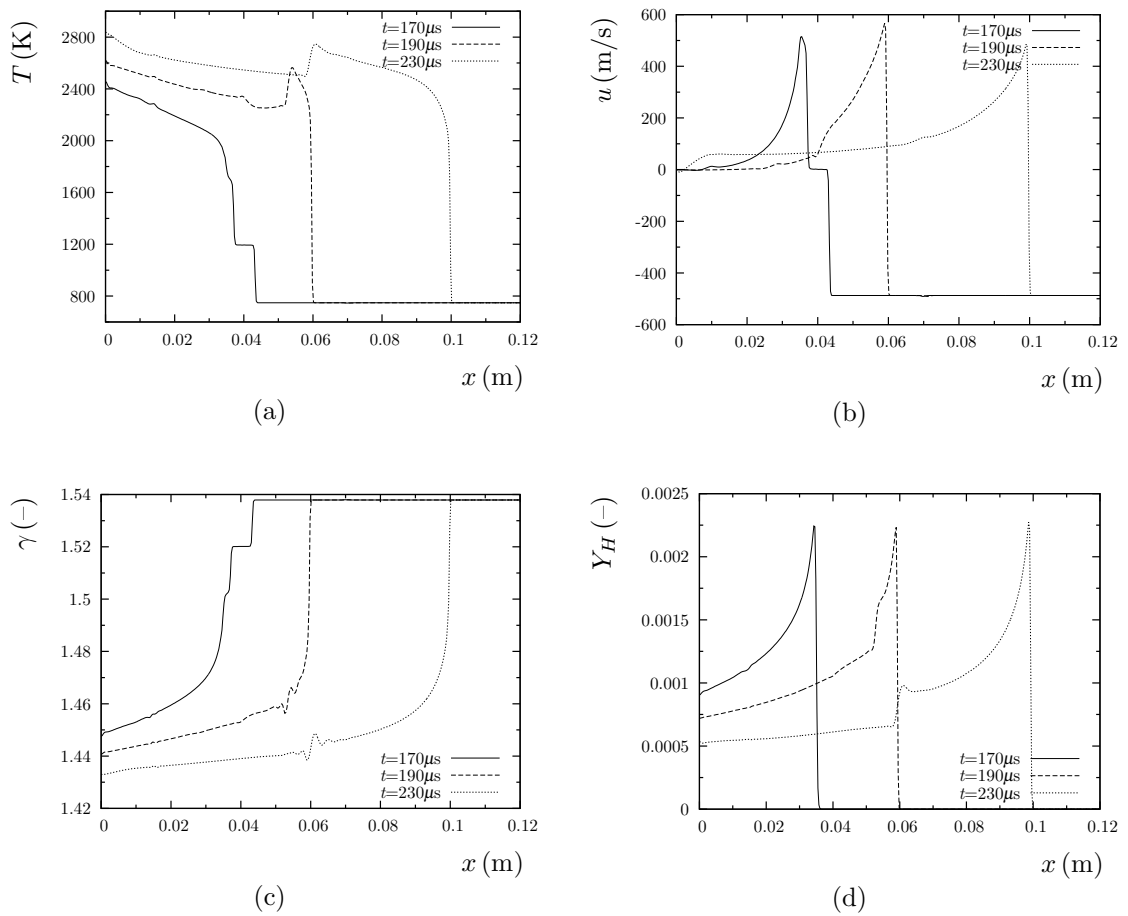


FIGURE 4.9 – Tube à choc multi-espèces réactif. Profils de température (a), vitesse (b), rapport des chaleurs spécifiques (c) et fraction massique de H (d) à trois instants différents. 400 points de calcul, CFL=0.5, Fo=0.1.

térêt à trois instants de temps différents. A $t = 170 \mu\text{s}$, l'onde réactive n'a pas encore rattrapé le choc. Les propriétés thermodynamiques correspondantes à cet état après choc ainsi que l'évolution temporelle de la solution sont en très bon accord avec les résultats présentés par Fedkiw *et al.* [50]. Cependant, les solutions correspondantes à $t > 190 \mu\text{s}$ ne sont pas directement comparables à celles reportées dans la référence [50], car les schémas cinétiques utilisés ne sont tout à fait les mêmes. Cependant, l'allure des solutions est qualitativement similaire.

4.9 Flamme laminaire prémélangée d'hydrogène et oxygène

Ce *benchmark* permet de vérifier le solveur numérique dans des problèmes où l'importance des termes de convection, de diffusion et de réaction des équations de Navier-Stokes est équivalente. Le but de ce test est de comparer la solution obtenue avec le code CFD à une solution de référence obtenue avec le module PREMIX de la librairie CHEMKIN [85]. La solution délivrée par PREMIX est basée sur une description simplifiée des termes de transport tandis que la solution CFD utilise les descriptions simplifiée et détaillée des termes de transport multi-espèces. En suivant les références [167, 183], l'étude de la combustion d'un mélange pauvre d'hydrogène-oxygène de richesse $\phi = 0.6$ est envisagée. Le schéma cinétique utilisé est celui de Ó Conaire *et al.* (2004) [119], reporté dans le tableau C.2, fourni en annexes. Ce mécanisme réactionnel considère 10 espèces chimiques et 21 étapes réactionnelles élémentaires. La température et la pression des gaz frais sont 298 K et 1 atm, respectivement. Le domaine de calcul monodimensionnel de 3 cm de longueur est uniformément discrétisé avec une taille de maille de $15 \mu\text{m}$, en assurant un degré de résolution compatible avec l'épaisseur caractéristique d'une flamme laminaire. La solution obtenue avec PREMIX est fournie comme condition initiale au code de calcul CFD. Des conditions limites compatibles avec cette solution sont définies. Ainsi, une condition de type Dirichlet est imposée du côté gaz frais, en fixant la valeur de la température et pression, vitesse et composition du mélange. Du côté gaz chauds, les gradients de fraction massique et de température sont annulés et la pression est fixée [85]. Dans la solution de PREMIX la pression est supposée constante dans tout le domaine. Cependant, dans la solution présente, la pression varie légèrement à travers de la flamme et il existe une période d'adaptation de la solution initiale due à l'ajustement de la pression [183]. Les valeurs $\text{CFL}=0.7$, $\text{Fo}=0.1$ et $\Delta T_{\text{max}} = 15 \text{ K}$ sont retenues et la simulation est conduite jusqu'à 1 milliseconde.

Il existent d'autres difficultés associées à ce problème qui peuvent affecter la comparaison entre la solution fournie par le module PREMIX et celle du code de calcul développé dans ce travail. Par exemple, la solution obtenue avec PREMIX correspond à un problème stationnaire à pression constante dans un repère lié à la flamme tandis que, la solution calculée avec CREAMS, correspond à un problème instationnaire dans un repère fixe où des variations de pressions se succèdent comme signalé précédemment. En outre, la

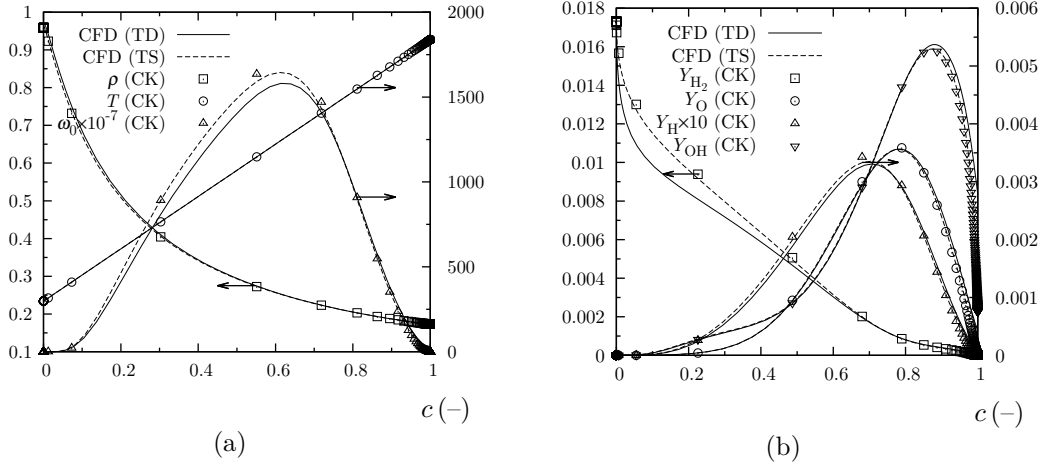


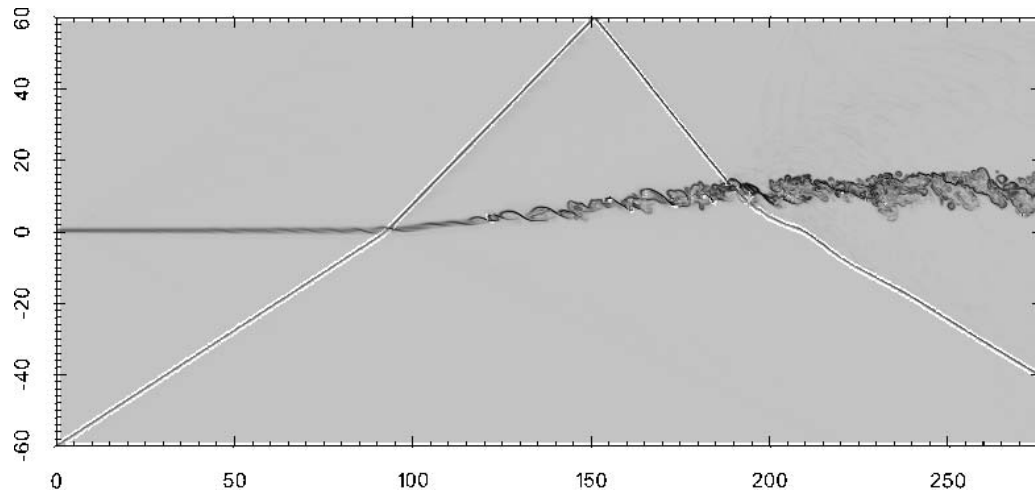
FIGURE 4.10 – Flamme laminaire de prémélange d’hydrogène-oxygène. Comparaison entre les solutions obtenues avec PREMIX (symboles) et le code de calcul (CFD) utilisant une description simplifiée (TS) et détaillée (TD) des termes de transport. Les quantités sont tracées en fonction de la variable de progrès $c = (T - T_f)/(T_b - T_f)$. CFL=0.7, Fo=0.1, $\Delta T_{\max} = 15$ K. Unités SI.

spécification des conditions limites n’est pas tout à fait compatible avec les équations de Navier-Stokes et, choisir de résoudre ce problème avec un outil numérique compressible, nous met dans une situation difficile pour cette configuration à bas nombre de Mach. Malgré toutes ces éventuelles complications, la comparaison des solutions présentée dans le paragraphe suivant montre que les deux solutions ne s’écartent pas significativement.

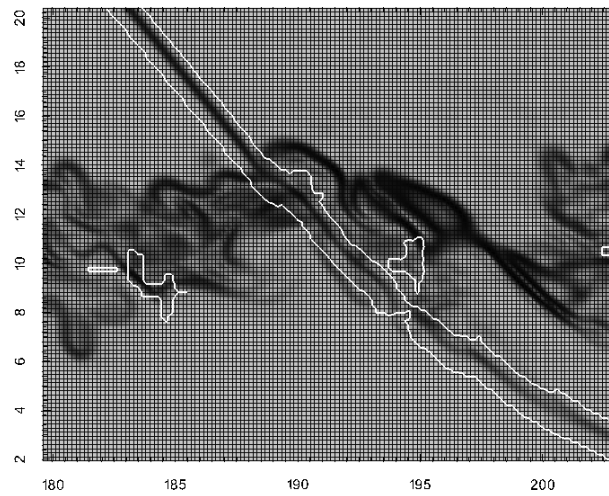
La Figure 4.10 illustre les variables d’intérêt obtenues avec le code de calcul et PREMIX. Toutes les quantités sont tracées en unités SI, en fonction de la variable de progrès définie comme $c = (T - T_f)/(T_b - T_f)$, avec T_f la température des gaz frais et T_b la température des gaz brûlés. La solution CFD calculée avec transport simplifié (TS) est directement comparable à celle de PREMIX. Néanmoins, des différences importantes subsistent entre la solution de référence et celle donnée par le code CFD avec transport détaillé (TD) : le niveau du taux de dégagement de chaleur est inférieur quand les effets Soret et Dufour sont pris en compte, comme le montre la figure 4.10(a). Quand le transport simplifié est retenu, la diffusion moléculaire de l’hydrogène vers les gaz frais est sous-estimée tandis que la diffusion du radical hydroxyde (OH) vers les gaz brûlés est légèrement sur-estimée (voir figure 4.10(b)). Ces résultats montrent l’importance de bien prendre en compte une description détaillée des termes de transport pour des cas réactifs.

4.10 Critère de détection de discontinuités

L’approche hybride utilisée dans la discrétisation des flux convectifs, qui combine le schéma WENO7 et un schéma centré du même ordre de précision, nécessite l’emploi d’un critère additionnel afin de détecter les possibles discontinuités présentes dans l’écoulement. Comme indiqué dans la section 3.2, la détermination de ces discontinuités se fait à



(a) Domaine de calcul.



(b) Interaction choc-couche de mélange.

FIGURE 4.11 – Critère de détection de chocs (lignes blanches), superposé au champ instantané du gradient normalisé de pression (niveaux de gris). Simulation I-3D-TD-0.48.

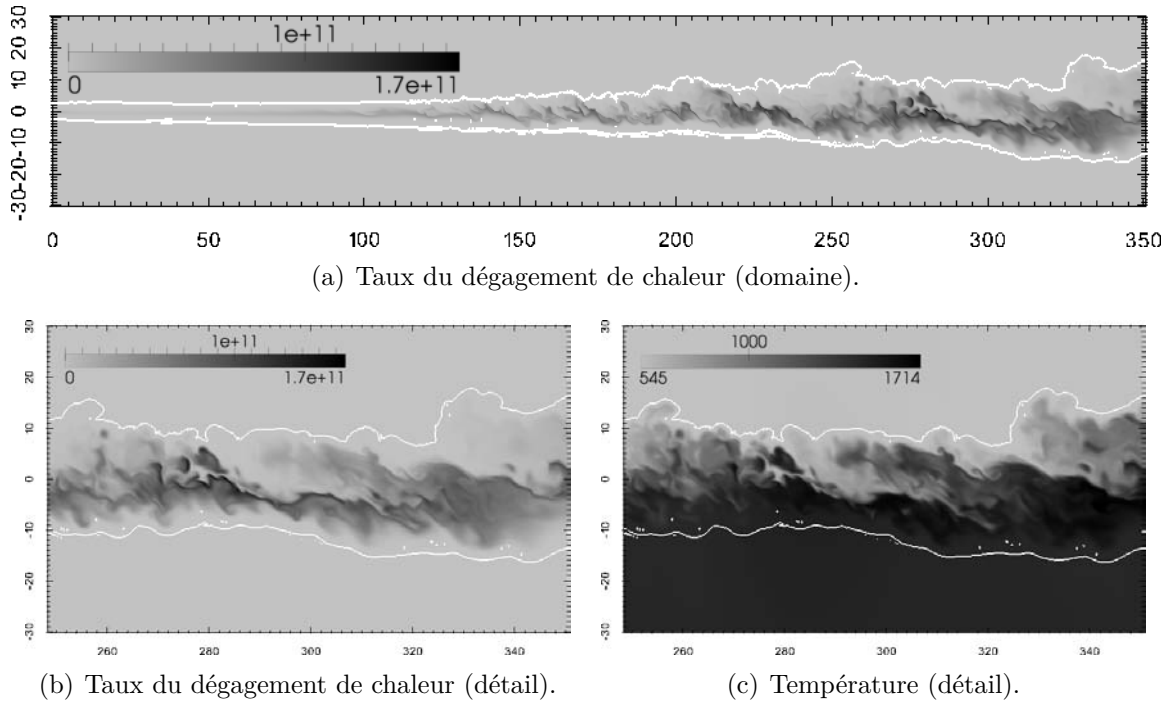


FIGURE 4.12 – Critère de détection de régions réactives (lignes blanches), superposé aux champs instantanés du taux de dégagement de chaleur et température (niveaux de gris). Simulation R-3D-TD-0.70.

partir de l'évaluation simultanée des variations locales normalisées de pression et de masse volumique. La figure 4.11 illustre l'application de ce critère avec $|\rho_{i+1} - \rho_i|/\rho_i > 3.5\%$ et $|p_{i+1} - p_i|/p_i > 3.5\%$. Dans les régions englobant les chocs, le schéma WENO7 est utilisé tandis que le schéma centré est appliqué en dehors de ces dernières. La valeur choisie de 3.5% reste peut être assez faible dans ce cas particulier, car ce critère est aussi appliqué dans certaines régions à l'intérieur de la couche de mélange. Quand cette valeur est augmentée à 5%, ces régions disparaissent et celles englobant les chocs restent pratiquement inchangées.

4.11 Critère de détection des zones réactives

Ce critère a pour but de diminuer significativement le temps de CPU associé aux simulations réactives. L'intégration implicite de la partie réactive des équations de Navier-Stokes s'effectue dans la procédure *splitting* de Strang [161] et constitue, approximativement, 50% du coût total des simulations. Il est fortement recommandé d'utiliser un critère permettant de définir les régions où l'intégration implicite est réellement nécessaire. Ce critère a déjà été défini précédemment dans la section 3.4. La figure 4.12 montre les lignes de contour séparant les régions réactives des régions inertes, superposées aux champs instantanés du taux de dégagement de chaleur et température.

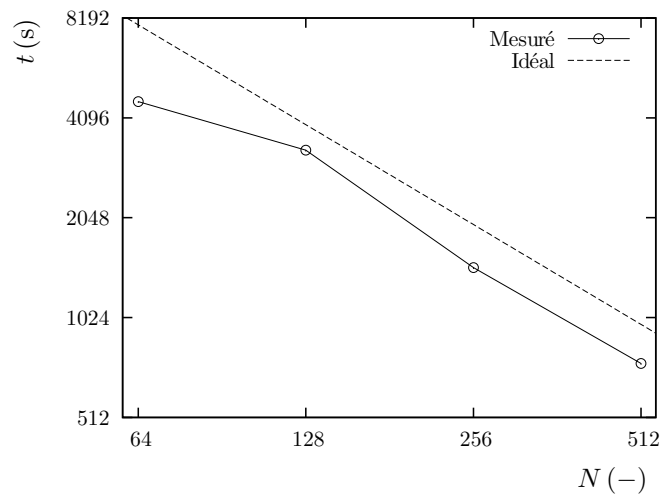


FIGURE 4.13 – Résultats obtenus dans le test de scalabilité sur le cluster de l’Institut P’. La courbe de scalabilité idéale est une droite de pente -1 . Simulation I-3D-ST-110.

4.12 Scalabilité du code de calcul

Le calcul parallèle permet l’exécution de beaucoup de tâches numériques simultanément. Cette parallélisation est nécessaire pour effectuer les simulations bidimensionnelles et tridimensionnelles. Parmi les différents environnements de calcul parallèle, celui choisi dans ce travail concerne les superordinateurs de calcul à haute performance (HPC ou *high performance computing*). Comme annoncé dans le chapitre précédent, le code de calcul développé dans ce travail est basé sur l’implémentation MPI pour rendre possible la communication entre les différentes tâches ou sous-domaines de calcul. Un test portant sur la scalabilité du code de calcul a été effectué sur le cluster de l’Institut P’. Ce calculateur possède 108 nœuds de calcul bi-processeurs (AMD Opteron 4 cœurs : 2.3Ghz pour la première tranche et 2.5Ghz pour la seconde), soit 864 cœurs de calcul disponibles et environ 8.5 TFlops. Le test de scalabilité consiste à calculer 0.2 μ s additionnels d’une simulation tridimensionnelle de référence (I-3D-ST-1.10) déjà établie. La figure 4.13 montre le temps investi par le code de calcul en fonction du nombre de cœurs utilisés. Les résultats obtenus montrent un taux de décroissance très proche du cas idéal, donné par une droite de pente -1 , dans lequel le temps théorique nécessaire pour effectuer la simulation est inversement proportionnel au nombre de cœurs utilisés. Le temps employé par la simulation utilisant 64 cœurs ne semble pas suivre la même tendance que les autres calculs, ce qui peut être attribué à la configuration hétérogène de la machine de calcul.

4.13 Récapitulatif

Une batterie exhaustive de tests permettant de vérifier le fonctionnement correct du code de calcul CREAMS a été présentée dans ce chapitre. Quelques tests ont été choisis 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 parties du code ont été aussi 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. De plus, certains de ces tests ont illustré l'importance de prendre en compte une description détaillée des termes de transport moléculaire dans des cas particuliers [64], *e.g.* dans des écoulements réactives mais aussi inertes. Des critères additionnels permettant de définir des régions englobant des discontinuités ou des régions réactives ont été définis dans le chapitre 3 et vérifiés dans les sections 4.10 et 4.11, respectivement. Enfin, un dernier test effectué dans le cluster de l'Institut P' a montré la bonne scalabilité du code de calcul, qui a été confirmée lors du passage aux supercalculateurs Babel (Blue Gene/P) et Turing (Blue Gene/Q) de l'IDRIS.

Chapitre 5

Simulations bidimensionnelles de couches de mélange

5.1 Introduction

La couche de mélange cisailée est un exemple d'écoulement libre cisailé qui a fait partie de nombreuses études à caractère expérimental, théorique et aussi numérique. Les premiers travaux étaient consacrés aux couches de mélange incompressibles. Parmi ces études se trouvent les travaux de Spencer & Jones (1971) [156], Brown & Roshko (1974) [21] et Dimotakis & Brown (1976) [39]. Ces études ont porté sur la structure des couches cisailées et ses effets sur le mélange. L'étude de l'état d'autosimilarité, caractérisé par une croissance linéaire de la couche de mélange et une superposition des profils normalisés des quantités moyennes, a été reportée plus tard par Bell & Mehta (1990) [12].

Des études numériques basées sur la théorie linéaire et non linéaire des instabilités, ainsi que sur des simulations numériques directes, ont montré des différences importantes entre le régime incompressible (nombre de Mach convectif $M_c \lesssim 0.4$) et le régime compressible ($M_c \gtrsim 0.6$). Dans le premier régime prédominent les instabilités bidimensionnelles au sein de l'écoulement, de type Kelvin-Helmholtz, tandis qu'à des régimes compressibles des ondes d'instabilité obliques apparaissent donnant lieu à des structures tridimensionnelles [32, 33, 48, 80, 108, 134]. Ces deux comportements ont été validés expérimentalement par différentes études [17, 29, 45, 141].

De nombreuses simulations de couches de mélange bidimensionnelles compressibles inertes et réactives ont déjà été réalisées. La plus grande partie sont des simulations assez anciennes qui étaient largement limitées par la puissance de calcul des ordinateurs de l'époque. Quelques exemples des cas inertes sont : Bogey [16] et Stanley & Sarkar [157]. Ces simulations bidimensionnelles étaient aussi limitées par le manque d'une direction d'envergure et certaines quantités restaient largement surestimées par rapport aux études expérimentales. La simulation des couches de mélange cisailées bidimensionnelles réactives a aussi été le sujet de nombreux travaux de thèse et publications [32, 113, 135, 148, 159, 160, 172]. La majorité de ces études présentaient des simplifications concernant les mécanismes réactionnels. Ainsi, ces simulations étaient limitées

parfois à une chimie infiniment rapide [32, 113], ou bien à une chimie à une seule étape de réaction globale [148]. Les résultats marquants ont été la mise en évidence de la forte réduction du taux de croissance de la couche de mélange par les réactions chimiques et la réduction de la longueur d'induction, soit avec l'augmentation de température, soit avec la réduction de la vitesse de l'écoulement d'oxydant.

Les hypothèses simplificatrices retenues pour la description de la cinétique chimique ne sont pas compatibles avec le processus de combustion supersonique, où le temps caractéristique chimique peut être du même ordre de grandeur que le temps caractéristique de l'écoulement. Des solutions aberrantes sont alors obtenues [56], par exemple, lors de l'utilisation d'une chimie globale pour simuler une flamme supersonique de diffusion d'hydrogène-air, *e.g.* la flamme de Cheng *et al.* [28]. Les simulations des couches de mélange bidimensionnelles conduites avec une chimie finie mettaient en évidence la combustion d'une flamme de diffusion dans les poches isolées, situées dans le côté combustible, formées par les grandes structures tourbillonnaires [159]. Dans ce cas particulier, l'augmentation du taux de croissance de la couche de mélange, calculée à partir de la fraction massique d'azote, était attribuée à l'expansion thermique produite par la combustion [160]. Enfin, l'approximation bidimensionnelle, qui exclut l'étirement tourbillonnaire, est connue pour surestimer les effets baroclines dans les flammes turbulentes de masse volumique variable [113].

Il est clair que le dégagement de chaleur produit par les réactions chimiques conduit à une diminution de la masse volumique, une augmentation de la viscosité cinématique et, en conséquence, à un couplage entre la dynamique du fluide et la cinétique chimique. En conséquence, il semble logique que la dilatation du fluide provoquée par l'augmentation de température dans la zone de mélange puisse contribuer à l'augmentation du taux de croissance de la couche de mélange. Dans le régime incompressible, des études expérimentales ont été réalisées avec des faibles valeurs du taux de dégagement de chaleur pour comprendre les effets de la dynamique du fluide sur le mélange et le taux de réaction [19, 115]. Ces résultats montraient que les effets tridimensionnels contribuaient à l'augmentation des produits de réaction grâce à la présence des structures tourbillonnaires tridimensionnelles (combinaison des tourbillons longitudinaux et dans le sens de l'envergure). D'autres études expérimentales avec des niveaux de dégagement de chaleur plus importants ont été aussi conduites [73, 107]. Ces études étaient consacrées aux effets produits par la combustion sur le taux de croissance et le développement des grandes échelles. En particulier, ces résultats ont confirmé que le dégagement de chaleur impacte le taux de croissance des couches de mélange, en le diminuant. Dans le régime compressible, Miller *et al.* [110] ont étudié des couches de mélange compressibles réactives à différents nombres de Mach convectif. Ils ont trouvé des structures similaires aux cas inertes compressibles équivalents. Ils avaient également mesuré des taux de croissance similaires aux cas inertes dus à la faible influence du dégagement de chaleur des couches cisillées réactives utilisées lors de ses expériences.

L'impact du dégagement de chaleur et la compressibilité sur l'efficacité de la combustion au sein de la couche de mélange a motivé différents auteurs à chercher des solutions

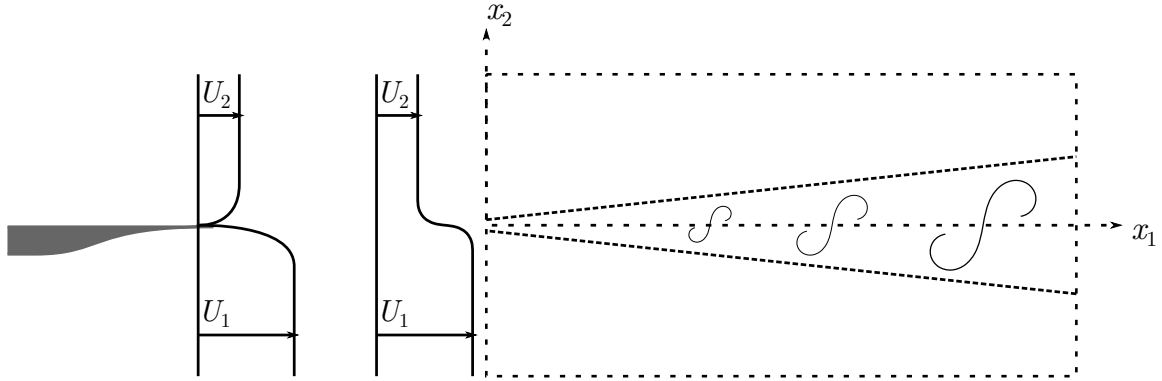


FIGURE 5.1 – Schéma du développement spatial de la couche cisailée à l'issue d'une plaque séparatrice.

à ce problème, *e.g.* installation des corps géométriques appropriés. L'interaction entre choc et couche de mélange, envisagé dans ce travail, a fait l'objet des diverses études numériques [24, 27] qui ont confirmée le bon rendement de cette méthode dans des situations pratiques. L'influence sur la combustion de l'interaction entre un choc incident et la couche de mélange a été aussi reportée [159].

Ce chapitre, consacré à l'étude des couches de mélanges compressibles bidimensionnelles inertes et réactives, a deux objectifs principaux. Dans un premier temps, les résultats issus du développement spatial des couches de mélange bidimensionnelles inertes et réactives, obtenus par l'outil de calcul développé dans le cadre de cette thèse, pourront être comparés à ceux déjà reportés dans la littérature. Néanmoins, les simulations tridimensionnelles sont indispensables pour capturer les processus de cascade des écoulements turbulents. Ainsi, le deuxième objectif de cette section est de relier la phénoménologie liée aux couches de mélanges bidimensionnelles à celles des couches tridimensionnelles. Ce chapitre est organisé de la façon suivante. La section 5.2 rappelle les propriétés générales des couches de mélange. La section 5.3 présente un cas de référence d'une couche de mélange incompressible d'air. La section 5.4 porte sur l'étude des couches de mélange compressibles inertes à différents nombres de Mach convectif tandis que la section 5.6 concerne les simulations réactives équivalentes. Finalement, la section 5.9 analyse la technique d'impact par choc sur le développement des couches de mélange et la dernière section présente un récapitulatif des résultats plus importants.

5.2 Propriétés générales des couches de mélange

La figure 5.1 schématise la géométrie d'une couche cisailée¹ développée spatialement à partir de deux écoulements parallèles. Dans le sillage de la plaque séparatrice, le profil de vitesse longitudinale de la couche cisailée est souvent modélisé par une tangente

1. Il faut noter que la majorité des couches cisailées étudiées dans ce travail correspondent à des couches de mélange. Ainsi, l'appellation "couche de mélange" ou "couche cisailée" sera utilisée indifféremment.

hyperbolique [16, 123, 148, 157]

$$u_1 = \frac{U_1 + U_2}{2} + \frac{U_1 - U_2}{2} \tanh\left(\frac{2x_2}{\delta_{\omega,0}}\right), \quad (5.1)$$

où U_1 est la vitesse de l'écoulement rapide et U_2 celle de l'écoulement lent ($U_1 > U_2$). La variable $\delta_{\omega,0} \equiv \delta_{\omega}(x=0)$ fait référence à l'épaisseur de vorticit  *initiale* de la couche de m lange. Cet  paisseur est calcul e   partir de la relation

$$\delta_{\omega} = \frac{U_1 - U_2}{|\partial\langle u_1 \rangle_f / \partial x_2|_{\max}}. \quad (5.2)$$

L'op rateur $\langle \bullet \rangle$ indique l'op rateur de moyenne au sens de Reynolds (ou moyenne statistique tout simplement) tandis que ce m me op rateur avec l'indice additionnel f , *i.e.* $\langle \bullet \rangle_f$, d signe la moyenne au sens de Favre $\langle \bullet \rangle_f = \langle \rho \bullet \rangle / \langle \rho \rangle$. Pour rappel, la valeur moyenne au sens de Reynolds d'une quantit  instantan e quelconque φ s'obtient avec la relation

$$\langle \varphi \rangle(x_1, x_2, x_3) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \varphi(x_1, x_2, x_3, t) dt}{\int_{t_i}^{t_f} dt}, \quad (5.3)$$

et la valeur moyenne au sens de Favre s' crit

$$\langle \varphi \rangle_f(x_1, x_2, x_3) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \rho \varphi(x_1, x_2, x_3, t) dt}{\int_{t_i}^{t_f} \rho(x_1, x_2, x_3, t) dt}, \quad (5.4)$$

avec t_i et t_f le temps initial et final de la prise de donn es de la base statistique. Les symboles primes, \bullet' , et secondes, \bullet'' , d signent leurs fluctuations respectives. L' paisseur de vorticit  peut pr senter une allure irr guli re d u au terme de d rivation du d nominateur et la d finition d' paisseur de quantit  de mouvement est autant utilis e dans la litt rature :

$$\delta_{\theta} = \frac{1}{\rho_0 \Delta U^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \rho \rangle (U_1 - \langle u_1 \rangle_f) (\langle u_1 \rangle_f - U_2) dx_2, \quad (5.5)$$

o  ρ_0 est la masse volumique moyenne des deux  coulements parall les en entr e. Les d finitions (5.2) et (5.5) s'utilisent comme longueurs caract ristiques de la couche cisill e, $\Delta U = U_1 - U_2$ s'utilise comme vitesse de r f rence et ρ_0 comme masse volumique de r f rence. Dans le cas o  le profil de vitesse longitudinale est donn  par la relation (5.1), *i.e.* tangente hyperbolique, les  paisseurs initiales v rifient la relation $\delta_{\omega,0} = 4\delta_{\theta,0}$.

Le taux de croissance de l' paisseur de vorticit  d'une de couche de m lange *spatiale* est donn  par

$$\delta'_{\omega} = \frac{1}{\eta} \frac{d\delta_{\omega}}{dx_1}, \quad (5.6)$$

avec $\eta = (U_1 - U_2)/(U_1 + U_2)$. Pour les simulations bas es sur l'approximation d'un d veloppement temporel des couches de m lange, ce taux de croissance est d fini autrement

comme

$$\delta'_{\omega,t} = \frac{1}{\Delta U} \frac{d\delta_\omega}{dt} = \frac{4}{\delta_{\omega,0}} \frac{d\delta_\omega}{d\tau}, \quad (5.7)$$

avec $\tau = 4\Delta U t / \delta_{\omega,0}$. En admettant que $U_c = (U_1 + U_2)/2$, ces relations vérifient

$$\delta'_\omega = \frac{1}{\eta} \frac{d\delta_\omega}{dx_1} = \frac{1}{\eta} \frac{dt}{dx_1} \frac{d\delta_\omega}{dt} = \frac{2}{\Delta U} \frac{d\delta_\omega}{dt} = 2\delta'_{\omega,t}. \quad (5.8)$$

Le même raisonnement peut être appliqué à la définition du taux de croissance de l'épaisseur de quantité de mouvement.

Le nombre de Reynolds basé sur l'épaisseur de vorticit  est d fini par

$$Re_\omega = \frac{\rho_0 \Delta U \delta_\omega}{\mu_0}, \quad (5.9)$$

o  la valeur moyenne de la viscosit  dynamique en entr e est prise en compte. Les d finitions du nombre de Reynolds et l' paisseur caract ristique sont utilis es pour dimensionner la couche de m lange.

Papamoschou & Roshko [126] ont d fini un rep re de r f rence dans leur  tudes exp rimentales afin de mesurer la compressibilit  de la couche cisail e. Il s'agit d'un r f rentiel galil en, diff rent de celui du laboratoire, se d pla ant   la vitesse des grandes structures turbulentes U_c . Dans ce rep re, les nombres de Mach convectifs pour chacun des  coulements sont d finis par

$$\begin{aligned} M_{c_1} &= \frac{U_1 - U_c}{c_1}, \\ M_{c_2} &= \frac{U_c - U_2}{c_2}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

o  c_1 et c_2 sont les vitesses du son dans chacun des  coulements. Dans le cas o  M_{c_1} et M_{c_2} ne sont pas des quantit s assez  lev es et le rapport des chaleurs sp cifiques de chacun des  coulements reste le m me, *i.e.* $\gamma_1 = \gamma_2$, Papamoschou & Roshko ont d montr  la relation

$$U_c = \frac{c_1 U_1 + c_2 U_2}{c_1 + c_2}. \quad (5.11)$$

L' quation (5.11) peut  tre substitu e dans (5.10) pour obtenir le nombre de Mach convectif de la couche cisail e

$$M_c = \frac{\Delta U}{c_1 + c_2}. \quad (5.12)$$

La relation (5.12) sera toujours utilis e dans ce travail m me quand le rapport des chaleurs sp cifiques γ soit diff rent dans chaque  coulement. La raison de ce choix est justifi e dans la r f rence [70] o  il est d montr  que la variation du nombre de Mach convectif d    la variation de γ reste limit e pour une gamme des valeurs assez large de cette quantit . En particulier, cette diff rence reste inf rieure   12% pour $M_c \in [0, 3]$ et $\gamma \in [1.1, 1.6]$. De plus, l' quation (5.12) est tr s couramment employ e dans la litt rature pour des cas o  le rapport des chaleurs sp cifiques diff re dans chacun des  coulements [27, 33, 110, 124, 148, 154].

L'effet de la compressibilité sur le taux de croissance de la couche de mélange, mesuré par le biais de la relation (5.12), peut être isolé des effets dus au rapport des vitesses de chacun des écoulements, $r = U_2/U_1$, et au rapport de masses volumiques, $s = \rho_2/\rho_1$. Pour cela, le taux de croissance de la couche de mélange compressible se normalise par le taux de croissance d'une couche de mélange incompressible ayant les mêmes rapports de vitesses et de masses volumiques. Après cette normalisation, les taux de croissance se rassemblent autour d'une seule courbe quand ils sont tracés en fonction du nombre de Mach convectif. Un exemple de ce comportement est illustré dans la "courbe expérimentale de Langley", obtenue à partir d'une compilation des expériences réalisées sur plusieurs couches cisailées air-air. Cette courbe montre que le taux de croissance décroît avec l'augmentation du Mach convectif. La compressibilité se comporte donc comme un mécanisme stabilisateur de la couche de mélange atténuant les modes instables des structures bidimensionnelles de Kelvin-Helmholtz et favorisant le développement des modes d'instabilité obliques [48]. Ainsi, les couches cisailées compressibles ont une structure plus tridimensionnelle et désorganisée que celles incompressibles [55].

Les effets du rapport de vitesse et de masse volumique sur le taux de croissance d'une couche de mélange sont pratiquement similaires dans le régime compressible et incompressible. En particulier, le taux de croissance se réduit lorsque le gaz le plus lourd est présent dans l'écoulement le plus rapide et augmente s'il se trouve dans l'écoulement le plus lent [21]. En outre, le taux de croissance augmente avec la diminution du rapport de vitesses U_2/U_1 , *e.g.* avec l'augmentation de la différence de vitesses U_1 et U_2 .

5.3 Couche de mélange incompressible

Cette section est consacrée à l'étude par simulation numérique d'une couche de mélange incompressible afin de déterminer ses principales caractéristiques aérodynamiques. La validation numérique de ces résultats permettra d'aborder ensuite des cas plus complexes.

La configuration de couche de mélange proposée ici est très similaire à celle présentée par Bogey [16]. La vitesse de chacun des écoulements est fixée à $U_1 = 100$ m/s et $U_2 = 50$ m/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 dû au très faible nombre de Mach convectif. Les dimensions du domaine de calcul sont $L_1 = 320\delta_{\omega,0}$ et $L_2 = 198\delta_{\omega,0}$. Ce domaine est uniformément discrétisé 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, les mailles sont progressivement étirées avec un taux de 1.8% à partir du centre du domaine, où la taille de maille est fixée à $\Delta x_2 = 0.16\delta_{\omega,0}$. A l'entrée du domaine de calcul, une condition de type Dirichlet est imposée et une condition non réfléchissante est utilisée en sortie, 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 $\rho = 1.22$ kg/m³ à pression $p = 1$ bar. La vitesse longitudinale suit le profil en tangente hyperbolique (5.1) tandis que la vitesse transversale est fixée à une valeur nulle. Afin de produire le déclenchement des

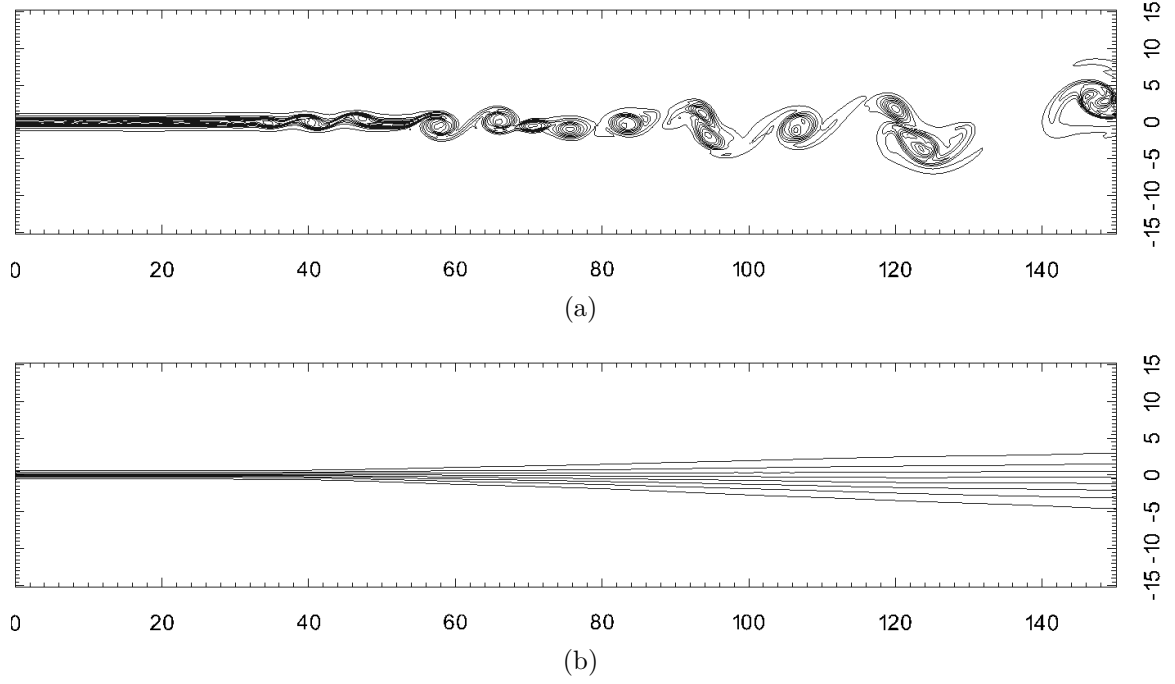


FIGURE 5.2 – Isolignes de vorticité instantanée (a) et de vitesse longitudinale moyenne (b).

instabilités du type Kelvin-Helmholtz, une perturbation aléatoire

$$v_p = \varepsilon \alpha U_c \exp \left(-\frac{(x_1 - x_{1,0})^2 + (x_2 - x_{2,0})^2}{\Delta x_0^2} \right), \quad (5.13)$$

est appliquée à la composante de vitesse transversale en $(x_{1,0}, x_{2,0}) = (4\delta_{\omega,0}, 0)$. La quantité ε désigne un nombre aléatoire compris entre -1 et $+1$, α et Δx_0 sont, respectivement, l'amplitude et la taille de la perturbation. Dans cette simulation $\alpha = 2 \times 10^{-3}$ et $\Delta x_0 = \delta_{\theta,0}$. D'après Bogey [16], ce type d'excitation vise à déclencher le développement naturel de la couche de mélange. Stanley & Sarkar [157] ont effectué une étude de l'influence des différentes excitations sur le développement de la couche de mélange. Certains types de forçages provoquent un déclenchement anticipé des instabilités par rapport à une perturbation aléatoire, *i.e.* bruit blanc. Ces perturbations contribuent à augmenter de façon *artificielle* le taux de croissance de la couche de mélange sur les premières étapes de développement et, après une certaine distance, la pente du taux de croissance se relaxe pour atteindre des valeurs plus proches de celles obtenues avec une perturbation aléatoire. Les simulations présentées dans ce travail utilisent uniquement un forçage aléatoire. Ce type de perturbation sera aussi retenu pour étudier la contribution des effets de compressibilité et du taux de dégagement de chaleur à la transition de la couche de mélange. 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.

La figure 5.2 montre les isolignes de vorticité et vitesse longitudinale moyenne en régime établi. L'apparition des structures tourbillonnaires a lieu près de $x_1 = 60\delta_{\omega,0}$, ce qui est en excellent accord avec les résultats de Bogey. Les tourbillons formés s'apparient

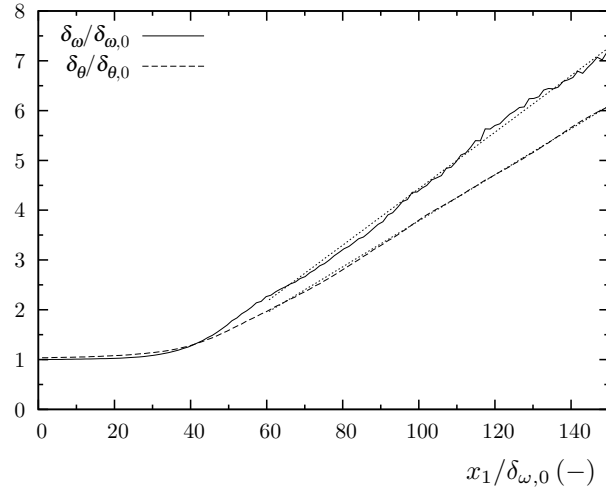


FIGURE 5.3 – Evolutions spatiales des épaisseurs de vorticité et de quantité de mouvement normalisées par leurs valeurs initiales respectives.

d’une manière aléatoire contribuant à l’élargissement de la couche, ce qui est vérifié par la forme régulière des isolignes de vitesse longitudinale moyenne.

L’évolution spatiale des épaisseurs de vorticité et quantité de mouvement, illustrée sur la figure 5.3, permet d’obtenir des grandeurs quantitatives concernant cette couche cisailée. Après une première phase de croissance pratiquement nulle, ce deux quantités augmentent de façon linéaire à partir de $x_1 = 50\delta_{\omega,0}$. Ce caractère linéaire de croissance a été reporté dans plusieurs études expérimentales et numériques (voir tableau 5.1). Dans cette étude, la valeur trouvée pour $\eta^{-1}d\delta_{\omega}/dx_1$ est égale à 0.166, ce qui est consistant avec différentes références comme le montre le tableau 5.1.

Un autre aspect important à étudier concerne le caractère autosimilaire des profils transversaux de vitesse longitudinale moyenne ainsi que les profils de vitesse rms (*root mean square*) déduits du tenseur de contraintes de Reynolds. La figure 5.4(a) confirme le caractère autosimilaire des profils de vitesse longitudinale moyenne tracés à différentes abscisses $x_1^* \equiv x_1/\delta_{\omega,0}$. La similitude des profils de vitesse rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds, figures 5.4(b)–5.4(d), est obtenue à partir de $x_1 \approx 100\delta_{\omega,0}$. Les valeurs maximales des vitesses rms ont été regroupées dans le tableau 5.1 afin de

TABLEAU 5.1 – Compilation de résultats adimensionnels obtenus pour différentes couches de mélange incompressibles.

$Re_{\omega,0}$	$r_{11,\max}$	$r_{22,\max}$	$r_{12,\max}$	$\eta^{-1}d\delta_{\omega}/dx_1$	Type	Référence
-	0.176	0.138	0.097	0.190	Exp.	Wygnanski & Fiedler [175]
-	0.190	0.120	0.114	0.160	Exp.	Spencer & Jones [156]
1800	0.180	0.140	0.100	0.163	DNS-3D	Bell & Mehta [12]
3200	0.160	0.130	0.100	0.130	DNS-3D	Rogers & Moser [138]
720	0.200	0.290	0.150	0.143	DNS-2D	Stanley & Sarkar [157]
5333	0.200	0.260	0.140	0.180	DNS-2D	Bogey [16]
5333	0.240	0.280	0.120	0.166	DNS-2D	Simulation présente

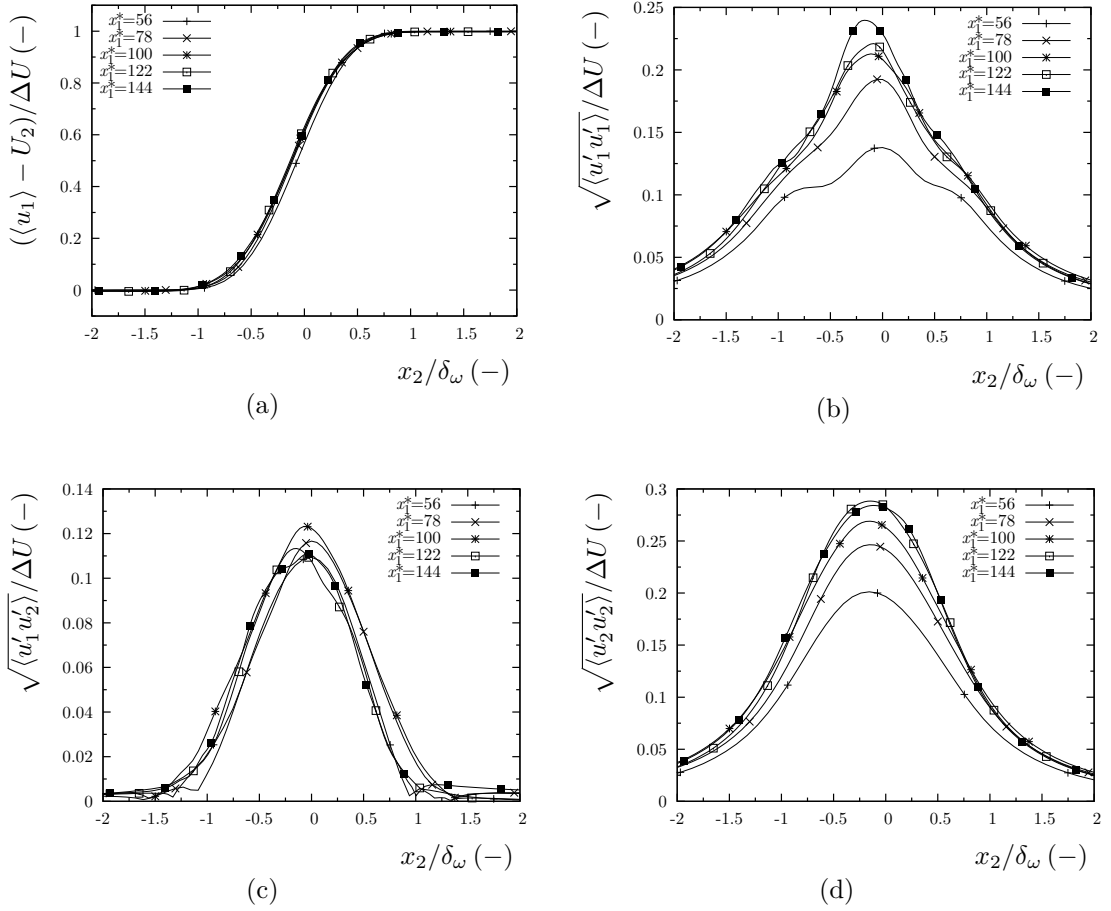


FIGURE 5.4 – Profils de la vitesse longitudinale moyenne et vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds, normalisés et montrés à différentes abscisses.

les comparer à d'autres études expérimentales et numériques. La valeur maximale de $r_{11} = \sqrt{|\langle u_1' u_1' \rangle|} / \Delta U$ est légèrement supérieure à celles obtenues avec d'autres simulations numériques bidimensionnelles. Néanmoins, la valeur maximale de $r_{12} = \sqrt{|\langle u_1' u_2' \rangle|} / \Delta U$ reste inférieure par rapport à ces simulations bidimensionnelles, mais plus grande que celle déterminée par le biais des simulations tridimensionnelles ou dans des études expérimentales, car l'énergie cinétique turbulente est surestimée dans les cas bidimensionnels.

Le bon accord obtenu entre les résultats présentés ici et ceux issus d'autres études précédentes permet de vérifier numériquement le bon comportement du code de calcul pour la simulation numérique des couches de mélanges incompressibles. Dans la suite, l'étude des couches de mélange bidimensionnelles compressibles inertes et réactives sera abordé.

5.4 Couches de mélange compressibles inertes

Cette section est consacrée à l'étude du développement spatial des couches de mélange compressibles bidimensionnelles inertes. Les différents nombres de Mach convectifs étudiés

sont 0.35, 0.70 et 1.10. Dans un premier temps, le mélange retenu pour chacun des écoulements parallèles est décrit et, ensuite, les propriétés des couches cisailées sont présentées séparément. Finalement, une comparaison des résultats est réalisée avec pour objectif de mettre en évidence les différences rencontrées en fonction du degré de compressibilité.

5.4.1 Description du mélange retenu

Les mélanges qui seront étudiés dans la suite correspondent à des études expérimentales et numériques portant sur des systèmes de propulsion à haute vitesse [28, 110, 148], *e.g.* moteurs ramjet et scramjet. Compte tenu de sa haute énergie par unité de masse et son faible temps d'auto-inflammation, l'hydrogène est le combustible préféré pour ce type de systèmes. Pour alléger le poids des structures aéronautiques, la longueur des moteurs scramjet reste assez limitée et le temps caractéristique de mélange dans une chambre de combustion peut être du même ordre de grandeur que le temps chimique de réaction du mélange hydrogène-air, ce qui peut réduire significativement l'efficacité de la combustion. Le développement de ces systèmes de propulsion a ouvert une nouvelle branche de recherche sur des écoulements turbulents cisailés avec l'objectif de comprendre les mécanismes fondamentaux à partir desquels la compressibilité affecte de façon notable le mélange et la combustion.

La configuration expérimentale de Miller *et al.* [110], utilisée pour étudier l'influence de la compressibilité dans les couches cisailées turbulentes réactives, est composée de quatre parties principales : un système générateur d'air vicié, un système d'injection de combustible, la chambre des essais et le système d'évacuation. L'écoulement de combustible est composé d'un mélange d'hydrogène dilué avec azote (ou hélium) tandis que l'écoulement d'air vicié est créé à partir de la précombustion d'hydrogène dans l'air enrichi en oxygène. Dans les travaux de Miller *et al.*, les niveaux de taux de dégagement de chaleur des couches de mélange ne sont pas suffisamment grands pour changer les structures des grandes échelles et, donc, elles restent similaires à celles des couches inertes au même niveau de compressibilité.

Comme un des objectifs de ce travail de recherche est d'étudier le phénomène d'auto-inflammation des écoulements turbulents cisailés, nous considérons une configuration légèrement différente à celle de Miller *et al.*, synthétisée dans le tableau 5.2. Cette configuration de mélange est utilisée pour les couches cisailées inertes et réactives. Les quatre dernières colonnes du tableau 5.2 sont séparées en groupes de deux de façon à différencier les simulations numériques utilisant un schéma cinétique avec une seule étape réactionnelle ("chimie globale", CG) de celles utilisant un schéma cinétique détaillé avec plusieurs réactions élémentaires ("chimie détaillée", CD). Tel que cela a été suggéré dans [110], l'influence des radicaux présents dans le courant d'oxydant (air vicié) n'est pas négligeable et doit être prise en compte pour les simulations numériques avec chimie détaillée. Pour ce faire, des calculs d'équilibre ont été conduits à l'aide de la librairie CHEMKIN [86]. Ces calculs permettent de déterminer la composition, la température adiabatique ainsi que le temps d'auto-inflammation d'un mélange donné à l'équilibre chimique. A partir des

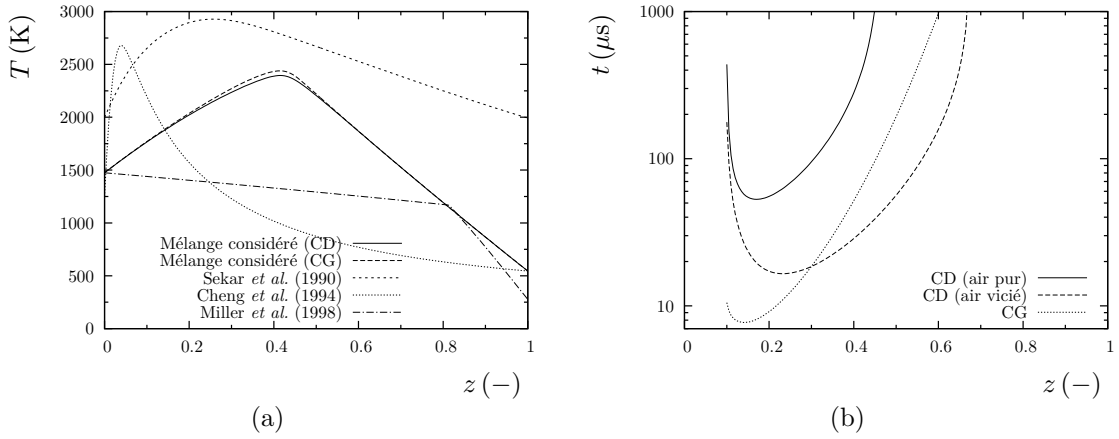


FIGURE 5.5 – Température adiabatique du mélange (a) et temps d’auto-inflammation (b) en fonction de la fraction de mélange correspondant au mélange considéré et autres mélanges reportés dans la littérature.

données expérimentales mesurées par Miller *et al.*, il est possible de calculer les fractions massiques de radicaux à l’équilibre chimique. Des valeurs approximatives de ces quantités ont été reportées dans le tableau 5.2.

La figure 5.5(a) montre la température adiabatique d’équilibre en fonction de la fraction de mélange

$$z = \frac{1}{1 + \phi} \left(\phi \frac{Y_C}{Y_{C,c}} - \frac{Y_O}{Y_{O,o}} + 1 \right), \quad (5.14)$$

où Y_C et Y_O sont les fractions massiques de combustible et d’oxydant, respectivement. La quantité $Y_{C,c}$ est la fraction massique de combustible du côté de combustible tandis que $Y_{O,o}$ désigne la même quantité se référant à l’oxydant. La richesse du mélange ϕ est définie comme

$$\phi = \frac{\nu_O W_O Y_{C,c}}{\nu_C W_C Y_{O,o}}. \quad (5.15)$$

TABLEAU 5.2 – Configuration du mélange retenu pour les couches cisillées inertes et réactives.

Quantité	Comb. (CG)	Ox. (CG)	Comb. (CD)	Ox. (CD)
Pression (Pa)	94232.25	94232.25	94232.25	94232.25
Température (K)	545.0	1475.0	545.0	1475.0
M. vol. (kg/m^3)	0.354	0.203	0.354	0.203
Y_{H_2} (-)	0.05	0.0	0.05	0.0
Y_{O_2} (-)	0.0	0.278	0.0	0.278
$Y_{\text{H}_2\text{O}}$ (-)	0.0	0.17	0.0	0.17
Y_{H} (-)	—	—	0.0	$5.60 \cdot 10^{-7}$
Y_{O} (-)	—	—	0.0	$1.55 \cdot 10^{-4}$
Y_{OH} (-)	—	—	0.0	$1.83 \cdot 10^{-3}$
Y_{HO_2} (-)	—	—	0.0	$5.10 \cdot 10^{-6}$
$Y_{\text{H}_2\text{O}_2}$ (-)	—	—	0.0	$2.50 \cdot 10^{-7}$
Y_{N_2} (-)	0.95	0.552	0.95	0.55

La température adiabatique d'équilibre pour la configuration de mélange retenue dans ce travail est comparée à différents mélanges utilisés dans la littérature : Miller *et al.* [110], Cheng *et al.* [28] et Sekar & Mukunda [148]. Cette température, correspondant au taux maximum de dégagement de chaleur, s'utilise comme une estimation des niveaux de température maximum attendus dans la couche de mélange. Dans la configuration de Miller *et al.*, la température adiabatique d'équilibre reste inférieure à celle de l'air vicié ($z = 0$), ce qui explique les résultats observés par les auteurs, discutés ci-dessus. Dans la configuration expérimentale de Cheng *et al.*, les effets dus à la combustion sont relativement importants, élevant la température jusqu'à 2700 K près de la stœchiométrie ($z_{st} = 0.41$). Finalement, la courbe correspondant à la simulation numérique effectuée par Sekar & Mukunda montre des effets encore plus importants. La courbe correspondant à la configuration retenue dans ce travail se situe dans une région intermédiaire. Cette configuration est obtenue en utilisant les mêmes compositions que Miller *et al.* et la même température de l'écoulement d'air vicié ($z = 0$). Du côté combustible ($z = 1$), la température de 545 K correspond à celle mesurée par Cheng *et al.* tandis que la fraction massique d'hydrogène est réduite de moitié par rapport à la configuration de Miller *et al.*. Ce choix permet d'obtenir une température maximale adiabatique de mélange suffisamment élevée pour produire des changements significatifs aux grandes échelles tout en utilisant une gamme de valeurs de composition et température compatibles avec les bancs d'essais actuels.

La figure 5.5(b) montre les temps d'auto-inflammation attendus dans la configuration de mélange retenue pour les deux schémas cinétiques mentionnés auparavant. Les calculs en chimie globale (CG) sont conduits avec le mécanisme de réaction globale de Marinov *et al.* [102], constitué d'une seule réaction globale et 4 espèces, tandis que les calculs en chimie détaillée (CD) sont effectués avec le mécanisme de Ó Conaire *et al.* [119], constitué de 21 réactions élémentaires et 9 espèces. Le schéma global présente le temps d'auto-ignition le plus faible. Avec le schéma détaillé l'effet de la présence de radicaux (air vicié) dans l'écoulement d'oxydant diminue le temps d'auto-inflammation au même temps qu'il augmente l'étendue de la zone inflammable. Néanmoins, le temps d'auto-inflammation reste toujours supérieur à celui obtenu à partir d'un mécanisme de réaction globale. À la lumière de ces résultats, les simulations numériques réactives conduites avec chimie détaillée sans prendre en compte la présence de radicaux (air pur) s'avèrent très coûteuses, voir irréalisables, car les dimensions du domaine de calcul nécessaires pour atteindre des conditions propices à l'auto-allumage du mélange seront exagérément importantes.

La configuration du mélange reportée dans le tableau 5.2 sera utilisée dans la suite pour les calculs des couches de mélange inertes à différents nombres de Mach convectif. Ces valeurs ont été choisies de façon stratégique : une valeur de $M_c = 0.35$ située dans la limite du régime incompressible (cas I-2D-0.35) selon la courbe expérimentale de Langley, une valeur $M_c = 0.70$ (cas I-2D-0.70) située dans la zone de transition de cette courbe et, finalement, une valeur $M_c = 1.10$ (cas I-2D-1.10) appartenant au régime compressible.

5.4.2 Paramètres de simulation

Des couches de mélange inertes à différents niveaux de compressibilité sont présentées dans la suite. Le tableau 5.3 résume les propriétés de chacune de ces couches cisillées. Il s'agit, dans tous les cas, des couches de mélange supersoniques. Le rapport de masse volumique se maintient constant car les propriétés du combustible et l'oxydant ne changent pas. Ce rapport est légèrement supérieur à l'unité, ce qui peut favoriser, dans un premier temps, l'augmentation du taux de croissance. Le rapport de vitesses diminue avec l'augmentation du Mach convectif. Pour arriver à ces trois configurations, la vitesse du courant de combustible (écoulement supérieur de la figure 5.1) est maintenue constante et légèrement supersonique, tandis que la vitesse du courant d'air vicié (plus léger) est augmentée de façon à accroître le Mach convectif. Finalement, la valeur de l'épaisseur de vorticit  initiale $\delta_{\omega,0}$ est modifi e de fa on   obtenir une valeur constante du nombre de Reynolds en entr e $Re_{\omega,0} = 640$ pour les trois r gimes.

Les simulations num riques sont r alis es dans un domaine de calcul cart sien de dimensions $L_1 \times L_2 = 350\delta_{\omega,0} \times 80\delta_{\omega,0}$ pour les cas quasi incompressible et $L_1 \times L_2 = 350\delta_{\omega,0} \times 122\delta_{\omega,0}$ pour les autres deux cas. Ces domaines sont discr tis s avec $N_1 \times N_2 = 1739 \times 369$ points et $N_1 \times N_2 = 1739 \times 403$ points, respectivement. Afin de diminuer le co t de calcul li  aux simulations, un  tirement des mailles est r alis  dans les deux directions de l'espace. Dans la direction transversale, la taille de maille est maintenue constante ($\Delta x_2 = 0.168\delta_{\omega,0}$) entre le centre du domaine et $x_2 = \pm 20\delta_{\omega,0}$. Cette r gion, avec un pas de discr tisation spatiale constant, englobe toute la zone de d veloppement de la couche de m lange. Ensuite, un  tirement constant   un taux de 40% est appliqu  jusqu'  $x_2 = \pm 30\delta_{\omega,0}$. Au del , le taux d' tirement est fix    500%. Dans la direction longitudinale, un  tirement continu est appliqu  comme le montre la figure 5.6. La valeur maximale de taille de maille, $\Delta x_1 = 0.40\delta_{\omega,0}$, correspond   celle retenue dans la DNS de couches de m lange spatiales de Fu & Li [55]. La taille minimale de maille, $\Delta x_1 = 0.168\delta_{\omega,0}$, correspond   celle utilis e dans diff rentes DNS des couches de m lange temporelles [101, 123].

Les simulations sont initialis es avec le profil en tangente hyperbolique donn  par (5.1). Ce profil n'est pas exclusivement appliqu    la vitesse longitudinale, mais aussi aux diff rentes esp ces et   la temp rature, pour  viter d'introduire des solutions discontin-

TABLEAU 5.3 – Param tres de simulation des couches cisill es pour diff rents nombres de Mach convectifs. L'indice 1 correspond   l'injection du courant d'oxydant et l'indice 2 correspond   l'injection du courant de combustible.

Quantit�	$M_c = 0.35$	$M_c = 0.70$	$M_c = 1.10$
U_1 (m/s)	1151.6	1634.0	2185.4
M_1 (–)	1.5	2.1	2.8
U_2 (m/s)	669.1	669.1	669.1
M_2 (–)	1.1	1.1	1.1
r (–)	0.58	0.41	0.31
s (–)	1.74	1.74	1.74
η (–)	0.265	0.419	0.531
$\delta_{\omega,0}$ (m)	$1.98 \cdot 10^{-4}$	$9.88 \cdot 10^{-5}$	$6.28 \cdot 10^{-5}$

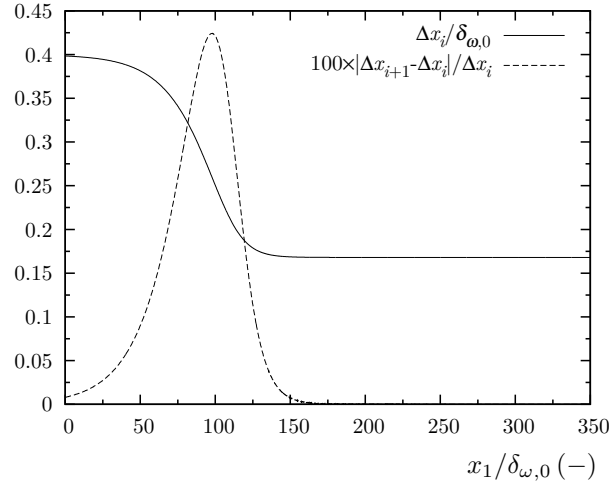


FIGURE 5.6 – Evolution de la taille de maille dans le sens longitudinal pour la simulation des couches de mélange.

ues [124]. Une condition limite de type Dirichlet est appliquée en entrée, tandis qu’une condition parfaitement non réfléchissante est appliquée en sortie, en bas et en haut du domaine de calcul. Une perturbation aléatoire, *i.e.* bruit blanc, donnée par (5.13) avec $\varepsilon = 0.01$ et $\Delta x_0 = \delta_{\theta,0}$ est ajoutée à la composante transversale de vitesse en $(x_{1,0}, x_{2,0}) = (4\delta_{\omega,0}, 0)$. La stabilité des simulations numériques est assurée par un nombre de CFL fixé à 0.75 et un nombre de Fourier égal à 0.1.

Une simulation numérique préliminaire d’un profil correspondant à une section transversale quelconque de la couche de mélange a été conduite de façon à isoler l’influence des termes de transport moléculaire. Cette simulation se déroule dans un domaine de calcul monodimensionnel de longueur $L_1 = 80\delta_{\omega,0}$ discrétisé en 369 points de calcul. La solution initiale correspond au profil en tangente hyperbolique pour les espèces et la température. La vitesse longitudinale est nulle. Des conditions limites non réfléchissantes sont imposées aux extrémités et les mêmes critères de stabilité numérique mentionnés précédemment sont utilisés. La figure 5.7 montre les résultats obtenus avec une description détaillée et simplifiée des termes de transport. Le temps de simulation de $80 \mu\text{s}$ est suffisamment grand pour qu’une particule traverse le domaine de calcul correspondant au cas I-2D-0.35. Ce temps est suffisamment grand pour étudier l’influence des termes moléculaires sur cette particule pendant un temps convectif caractéristique d’une couche de mélange à $M_c = 0.35$. Pour ce cas inerte, la différence entre les deux descriptions des termes de transport reste assez faible. L’approche détaillée n’est pas, à la lumière de ces résultats, essentielle dans cette configuration. Néanmoins, cette description détaillée des termes de transport sera tout de même retenue dans la suite car le coût de calcul additionnel des simulations est ici seulement d’environ 10% par rapport à l’approche simplifiée.

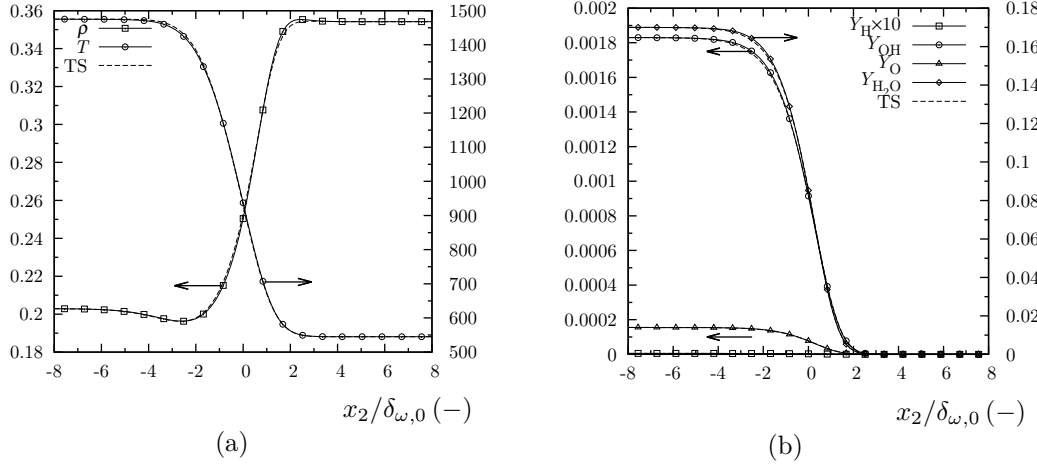
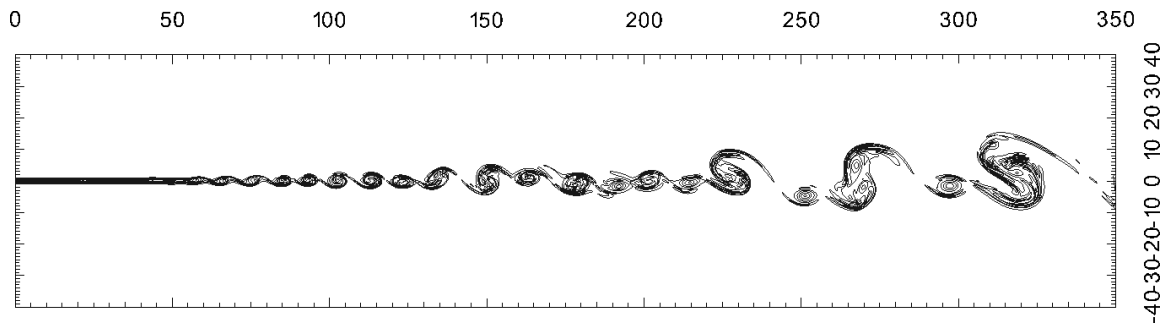


FIGURE 5.7 – Test de diffusion correspondant à une section de la couche de mélange inerte. Comparaison des solutions obtenues avec transport détaillé (symboles) et transport simplifié (TS) à $t = 80 \mu\text{s}$. 369 points de calcul, CFL=0.75, Fo=0.1. Unités SI.

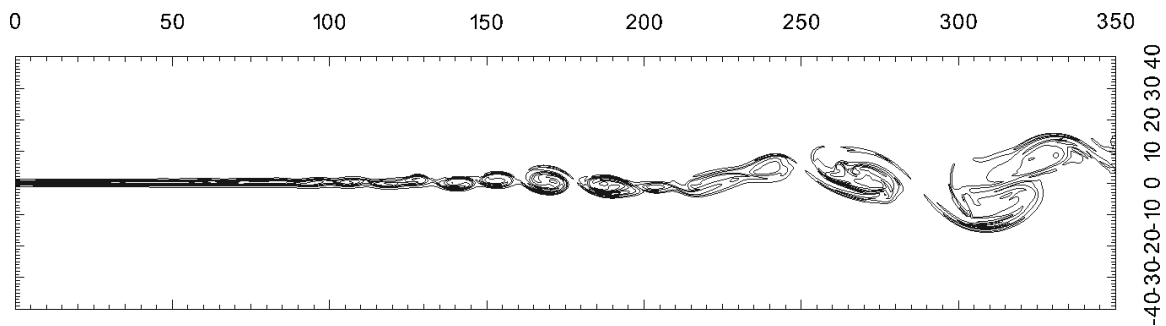
5.4.3 Structure des couches de mélange

La figure 5.8 montre des visualisations instantanées de l'écoulement avec les isolignes de vorticité, correspondant à différents niveaux de compressibilité. L'appariement des tourbillons du cas I-2D-0.35 est similaire à celui observé dans la simulation de la couche de mélange incompressible (figure 5.2(a)) et aux résultats présentés par Stanley & Sarkar. Les premiers appariements se produisent juste avant $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$. Cette distance est néanmoins significativement plus importante que celle du cas incompressible. Ces tourbillons croissent au fur et à mesure qu'ils se déplacent dans le sens de l'écoulement. Le cas I-2D-0.70 présente un développement des structures moins cohérent. Les premiers appariements se forment à environ $x_1 = 150\delta_{\omega,0}$, donnant naissance à des structures tourbillonnaires plus distordues. Finalement, la figure 5.8(c) montre que l'excitation aléatoire n'arrive pas à déclencher les instabilités de la couche cisailée à $M_c = 1.10$. Ce résultat est consistant avec l'étude de Fedioun & Lardjane [48] consacrée à l'analyse linéaire de stabilité temporelle des couches de mélange binaires tridimensionnelles. Les modes d'instabilité les plus amplifiés de la couche cisailée deviennent en effet tridimensionnels avec l'augmentation du nombre de Mach convectif. Le plan où les perturbations se propagent se décale d'un certain angle du plan x_1 - x_2 où l'écoulement bidimensionnel a lieu. Cela empêche le développement spatial de la couche de mélange bidimensionnelle comme le montre la figure 5.8(c). Dans la suite, ce régime de compressibilité ne sera abordé que dans les simulations tridimensionnelles.

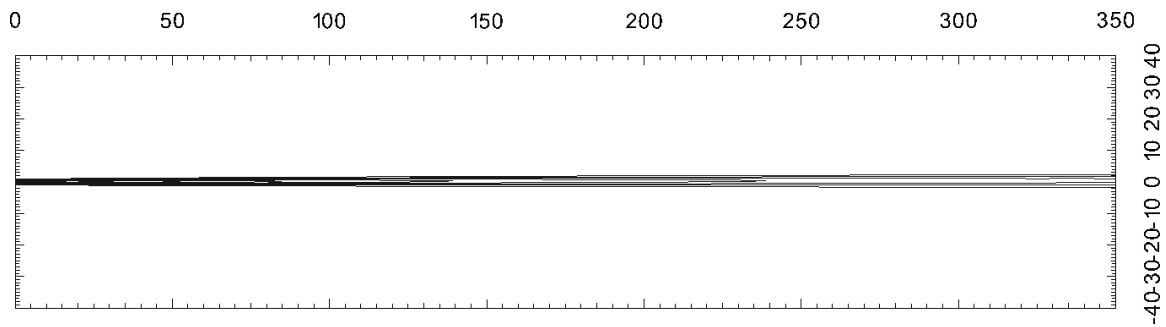
La figure 5.9 montre les champs instantanés de la fraction massique d'hydrogène pour les deux cas retenus : I-2D-0.35 et I-2D-0.70. Cette figure permet d'observer l'influence de la compressibilité sur la topologie des structures ainsi que du mélange. Pour le régime quasi incompressible (figure 5.9(a)), ces structures conservent une cohérence plus marquée et trois rouleaux peuvent être identifiés aux abscisses : $x_1 \approx 227\delta_{\omega,0}$, $x_1 \approx 270\delta_{\omega,0}$ et $x_1 \approx$



(a) Cas I-2D-0.35.

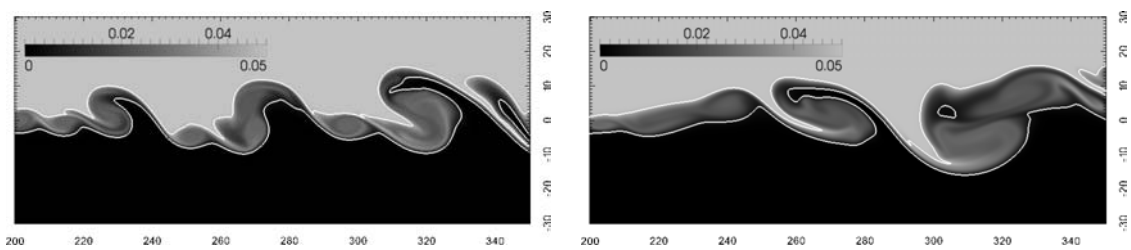


(b) Cas I-2D-0.70.



(c) Cas I-2D-1.10.

FIGURE 5.8 – Isolignes de vorticité pour les couches de mélange inertes.



(a) Cas I-2D-0.35.

(b) Cas I-2D-0.70.

FIGURE 5.9 – Champ instantané de la fraction massique d'hydrogène. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$.

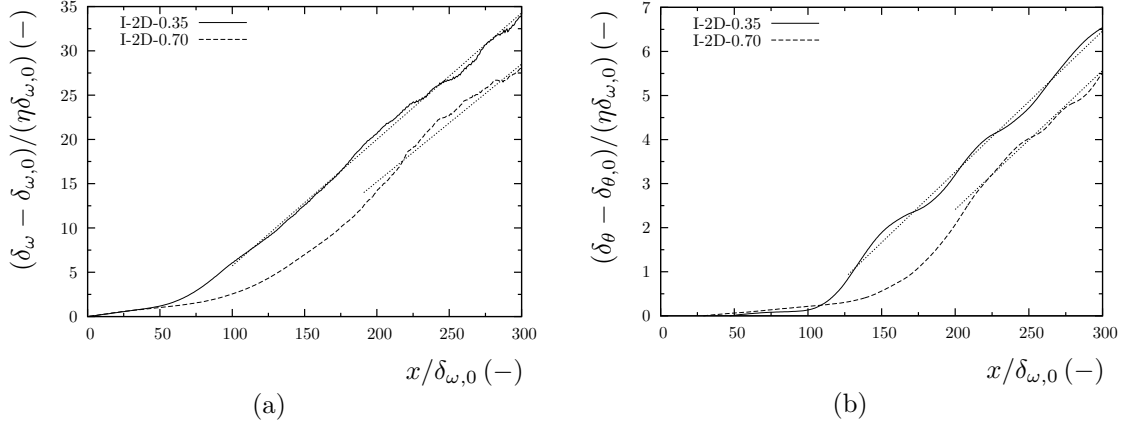


FIGURE 5.10 – Evolution spatiale des  paisseurs normalis es de vorticit  (a) et de quantit  de mouvement (b).

$320\delta_{\omega,0}$. En revanche, le cas I-2D-0.70 pr sente une structure beaucoup plus d sorganis e et allong e.

5.4.4 Etat d'autosimilarit 

Les simulations pr sentes ont  t  conduites pendant un temps suffisamment long pour g n rer une base de donn es qui permet d'effectuer des analyses statistiques. En outre, les domaines de calcul choisis sont suffisamment longs dans la direction longitudinale pour atteindre l' tat d'autosimilarit .

La figure 5.10(a) montre l' volution spatiale de l' paisseur de vorticit  normalis e pour les deux simulations   nombre de Mach convectif diff rent. Dans le cas I-2D-0.35, l' volution de l' paisseur de vorticit  montre que la croissance lin aire de la couche cisail e a lieu en $x_1 \approx 100\delta_{\omega,0}$. Quand le nombre de Mach convectif est augment , la croissance lin aire se produit plus tard, en $x_1 \approx 225\delta_{\omega,0}$. Le tableau 5.4 rassemble les principaux r sultats obtenus pour ces deux simulations en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$. Les profils des quantit s moyennes pr sent es dans la suite seront calcul s   cette abscisse, sauf indication contraire. Comme attendu, le taux de croissance de l' paisseur de vorticit , donn  par la valeur de $\eta^{-1}d\delta_{\omega}/dx_1$, est l g rement inf rieur dans le r gime le plus compressible. Ces taux de croissance sont assez proches de ceux d termin s par Stanley & Sarkar [157] (voir tableau 5.1), qui ont r alis  des simulations num riques bidimensionnelles des couches de m lange incompressibles avec un nombre de Reynolds en entr e proche de celui des simulations pr sent es ici. La figure 5.10(b) montre l' volution spatiale de l' paisseur de quantit  de mouvement normalis e, qui peut  tre directement compar e   celle obtenue par Fu & Li [55] dans leur simulations tridimensionnelles. N anmoins, dans les simulations de Fu & Li, la croissance de la couche de m lange se produit plus en amont de l' coulement pour le m me nombre de Mach convectif ($x_1 \approx 50\delta_{\omega,0}$) d    la forme des perturbations introduites dans l' coulement. La quantit  $\delta'_{\omega}/\delta'_{\omega,i}$ permet d' valuer l'effet de la compressibilit  sur le taux de croissance de la couche cisail e. La valeur de r f rence $\delta'_{\omega,i} = 0.166$ correspond  

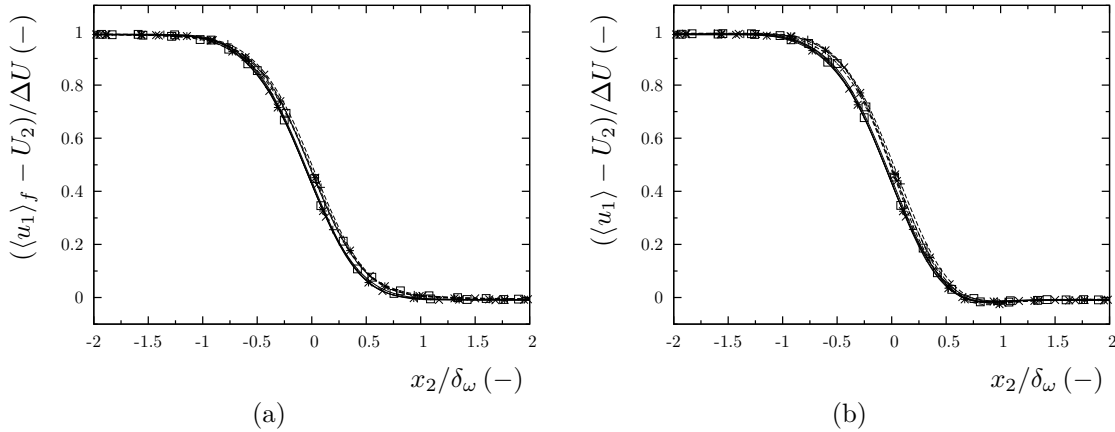


FIGURE 5.11 – Profils de vitesse longitudinale moyenne au sens de Favre (a) et Reynolds (b) normalisés, tracés à différentes abscisses : $x_1/\delta_{\omega,0} = 150$ (+), 200 (×), 250 (*) et 300 (□). $M_c = 0.35$ (—) et $M_c = 0.70$ (- -).

celle calculée pour la couche de mélange bidimensionnelle incompressible étudiée dans la section 5.3. Ces rapports sont montrés et comparés à d'autres résultats de la littérature et à ceux des simulations réactives sur la figure 5.19. Enfin, le nombre de Reynolds basé sur l'épaisseur de vorticit  est relativement  lev  [55, 123].

Le choix des quantit s ρ_0 , ΔU et δ_ω comme variables d'adimensionnement permet de v rifier l'obtention d'un  tat d'autosimilarit  en suivant le d veloppement spatial de certains profils moyenn s temporellement. La figure 5.11 montre aussi les profils de vitesse longitudinale moyenne au sens de Favre et au sens de Reynolds   diff rentes abscisses. L'autosimilarit  des solutions est  vidente ind pendamment du choix utilis  pour la moyenne, qui conduit   des r sultats presque  quivalents. Il est int ressant de remarquer que, en fonction du r gime de compressibilit , ces courbes convergent vers deux profils l g rement diff rents.

La figure 5.12 montre les profils des vitesses rms d duites du tenseur de contraintes de Reynolds d fini comme

$$R_{ij} = \frac{\langle \rho u_i'' u_j'' \rangle}{\langle \rho \rangle}. \quad (5.16)$$

En g n ral, la superposition des profils correspondant aux derni res abscisses, pour les deux nombres de Mach convectif retenus, permet de v rifier autrement l'arriv    l' tat d'autosimilarit . Dans le r gime le plus compressible, l' tat d'autosimilarit  est plus difficile   obtenir, ce qui est consistant avec les structures plus allong es qui s'appartiennent de

TABLEAU 5.4 – Caract risation des couches de m lange bidimensionnelles inertes. Le nombre de Reynolds est calcul  en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$.

Cas	$\eta^{-1}d\delta_\omega/dx_1$ (-)	$\delta'_\omega/\delta'_{\omega,i}$ (-)	Re_ω (-)
I-2D-0.35	0.143	0.86	6421
I-2D-0.70	0.133	0.80	8247

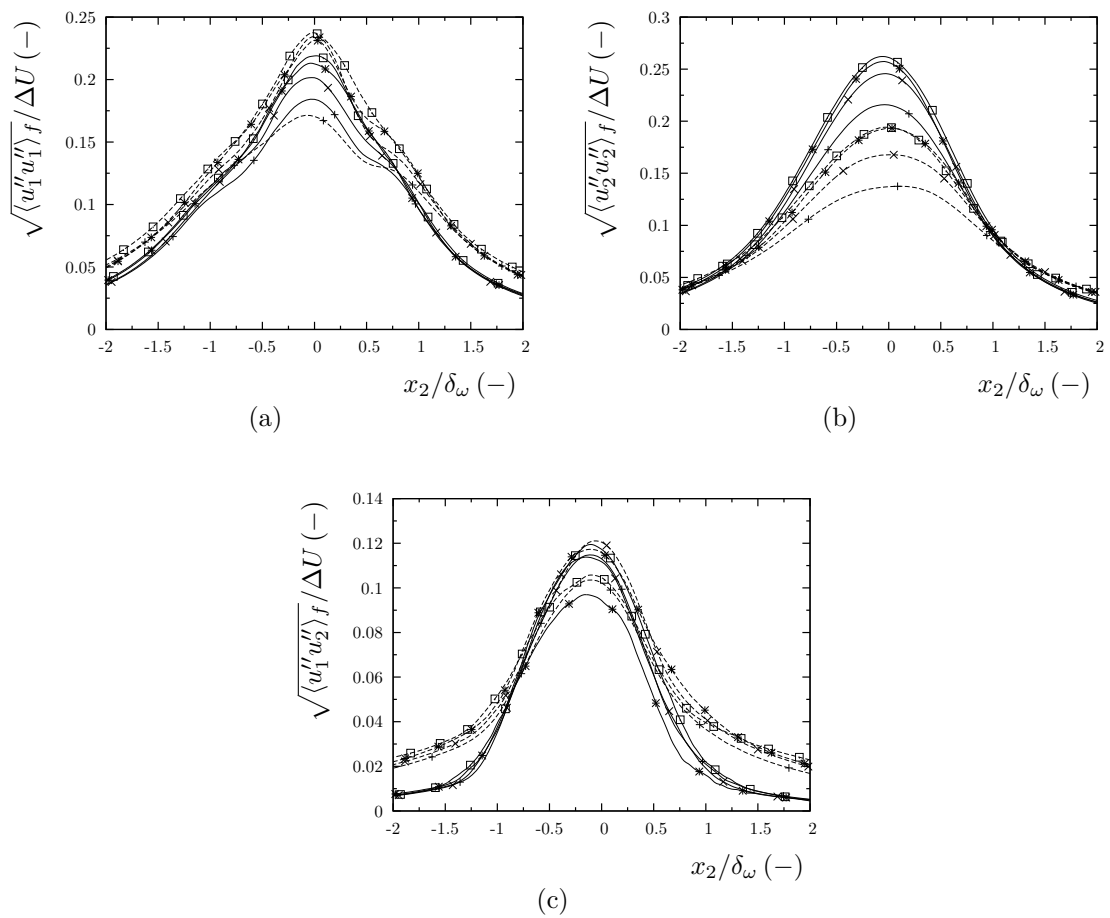


FIGURE 5.12 – Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds à différents abscisses. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 5.11.

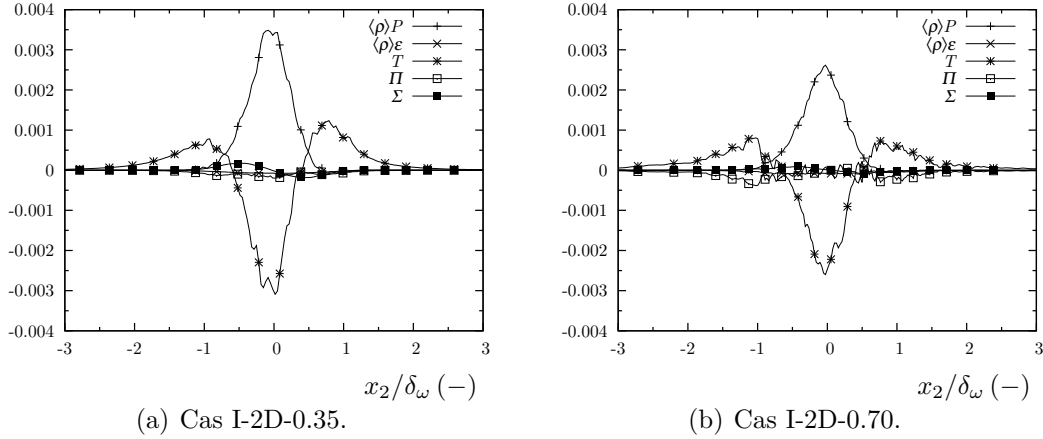


FIGURE 5.13 – Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente, normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega$.

manière moins efficace. Quant aux niveaux de vitesses rms, il y a une baisse significative de la composante transversale.

5.5 Equilibre énergétique

La figure 5.13 montre les différents termes de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente

$$\frac{D(\langle \rho \rangle k)}{Dt} = \langle \rho \rangle (P - \epsilon) - T + \Pi + \Sigma, \quad (5.17)$$

pour les deux nombres de Mach convectif retenus. Dans cette équation P est le terme de production, ϵ le terme de dissipation, T le terme de transport, Π le terme de pression-dilatation et Σ le terme de flux massique. La relation (5.17) est obtenue à partir de l'équation de transport du tenseur de Reynolds

$$\frac{D(\langle \rho \rangle R_{ij})}{Dt} = \langle \rho \rangle (P_{ij} - \epsilon_{ij}) - \frac{\partial T_{ijk}}{\partial x_k} + \Pi_{ij} + \Sigma_{ij}, \quad (5.18)$$

en contractant les indices, *i.e.* $k = R_{kk}/2$. Le terme de production est

$$P_{ij} = - \left(R_{ik} \frac{\partial \langle u_j \rangle_f}{\partial x_k} + R_{jk} \frac{\partial \langle u_i \rangle_f}{\partial x_k} \right), \quad (5.19)$$

le taux de dissipation est

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \left\langle \tau'_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \tau'_{jk} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right\rangle, \quad (5.20)$$

le terme de transport par les fluctuations de vitesse et pression ainsi que les effets visqueux est

$$T_{ijk} = \langle \rho u_i'' u_j'' u_k'' + p' u_i' \delta_{jk} + p' u_j' \delta_{ik} - \tau'_{jk} u_i'' + \tau'_{ik} u_j'' \rangle, \quad (5.21)$$

le terme de pression-dilatation est

$$\Pi_{ij} = \langle p' \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right) \rangle, \quad (5.22)$$

et, finalement, le terme de flux massique est donné par

$$\Sigma_{ij} = \langle u_i'' \rangle \left(\frac{\partial \langle \tau_{jk} \rangle}{\partial x_k} - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \right) + \langle u_j'' \rangle \left(\frac{\partial \langle \tau_{ik} \rangle}{\partial x_k} - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} \right). \quad (5.23)$$

Les résultats présentés dans la figure 5.13 montrent que, dans le cas bidimensionnels inertes, les termes les plus importants du bilan d'énergie cinétique turbulente sont ceux de production et transport. Les autres termes et, en particulier le taux de dissipation, sont relégués à un second plan. On notera que ces termes sont d'autant plus importants quand le Mach convectif dévient plus faible. La forme irrégulière des profils peut être attribuée à l'absence des directions d'homogénéisation, caractéristiques des simulations tridimensionnelles des couches de mélange, qui permettent de faire converger la base statistique plus rapidement avec le même nombre d'échantillons temporels.

5.6 Couches de mélange compressibles réactives

Cette section est consacrée à l'étude du développement spatial des couches de mélange compressibles bidimensionnelles réactives. La configuration du mélange retenue est strictement la même que pour les couches de mélange inertes (tableau 5.2). De la même manière, les paramètres de simulation reportés dans le tableau 5.3 restent inchangés. Les paramètres de la perturbation aléatoire sont modifiés par rapport au cas inerte de façon à avoir $\varepsilon = 0.001$ et $\Delta y_0 = \delta_{\omega,0}$. Une valeur de Δy_0 plus grande est nécessaire dans les cas réactifs pour exciter les modes externes les plus instables qui se trouvent loin du centre de la couche cisailée [32, 124, 132]. Les résultats de Day *et al.* [32] ont montré l'existence de ces modes d'instabilité déduits à partir de l'observation de deux maxima locaux du profil de $\rho \partial u_1 / \partial x_2$ pour des couches de mélange réactives spatiales. Ces deux modes, associés à un processus de mélange à deux étapes, ont été responsables d'une détérioration du processus du mélange et donc de combustion par rapport au cas inerte, où un seul mode central de Kelvin-Helmoltz existe.

A différence des cas inertes, les termes de production chimique des équations de Navier-Stokes (2.1)–(2.4) sont pris en compte permettant l'auto-inflammation du mélange. Les mécanismes réactionnels de Marinov *et al.* [102] et Ó Conaire *et al.* [119] sont envisagés pour les simulations conduites avec chimie globale (CG) et chimie détaillée (CD), respectivement. Les nombres de Mach convectifs étudiés sont $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. Le cas à $M_c = 1.10$ sera étudié dans les simulations tridimensionnelles. Les notations CG-2D-0.35 et CD-2D-0.35 font référence aux simulations à $M_c = 0.35$ conduites avec chimie globale et détaillée, respectivement. Une notation similaire est retenue pour les autres valeurs du nombre de Mach convectif considéré. Les mêmes domaines de calcul, conditions limites

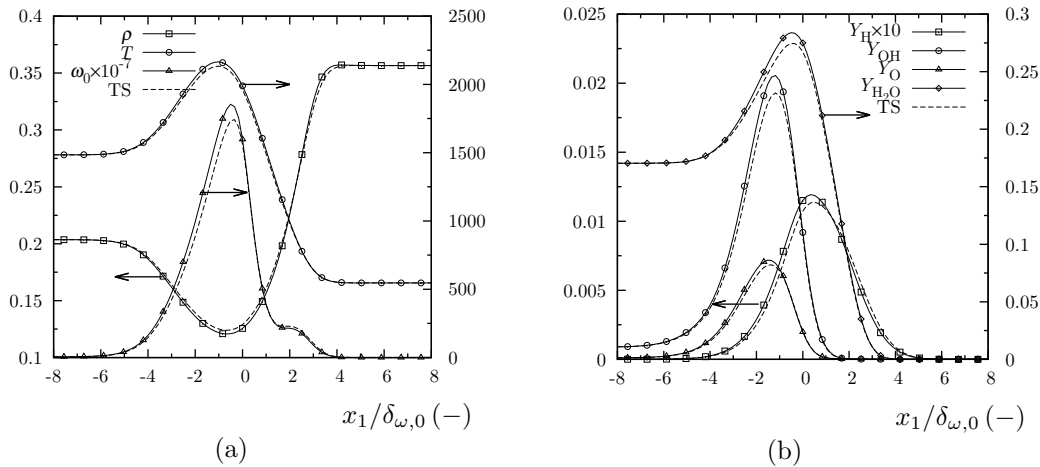


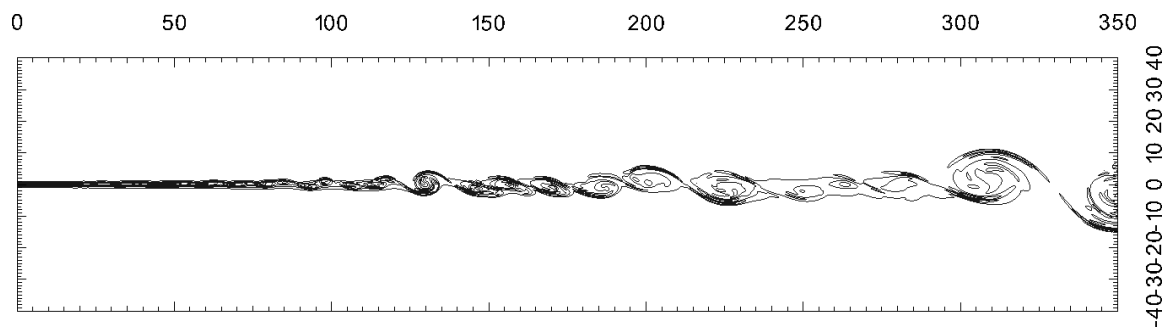
FIGURE 5.14 – Test de diffusion correspondant à une section de la couche de mélange réactive utilisant une chimie détaillée. Comparaison des solutions obtenues avec transport détaillé (symboles) et transport simplifié (TS) à $t = 80 \mu\text{s}$. 369 points de calcul, CFL=0.75, Fo=0.1. Unités SI.

et critères de stabilité commentés dans la section 5.4.2 sont utilisés à nouveau dans ces simulations réactives. De plus, le critère de stabilité chimique présenté dans la section 3.5 est employé pour assurer la stabilité numérique des calculs lors de l'application de la technique *splitting* de Strang [161].

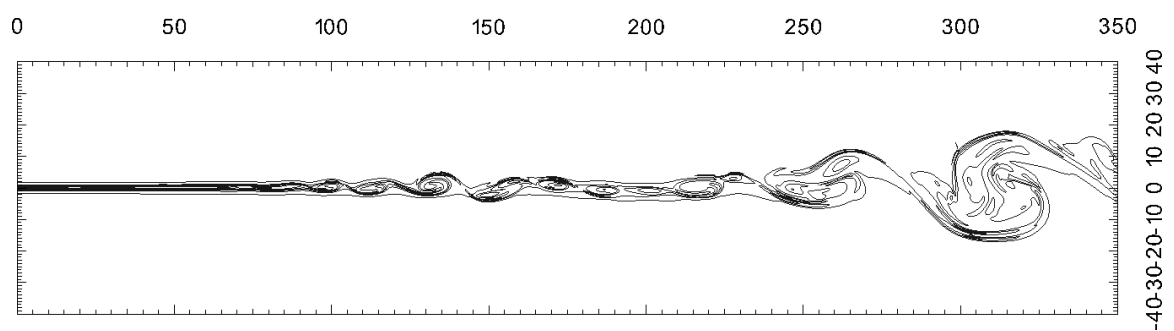
Une simulation préliminaire d'un profil de couche de mélange a été conduite pour évaluer les termes de transport moléculaire combinés aux effets produits par le dégagement de chaleur dans un milieu réactif. Une chimie détaillée a été retenue. Les paramètres utilisés pour cette simulation sont similaires à ceux indiqués dans la section 5.4.2. La figure 5.14 montre les résultats obtenus avec description détaillée et simplifiée des termes de transport. Les niveaux maximum atteints dans les solutions avec transport simplifié sont toujours légèrement inférieurs à ceux obtenus avec l'approche détaillée. Ces différences restent du même ordre de grandeur que dans le cas de la flamme de prémélange étudiée dans la section 4.9. Les simulations des couches de mélange réactives présentées dans la suite utilisent la description détaillée des termes de transport moléculaire.

5.6.1 Structure des couches de mélange

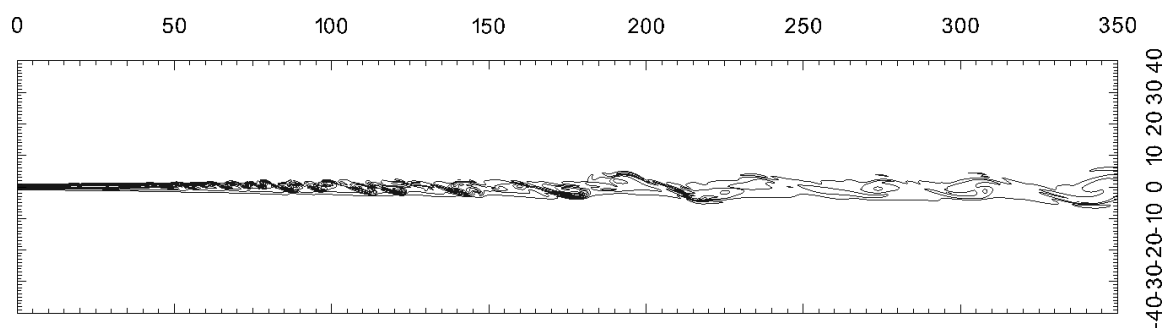
La figure 5.15 montre les isolignes de vorticit  correspondantes aux quatre cas r actifs. L'apparition d'appariements est   nouveau visible dans les deux configurations conduites avec chimie d taill e. Dans le cas CD-2D-0.35, les structures tourbillonnaires ne gardent pas la m me coh rence observ e dans le cas inerte  quivalent, mais plut t une morphologie plus d sordonn e avec une zone de transition repouss e l g rement vers l'aval. Pour $M_c = 0.70$, les figures 5.8(b) et 5.15(b) montrent des isolignes de vorticit  tr s similaires, rendant pratiquement impossible la distinction entre le cas r actif et le cas inerte   ce niveau de compressibilit . L'utilisation du m canisme r actionnel global de Marinov *et al.* modifie



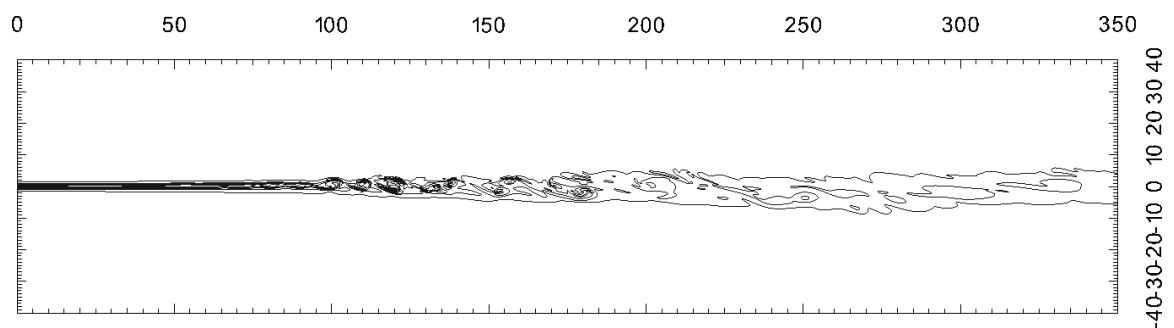
(a) Cas CD-2D-0.35.



(b) Cas CD-2D-0.70.



(c) Cas CG-2D-0.35.



(d) Cas CG-2D-0.70.

FIGURE 5.15 – Isolignes de vorticité pour les couches de mélange réactives.

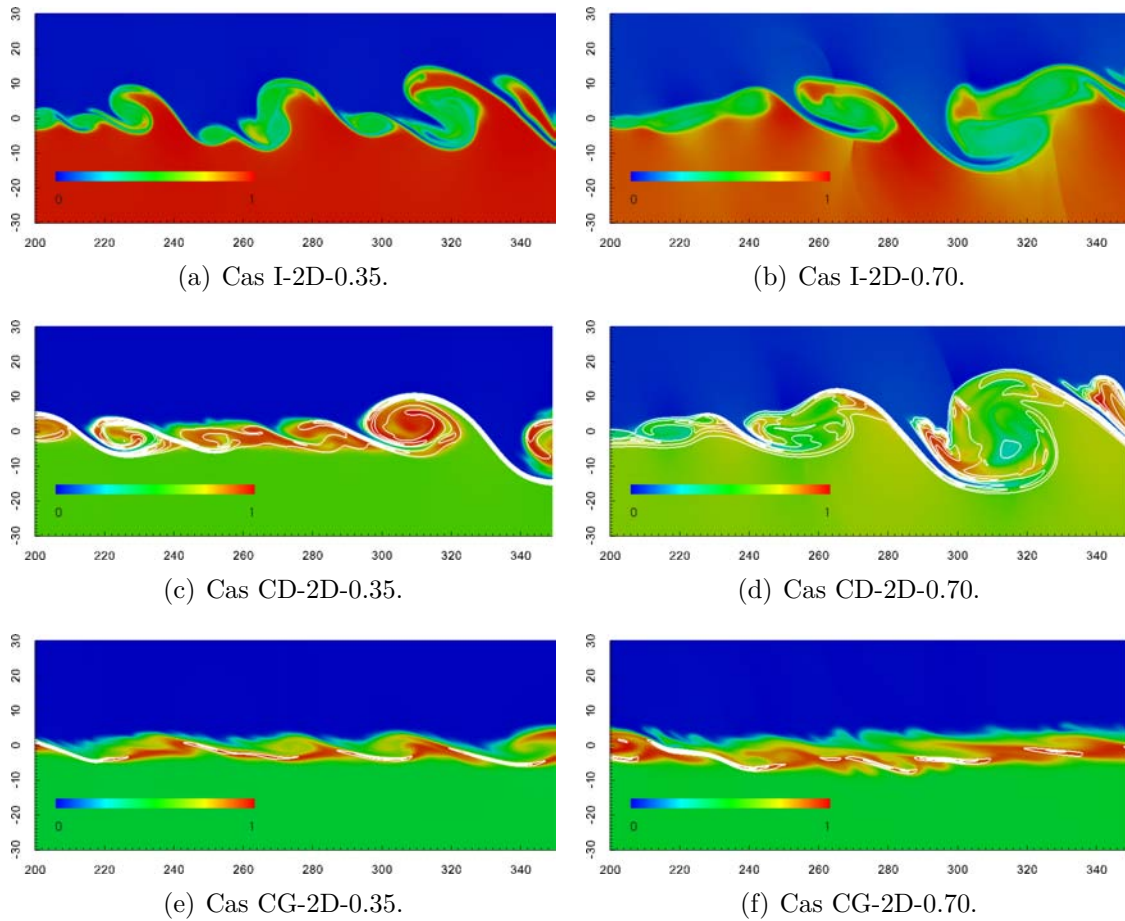


FIGURE 5.16 – Champs instantanés de température normalisée pour différentes couches de mélange. Isolignes du taux de dégagement de chaleur.

plus substantiellement la morphologie de la couche cisillée. Le fort dégagement de chaleur produit par la réaction chimique globale rend impossible la distinction d'appariements de tourbillons, indépendamment du nombre de Mach convectif. En outre, aucun taux de croissance significatif ne peut être mis en évidence d'après les figures 5.15(c)–5.15(d).

La figure 5.16 montre le champs instantanés de température normalisée des cas inertes et réactifs. Des isolignes du taux de dégagement de chaleur sont superposées pour les cas réactifs. Avec chimie détaillée, le taux de dégagement de chaleur devient notable dans le côté pauvre en combustible, délimitant les régions à haute température. Ces régions sont continues à $M_c = 0.35$ et deviennent des zones isolées à $M_c = 0.70$, ce qui suggère que l'influence du dégagement de chaleur est moins importante dans ce cas. Avec chimie globale, la présence d'un écoulement à masse volumique plus faible dans la région de mélange produit un changement du mode le plus instable vers des nombres d'onde plus faibles (longeurs d'onde plus grandes). Quand une chimie à une seule étape est retenue, la plus grosse partie du dégagement de chaleur a lieu au voisinage du plan d'entrée. Ceci explique la présence réduite des isolignes du taux de dégagement de chaleur dans les figures 5.16(e)–5.16(f) : à partir de $x_1 = 200\delta_{\omega,0}$, presque tout l'hydrogène et l'oxygène ont été convertis en produits de combustion.

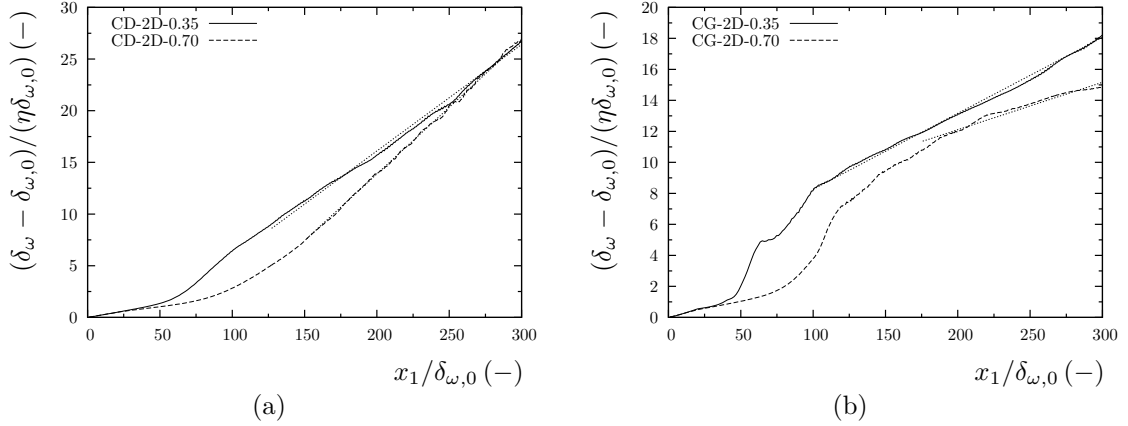


FIGURE 5.17 – Evolution spatiale des épaisseurs de vorticité normalisées avec chimie détaillée (a) et chimie globale (b).

La normalisation de la température permet de comparer les cas inertes et réactifs. Néanmoins, les niveaux atteints dans les cas réactifs sont bien distincts en fonction du schéma cinétique employé. Le tableau 5.5 montre les valeurs maximales de température instantanée et moyenne pour chacun des cas considérés dans la figure 5.16. Les simulations conduites avec un mécanisme de réaction global surestiment les niveaux de température et sous-estiment les délais d’auto-inflammation, ce qui est en accord avec les études récentes de Gerlinger *et al.* [56, 57].

Finalement, la présence de forts gradients, qui pourraient correspondre à des shocklets, est constatée dans la figure 5.16(d), notamment dans le courant de combustible. Une de ces structures pénètre le dernier tourbillon en $x_1 \approx 300\delta_{\omega,0}$, en créant une zone de réaction à son tour. Une étude plus minutieuse permettant de vérifier la présence de tels shocklets sera conduite pour les simulations tridimensionnelles.

5.6.2 Etat d’autosimilarité

L’évolution spatiale des épaisseurs de vorticité normalisées pour les quatre simulations réactives est reportée sur la figure 5.17. Quand le mécanisme de réaction globale de Marinov *et al.* est utilisé, figure 5.17(b), ces courbes présentent trois régions principales. Dans la première région, le taux de croissance reste assez faible. Ensuite, le phénomène d’auto-allumage produit un changement brusque de pente qui se traduit pour une forte croissance de la couche cisailée. La dernière région montre un taux de croissance linéaire.

TABLEAU 5.5 – Températures maximales instantanées et moyennes des couches de mélanges bidimensionnelles.

Cas	I-2D-0.35	I-2D-0.70	CD-2D-0.35	CD-2D-0.70	CG-2D-0.35	CG-2D-0.70
T_{\max} (K)	1507	1595	2160	2021	2740	2729
$\langle T \rangle_{\max}$ (K)	1480	1485	1736	1499	2540	2204

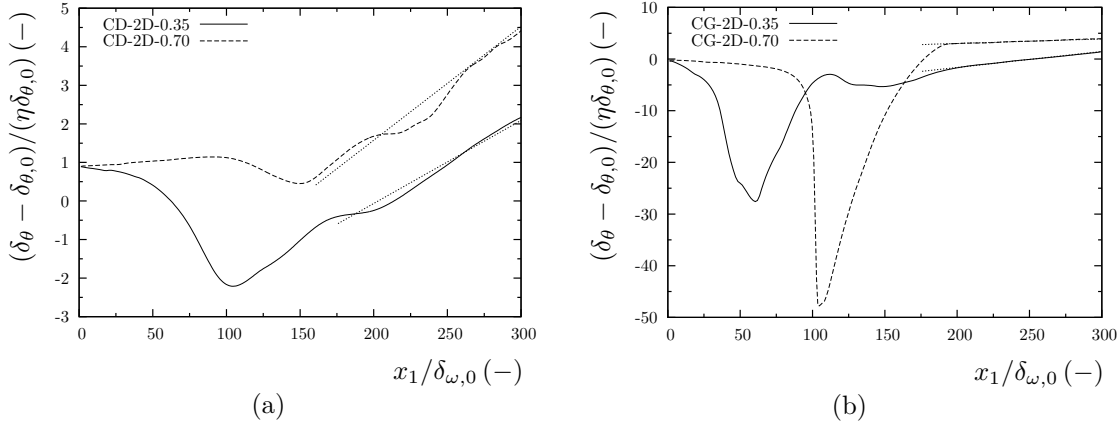


FIGURE 5.18 – Evolution spatiale des épaisseurs de quantité de mouvement normalisées avec chimie détaillée (a) et chimie globale (b).

Avec le mécanisme de réaction détaillé de Ó Conaire *et al.*, cette deuxième région est presque indistinguable car l’auto-ignition du mélange a lieu de manière plus progressive.

Les courbes d’évolution spatiale des épaisseurs de quantité de mouvement sont présentées sur la figure 5.18. Cette quantité ne varie pas de manière monotone à cause des effets du dégagement de chaleur et, donc, son utilisation en tant que variable de similarité n’est pas recommandée pour les cas réactifs. Cette remarque a déjà été formulée dans des travaux antérieurs [113, 124]. Seule l’épaisseur de vorticit e sera désormais consid er ee.

Le tableau 5.6 pr esente les r esultats obtenus pour les quatre simulations. Dans tous les cas, les valeurs du taux de croissance restent inf erieures  a celles obtenues dans les simulations inertes correspondantes  etudi ees dans la section 5.4. Avec chimie globale, les taux de croissance sont beaucoup plus faibles qu’avec chimie d etaill ee. L’effet du Mach convectif diminue davantage ce taux de croissance dans le cas CG-2D-0.70. Cependant, la m eme tendance n’est plus retrouv ee pour le cas CD-2D-0.70, o u le taux de croissance est sup erieur  a celui du cas CD-2D-0.35. La figure 5.16(d) montre qu’ a $M_c = 0.70$ il existe des poches isol ees avec des valeurs maximales de temp erature d’environ 2000 K, tandis que  a $M_c = 0.35$ il existe une zone plus ou moins continue  a une temp erature plus  elev ee d’environ 2150 K. Ceci permet d’en d eduire que les effets du d egagement de chaleur, qui vont diminuer le taux de croissance de la couche de m elange, sont nettement moins importants dans le cas CD-2D-0.70 et, donc, le taux de croissance de la couche

TABLEAU 5.6 – Caract erisation des couches de m elange bidimensionnelles r eactives. Le nombre de Reynolds est calcul e en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$.

Cas	$\eta^{-1}d\delta_\omega/dx_1$ (–)	$\delta'_\omega/\delta'_{\omega,i}$ (–)	Re_ω (–)
CD-2D-0.35	0.103	0.62	5158
CD-2D-0.70	0.129	0.78	7884
CG-2D-0.35	0.049	0.30	3735
CG-2D-0.70	0.031	0.19	4638

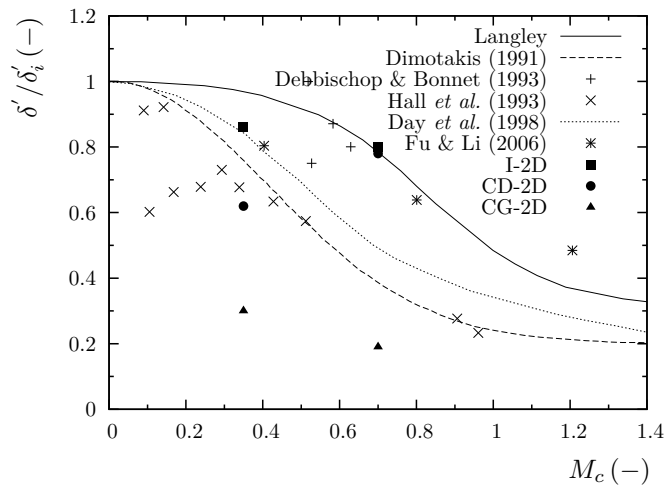


FIGURE 5.19 – Taux de croissance normalisés en fonction du nombre de Mach convectif pour différentes simulations et études expérimentales.

réactive est supérieur à un nombre Mach convectif plus élevé. Les valeurs du nombre de Reynolds atteintes à la fin de la simulation sont plus faibles que celles obtenues pour les simulations inertes équivalentes, mais elles restent du même ordre de grandeur que celles des simulations numériques des couches de mélange turbulentes réactives de Pantano *et al.* [124]. Finalement, la figure 5.19 rassemble les taux de croissance normalisés des couches de mélange inertes et réactives en fonction du nombre de Mach convectif. Les résultats de la courbe expérimentale de Langley, Dimotakis [37], Debbischop & Bonnet [35], Hall *et al.* [66] Day *et al.* [32], cette dernière basée sur l'étude numérique des couches de mélange compressibles réactives, et Fu & Li [55] sont aussi présentés comme points de référence.

Des profils de vitesse longitudinale moyennés temporellement sont tracés à différentes abscisses sur la figure 5.20, afin de vérifier leur similarité. Tous les profils convergent correctement et indépendamment du niveau de compressibilité. Avec chimie globale, les profils se superposent sur une même courbe. Cependant, avec chimie détaillée, ces profils convergent vers des courbes bien différentes en fonction du nombre de Mach convectif. En outre, la moyenne de Reynolds révèle l'effet barocline [113] sur la région riche en combustible, ce qui fait chuter le profil de vitesse longitudinale dans cette région (voir figure 5.20(c)).

La figure 5.21 montre les profils de vitesses rms obtenus à partir du tenseur de contraintes de Reynolds (5.16). Cette figure montre que, en général, les profils correspondant à $M_c = 0.35$ ne convergent pas dans une seule courbe et que cette divergence est plus significative avec chimie globale. Pour un nombre de Mach convectif plus élevé, les solutions redeviennent autosimilaires à nouveau, indépendamment du mécanisme réactionnel utilisé. Compte tenu que la variable d'adimensionnement δ_ω est adéquate pour l'obtention des profils autosimilaires, comme le montre la figure 5.20, ceci suggère que les simulations des couches cisillées réactives à $M_c = 0.35$ nécessitent des domaines de calcul plus longs dans le sens de l'écoulement afin de faire converger les profils de vitesse rms. Le caractère

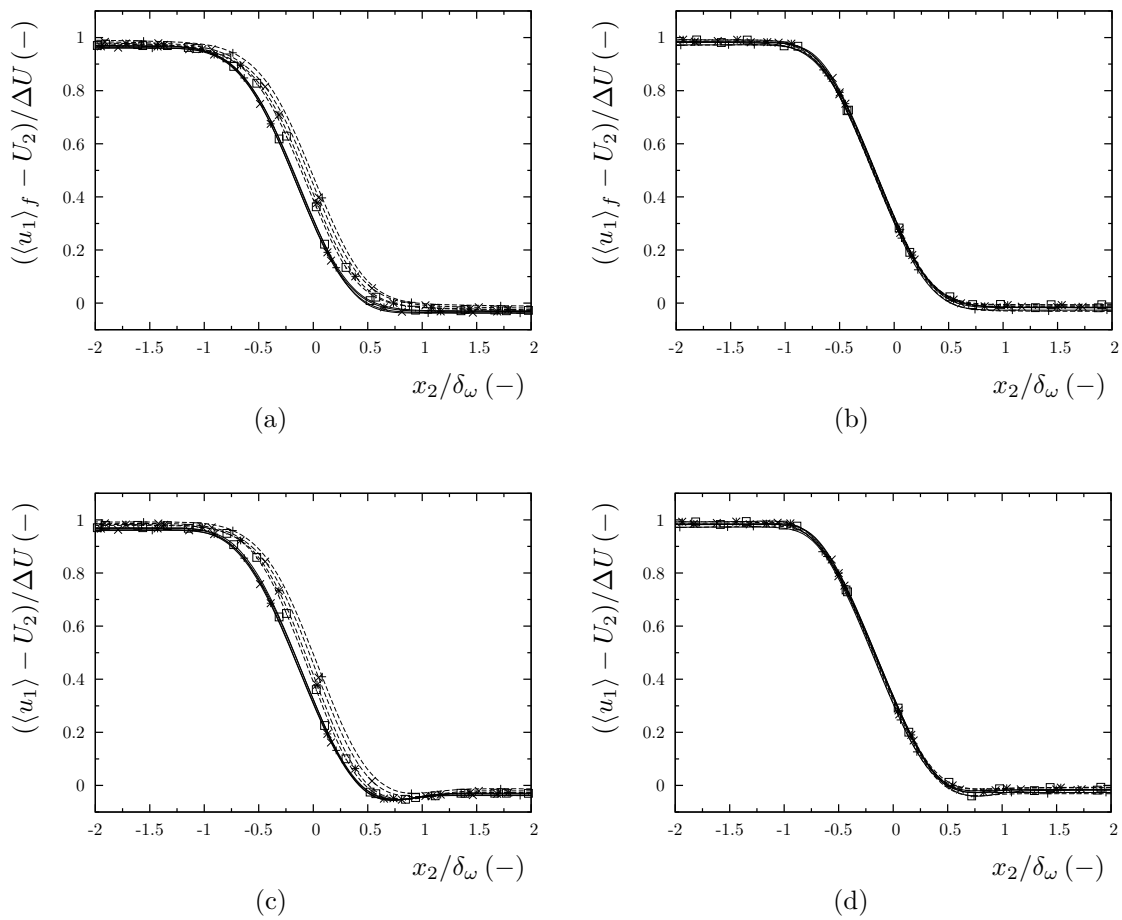


FIGURE 5.20 – Profils de vitesse longitudinale normalisée moyennée au sens de Favre et de Reynolds avec chimie détaillée (figures (a) et (c)) et chimie globale (figures (b) et (d)), respectivement. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 5.11.

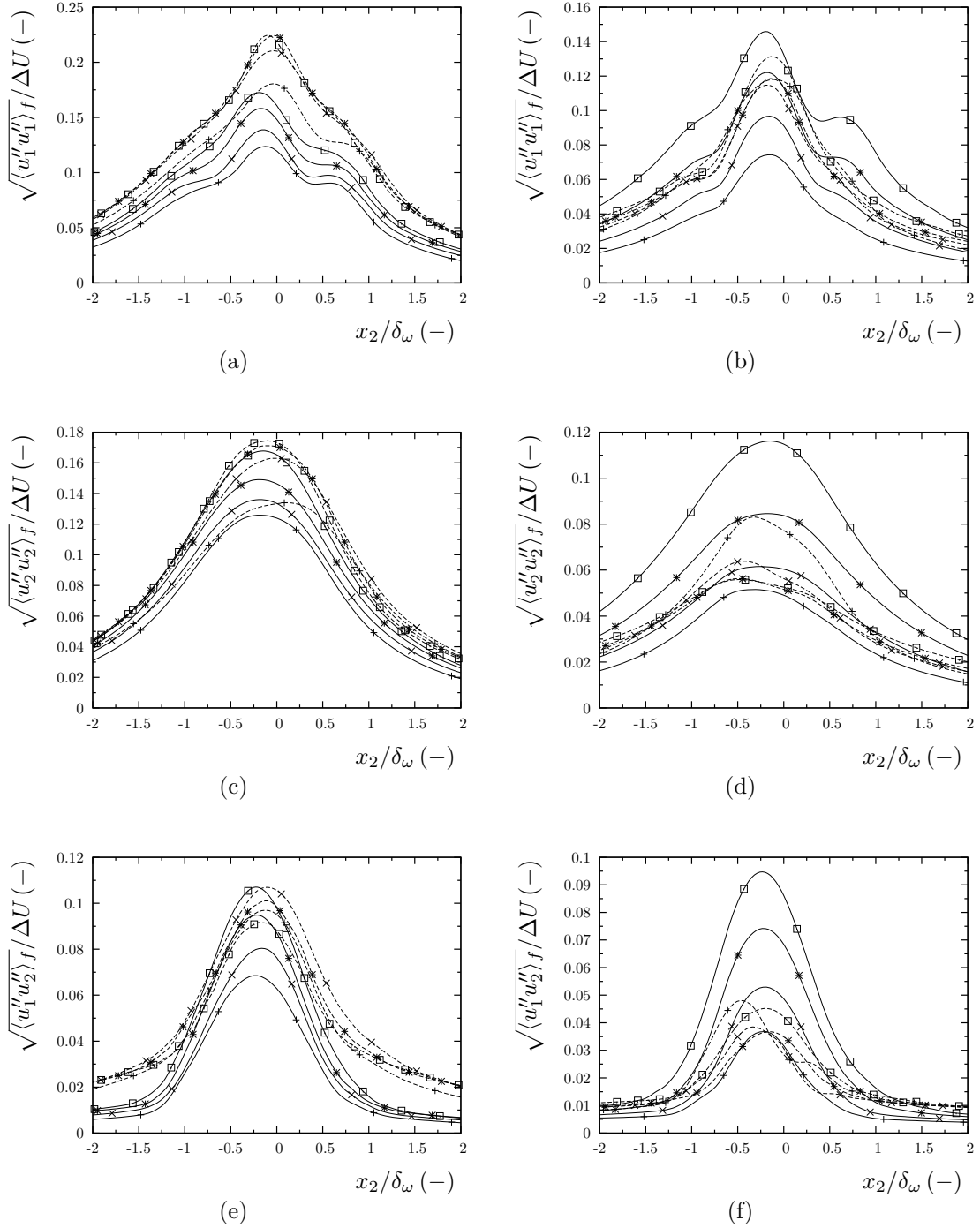


FIGURE 5.21 – Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds à différents abscisses avec chimie détaillée (figures (a), (c) et (e)) et chimie globale (figures (b), (d) et (f)). Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 5.11.

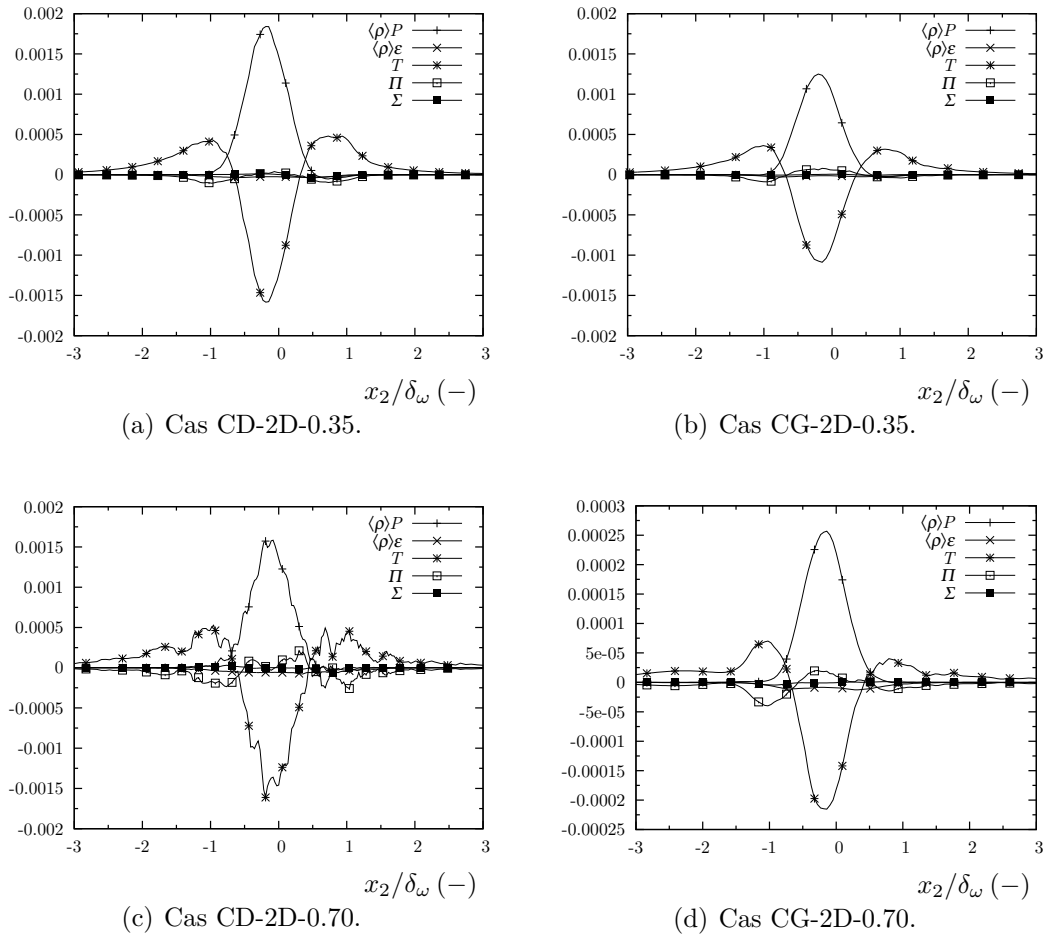


FIGURE 5.22 – Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente, normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega$.

stabilisant de la compressibilité à $M_c = 0.70$ joue ici un rôle déterminant permettant l'obtention des profils de vitesses rms avec un degré de similarité acceptable. Les valeurs maximales des vitesses rms restent toujours supérieures dans les simulations conduites avec chimie détaillée, par rapport aux simulations conduites avec chimie simplifiée. Dans la première série de simulations, ces niveaux sont du même ordre de grandeur pour les deux nombres de Mach convectifs considérés. Ceci peut être directement attribué à l'influence du taux de dégagement de chaleur. Comme il a été déjà mentionné auparavant, les effets du taux de dégagement de chaleur sont plus importants dans le cas le moins compressible lorsque le mécanisme réactionnel détaillé est utilisé. Ces effets contribuent à la diminution du taux de croissance de la couche de mélange et aussi à la réduction des contraintes du tenseur de Reynolds. Pour la même raison, les niveaux des profils de vitesses rms des simulations conduites avec chimie globale sont toujours plus faibles que ceux obtenus avec chimie détaillée.

5.7 Equilibre énergétique

La figure 5.22 montre les termes de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente pour les couches de mélanges réactives. En général, les courbes présentent la même tendance que celles du cas inerte avec une forme significativement plus régulière. Avec chimie globale, les niveaux de ces termes à $M_c = 0.70$ sont jusqu'à 5 fois plus faibles que ceux obtenus à $M_c = 0.35$. Avec chimie détaillée, ces niveaux restent toujours inférieurs à ceux des simulations inertes équivalentes.

5.8 Production de vorticit 

Cette section est consacr e   l'identification des ph nom nes responsables de la production de vorticit  dans la couche cisail e   partir de l' tude des termes intervenant dans l' quation de transport de l'enstrophie

$$\begin{aligned} \frac{D(\langle \omega_i \omega_i \rangle)}{Dt} = & 2\langle \omega_i \omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \rangle - 2\langle \omega_i \omega_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \rangle \\ & + 2\langle e_{ijk} \omega_i \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial x_k} \rangle + 2\langle e_{ijk} \omega_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{km}}{\partial x_m} \right) \rangle. \end{aligned} \quad (5.24)$$

o  le symbole de Levi-Civita s' crit $e_{ijk} = (i - j)(j - k)(k - i)/2$. Les quatre termes qui apparaissent   droite de l' galit  de (5.24) d crivent, respectivement, l' tirement tourbillonnaire, l'expansion (ou compression) volumique, le couple barocline et la diffusion visqueuse. Dans un  coulement   masse volumique constante, les termes barocline et de dilatation sont nuls. Ces deux m canismes distinguent les  coulements   masse volumique constante ou variable. Le terme d'expansion ou dilatation volumique peut devenir important quand la masse volumique se r duit   cons quence du d gagement de chaleur au sein de l' coulement. Comme la divergence de la vitesse $\partial u_j / \partial x_j$ est positive pour un fluide en expansion, le terme $-\omega_i \partial u_j / \partial x_j$ repr sente une diminution de l'enstrophie. Le couple barocline repr sente la g n ration (ou la destruction) de la vorticit  induite par l'interaction des gradients de masse volumique avec le gradient local de pression. Ce terme est non nul lorsque ce deux vecteurs sont oppos s.

La figure 5.23 montre les termes de dilatation obtenus pour les cas inertes et r actifs   diff rents nombres de Mach convectif. A $M_c = 0.35$, l'influence des r actions chimiques r duit l'amplitude de la contribution n gative du terme de dilatation avec un effet plus significatif quand le m canisme de r action globale est utilis . Quand le Mach convectif est augment , ce terme reste du m me ordre de grandeur pour les cas I-2D-0.70 et CD-2D-0.70. Les niveaux maximum de dilatation sont n anmoins deux fois sup rieurs   ceux des simulations conduites   $M_c = 0.35$. L'emploi d'une chimie globale produit une r duction remarquable du terme de dilatation   $M_c = 0.70$. Les figures 5.24–5.25 montrent, respectivement, le terme barocline et de diffusion visqueuse. Ces deux termes sont les plus importants dans l' quation de transport de l'enstrophie contrairement aux simulations tridimensionnelles, o  les contributions les plus importantes proviennent des

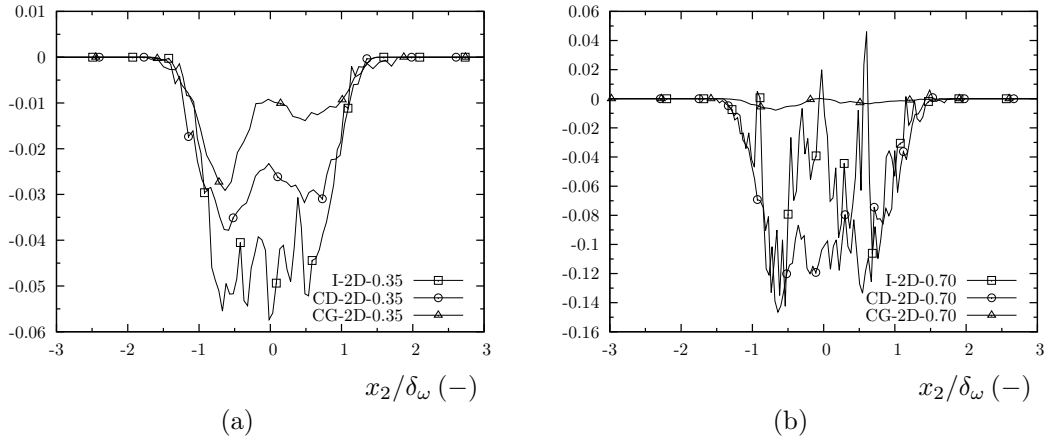


FIGURE 5.23 – Terme de dilatation du bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisé par $(\Delta U \delta_\omega)^3$.

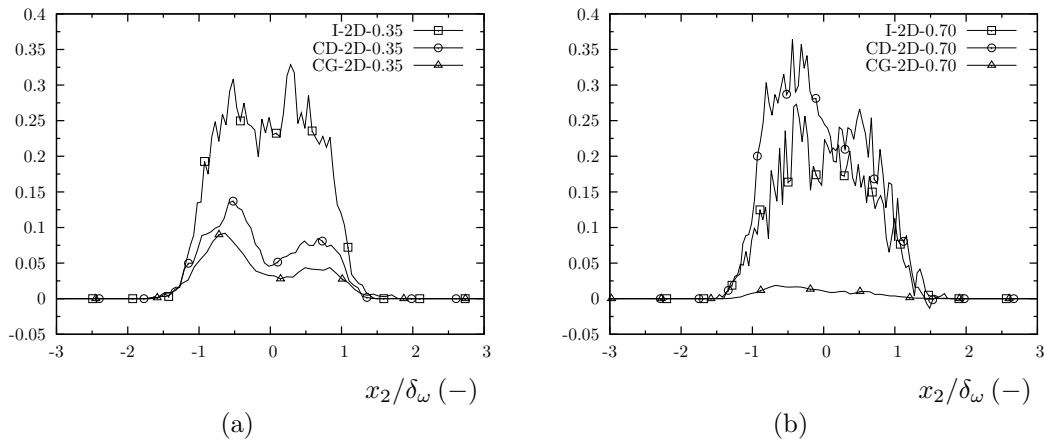


FIGURE 5.24 – Terme barocline du bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisé par $(\Delta U \delta_\omega)^3$.

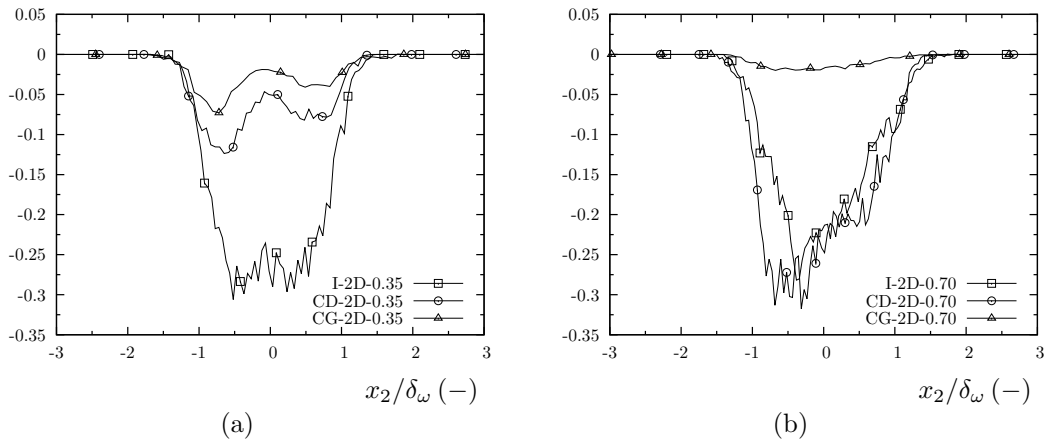


FIGURE 5.25 – Terme de diffusion visqueuse du bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisé par $(\Delta U \delta_\omega)^3$.

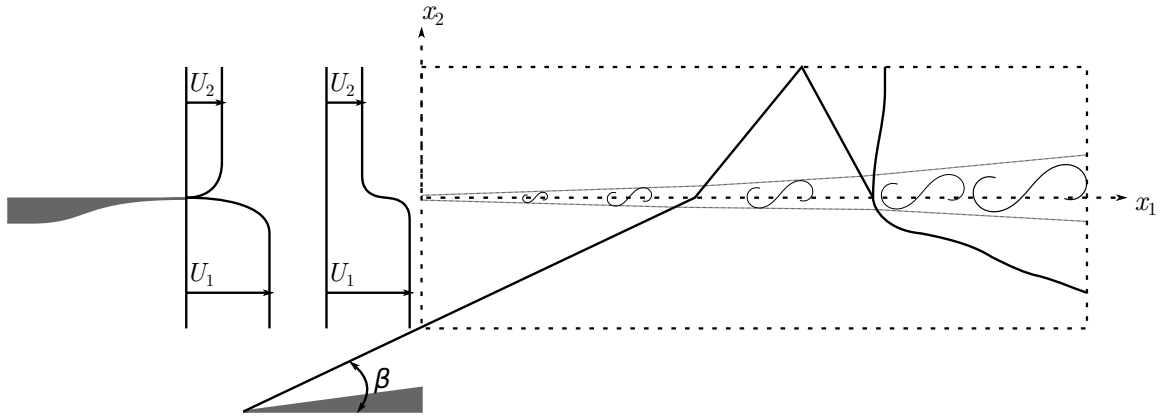


FIGURE 5.26 – Schéma du développement d’une couche cisailée impactée par une onde de choc oblique.

termes d’étirement tourbillonnaire et de diffusion visqueuse [120]. Dans les cas réactifs à $M_c = 0.35$, il existe une dissymétrie de ces profils avec des niveaux plus importants dans les zones où la combustion a lieu (ordonnées négatives). A $M_c = 0.70$ et avec chimie détaillée, le terme barocline, qui est le seul contributeur à la création de vorticit , devient du m me ordre de grandeur que celui du cas inerte, ce qui est consistant avec le fait d’avoir obtenu des taux de croissance tr s similaires pour ces deux cas. Le fait d’avoir obtenu un taux de croissance dans le cas CD-2D-0.70 sup rieur   celui du cas CD-2D-0.35 peut  tre aussi expliqu    partir des niveaux trouv s pour le terme barocline report s dans les figures 5.24(a)–5.24(b). Enfin, le terme d’ tirement tourbillonnaire n’est pas pr sent  car il est strictement nul dans un  coulement bidimensionnel.

5.9 Couches de m lange impact es par un choc oblique

Cette section pr sente le d veloppement spatial des couches de m lange compressibles bidimensionnelles inertes et r actives, impact es par un choc oblique. Les r sultats pr c dents ont montr  que le m lange entre le combustible et l’oxydant dans des r gimes fortement compressibles est un processus relativement lent. Cependant, comme la pr sence des ondes de chocs (d sign s aussi comme SW ou *shock waves*) est inh rent dans les entr es des chambres de combustion des moteurs scramjet [78, 116], l’impact par choc peut  tre une technique int ressante   mettre en  uvre de fa on   augmenter l’efficacit  du m lange au sein de la couche cisail e. Cette technique, sch matis e dans la figure 5.26, est consid r e comme une des plus attractives parmi d’autres [24].

Le m lange retenu est strictement le m me que pour les couches inertes (tableau 5.2). N anmoins, des nouveaux param tres de simulation correspondant   un nombre de Mach convectif $M_c = 0.48$ sont utilis s pour cette configuration. Ces valeurs sont report es dans le tableau 5.7. Les dimensions du domaine de calcul sont $L_1 = 275\delta_{\omega,0}$ et $L_2 = 120\delta_{\omega,0}$. Ce domaine est uniform ment discr t s  dans les deux directions de l’espace utilisant $N_1 \times N_2 = 1638 \times 717$ points de calcul. A l’entr e du domaine, une condition de type Dirichlet est impos e et une condition non r fl chissante est employ e en sortie. En haut du domaine de

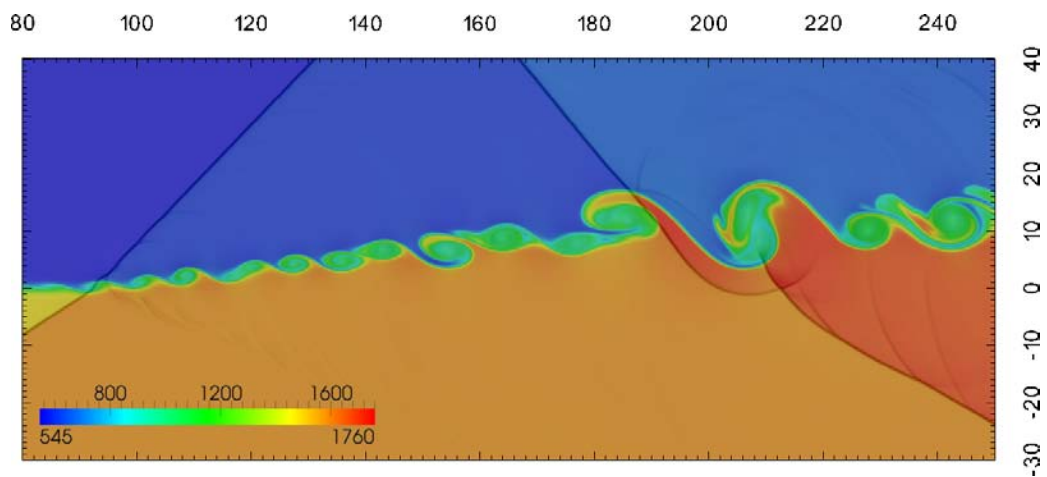
calcul, une condition de paroi glissante est utilisée. Dans la partie inférieure du domaine, une condition de type Dirichlet est appliquée. Cette condition correspond aux relations de Rankine-Hugoniot généralisées pour un mélange multi-espèce (voir section 3.7.4), avec un angle d'inclinaison $\beta = 33^\circ$ par rapport à la direction de l'écoulement d'entrée non perturbé. Les mêmes critères de stabilité commentés dans la section 5.4.2 sont utilisés dans ces simulations. Par soucis de concision, la simulation de la couche de mélange réactive, cas R-2D-SW-0.48, ne sera conduite qu'avec le mécanisme réactionnel détaillé de Ó Conaire *et al.*. Des simulations conduites avec le schéma réactionnel simplifié de Marinov *et al.* ont montré des résultats équivalents à ceux déjà discutés dans la section précédente utilisant le même schéma réactionnel.

La figure 5.27 montre la structure de l'écoulement dans une partie du domaine de calcul influencée par l'interaction entre le choc et la couche de mélange. Les structures restent très similaires pour les cas inerte et réactif. Dans la simulation réactive, le champ instantané de température révèle la présence des régions isolées avec des températures très élevées, après le première impact. Les réactions chimiques qui débutent dans cette région deviennent plus importantes après la deuxième interaction entre le choc réfléchi et la couche de mélange, ce qui fait augmenter d'avantage la température. Une onde de choc additionnelle se forme dans cette deuxième interaction comme résultat de la diminution du nombre de Mach local dû au dégagement de chaleur, ce qui rend l'écoulement légèrement subsonique dans cette zone.

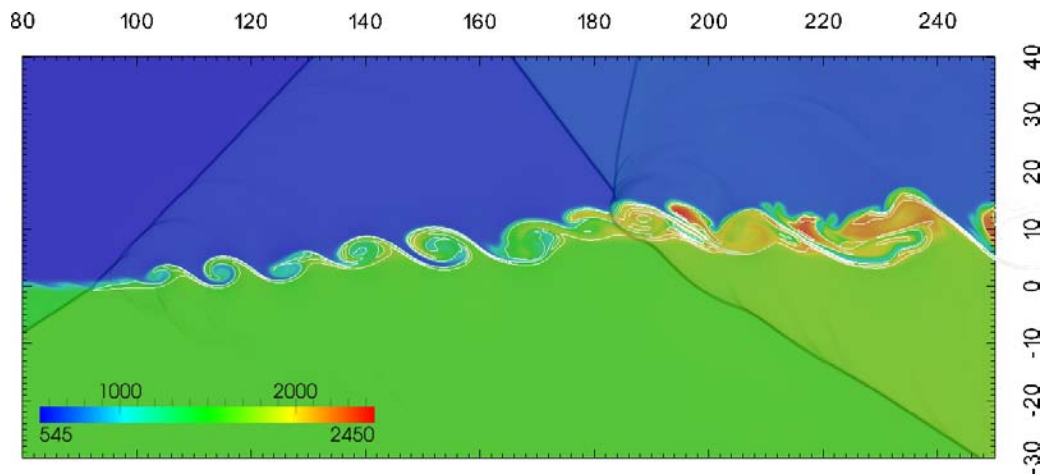
La figure 5.28 montre l'évolution spatiale des épaisseurs de vorticit  normalis es concernant les simulations actuelles. Avant la premi re interaction, l' volution de cette quantit  est similaire   celle observ e dans les simulations pr c dentes. Apr s cette premi re interaction, l'augmentation du taux de croissance est  vidente pour les deux cas. En particulier, le cas r actif pr sente une l g re augmentation par rapport au cas inerte. En $x_1 \approx 150\delta_{\omega,0}$, il se produit une l g re diminution suivie d'oscillations non physiques li es aux r flexions du choc sur le plan sup rieur du domaine de calcul. Apr s la deuxi me interaction, aux alentours de $x_1 = 180\delta_{\omega,0}$, l'effet du taux de d gagement de chaleur est nettement plus important. La diff rence observ e en termes de croissance entre les deux cas confirme ce comportement. Le tableau 5.8 pr sente les r sultats obtenus pour ces

TABLEAU 5.7 – Param tres de simulation de la couche de m lange impact e par choc oblique. L'indice 1 correspond   l'injection de l'oxydant et l'indice 2 correspond   l'injection du combustible.

Quantit�	$M_c = 0.48$
U_1 (m/s)	1634.0
M_1 (–)	2.1
U_2 (m/s)	973.0
M_2 (–)	1.6
r (–)	0.60
s (–)	1.74
η (–)	0.25
$\delta_{\omega,0}$ (m)	$1.44 \cdot 10^{-4}$



(a) Cas I-2D-SW-0.48.



(b) Cas R-2D-SW-0.48.

FIGURE 5.27 – Champ instantané de température. Isolignes du gradient de pression (noires) et du taux de dégagement de chaleur (blanches) pour le cas R-2D-SW. Unités SI.

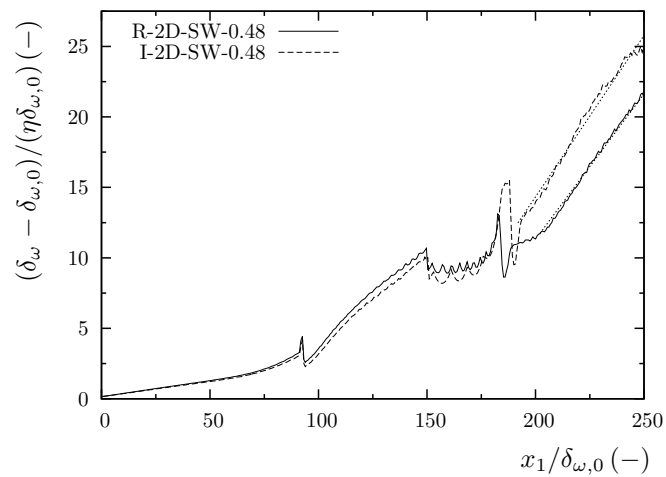


FIGURE 5.28 – Evolution spatiale de l'épaisseur de vortacité normalisée.

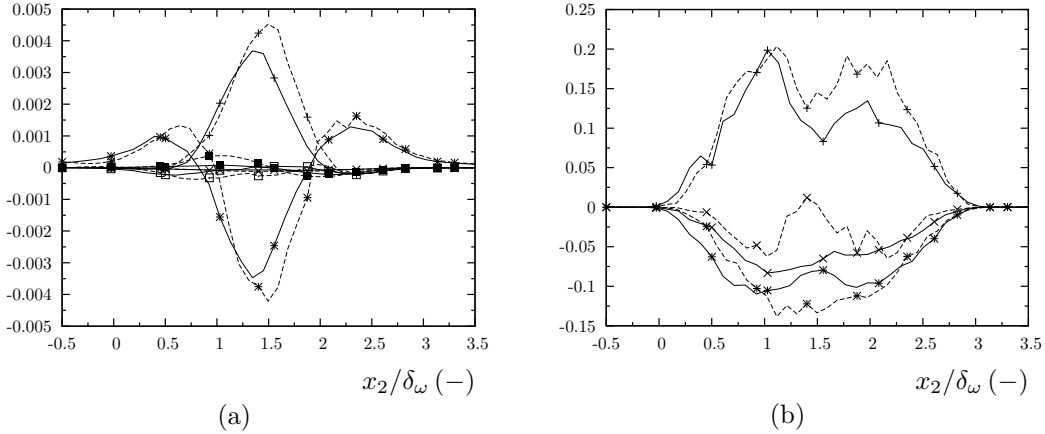


FIGURE 5.29 – Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (a) normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega$, et de l'ensrophie (b) normalisé par $(\Delta U\delta_\omega)^3$, en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$. Cas R-2D-SW-0.48 (—) et I-2D-SW-0.48 (- -). Figure (a) : terme de production (+), de dissipation (\times), de transport turbulent (*) de pression-dilatation (\square) et du flux massique (\blacksquare). Figure (b) : terme barocline (+), de dilatation (\times) et de diffusion visqueuse (*).

simulations, évalués en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$. Dans cette abscisse, l'épaisseur de vorticit  mesur  est 0.205 et 0.229 pour le cas r actif et inerte, respectivement. Ces valeurs sont largement sup rieures   celles obtenues dans les simulations pr c dentes (voir tableaux 5.4 et 5.6), ce qui d montre l'efficacit  de l'impact du choc oblique dans l'augmentation du taux de croissance de la couche de m lange. Les profils des quantit s moyennes montr s dans la suite sont  valu s en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$, sauf indication contraire.

Les figures 5.29(a)–5.29(b) montrent les termes contribuant au bilan de l' quation de transport de l' nergie cin tique turbulente et de l'ensrophie, respectivement. Les niveaux maximum de ces quantit s,  valu es en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$, sont plus faibles dans le cas r actif, sauf pour le terme de dilatation intervenant dans le bilan d'ensrophie.

Le processus d'auto-inflammation est discut  dans la suite   l'aide de la figure 5.30. La figure 5.30(b) montre la formation de radicaux HO_2 juste apr s le plan d'entr e. Plus en aval et avant la premi re interaction, un processus d'induction commence dans lequel une certaine proportion des radicaux HO_2 est convertie en radicaux OH , dans la r gion pauvre en combustible. Apr s la premi re interaction entre le choc et la couche de m lange, la production de radicaux OH augmente de fa on significative avec formation des poches   l'int rieur des rouleaux. Ces poches co ncident avec les zones   haute temp rature discut es pr c demment et constituent l'endroit id al permettant l'emballement des

TABLEAU 5.8 – R sultats des couches de m lange bidimensionnelles impact es par un choc oblique. Le nombre de Reynolds est calcul  en $x_1 = 250\delta_{\omega,0}$.

Cas	$\eta^{-1}d\delta_\omega/dx_1$ (-)	$\delta'_\omega/\delta'_{\omega,i}$ (-)	Re_ω (-)
R-2D-SW-0.48	0.205	1.23	4074
I-2D-SW-0.48	0.229	1.38	4625

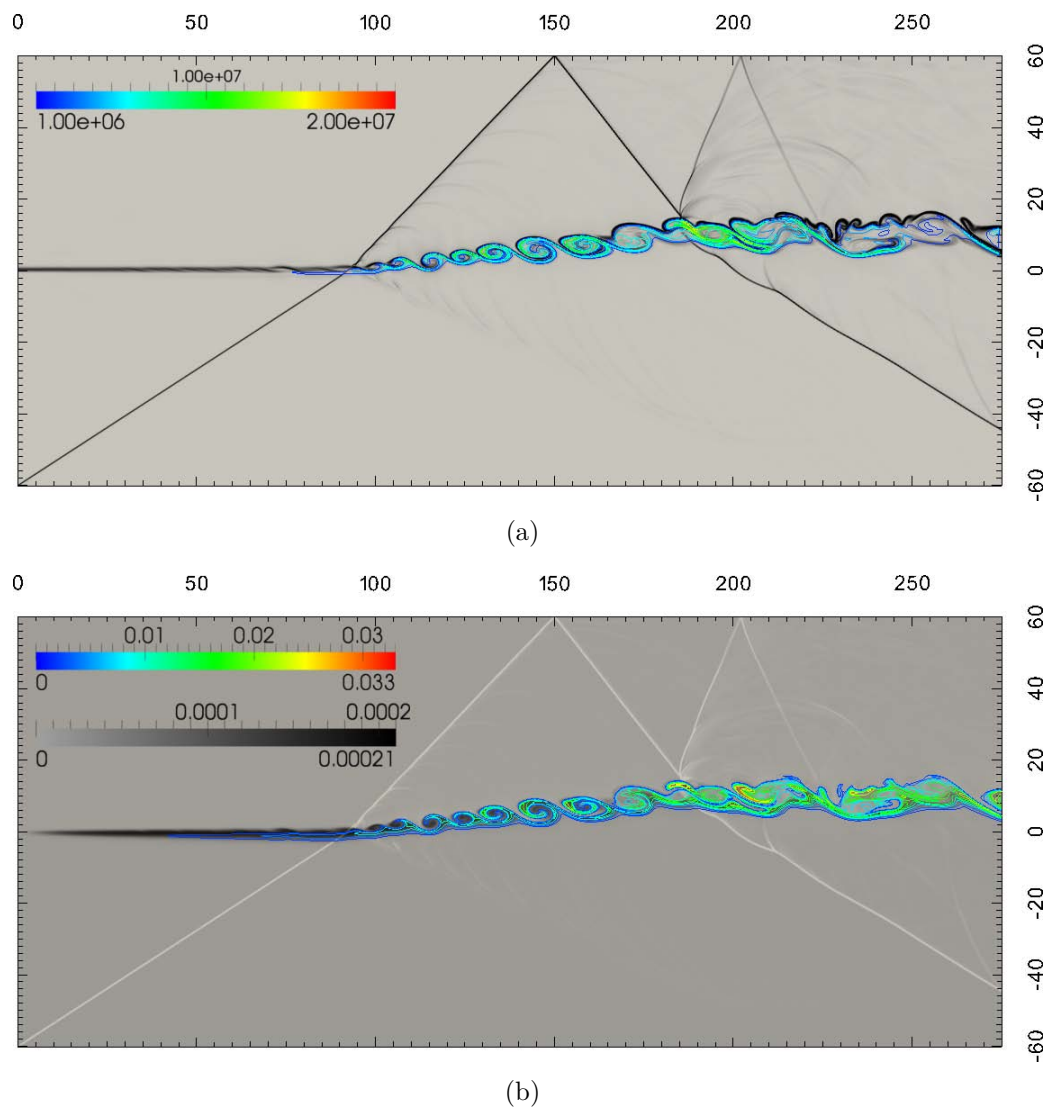


FIGURE 5.30 – Cas R-2D-SW-0.48. Schlieren numérique de la masse volumique avec isolignes du taux de dégagement de chaleur (a). Champ instantané de fraction massique de HO_2 (tons noirs) avec superposition du champ instantané du gradient de pression (tons blancs) et isolignes de fraction massique de OH (b). Unités SI.

processus réactionnels. Dans le même temps, la concentration de radicaux HO_2 diminue progressivement dans cette région. Les niveaux maximum de concentration des radicaux d'hydroxyde apparaissent après la deuxième interaction entre le choc réfléchi et la couche de mélange. Les valeurs maximales du taux de dégagement de chaleur se trouvent aussi dans cette zone (voir figure 5.30(a)). A cet endroit, le processus de combustion est entretenu et les radicaux d'hydroperoxyde qui subsistent se concentrent du côté pauvre en combustible, dans le courant d'oxydant.

5.10 Récapitulatif

Dans ce chapitre, l'étude des couches de mélange compressibles inertes et réactives se développant spatialement et naturellement a été abordée à l'aide de simulations numériques bidimensionnelles. Dans un premier temps, et de façon à vérifier le bon comportement du code de calcul CREAMS pour ce type d'écoulements, un problème de référence concernant une couche de mélange incompressible d'air a été traité. Les résultats obtenus ont été comparés de façon satisfaisante à des études antérieures.

Ensuite, des couches de mélange à différents nombres de Mach convectif ($M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$), *i.e.* différents niveaux de compressibilité, ont été analysées. Le mélange d'étude, composé d'hydrogène et d'air, a été retenu en s'appuyant sur différents études expérimentales et il est représentatif des régimes de fonctionnement des bancs d'essais actuels. L'objectif principal de cette étude concerne les effets de la compressibilité et du taux de dégagement de chaleur, en utilisant des mécanismes de réaction globaux et détaillés, sur la structure des couches de mélange et, notamment, sur le taux de croissance. La description détaillée des termes de transport moléculaire a été retenue pour ces simulations. De manière générale, ces simulations ont été conduites sur des temps caractéristiques et domaines suffisamment étendus pour atteindre un état d'autosimilarité défini par un taux de croissance linéaire de l'épaisseur de vorticit  et la superposition des profils des contraintes du tenseur de Reynolds.

Pour les couches de mélange inertes, l'effet stabilisateur de la compressibilité s'est manifesté dans la réduction du taux de croissance, ce qui est une conséquence d'une réduction des contraintes du tenseur de Reynolds, de l'énergie cinétique turbulente et de l'enstrophie. En particulier, l'analyse du bilan de l'équation de transport de l'enstrophie a confirmé que la diminution des effets barocline, principale responsable de la création de vorticit  dans un écoulement bidimensionnel, est liée à la réduction du taux de croissance de la couche de mélange.

Deux mécanismes réactionnels ont été considérés pour l'étude de l'effet du dégagement de chaleur dans les couches de mélange. L'utilisation d'une chimie détaillée à plusieurs étapes réactionnelles élémentaires conduit à des simulations où l'effet du dégagement de chaleur dépend du niveau de compressibilité considérée. Ainsi, pour des faibles valeurs du nombre de Mach convectif, l'influence du taux de dégagement de chaleur est très importante, ce qui est constaté par les champs instantanés et moyennes de température obtenus, ainsi que pour les taux de croissance correspondants. L'utilisation d'une chimie globale

à une seule étape réactionnelle conduit à des simulations où le champ de température et le taux de dégagement de chaleur sont surestimés, par rapport aux simulations réactives conduites avec une chimie détaillée. Les délais d'auto-inflammation sont, quant à eux, sous-estimés. Ceci se traduit par une influence du taux de dégagement de chaleur démesurée dans tous les régimes de compressibilité étudiés dans ce chapitre. Néanmoins, ce comportement est tout à fait consistant avec les études précédentes utilisant des hypothèses simplificatrices des processus de combustion.

La conséquence immédiate constatée sur le développement de la couche de mélange par l'effet de la compressibilité et du dégagement de chaleur est la réduction de son taux de croissance. La dernière partie de ce chapitre a été consacrée à l'étude des couches de mélange impactées par un choc oblique. Les simulations conduites pour des couches de mélange inertes et réactives ont démontré les capacités de cette technique. En particulier, l'évolution du taux de croissance révèle une augmentation très importante de cette quantité dans le cas réactif ainsi qu'une accélération du processus d'auto-inflammation après le passage du choc.

Des simulations tridimensionnelles des couches de mélange inertes et réactives seront abordées dans les chapitres suivants avec l'objectif de préciser les tendances observées dans les cas bidimensionnels.

Chapitre 6

Simulations tridimensionnelles des couches de mélange inertes

6.1 Introduction

La première DNS d'une couche de mélange compressible était réalisée par Sandham & Reynolds (1989) [142]. Cette simulation ne représentait que les premiers appariements des structures tourbillonnaires et le manque d'informations associées aux petites échelles de la turbulence était évident. Rogers & Moser (1994) [138] ont été les premiers auteurs à effectuer l'analyse détaillée d'une base de données statistiques obtenue avec une simulation numérique directe d'une couche de mélange turbulente incompressible se développant temporellement. Récemment, des études conduites par DNS et LES tridimensionnelles des couches de mélange compressibles inertes temporelles ont été publiées dans la littérature [27, 100, 101, 120, 123]. Les DNS ou LES des couches de mélange spatiales sont moins abondantes dans la littérature et seuls quelques exemples assez récents, avec un niveau de résolution important, sont reportés dans la littérature [4, 55, 98, 136]. Le principal problème associé aux simulations des couches de mélange spatiales est le coût de calcul important comparé aux simulations temporelles. Ce soucis peut dorénavant être contourné grâce à la montée en puissance de calcul des supercalculateurs.

La simulation numérique de couches de mélange temporelles est souvent préférée à celle des couches de mélange spatiales pour différentes raisons. Par exemple, la spécification des conditions aux limites d'entrée et de sortie est remplacée par des conditions de périodicité. Les domaines de calcul sont ainsi considérablement réduits dans la direction longitudinale, ce qui permet d'atteindre plus facilement l'état d'autosimilarité avec un coût de calcul inférieur. Dans le traitement des données, le fait de disposer d'une direction d'homogénéisation supplémentaire permet d'obtenir des profils des quantités moyennes mieux convergés. L'évolution des couches de mélange temporelles fournit une bonne approximation de la physique impliquée dans l'écoulement se développant spatialement si la différence des vitesses entre les deux écoulements est largement inférieure à la vitesse

de convection de la couche de mélange [59] :

$$\frac{\Delta U}{U_c} = \frac{U_1 - U_2}{U_c} \ll 1. \quad (6.1)$$

Cette hypothèse n'est pas particulièrement vraie pour les couches de mélanges supersoniques compressibles. Néanmoins, les simulations effectuées récemment pour ce type d'écoulement ont montré des résultats assez proches des expériences réalisées. Un des principaux inconvénients de l'approche temporelle réside en fait dans l'impossibilité de distinguer les deux écoulements à différente vitesse. Cela donne lieu à une couche de mélange qui est forcément symétrique et, en conséquence, certaines caractéristiques essentielles des couches de mélange spatiales étudiées dans le laboratoire ne peuvent pas être analysées, *e.g.* le taux d'entraînement de fluide [100].

Des études expérimentales ont mise en évidence l'effet stabilisant de la compressibilité, responsable de la diminution du taux de croissance ainsi que des niveaux de fluctuations dans la couche de mélange [9, 15, 44, 126]. La décroissance de ces quantités a un impact important dans des applications pratiques comme le mélange entre l'oxydant et le combustible dans les moteurs ramjet ou scramjet, où la combustion turbulente dépend largement du micro-mélange des réactifs. Ce phénomène est associé à différentes causes : le comportement du terme de pression-dilatation [101, 123, 124, 144] ou l'effet de la compressibilité sur le développement des grandes échelles cohérentes [29, 66, 126]. De plus, l'incrément du nombre de Mach de gradient est associé à la forte diminution des niveaux d'énergie cinétique turbulente et du taux de croissance [145, 170]. Ces études démontrent que la diminution des fluctuations de pression, qui provoquent une diminution du terme de pression-dilatation, est responsable des faibles valeurs du taux de croissance. Les résultats de Mahle [100] et Pantano & Sarkar [123], dérivés d'une étude minutieuse basée sur l'équation d'onde des fluctuations de pression, confirment que la réduction de cette quantité avec la compressibilité est liée au délai des signaux de pression-dilatation dans l'écoulement compressible.

Ce chapitre est consacré à l'étude des couches de mélange compressibles inertes se développant spatialement et naturellement à l'aide des simulations numériques directes tridimensionnelles. Un des objectifs de ce chapitre réside dans la vérification et l'amélioration des connaissances déjà acquises sur ce type d'écoulements. Ce chapitre est organisé de la manière suivante. La section 6.2 décrit les paramètres des simulations et la section 6.3 vérifie la validation de celles-ci. La section 6.4 montre les caractéristiques principales de la structure des couches de mélange. La section 6.5 est consacrée au caractère autosimilaire des solutions. Les sections 6.6 et 6.7 présentent l'analyse des effets de la compressibilité sur la structure turbulente des couches de mélange et sur le mélange scalaire, respectivement. Dans la section 6.8 l'analyse de shocklets est effectuée. Enfin, la dernière section de ce chapitre est un résumé des principaux résultats obtenus.

6.2 Description des configurations étudiées

Les différents nombres de Mach convectif retenus pour les simulations présentées dans ce chapitre sont 0.35, 0.70 et 1.10. Une description détaillée des termes de transport est retenue pour la simulation conduite à $M_c = 0.35$ (I-3D-TD-0.35). Pour les simulations à $M_c = 0.70$ (I-3D-TS-0.70) et $M_c = 1.10$ (I-3D-TS-1.10), les expressions simplifiées des termes de transport moléculaire sont utilisées. La configuration du mélange est strictement la même que pour les couches cisailées inertes bidimensionnelles (tableau 5.2) : l'écoulement supérieur (indice 1) est le combustible tandis que l'écoulement inférieur est l'oxydant (indice 2). Les paramètres de simulation reportés dans le tableau 5.3 sont toujours valables. L'initialisation des calculs et les critères de stabilité des cas bidimensionnels sont conservés. De la même manière, les conditions limites présentées dans le chapitre précédent sont réutilisées et de nouvelles conditions de périodicité sont définies dans les sens de l'envergure x_3 . La vitesse de perturbation permettant le déclenchement *naturel* des instabilités au sein de la couche de mélange est fixée de la manière suivante :

$$v_p = \varepsilon_1 \alpha U_c \exp\left(-\frac{(x_1 - x_{1,0})^2 + (x_2 - x_{2,0})^2}{\Delta x_0^2}\right) \cos\left(\frac{2\pi(x_3 - x_{3,0})N}{L_3} + \varepsilon_2 \pi\right), \quad (6.2)$$

où ε_1 et ε_2 sont deux nombres aléatoires qui oscillent entre -1 et $+1$. α et Δx_0 sont, respectivement, l'amplitude et la taille de la perturbation. La relation (6.2) présente une forme sinusoïdale selon l'envergure avec un décalage en phase aléatoire [55]. La valeur de N choisie permet d'avoir 3 périodes complètes de cette fonction sinusoïdale dans la direction de l'envergure. Cette perturbation est appliquée à la composante transversale et selon l'envergure de la vitesse, en $(x_{1,0}, x_{2,0}, x_{3,0}) = (4\delta_{\omega,0}, 0, L_3/2)$.

Le nombre de Reynolds initial basé sur l'épaisseur de vorticit  est $Re_{\omega,0} = 640$ pour les trois simulations, similaire   celui utilis  dans les couches de m lange bidimensionnelles. Les caract ristiques du maillage ainsi que la taille des domaines sont report es dans le tableau 6.1. La taille de maille est constante selon la direction de l'envergure et, selon les deux autres directions de l'espace, un l ger  tirement est appliqu  comme indiqu  pr c demment dans la section 5.4.2. Pour rappel, l'obtention des couches de m lange inertes se fait en n gligeant les termes sources chimiques des  quations de Navier-Stokes, comme c' tait le cas pour les simulations bidimensionnelles inertes.

Les trois simulations consid r es dans ce chapitre ont  t  r alis es sur deux supercal-

TABLEAU 6.1 – Param tres g om triques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitu  d'un nombre de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. L' paisseur de vorticit  initiale $\delta_{\omega,0}$, utilis e comme longueur de r f rence, est calcul    partir de $Re_{\omega,0} = 640$.

Cas	$L_1/\delta_{\omega,0}$	$L_2/\delta_{\omega,0}$	$L_3/\delta_{\omega,0}$	N_1	N_2	N_3	N
I-3D-TD-0.35	320	60.6	30	1517	325	179	88×10^6
I-3D-TS-0.70	320	93.2	30	1517	341	179	92×10^6
I-3D-TS-1.10	385	93.2	30	1645	341	179	100×10^6

culateurs. Le premier est le supercalculateur ‘‘Turing’’ de l’IDRIS. Il s’agit d’une machine IBM Blue Gene/Q équipée de 65536 cœurs PowerPC A2 avec une puissance en crête totale de 836 Tflops. La deuxième machine est le cluster 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 I-3D-TD-0.35 a été exécuté sur Turing avec 2048 processus MPI tandis que les autres deux ont été lancées sur le cluster de l’Institut P’ en utilisant 256 processus MPI chacune.

6.3 Vérification des simulations

Les simulations présentées dans ce chapitre ont été conduites sur une période de temps suffisamment longue pour l’obtention d’une base statistique convergée. Le critère permettant d’assurer la convergence en temps des données statistiques est basé sur la convergence des moments d’ordre 2. Soient u_i et u_j deux composantes de vitesse instantanées et la fonction

$$f(u_i, u_j) = \frac{\langle u_i u_j \rangle - \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle - \langle u'_i u'_j \rangle}{\Delta U^2}, \quad (6.3)$$

pour vérifier la convergence de moments d’ordre 2, les simulations ont tourné pendant un temps suffisamment long pour permettre d’obtenir une base de données où la relation (6.3) tend vers une valeur inférieure à 10^{-5} .

La figure 6.1 montre la convergence des moments d’ordre 2 en fonction du temps de simulation, normalisé par L_1/U_c . Le calcul des moments d’ordre 2 est réalisé en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ pour les cas I-3D-TD-0.35 et I-2D-TS-0.70 tandis que pour le cas I-3D-TS-1.10 cette abscisse est décalée en $x_1 = 375\delta_{\omega,0}$. Dans la suite, toutes les quantités moyennes seront calculées à ces endroits sauf indication contraire. Les résultats des corrélations montrent que 10 et 18 unités de temps normalisé sont nécessaires, en fonction du nombre de Mach convectif, pour atteindre la convergence de ces statistiques. Ces chiffres sont sensiblement supérieurs à ceux des simulations de Fu & Li [55]. Ils correspondent à une base de données comprenant au moins 700 champs instantanés. Comme attendu, les fluctuations de vitesse longitudinales sont les quantités qui convergent le plus lentement du fait de ses valeurs relativement importantes.

Pour vérifier si la taille du domaine est suffisamment grande dans la direction d’homogénéité, *i.e.* selon le sens de l’envergure, où les conditions de périodicité sont appliquées, l’évaluation de corrélations en deux points et la détermination ultérieure de l’échelle de longueur intégrale est effectuée selon la procédure indiquée par O’Neill *et al.* [121]. La corrélation en deux points d’une quantité f dans la direction x_3 s’exprime comme

$$R_{3,f} = \frac{\langle f'(x_1, x_2, x_3, t) f'(x_1, x_2, x_3 + \Delta x_3, t) \rangle}{f_{\text{rms}}^2}. \quad (6.4)$$

Pour éviter une possible contamination numérique liée à un domaine de calcul insuffisamment long selon la direction de périodicité, la relation (6.4) doit tendre vers zéro au fur et à mesure que Δx_3 augmente. La figure 6.2 montre les corrélations des composantes de

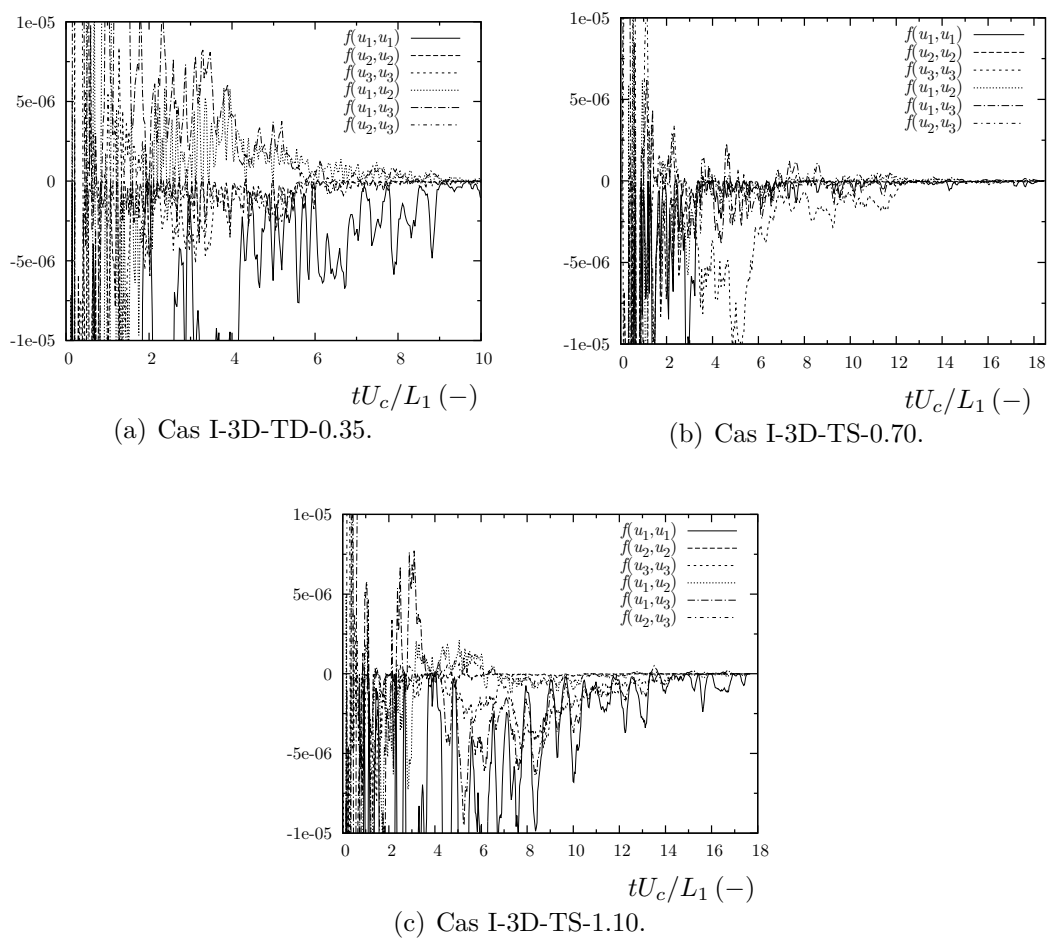


FIGURE 6.1 – Convergence des moments d'ordre 2.

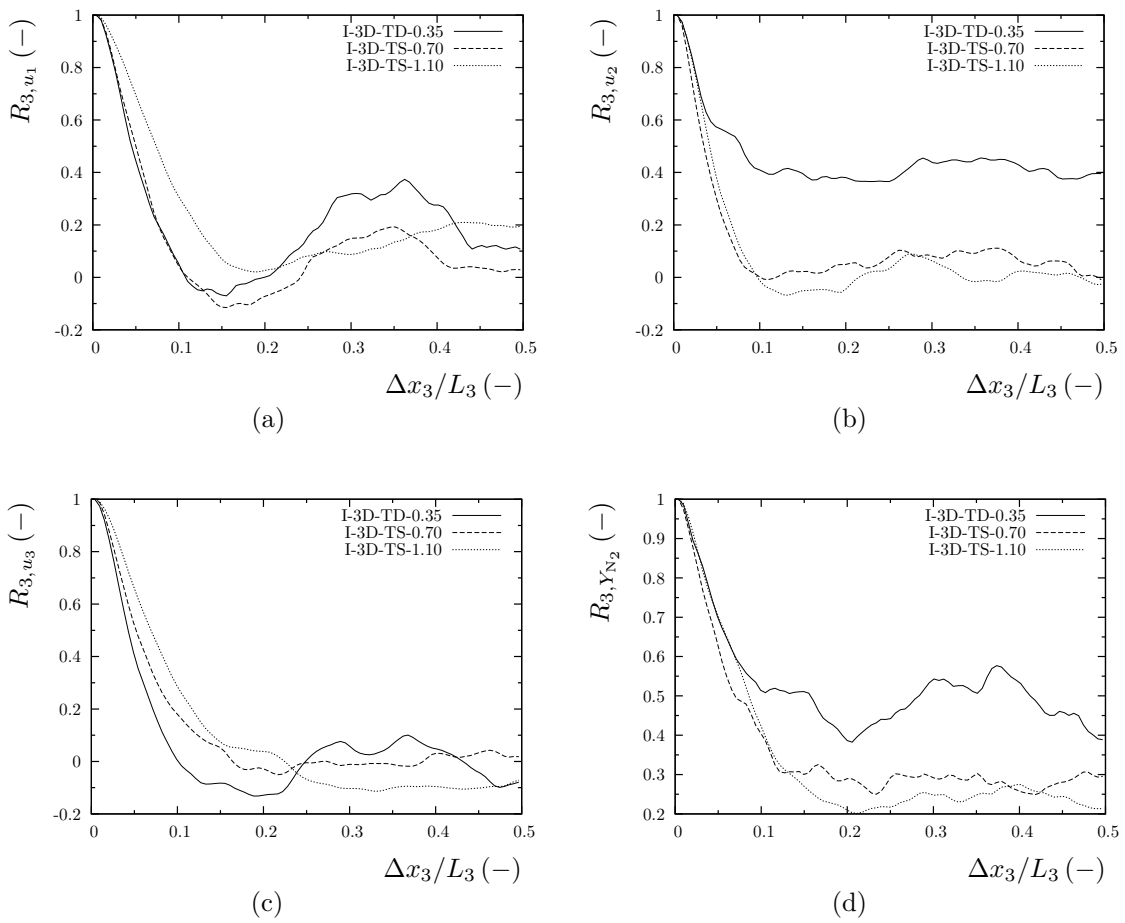


FIGURE 6.2 – Corrélations en deux points.

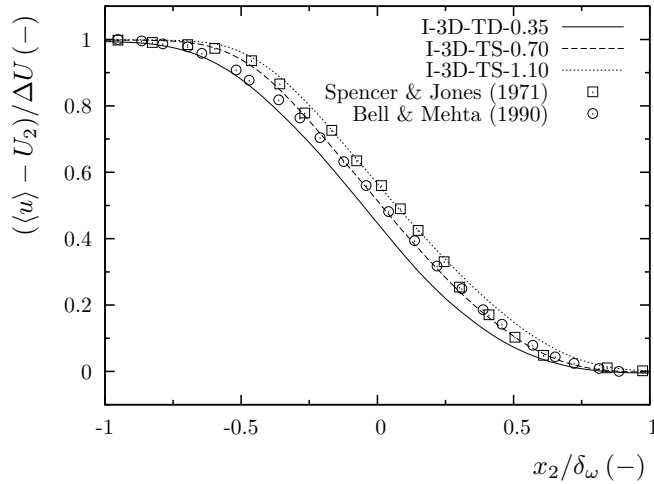


FIGURE 6.3 – Composante longitudinale de vitesse.

vitesse ainsi que de la fraction massique d'azote. Le comportement général de ces courbes montre une diminution effective de la corrélation. La simulation I-3D-DT-0.35 présente des niveaux de corrélation légèrement plus élevés comparés aux autres simulations. Ceci peut être attribué au développement de la couche de mélange en régime quasi incompressible. Comme il sera discuté dans la section suivante, à ce nombre de Mach convectif la structure de la couche de mélange présente une allure plus bidimensionnelle comparés aux autres régimes de compressibilité. Ce caractère bidimensionnel, qui peut aussi être influencé par le type de forçage utilisé, peut augmenter les valeurs des corrélations en deux points.

La longueur intégrale se calcule selon

$$l_3 = \int_0^{L_3/2} R_{3,u_1} d(\Delta x_3), \quad (6.5)$$

et sa valeur doit être inférieure à l'envergure du domaine de calcul. Le tableau (6.2) reporte les valeurs trouvées pour chaque simulation. Ces résultats sont tout à fait satisfaisants et du même ordre de grandeur ($l_3/L_3 \lesssim 0.1$) que ceux reportés dans la littérature [27, 100, 121, 123, 124].

La figure 6.3 montre la composante longitudinale moyenne de vitesse comparée à des études expérimentales. Les profils moyens obtenus pour les simulations numériques tridimensionnelles sont moyennés spatialement dans la direction d'homogénéité et temporellement. Pour rappel, la moyenne d'ensemble au sens de Reynolds et Favre s'exprime,

TABLEAU 6.2 – Echelles intégrales pour les simulations inertes.

Cas	I-3D-TD-0.35	I-3D-TS-0.70	I-3D-TS-1.10
l_3/L_3	0.108	0.066	0.119

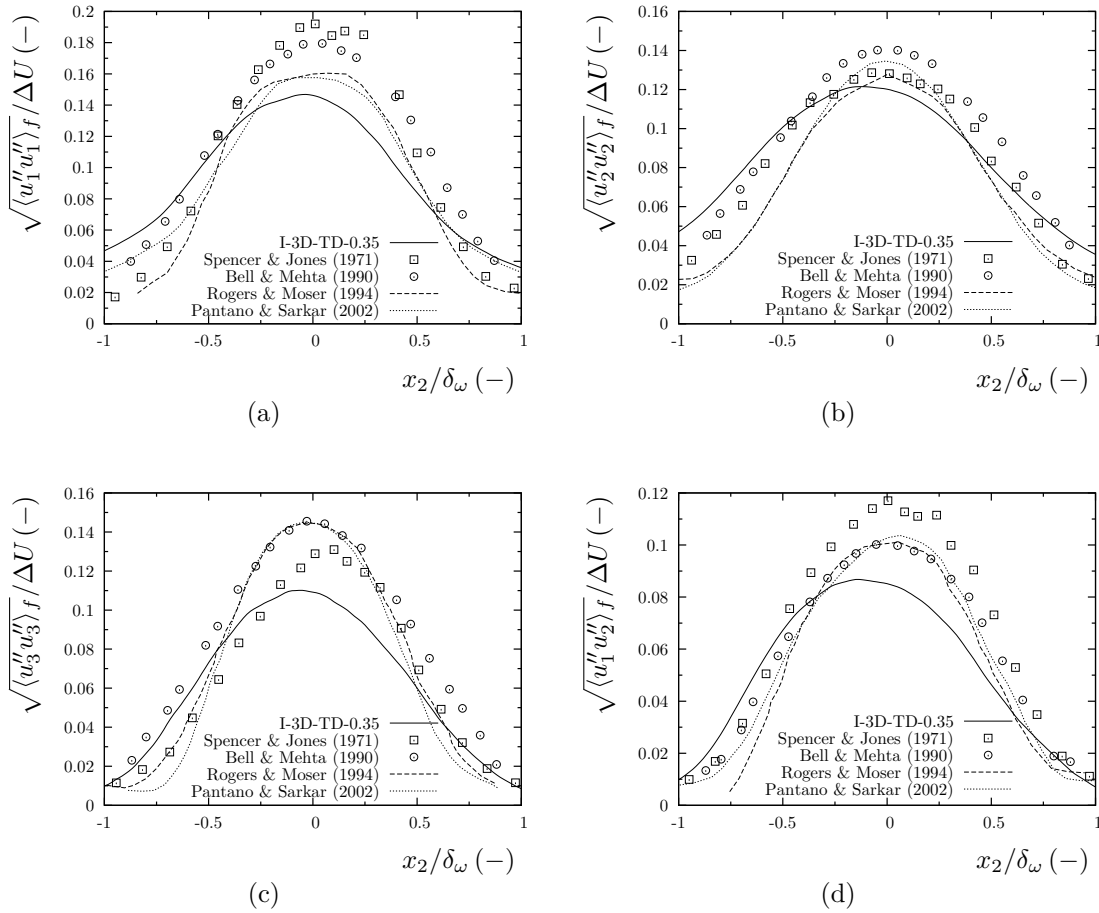


FIGURE 6.4 – Cas I-3D-TD-0.35. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU .

respectivement, comme

$$\langle \varphi \rangle (x_1, x_2) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \varphi(x_1, x_2, x_3, t) dx_3 dt}{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} dx_3 dt}, \quad (6.6)$$

et

$$\langle \varphi \rangle_f (x_1, x_2) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \rho \varphi(x_1, x_2, x_3, t) dx_3 dt}{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \rho(x_1, x_2, x_3, t) dx_3 dt}. \quad (6.7)$$

Pour toutes les quantités moyennes présentées dans la suite, la même procédure est utilisée sauf indication contraire. Il existe un bon accord entre les résultats obtenus dans ce travail et ceux de Spencer & Jones [156] et Bell & Mehta [12]. Une observation intéressante qui peut être tirée de cette figure est le caractère asymétrique des profils correspondant aux simulations actuelles. Cette dissymétrie est plus marquée avec la compressibilité.

Les figures 6.4–6.5 montrent les profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds (5.16) comparés à d'autres simulations numériques et études expérimentales [12, 123, 138, 156]. Ces résultats sont limités uniquement aux deux premiers régimes de compressibilité, $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. En général, les résultats obtenus ici

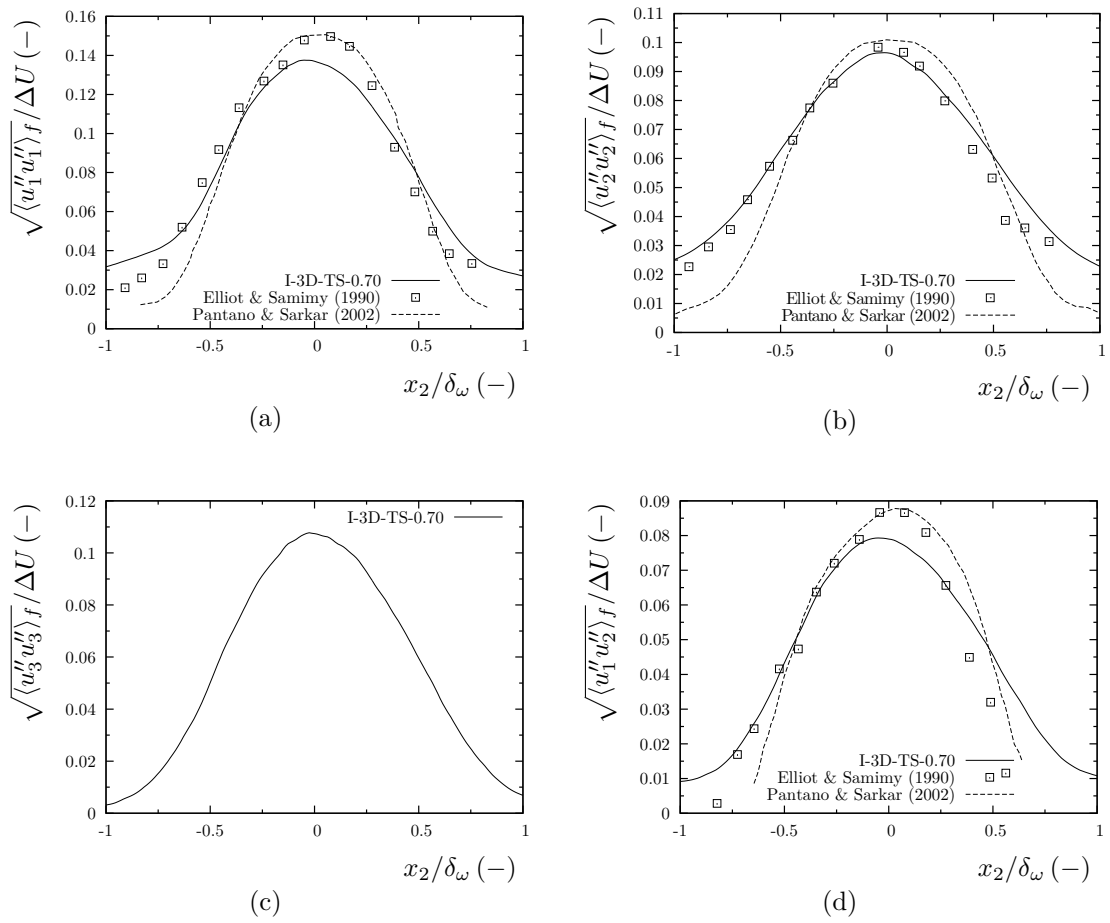


FIGURE 6.5 – Cas I-3D-TS-0.70. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU .

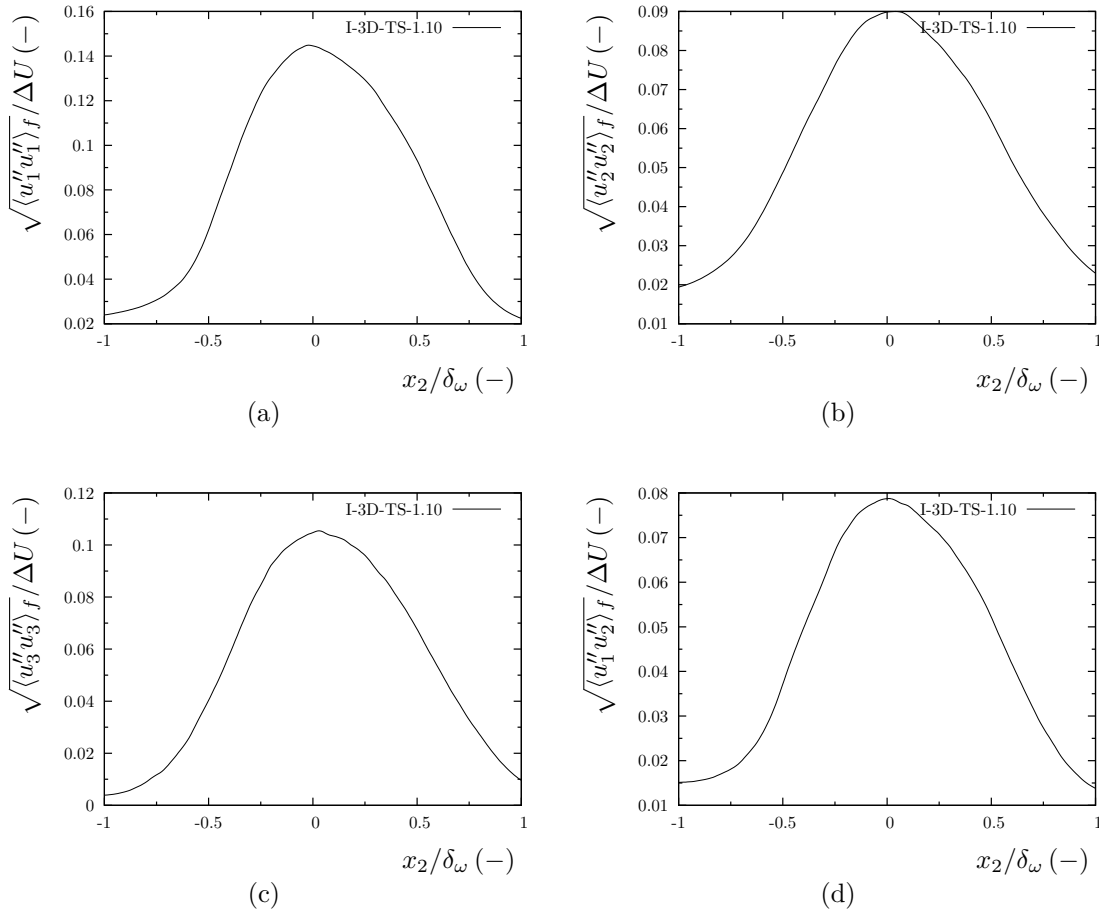


FIGURE 6.6 – Cas I-3D-TS-1.10. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU .

sont similaires à ceux observés dans ces études. Cependant, la largeur ainsi que la hauteur des profils des couches d'hydrogène-air sont légèrement différentes pour la simulation conduite à $M_c = 0.35$. Ces différences ont été attribuées à l'initialisation des simulations et aux dimensions du domaine de calcul. Effectivement, les dimensions des domaines de calcul des simulations présentées ici sont assez similaires à celles employées par Mahle [100]. Ces dimensions sont entre 2 et 4 fois plus grandes que celles des simulations de Rogers & Moser [138] et Pantano & Sarkar [123]. Il est possible que les simulations présentées ici et celles de Mahle capturent de manière plus complète la relaxation vers un état autosimilaire, ce qui se traduit par une diminution des niveaux maximum observés dans les profils présentés ici et dans la référence [100]. A nouveau, une forte dissymétrie est constatée et les profils sont déplacés vers l'écoulement le plus léger. Finalement, la figure 6.6 montre les profils de vitesse rms pour $M_c = 1.10$. Les valeurs maximales de la vitesse sont légèrement plus faibles qu'à $M_c = 0.70$, avec un faible décalage additionnel vers le courant de combustible, ce qui est consistant avec les résultats montrés dans la figure 6.3.

Pour finir cette étude de vérification préliminaire, le tableau 6.3 regroupe des résultats numériques et expérimentaux portant sur des couches de mélange incompressibles. Les résultats de la couche de mélange bidimensionnelle I-2D-0.35 (voir section 5.4) et la

simulation I-3D-TD-0.35 sont aussi présentés afin de pouvoir les comparer. Les valeurs maximales des profils de vitesses rms obtenues dans le cas I-3D-TD-0.35 sont concordants avec d'autres expériences et simulations numériques directes tridimensionnelles. La simulation équivalente bidimensionnelle présente, quant à elle, des valeurs supérieures pour ces quantités, ce qui avait été déjà discuté dans la section 5.3. En particulier, cette surestimation moyenne d'environ 66% dans le cas I-2D-0.35 suffit à justifier l'intérêt d'une description tridimensionnelle de la couche de mélange.

6.4 Structure des couches de mélange

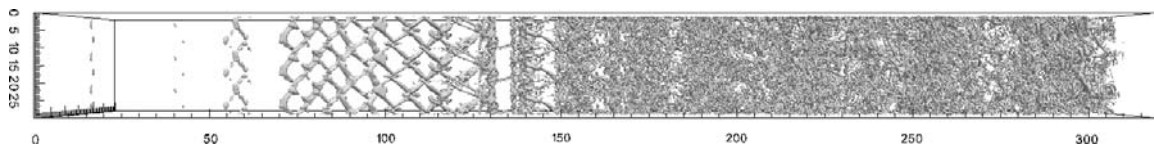
Dans la suite, des champs instantanés associés aux couches de mélange en régime permanent sont présentés et discutés. Le but de cette section est de comparer quelques caractéristiques du développement spatial ainsi que de la transition des couches de mélange à différents niveaux de compressibilité.

6.4.1 $M_c = 0.35$

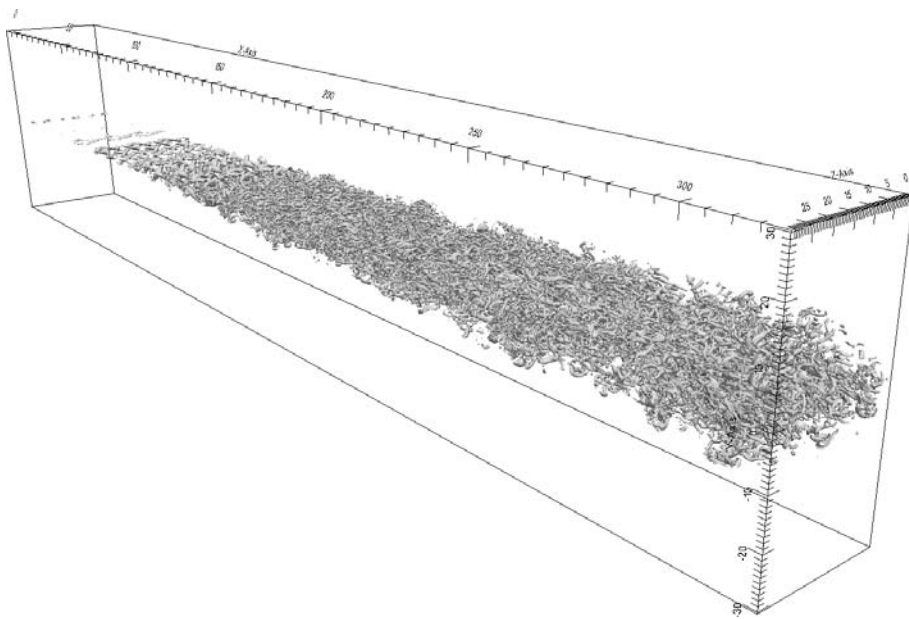
La figure 6.7 montre l'enroulement des tourbillons à l'aide des isocontours du critère λ_2 . Cette quantité correspond à la valeur propre la plus négative associée au tenseur de gradient de vitesse $S^2 + \Omega^2$, où S et Ω sont la partie symétrique et antisymétrique de ce tenseur, respectivement. D'autres critères sont également utilisés dans la littérature pour visualiser les structures turbulentes, *e.g.* les isocontours de pression ou le critère Q . Plusieurs auteurs [55, 82] considèrent que les critères Q et λ_2 sont souvent équivalents. Dans la figure 6.7(a) on peut visualiser l'apparition d'une structure cohérente entrelacée associée au type de perturbation aléatoire introduite en amont. Ces structures entrelacées marquent la région de transition de la couche de mélange tel que le suggèrent Ma *et al.* [98]. Ces structures donnent naissance à la création d'un première enroulement en $x_1 \approx 130\delta_{\omega,0}$. Un deuxième et un troisième rouleau apparaissent ensuite de manière successive jusqu'à $x_1 \approx 160\delta_{\omega,0}$. La formation des tourbillons contre-rotatifs longitudinaux (instabilité secondaire), appelés "ribs" [59], dans les tresses des rouleaux est clairement visible à ce niveau de compressibilité. Les figures 6.7(b)–6.8 démontrent que l'écoulement compris au sein de

TABLEAU 6.3 – Compilation de résultats obtenus pour différentes couches de mélange incompressibles.

$Re_{\omega,0}$	$r_{11,\max}$	$r_{22,\max}$	$r_{12,\max}$	Type	Référence
-	0.176	0.138	0.097	Expérimentale	Wynanski & Fiedler [175]
-	0.190	0.120	0.114	Expérimentale	Spencer & Jones [156]
1800	0.180	0.140	0.100	DNS-3D	Bell & Mehta [12]
3200	0.160	0.130	0.100	DNS-3D	Rogers & Moser [138]
720	0.200	0.290	0.150	DNS-2D	Stanley & Sarkar [157]
5333	0.200	0.260	0.140	DNS-2D	Bogey [16]
640	0.230	0.260	0.120	DNS-2D	I-2D-0.35
640	0.150	0.120	0.090	DNS-3D	I-3D-TD-0.35



(a)



(b)

FIGURE 6.7 – Cas I-3D-TD-0.35. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.

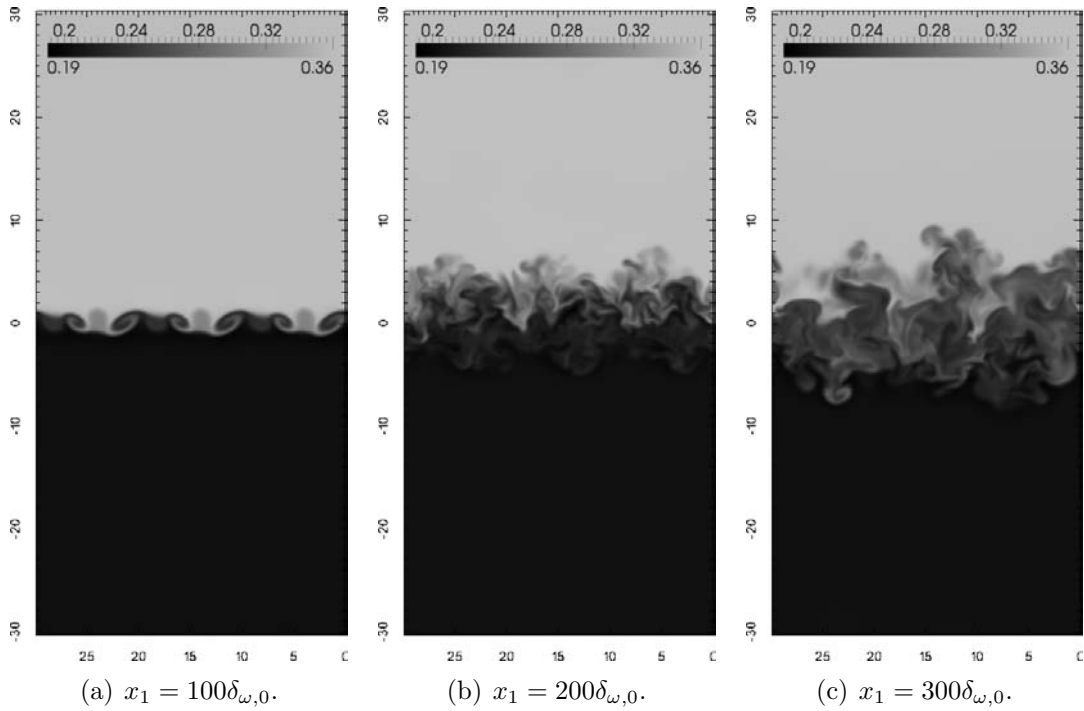


FIGURE 6.8 – Cas I-3D-TD-0.35. Champs instantanés de masse volumique correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

la couche cisailée est dominé par les structures tourbillonnaires, vers la fin du domaine de calcul.

La figure 6.9 montre la distribution instantanée de la fraction massique d’hydrogène dans différents plans de l’espace. La croissance de la couche cisailée se confirme avec le mélange continu entre les tourbillons voisins comme le montrent les figures 6.9(a)–(b). Ce mécanisme, caractéristique d’un état turbulent développé, est en accord avec des études expérimentales [21] et numériques [138]. La figure 6.9(b) montre le champ instantané de fraction massique d’hydrogène dans un plan x_1 - x_3 situé au milieu du domaine de calcul. Cette structure plus ou moins bidimensionnelle est typique des couches de mélange incompressibles [20, 21, 29]. Les figures 6.9(c)–(d) montrent des plans x_2 - x_3 appartenant à une tresse et à un rouleau, respectivement. Ces régions coïncident également avec des endroits où la pression est maximale (tresse) et minimale (rouleau). La différence la plus notable entre l’action des structures de type tresse et rouleau réside dans la quantité de fluide engloutie, comme le confirment les isolignes de fraction massique d’hydrogène.

6.4.2 $M_c = 0.70$

La figure 6.10 montre l’enroulement des tourbillons à l’aide des isocontours du critère λ_2 . A la différence du cas précédent, la présence des structures entrelacées est sensiblement réduite et les structures cohérentes présentent une allure plus étirée. Le déclenchement des instabilités a lieu plus ou moins à la même abscisse que celle du cas quasi incompressible, soit environ $x_1 = 130\delta_{\omega,0}$, sans néanmoins une continuation successive des rouleaux.

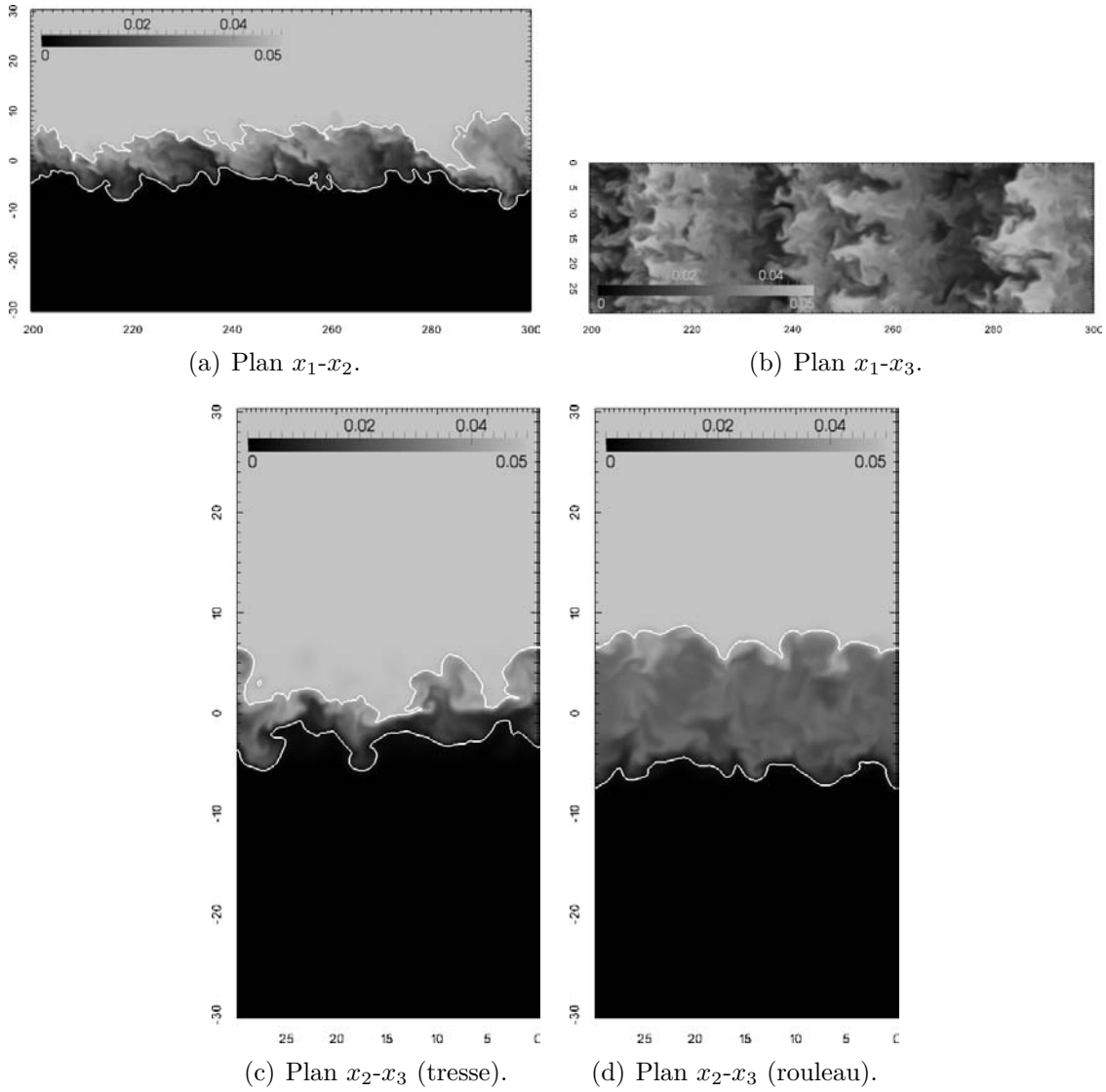
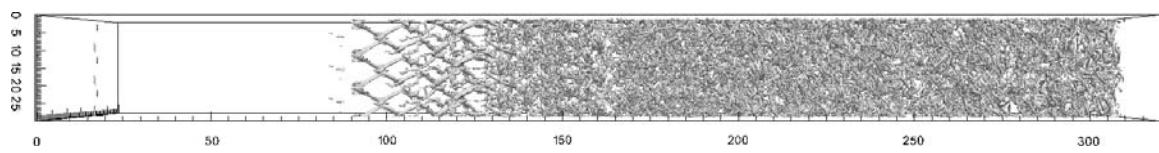
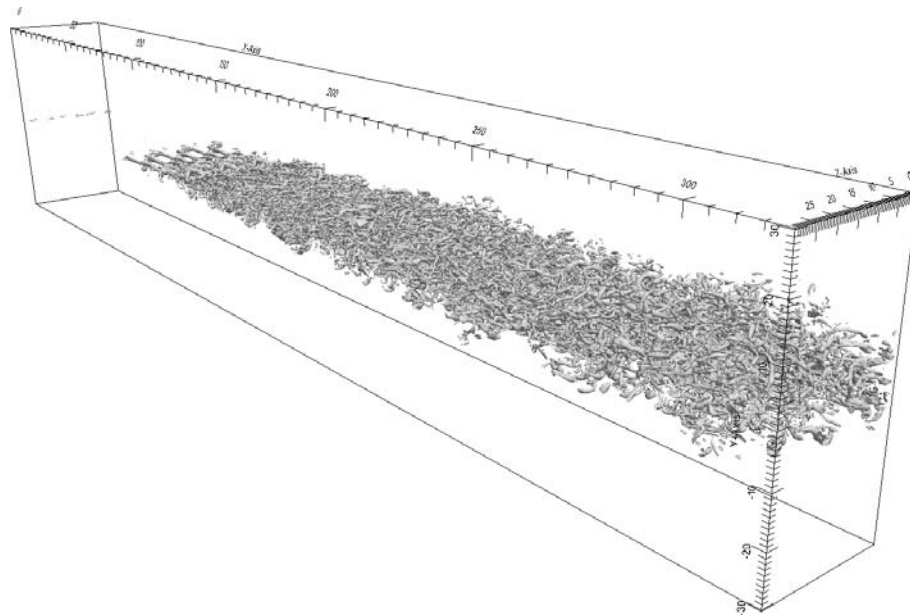


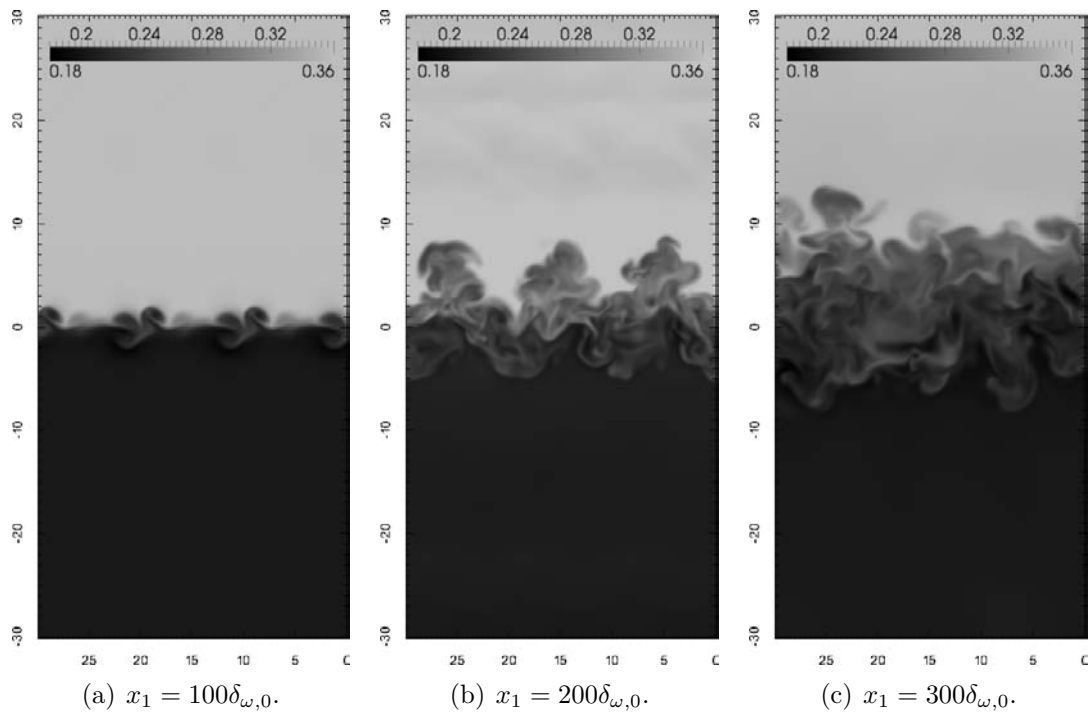
FIGURE 6.9 – Cas I-3D-TD-0.35. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).



(a)



(b)

FIGURE 6.10 – Cas I-3D-TS-0.70. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.(a) $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$.(b) $x_1 = 200\delta_{\omega,0}$.(c) $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$.FIGURE 6.11 – Cas I-3D-TS-0.70. Champs instantanés de masse volumique correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

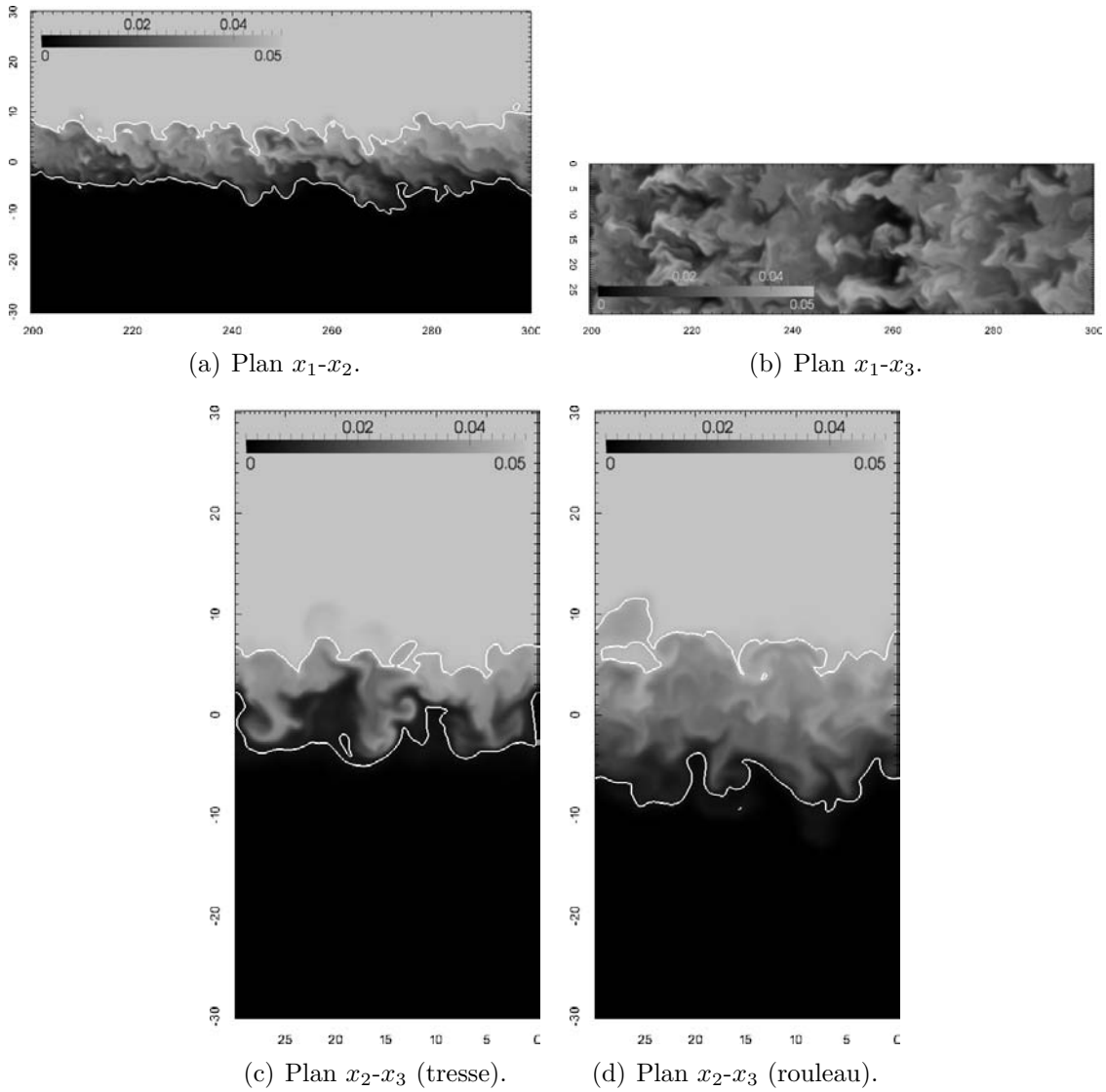
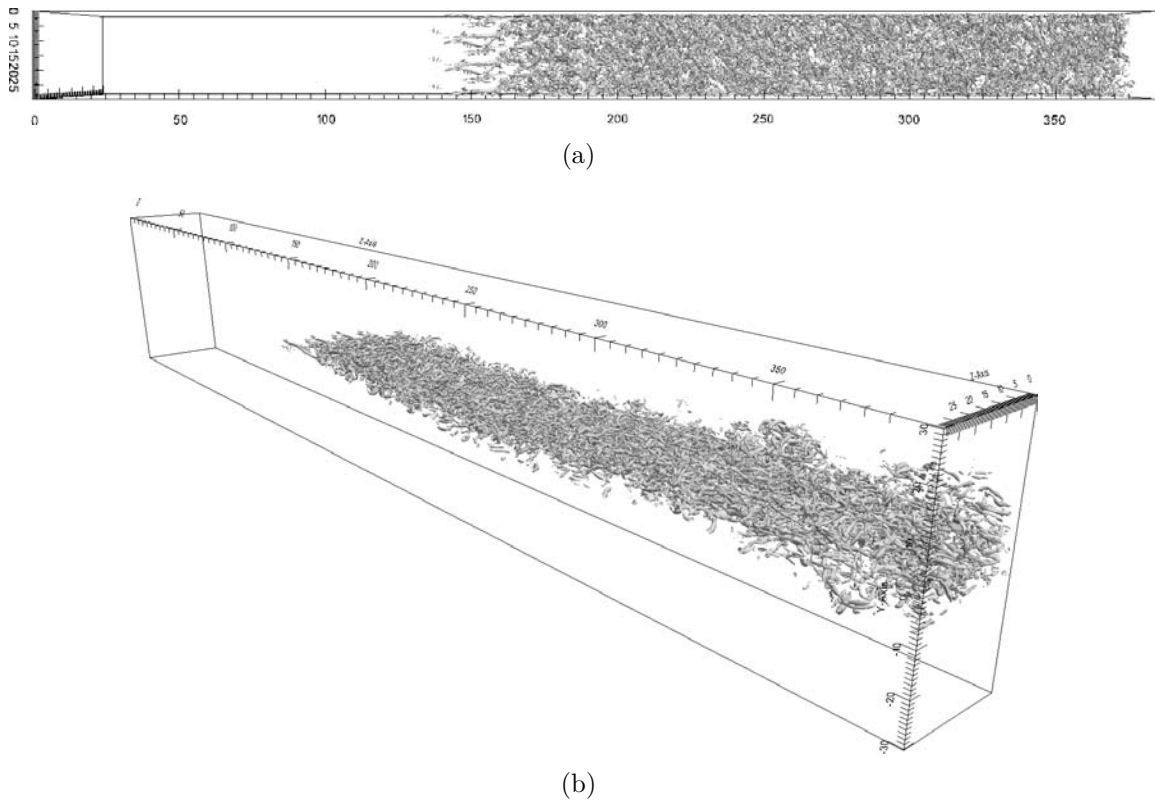


FIGURE 6.12 – Cas I-3D-TS-0.70. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).

Les structures tourbillonnaires se développent rapidement après le déclenchement. La figure 6.11 montre la distribution instantanée de masse volumique dans différents plans x_2-x_3 . En $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$, les tourbillons contre-rotatifs issus de la perturbation aléatoire appliquée en amont présentent une allure plus oblique par rapport à celle observée dans le cas quasi incompressible. Ces tourbillons croissent dans le sens de l’écoulement et génèrent des structures de taille plus petite vers la fin du domaine de calcul.

La figure 6.12 montre la distribution instantanée de la fraction massique d’hydrogène dans différents plans de l’espace. Comme dans le cas des simulations bidimensionnelles, la structure générale de la couche de mélange devient moins cohérente. L’identification entre rouleaux et tresses dans la figure 6.12(a) est moins évidente que dans le cas précédent. La figure 6.12(b) montre le champ instantané de fraction massique d’hydrogène dans un plan x_1-x_3 situé au milieu du domaine de calcul. Les niveaux de fraction massique montrent

FIGURE 6.13 – Cas I-3D-TS-1.10. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.

une structure légèrement plus désorganisée et étirée dans le sens longitudinal comparé au régime quasi incompressible. Comme mentionné plus haut, l'identification des plans x_2 - x_3 correspondant aux tresses et rouleaux, devient plus difficile (voir figures 6.12(c)–(d)). Par rapport au cas précédent, le champ instantané de fraction massique d'hydrogène révèle une structure plus désorganisée avec des éjections de fluide avec une forme caractéristique de champignon plus prononcées.

6.4.3 $M_c = 1.10$

La figure 6.13 montre l'enroulement des tourbillons à l'aide des isocontours du critère λ_2 . A différence du cas bidimensionnel où le développement des instabilités n'avait pas eu lieu, le déclenchement de l'enroulement dans le cas tridimensionnel apparaît à environ $x_1 = 160\delta_{\omega,0}$. Cette distance est significativement supérieure à celles obtenues pour les autres cas, ce qui oblige à étendre le domaine du calcul dans le sens de l'écoulement. La transition de l'écoulement laminaire en turbulent se fait encore plus rapidement qu'à $M_c = 0.70$ et la formation de ribs reste complètement insignifiante à ce régime de compressibilité. Les structures entrelacées indicatrices de la transition et observées dans les deux cas précédents sont complètement disparues. Il est important de remarquer le fait que les simulations présentées ici capturent de manière adéquate l'état transitoire des couches de mélange, de manière similaire aux calculs LES de Ma *et al.* [98], et elles diffèrent des couches de Fu & Li [55], qui deviennent turbulentes très près du plan d'entrée de la simulation et

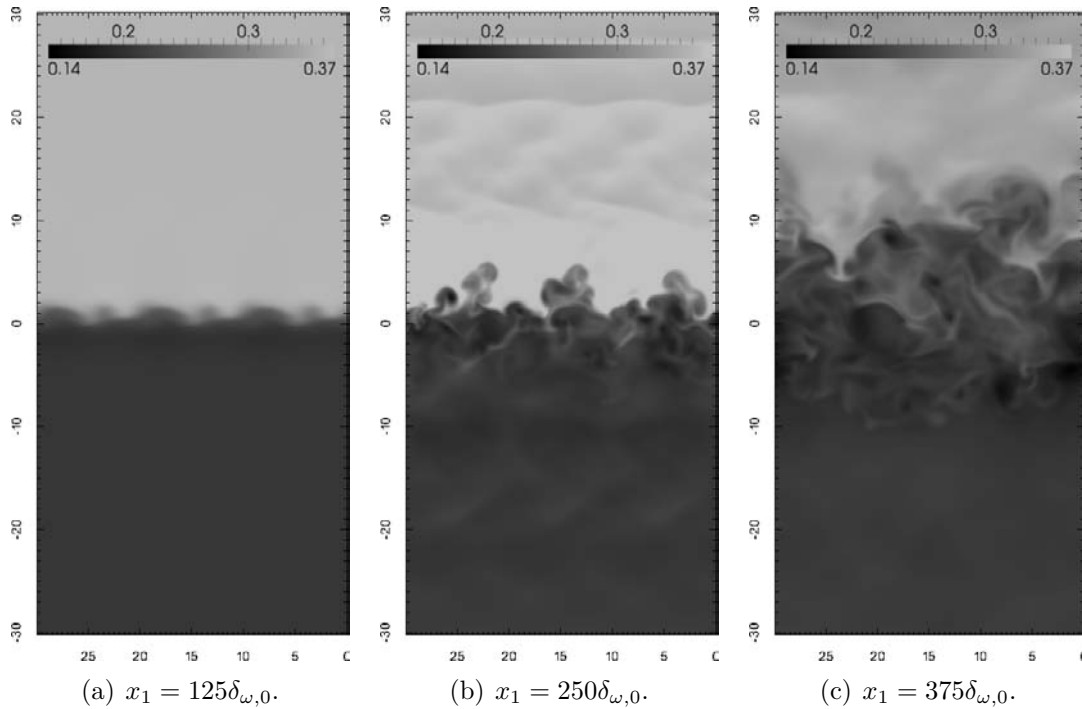


FIGURE 6.14 – Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantanés de masse volumique correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

ne semblent pas subir une transition. La figure 6.14 montre la distribution instantanée de masse volumique dans différents plans x_2 - x_3 . Les résultats illustrent à nouveau une structure très désorganisée vers la fin du domaine de calcul. La figure 6.14(b) montre l'apparition des forts gradients de masse volumique loin du centre de la couche de mélange et, plus particulièrement, dans le courant de combustible. Ces gradients se forment lors du déclenchement des instabilités et leur amplitude diminue plus en aval de l'écoulement (voir figure 6.14(c)). Ces discontinuités peuvent être associées à des "shocklets". Une analyse plus détaillée sera effectuée dans la section 6.8 pour vérifier la présence des shocklets dans les couches de mélanges compressibles.

La figure 6.15 montre la distribution instantanée de la fraction massique d'hydrogène dans différents plans de l'espace. La structure générale de la couche de mélange présentée dans la figure 6.15 est la plus déformée des trois cas. La structure tridimensionnelle et désorganisée est visible dans la figure 6.15(b). La distinction entre tresses et rouleaux est plus difficile à effectuer tel que le démontrent les figures 6.15(c)–(d).

6.5 Etat d'autosimilarité

Les domaines de calcul employés sont suffisamment longs pour atteindre un état autosimilaire. Dans cet état, les taux de croissance basés sur les épaisseurs de vorticit  et de quantit  de mouvement  voluent de mani re lin aire, comme le montre la figure 6.16. Cette figure confirme aussi qu'au fur et   mesure que la compressibilit  augmente, l' tat autosimilaire est atteint plus lentement. Le tableau 6.4 montre les taux de croissance nor-

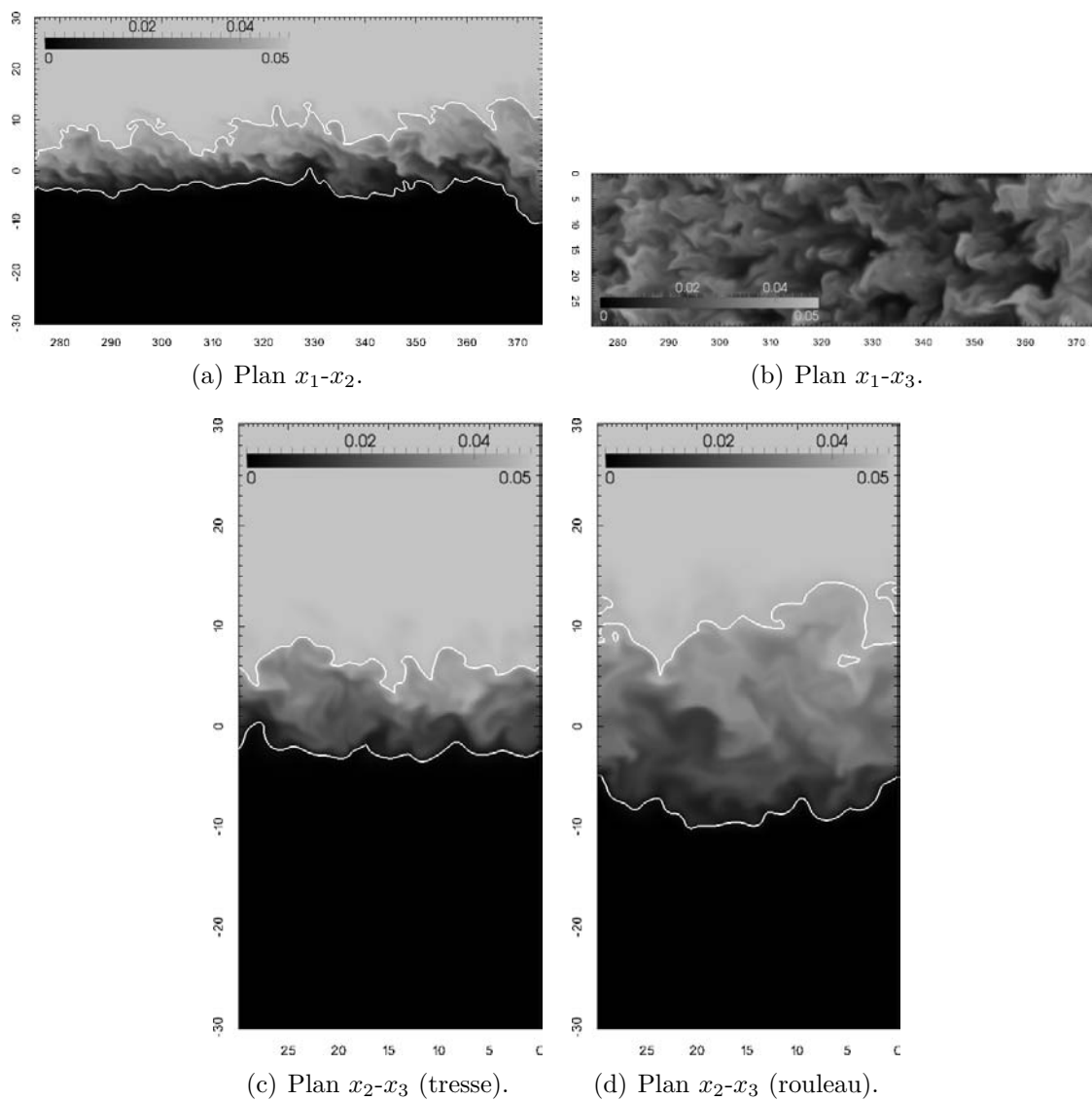


FIGURE 6.15 – Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantanés de fraction massique d'hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).

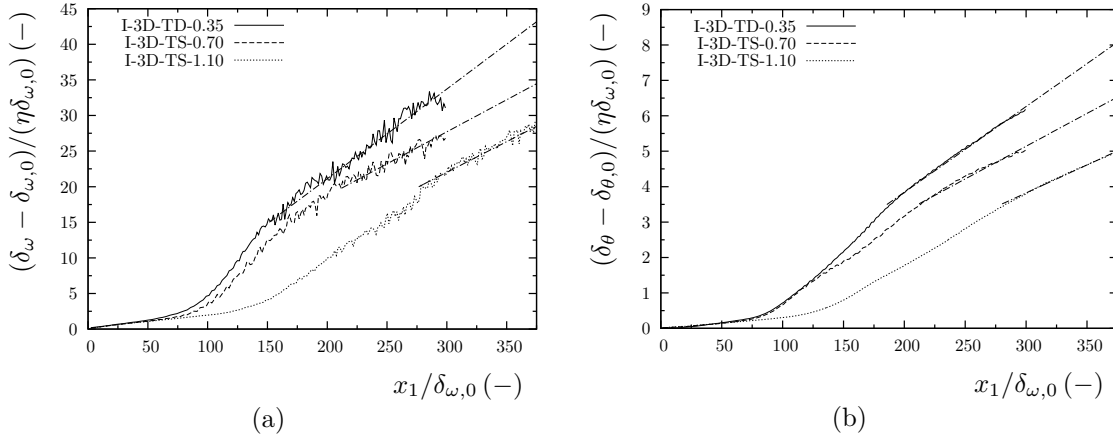


FIGURE 6.16 – Evolution spatiale des  paisseurs normalis es de vorticit  (a) et de quantit  de mouvement (b).

malis s correspondant aux couches de m lange tridimensionnelles inertes. En g n ral, ces valeurs sont plus faibles que dans les cas bidimensionnels  quivalents (voir section 5.4). La valeur trouv e de 0.126 pour $M_c = 0.35$ est en bon accord avec les simulations de Rogers & Moser [138]. Ce tableau pr sente aussi les valeurs du nombre de Reynolds (5.9) atteints   la fin du domaine de calcul. Ces valeurs sont  quivalentes aux simulations bidimensionnelles et suffisamment grands pour consid rer une turbulence pleinement d velopp e [55, 123]. La longueur caract ristique de l' chelle de Kolmogorov, report e dans le tableau 6.4, est calcul e   partir de la relation

$$L_\eta = \left(\frac{\langle \nu \rangle^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (6.8)$$

avec ν la viscosit  cin matique et ϵ le taux de dissipation de l' nergie cin tique turbulente (5.17). L_η est l g rement inf rieure   la taille minimale de maille du domaine de calcul, ce qui confirme que les petites  chelles sont correctement r solues [27, 101, 123, 124]. Le tableau 5.4 montre aussi les valeurs obtenues pour le nombre de Reynolds bas  sur la micro- chelle de Taylor, d fini comme

$$Re_\lambda = 2k \sqrt{\frac{5}{\langle \nu \rangle \epsilon}}, \quad (6.9)$$

o  k d signe l' nergie cin tique turbulente. Pour rappel, la micro- chelle de Taylor est d finie comme

$$L_\lambda = \sqrt{\frac{10 \langle \nu \rangle k}{\epsilon}}. \quad (6.10)$$

Les valeurs de Re_λ sont  quivalentes   celles trouv es dans les simulations portant sur le d veloppement temporel des couches de m lange [100, 123, 124] et en accord avec les conclusions de Dimotakis [38].

Quand une couche de m lange devient autosimilaire, les profils des quantit s moyennes normalis es par ρ_0 , ΔU et δ_ω se superposent. Pour v rifier cette propri t , la figure 6.17

TABLEAU 6.4 – Caractérisation des couches de mélange tridimensionnelles inertes. Les nombres de Reynolds et les échelles caractéristiques sont calculés en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas I-3D-TD-0.35 et I-3D-TS-0.70) et $x_1 = 375\delta_{\omega,0}$ (cas I-3D-TS-1.10), au centre du domaine de calcul.

Cas	$\eta^{-1}d\delta_{\omega}/dx_1$	$\delta'_{\omega}/\delta'_{\omega,i}$	Re_{ω}	Re_{λ}	$L_{\eta}/\Delta x$	$L_{\lambda}/\Delta x$
I-3D-TD-0.35	0.126	0.76	6419	129	0.36	6.12
I-3D-TS-0.70	0.090	0.54	8492	118	0.42	6.87
I-3D-TS-1.10	0.086	0.51	10628	122	0.51	8.40

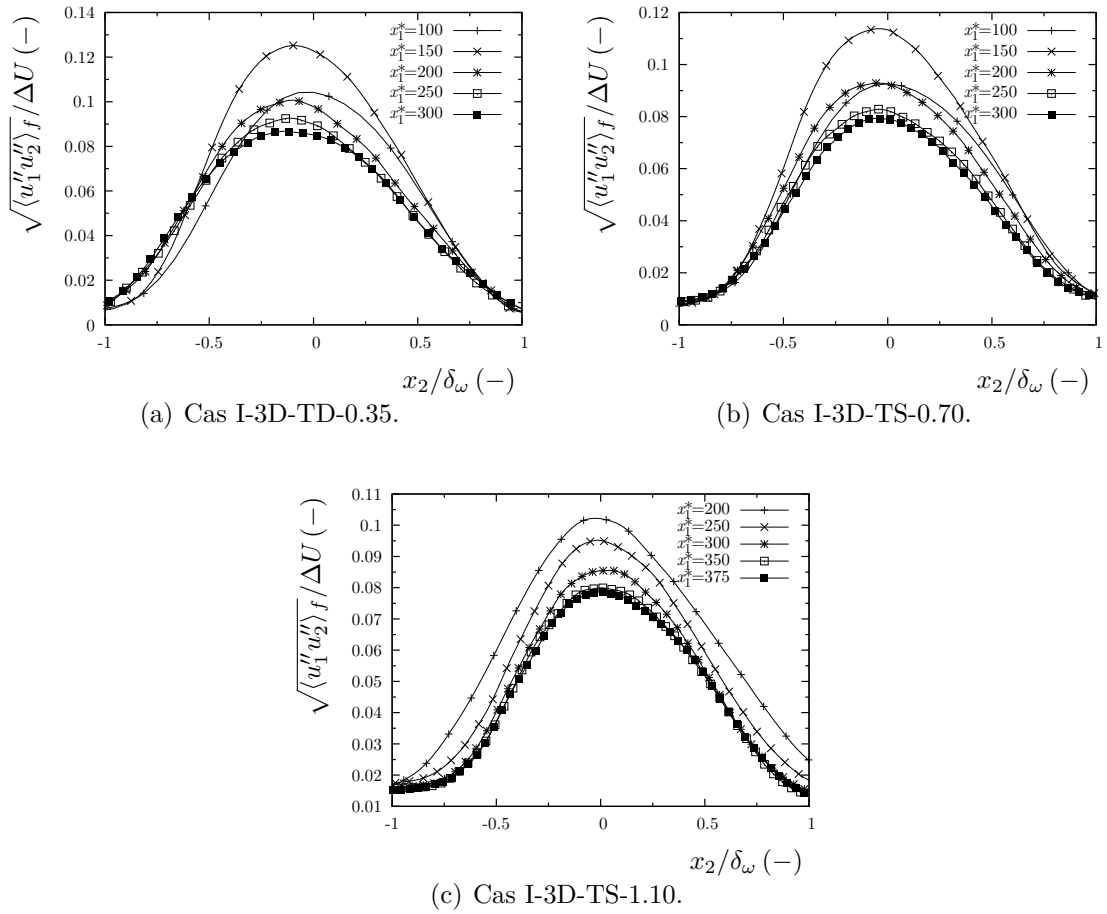


FIGURE 6.17 – Profils de vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} à différentes abscisses.

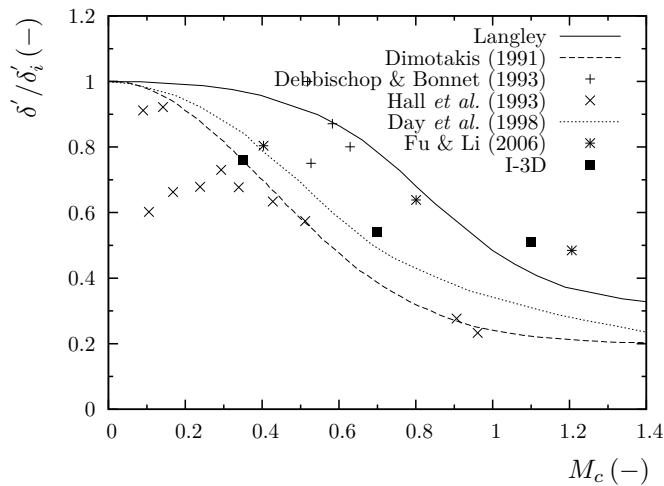


FIGURE 6.18 – Taux de croissance normalisés en fonction du nombre de Mach convectif pour différentes simulations et études expérimentales.

présente les profils des vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} en fonction de l'abscisse normalisée $x_1^* \equiv x_1/\delta_{\omega,0}$. Les profils correspondant aux dernières abscisses sont très proches les uns des autres, vérifiant donc cette propriété.

Cette section se conclut avec la comparaison des taux de croissance normalisés des couches de mélange inertes avec d'autres travaux expérimentaux et numériques [32, 35, 37, 55, 66]. La figure 6.18 montre la décroissance de l'épaisseur de vorticit  en fonction du nombre de Mach convectif. La valeur de l'épaisseur de vorticit  incompressible est fix e   0.166 (voir section 5.3). Les r sultats obtenus dans ce travail se trouvent bien dans les r gions d limit es par d'autres  tudes. Enfin, il peut  tre aussi constat  que les taux de croissance appartenant aux deux derniers r gimes de compressibilit  sont tr s similaires.

6.6 Effet de la compressibilit  sur la turbulence

6.6.1 Variables moyennes

La figure 6.19 montre les profils de vitesses longitudinales moyenn es au sens de Favre et de Reynolds. La diff rence entre les profils est inappr ciable car le terme barocline de l' quation de transport de l'enstrophie (5.24), responsable de l g res diff rences dans ces profils dans les cas bidimensionnels [113], devient n gligeable dans le cas tridimensionnel (voir section 6.6.4). La dissym trie de ce profil avec la compressibilit  est  vidente, ce qui est aussi constat  dans les cas 2D  tudi s dans la section 5.4.

La figure 6.20 montre les profils moyens des principales variables thermodynamiques d'int r t : masse volumique, temp rature, pression et masse molaire du m lange. Ces profils sont pr sent s sous forme normalis e de fa on   avoir des quantit s qui varient entre 0 et 1. Comme le montre la figure 6.20(b), la valeur moyenne maximale de la temp rature au sein de la couche de m lange se produit dans le cas le plus compressible. Ceci est une cons quence directe du frottement visqueux entre les deux  coulements, qui augmente

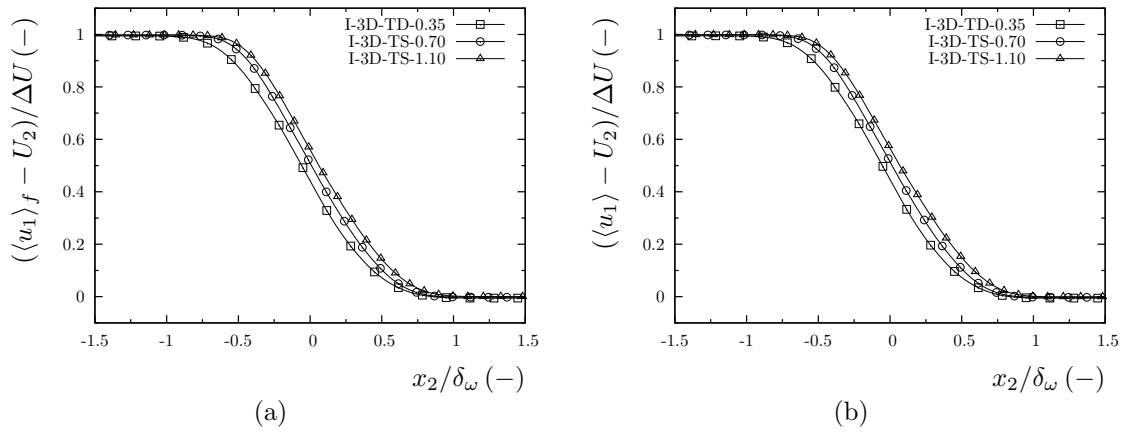


FIGURE 6.19 – Profils de vitesse longitudinale normalisée moyennée au sens de Favre (a) et de Reynolds (b).

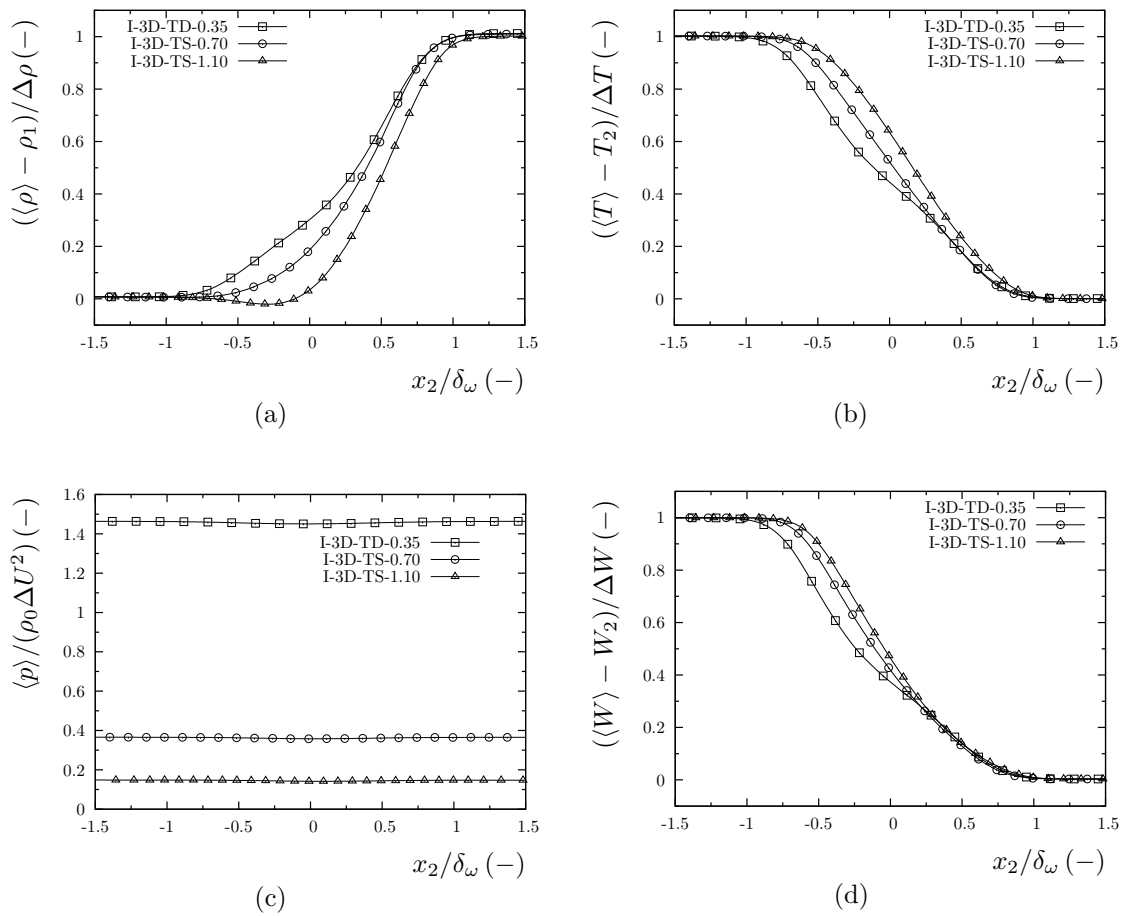


FIGURE 6.20 – Profils moyens de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).

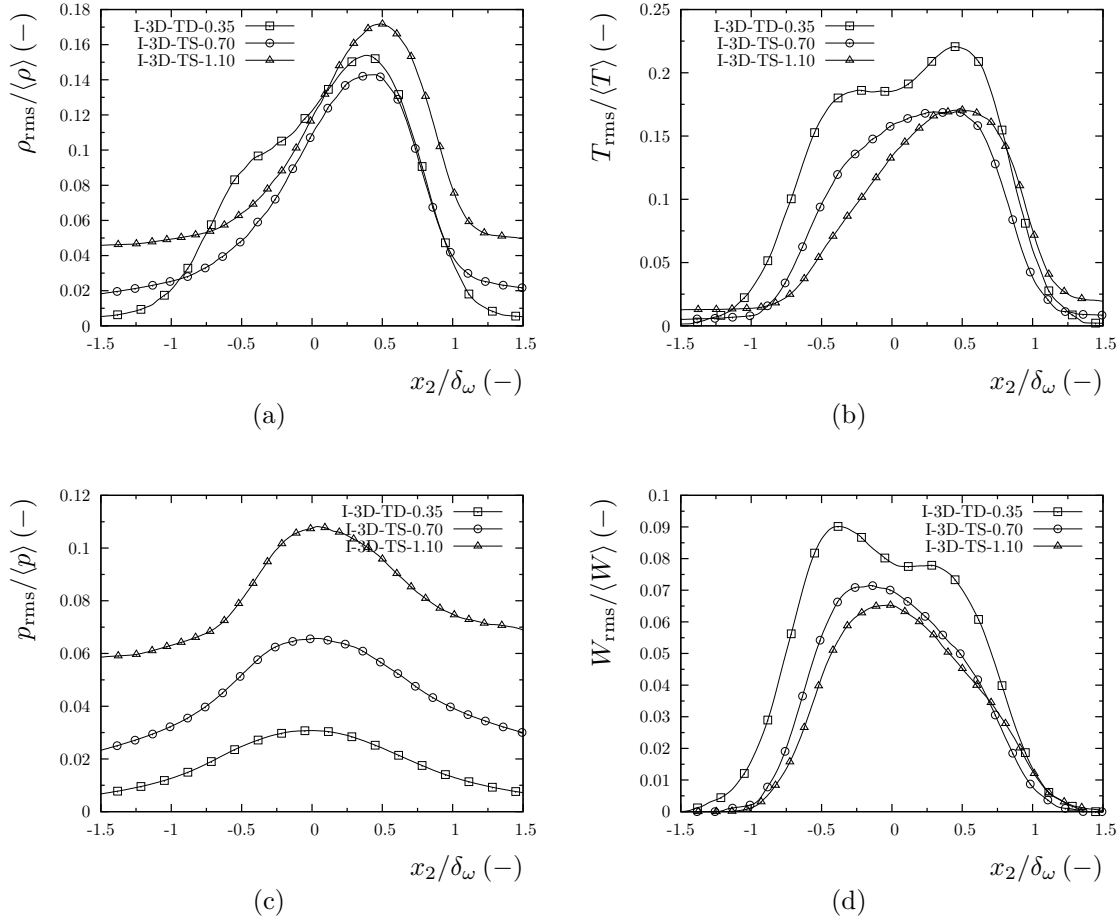


FIGURE 6.21 – Profils rms de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).

plus la température moyenne du fluide, d'environ 230 K, pour le régime de compressibilité le plus élevé par rapport au cas quasi incompressible. Ces résultats sont en bon accord qualitatif avec les observations de Figueira da Silva *et al.* [51] et Nishioka & Law [118] portant sur des couches de mélange laminaire d'hydrogène-air. Cette augmentation notable de température entraîne une diminution de la masse volumique (figure 6.20(a)). La pression moyenne normalisée par le facteur $\rho_0\Delta U^2$ est presque constante à travers la couche de mélange et chute quand le nombre de Mach convectif augmente. La multiplication des profils de pression par γM_c^2 donne une constante de valeur approximative 0.24, démontrant que la chute en pression est proportionnelle à ce facteur. Enfin, le profil de masse molaire normalisée présente une évolution similaire à celle de la température.

6.6.2 Variables thermodynamiques fluctuantes

La figure 6.21 montre les profils rms des principales variables thermodynamiques. Les fluctuations de la masse molaire diminuent avec la compressibilité comme résultat d'une diminution du degré de mélange. Le même comportement est observé pour les valeurs rms de la température. En revanche, les fluctuations de pression et de masse volumique

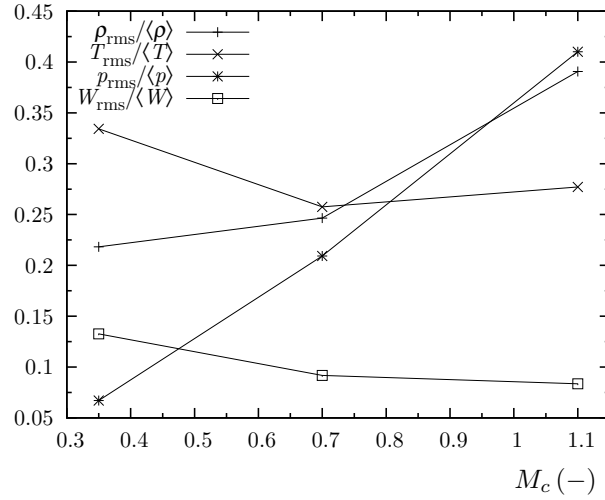


FIGURE 6.22 – Fluctuations des variables thermodynamiques intégrées dans la direction transversale.

normalisées par leurs valeurs moyennes respectives augmentent avec le nombre de Mach compressible. Pour démontrer la dépendance des fluctuations thermodynamiques avec M_c , l'intégration des profils de la figure 6.21 est effectuée dans la direction transversale. Soit φ une variable quelconque normalisée comme celles présentées sur la figure 6.21, son intégration dans la direction transversale s'effectue selon

$$\hat{\varphi}(x_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x_1, x_2) d(x_2/\delta_\omega), \quad (6.11)$$

où $\hat{\varphi}$ représente la valeur normalisée de φ , intégrée dans la direction transversale. La figure 6.22 montre les résultats obtenus après l'intégration des variables thermodynamiques fluctuantes normalisées. Les fluctuations de pression et de masse volumique augmentent avec la compressibilité. En revanche, les fluctuations de température et de masse molaire ne montrent pas de dépendance significative au nombre de Mach convectif.

Pour étudier de manière plus détaillée le comportement des fluctuations de masse volumique et de température, la décomposition des ces fluctuations en partie acoustique et entropique est prise en compte en suivant l'analyse de Sarkar [146] :

$$\rho' = \rho'_{ac} + \rho'_{en}, \quad (6.12)$$

et

$$T' = T'_{ac} + T'_{en}, \quad (6.13)$$

avec $\rho'_{ac} = p'_{ac}/\langle c \rangle^2$, $T'_{ac} = (\gamma - 1)Tp'/(\gamma p)$ et $p'_{ac} = p'$. Les valeurs des quantités rms correspondant sont montrées dans la figure 6.23. La tendance générale observée est une augmentation des fluctuations acoustiques et une diminution des fluctuations entropiques avec la compressibilité. A la lumière de ces résultats, il peut être constaté que les fluctuations entropiques sont les plus importantes, ce qui est particulièrement vrai pour la

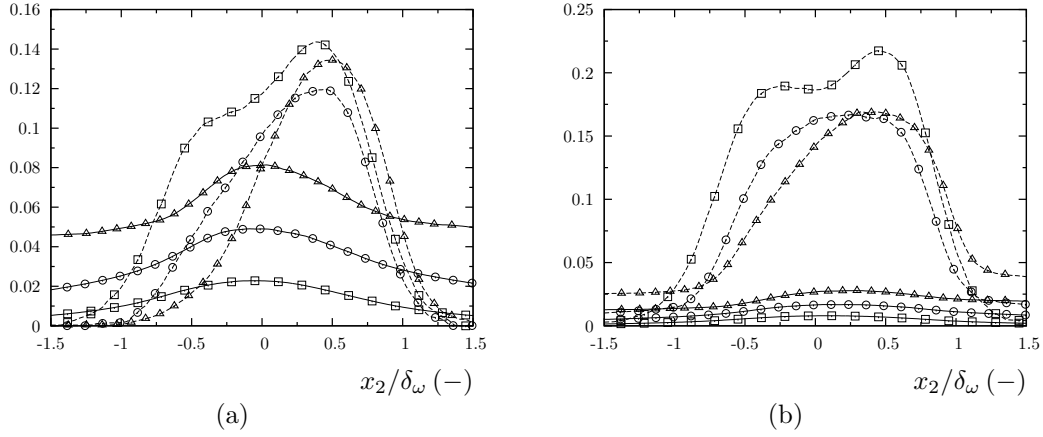


FIGURE 6.23 – Décomposition des profils rms de masse volumique (a) et température (b) en partie acoustique (—) et entropique (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.21.

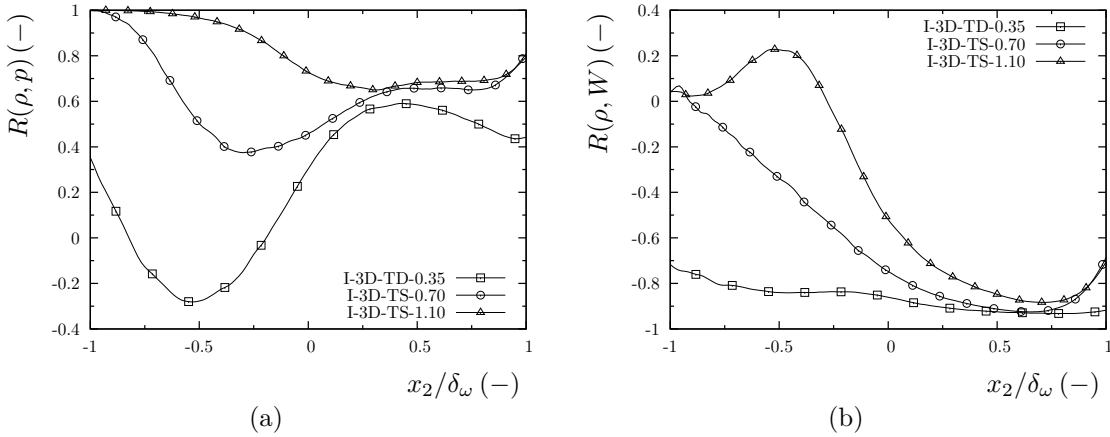


FIGURE 6.24 – Coefficient de corrélation entre la masse volumique et la pression (a) et entre la masse volumique et la masse molaire (b).

température. Cependant, les fluctuations acoustiques de masse volumique deviennent de plus en plus importantes avec la compressibilité.

La corrélation entre les fluctuations de masse volumique et pression

$$R(\rho, p) = \frac{\langle \rho' p' \rangle}{\rho_{\text{rms}} p_{\text{rms}}}, \quad (6.14)$$

est présentée dans la figure 6.24(a). Dans le cas quasi incompressible, cette quantité oscille autour de zéro. Ce résultat est cohérent avec la figure 6.23 qui montre que la partie acoustique de la masse volumique et la température est faible dans ce régime de compressibilité. Pour des nombres de Mach convectif plus élevés, cette corrélation augmente significativement du côté combustible, où la partie entropique des fluctuations est fortement réduite (voir figure 6.24(a)).

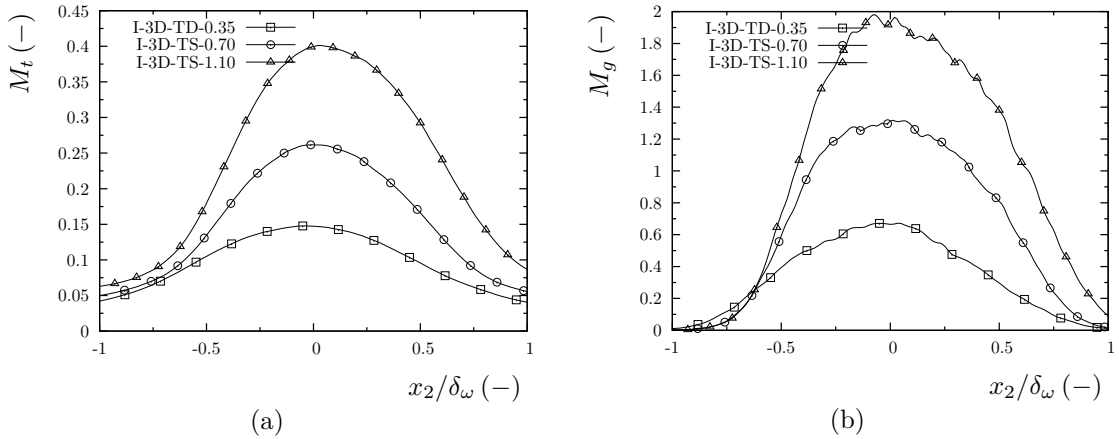


FIGURE 6.25 – Nombre de Mach turbulent (a) et Mach de gradient (b).

A faible nombre de Mach convectif, les fluctuations de masse volumique sont corrélées avec celles de la masse molaire

$$R(\rho, W) = \frac{\langle \rho' W' \rangle}{\rho_{\text{rms}} W_{\text{rms}}}, \quad (6.15)$$

comme l'illustre la figure 6.24(b). En effet, la partie entropique des fluctuations de masse volumique est plus remarquée dans ce régime et ces fluctuations entropiques proviennent des fluctuations de masse molaire et température. En conséquence, la corrélation entre fluctuations de masse volumique et masse molaire est aussi importante et diminue avec la compressibilité.

6.6.3 Nombres de Mach

Le nombre de Mach turbulent

$$M_t = \frac{\sqrt{2k}}{\langle c \rangle}, \quad (6.16)$$

s'utilise pour mesurer le degré de compressibilité de la turbulence. Freund *et al.* [53] ont interprété cette quantité comme le rapport entre le temps acoustique τ_a et le temps caractéristique de la turbulence τ_t . Le nombre de Mach de gradient est aussi utilisé dans la littérature

$$M_g = \frac{Sl}{\langle c \rangle}, \quad (6.17)$$

où $S = \partial \langle u_1 \rangle_f / \partial x_2$ est le cisaillement moyen et l est l'échelle caractéristique du cisaillement. Pour les couches de mélange inertes, cette longueur est fixée à $l = \delta_{\omega,0}$ en suivant [100]. Les nombres de Mach (6.16)–(6.17) sont reliées à la forte diminution des niveaux d'énergie cinétique turbulente et du taux de croissance [123, 145, 170].

La figure 6.25 montre l'augmentation du Mach turbulent et du Mach de gradient avec le nombre de Mach convectif, ce qui était consistant avec la réduction du taux de croissance avec la compressibilité. Blaisdel *et al.* [14] ont confirmé une corrélation entre

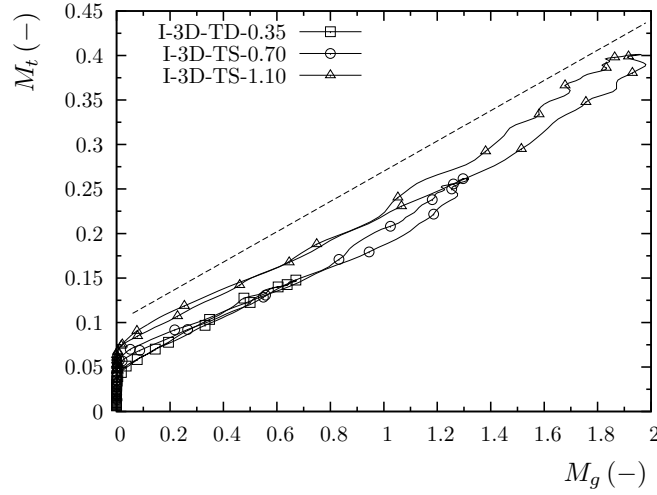


FIGURE 6.26 – Evolution du nombre de Mach turbulent en fonction du nombre de Mach de gradient.

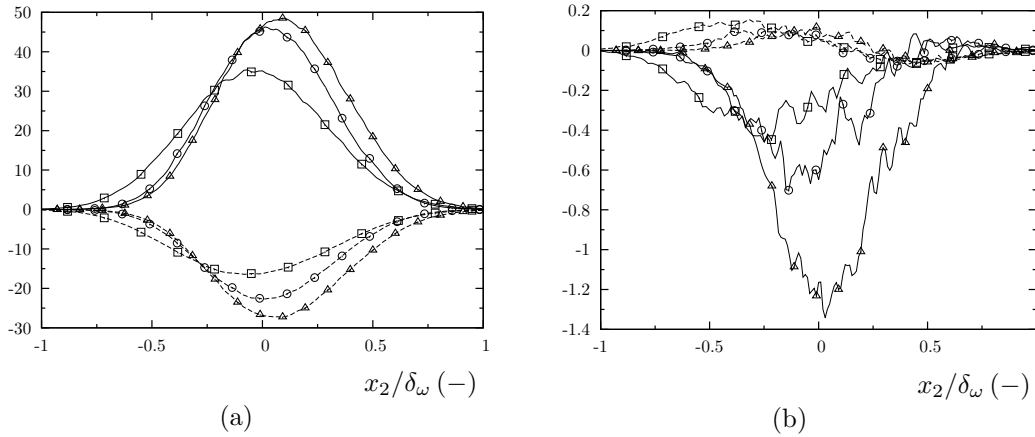
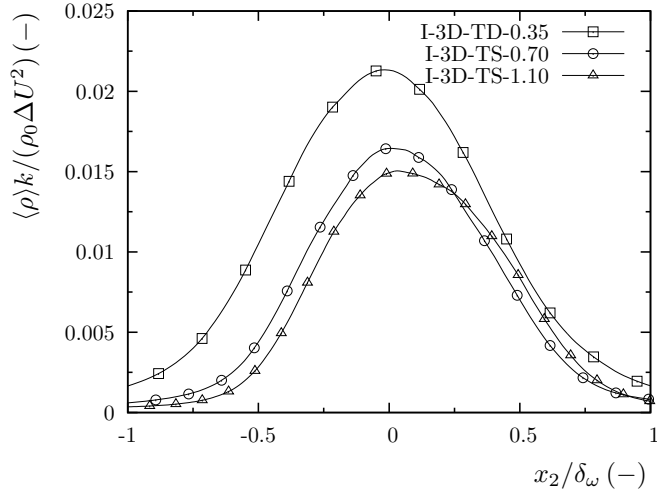


FIGURE 6.27 – Bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega^3$. Figure (a) : terme d'étirement (—) et de diffusion (- -). Figure (b) : terme de dilatation (—) et couple barocline (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.26.

ces deux quantités, ce qui est vérifié dans la figure 6.26. Comme le nombre de Mach de gradient peut être interprété comme le temps acoustique τ_a divisé par le temps moyen de distorsion de l'écoulement τ_d , le rapport du nombre de Mach de gradient et le nombre de Mach turbulent conduit à

$$\frac{M_g}{M_t} = \frac{\tau_a/\tau_d}{\tau_a/\tau_t} = \frac{\tau_t}{\tau_d}. \quad (6.18)$$

Cette corrélation mesure le degré d'influence des effets de distorsion dans l'écoulement. Les simulations présentées ici vérifient de manière approximative une corrélation linéaire avec $M_g \propto 6.25M_t$ très faiblement influencée par le régime de compressibilité.

FIGURE 6.28 – Energie cinétique turbulente normalisée par $\rho_0 \Delta U^2$.

6.6.4 Equation de transport de l’ensrophie

La figure 6.27 montre la contribution des termes intervenant dans l’équation de transport de l’ensrophie (5.24) afin d’identifier le processus responsable de la création de vorticité au sein de la couche de mélange. Contrairement aux simulations bidimensionnelles (voir section 5.8), les termes du bilan augmentent avec la compressibilité. Dans les couches de mélange tridimensionnelles, les contributions les plus importantes proviennent du terme d’étirement tourbillonnaire et de diffusion visqueuse. Cependant, la contribution par étirement domine celle de diffusion dans tous les régimes de compressibilité. Ces résultats sont en accord avec ceux de Miller *et al.* [112] et sont une conséquence de la création des échelles turbulentes produites par étirement. On notera que le bilan global d’ensrophie ne se ferme pas parfaitement comme il a été constaté dans d’autres études portant sur des couches de mélange binaires et jets [112, 120, 147]. Enfin, le terme de dilatation augmente avec M_c tandis que le terme couple barocline ne subit pas de variation significative.

6.6.5 Equation de transport de l’énergie cinétique turbulente

La figure 6.28 confirme la réduction de l’énergie cinétique turbulente (5.17) avec la compressibilité. Pour mieux comprendre cette réduction, l’analyse des termes principaux intervenant dans l’équation de transport de cette quantité est effectuée. La figure 6.29 montre que la contribution la plus importante à la création d’énergie cinétique turbulente provient du terme de production et diminue avec le nombre de Mach convectif. Ce terme est compensé, en grande partie, par le terme de dissipation, qui est légèrement moins affecté par la compressibilité. Le terme de transport turbulent contribue à la création d’énergie en périphérie de la couche de mélange tandis qu’au sein de la couche il devient négatif. Cette quantité se comporte comme un mécanisme qui enlève l’énergie des régions avec un forte cisaillement pour la déposer dans des régions avec des niveaux

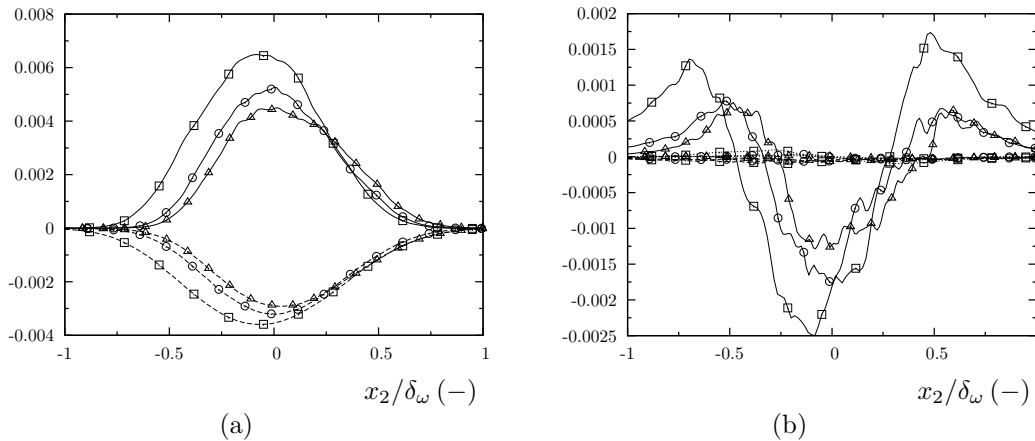


FIGURE 6.29 – Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport turbulent (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique (· · ·). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.28.

d'énergie plus faibles. La figure 6.29(b) montre que les contributions dues aux termes de pression-dilatation et de flux massique restent négligeables pour tous les nombres de Mach convectifs retenus.

La figure 6.30(a) montre le rapport entre le terme de pression-dilatation et production, cette quantité étant préalablement intégrée dans la direction transversale selon (6.11), en fonction du nombre de Mach convectif. La figure 6.30(b) confirme que le taux de dissipation est moins affecté par la compressibilité que le terme de production.

6.6.6 Equations de transport des composantes du tenseur de Reynolds

La figure 6.31 montre les profils moyens des contraintes de Reynolds pour les trois simulations inertes. Les différences trouvées en termes de forme et de niveaux maximum atteints illustrent leur caractère anisotrope. La composante normale longitudinale présente les niveaux maximum, suivie par la transversale puis celle dans le sens de l'envergure. La composante de cisaillement R_{12} présente les niveaux les plus faibles. La tendance générale des contraintes R_{22} , R_{33} et R_{12} est une diminution avec la compressibilité, ce qui est en accord avec plusieurs expériences [35, 44, 60] et simulations numériques directes [53, 101, 123]. Concernant la contrainte R_{11} , certains auteurs [53, 60] ont trouvé que la valeur maximale ne dépend pas du nombre de Mach convectif tandis que dans d'autres travaux [44, 101, 123] cette quantité est diminuée avec la compressibilité. Dans les résultats présentés ici, la quantité R_{11} présente ces deux tendances, en fonction du nombre de Mach convectif considéré : elle diminue entre $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$ puis elle reste constante entre $M_c = 0.70$ et $M_c = 1.10$.

Vreman *et al.* [170] ont constaté que le comportement similaire observé entre les contraintes normales et de cisaillement du tenseur de Reynolds avec la compressibilité rend

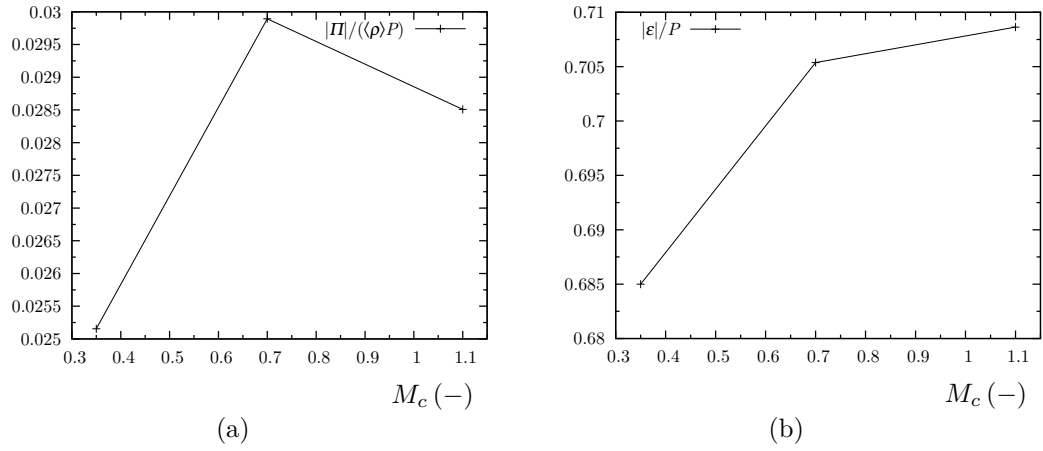


FIGURE 6.30 – Rapports des quantités intégrales correspondant au bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente.

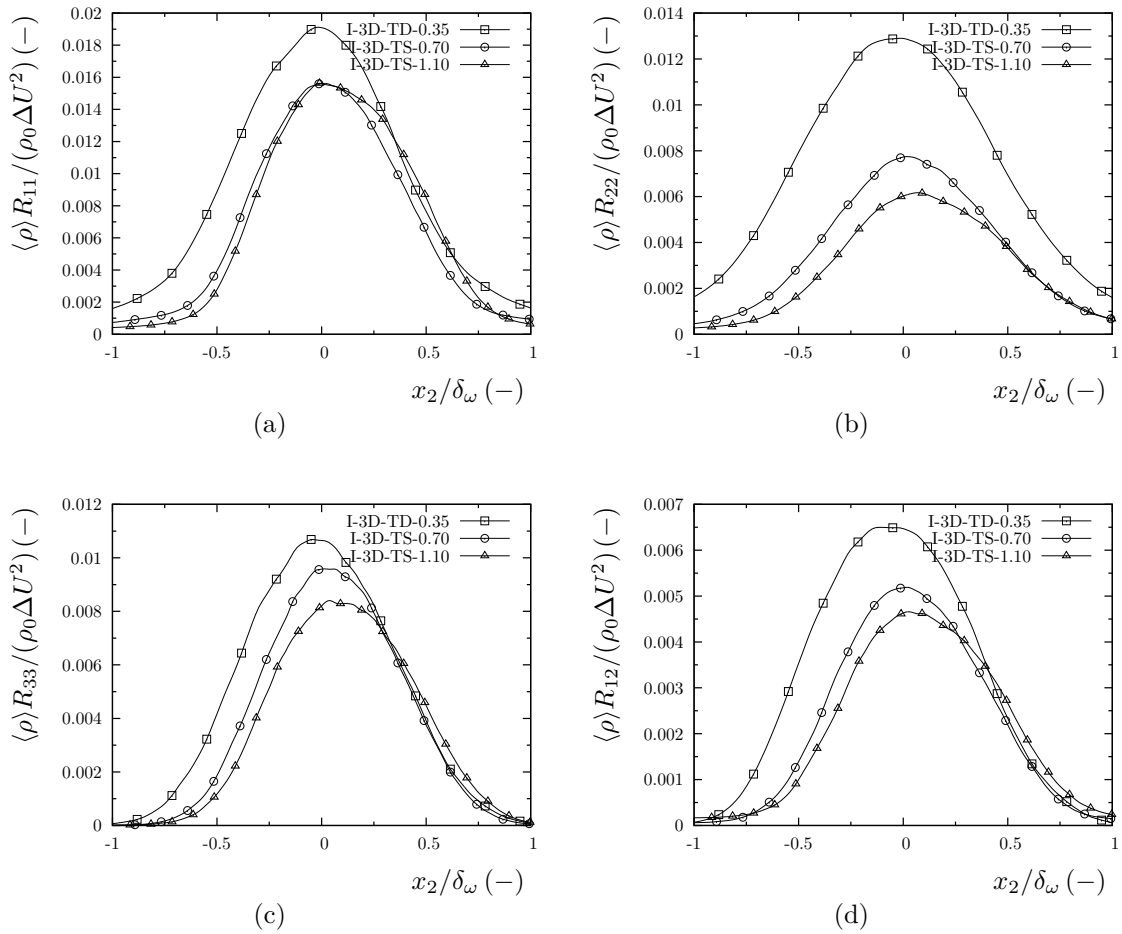


FIGURE 6.31 – Contraintes de Reynolds normalisées par $\rho_0 \Delta U^2$.

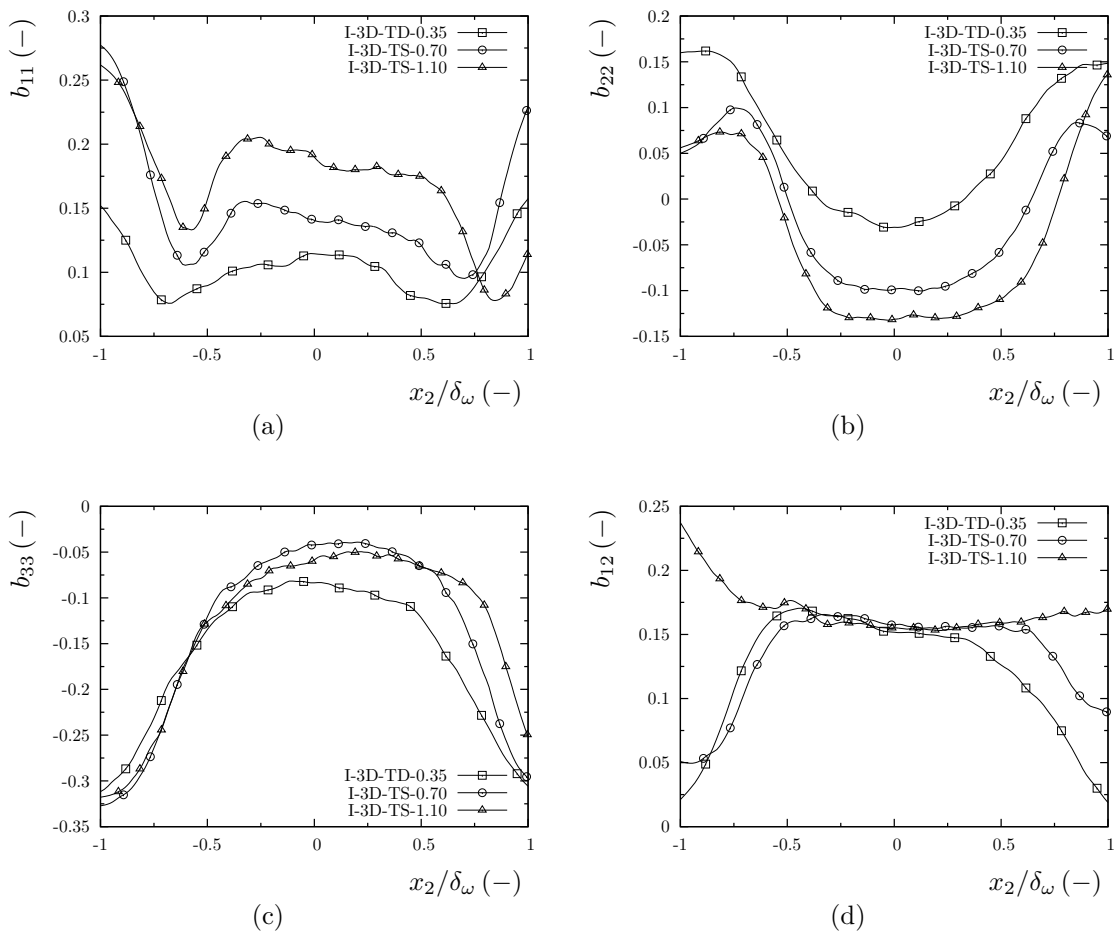


FIGURE 6.32 – Anisotropies.

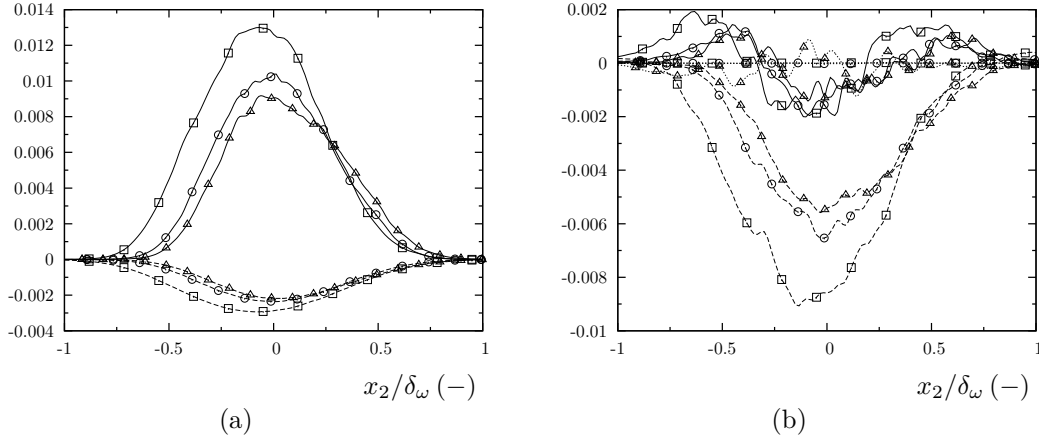


FIGURE 6.33 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{11}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.32.

le paramètre d'anisotropie

$$b_{12} = \frac{\langle u_1'' u_2'' \rangle_f}{2k}, \quad (6.19)$$

quasi indépendant du nombre de Mach convectif M_c . La figure 6.32 montre ce paramètre et ceux correspondant aux composantes normales du tenseur de contraintes de Reynolds

$$b_{ij} = \frac{\langle u_i'' u_j'' \rangle_f}{2k} - \frac{\delta_{ij}}{3}. \quad (6.20)$$

Au centre de la couche de mélange, b_{33} et b_{12} sont pratiquement indépendants du nombre de Mach convectif. Ces résultats sont aussi confirmés par [100, 123]. Les quantités b_{11} et b_{22} présentent en revanche des différences plus marquées avec la compressibilité.

Les figures 6.33–6.36 montrent les termes principaux de l'équation de transport des contraintes de Reynolds (5.18). Pour la contrainte normale longitudinale R_{11} , les termes les plus importants sont : celui de production, qui agit en tant que terme source, le terme de pression-dilatation et le terme de dissipation, ces deux derniers constituant des termes puits. Le terme de pression-dilatation est le terme source le plus important des contraintes R_{22} et R_{33} . Le rôle de cette quantité est ainsi de distribuer l'énergie de la composante longitudinale R_{11} vers les composantes transversales R_{22} et R_{33} (isotropisation). Ceci est confirmé par les figures 6.34(a)–6.35(a) qui montrent que la contribution du terme de production est, cette fois-ci, quasi nulle, *i.e.* il n'y a pas d'énergie provenant directement de l'écoulement moyen. Le comportement du terme de transport turbulent est similaire pour toutes les contraintes de Reynolds et son rôle a été déjà discuté dans l'analyse de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (section 6.6.5). Pour rappel, ce terme contribue à répartir l'énergie en périphérie de la couche de mélange en la transportant depuis des régions à forte cisaillement vers des régions à faibles niveaux d'énergie. Enfin, le terme de dissipation présente des niveaux assez similaires pour toutes les composantes

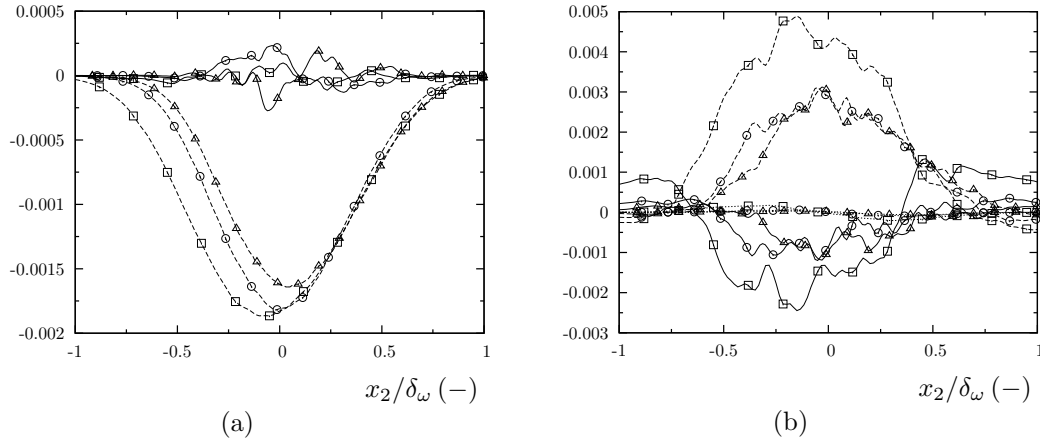


FIGURE 6.34 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{22}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33.

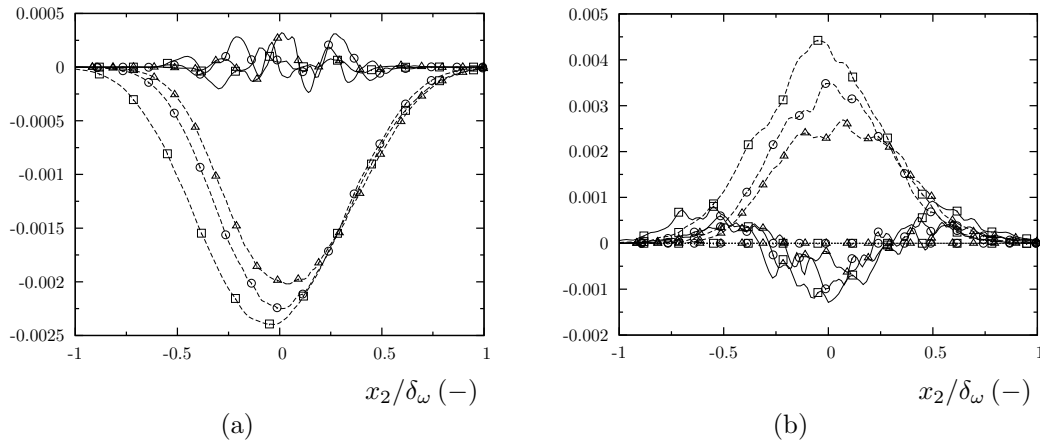


FIGURE 6.35 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{33}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33.

diagonales R_{ii} indépendamment du degré de compressibilité (dissipation isotrope), ce qui est en accord avec l'étude de Vreman *et al.* [170].

La réduction du terme de production de R_{11} (voir figure 6.33(a)) peut désormais être analysée à partir de la définition (5.19), particularisée à la composante normale longitudinale

$$P_{11} = -2R_{1k} \frac{\partial \langle u_1 \rangle_f}{\partial x_k} \approx -2R_{12} \frac{\partial \langle u_1 \rangle_f}{\partial x_2}. \quad (6.21)$$

L'équation (6.21) suppose que l'écoulement est homogène dans le sens de l'envergure avec une vitesse longitudinale moyenne constante, *e.g.* hypothèse de couche de mélange temporelle. Cette hypothèse n'est pas strictement valable pour les couches de mélange spatiales. Néanmoins, l'analyse de (6.21) permet de comparer les résultats des couches de mélange de ce travail à ceux des couches temporelles [100, 123]. Les profils de vitesses longitudinales moyennes ne sont pas trop affectés par la compressibilité, comme le montre

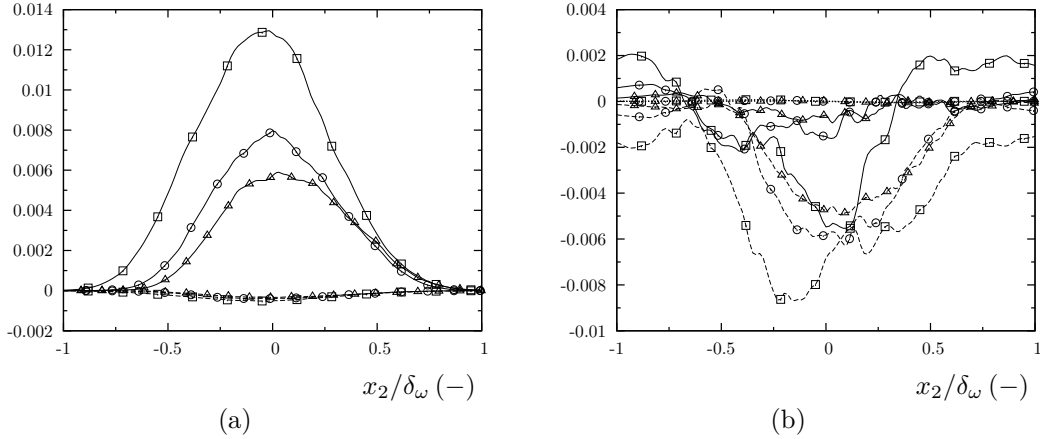


FIGURE 6.36 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{12}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.33.

la figure 6.19. Ainsi, la réduction de P_{11} provient en fait principalement d'une réduction de R_{12} . La diminution avec la compressibilité des autres termes de R_{11} , *i.e.* dissipation, pression-dilatation et production turbulente, est aussi constatée. Ce comportement est aussi observé pour les contraintes R_{22} et R_{33} . Comme indiqué, le terme source le plus important de R_{12} est celui de production et il est contrebalancé par le terme de pression-dilatation. Le terme de transport est présent à $M_c = 0.35$, mais son influence est très réduite avec la compressibilité comme dans les couches de mélange binaires de Mahle [100]. Le terme de dissipation ϵ_{12} reste proche de zéro, ce qui est consistant avec des nombres de Reynolds suffisamment grands compatibles avec une dissipation isotrope. Enfin, la réduction de R_{11} avec la compressibilité peut être interprétée par l'action de deux mécanismes : la compressibilité elle-même et l'action du terme R_{12} .

En suivant la démarche proposée dans [53, 123, 170], les termes des bilans présentés précédemment sont intégrés dans la direction transversale selon la relation (6.11). Cette intégration présente l'avantage d'être moins dépendante de l'échantillon d'étude. Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 6.37. En général, ces termes subissent une diminution plus ou moins importante avec la compressibilité. Certains rapports présentés dans la figure 6.37(d) semblent ne plus trop dépendre du nombre de Mach convectif au-delà d'une certaine valeur, comme remarqué précédemment par Vreman *et al.* [170].

D'après les travaux de Freund *et al.* [53], Pantano & Sarkar [123] et Mahle *et al.* [101], un des paramètres responsables de la réduction du taux de croissance dans le développement temporel des couches de mélange est la composante longitudinale du terme de pression-dilatation Π_{11} . Ces études ont démontrée que l'atténuation de ce paramètre avec la compressibilité provoque une diminution des niveaux des contraintes du tenseur de Reynolds et de l'énergie cinétique turbulente. Pour identifier les phénomènes liés à une diminution de ce terme

$$\Pi_{11} = 2 \left\langle p' \frac{\partial u_1''}{\partial x_1} \right\rangle, \quad (6.22)$$

l'étude des quantités intervenant dans (6.22) est effectuée. Les figures 6.38(a)–6.38(b)

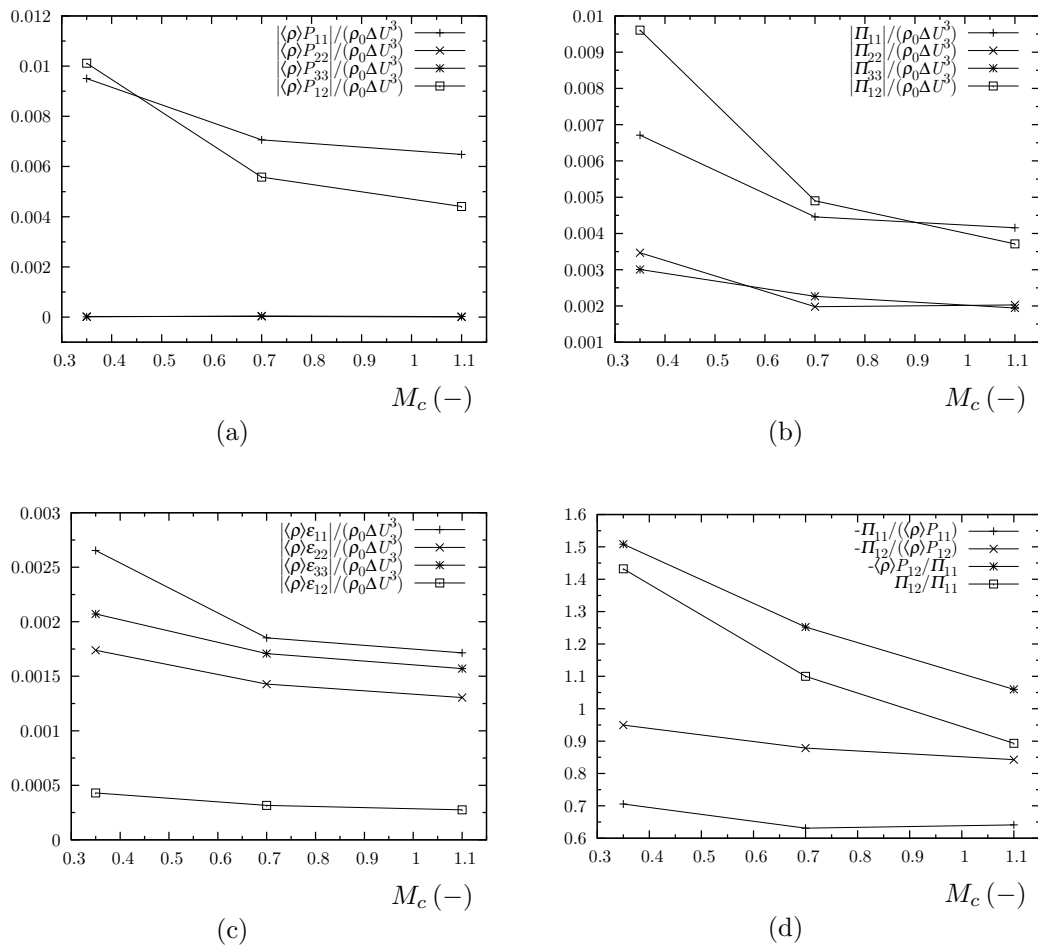


FIGURE 6.37 – Quantités intégrales correspondant à l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds.

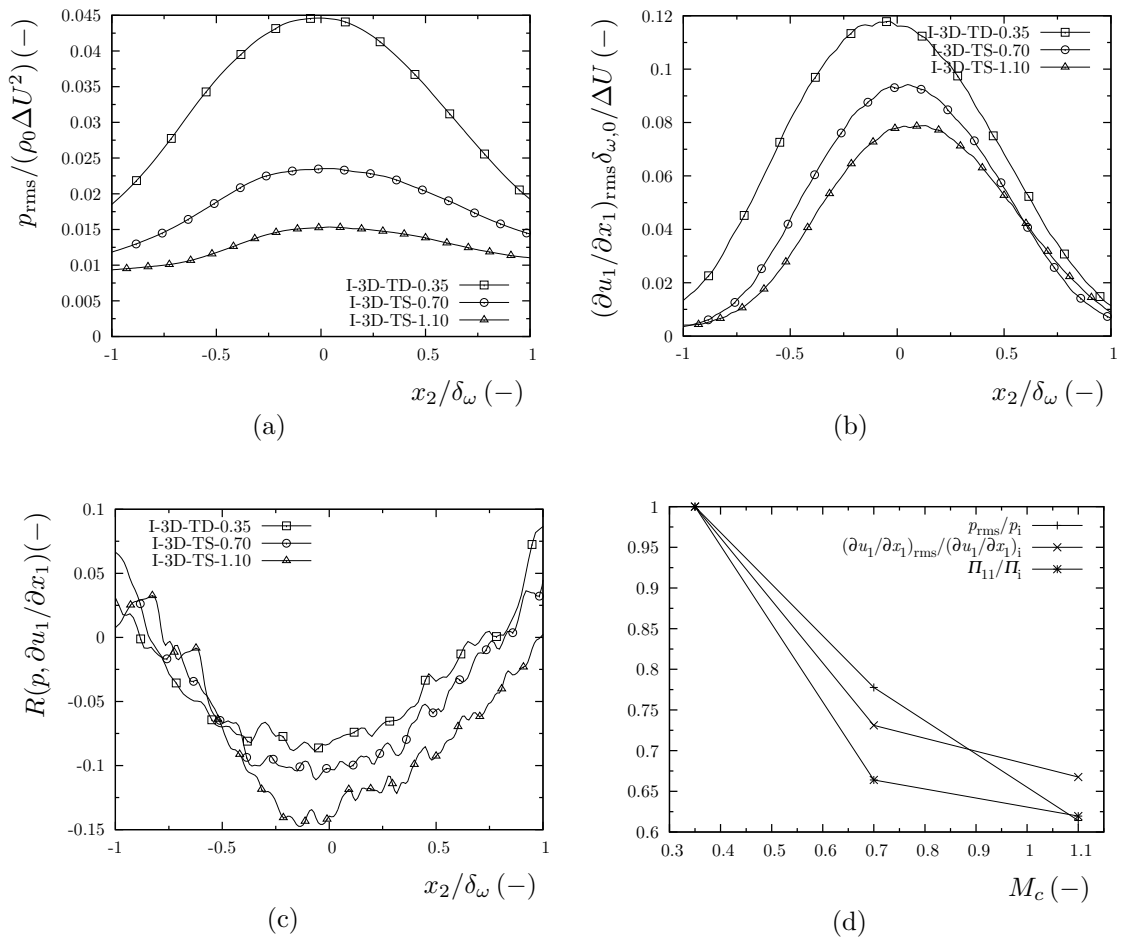


FIGURE 6.38 – Analyse du comportement des quantités qui composent le terme de pression-dilatation Π_{11} .

montrent la valeur rms normalisée des fluctuations de pression et du gradient de vitesse, respectivement. Contrairement à ce qui a été observé dans le développement temporel des couches de mélange, la réduction de ces deux quantités avec le nombre de Mach convectif est sensiblement équivalente. La figure 6.38(c) montre que le coefficient de corrélation entre les fluctuations de pression et du gradient de vitesse, défini comme

$$R(p, \partial u_1 / \partial x_1) = \frac{\langle p' \partial u_1'' / \partial x_1 \rangle}{p_{\text{rms}} (\partial u_1'' / \partial x_1)_{\text{rms}}}, \quad (6.23)$$

reste assez faible pour les nombres de Mach convectif considérés. La figure 6.38(d) montre la réduction des valeurs rms de p' , $\partial u_1'' / \partial x_1$ et Π_{11} , intégrées dans la direction transversale et normalisées par sa valeur incompressible à $M_c = 0.35$. Cette figure indique à nouveau que la réduction de Π_{11} n'est pas *exclusivement* attribuée à la réduction des fluctuations de pression, comme le suggèrent les résultats obtenus par DNS des couches de mélange temporelles. En effet, la réduction des fluctuations du gradient de vitesse et celles des fluctuations de pression sont d'égale importance vis-à-vis la réduction du terme de pression-dilatation.

6.7 Effet de la compressibilité sur le mélange scalaire

6.7.1 Variables moyennes et fluctuantes

La figure 6.39 montre les profils moyennés au sens de Favre des fractions massiques de toutes les espèces constituant le mélange. Ces profils sont aussi normalisés pour avoir des valeurs comprises entre 0 et 1. En général, la forme des courbes ressemble à celle de la masse molaire (figure 6.20(d)), avec de légères différences du côté oxydant selon le nombre de Mach convectif considéré. Les profils obtenus à $M_c = 0.70$ et $M_c = 1.10$ s'approchent de celle d'une tangente hyperbolique (utilisée comme condition d'entrée pour l'injection) comme dans les couches de mélange binaires de Mahle [100]. Il est important de remarquer que, suite à la normalisation choisie et indépendamment de l'espèce considérée ou bien de la loi de transport utilisée, les quatre courbes suivent des tendances assez similaires.

La variance des fractions massiques est diminuée avec la compressibilité, comme le montre la figure 6.40. Cette diminution est en bon accord avec les études précédentes de Clemens & Mungal [29], Freund *et al.* [53] et Mahle [100]. La principale différence observable entre les quatre profils réside dans les niveaux maximum atteints, qui varient en fonction de l'espèce considérée. Une remarque importante à prendre en compte est le changement de l'allure des profils en fonction du Mach convectif. Ainsi, deux maxima locaux se trouvent aux extrémités de la couche de mélange séparés par un minimum local à $M_c = 0.35$. Cependant, au fur et à mesure que les effets compressibles augmentent, il existe un seul maximum situé au centre de la couche cisailée. Ce maximum se réduit avec M_c de la même manière qu'il se déplace vers des valeurs positives de la coordonnée x_2 , en suivant le centre de la couche de mélange (voir figure 6.19). Ce changement des profils avec la compressibilité a été constaté dans plusieurs études [101, 111, 124] et vient du

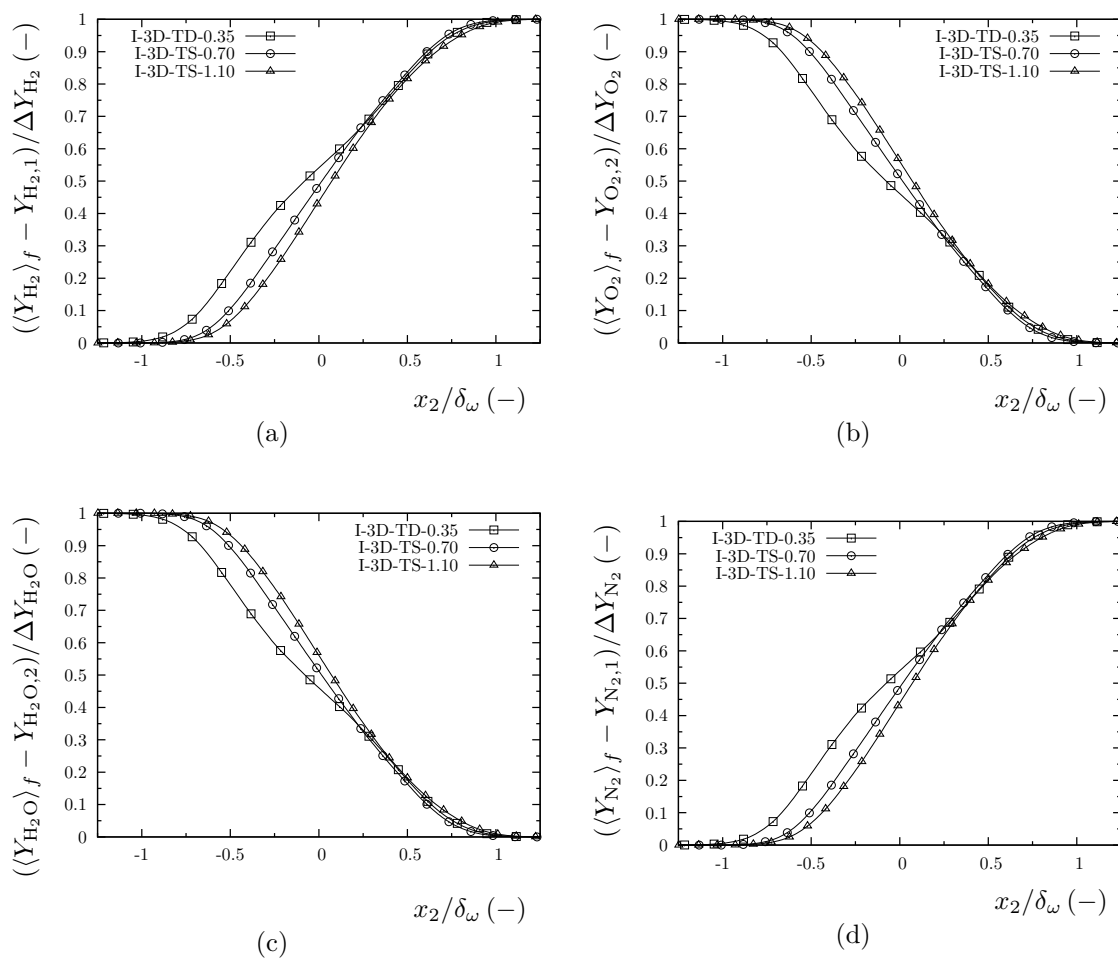


FIGURE 6.39 – Profils moyens des espèces.

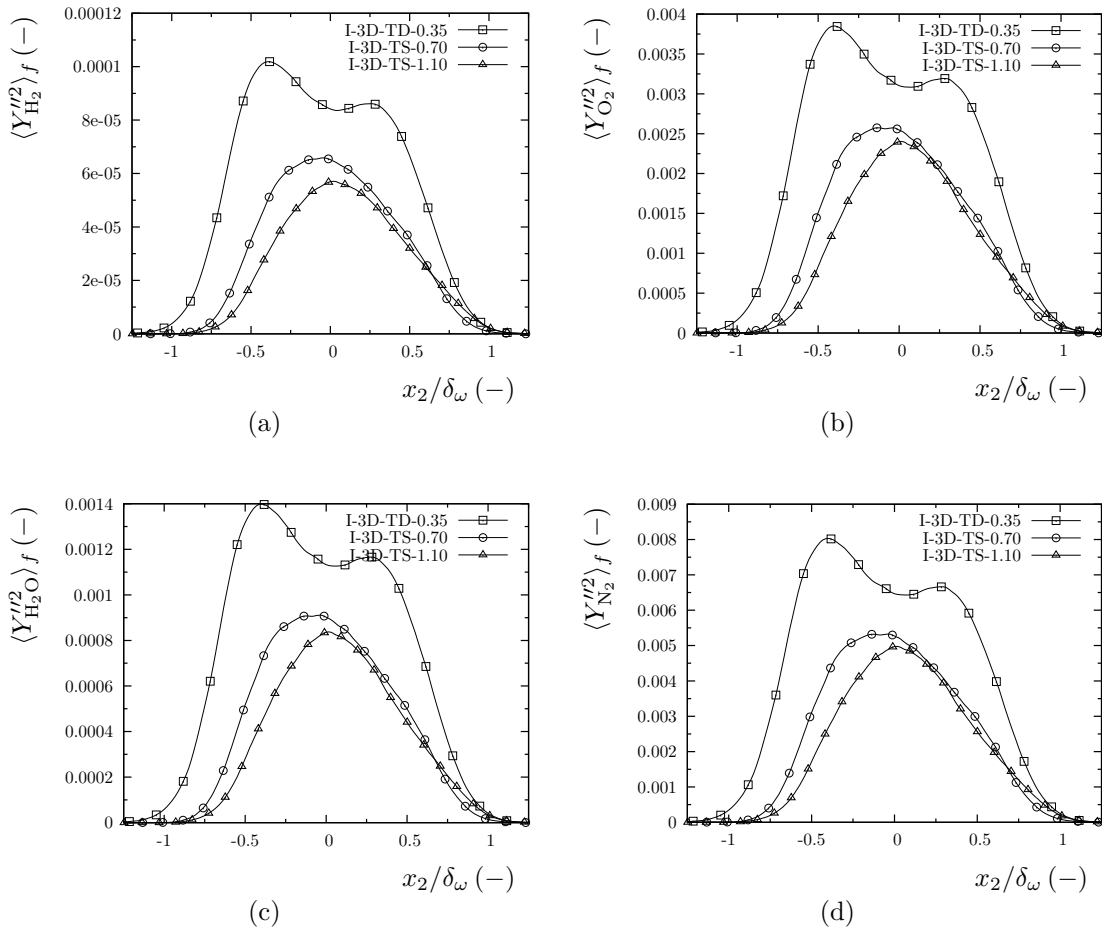


FIGURE 6.40 – Profils de variance des espèces.

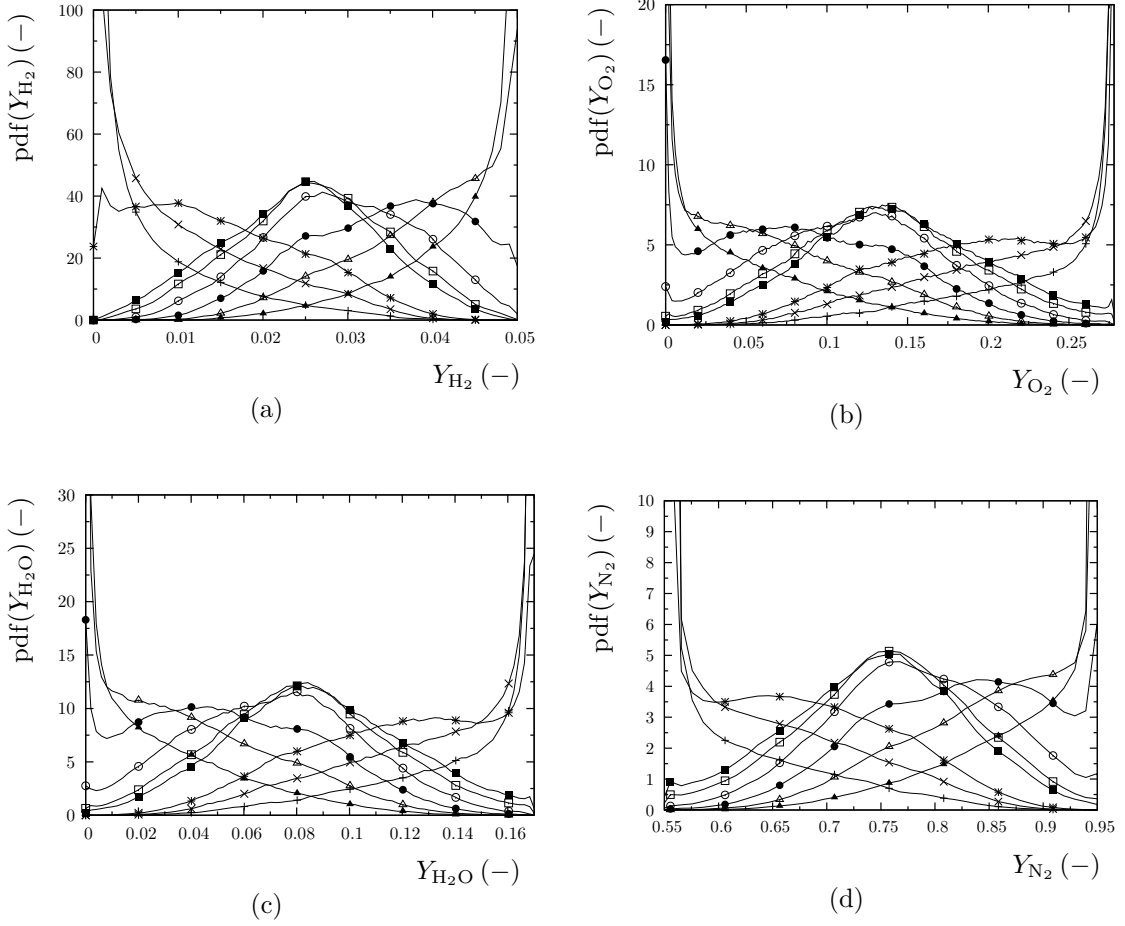


FIGURE 6.41 – Cas I-3D-TD-0.35. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.1$ (+), 0.2 (\times), 0.3 (*), 0.4 (\square), 0.5 (\blacksquare), 0.6 (\circ), 0.7 (\bullet), 0.8 (\triangle), 0.9 (\blacktriangle).

fait qu'à bas nombre de Mach convectif le fluide s'incorpore dans la couche de mélange aux extrémités de celle-ci et, en conséquence, une intermittence plus forte apparaît dans ces régions. D'après la référence [100], la décroissance généralisée des fluctuations avec la compressibilité est une conséquence de la quantité du fluide libre pénétrant dans la couche cisailée, diminuant en fonction du M_c , ce qui conduit à une réduction des fluctuations autour de la valeur moyenne.

6.7.2 Pdfs des variables scalaires

Les figures 6.41–6.43 montrent les fonctions de densité de probabilité (pdfs) des espèces composant le mélange, pour les trois nombres de Mach convectif retenus. Ces pdfs sont calculées à différents plans x_2 - x_3 correspondant à différentes valeurs de la variable de mélange $\langle z \rangle_f$. La valeur de z peut être déterminée à l'aide d'une équation de transport additionnelle rajoutée aux équations de Navier-Stokes présentées dans le chapitre 2, mais ceci n'est pas le cas pour les simulations inertes traitées ici. Ainsi, la variable de mélange z proposée par Pierce & Moin [128, 129] est utilisée. Cette variable est issue de la conservation des fractions massiques atomiques ou élémentaires a_γ . Ces fractions sont

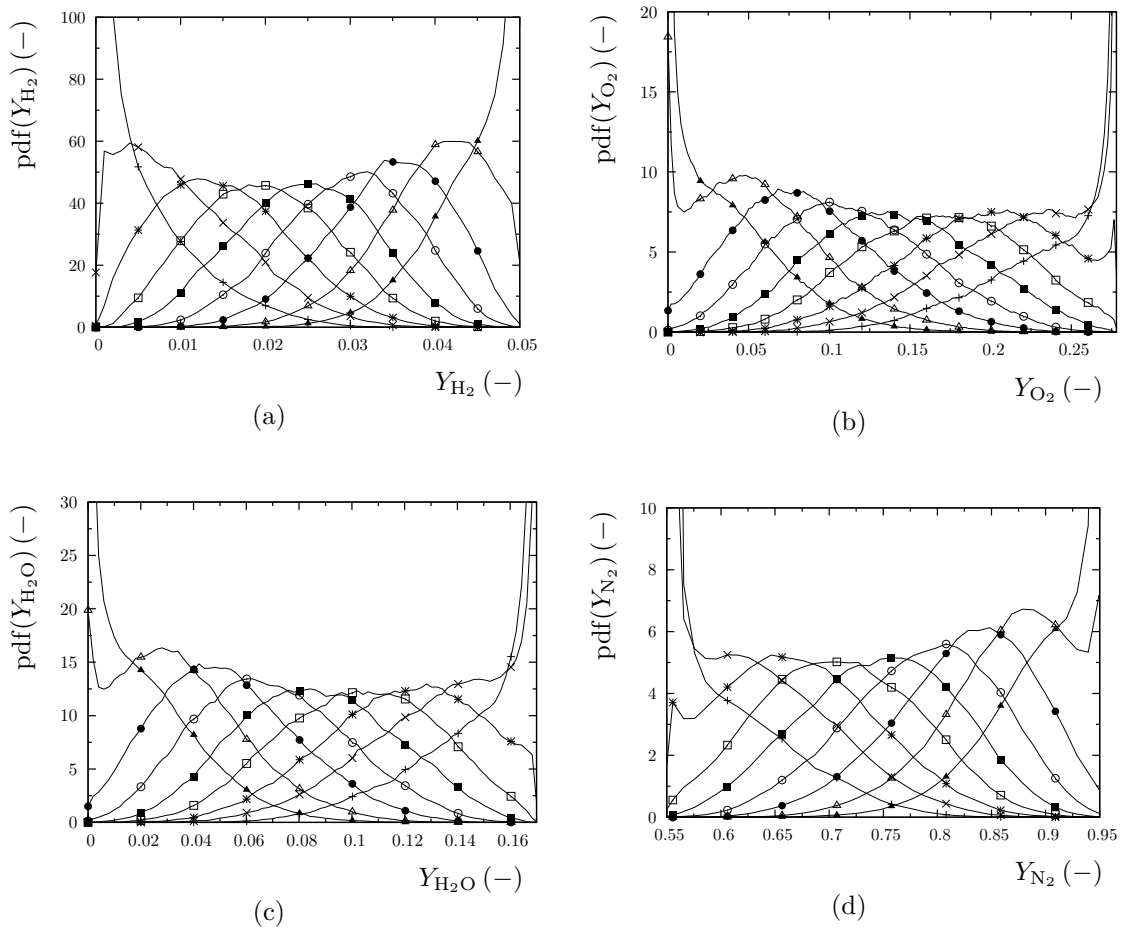


FIGURE 6.42 – Cas I-3D-TS-0.70. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.41.

définies par

$$a_\gamma = \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha N_{\alpha\gamma} A_\gamma}{W_\alpha}, \quad (6.24)$$

avec $N_{\alpha\gamma}$ le nombre d'atomes γ contenus dans la $\alpha^{\text{ème}}$ molécule et A_γ le poids atomique correspondant. La variable de mélange s'obtient après la somme et normalisation des fractions massiques élémentaires

$$z = \frac{\sum_\gamma |a_\gamma - a_{\gamma,o}|}{\sum_\gamma |a_{\gamma,c} - a_{\gamma,o}|}, \quad (6.25)$$

où $a_{\gamma,c}$ et $a_{\gamma,o}$ sont les fractions massiques atomiques dans le courant de combustible et d'oxydant, respectivement. La définition (6.25) est basée sur l'hypothèse qu'il existe une fraction massique qui est un scalaire passif conservé, éliminant les effets d'un coefficient de diffusion différent pour chaque espèce, *e.g.* $D_{m\alpha}$ pour le transport simplifié ou $\tilde{D}_{\alpha\beta}$ pour le transport détaillé [128]. Cependant, d'autres définitions peuvent être utilisées pour définir cette variable (ou fraction) de mélange [13, 180]. L'approche utilisée par Pitsch & Peters [131], consistant à résoudre une équation de transport pour la fraction de mélange avec un coefficient de diffusion arbitraire et des conditions limites appropriées, sera présentée dans le chapitre suivant portant sur des couches de mélange réactives.

Les pdfs des fractions massiques sont reconstruites en profitant de l'existence de la direction d'homogénéité x_3 et en définissant un intervalle de variation compris entre 0 et 1. Le nombre des points assignés à cet intervalle dépend de la fraction massique considérée, mais il oscille autour de 200. A $M_c = 0.35$, les pdfs montrent la présence de fluide non mélangé en $\langle z \rangle_f = 0.1, 0.2, 0.3$ et $0.7, 0.8, 0.9$. Pour $M_c = 0.70$ et $M_c = 1.10$, cette région se réduit à $\langle z \rangle_f = 0.1, 0.2$ et $0.8, 0.9$ pour la majorité des espèces. L'hydrogène fait exception dans tous les cas, devenant l'espèce la plus mélangée avec la compressibilité. Les résultats présentés dans les figures 6.42–6.43 confirment que la valeur la plus probable de la fraction massique d'une espèce varie en fonction du plan $\langle z \rangle_f$, *i.e.* à travers la couche de mélange. Les pdfs appelées marchantes se déplacent en suivant la valeur moyenne et présentent leur valeur maximale en ce point [115]. L'apparition des pdfs marchantes est liée à la notion du mélange dominé par les petites échelles, appelé “nibbling”, et plusieurs auteurs ont constaté ce comportement sur des couches de mélange inertes [29, 54, 100, 136]. Rogers & Moser [138] ont aussi montré l'existence des pdfs non marchantes, pour lesquelles la valeur la plus probable ne dépend pas de la position transversale. Ce dernier type de pdfs non marchantes a été associé à l'entraînement des grandes quantités de fluide non perturbé par les grandes échelles, *i.e.* engouffrement ou “engulfment”. Les pdfs des cas inertes présentées dans cette section suggèrent les deux comportements. A $M_c = 0.35$, les pdfs présentent une allure très similaire sur les plans $\langle z \rangle_f = 0.4, \langle z \rangle_f = 0.5$ et $\langle z \rangle_f = 0.6$. Dans ce régime quasi incompressible, la valeur maximale des pdfs se trouve au même endroit indépendamment de la valeur de $\langle z \rangle_f$, ce qui est attribué aux pdfs non marchantes. Cependant, pour les régimes plus compressibles le changement dans la distribution des pdfs sur les différents plans est évident. Ces pdfs montrent des valeurs maximales qui se

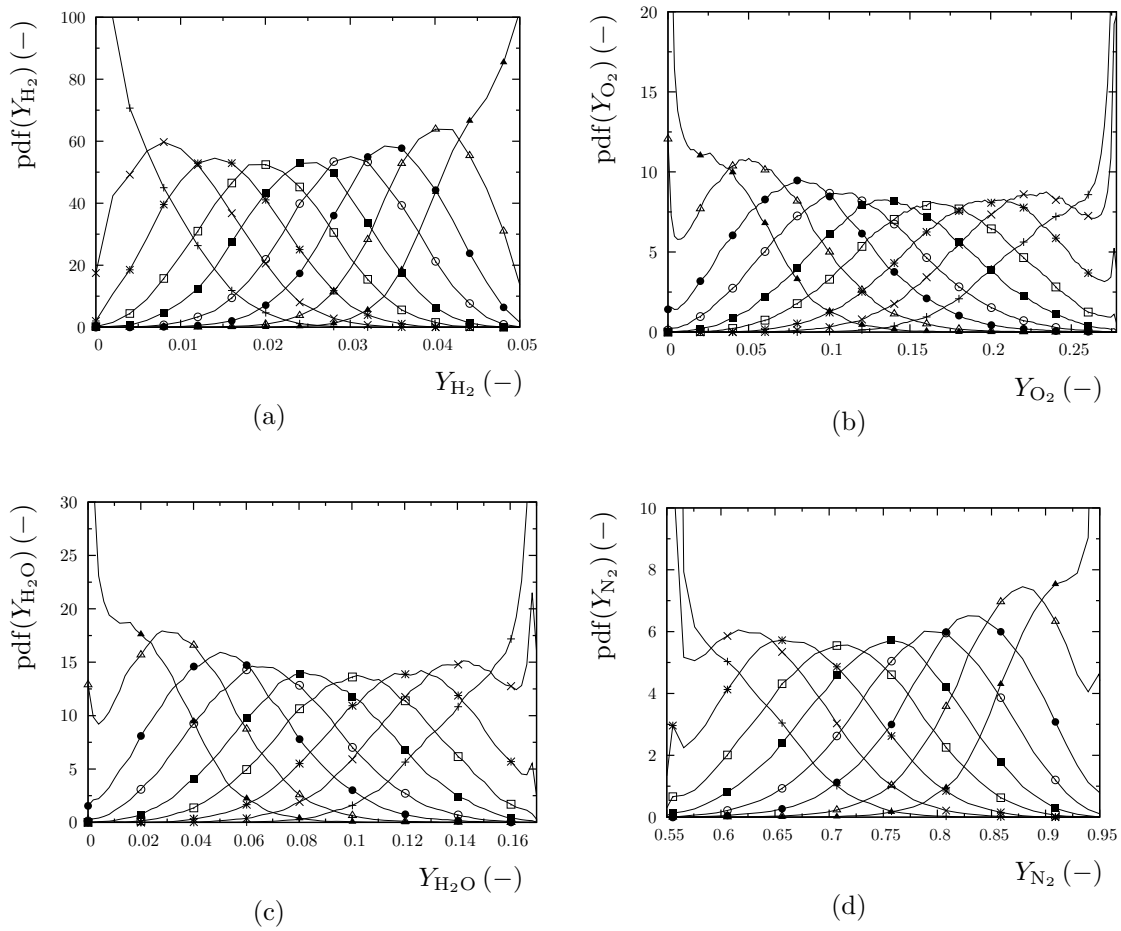


FIGURE 6.43 – Cas I-3D-TS-1.10. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.41.

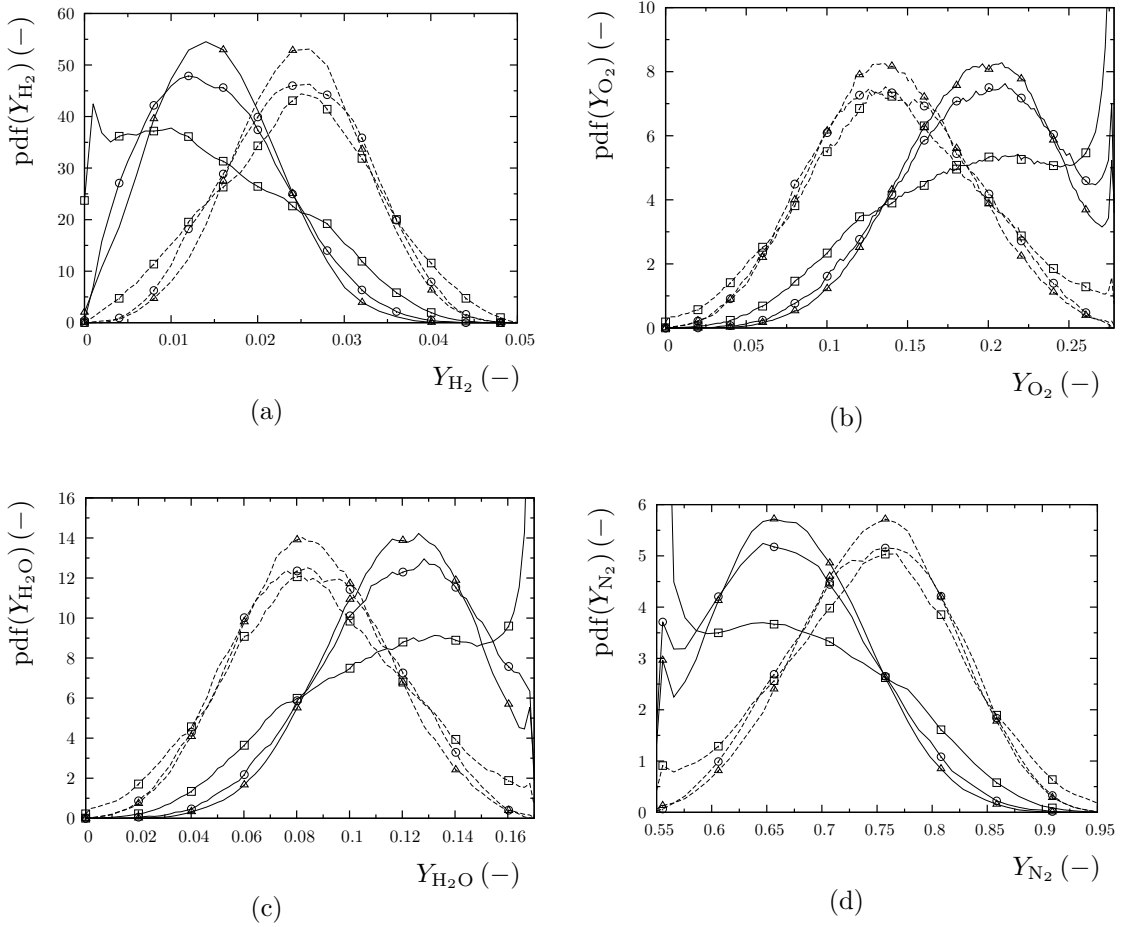


FIGURE 6.44 – Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.3$ (—), 0.5 (- -), et différents $M_c = 0.35$ (\square), 0.70 (\circ), 1.10 (\triangle).

déplacent en suivant plus ou moins la valeur de $\langle z \rangle_f$, ce qui est attribué à un comportement marchant similaire à celui déjà observé dans [100]. Il est à noter qu'une vérification plus rigoureuse du caractère marchant des pdfs ne peut pas être conduite dans ces simulations car la valeur maximale d'une variable quelconque ne coïncide pas nécessairement avec la valeur de $\langle z \rangle_f$ du plan correspondant. Le fait d'avoir choisi $\langle z \rangle_f$ pour la définition des plans x_2 - x_3 , au lieu de $\langle Y_\alpha \rangle_f$ pour la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce correspondante, permet seulement de comparer les pdfs scalaires des différentes espèces sur le même plan d'étude.

La figure 6.44 compare les pdfs des fractions massiques en fonction du degré de compressibilité. Il est évident qu'au fur et à mesure que le nombre de Mach convectif augmente les pdfs deviennent plus étroites en conséquence de la diminution des fluctuations avec la compressibilité [29]. Les pdfs larges et non marchantes sont produites par des couches de mélange présentant une structure échelonnée dans la direction longitudinale et uniforme dans la direction transversale, tandis que les couches de mélange présentant une structure uniforme dans la direction longitudinale et échelonnée dans la direction transversale sont caractérisées par des pdfs étroites et marchantes [29]. Les pdfs illustrées dans la figure 6.44 pour $M_c = 0.70$ et $M_c = 1.10$ présentent *a priori* un caractère marchant mais elles sont

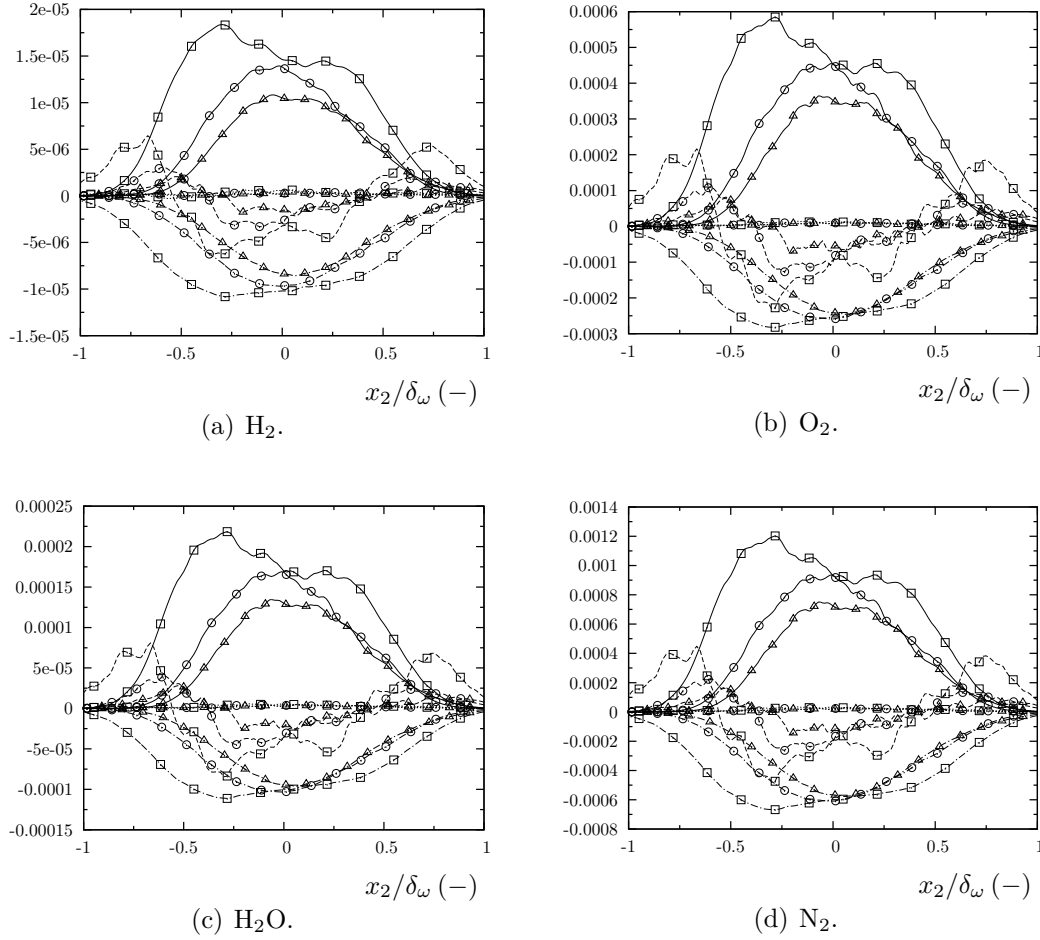


FIGURE 6.45 – Bilan de l'équation de transport de la variance d'un scalaire, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production (—), de transport (- -), de diffusion ($\cdot \cdot \cdot$) et de dissipation (---). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.

relativement larges [29, 100], ce qui suggère la possibilité que les deux types des structures turbulentes soient en fait présentes.

6.7.3 Equation de transport de la variance d'un scalaire

L'équation de transport de la variance d'un scalaire est écrite sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \left\langle \frac{1}{2} \rho Y_\alpha''^2 \right\rangle = & - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \rho u_k'' Y_\alpha'' \rangle - \langle \rho u_k'' Y_\alpha'' \rangle \frac{\partial \langle Y_\alpha \rangle_f}{\partial x_k} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} Y_\alpha'' \rangle + \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \frac{\partial Y_\alpha''}{\partial x_k} \rangle, \end{aligned} \quad (6.26)$$

où le premier terme à droite de l'égalité est le transport turbulent, le deuxième est le terme de production turbulente, le troisième terme représente la diffusion moléculaire et le dernier terme est la dissipation scalaire.

La figure 6.45 montre la contribution des termes intervenant dans l'équation (6.26). Le terme de production se comporte comme le terme source le plus important compensé

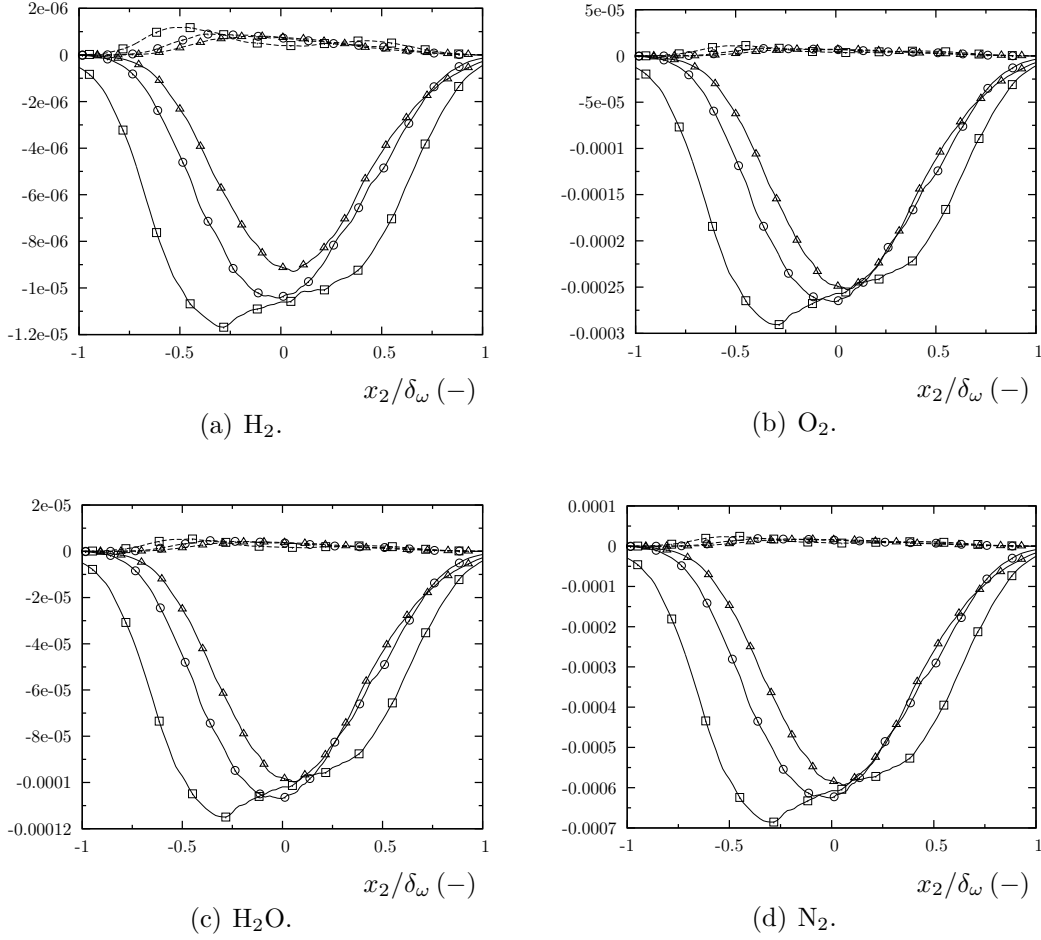


FIGURE 6.46 – Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_{Y_α} , normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Contribution instantanée (—) et moyenne (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.

par le terme de dissipation. Le terme de transport change de signe au sein de la couche cisailée où il devient négatif. L'influence de ce terme est particulièrement plus importante à faible nombre de Mach convectif. A nouveau, l'allure des courbes est assez similaire pour toutes les espèces considérées et la différence la plus remarquable se trouve dans les niveaux maximum atteints. A la différence des autres bilans effectués dans les sections précédentes, le terme de dissipation est ici notablement affecté par la compressibilité.

Le terme de dissipation ϵ_{Y_α} peut être décomposé en deux parties

$$\epsilon_{Y_\alpha} = \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \frac{\partial Y_\alpha''}{\partial x_k} \rangle = \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_k} \rangle - \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \rangle \frac{\partial \langle Y_\alpha \rangle}{\partial x_k}, \quad (6.27)$$

ce qui permet d'étudier séparément la contribution provenant de la partie instantanée (premier terme) et de la partie moyenne (second terme). Ces contributions sont montrées dans la figure 6.46. Indépendamment de l'espèce considérée, la contribution instantanée est la plus importante et constitue presque la totalité du terme de dissipation scalaire : $\langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \partial Y_\alpha'' / \partial x_k \rangle \approx \langle \rho Y_\alpha V_{\alpha k} \partial Y_\alpha / \partial x_k \rangle$. On notera néanmoins le cas particulier de l'hy-

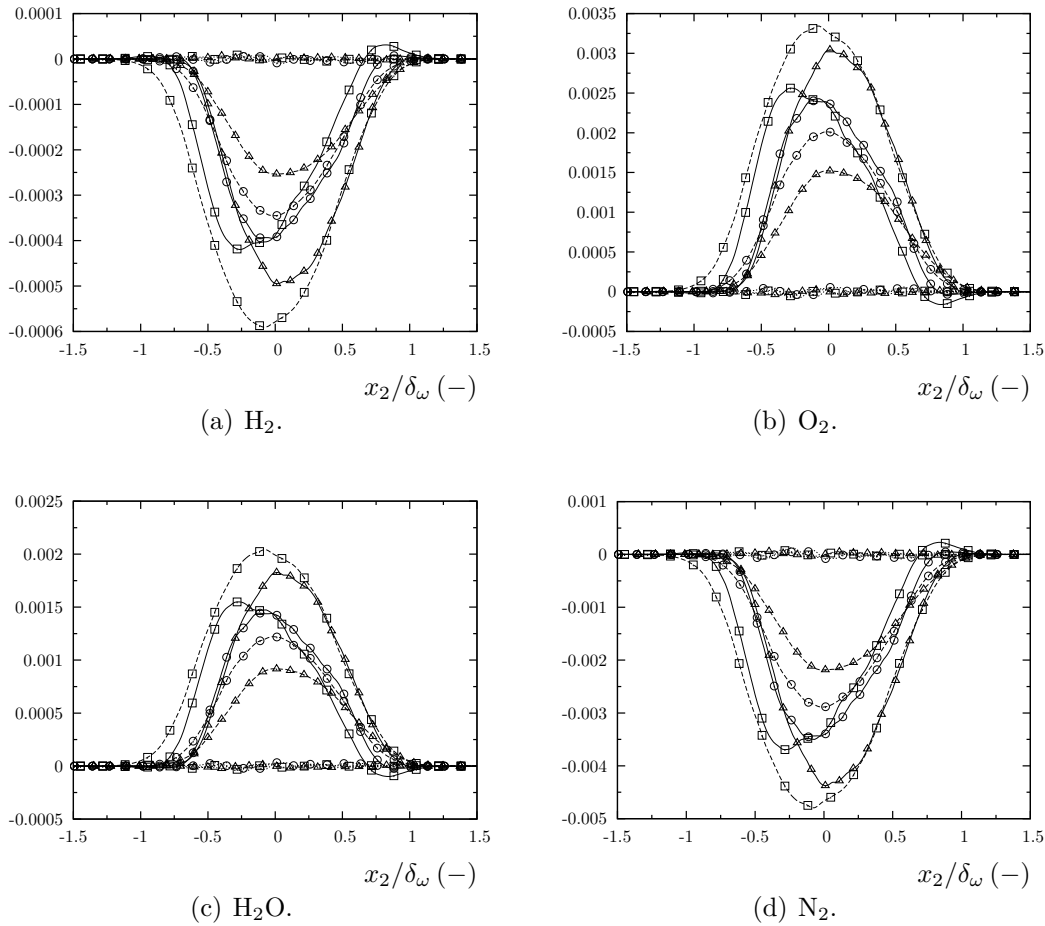


FIGURE 6.47 – Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 6.44.

drogène (figure 6.46(a)), qui présente une contribution moyenne légèrement supérieure en termes relatifs comparée aux autres espèces, bien que celle-ci reste négligeable dans la contribution globale à la dissipation scalaire.

6.7.4 Flux scalaires

Les figures 6.47–6.48 montrent, respectivement, les flux scalaires $\langle \rho u_k'' Y_\alpha'' \rangle$ tracés en fonction de la coordonnée transversale et en fonction de la variable de mélange (6.25), pour différentes valeurs du nombre de Mach convectif. Il peut être déduit que la composante transversale du flux scalaire $\langle \rho u_2'' Y_\alpha'' \rangle$ diminue fortement avec la compressibilité, tandis que la composante transversale est fortement réduite. Cette réduction a déjà été constatée dans d'autres études [54, 100] portant sur le développement temporel des couches de mélange. Cependant, il existe une différence fondamentale entre ces travaux et les simulations présentées ici concernant le comportement de la composante longitudinale du flux scalaire $\langle \rho u_1'' Y_\alpha'' \rangle$. En effet, cette quantité n'est pas très affectée par la compressibilité entre $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. En revanche, elle subit une augmentation

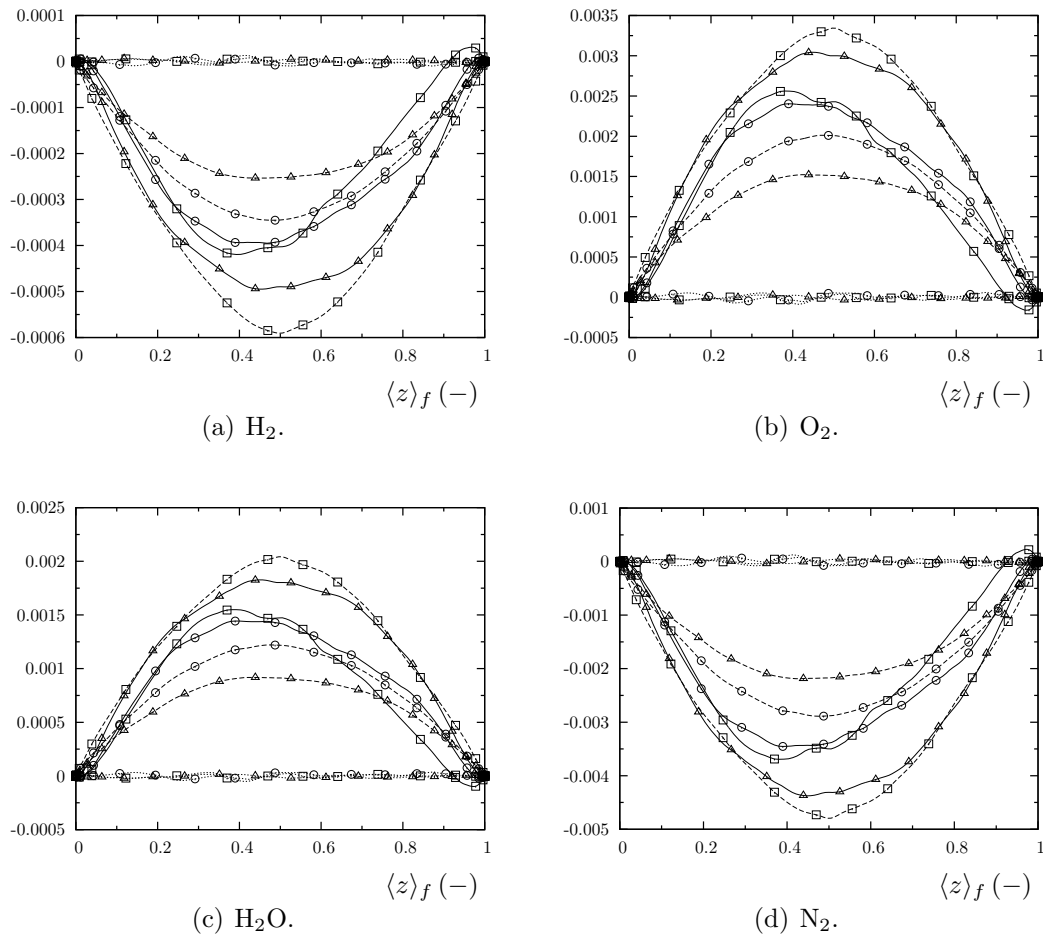


FIGURE 6.48 – Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 6.47.

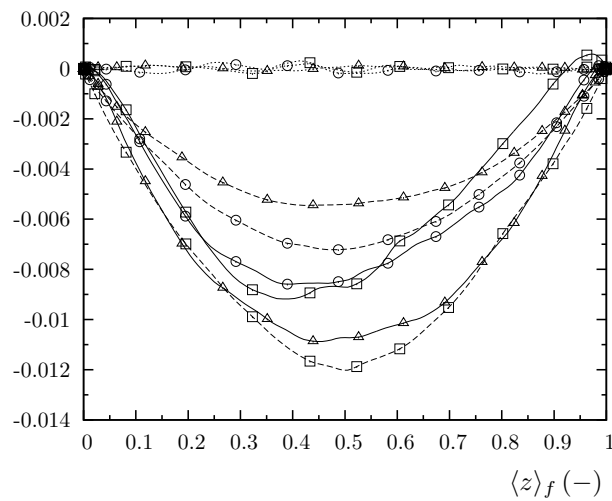


FIGURE 6.49 – Profil de flux scalaire de la variable de mélange z , normalisé par $\rho_0 \Delta U$ et tracé en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 6.47.

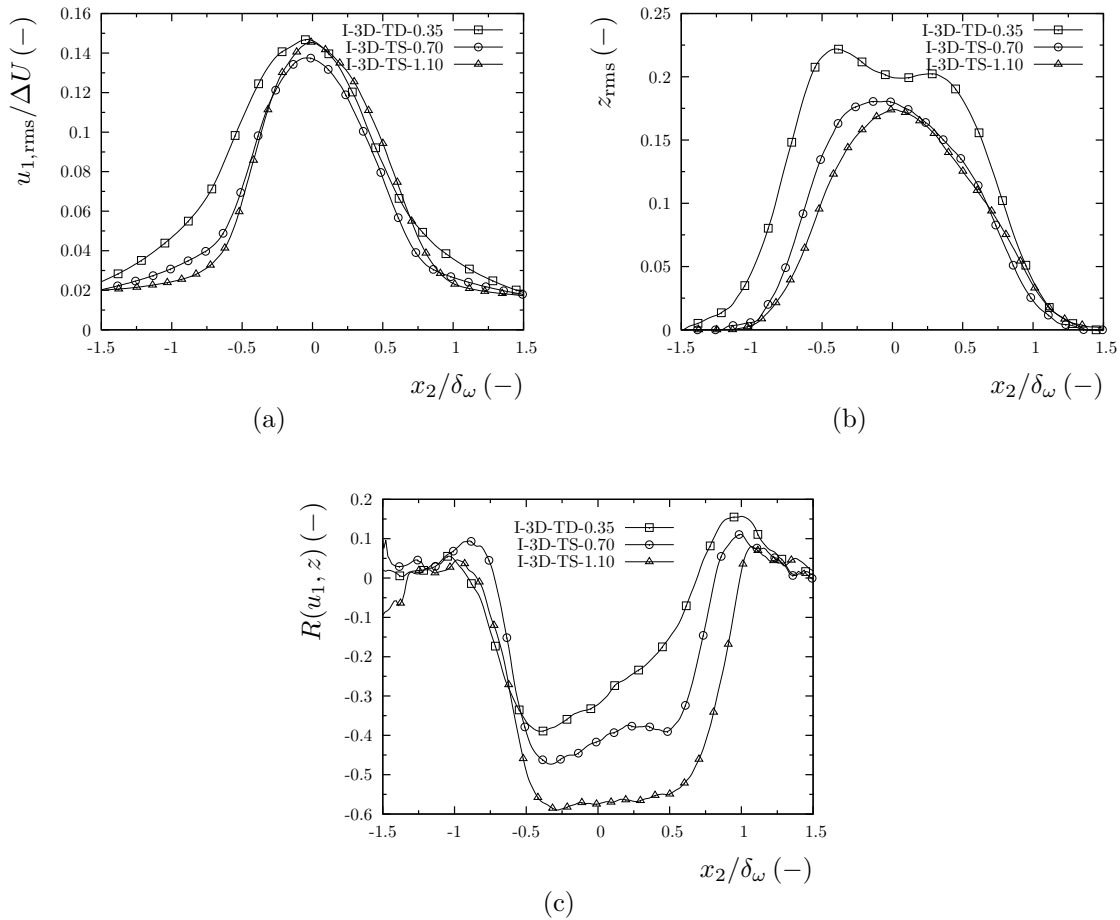


FIGURE 6.50 – Corrélations intervenant dans le flux scalaire de la variable de mélange.

non négligeable à $M_c = 1.10$. L'autre composante du flux $\langle \rho u_3'' Y_\alpha'' \rangle$ reste quelques ordres de grandeur en dessous des autres composantes. La figure 6.48 montre les mêmes flux scalaires, cette fois-ci tracés en fonction de la variable de mélange (6.25). La figure 6.49 montre les trois composantes des flux scalaires de la variable de mélange. En général, ces courbes présentent des valeurs négatives dans tout l'espace de définition de la variable de mélange, sauf pour des valeurs très proches à l'unité, *i.e.* vers le courant de combustible. La compressibilité joue le même rôle que pour les espèces chimiques considérées précédemment.

De façon à expliquer le comportement observé sur la composante longitudinale des flux scalaires en fonction du degré de compressibilité, une étude portant sur l'analyse des valeurs rms de la composante longitudinale de vitesse, de la variable de mélange et la corrélation entre ces deux quantités est effectuée. Comme attendu, les niveaux rms de la composante longitudinale de vitesse et la variable de mélange diminuent avec la compressibilité comme le montrent les figures 6.50(a)–6.50(b). Cette diminution est plus évidente dans les deux premiers régimes, *i.e.* $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. A $M_c = 1.10$, cette

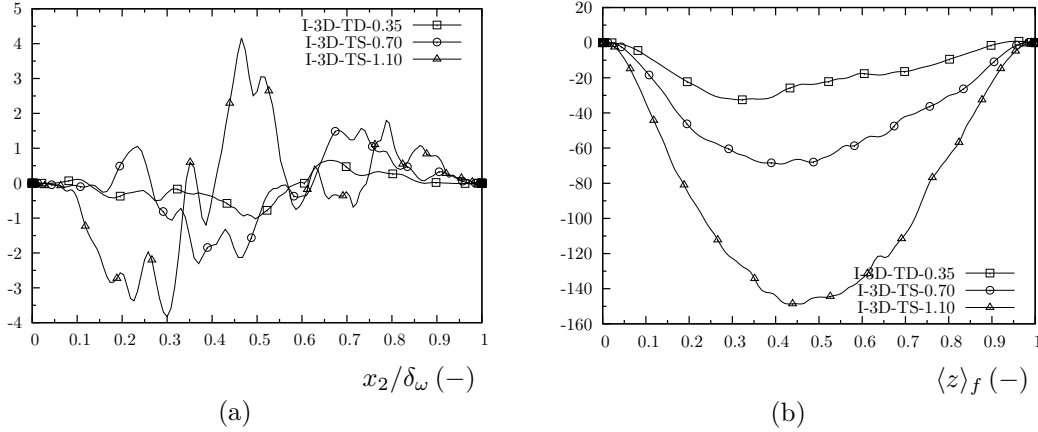


FIGURE 6.51 – Vérification de la loi gradient. Composante longitudinale de flux (a) : $\langle u_1'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_1) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$. Composante transversale de flux (b) : $\langle u_2'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_2) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$.

diminution n'est pas aussi importante. Cependant, la corrélation entre ces deux quantités

$$R(u_1, z) = \frac{\langle u_1' z' \rangle}{u_{1,\text{rms}} z_{\text{rms}}}, \quad (6.28)$$

augmente avec la compressibilité, comme le montre la figure 6.50. Ceci explique pourquoi les niveaux associés à la composante longitudinale du flux scalaire augmentent avec le nombre de Mach convectif malgré le fait que les valeurs rms de vitesse et de la variable de mélange. Le même raisonnement peut être appliqué aux flux associés aux espèces chimiques.

L'hypothèse de “loi gradient” sur ce type d'écoulements est vérifiée à l'aide de la figure 6.51. Cette figure illustre le comportement des termes correspondant aux composantes longitudinale et transversale du flux $\langle u_i'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_i)$. La composante transversale est toujours négative tandis que la composante longitudinale oscille autour de zéro. Les niveaux maximum associés à la composante transversale du flux sont près de 40 fois plus grands que ceux de la composante longitudinale. Il est donc confirmé que les couches de mélange supersoniques inertes considérées dans ce travail vérifient la loi gradient pour les différents régimes de compressibilité étudiés.

6.8 Etude des shocklets

Les “shocklets”, aussi appelés “eddy shocklets”, sont des structures locales de type choc associées aux tourbillons turbulents se développant, dans ce type d'écoulement, au sein de la couche de mélange. L'existence de shocklets dans un écoulement turbulent isotrope a été confirmée par Lee *et al.* (1991) [90]. Dans les écoulements cisailés libres, la présence de shocklets a été constatée à différents nombres de Mach convectif, en fonction du type d'écoulement, *e.g.* bidimensionnel ou tridimensionnel. Dans le premier type

d'écoulement, la présence de shocklets a été confirmée à $M_c \approx 0.6$ [52, 91, 143] tandis que, dans des écoulements tridimensionnels, ils apparaissaient dans des régimes plus compressibles : $M_c = 1.2$ dans des couches de mélange planes [171] et $M_c = 1.54$ dans une couche de mélange annulaire [53]. La différence dans le nombre de Mach convectif auquel ce phénomène a lieu en 2D et 3D est liée à la troisième direction de l'espace associée à l'envergure, qui permet à l'écoulement de changer de direction évitant ainsi des zones de haute pression induites par les mouvements verticaux de la couche cisailée. Enfin, la première preuve expérimentale de l'existence de shocklets était constatée par Papamoschou (1995) [125], dans une couche de mélange supersonique à écoulements opposés. D'autres études ont mise en évidence l'importance d'utiliser des équipements et des techniques très sophistiquées de visualisation pour capturer correctement ces phénomènes [1, 139].

Pour déterminer l'existence de shocklets dans les couches de mélange simulées dans ce chapitre, une démarche similaire à celle effectuée dans [55, 100] est adoptée. Cette étude se base sur la localisation des régions avec forts gradients de pression accompagnées de valeurs de dilatation négatives ($\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$), ainsi que sur la vérification des relations de Rankine-Hugoniot dans ces régions. Cependant, il faut retenir que ces phénomènes sont tout de même visqueux, instationnaires et présentent une extension normale finie (largeur finie) et, donc, ils ne sont pas censés suivre exactement les conditions de saut de Rankine-Hugoniot [26, 53].

La figure 6.52 montre les champs instantanés de dilatation et du gradient normalisé de pression pour chaque niveau de compressibilité retenu, dans des plans x_1 - x_2 placés en $x_3 = L_3/2$. Le calcul du gradient normalisé de pression se fait de manière similaire au calcul du Schlieren numérique de la masse volumique [65]

$$S_\rho = \exp \left(-\alpha \frac{\nabla \rho \cdot \nabla \rho}{(\nabla \rho \cdot \nabla \rho)_{\max}} \right), \quad (6.29)$$

avec une valeur de $\alpha = 5$ qui permet de mieux faire ressortir les gradients les plus faibles. Le champ instantané de dilatation présente des niveaux très lisses à $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. Cependant, les isolignes de pression changent radicalement de forme entre ces deux régimes de compressibilité. Ainsi, à $M_c = 0.70$, ces isolignes ne sont plus attachées aux rouleaux et tresses (régions de basse et haute pression, respectivement) et deviennent des lignes complètement détachées en suivant une direction plus ou moins verticale. Les champs correspondant au gradient normalisé de pression sont présentés dans les figures 6.52(b),(d),(f). À $M_c = 0.35$ les fluctuations de pression n'ont lieu qu'au sein de la couche de mélange (tons noirs) tandis que l'écoulement en périphérie n'est pas perturbé. À $M_c = 0.70$, les plus forts gradients de pression ont toujours lieu au sein de la couche de mélange mais l'écoulement autour, et notamment le courant de combustible (écoulement supérieur), expérimente de légères variations de pression, comme le confirment les isolignes de pression illustrées dans la figure 6.52(c). À $M_c = 1.10$, le champ instantané de gradient de pression confirme la présence des fortes discontinuités de pression dans l'écoulement libre, avec des amplitudes équivalentes à celles ayant lieu au sein de la couche de mélange. L'inclinaison des isolignes de pression est plus marquée qu'à $M_c = 0.70$. Ces

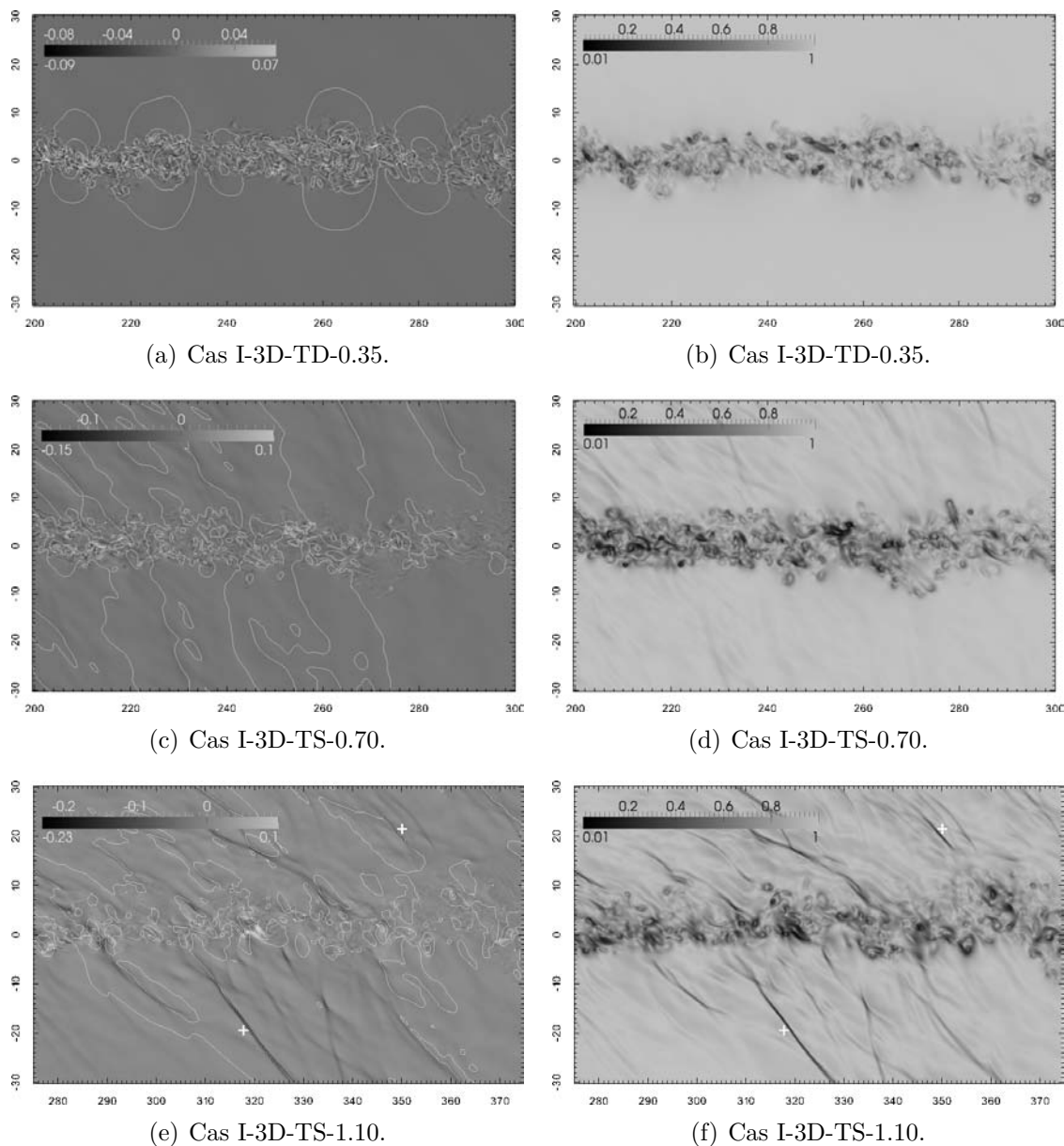


FIGURE 6.52 – Champs instantanés de dilatation normalisés par $\Delta U/\delta_{\omega,0}$ avec superposition des isolignes de pression (figures (a), (c) et (e)) et champs instantanés de gradient normalisé de pression (figures (b), (d) et (f)).

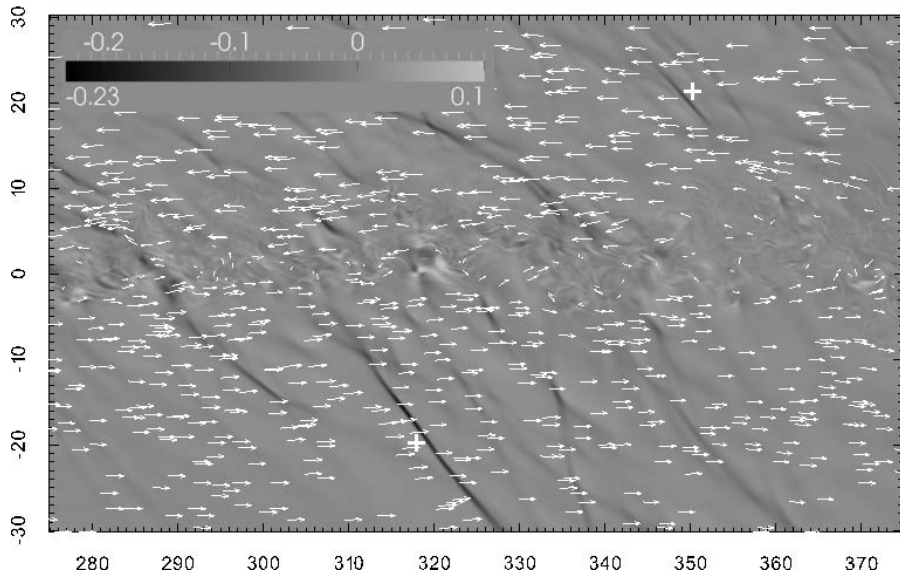


FIGURE 6.53 – Cas I-3D-TS-1.10. Champ de dilatation normalisé par $\Delta U/\delta_{\omega,0}$ avec superposition des vecteurs de vitesse.

structures complexes, similaires à celles trouvées par Fu & Li [55], sont caractérisées par la présence des forts gradients de pression coïncidant avec des valeurs négatives du champ de dilatation, ce qui suggère la présence de shocklets. Dans la suite, l'étude plus approfondie des shocklets ne sera consacrée qu'au cas I-3D-TS-1.10.

Dans chacun des écoulements parallèles, une sonde est choisie pour effectuer l'étude des shocklets (voir figures 6.52(e)–(f)). Dans le courant d'oxydant, la sonde se trouve en $(x_1, x_2, x_3) = (317.85\delta_{\omega,0}, -19.14\delta_{\omega,0}, 15\delta_{\omega,0})$ et, dans celui de combustible, elle est placée en $(x_1, x_2, x_3) = (349.79\delta_{\omega,0}, 21.23\delta_{\omega,0}, 15\delta_{\omega,0})$. Ces sondes sont proches des discontinuités à étudier. Les composantes de vitesse instantanée mesurées pour chaque sonde sont reportées dans le tableau 6.5. D'après les valeurs obtenues pour la composante dans le sens de l'envergure, il peut être déduit que l'orientation du gradient de pression est pratiquement perpendiculaire à cette direction pour les deux discontinuités. La figure 6.53 montre l'orientation des vecteurs de vitesse dans un plan x_1 - x_2 . A la traversée des discontinuités, l'orientation de ce vecteur est légèrement modifiée. Ces deux structures instationnaires ont un angle de 56.7° et 48.9° , respectivement, par rapport à la direction locale de l'écoulement incident (voir tableau 6.5).

La figure 6.54 montre l'évolution des principales quantités à la traversée de la discontinuité près de la première sonde, en suivant la direction du gradient maximum local de pression. Les figures 6.54(e)–(f) permettent de vérifier que la discontinuité est due à un fort gradient de pression accompagné d'une chute de la dilatation. Les rapports suivants sont

TABLEAU 6.5 – Composantes de vitesse instantanée mesurées par les sondes.

Sonde	$(u_1 - U_c)$ (m/s)	u_2 (m/s)	u_3 (m/s)
Oxydant	725.5	62.9	-1.2
Combustible	-835.9	-7.9	-3.2

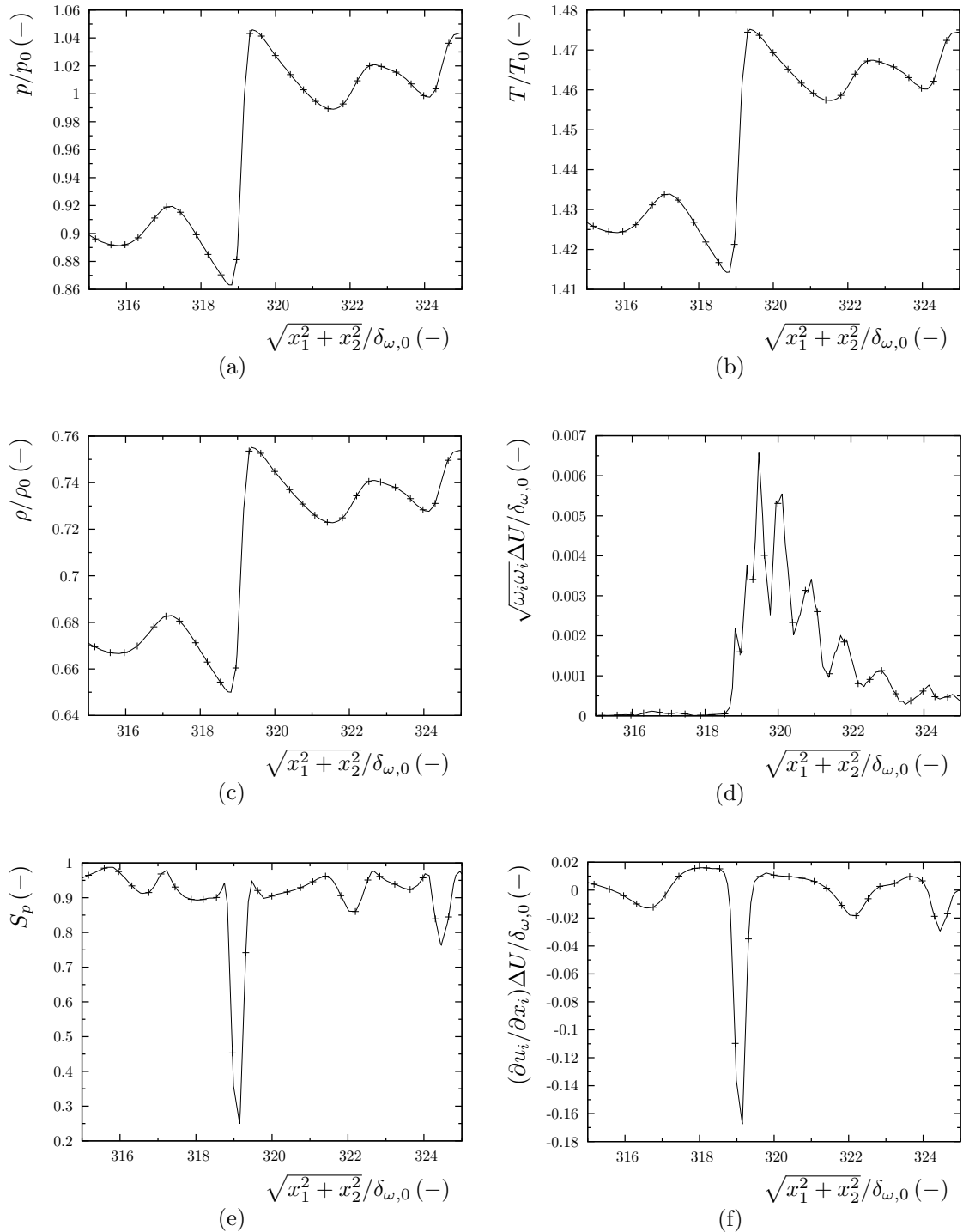


FIGURE 6.54 – Sonde placée dans le courant d’oxydant. Variation de la pression (a), température (b), masse volumique (c), vorticit  (d), gradient normalis  de pression (e) et dilatation (f)   la travers  de la discontinuit .

obtenus à partir de la figure 6.54 : $p_{\max}/p_{\min} = 1.21$, $\rho_{\max}/\rho_{\min} = 1.16$ et $T_{\max}/T_{\min} = 1.04$. Les relations de Rankine-Hugoniot pour un gaz mono-espèce idéal s'écrivent

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(p_2/p_1)(\gamma + 1) + (\gamma - 1)}{(\gamma + 1) + (p_2/p_1)(\gamma - 1)}, \quad (6.30)$$

et

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{p_2 \rho_1}{p_1 \rho_2}, \quad (6.31)$$

avec $\gamma = 1.28$ (valeur moyenne dans l'écoulement d'oxydant). En prenant le rapport de pression issu des courbes de la figure 6.54, les relations (6.30)–(6.31) donnent respectivement : $\rho_{\max}/\rho_{\min} = 1.16$ et $T_{\max}/T_{\min} = 1.04$. Ces valeurs sont tout à fait similaires à celles données par la simulation, même si les équations précédentes constituent une simplification valable seulement pour un gaz mono-espèce idéal.

Pour l'écoulement de combustible, la figure 6.55 montre l'évolution des quantités à la traversée de la discontinuité près de la sonde, en suivant la direction du gradient maximum local de pression. Les figures 6.55(e)–(f) permettent de vérifier à nouveau qu'il s'agit d'une discontinuité associée à un fort gradient de pression et une sévère diminution de la dilatation. Les rapports des valeurs maximales et minimales à la traversée de la discontinuité calculées à partir de la figure 6.54 sont : $p_{\max}/p_{\min} = 1.17$, $\rho_{\max}/\rho_{\min} = 1.12$ et $T_{\max}/T_{\min} = 1.05$. En utilisant le même rapport de pression et une valeur du rapport de chaleurs spécifiques égal à 1.39 (valeur moyenne dans le courant de combustible), les relations de Rankine-Hugoniot (6.30)–(6.31) donnent : $\rho_{\max}/\rho_{\min} = 1.12$ et $T_{\max}/T_{\min} = 1.04$. A nouveau, ces résultats s'approchent de ceux mesurés à l'aide de la figure 6.55, ce qui permet de vérifier que les deux discontinuités étudiées correspondent effectivement à des shocklets. On remarquera de ce point de vue l'excellent degré de précision de ces résultats en comparaison des analyses déjà conduites dans la littérature [53, 55, 100], qui reportent des variations de l'ordre de 20% entre les valeurs mesurées et les relations de saut de Rankine-Hugoniot.

6.9 Récapitulatif

Ce chapitre a été consacré à l'étude, par simulation numérique directe, des couches de mélange compressibles inertes tridimensionnelles se développant spatialement et de forme naturelle. Le but principal était l'étude des effets provoqués par les différents régimes de compressibilité sur la structure de la turbulence dans la couche de mélange. Ces simulations ont également permis de comparer les différences entre les couches de mélange bidimensionnelles équivalentes traitées dans le chapitre précédent.

La convergence des moments d'ordre 2, les corrélations en deux points et la comparaison des niveaux des vitesses rms déduites du tenseur de contraintes Reynolds à d'autres études précédentes a permis de vérifier la représentativité de la base de données statistique obtenue pour chaque simulation. Les nombres de Reynolds obtenus ainsi que les longueurs calculées, *i.e.* longueur de Kolmogorov et micro-échelle de Taylor, ont permis

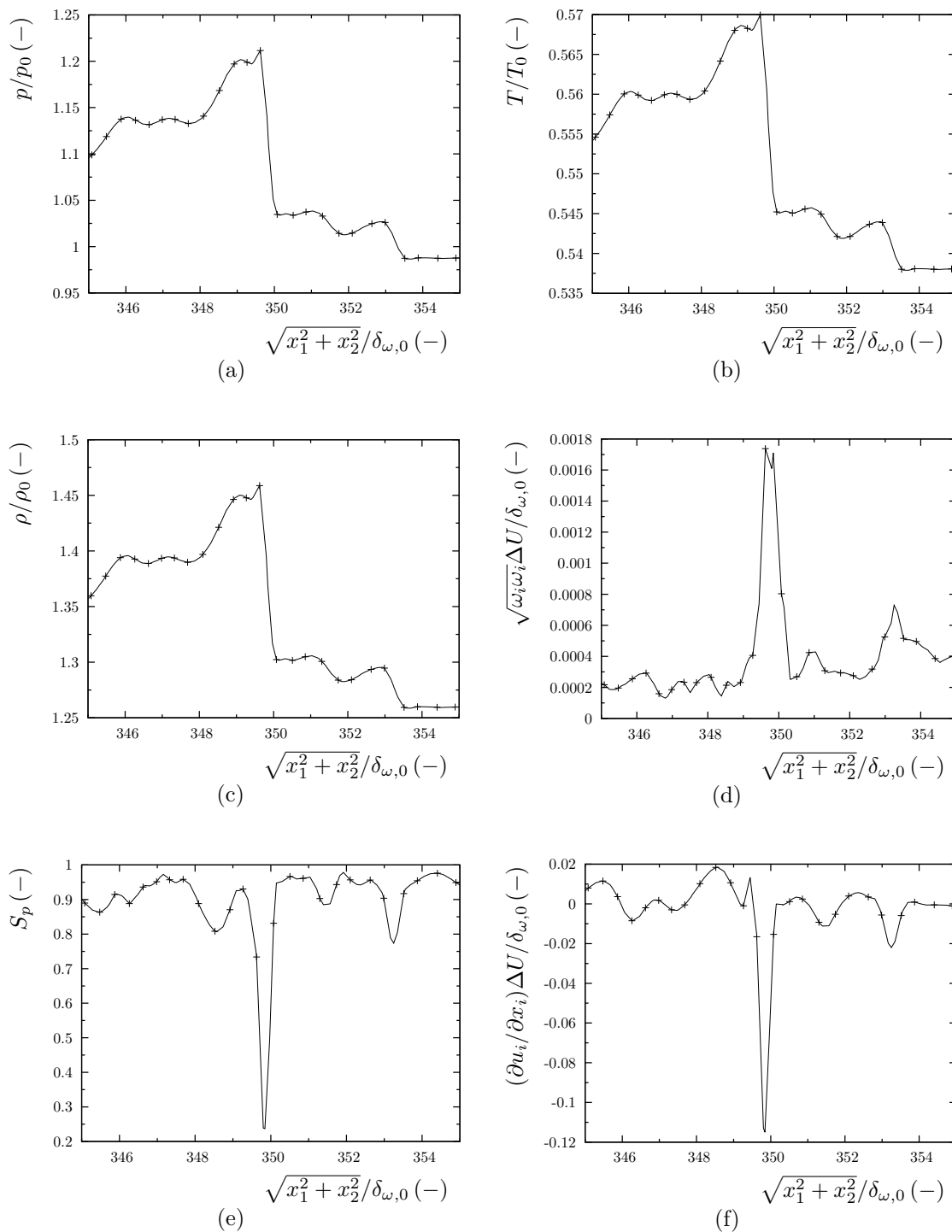


FIGURE 6.55 – Sonde placée dans le courant de combustible. Mêmes courbes que pour la figure 6.54.

aussi de garantir *a posteriori* la résolution correcte de toutes les échelles de la turbulence. Les champs instantanés du critère λ_2 ont montré un processus de transition d'un état laminaire vers un état complètement turbulent dépendant du M_c . Les figures correspondant aux champs de masse volumique et de fraction massique d'hydrogène ont révélé aussi des structures plus tridimensionnelles et désorganisées avec la compressibilité.

L'effet stabilisateur de la compressibilité a démontré son impact sur le taux de croissance de la couche de mélange, en le faisant diminuer. Les taux de croissance qui ont résulté de ces simulations sont inférieurs à ceux des couches de mélange bidimensionnelles équivalentes, mais du même ordre de grandeur que ceux reportés dans d'autres études expérimentales. L'analyse complète de l'équation de transport de l'entropie, de l'énergie cinétique turbulente ainsi que de chacune des composantes du tenseur de contraintes de Reynolds a été abordée. Une réduction généralisée des différents termes qui interviennent dans ces équations a été constatée. Contrairement à d'autres études portant sur des couches de mélange temporelles, qui montrent que la réduction du terme de pression-dilatation longitudinale est due principalement à la réduction des fluctuations de pression, les résultats correspondant aux couches de mélange spatiales suggèrent que les fluctuations du gradient de vitesse jouent elles aussi un rôle essentiel dans cette diminution.

Le mélange scalaire et l'influence de la compressibilité sur celui-ci ont été aussi étudiés. En général, la compressibilité réduit le mélange entre les espèces, ce qui est vérifié par l'atténuation des fluctuations de ces quantités. Ces résultats corroborent le fait que la compressibilité affecte toutes les espèces de façon similaire, dans le cas inerte. Les pdfs des fractions massiques tracées en différents plans et en fonction du nombre de Mach convectif ont par ailleurs montré un comportement "non marchant" à $M_c = 0.35$ et "marchant" pour des régimes plus compressibles. La composante longitudinale des flux scalaires n'est pas très affectée par la compressibilité entre $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$, mais elle augmente notablement à $M_c = 1.10$, ce qui n'a pas été reporté précédemment. Une étude plus approfondie a révélée que ce comportement inattendu provient de l'augmentation de la corrélation entre les fluctuations de la composante longitudinale de vitesse et de la variable de mélange (ou les fractions massiques) avec le nombre de Mach convectif. En outre, les résultats obtenus confirment que l'hypothèse de loi gradient est vérifiée pour ce type d'écoulements.

Finalement, l'étude du gradient de pression et du champ de dilatation a montré l'existence de fortes discontinuités dans l'écoulement à $M_c = 1.10$. Ces structures, présentes dans une grande partie du domaine de calcul, peuvent être identifiées comme des shocklets.

Chapitre 7

Simulations tridimensionnelles des couches de mélange réactives

7.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à l'étude de l'interaction entre la turbulence, la compressibilité et le taux de réaction chimique. Pour cette raison, la considération d'une chimie finie est nécessaire. Une description détaillée des termes de transport moléculaire, prenant en compte les effets de thermodiffusion et barodiffusion ainsi que la diffusion différentielle, est fortement recommandée, comme suggéré par Pierce [128]. D'après ses résultats, l'auteur indique que la description détaillée de ces termes est aussi importante que celle de la cinétique chimique. Des simulations numériques directes sur la combustion turbulente prenant en compte tous ces niveaux de détails restent très rares [34, 74] et sont parfois limitées à des lois de transport simplifiées [180].

Du point de vue numérique, des DNS tridimensionnelles de couches de mélange réactives ont été effectuées et analysées par différents auteurs [101, 107, 111, 124, 137]. Certains calculs employaient des schémas cinétiques incluant une seule étape de réaction globale [107, 137]. Avec des effets modérés de taux de dégagement de chaleur, les grandes structures de la couche de mélange sont modifiées : les longueurs d'onde associées à ces structures sont déplacées vers des valeurs plus grandes, et l'engloutissement des réactifs et la formation de produits de combustion est diminuée en conséquence d'un mélange moins effectif. McMurtry *et al.* [107] avaient associé ce comportement à l'effet stabilisateur du dégagement de chaleur. Les influences plus remarquées du taux de réaction observées par Miller *et al.* [111], pour différents nombres de Damköhler, étaient la diminution du taux de croissance, des appariements, du niveau d'énergie cinétique turbulente et de la formation des produits de combustion. L'étude plus récente effectuée par Pantano *et al.* [124] est caractérisée par sa haute résolution spatiale ainsi que des domaines suffisamment étendus permettant d'atteindre un état turbulent pleinement développé. Néanmoins, cette étude considérait une chimie infiniment rapide avec des niveaux variables de dégagement de chaleur et confirmait une diminution notable du taux de réaction avec l'augmentation de l'exothermicité. Les simulations numériques de Mahle *et al.* [101] sont une continuation

des travaux de Pantano *et al.*, avec un intérêt particulier donné à l'interaction entre la compressibilité et le taux du dégagement de chaleur. A nouveau, ces DNS sont basées sur l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide et sur des lois de transport moléculaire simplifiées. Elles correspondent ailleurs à des couches de mélange temporelles.

Comme mentionné ci-dessus, les simulations antérieures ont été conduites avec certaines hypothèses susceptibles d'être très restrictives qui concernent la cinétique chimique, *e.g.* l'approche de Burke & Schumann [23], laissant au mélange turbulent et à la diffusion moléculaire le contrôle du taux de réaction. Les couches de mélanges réactives obtenues avec cette hypothèse sont représentatives de flammes de diffusion, où le combustible et l'oxydant sont séparés par la flamme. Il s'agit donc du cas limite associé aux très grandes valeurs du nombre de Damköhler. Même si cette approche est intéressante pour des applications pratiques telles que les superstatoréacteurs, d'autres propriétés essentielles du processus de combustion comme l'auto-inflammation ou l'extinction doivent être prises en compte et, notamment, l'effet de la compressibilité sur ces processus peut être étudié en détail. Cela requiert l'emploi d'une description suffisamment finie des processus chimiques.

L'auto-inflammation est un processus de transition d'un état plus ou moins réactif vers un état de combustion. Ce processus a un caractère très local dans le mélange. Dans un écoulement turbulent, l'interaction entre la chimie et la turbulence détermine les sites les plus favorables à l'auto-ignition du mélange. D'après [40, 105, 180], l'auto-inflammation a lieu dans des régions caractérisées par une faible dissipation scalaire et à la fraction de mélange la plus réactive z_{mr} , susceptible d'être différente de la stœchiométrie z_{st} . L'auto-inflammation est un processus fortement non linéaire et rapide, ce qui est constaté par l'expression de vitesses de réaction basées sur une loi d'Arrhenius. Les auteurs parlent souvent d'un processus d'emballement thermique ou "thermal runaway", car un léger dégagement de chaleur fait augmenter la température qui fera augmenter à nouveau le dégagement de chaleur, déclenchant le processus d'auto-ignition.

Comme annoncé au début de ce manuscrit, l'hydrogène est un combustible de tout premier choix pour les applications liées à la propulsion aérospatiale. La chimie et, en conséquence, l'auto-ignition de l'hydrogène ont été largement étudiées dans la littérature. Son faible nombre des réactions élémentaires, relativement simples comparées à celles des hydrocarbures, explique aussi pour partie cet engouement. Le mécanisme de combustion de l'hydrogène commence par la réaction de dissociation de cette molécule, car l'énergie nécessaire pour dissocier la molécule d'oxygène, intervenant aussi dans le processus de combustion, est beaucoup plus grande. Des expériences dans de tubes à choc à très basse pression ont certes montrée que cette dissociation n'est pas la plus importante dans le processus d'auto-ignition [104]. Néanmoins, ce qui est généralement accepté est que le rôle de la première étape de combustion est de fournir les radicaux utilisés ensuite pour la succession des réactions en chaîne. Ces réactions en chaîne se composent des réactions de ramification et de propagation qui deviennent plus importantes avec l'incrément en température. A hautes températures, des réactions de recombinaison, correspondant aux dernières étapes de réaction, se succèdent. L'importance du troisième corps dans les étapes d'initiation et terminaison est remarquée et la concentration du rad-

ical hydroperoxyde (HO_2) joue aussi un rôle crucial dans le phénomène d'auto-ignition au travers de la température de croisement [104, 180]. Cette température, $T_c \approx 925 \text{ K}$ à 1 atm, est définie comme celle à laquelle les réactions de ramification et recombinaison de l'hydroperoxyde deviennent du même ordre de grandeur. Plus de détails sont donnés dans les références [88, 92]. Un facteur important à prendre en compte concerne aussi les limites d'inflammabilité des mélanges d'hydrogène-air. L'auto-inflammation des mélanges homogènes d'hydrogène-oxygène a été étudiée, entre autres, par Lewis & von Elbe [92] et les conclusions tirées dans ces travaux sont aussi extrapolées au cas des mélanges inhomogènes. La constatation des trois limites d'inflammabilité est la caractéristique principale de ce type de mélanges. La première et troisième limites correspondent à des pressions très faibles ou très fortes. Par contre, la deuxième limite d'inflammabilité coïncide avec la limite d'explosion, caractérisée par une période d'induction suivie d'inflammation. Ce régime a lieu à des pressions modérées, *e.g.* 1 bar, similaires à celles considérées dans ce travail.

Comme annoncé précédemment, l'auto-inflammation est un phénomène local qui se déroule à la fraction massique la plus réactive. Cette quantité peut être définie comme celle à laquelle le temps de l'allumage correspondant est le plus court. Ce type de calculs s'effectuent souvent dans des réacteurs adiabatiques parfaitement mélangés [106]. Les résultats de Echekki & Chen [42] ont montré l'existence des régions appelées *kernels* où l'auto-ignition du mélange se produit à z_{mr} . Ces régions sont aussi caractérisées par une haute température, elles sont pauvres en combustible et les niveaux de dissipation scalaire sont très faibles. D'après Mastorakos *et al.* [106], la turbulence diminue le délai d'allumage par rapport au cas laminaire. L'allumage dans une couche de mélange turbulente a aussi été étudié par Im *et al.* [79] pour différents niveaux de turbulence. Dans ces études, la fraction de mélange de l'hydroperoxyde constituait un bon indicateur de l'auto-allumage. Le noyau d'allumage se trouvait dans le courant d'air chaud et, en fonction du degré de turbulence, il était différent. Pour une turbulence faible, un seul noyau d'allumage se forme dans la zone d'induction tandis que, pour une turbulence plus forte, plusieurs noyaux coexistent. De nombreuses études numériques d'auto-ignition sur des couches laminares subsoniques [95, 96] et supersoniques [51, 81, 84, 118] ont été aussi effectuées. L'influence de la température, le gradient de vitesse transversal ainsi que la dissipation visqueuse (dans le cas supersonique) jouent un rôle notable dans le délai d'inflammation. Ainsi, une augmentation de ces quantités de façon générale fait diminuer ce délai.

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 aboutie en créant une zone de recirculation des gaz brûlés à basse vitesse et haute température, le cas supersonique pose plus de difficultés dû à l'ordre de grandeur des vitesses impliquées [10]. 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 [62, 103, 180]. En particulier, les résultats obtenus dans la récente DNS de Yoo *et al.* [180] 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. La compression générée par le choc fait augmenter la température, ce qui peut entraîner l'auto-allumage du mélange considéré [159]. En absence de chocs, au sein de la couche de mélange créée entre l'hydrogène et l'air peuvent se produire des inflammations locales, pilotées par les effets de compressibilité, de dissipation visqueuse et les 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 [169] : haute température, faible dissipation scalaire et temps d'induction faible.

Ce chapitre est consacré à l'étude des couches de mélange compressibles réactives se développant spatialement et naturellement à l'aide des simulations numériques directes tridimensionnelles. Les objectifs principaux sont de comparer les caractéristiques de couches de mélange avec celles déjà présentées dans la littérature qui utilisaient des hypothèses simplificatrices. L'étude de l'auto-inflammation et, notamment l'interaction entre la compressibilité et le dégagement de chaleur, est aussi abordée. Ce chapitre est organisé de manière similaire au précédent. La section 7.2 décrit les paramètres des simulations réactives et la section 7.3 vérifie son déroulement correct. L'étude consacrée à l'auto-allumage de ce type d'écoulements est réalisée dans la section 7.4. La section 7.5 montre les caractéristiques principales de la structure des couches de mélange turbulentes réactives et la section 7.6 est dédiée à la vérification des solutions autosimilaires. Les sections 7.7 et 7.8 présentent les effets de la compressibilité et le dégagement de chaleur issu d'une chimie détaillée sur la structure turbulente des couches de mélange et sur le mélange scalaire, respectivement. Finalement, la section 7.9 est dédiée à l'analyse de shocklets et le chapitre se conclut avec un récapitulatif des principaux résultats et conclusions tirés de l'étude des couches réactives.

7.2 Description des configurations étudiées

Les nombres de Mach convectifs 0.35, 0.70 et 1.10 retenues pour les simulations inertes du chapitre précédent sont réutilisés pour les couches de mélange réactives étudiées dans ce chapitre. Toutes ces simulations sont conduites avec une description détaillée de la cinétique chimique (mécanisme réactionnel de Ó Conaire *et al.* [119]) et des termes de transport moléculaire (bibliothèque EGLIB [47]). La configuration de mélange (tableau 5.2) et les paramètres de simulation (tableau 5.3) restent inchangés. L'écoulement supérieur (indice 1) correspond au combustible tandis que l'écoulement inférieur est l'oxydant (indice 2). L'initialisation des calculs, les critères de stabilité numérique et les conditions aux limites sont similaires à ceux déjà utilisés dans le chapitre précédent. Pour ces cas réactifs, les paramètres de l'expression de la vitesse de perturbation (6.2) sont modifiés conformément aux simulations réactives bidimensionnelles étudiées dans la section 5.6.

Le nombre de Reynolds initial basé sur l'épaisseur de vorticit  est $Re_{\omega,0} = 640$ pour les trois cas. Le maillage ainsi que les dimensions des domaines de calcul sont reportés dans

le tableau 7.1. La taille de maille est constante selon la direction d'envergure et, selon les autres deux directions de l'espace, un léger étirement est appliqué comme indiqué précédemment dans la section 5.4.2.

Toutes les simulations ont été conduites sur le supercalculateur Turing à l'IDRIS. La simulation R-3D-TD-0.35 a tourné avec 16384 processus MPI, la simulation R-3D-TD-0.70 a tourné avec 65536 processus MPI et, finalement, la simulation R-3D-TD-1.10 a quant à elle tourné avec 8192 processus MPI. Le coût de calcul associé à chaque simulation est d'environ 2.5 millions d'heures de CPU pour le cas R-3D-TD-0.35 et de 4.0 millions d'heures de CPU pour le cas R-3D-TD-0.70.

Les champs instantanés de température et du taux de dégagement de chaleur ont montré que l'auto-inflammation de la couche cisailée du cas R-3D-TD-1.10 n'a pas eu lieu en régime permanent pour la longueur du domaine de calcul considéré. En conséquence, l'étude statistique de ce cas n'a pas été effectuée. La section 7.5.3 présente néanmoins quelques champs instantanés correspondant à ce cas.

7.3 Vérification des simulations

Les simulations des couches de mélange réactives se sont déroulées sur une période de temps suffisamment longue pour l'obtention d'une base statistique convergée. Ce critère est basé sur la convergence de moments d'ordre 2 donné par la relation (6.3).

La figure 7.1 montre la convergence des moments d'ordre 2 en fonction du temps convectif de simulation (L_1/U_c) en suivant le critère donné dans la section 6.3. Le calcul des convergences est effectué vers la fin du domaine de calcul, en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ pour le cas R-3D-TD-0.35, et en $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ pour le cas R-3D-TD-0.70. Dans la suite, toutes les quantités moyennes seront calculées dans ces positions sauf indication contraire. Comme pour les simulations inertes, au fur et à mesure que le nombre de Mach convectif augmente, un temps plus important est nécessaire pour obtenir la convergence des statistiques d'ordre 2. Il faut environ 10 unités de temps caractéristique de convection à $M_c = 0.35$ et 18 unités de temps à $M_c = 0.70$ pour générer une base de données de 700 et 1000 champs instantanés, respectivement.

L'évaluation des corrélations en deux points et la détermination de l'échelle de longueur intégrale permet de vérifier que la taille du domaine selon le sens de l'envergure est suffisamment grande. La figure 7.2 montre les corrélations des composantes de vitesse

TABLEAU 7.1 – Paramètres géométriques correspondant aux simulations réactives. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est constitué d'un nombre de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. L'épaisseur de vorticit  initiale $\delta_{\omega,0}$, utilis e comme longueur de r f rence, est calcul e   partir de $Re_{\omega,0} = 640$.

Cas	$L_1/\delta_{\omega,0}$	$L_2/\delta_{\omega,0}$	$L_3/\delta_{\omega,0}$	N_1	N_2	N_3	N
R-3D-TD-0.35	320	60.6	30	1517	325	179	88×10^6
R-3D-TD-0.70	360	93.2	30	1756	341	179	107×10^6
R-3D-TD-1.10	385	93.2	30	1645	341	179	100×10^6

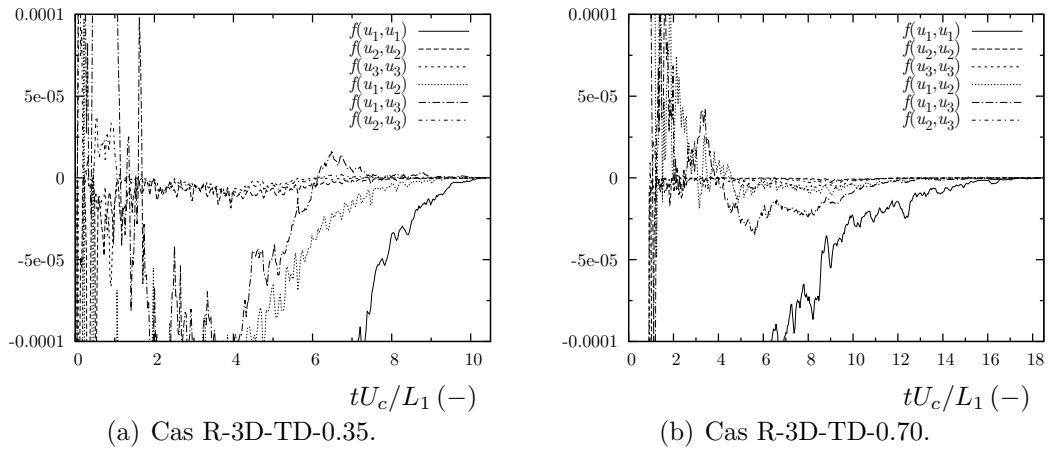


FIGURE 7.1 – Convergence des moments d'ordre 2.

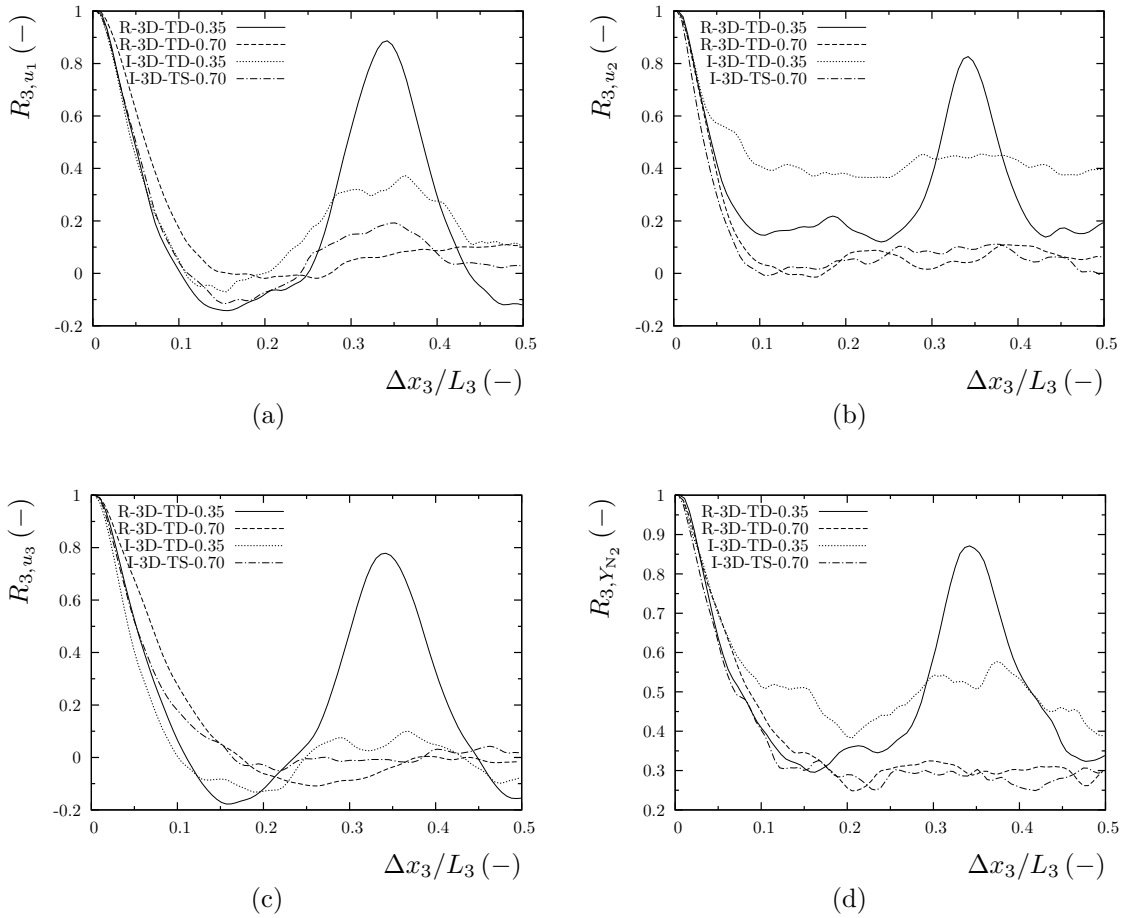


FIGURE 7.2 – Corrélations en deux points.

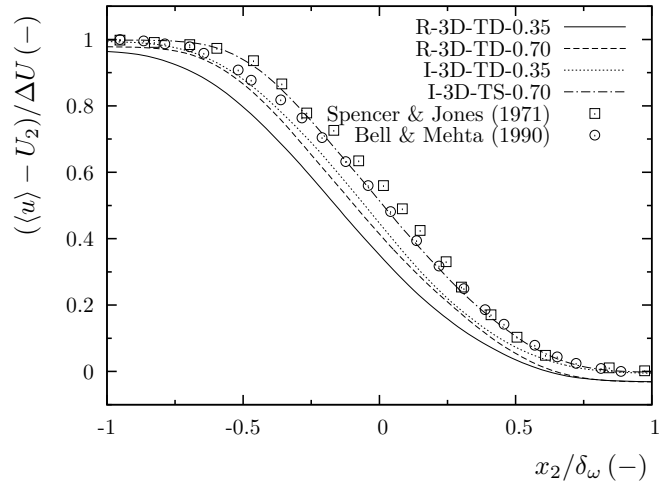


FIGURE 7.3 – Composante longitudinale de vitesse.

ainsi que de la fraction massique d'azote. Pour la simulation R-3D-TD-0.35, un pic de corrélation assez important reste présent. La relaminarisation de l'écoulement provoquée par le dégagement de chaleur accentue ce comportement par rapport au cas I-3D-TD-0.35. L'analyse de la structure de la couche de mélange effectuée dans la section 7.5 révèle que ce pic est provoqué par un lien renforcé entre les instabilités issues des perturbation aléatoires en amont de l'écoulement et le dégagement de chaleur. Le cas R-3D-TD-0.70 ne reproduit pas ce comportement. Néanmoins, les résultats obtenus pour les corrélations en deux points du cas R-3D-TD-0.35 ne semblent pas affecter la qualité des statistiques obtenues. Ceci est confirmé par la valeur de la longueur intégrale calculée à partir de la relation (6.5) et reportée dans le tableau 7.2. La longueur intégrale du cas R-3D-TD-0.35 n'est finalement pas significativement plus grande que celle obtenue dans le cas I-3D-TS-1.10. Elle est néanmoins comparable à celles reportées dans la littérature, comme mentionné dans la section 7.3.

La figure 7.3 montre la composante longitudinale moyenne de vitesse en fonction de la coordonnée transversale normalisée. Les résultats obtenus pour les simulations réactives et inertes sont comparées à des études expérimentales. Comme dans le cas des simulations inertes, toutes les quantités présentées dans la suite sont, par défaut, moyennées spatialement et temporellement selon les formules (6.6)–(6.7). Deux caractéristiques principales peuvent être constatées dans le cas réactif. Dans un premier temps, le dégagement de chaleur pousse les profils vers le côté oxydant. La compressibilité a un effet contraire pour ramener les profils vers le combustible. Dans un deuxième temps, la valeur de la vitesse longitudinale aux extrémités ne revient pas à celle imposée en entrée de l'écoulement. En effet, l'écoulement réactif subit une décélération qui est plus remarquée dans la couche de

TABLEAU 7.2 – Echelles intégrales pour les simulations réactives.

Cas	R-3D-TD-0.35	R-3D-TD-0.70
l_3/L_3	0.12	0.081

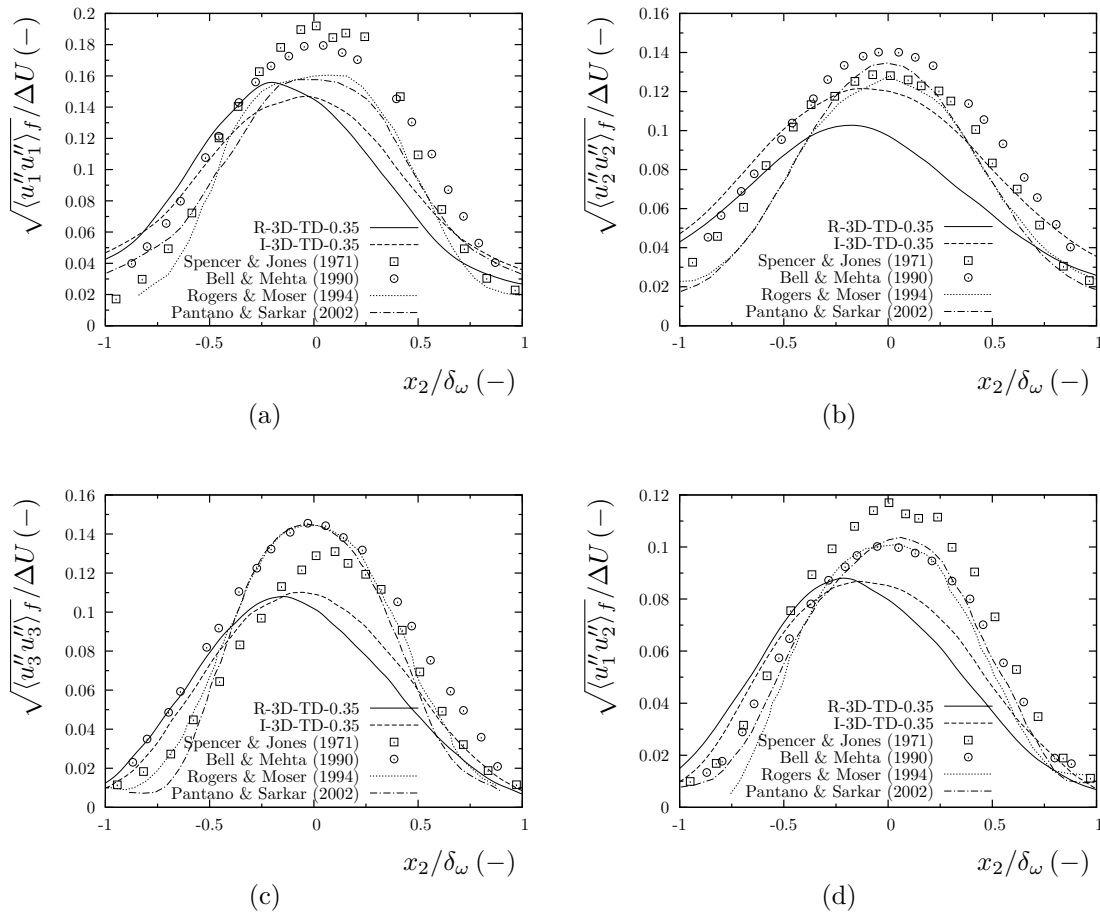


FIGURE 7.4 – Cas R-3D-TD-0.35. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU .

mélange à plus bas nombre de Mach convectif.

Les figures 7.4–7.5 montrent les profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds (5.16) pour les cas réactifs et inertes. Ils sont également comparés à d'autres simulations numériques et études expérimentales [12, 123, 138, 156]. Ces résultats sont limités uniquement aux deux premiers régimes de compressibilité : $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$. Pour le cas à $M_c = 0.35$, seulement la contrainte normale transversale présente des niveaux plus faibles que ceux du cas inerte équivalent. En conséquence, le dégagement de chaleur issu du processus de réaction ne semble pas influencer de manière significative les niveaux de contraintes du tenseur de Reynolds. A $M_c = 0.70$ ces niveaux se réduisent dans le cas réactif d'environ 10%. Hermanson & Dimotakis [73] ont montré que la réduction des niveaux des contraintes du tenseur de Reynolds des couches de mélanges réactives est consistant avec la réduction du taux de croissance de la couche de mélange. Les résultats présentés ici sont en accord avec ceux de Hermanson & Dimotakis et confirment que les légères différences trouvées dans les niveaux des profils rms entre les cas réactifs et inertes sont équivalentes aux différences entre les taux des couches de mélange (voir section 7.6). On constate les mêmes différences que précédemment pour le cas réactif et inerte par rapport aux résultats de la littérature portant sur des couches de

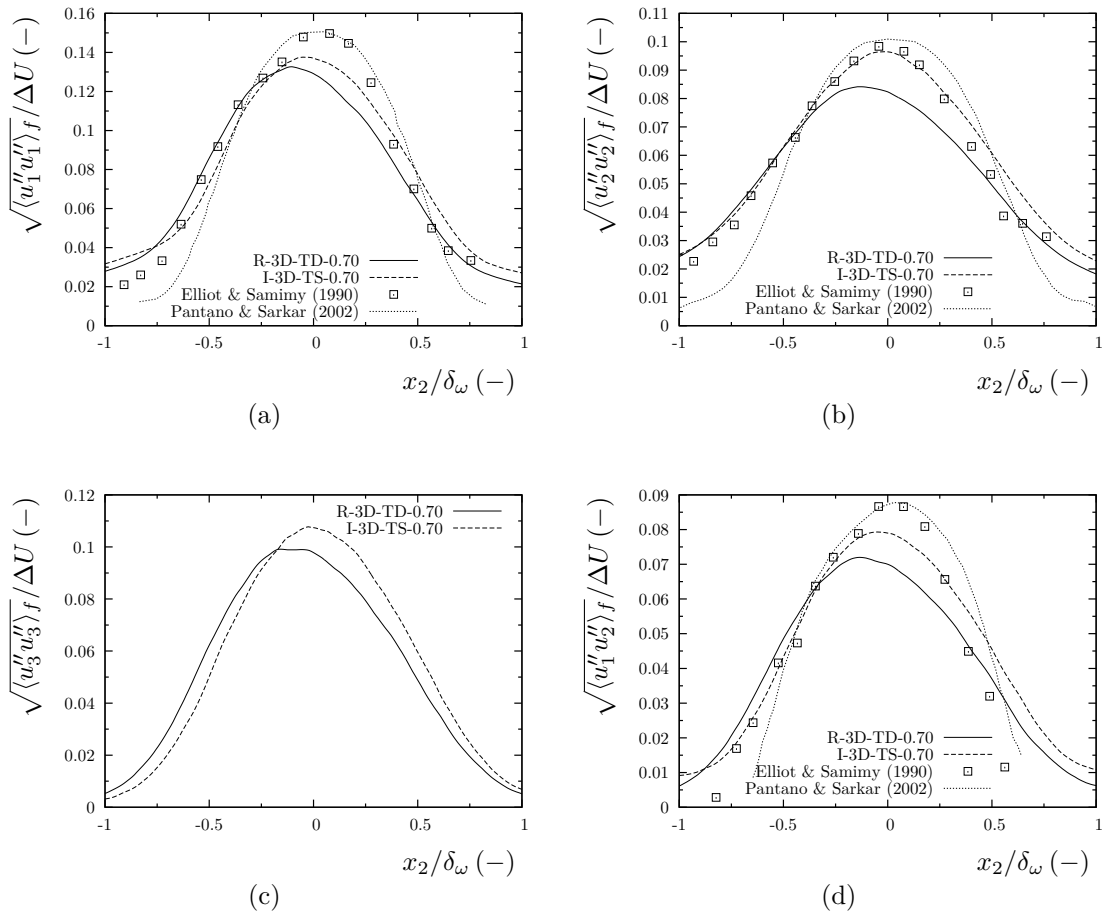


FIGURE 7.5 – Cas R-3D-TS-0.70. Profils de vitesses rms déduites du tenseur de contraintes de Reynolds normalisés par ΔU .

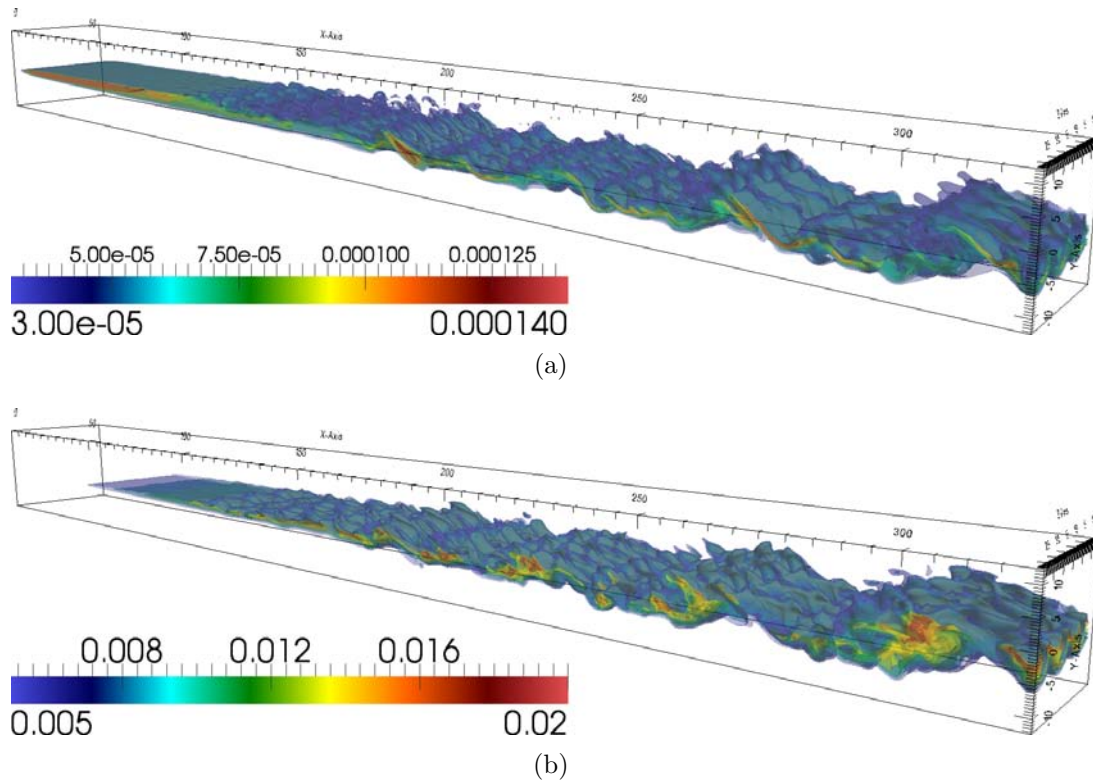


FIGURE 7.6 – Cas R-3D-TD-0.35. Isocontours de HO_2 (a) et OH (b). Unités SI.

mélange inertes d'air.

7.4 Auto-inflammation de la couche de mélange

Dans cette section, le phénomène d'auto-inflammation des couches de mélange réactives compressibles est étudié plus en détail. Des champs instantanés de l'écoulement turbulent sont présentés à différentes positions longitudinales et transversales. En outre, les profils des taux de réaction élémentaires sont aussi analysés. Des variables statistiques d'intérêt dans la combustion, *e.g.* le taux de dissipation scalaire, le taux de dégagement de chaleur, le nombre de Damköhler et l'indice de Takeno, sont examinées à l'aide des moyennes et pdfs conditionnelles.

Les figures 7.6–7.7 montrent un instantané de la distribution des radicaux hydroxyde (OH) et peroxyde d'hydrogène (HO_2) au sein des couches de mélange à $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$, respectivement. Cette distribution reste très proche de celle décrite dans la couche de mélange bidimensionnelle impactée par choc étudiée dans la section 5.9. On note une accumulation de radical HO_2 très près du plan d'injection. La présence de ce radical en amont du point d'auto-allumage et ses niveaux relativement importants comparés à d'autres espèces intermédiaires jouent un rôle crucial dans la stabilisation de la flamme en aval [42, 180]. Après la formation de cette poche de HO_2 , la teneur en radical OH augmente légèrement et des maxima locaux de cette espèce sont présents en aval de l'écoulement. Ceci est particulièrement marqué dans la figure 7.7(b). La présence simultanée des maxima

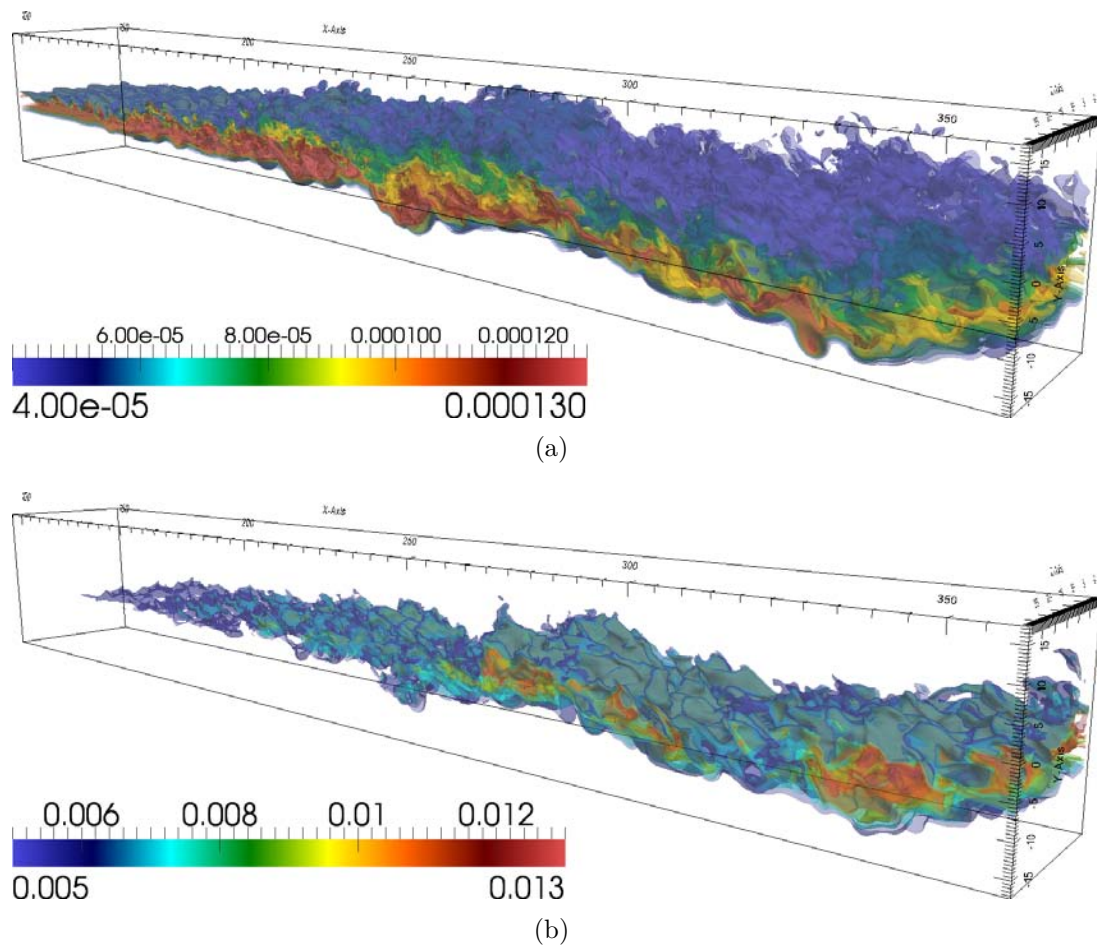
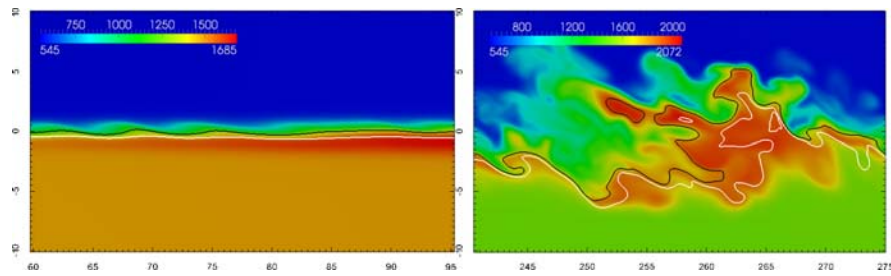


FIGURE 7.7 – Cas R-3D-TD-0.70. Isocontours de HO_2 (a) et OH (b). Unités SI.

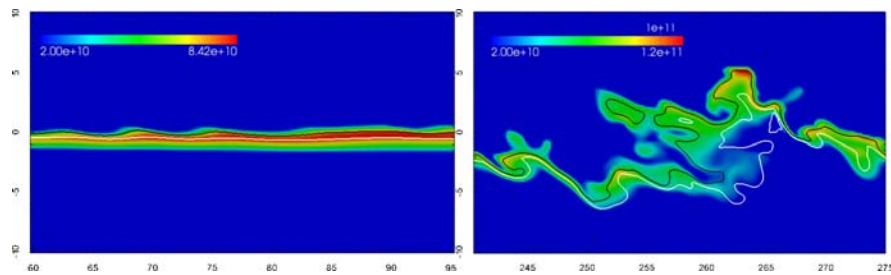
de radical OH et de température est un indicatif de l’auto-inflammation du mélange. En effet, dans les mélanges inflammables d’hydrogène-air, le processus d’induction a lieu dans des conditions quasi isothermes où des radicaux HO₂ se forment ; dans l’étape suivante, communément appelée “emballement thermique”, ces radicaux sont convertis en radicaux OH en même temps que la température augmente brusquement.

Les figures 7.8–7.9 montrent des champs instantanés de température, taux de dégagement de chaleur, taux de dissipation scalaire et des radicaux HO₂ et OH, pour les cas R-3D-TD-0.35 et R-3D-TD-0.70, respectivement. Les isolignes de fraction massique z_{mr} (lignes blanches) et z_{st} (lignes noires) sont superposées à ces champs. La valeur de la fraction massique la plus réactive z_{mr} correspond au temps d’auto-inflammation le plus faible τ_{ref} et, dans ce travail, ces deux quantités sont calculées à partir des résultats correspondant à un réacteur parfaitement mélangé ou PSR (*perfectly stirred reactor*), présentés dans la figure 5.5(b). Dans le régime le moins compressible (figure 7.8) la montée en température de l’écoulement peut être observée aux alentours de $x_1 = 65\delta_{\omega,0}$. En connaissant le temps de référence d’auto-inflammation τ_{ref} et la vitesse de convection de l’écoulement U_c , la distance caractéristique de référence d’auto-inflammation est estimée, pour ce régime de compressibilité, en $x_{\text{ref}} \approx 50\delta_{\omega,0}$. Ces deux distances sont très proches entre elles car, dans la couche de mélange, l’auto-inflammation a lieu dans un écoulement laminaire, avant la zone de transition. De plus, l’auto-inflammation a lieu à des valeurs de fraction massique inférieures à la fraction massique la plus réactive z_{mr} . Cette région où le mélange s’enflamme se caractérise par des faibles valeurs du taux de dissipation scalaire, ce qui est en accord à la fois avec les travaux de Mastorakos *et al.* [106], conduits avec une chimie globale, et les résultats de Echehki & Chen [42], obtenus avec une chimie détaillée. Les figures 7.8(d)–7.8(e) confirment à nouveau le mécanisme de conversion de l’espèce HO₂ en OH. En fin du domaine de calcul (figures à droite), les régions à plus hautes températures sont comprises, en générale, entre z_{mr} et z_{st} , tandis que les niveaux maximum du dégagement de chaleur suivent fidèlement la ligne z_{st} . La figure 7.8(c) révèle que les valeurs du taux de dissipation les plus importantes se situent dans des régions proches de la fraction massique stœchiométrique. Enfin, il peut être observé que la teneur maximale de OH dans le mélange brûlé (vers la fin du domaine de calcul) se trouve dans une région située entre z_{mr} et z_{st} , et non à des valeurs inférieures de z_{mr} comme c’était le cas dans la région d’auto-inflammation.

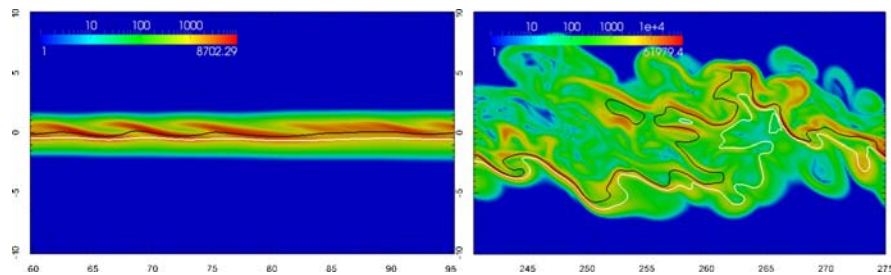
Quand le nombre de Mach convectif est augmenté à $M_c = 0.70$, l’auto-ignition du mélange a lieu dans un écoulement turbulent, après la zone de transition de la couche de mélange. La figure 7.9(a) montre le champ instantané de température dans la région d’auto-allumage (figure à gauche), entre $x_1 = 210\delta_{\omega,0}$ et $x_1 = 260\delta_{\omega,0}$. Des croix sont positionnées sur cette figure de manière à identifier des régions susceptibles de s’auto-inflammer. Ces régions sont définies par des valeurs locales de température plus importantes (dans ce cas particulier, 50 K supérieures à la température de l’écoulement d’oxydant), où les niveaux du dégagement de chaleur deviennent significatifs et la fraction massique de HO₂ diminue. Il peut être constaté que ces points d’auto-ignition se trouvent systématiquement à $z < z_{\text{mr}}$, comme dans le cas R-3D-TD-0.35. La distance d’auto-



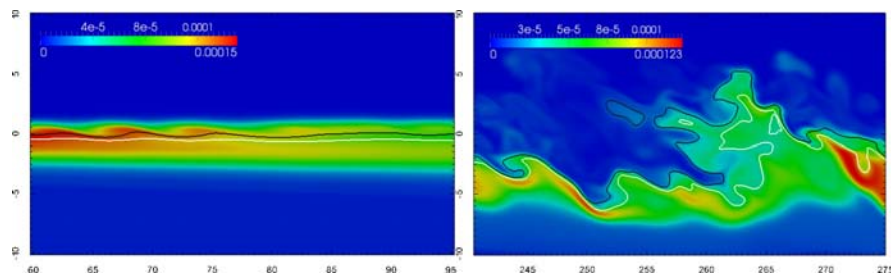
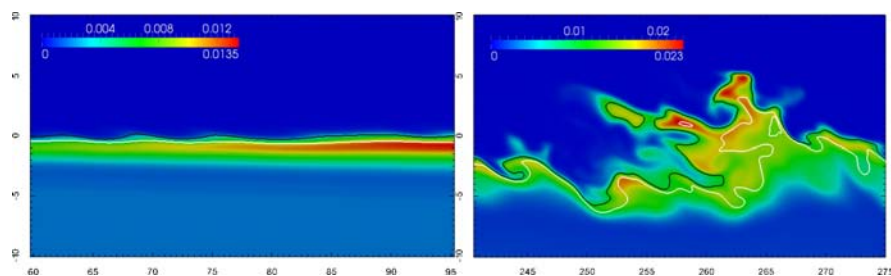
(a) Température.



(b) Taux de dégagement de chaleur.

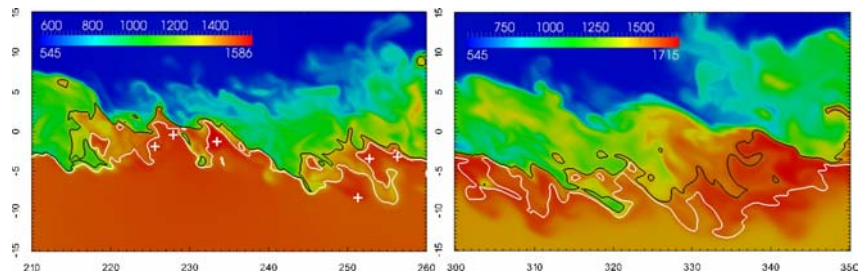


(c) Taux de dissipation scalaire.

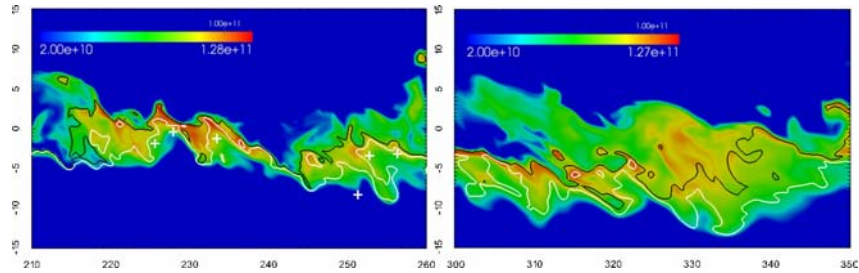
(d) Fraction massique de HO₂.

(e) Fraction massique de OH.

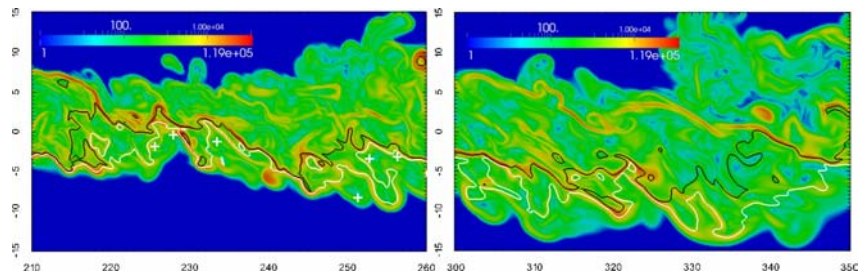
FIGURE 7.8 – Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés avec superposition des isolignes de z_{mr} (blanche) et de z_{st} (noire). Région d'auto-inflammation (gauche) et fin du domaine de calcul (droite). Unités SI.



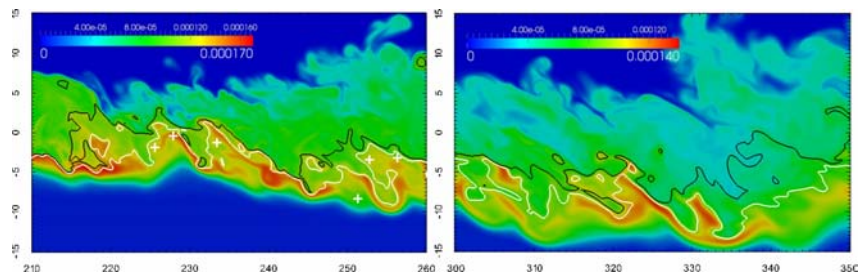
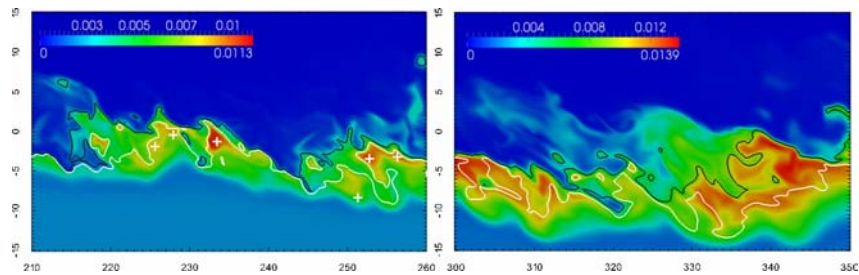
(a) Température.



(b) Taux de dégagement de chaleur.



(c) Taux de dissipation scalaire.

(d) Fraction massique de HO₂.

(e) Fraction massique de OH.

FIGURE 7.9 – Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés avec superposition des isolignes de $z_{mr} = 0.23$ (blanche) et de $z_{st} = 0.41$ (noire). Région d'auto-inflammation (gauche) et fin du domaine de calcul (droite). Unités SI.

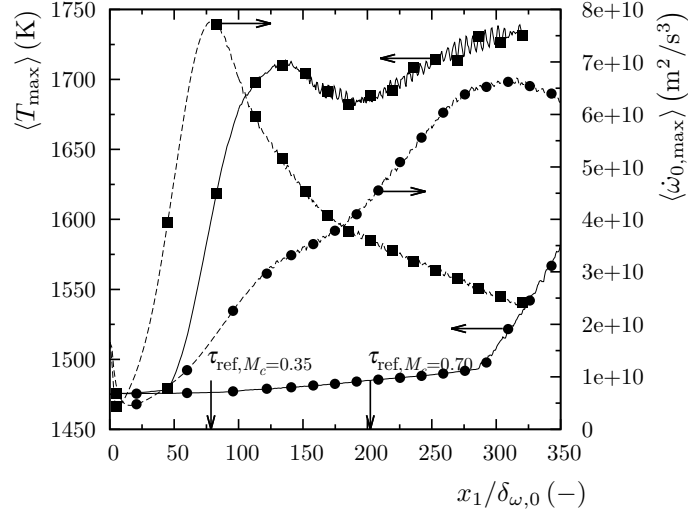


FIGURE 7.10 – Température (—) et taux de dégagement (- -) maximum moyennés au sens de Reynolds et tracés en fonction de la coordonnée longitudinale. Cas R-3D-TD-0.35 (■) et R-3D-TD-0.70 (●).

ignition de référence, calculée à partir du temps de référence mesuré dans le PSR et la vitesse de convection de l'écoulement, est $x_{\text{ref}} \approx 200\delta_{\omega,0}$. Cette distance est très proche de celle où les poches d'auto-ignition ont été identifiées sur les champs instantanés. Ces noyaux sont localisés dans des endroits où les niveaux du taux de dissipation scalaire ne sont pas très importants et le radical HO_2 est transformé en OH . A proximité de la fin du domaine de calcul (figures à droite), les remarques effectuées pour le cas quasi incompressible sont applicables aussi dans ce cas.

A la lumière des résultats obtenus à partir des champs instantanés, il semble que l'auto-ignition de l'écoulement se produit de façon privilégiée pour des valeurs de fraction massique légèrement inférieures à z_{mr} . De plus, l'auto-ignition semble s'établir à des temps (où distances) équivalents à ceux déduits d'un calcul PSR, même à $M_c = 0.70$ où elle a lieu en écoulement turbulent. Cette dernière affirmation semble contredire certains résultats de la littérature [106]. En effet, il serait attendu que dans un écoulement turbulent le délai d'auto-ignition soit supérieur à celui obtenu dans un calcul PSR, de l'ordre d'un facteur 2 ou 3. Ce délai plus important serait une conséquence des pertes de chaleur et des radicaux dues aux valeurs locales du taux de dissipation scalaire [42, 106]. La figure 7.10 montre l'évolution des valeurs moyennes de température et du taux de dégagement maximum en fonction de la coordonnée longitudinale. A $M_c = 0.35$, l'emballement thermique a lieu à $x_1 \approx 75\delta_{\omega,0}$ et coïncide à peu près avec les calculs issus du PSR. Ceci peut être attribué au fait que l'auto-ignition a lieu dans un écoulement laminaire plus ou moins homogène, où les pertes de chaleur ne sont pas significatives. En revanche, à $M_c = 0.70$, l'emballement thermique se produit à partir de $x_1 \gtrsim 300\delta_{\omega,0}$, ce qui correspond à une distance 50% supérieure à celle estimée par PSR. Ainsi, la seule visualisation des champs instantanés ne permet pas d'étudier en détail l'auto-inflammation de l'écoulement et il est donc nécessaire d'utiliser d'autres quantités statistiques pertinentes. L'obtention

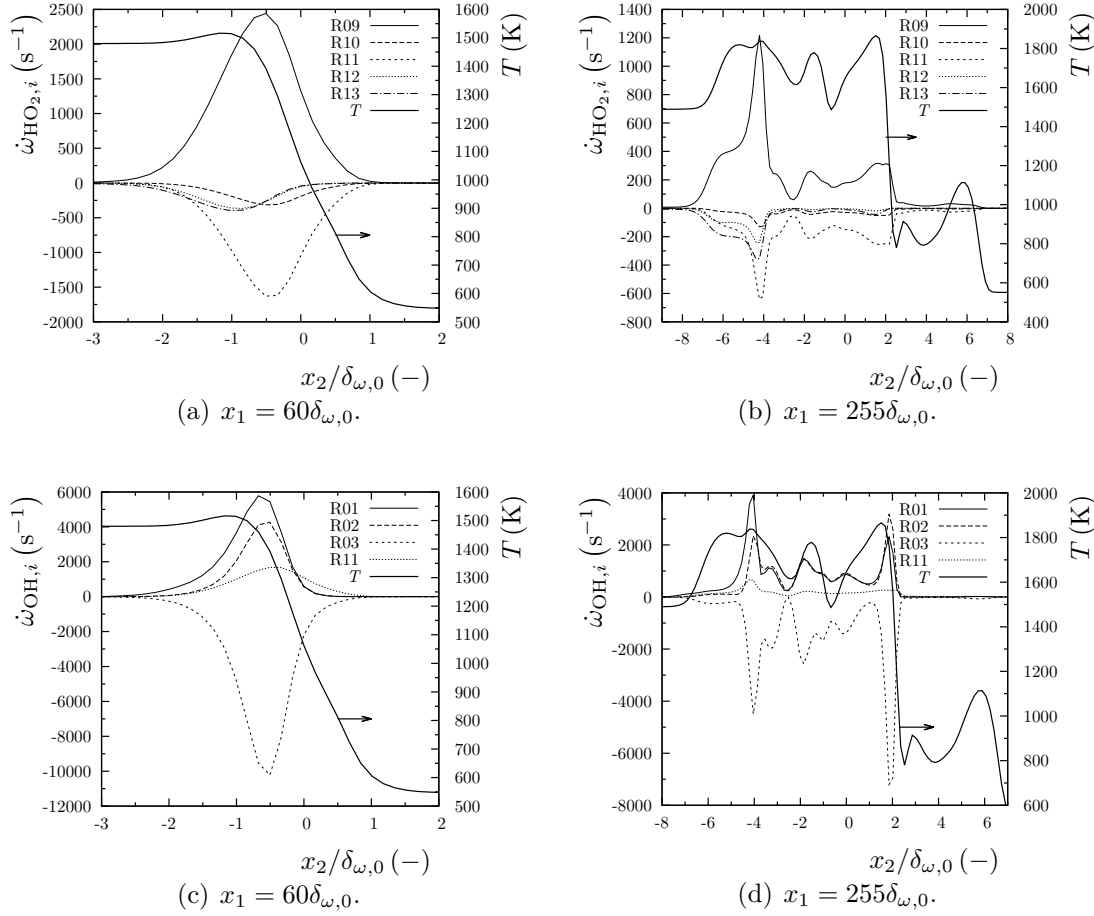


FIGURE 7.11 – Cas R-3D-DT-0.35. Profils de température et des réactions élémentaires de HO_2 (a)–(b) et OH (c)–(d) à différentes abscisses.

d'un délai d'auto-inflammation plus grand en écoulement turbulent est consistante avec d'autres travaux publiés dans la littérature et peut, éventuellement, expliquer pourquoi la couche de mélange réactive du cas R-3D-TD-1.10 ne s'auto-inflamme pas dans le domaine de calcul envisagé, malgré le fait que l'incrément de température dû au frottement visqueux soit considérable à ce niveau de compressibilité.

Les figures 7.11–7.12 montrent les profils de réactions élémentaires de HO_2 et OH à différentes abscisses et pour $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$, respectivement. Cette analyse est similaire à d'autres réalisées dans la littérature [40, 42, 180] et permet de déterminer la chimie dominante près de la région d'auto-ignition et vers la fin du domaine de calcul. Pour le cas R-3D-TD-0.35, la production dominante de HO_2 proche de la région d'auto-inflammation (figure 7.11(a)) est donnée par la réaction R09 ($\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$, voir le mécanisme de réaction détaillé de Ó Conaire *et al.* en annexe C) tandis que sa consommation, contrôlée par la réaction R11 ($\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2\text{OH}$), est moins importante. Dans cet endroit, localisé en $x_1 = 66\delta_{\omega,0}$, le radical HO_2 est sur le point d'atteindre son état chimique d'équilibre tandis qu'il existe une légère production de radical OH et, éventuellement, l'emballement thermique de la réaction se produit. Près de la fin du domaine de calcul, en $x_1 = 255\delta_{\omega,0}$ (voir figure 7.11(b)), la réaction R09 est presque contrebalancée par les

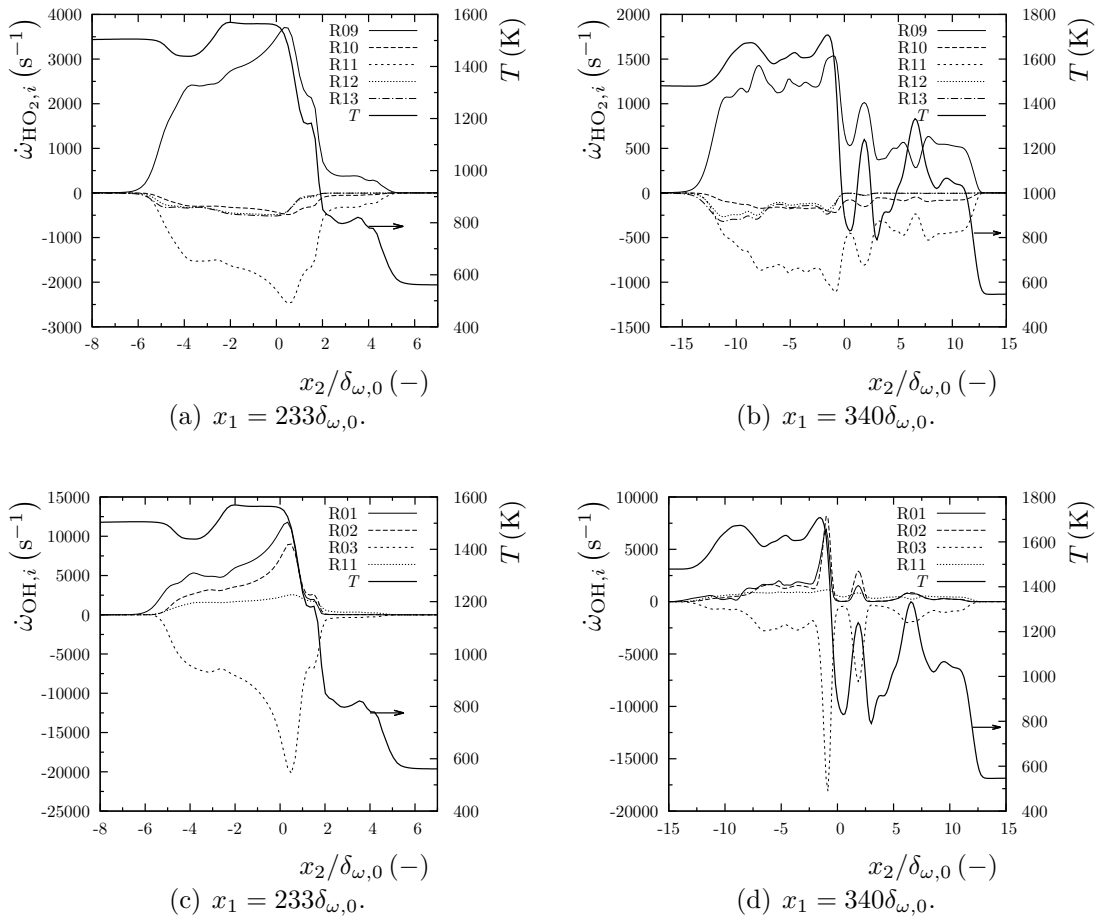


FIGURE 7.12 – Cas R-3D-TD-0.70. Profils de température et des réactions élémentaires de HO_2 (a)–(b) et OH (c)–(d) à différentes abscisses.

réactions R10, R11, R12 et R13. Les réactions élémentaires correspondant au radical OH révèlent que la contribution de la réaction R11 ($\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2\text{OH}$) à la production de OH est inférieure à celle issue des réactions de ramification R01 ($\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$) et R02 ($\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{OH}$), mais elle reste du même ordre de grandeur comme le montre la figure 7.11(c). En $x_1 = 255\delta_{\omega,0}$, la contribution de R11 par rapport à R01 et R02 devient complètement négligeable. En effet, les réactions de ramification deviennent importantes à haute température et la plus grande partie de OH produit dans le mélange brûlé provient de ces réactions. Un comportement similaire des réactions élémentaires est constaté à $M_c = 0.70$, avec des différences en termes des niveaux atteints. La figure 7.12(c) montre que l'arrivée du radical HO_2 à un état d'équilibre chimique est plus difficile à atteindre à ce niveau de compressibilité. En outre, la contribution de la réaction R11 à la production de OH reste négligeable par rapport aux réactions R01 et R02 (voir figures 7.12(c)–7.12(d)), ce qui peut être à nouveau associé à la haute température du courant d'oxydant, qui favorise les réactions de branchement.

La figure 7.13 montre les profils moyens et rms du taux de dégagement de chaleur, taux de dissipation scalaire, nombre de Damköhler et indice de Takeno pour les deux simulations réactives. Vers la fin du domaine de chaque simulation, le taux de dégagement de chaleur moyen à $M_c = 0.70$ reste supérieur de celui à $M_c = 0.35$ au long de la coordonnée transversale, ce qui est confirmé aussi pour la figure 7.10. Les niveaux du taux de dissipation scalaire et le nombre de Damköhler restent aussi supérieurs dans le cas le plus compressible. Cette dernière quantité est définie dans [42] comme

$$Da = \frac{\rho \dot{\omega}_\alpha}{|-\partial(\rho Y_\alpha V_{\alpha j})/\partial x_j|}, \quad (7.1)$$

et dans ce travail elle est reportée sur l'espèce H_2O en suivant [180]. D'après [42], une condition nécessaire pour l'auto-ignition du mélange est que la relation (7.1) soit supérieure à l'unité. La figure 7.13(e) confirme que cette condition est satisfaite au milieu de la couche de mélange, pour les deux régimes de compressibilité retenus. L'indice de Takeno [177], aussi appelé indice de flamme ou *flame index*, est défini ici de la manière suivante :

$$G_{co} = \frac{\nabla Y_c \cdot \nabla Y_o}{\|\nabla Y_c\| \|\nabla Y_o\|}, \quad (7.2)$$

où les indices c et o désignent, respectivement, le combustible et l'oxydant. La relation (7.2) représente le cosinus de l'angle entre les gradients de combustible et d'oxydant de telle sorte que des valeurs de G_{co} proches de l'unité correspondent à des gradients alignés (associés à des flammes de prémélange), tandis que des valeurs proches à -1 correspondent à des gradients opposés (ou à des flammes non prémélangées). La figure 7.13(g) indique que, en moyenne, l'indice de Takeno tend vers des valeurs négatives à l'intérieur de la couche de mélange sans que la compressibilité joue un rôle important. La valeur moyenne et rms du taux de dégagement de chaleur (figures 7.13(a)–7.13(b)) restent du même ordre de grandeur pour les deux valeurs du nombre de Mach convectif, avec des niveaux rms légèrement inférieurs aux niveaux moyens. La même tendance est suivie par l'indice

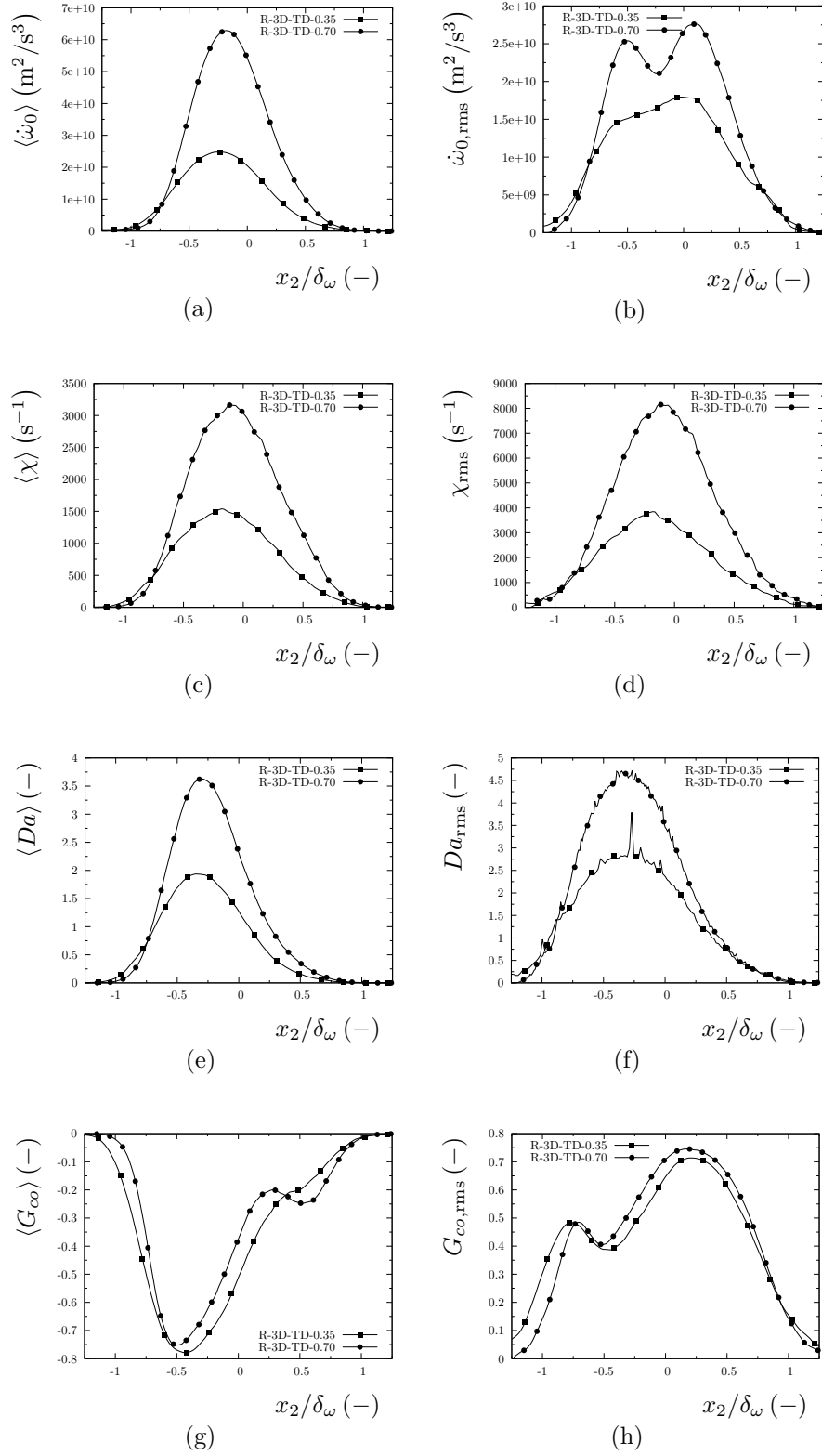


FIGURE 7.13 – Profils moyens et rms du taux de dégagement de chaleur (a)–(b), taux de dissipation scalaire (c)–(d), nombre de Damköhler (e)–(f) et indice de Takeno (g)–(h).

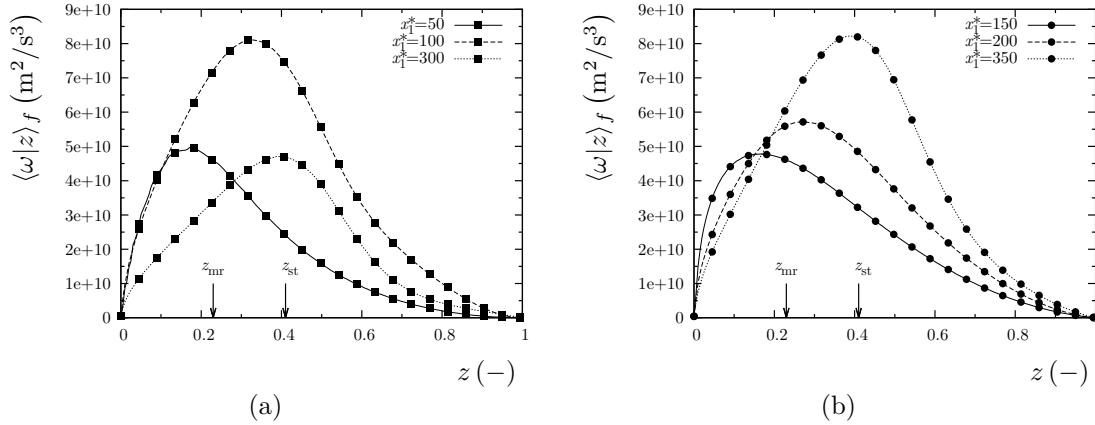


FIGURE 7.14 – Moyenne conditionnelle du taux de dégagement de chaleur pour les cas R-3D-TD-0.35 (a) et cas R-3D-TD-0.70 (b).

de Takeno et, conséquemment, des valeurs instantanées locales de cette indice positives peuvent être attendus dans le côté riche en combustible. Cependant, un comportement différent est remarqué pour le taux de dissipation scalaire et le nombre de Damköhler : les niveaux rms excèdent les valeurs moyennes. L'étude des profils rms de ces grandeurs est d'une grande importance pour les résultats qui seront présentés dans la suite. Ainsi, une conséquence immédiate des valeurs rms de χ et Da est l'approximation des pdfs de ces quantités par des lois log-normales, comme il sera discuté plus tard.

D'un point de vue statistique, le processus d'auto-inflammation est souvent étudié à l'aide des moyennes conditionnelles, ce qui est très apprécié pour le développement de modèles de combustion et leur validation. Les moyennes au sens de Reynolds et de Favre d'une quantité instantanée φ conditionnée à la variable ϕ s'expriment, respectivement, comme

$$\langle \varphi | \phi \rangle (\phi, x_1) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \int_0^{L_2} (\varphi(x_1, x_2, x_3, t) |_{\phi^* = \phi}) dx_2 dx_3 dt}{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \int_0^{L_2} (1 |_{\phi^* = \phi}) dx_2 dx_3 dt}, \quad (7.3)$$

et

$$\langle \varphi | \phi \rangle_f (\phi, x_1) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \int_0^{L_2} (\rho \varphi(x_1, x_2, x_3, t) |_{\phi^* = \phi}) dx_2 dx_3 dt}{\int_{t_i}^{t_f} \int_0^{L_3} \int_0^{L_2} (\rho(x_1, x_2, x_3, t) |_{\phi^* = \phi}) dx_2 dx_3 dt}, \quad (7.4)$$

où l'espace d'échantillonnage de la moyenne est donné par la variable ϕ . Les relations (7.3)–(7.4) dépendent seulement de la coordonnée longitudinale et de cet espace d'échantillonnage.

La figure 7.14 montre la moyenne conditionnelle du taux de dégagement de chaleur à différentes abscisses ($x_1^* \equiv x_1 / \delta_{\omega,0}$) et pour les deux nombres de Mach convectif retenus. Indépendamment de la valeur de M_c , en amont de la région d'emballement thermique les niveaux de dégagement de chaleur deviennent importants pour des valeurs de la fraction de mélange proches de la plus réactive. Au fur et à mesure que la réaction progresse, *i.e.* pour des valeurs croissantes de la coordonnée longitudinale, les niveaux maximum du dégagement de chaleur s'approchent de z_{st} . La différence fondamentale entre les deux régimes de compressibilité réside dans l'évolution de ces maximum. Ainsi, à $M_c = 0.35$ ce

maximum se produit à des valeurs $z < z_{st}$ tandis qu'à $M_c = 0.70$ le maximum correspond à des valeurs $z \approx z_{st}$. Ces tendances sont également confirmées par la figure 7.10.

La figure 7.15 reporte les moyennes conditionnelles et valeurs rms à différentes abscisses de la température, le taux de dissipation scalaire, le nombre de Damköhler et l'indice de Takeno. La figure 7.15(a) montre que la température moyenne augmente dans le mélange pauvre en combustible et les niveaux maximum se décalent vers des zones où le mélange est plus proche de la stœchiométrie au fur et à mesure que x_1 augmente. Vers le côté oxydant, la température moyenne reste légèrement supérieure à la température d'équilibre, représentée par le trait en pointillé. Ceci est un comportement attendu étant donné la prise en compte d'une loi de diffusion différentielle dans la description détaillée des termes de transport moléculaire et cet effet est souvent mentionné dans la littérature comme un effet de "super-equilibre" [58, 180]. Les profils obtenus pour le taux de dissipation scalaire sont qualitativement similaires à ceux obtenus dans le jet d'hydrogène de Yoo *et al.* [180]. Cependant, les profils présentés ici ont une allure plus ou moins symétrique et, en conséquence, des valeurs du taux de dissipation scalaire notables se trouvent même dans la région $z \lesssim z_{mr}$. Les niveaux rms de χ sont cependant du même ordre de grandeur que les valeurs moyennes (voir figure 7.15(d)), ce qui permet au mélange de s'auto-inflammer si la valeur locale instantanée de χ est suffisamment faible pendant un certain temps [106]. Proche de la région d'auto-ignition, les valeurs maximum de Da apparaissent à des faibles valeurs de la fraction de mélange. Cependant, à $M_c = 0.35$, la présence d'un deuxième pic proche de z_{st} est observable. Ce deuxième pic peut résulter du choix particulier de l'abscisse $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$ au lieu d'une position plus en amont de l'écoulement où l'emballement thermique n'a pas encore eu lieu. Les valeurs maximum de cette quantité se déplacent vers la stœchiométrie proche de la fin du domaine de calcul, avec une réduction considérable d'amplitude. Des valeurs du Da supérieures à l'unité pour $z > z_{mr}$ suggèrent que l'auto-ignition se produit non seulement dans des conditions stœchiométriques, mais aussi dans de mélanges riches en combustible. Ce changement de comportement est aussi caractéristique de la transition de l'auto-inflammation vers une flamme non prémélangée, où le terme de diffusion contrebalance celui de réaction. L'indice de Takeno présente des valeurs très faibles pour $z < z_{st}$. Pour des valeurs de fraction de mélange plus élevées, G_{co} augmente légèrement. A nouveau, les valeurs rms dans cette région deviennent plus significatives et la possibilité d'avoir des valeurs locales instantanées de G_{co} positives augmente.

La figure 7.16 présente les pdfs du taux de dissipation scalaire et du nombre de Damköhler. Ces pdfs sont tracées à de positions transversales où la valeur de la fraction de mélange est égale à la plus réactive et à la stœchiométrie. Des pdfs suivant une loi log-normale ou des pdfs-bêta sont communément employées dans les modèles de combustion à pdf présumée [127, 173]. Les profils des pdfs de la figure 7.16 semblent suivre *a priori* une distribution log-normale. Néanmoins, dans les simulations conduites dans ce travail, les valeurs relevées de variance (ou rms) pour ces deux grandeurs sont relativement importantes comparées aux valeurs moyennes, comme observé dans les figures 7.13(c)–7.13(f). Même si la valeur moyenne de ces quantités est représentative des pdfs correspondantes,

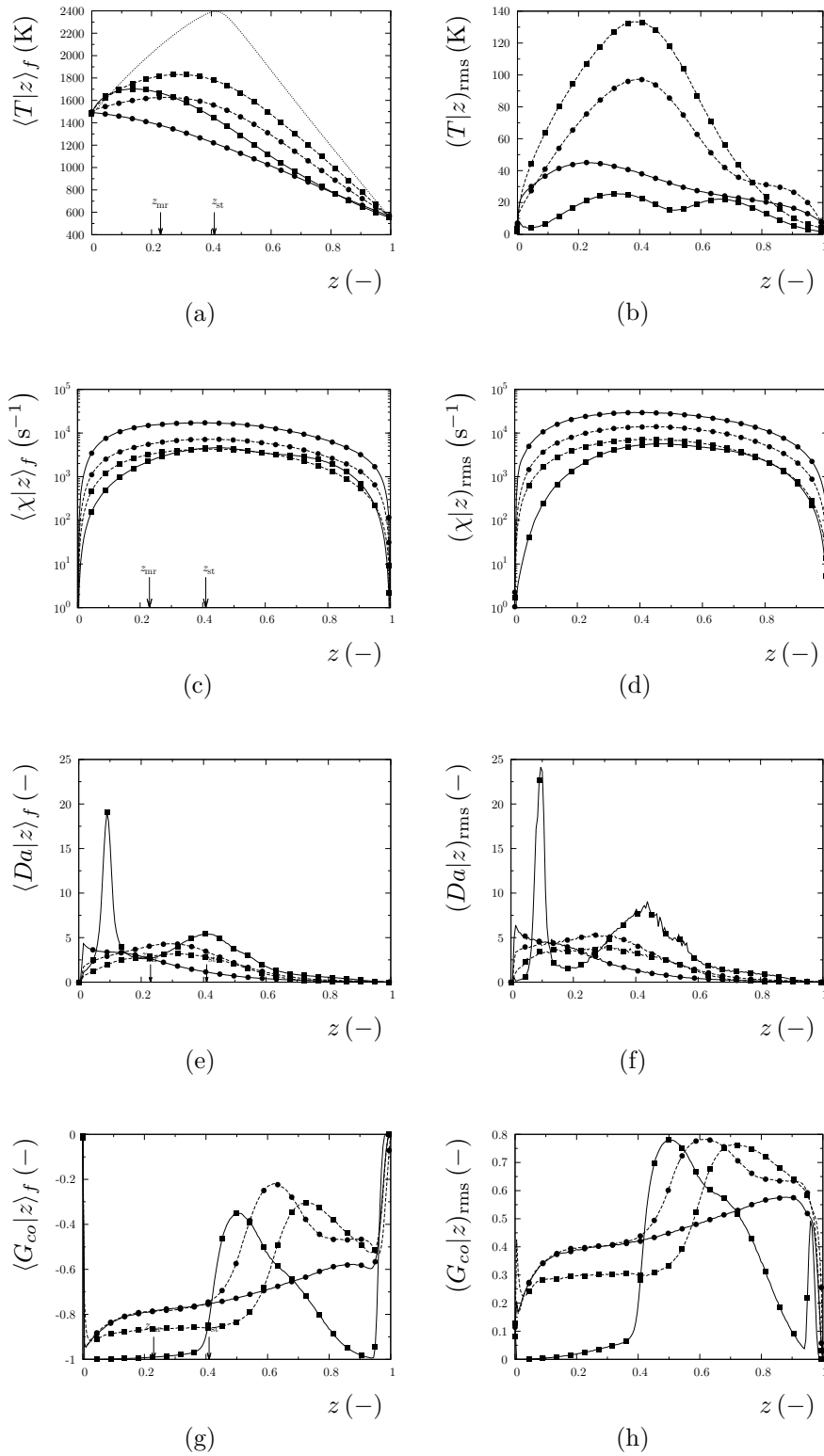


FIGURE 7.15 – Moyenne conditionnelle et valeurs rms pour différentes variables. Cas R-3D-TD-0.35 (■) : $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$ (—) et $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (- -). Cas R-3D-TD-0.70 (●) : $x_1 = 200\delta_{\omega,0}$ (—) et $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (- -).

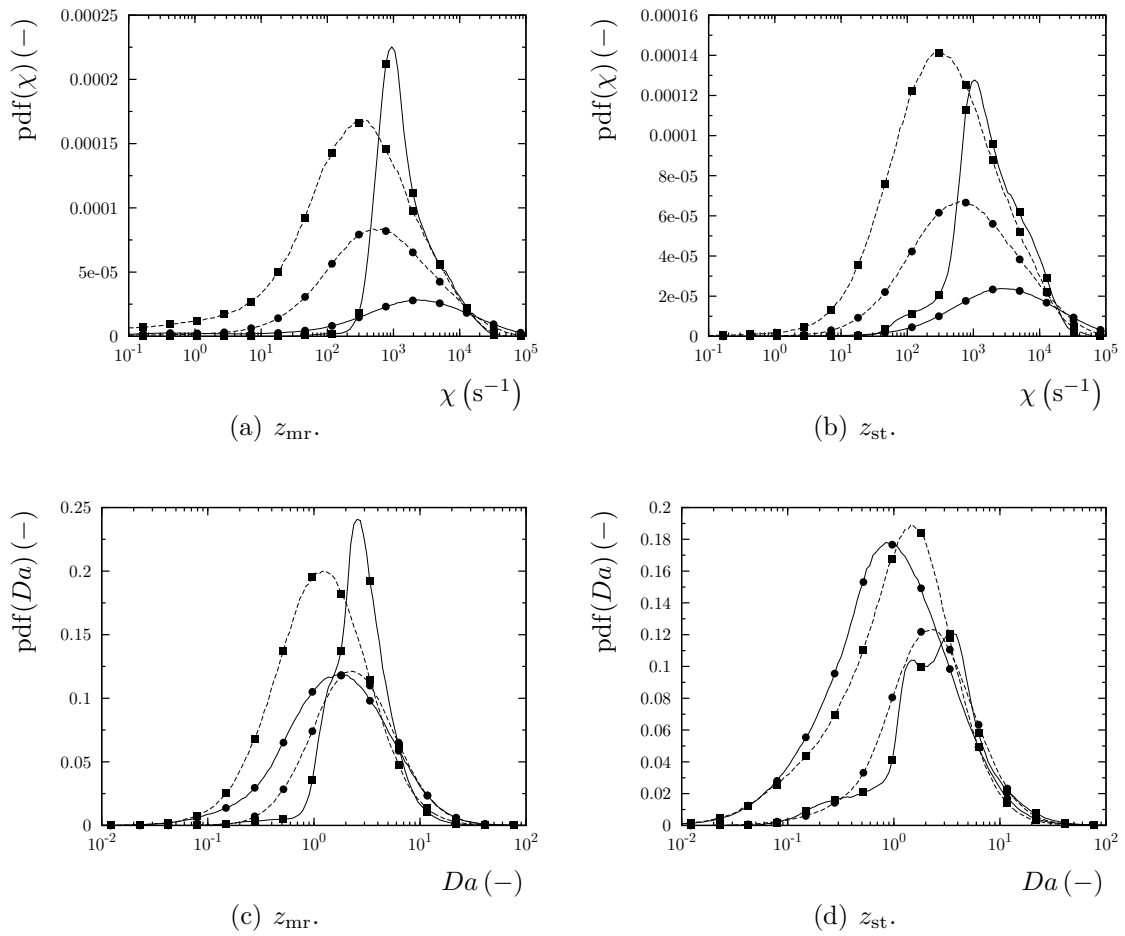


FIGURE 7.16 – Pdfs du taux de dissipation scalaire (a)–(b) et du nombre de Damköhler (c)–(d) pour $\langle z \rangle_f = z_{mr}$ et $\langle z \rangle_f = z_{st}$, respectivement. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.15.

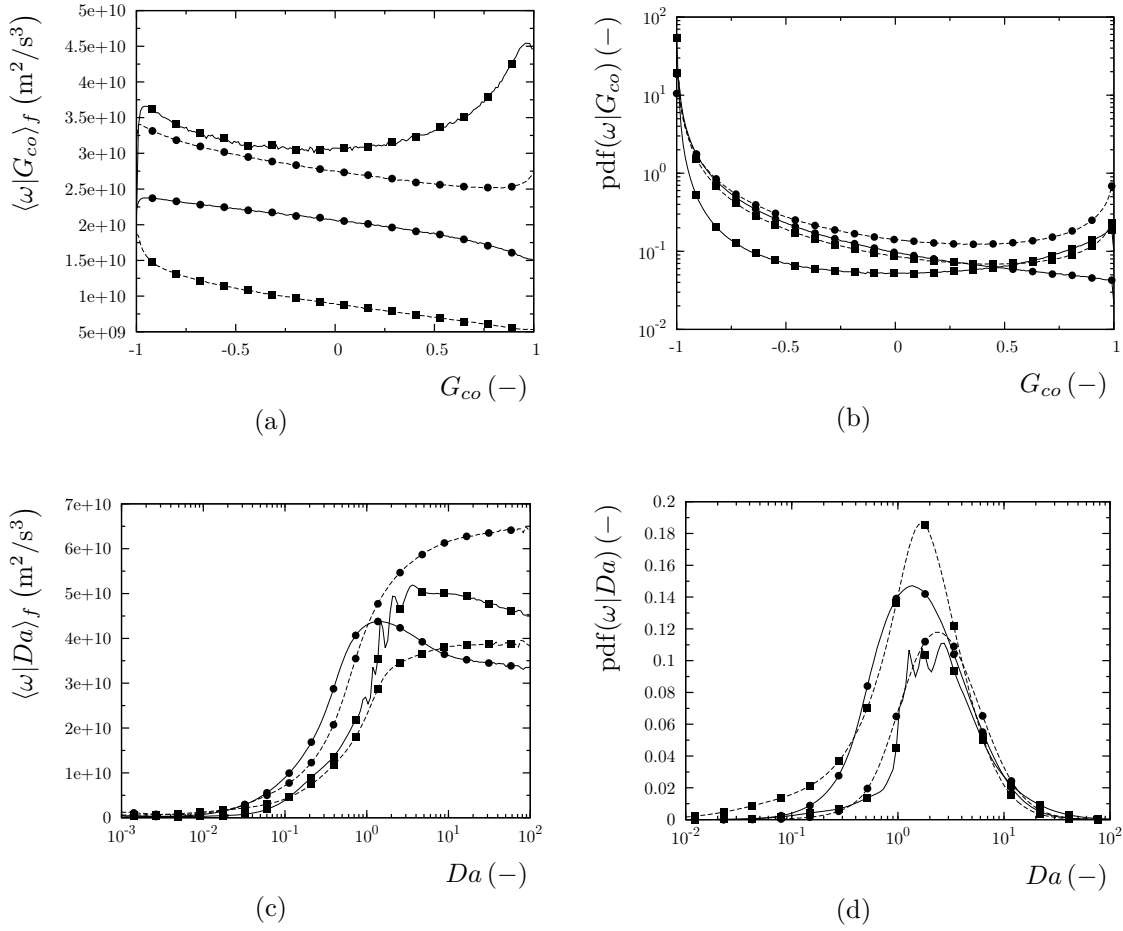


FIGURE 7.17 – Moyennes et pdfs conditionnelles du taux de dégagement de chaleur. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.15.

il n'est pas possible d'approcher ces pdfs par des lois du type log-normale car les niveaux de variance obtenus dans ce type d'écoulements à haute vitesse restent très importants. A la lumière de ces résultats, sur ce type particulier d'écoulements à grandes vitesses les modèles à pdf présumée doivent être revisités pour certaines quantités.

La figure 7.17 montre les moyennes et pdfs du dégagement de chaleur conditionnées à l'indice de Takeno et au nombre de Damköhler. Pour rappel, la pdf de la variable φ conditionnée à la variable ϕ est définie comme

$$\text{pdf}(\varphi|\phi)(\phi, x_1) = \frac{\langle \varphi|\phi \rangle \text{pdf}(\phi)}{\int_{\phi} (\langle \varphi|\phi \rangle \text{pdf}(\phi)) d\phi}. \quad (7.5)$$

En général, la quantité $\langle \omega | G_{co} \rangle_f$ présente ses valeurs maximum quand les gradients sont complètement opposés (voir figure 7.17(a)), puis elle diminue progressivement avec l'indice de Takeno. La pdf conditionnelle reportée sur la figure 7.17(b) montre clairement un mode unique de combustion non prémélangée. Néanmoins, en aval de l'écoulement, la probabilité d'avoir du dégagement de chaleur en mode prémélangé augmente sensiblement. Il peut être attendu qu'une grande partie du dégagement de chaleur soit générée par

une configuration de flamme non prémélangée, et que cette quantité soit limitée par le degré de mélange. La variable $\langle \omega | Da \rangle_f$ permet d'identifier la contribution de l'ignition du mélange au taux de dégagement de chaleur. La figure 7.17(c) montre que cette quantité est assez faible pour $Da \lesssim 0.1$. Pour des valeurs du nombre de Damköhler supérieures, le dégagement de chaleur augmente considérablement, puis s'établit pour $Da \gtrsim 10$. Les profils de $\text{pdf}(\omega | Da)$, reportés sur la figure 7.17(d), montrent que, proche de la zone d'auto-inflammation ($x_1 \approx 100\delta_{\omega,0}$ à $M_c = 0.35$ et $x_1 \approx 200\delta_{\omega,0}$ à $M_c = 0.70$), la plus grande partie du dégagement de chaleur se produit quand $Da \gtrsim 1$.

Les résultats présentés dans cette section confirment que l'auto-ignition de l'écoulement a lieu principalement dans des régions où les gradients de combustible et d'oxydant sont opposés, dans des mélanges pauvres où la fraction de mélange est proche, mais légèrement plus petite, que la fraction de mélange la plus réactive issue d'un calcul PSR. Il peut être conclu que, pour les DNS réalisées dans ce travail, l'auto-ignition de l'écoulement et la structure de flamme dépendent de la compétition entre le degré de mélange de combustible et d'oxydant et le délai d'auto-inflammation, caractéristique d'un comportement associé à des flammes non prémélangées. En outre, l'étude des fonctions de densité de probabilité de certaines variables d'intérêt pour la combustion a permis de constater que, pour ce type d'écoulement à haute vitesse, elles ne suivent pas nécessairement des distributions de type log-normale qui sont souvent pourtant retenues dans les modèles de combustion à pdf présumées.

7.5 Structure des couches de mélange

7.5.1 $M_c = 0.35$

La figure 7.18 montre l'enroulement des tourbillons à l'aide des isocontours de critère λ_2 . La forme des structures entrelacées donnant lieu à la transition de la couche de mélange reste en générale très similaire à celle du cas inerte. Cependant cette zone de transition augmente légèrement en conséquence du dégagement de chaleur. Un autre effet provoqué par le dégagement de chaleur est la diminution de l'activité tourbillonnaire après la transition. Cette diminution permet de distinguer entre rouleaux et tresses, qui se succèdent de manière régulière dans la direction de l'écoulement. Elle peut être même appréciée par la biais de la taille des rouleaux, qui augmente légèrement, tandis que celle des tresses reste plus ou moins constante.

La figure 7.18 montre l'évolution de la température dans différents plans x_2 - x_3 . En $x_1 = 100\delta_{\omega,0}$, le champ de température est très diffusé à cause du dégagement de chaleur et une zone à haute température se situe dans le côté oxydant, marquant le début de l'inflammation de la couche de mélange. Le fort dégagement de chaleur empêche les instabilités de se développer comme dans le cas inerte et, en $x_1 = 200\delta_{\omega,0}$, elles croissent de manière cohérente. La comparaison de la figure 6.8(b), correspondant au cas I-3D-TD-0.35, et la figure 7.19(b), du cas R-3D-TD-0.35, met en évidence une croissance des instabilités différente en présence de dégagement de chaleur. Avec le type de perturba-

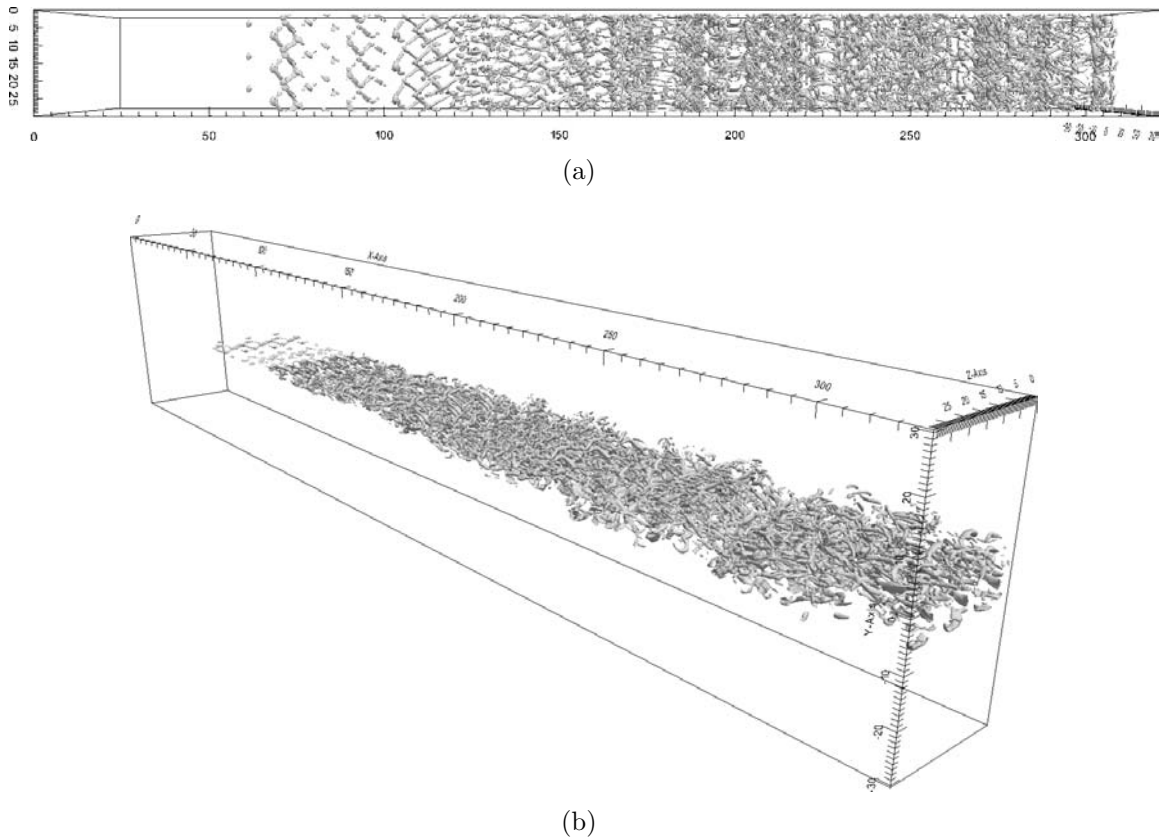


FIGURE 7.18 – Cas R-3D-TD-0.35. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.

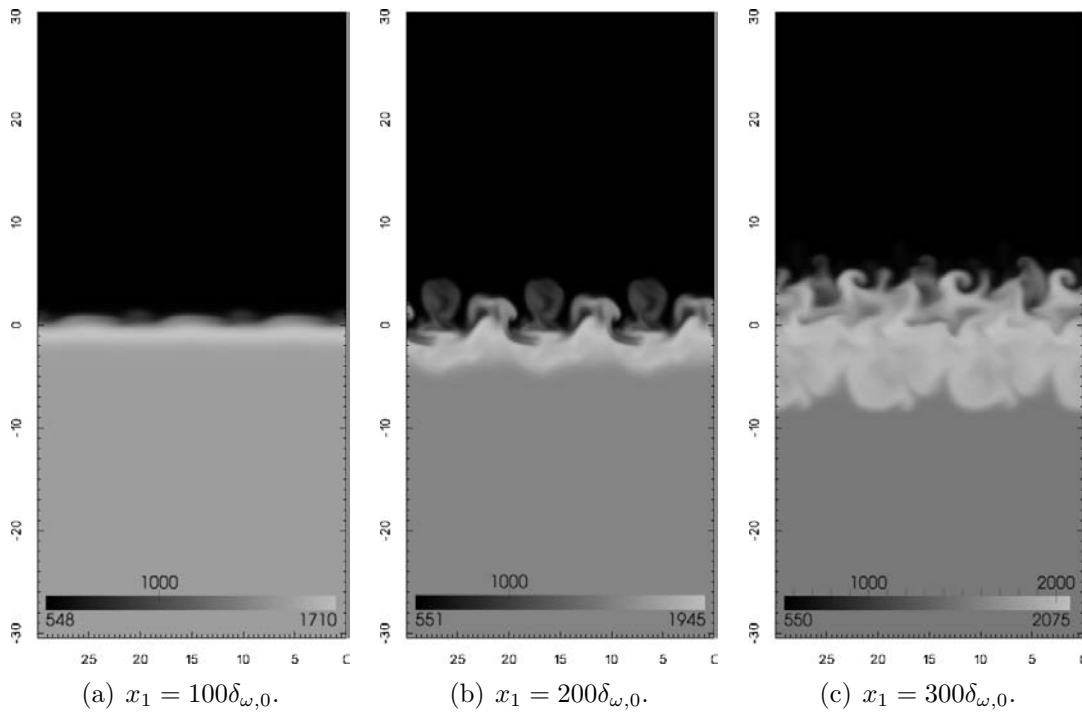


FIGURE 7.19 – Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

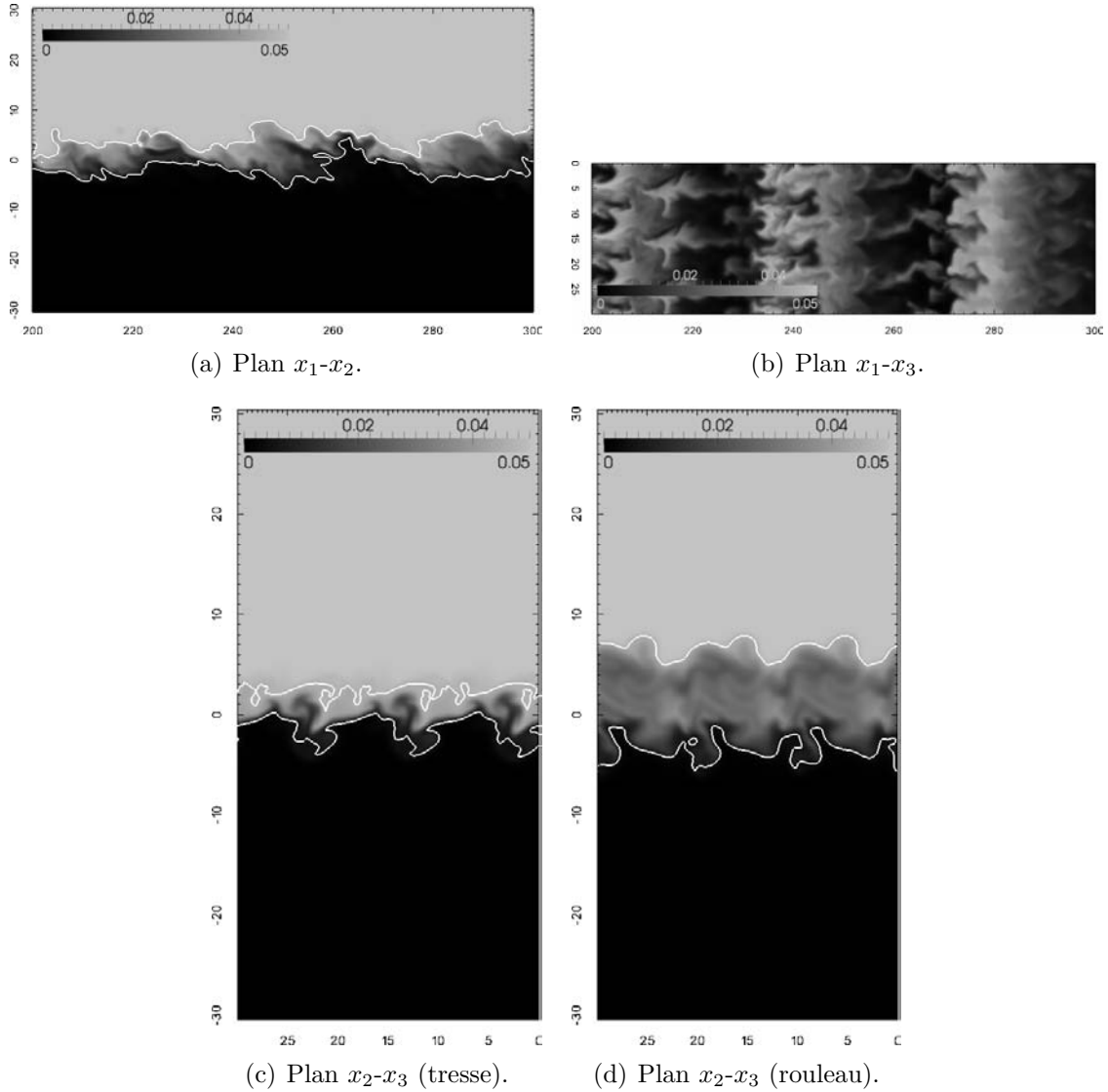


FIGURE 7.20 – Cas R-3D-TD-0.35. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{H_2} = 0.005$ et $Y_{H_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).

tion choisi, *i.e.* bruit blanc à très basse amplitude, le dégagement de chaleur inhibe le développement tridimensionnel des instabilités et favorise l’émergence de modes fortement bidimensionnels de longueur d’onde plus grande. Cet effet s’amplifie en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$, ce qui explique l’apparition d’un pic dans les courbes de corrélations en deux points. En effet, ce pic de corrélation n’est pas dû à une largeur du domaine assez courte, mais à ce lien entre les instabilités et le dégagement de chaleur. Ces figures montrent qu’au fur et à mesure que l’écoulement progresse, la température de l’écoulement augmente ainsi que la région enflammée. Cette zone correspond entièrement à la couche de mélange. L’extension de cette région en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ est similaire à celle de la couche de mélange inerte.

La figure 7.20 montre la distribution instantanée de la fraction massique d’hydrogène dans différents plans de l’espace. Les champs instantanés sont plus diffusés que dans le cas inerte suite au dégagement de chaleur. La figure 7.20(b) révèle une diminution importante

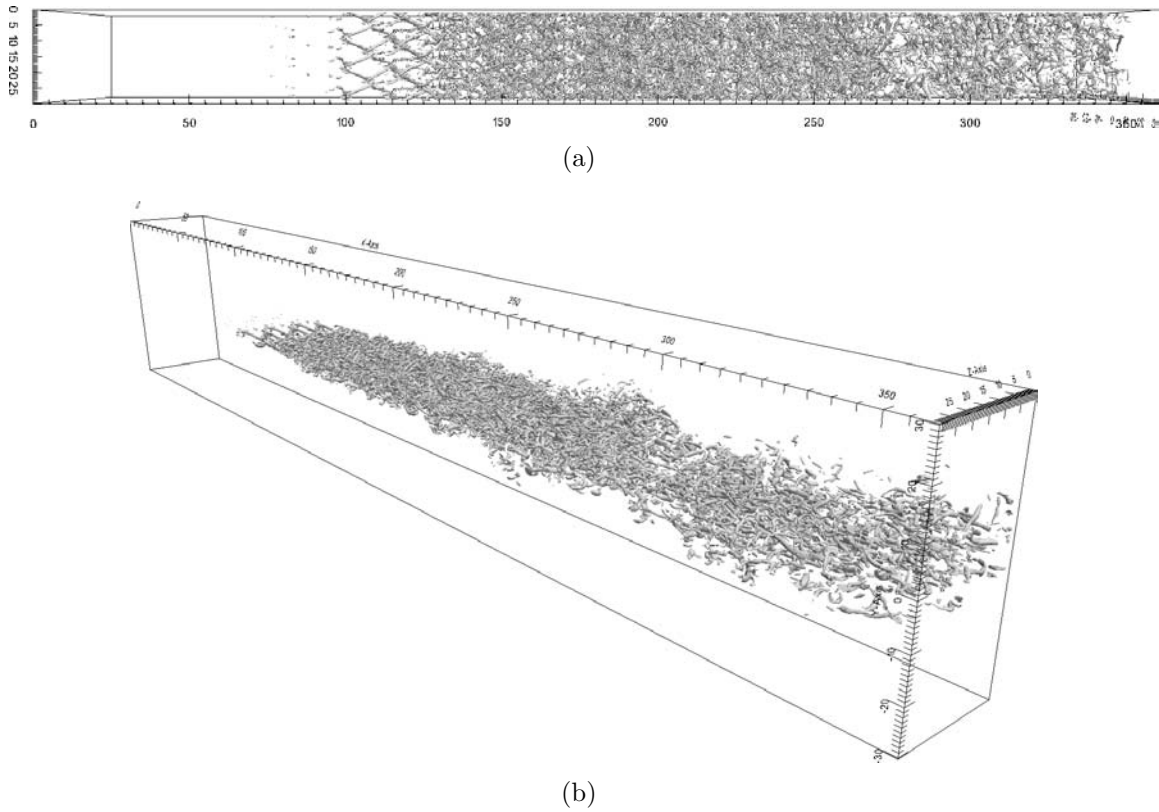


FIGURE 7.21 – Cas R-3D-TD-0.70. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.

de cette quantité sur le plan x_1 - x_3 dû à sa consommation dans les réactions chimiques. Les figures 7.20(c)–(d) montrent des plans x_2 - x_3 appartenant à une tresse et à un rouleau, respectivement.

7.5.2 $M_c = 0.70$

La figure 7.21 montre l'enroulement des tourbillons à l'aide des isocontours de critère λ_2 pour le cas R-3D-TD-0.70. A différence du cas inerte équivalent (figure 6.10), les structures entrelacées de la zone de transition sont légèrement étirées dans la direction longitudinale. De plus, il semble que cette transition s'achève plus graduellement dans le cas réactif, à environ $x_1 = 135\delta_{\omega,0}$. La présence de tourbillons diminue aussi dans le cas réactif. Ceci est particulièrement vrai vers la fin de la couche de mélange. La figure 7.21 montre une diminution significative de l'activité tourbillonnaire à cet endroit.

La figure 7.22 montre la distribution instantanée de température dans différents plans x_2 - x_3 . En $x_1 = 115\delta_{\omega,0}$, la forme des perturbations introduites en amont reste très similaire à celle du cas inerte car l'auto-inflammation n'a pas eu lieu à cette abscisse. Comme le développement initial des perturbations n'est pas affecté par la présence du dégagement de chaleur, elles peuvent continuer à se développer de manière tridimensionnelle comme dans les couches de mélange inertes. En $x_1 = 230\delta_{\omega,0}$, la structure du champ de température présente une forme très désorganisée et n'est pas encore affectée par le dégagement de chaleur car la température maximale est de seulement 1572 K. En $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ s'apprécie

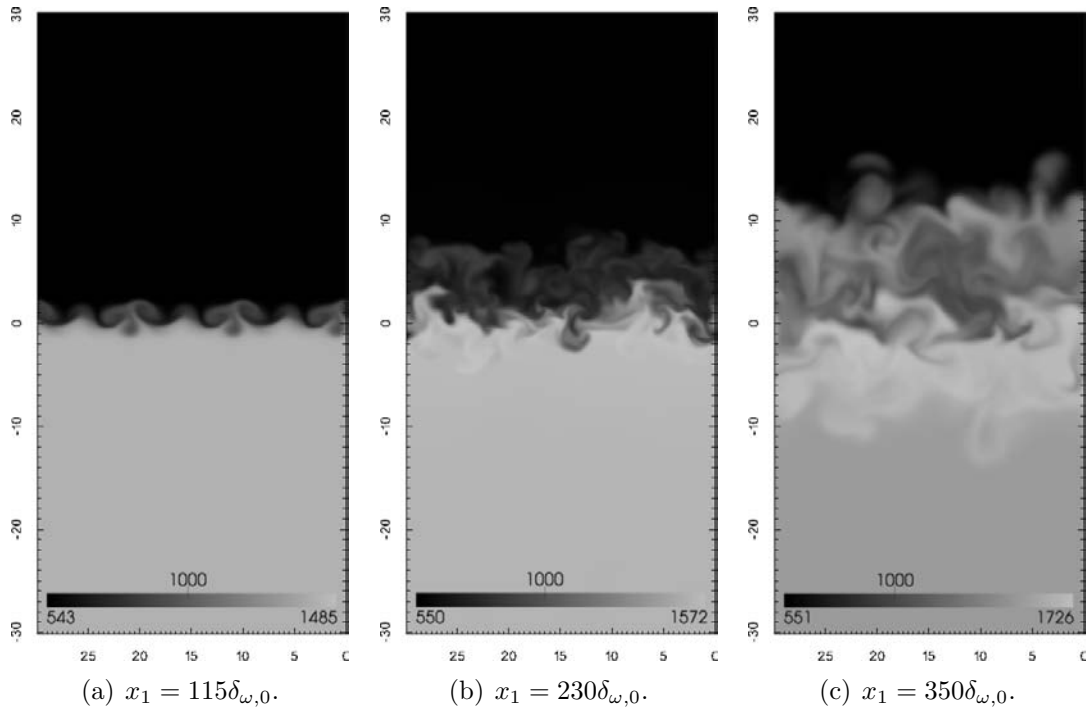


FIGURE 7.22 – Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

une région à haute température en dessus du courant d'oxydant. Cette région est à une température d'environ 1726 K et n'englobe pas toute la couche de mélange, mais seulement la partie pauvre en combustible (voir figures 7.23(c)–(d)). Les résultats obtenus à deux nombres de Mach convectif montrent une combustion différente dans chaque régime. Ainsi, dans le premier régime s'obtient une combustion entretenue avec une couche de mélange réactive enflammée dans sa totalité. L'auto-inflammation dans ce cas se produit très proche de l'injection des deux courants. Cependant, dans le régime le plus compressible, l'auto-inflammation se produit très en aval de l'injection et donne lieu à une couche de mélange réactive partiellement enflammée. Il s'agit d'une combustion de caractère intermittente avec des inflammations et extinctions ayant lieu vers la fin du domaine de calcul. Ces conclusions sont supportées aussi par les vidéos qui résultent des simulations. Par extrapolation et en suivant les conclusions obtenues dans la section 7.4, il est naturel que dans un régime encore plus compressible, *e.g.* $M_c = 1.10$, l'auto-inflammation de la couche de mélange ne puisse pas se produire dans le domaine de calcul qui a pu être retenu.

La figure 7.23 montre la distribution instantanée de la fraction massique d'hydrogène dans différents plans de l'espace. La figure 7.23(a) montre la dominance des grandes échelles dans l'écoulement. Dans ces conditions de compressibilité et de dégagement de chaleur, il est encore possible de faire la distinction entre tresses (figure 7.23(c)) et rouleaux (figure 7.23(d)), contrairement à ce qui a été reporté dans [100]. Les structures des couches de mélange réactives conduites avec une chimie infiniment rapide de Mahle [100] montrent une structure fortement laminarisée assez différente des structures montrées ci-dessus.

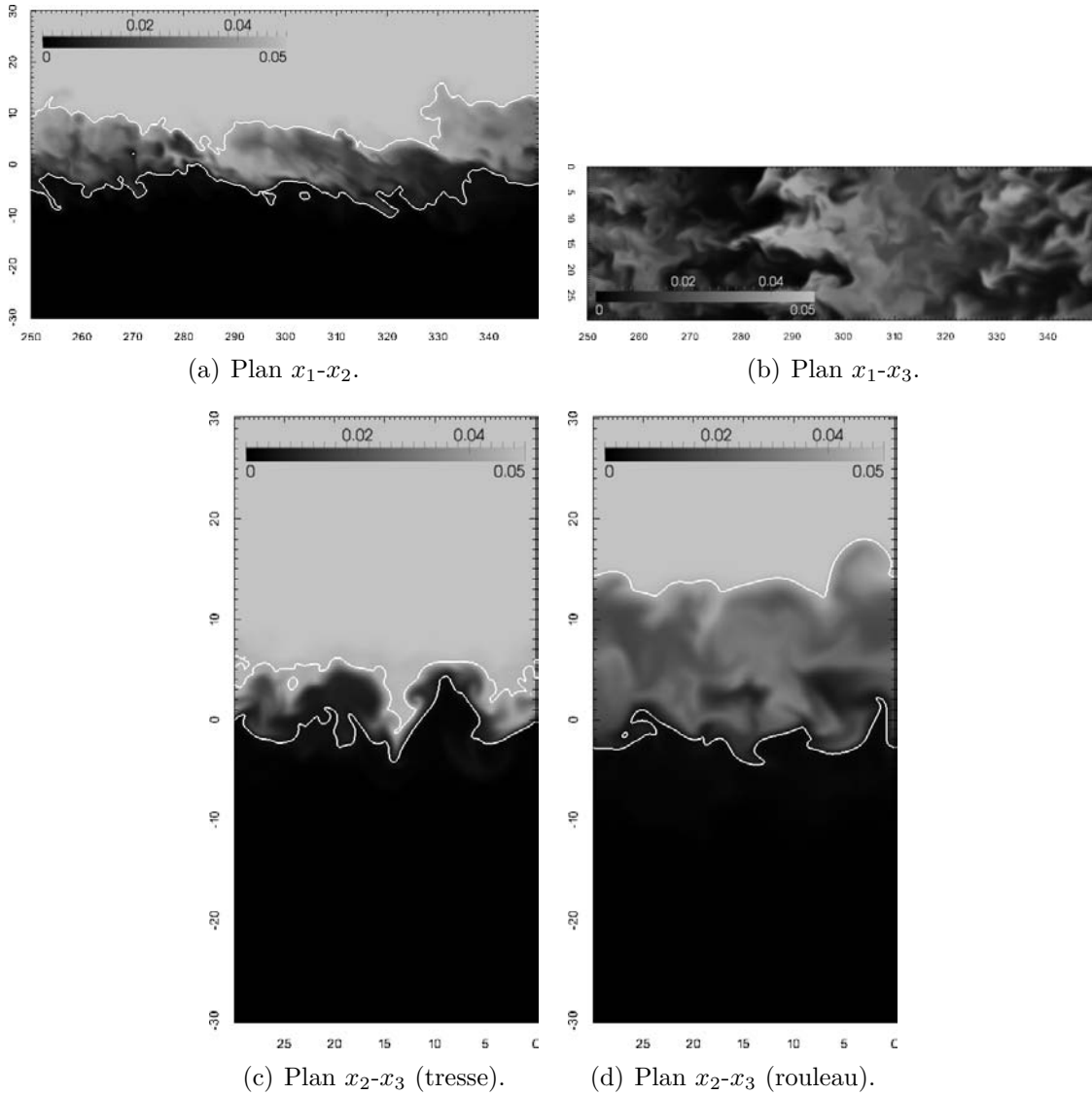
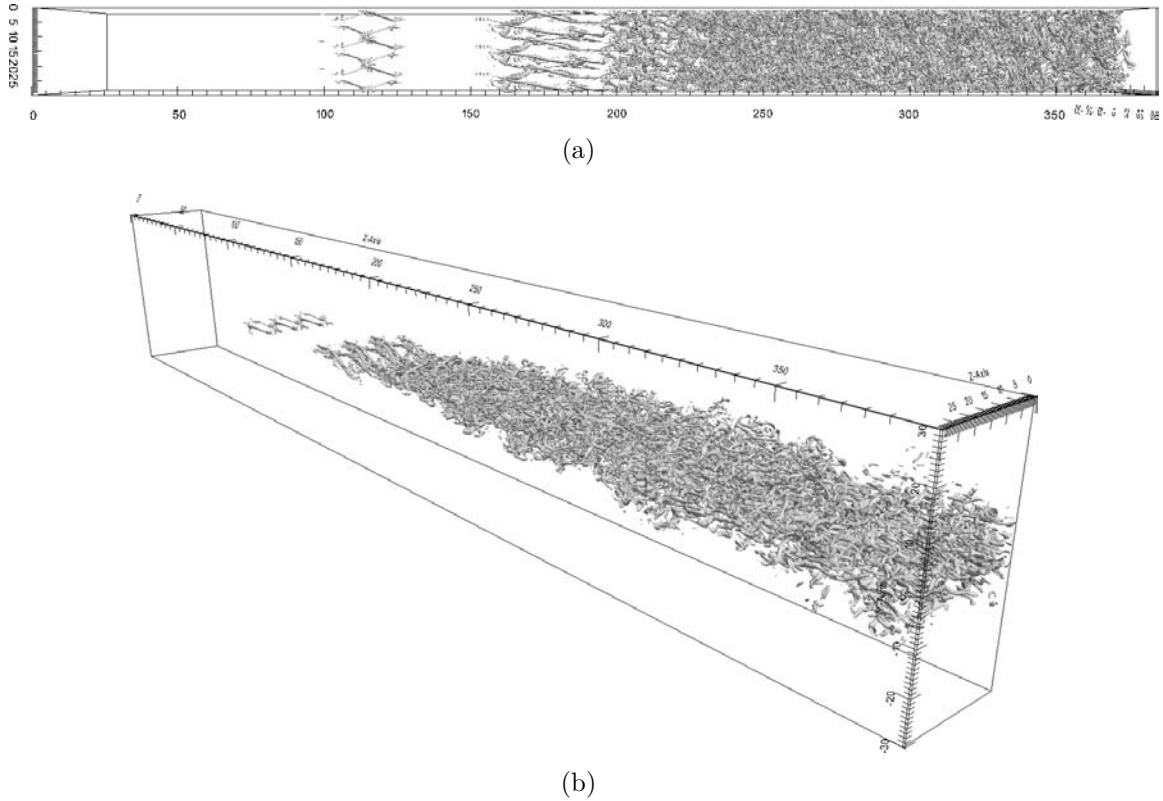


FIGURE 7.23 – Cas R-3D-TD-0.70. Champs instantanés de fraction massique d’hydrogène correspondant à plusieurs plans. Isolignes $Y_{\text{H}_2} = 0.005$ et $Y_{\text{H}_2} = 0.045$ dans les figures (a), (c) et (d).

FIGURE 7.24 – Cas I-3D-TS-1.10. Isocontours $\lambda_2 = 0.01\lambda_{2,\min}$.

Cependant, elles restent assez proches de celles observées dans les simulations bidimensionnelles des couches de mélange réactives conduites avec une chimie globale, telles que celles reportées dans les figures 5.16(e)–5.16(f).

7.5.3 $M_c = 1.10$

La figure 7.24 montre une transition équivalente à celle du cas inerte. En $x_1 \approx 100\delta_{\omega,0}$, des structures entrelacées très étirées dans la direction longitudinale apparaissent momentanément pour ensuite disparaître dû à la valeur introduite pour tracer les isocontours. La transition ne s'effectue qu'aux alentours de $x_1 = 155\delta_{\omega,0}$ donnant naissance à des petites tourbillons en $x_1 \approx 200\delta_{\omega,0}$. Les vidéos des simulations ont montré qu'à ce régime de compressibilité la zone de transition de la couche de mélange peut être repoussée vers l'aval significativement pour ensuite remonter vers l'amont. Ceci peut expliquer le décalage de la zone de transition entre le cas inerte et réactif ($\Delta x_1 \approx 30\delta_{\omega,0}$), mesuré à partir d'un seul champ instantané.

La figure 7.25 montre la distribution instantanée de température dans différents plans x_2 - x_3 . La structure reste assez similaire à celle de la simulation I-3D-TS-110. Les niveaux de température sont du même ordre de grandeur que ceux du cas inerte, ce qui signifie que le dégagement de chaleur est tout à fait négligeable, même vers la fin du domaine de calcul.

La figure 7.26 montre les champs instantanés du dégagement de chaleur (2.26) pour les

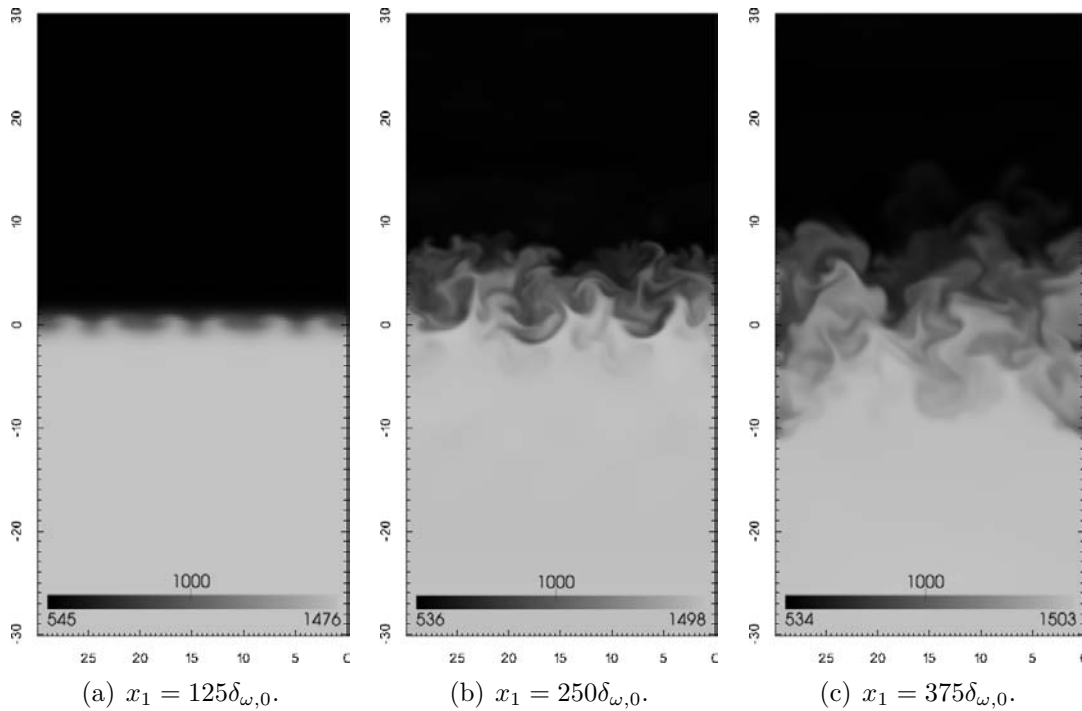


FIGURE 7.25 – Cas I-3D-TS-1.10. Champs instantanés de température correspondant à des plans x_2 - x_3 situés à différentes abscisses. Unités SI.

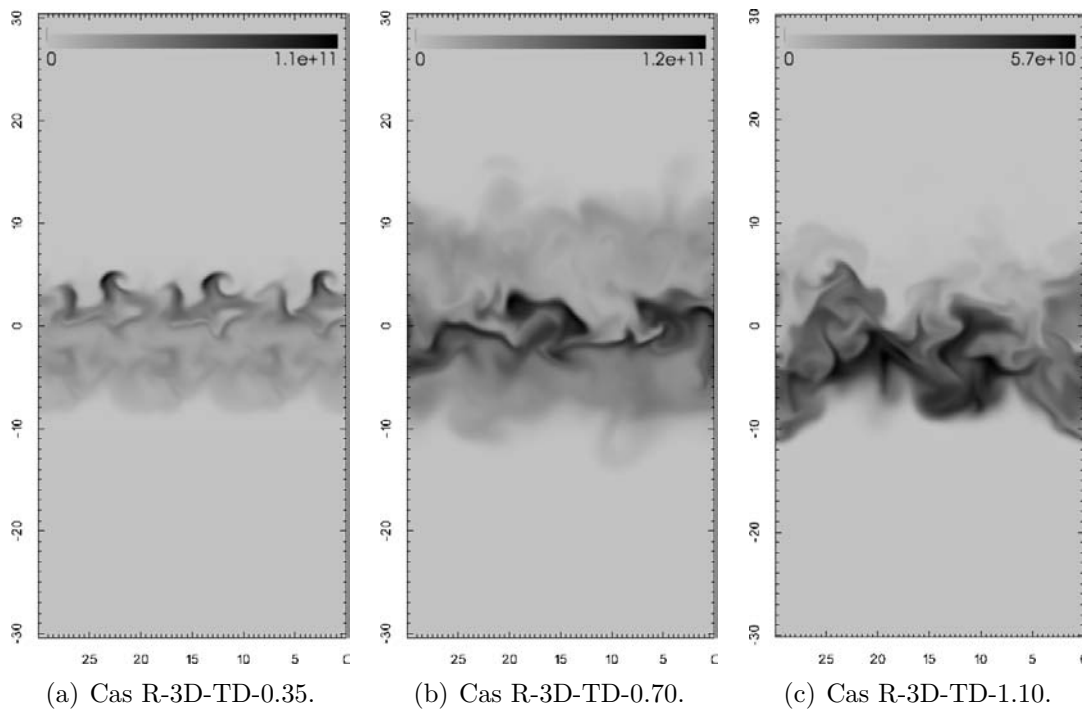


FIGURE 7.26 – Champs instantanés de taux de dégagement de chaleur correspondant à différents plans x_2 - x_3 situés à $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.35), $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.70) et $x_1 = 375\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-1.10). Unités SI.

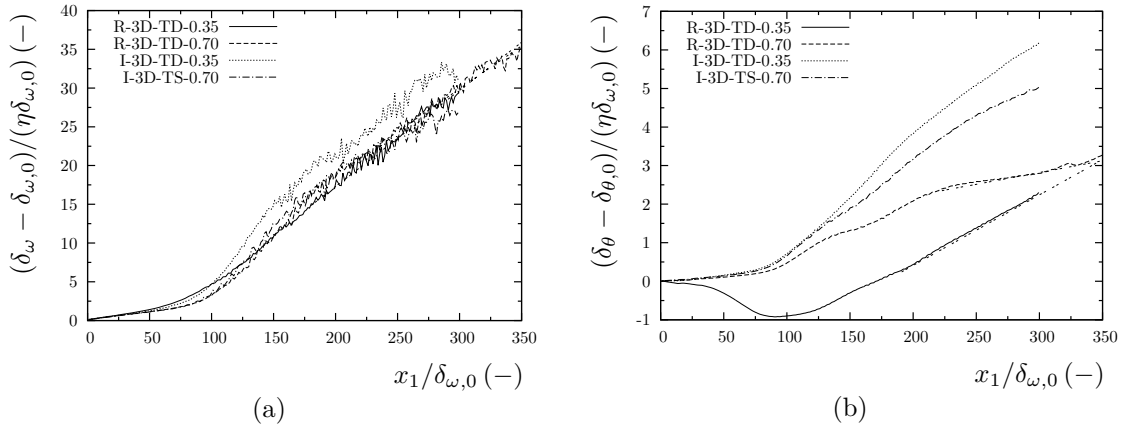


FIGURE 7.27 – Evolution spatiale des  paisseurs normalis es de vorticit  (a) et de quantit  de mouvement (b).

trois simulations r actives. L'allure des champs est assez diff erente pour chaque r egime de compressibilit . A $M_c = 0.35$, cette quantit  devient maximale pour des valeurs positives de l'axe des ordonn es, entre la couche de m lange et l' coulement de combustible. En dessous, dans la r egion o  la temp rature est plus  lev e (voir figure 7.19(c)), les niveaux de cette quantit  diminuent. A $M_c = 0.70$, la r egion avec le taux de d gagement de chaleur maximum oscille autour de $x_2 = 0$, entour e par des r egions o  cette quantit  s'affaiblit. Le c t  pauvre en combustible pr esente des niveaux sup rieurs de cette quantit  compar s   ceux de l' coulement pauvre en oxydant. A ces deux premiers r egimes de compressibilit , les r egions o  le taux de d gagement de chaleur devient maximum ($\dot{\omega}_0 \approx 10^{11} \text{ m}^2/\text{s}^3$) sont relativement minces. A $M_c = 1.10$, le champ instantan  de cette grandeur devient plus  pais avec une distribution des niveaux plus homog ne. Cependant, les valeurs maximales atteintes de d gagement de chaleur sont inf rieures en comparaison des autres cas r actifs o  l'auto-inflammation se produit. La valeur maximale de d gagement de chaleur dans tout le domaine de calcul est  quivalente pour les cas R-3D-TD-0.35 et R-3D-TD-0.70, et elle est deux fois sup rieure   celle de la simulation R-3D-TD-1.10. La valeur de ce rapport est aussi confirm e par la figure 7.26.

TABLEAU 7.3 – Caract risation des couches de m lange tridimensionnelles r actives. Les nombres de Reynolds et les  chelles caract ristiques sont calcul s en $x_1 = 300\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.35) et $x_1 = 350\delta_{\omega,0}$ (cas R-3D-TD-0.70), au centre du domaine de calcul.

Cas	$\eta^{-1}d\delta_\omega/dx_1$	$\delta'_\omega/\delta'_{\omega,i}$	Re_ω	Re_λ	$L_\eta/\Delta x$	$L_\lambda/\Delta x$
R-3D-TD-0.35	0.124	0.75	5936	75	0.60	7.90
R-3D-TD-0.70	0.110	0.66	10383	92	0.63	9.10

7.6 Etat d'autosimilarité

La figure 7.27 montre l'évolution des épaisseurs de vorticit  et de quantit  de mouvement normalis es, pour les simulations r actives et inertes. A $M_c = 0.35$, le taux de croissance de l' paisseur de vorticit  diminue l g rement par rapport au cas inerte en cons quence du d gagement de chaleur. Cependant, pour un nombre de Mach convectif plus  lev e, *i.e.* $M_c = 0.70$, les taux de croissance des simulations inertes et r actives se confondent dans le graphique. Le tableau 7.3 montre les valeurs des pentes qui correspondent aux taux de croissance, obtenus par r gression lin aire sur la zone autosimilaire. Pour le r gime de compressibilit  le plus bas, la d croissance de la couche de m lange est de 2% par rapport au cas inerte. Cependant la couche de m lange voit augmenter son taux de croissance d'environ 22% en pr sence de d gagement de chaleur. N anmoins, ces valeurs sont sujettes   des variations significatives en fonction de la r gion consid r e pour effectuer la r gression lin aire. Ainsi, la conclusion la plus prudente qui peut  tre tir e   partir des r sultats du tableau 7.3 et les courbes montr es dans la figure 7.27(a) est que les taux de croissance des couches r actives ne sont pas notablement affect s par le d gagement de chaleur : ce taux peut subir une l g re diminution et, dans certains cas, une augmentation. Ces r sultats diff rent de ceux issus de pr c dentes simulations num riques directes de couches de m lange r actives [100, 101, 107]. Dans ces simulations, les auteurs utilisent des simplifications pour la cin tique chimique et le transport mol culaire. Les effets provoqu s par le d gagement de chaleur en utilisant l'approximation de Burke & Schumann [23]  taient largement surestim s, comme c' tait le cas des simulations bidimensionnelles r actives conduites avec une chimie globale. Par exemple, le rapport entre le taux de croissance inerte et r actif des simulations de Mahle *et al.* [101] est sup rieur   3, une valeur significativement plus grande que celle obtenue dans ce travail. Les r sultats obtenus ici concernant le taux de croissance semblent  tre plus en accord avec les  tudes exp rimentales [72, 73, 110] mais aussi avec certains r sultats num riques [160]. Hermanson [72] a constat  une l g re r duction du taux de croissance avec le d gagement de chaleur tandis que Miller *et al.* [110] ont trouv  des valeurs de cette quantit  similaires   celles des cas inertes. Comme annonc , les observations de Hermanson & Dimotakis [73] se confirment car les diff rences entre les niveaux des contraintes du tenseur de Reynolds sont du m me ordre de grandeur que les diff rences entre les taux de croissance pour les cas r actifs et inertes. En outre, la simulation r alis e par Stoukov *et al.* [160], conduite avec une description d taill e de la cin tique chimique, pr sentait une augmentation de l'ouverture de la couche de m lange par rapport au cas inerte. Enfin, le d gagement de chaleur ne semblait pas influencer non plus le d but de la transition de la couche, qui se produit aux m mes endroits que dans les cas inertes.

La figure 7.27(b) montre l' volution spatiale de l' paisseur de quantit  de mouvement pour les simulations r actives et inertes. Comme discut  dans la section 5.6.2, dans les couches de m lange spatiales et r actives cette quantit  n' volue pas de mani re monotone avec la direction de l' coulement moyen et ne peut pas  tre utilis e pour tracer des quantit s autosimilaires. De plus, l' volution des ces quantit s semble contradictoire par

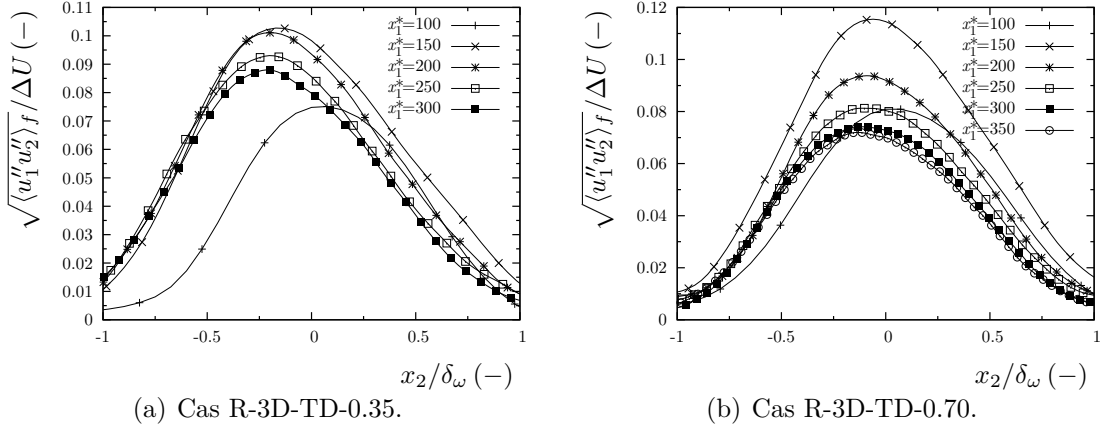


FIGURE 7.28 – Profils de vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} à différentes abscisses.

rapport à celle de l'épaisseur de vortacité. Une explication à ce comportement est donné dans la section 7.7.1. Dans la suite, l'épaisseur de vortacité sera utilisée pour tracer les profils autosimilaires.

Le tableau 7.3 présente aussi les valeurs du nombre de Reynolds (5.9) obtenus vers la fin du domaine de calcul. Les nombres de Reynolds des simulations réactives sont en parfait accord avec l'évolution de l'épaisseur de vortacité. La valeur de Re_ω du cas R-3D-TD-0.35 est inférieure à celle du cas inerte au même nombre de Mach convectif tandis que la valeur correspondante à la simulation R-3D-TD-0.70 est supérieure à la valeur du cas inerte. Les nombres de Reynolds basés sur la micro-échelle de Taylor (6.9) restent inférieurs dans les simulations réactives avec un diminution d'environ 22%. Cette diminution est attribuée à l'augmentation de la viscosité cinématique des couches de mélange réactives. Ces valeurs sont en parfait accord avec les simulations de Pantano *et al.* [124], mais différent des simulations de Mahle [100]. Encore une fois, la différence observée avec cette référence peut s'expliquer par les niveaux différents de dégagement de chaleur considérés dans [100, 124]. Enfin, les valeurs correspondant à l'échelle de Kolmogorov permettent de vérifier que le maillage du domaine de calcul est suffisamment fin pour conduire la DNS.

La figure 7.28 montre les profils des vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} en fonction de l'abscisse normalisée $x_1^* \equiv x_1/\delta_{\omega,0}$. Les profils correspondant aux dernières abscisses sont très proches entre eux, vérifiant l'obtention d'un état de similarité. Cette vérification peut être aussi réalisée pour les profils des espèces. La figure 7.29 montre les profils rms de la fraction massique d'azote pour les deux régimes de compressibilité retenus. Ces résultats confirment à nouveau que l'autosimilarité des solutions est atteinte.

La comparaison des taux de croissance normalisés des couches de mélange réactives et inertes avec d'autres travaux expérimentaux et numériques [32, 35, 37, 55, 66] est montrée dans la figure 7.30. La valeur de l'épaisseur de vortacité incompressible est fixée à 0.166 pour le cas inerte mais aussi pour le réactif. Cette normalisation est certes ici tout à fait discutable pour le cas réactif car la valeur de référence $\delta'_{\omega,i}$ doit correspondre à une

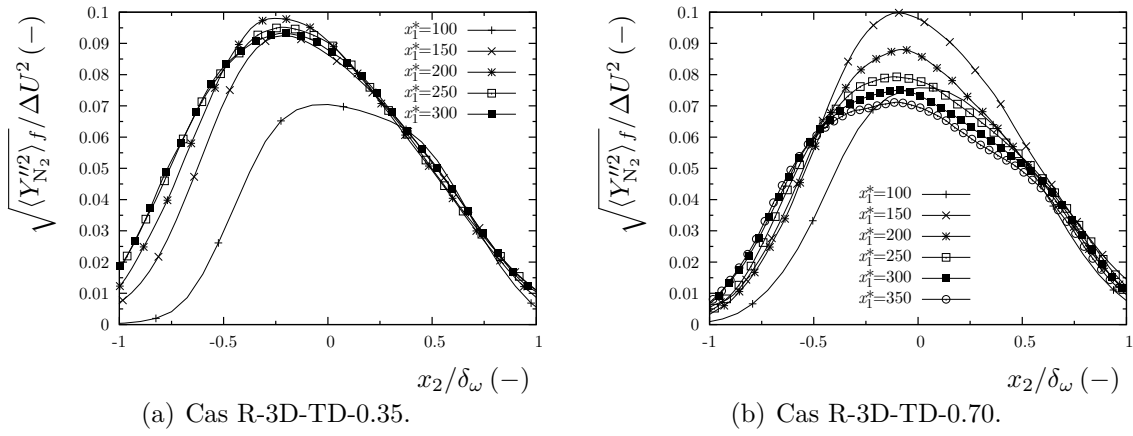


FIGURE 7.29 – Profils de vitesses rms déduites de la contrainte de Reynolds R_{12} à différentes abscisses.

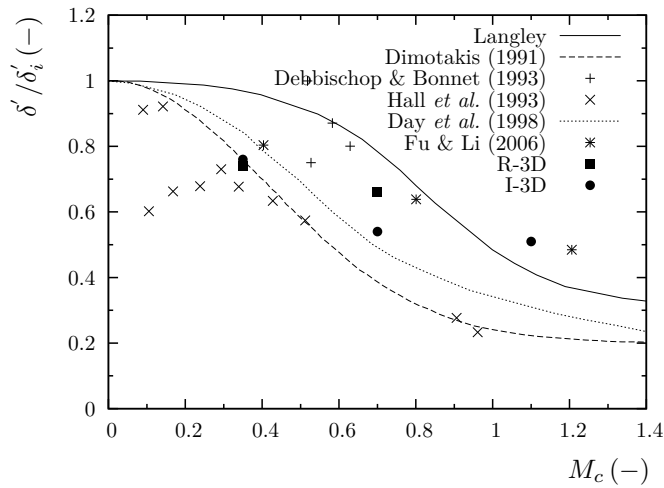


FIGURE 7.30 – Taux de croissance normalisés en fonction du nombre de Mach convectif pour différentes simulations et études expérimentales.

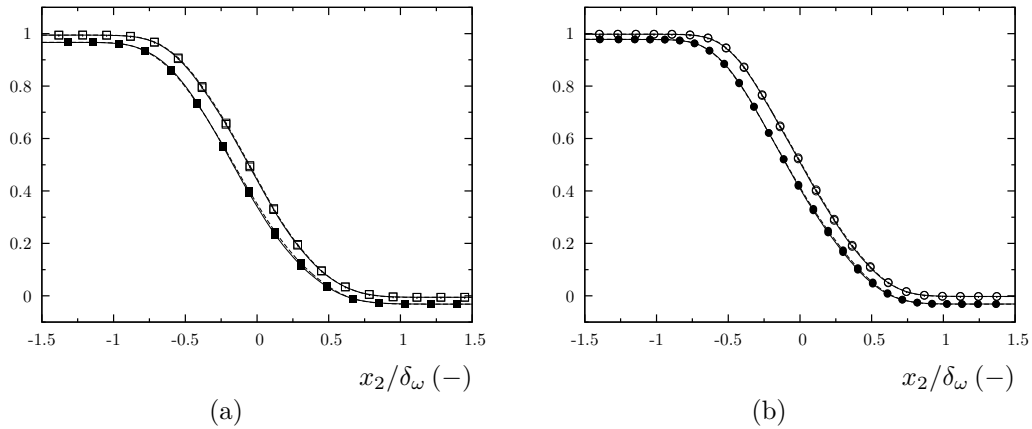


FIGURE 7.31 – Profils de vitesse longitudinale normalisée moyennée au sens de Favre (—) et de Reynolds (- -) pour $M_c = 0.35$ (a) et $M_c = 0.70$ (b). Cas R-3D-TD-0.35 (■), R-3D-TD-0.70 (●), I-3D-TD-0.35 (□) et I-3D-TS-0.70 (○).

couche de mélange incompressible *réactive*. Or, une telle couche de mélange n'a pas pu être simulée pour des raisons de coûts de calcul.

7.7 Effet de la compressibilité et du dégagement de chaleur sur la turbulence

7.7.1 Variables moyennes

La figure 7.31 montre les profils de vitesse longitudinale moyenne au sens de Favre et Reynolds. Des différences peuvent être attendues entre les deux moyennes dues à la compressibilité (variations de pression thermodynamique) et le dégagement de chaleur. Cependant, cette figure montre que ces différences restent limitées pour chaque régime de compressibilité. Cette conclusion est en accord avec d'autres DNS portant sur des couches de mélange temporelles réactives [100, 124]. Contrairement à ces simulations temporelles, dans le développement spatial de la couche de mélange il existe une réduction de la vitesse entre les cas réactif et inerte. Comme mentionné, cette différence est plus marquée en dehors de la couche de mélange, dans chacun des écoulements parallèles, où le niveau maximum de la vitesse normalisée est sensiblement inférieur à 1 et, le minimum, inférieur à 0.

La figure 7.32 montre les profils moyens normalisés des principales variables thermodynamiques qui interviennent dans la loi d'état. Le masse volumique moyenne (figure 7.32(a)) et la température moyenne (figure 7.32(b)) montrent l'influence du taux de dégagement de chaleur qui conduit à un minimum de masse volumique et un maximum de température. L'endroit où se positionnent ces valeurs maximales et minimales est légèrement décalé vers l'écoulement d'oxydant. Ce résultat se différencie des observations de Mahle [100] sur des couches réactives conduites sous l'hypothèse de chimie infiniment rapide. Les ré-

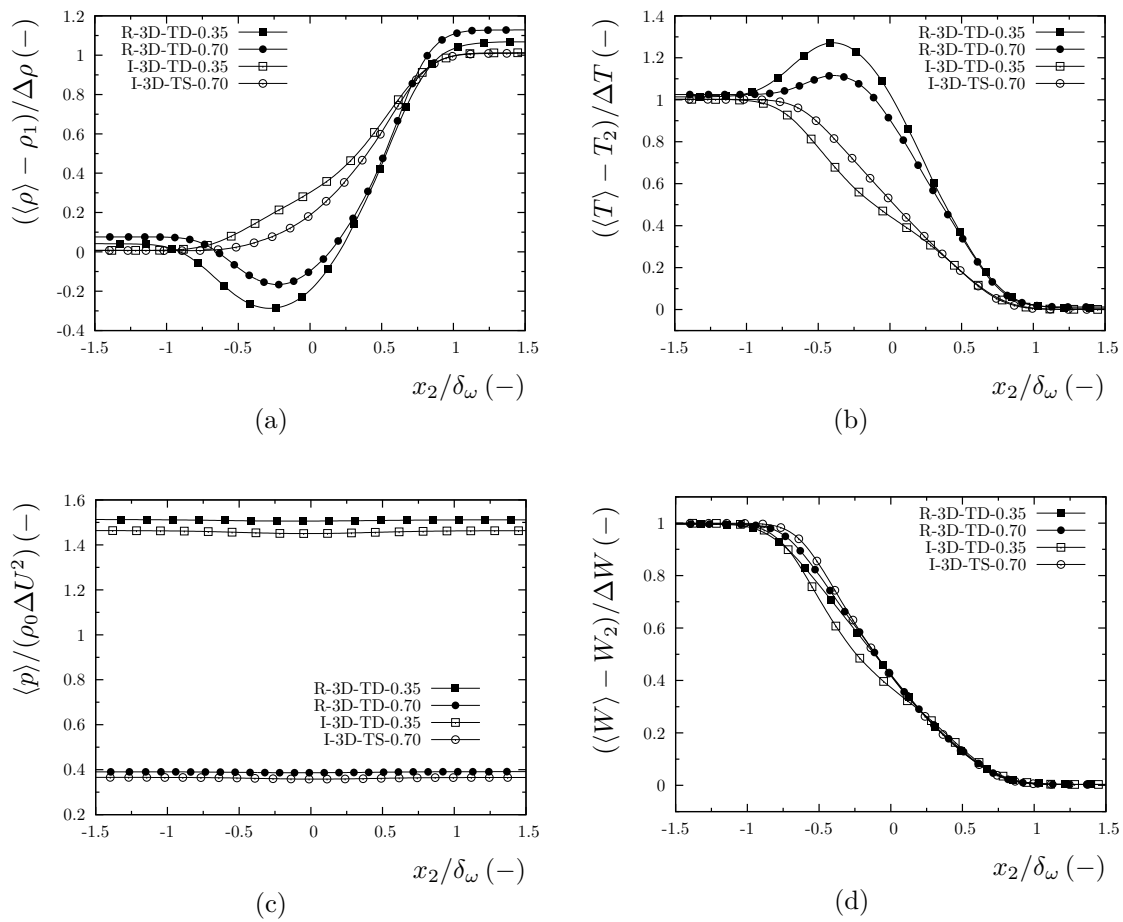


FIGURE 7.32 – Profils moyens de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).

sultats de la référence [100] présentent des valeurs maximales de température (valeurs minimales de masse volumique) presque identiques à différents régimes de compressibilité et les profils correspondant ont tendance à se superposer quand ils sont tracés pour différentes valeurs de M_c . Cette observation issue des résultats de Mahle [100] sera appelée dans la suite comme “effet de superposition”. Dans [100], la très faible augmentation de la température moyenne maximale avec la compressibilité était attribuée uniquement au frottement visqueux. Ce raisonnement est cohérent avec l’hypothèse de chimie infiniment rapide retenue car le temps caractéristique de la chimie est fixé à une valeur nulle et, dans ce cas particulier, la compressibilité est la seule à piloter l’écoulement turbulent réactif. Voici un des inconvénients liés à la simplification de la cinétique chimique, ce qui souligne l’intérêt d’aller regarder ce type d’écoulements réactifs avec une description complète et détaillée des processus chimiques.

La figure 7.32(b) montre que la température maximale est atteinte à $M_c = 0.35$ et diminue avec la compressibilité, contrairement aux résultats de Mahle [100]. A $M_c = 1.10$, l’auto-inflammation du mélange n’a pas été possible. Comme discuté précédemment dans la section 6.6.1, les effets de compressibilité dans les couches inertes ne sont pas négligeables et, en ne considérant que les cas inertes, ils contribuent à augmenter de manière considérable la température du mélange par échauffement visqueux (voir figure 6.20(b)). Néanmoins, cette contribution positive vis-à-vis de l’allumage du mélange n’est pas suffisante et c’est le temps fini imposé par la chimie qui détermine si l’auto-inflammation du mélange est possible. La décélération subie par l’écoulement dans le cas réactif est évidente d’après la figure 7.32 car les niveaux de masse volumique, température et pression des écoulements libres restent supérieurs à ceux des cas inertes. La pression moyenne diminue proportionnellement à γM_c^2 et reste pratiquement constante à la traversée de la couche de mélange pour les deux niveaux de compressibilité retenus. Enfin, les profils correspondant à la masse molaire montrent que cette quantité n’est pas très dépendante ni de la compressibilité ni du taux de dégagement de chaleur.

La réduction de la vitesse moyenne des écoulements parallèles illustrée dans la figure 7.31 ou, par exemple, l’augmentation de la masse volumique moyenne reportée dans la figure 7.32(a) sont une conséquence directe de la conservation de l’enthalpie totale de l’écoulement. En effet, l’enthalpie totale de l’écoulement libre injecté en entrée doit être conservée en sortie. L’expression de l’enthalpie totale du mélange

$$h_t = c_p(T)T + \frac{u_i u_i}{2}, \quad (7.6)$$

permet de déduire que des variations de chaleur spécifique à pression constante, de température statique et des vitesses sont permises pour garantir la conservation de cette quantité. Dans un écoulement monoespèce avec propriétés thermodynamiques constantes, *e.g.* chaleur spécifique à pression constante indépendant de la température, la conservation de l’enthalpie totale est équivalente à la conservation de la température totale

$$T_t = \frac{h_t}{c_p}. \quad (7.7)$$

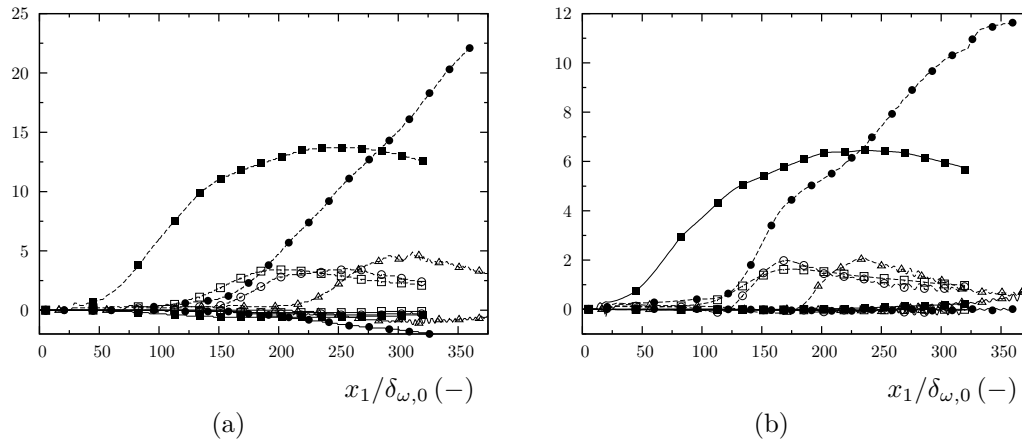


FIGURE 7.33 – Evolution de la différence entre la température moyenne totale (—) et statique (- -) et leurs valeurs respectives au plan d’injection, en fonction de l’abscisse $x_1/\delta_{\omega,0}$. Simulations R-3D-TD-0.35 (■), R-3D-TD-0.70 (●), I-3D-TD-0.35 (□), I-3D-TS-0.70 (○) et I-3D-TS-1.10 (△). Figure (a) : courant d’oxydant ($x_2 = -25\delta_{\omega,0}$ pour R-3D-TD-0.35 et I-3D-TD-0.35; $x_2 = -40\delta_{\omega,0}$ pour R-3D-TD-0.70, I-3D-TS-0.70 et I-3D-TS-1.10). Figure (b) : courant de combustible (cordonnées symétriques par rapport à $x_2 = 0$). Unités SI.

Cette hypothèse n’est pas valide pour un mélange des gaz comme celui considéré dans ce travail. Néanmoins, elle peut être retenue si les changements en température statique restent modérés, de l’ordre de quelques degrés Kelvin, et n’entraînent pas de changements importants du chaleur spécifique à pression constante. Le choix de la température totale au lieu de l’enthalpie totale permet de faire une comparaison très pratique entre les évolutions de température totale et statique, utilisant une échelle en degrés Kelvin. Une étude sur l’évolution de ces deux températures loin de la couche de mélange permettra de mettre en évidence la conservation de la température totale et ses conséquences pour les autres variables de l’écoulement.

La figure 7.33 montre l’évolution de la température statique moyenne et la température totale moyenne. Cette moyenne est calculé dans un plan x_1 - x_2 , situé en $x_3 = L_3/2$. La soustraction de la température correspondante au plan d’injection permet d’avoir une valeur nulle en $x_1 = 0$. Les courbes se correspondent donc avec des différences de température par rapport à celles de l’injection. Comme attendu, la température totale est maintenue presque constante pour toutes les simulations réalisées dans ce travail. En général, les variations de température totale les plus importantes apparaissent dans le régime le plus compressible : à $M_c = 1.10$ pour le cas inerte et à $M_c = 0.70$ pour le cas réactif. Ces résultats sont cohérents et confirment qu’au fur et à mesure que la température statique augmente du fait de la compressibilité et du dégagement de chaleur, la différence de température totale augmente par un changement dans la valeur de c_p . Néanmoins, ces différences restent limitées et toujours inférieures à 2 K pour le courant d’oxydant, ce qui est tout à fait raisonnable compte tenu qu’il existe des variations de chaleur spécifique à pression constante avec la température statique. L’évolution de la température statique est

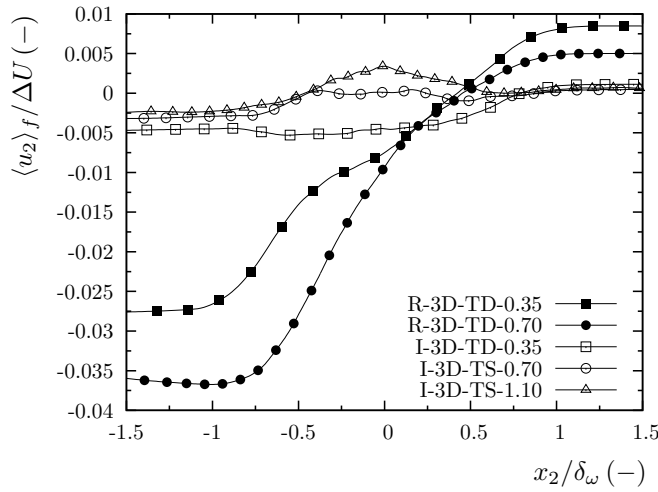


FIGURE 7.34 – Composante transversale de vitesse.

encore plus intéressante. Pour les cas inertes, la température statique augmente jusqu'à une valeur maximale, puis elle diminue. L'endroit où la température statique moyenne devient maximale dépend du type d'écoulement considéré ainsi que du régime de compressibilité. Dans les cas inertes, la valeur maximale de la température statique augmente très légèrement avec le nombre de Mach convectif. Pour les cas réactifs, l'augmentation de la température statique dans la direction de l'écoulement moyen est très affectée par le dégagement de chaleur. A $M_c = 0.35$, le profil de température augmente jusqu'à atteindre une différence maximale de 14 K pour ensuite diminuer de façon similaire aux cas inertes. A $M_c = 0.70$, la différence de température arrive jusqu'à 22.5 K, mais des limitations liées à la longueur du domaine de calcul empêchent d'observer une diminution. La relaxation des différentes variables en fonction de la direction longitudinale, *e.g.* les contraintes du tenseur de Reynolds ou l'épaisseur de quantité de mouvement, a été aussi constatée par Fu & Li [55] dans leurs simulations tridimensionnelles de couches de mélanges inertes se développant spatialement.

La figure 7.32 montre une augmentation de température, pression et masse volumique accompagnée d'une décélération de l'écoulement. A l'injection, la composante transversale et selon l'envergure de la vitesse sont nulles. En sortie, la composante de vitesse selon l'envergure reste nulle en moyenne. Comme attendu, la composante transversale de vitesse est positive, en moyenne, dans le courant supérieur tandis qu'elle est négative, en moyenne, dans le courant inférieur (voir figure 7.34). Par application de la conservation de la quantité de mouvement, le fluide voit diminuer sa composante longitudinale moyenne de vitesse en conséquence. En résumé, l'écoulement expérimente une décélération par l'effet du dégagement de chaleur qui est renforcée par la compressibilité. Ce comportement physique est caractéristique des couches de mélanges spatiales et ne peut pas être reproduit avec les simulations temporelles. Par ailleurs, certaines opérations —qui se font de manière habituelle dans l'étude des couches de mélange temporelles— ne peuvent pas s'appliquer dans le cas spatial. Par exemple, l'application de la relation (5.5) pour étudier l'évolution de l'épaisseur de quantité de mouvement n'est pas applicable dans le cas réac-

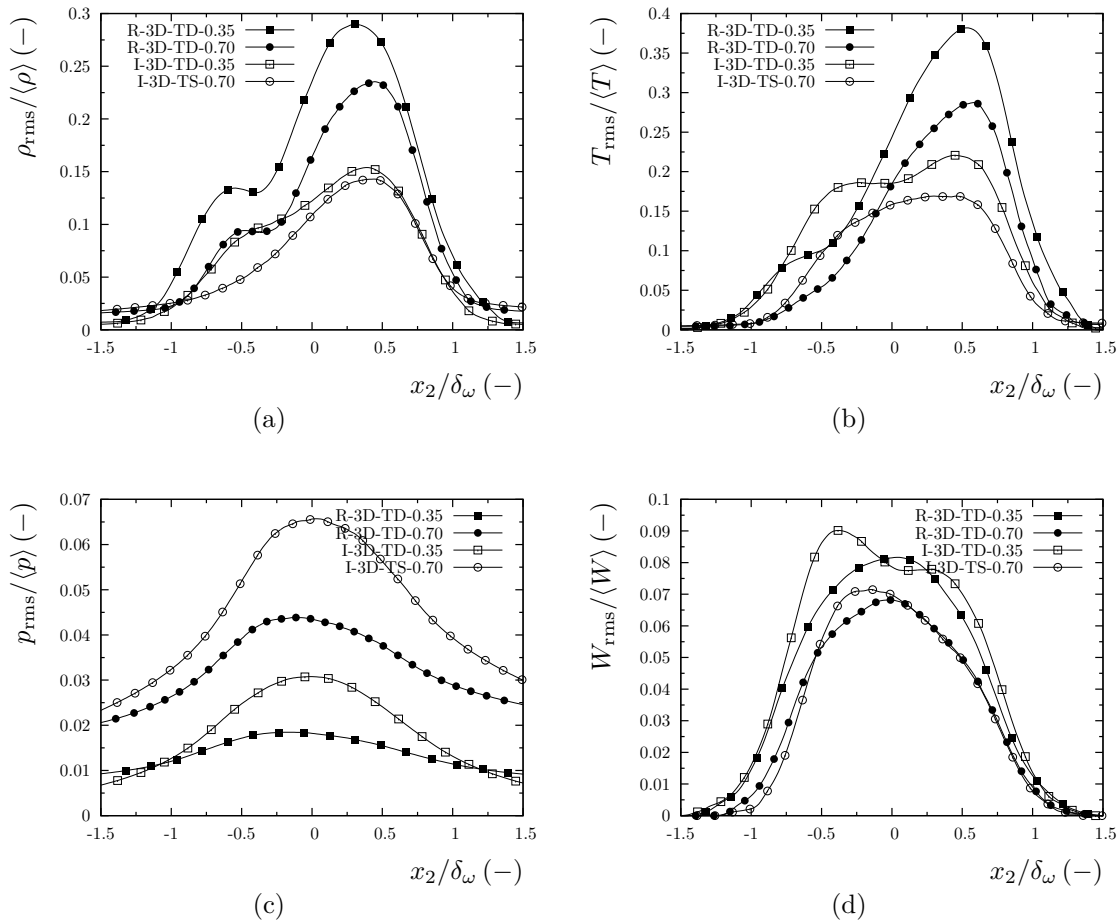


FIGURE 7.35 – Profils rms de masse volumique (a), température (b), pression (c) et masse molaire (d).

tif. En effet, cette définition considère que les vitesses d'injection du courant rapide U_1 et lent U_2 restent inchangées. Or, dans les couches de mélange réactives existe une décélération non négligeable, l'application de l'expression (5.5) conduit à des résultats erronés. Ces résultats sont d'autant imprécis que cette décélération devient plus importante. Les figures 7.27(b) et 7.31 confirment ce raisonnement pour la simulation R-3D-TD-0.70.

7.7.2 Variables thermodynamiques fluctuantes

La figure 7.35 montre les profils rms des principales variables thermodynamiques. Comme attendu, les fluctuations de masse volumique et température (figures 7.35(a)–7.35(b)) sont plus importantes dans le cas réactif, en conséquence des réactions chimiques. Cette augmentation de l'ordre d'un facteur 2 est largement inférieure à celle reportée avec chimie infiniment rapide et seulement les profils de masse molaire ont tendance à se superposer [100]. Comme dans le cas inertes, la compressibilité réduit l'intensité de la turbulence dans les couches réactives, ce qui se traduit par des valeurs rms inférieures. Les maxima locaux de masse volumique se trouvent aux frontières de la couche de mélange, où le fluide inerte appartenant aux écoulements parallèles est englouti, et non autour de

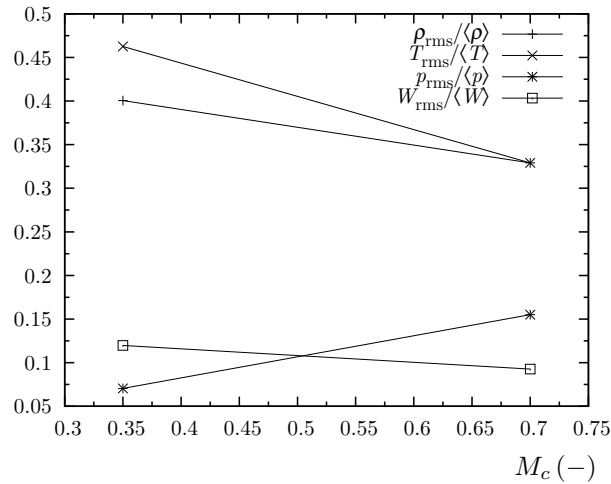


FIGURE 7.36 – Fluctuations des variables thermodynamiques intégrées dans la direction transversale.

la position de la flamme. Ceci est confirmé par la valeur maximale des profils rms qui se situe précisément dans le côté opposé à celui de la flamme. Le gradient maximum de température se trouve aussi à cet endroit. Les fluctuations de pression reportées dans la figure 7.35(c) diminuent avec le dégagement de chaleur, mais elles augmentent avec le nombre de Mach convectif. En général, l'influence de la compressibilité et du taux de dégagement de chaleur sur les fluctuations de pression est opposé à celui sur les autres variables thermodynamiques.

La figure 7.36 montre les résultats obtenus après l'intégration des variables thermodynamiques fluctuantes normalisées selon l'expression (6.11). Les résultats obtenus ne sont pas très différents que ceux des cas inertes jusqu'à $M_c = 0.70$. Seule la masse volumique change de comportement pour diminuer avec la compressibilité tandis que les autres quantités évoluent de manière similaire au cas inerte. Par extrapolation, les tendances à $M_c = 1.10$ devraient correspondre à celles du cas inerte équivalent car l'auto-inflammation n'avait pas eu lieu à ce régime de compressibilité.

Pour étudier avec plus de détails le comportement des fluctuations de masse volumique et de température, la décomposition des ces fluctuations en partie acoustique et entropique est effectuée en utilisant les relations (6.12)–(6.13). La figure 7.37 montre que les fluctuations entropiques de ces quantités sont largement supérieures à celles observées dans les cas inertes. La partie acoustique des fluctuations de masse volumique et de température est réduite sensiblement avec le dégagement de chaleur et devient négligeable par rapport à la partie entropique. Pour conclure, les fluctuations de température et masse volumique au sein des couches de mélange réactives sont donc essentiellement de nature entropique.

La corrélation du rapport entre les fluctuations de masse volumique et pression, donnée par l'expression (6.14), est montrée dans la figure 7.38(a). Le dégagement de chaleur provoque un effet similaire à celui de la compressibilité dans cette corrélation. Ainsi, il existe une corrélation modérée entre la masse volumique et la pression qui est plus accentuée

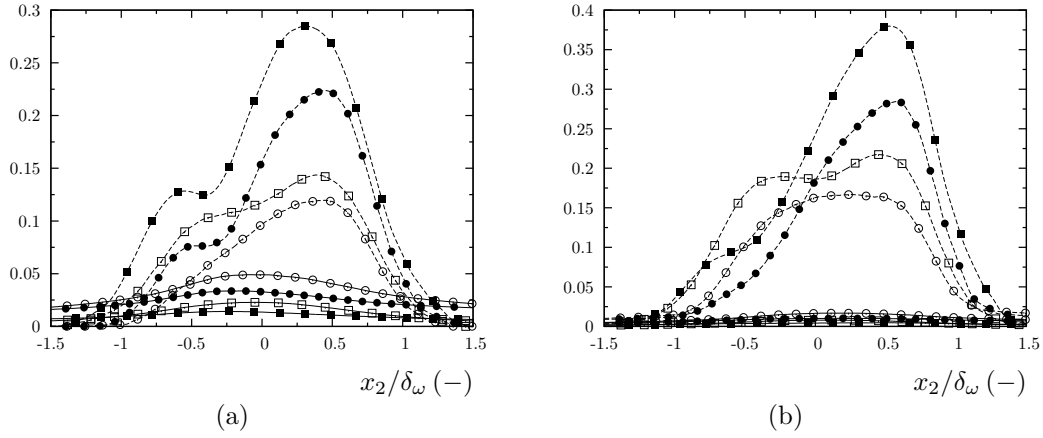


FIGURE 7.37 – Décomposition des profils rms de masse volumique (a) et température (b) en partie acoustique (—) et entropique (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.35.

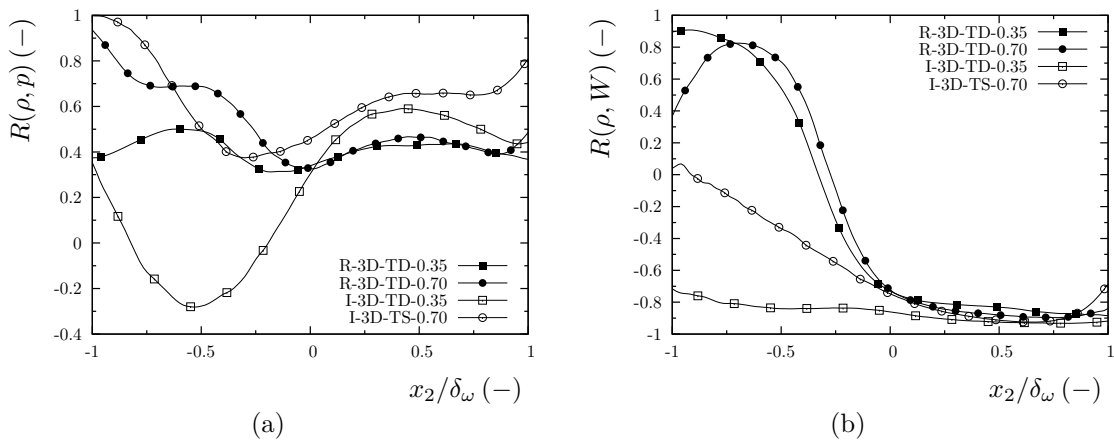


FIGURE 7.38 – Coefficient de corrélation entre la masse volumique et la pression (a) et entre la masse volumique et la masse molaire (b).

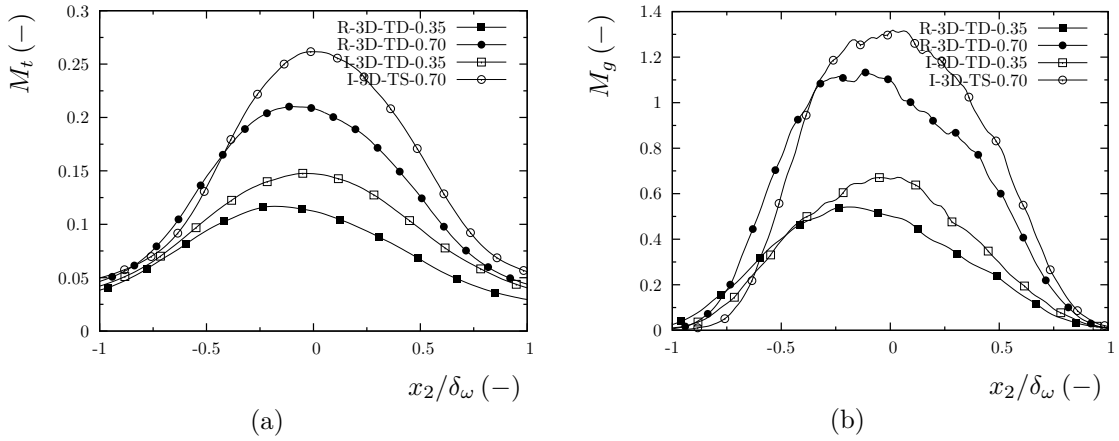


FIGURE 7.39 – Nombre de Mach turbulent (a) et Mach de gradient (b).

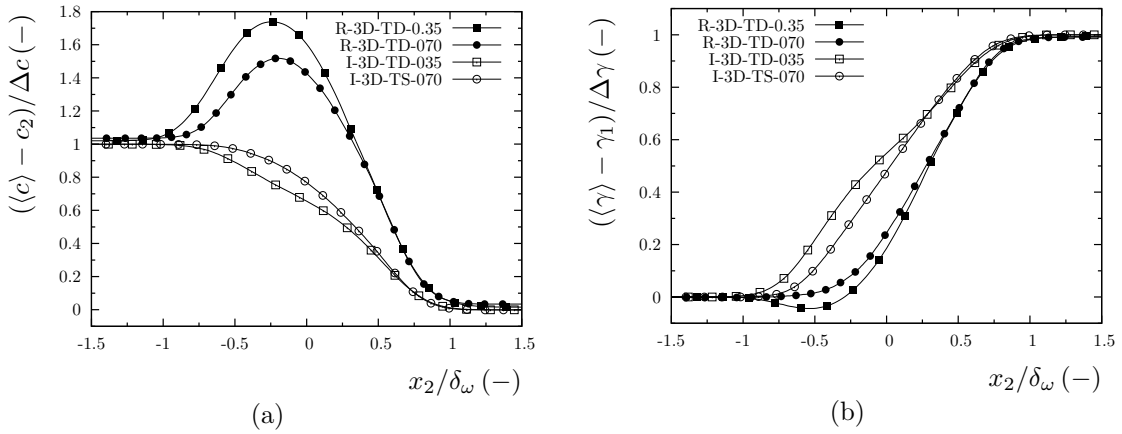


FIGURE 7.40 – Profils moyens de la vitesse du son (a) et du rapport de chaleurs spécifiques (b).

quand le nombre de Mach convectif augmente. Les fluctuations de masse volumique sont, en revanche, corrélées avec celles de la masse molaire comme l'illustre la figure 7.38(b), avec une forte corrélation positive du côté oxydant et négative du côté combustible.

7.7.3 Nombres de Mach

La figure 7.39(a) montre une diminution du nombre de Mach turbulent (6.16) avec le dégagement de chaleur. Cette diminution est due principalement à l'augmentation de la valeur de $\langle c \rangle$. La principale contribution au changement de la vitesse du son (voir figure 7.40(a)) vient effectivement de l'augmentation de la température. La contribution du rapport de chaleur spécifiques (figure 7.40(b)) et de la masse molaire du mélange (figure 7.32(d)) restent inférieures.

Le nombre de Mach de gradient est aussi réduit par le dégagement de chaleur comme le montre la figure 7.39(b), mais cette quantité continue à augmenter avec la compressibilité de la même manière que le nombre de Mach turbulent. Pour rappel, l'incrément

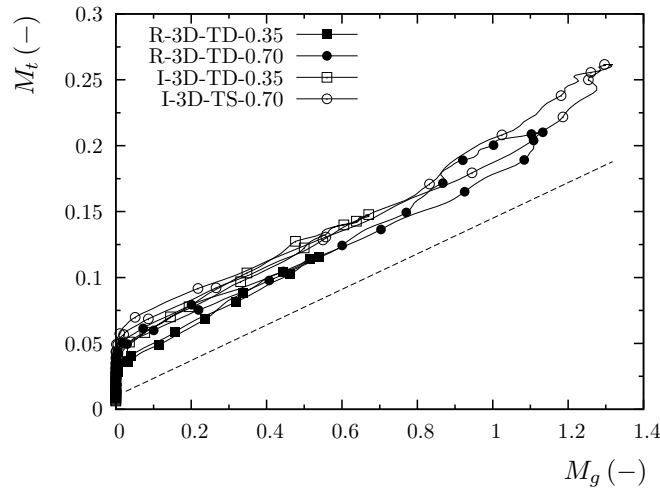


FIGURE 7.41 – Evolution du nombre de Mach turbulent en fonction du nombre de Mach de gradient.

du nombre de Mach gradient avec la compressibilité est relié à la diminution du terme de pression-dilatation [101, 123] et, par conséquent, à la réduction du taux de croissance de la couche de mélange. Ces conclusions ne semblent pas confirmer les résultats des couches de mélange réactives car, au lieu d’attendre une augmentation de ces quantités en présence de dégagement de chaleur, les résultats montrent une claire diminution.

Comme pour les cas inertes, dans les cas réactifs il est toujours possible de trouver une corrélation linéaire entre le nombre de Mach turbulent et le nombre de Mach de gradient. La figure 7.41 montre cette corrélation : $M_g \propto 6.67M_t$, ce qui correspond à une différence d’environ 7% par rapport au cas inerte. Avec l’emploi d’une chimie infiniment rapide, des différences plus larges entre les cas réactifs et inertes sont retrouvées [100]. En conséquence, les résultats obtenus utilisant une chimie détaillée confirment que le dégagement de chaleur diminue les valeurs de ces nombres de Mach sans pour autant affecter la corrélation entre eux.

7.7.4 Equation de transport de l’énstrophie

Les résultats obtenus pour les simulations inertes tridimensionnelles ont montré que l’effet de la compressibilité est l’augmentation des niveaux des termes composant l’équation de transport de l’énstrophie (voir section 6.6.4), contrairement à ce qui se passe dans les cas bidimensionnels (voir section 5.8). De plus, il a été montré que, dans les cas 2D, ces termes peuvent diminuer, ou rester inchangés, avec le dégagement de chaleur pour les simulations conduites avec une chimie détaillée et en fonction du nombre de Mach convectif considéré. Pour ces simulations bidimensionnelles réactives et des faibles nombres de Mach convectif, les termes de l’équation d’énstrophie diminuent de la même façon que le taux de croissance de la couche tandis que, à un nombre de Mach convectif plus élevé, ces termes restent inchangés et le taux de croissance de la couche de mélange réactive reste similaire au cas inerte correspondant.

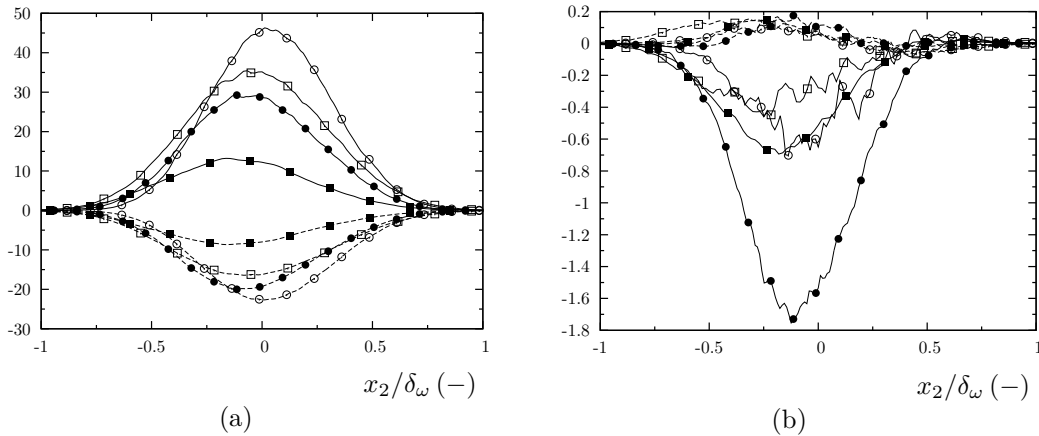


FIGURE 7.42 – Bilan de l'équation de transport de l'entrophie normalisé par $\Delta U^3/\delta_\omega^3$. Figure (a) : terme d'étirement (—) et de diffusion (- -). Figure (b) : terme de dilatation (—) et couple barocline (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.41.

La figure 7.42 montre la contribution des termes intervenant dans l'équation de transport de l'entrophie (5.24). La présence du dégagement de chaleur réduit considérablement les termes du bilan et, notamment, ceux correspondant à $M_c = 0.35$. En regardant le terme du couple barocline reporté dans la figure 7.42(b), il peut être constaté que les termes baroclines ont une contribution négligeable dans le bilan global, indépendamment de la compressibilité et du taux de dégagement de chaleur. Le terme de dilatation suit une évolution contraire aux autres termes. Ainsi, la valeur absolue de cette quantité augmente faiblement avec le dégagement de chaleur à basse compressibilité et elle expérimente une augmentation plus importante à $M_c = 0.70$. Enfin, il est important de remarquer que la fermeture des bilans s'est plus aisément atteinte que dans le cas inerte grâce à la présence du dégagement de chaleur.

Cette section montre l'importance de considérer une approche tridimensionnelle pour la description correcte des phénomènes physiques de la couche de mélange. A la différence des autres quantités présentées dans ce travail qui montrent des comportements et tendances plus ou moins similaires en 2D et 3D, l'équation de l'entrophie révèle la présence de mécanismes physiques différents entre les deux types d'écoulements et, en conséquence, des comportements opposés.

7.7.5 Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente

La figure 7.43(a) confirme la réduction de l'énergie cinétique turbulente avec la compressibilité dans les cas réactifs. Cependant, cette réduction n'est pas aussi importante dans le cas réactif comparée au cas inerte. La réduction d'énergie cinétique turbulente implique une diminution du transfert d'énergie de l'écoulement moyen vers la turbulence. La figure 7.43(b) présente les profils d'énergie cinétique turbulente normalisés différemment. A $M_c = 0.35$, ce changement de variables permet de différencier jusqu'à un certain degré les effets dus à la compressibilité de ceux dus au dégagement de chaleur car les

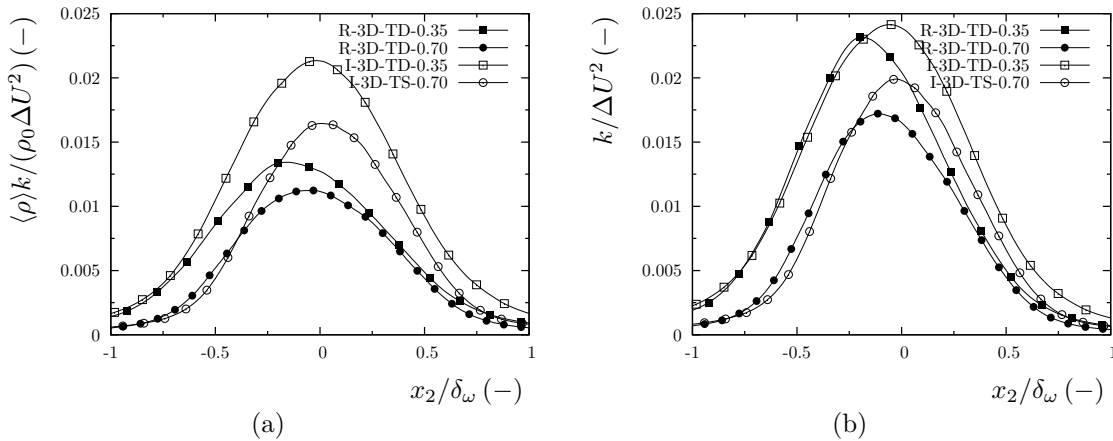


FIGURE 7.43 – Energie cinétique turbulente normalisée.

niveaux maximum d'énergie cinétique restent très similaires. Ce résultat suggère que la compressibilité et le taux de dégagement de chaleur modifient les propriétés de la couche de mélange à travers l'action des mécanismes différents. Conformément à ce raisonnement, la compressibilité ne semble pas affecter la masse volumique autant que le dégagement de chaleur, ce qui peut être vérifiée en comparant les niveaux maximum des cas inertes des figures 7.43(a)–7.43(b). En revanche, le taux de dégagement de chaleur a bien un effet sur la masse volumique moyenne plus marqué avec la normalisation utilisant $\langle \rho \rangle$ (figure 7.43(a)). Pour conclure, la réduction des niveaux de $\langle \rho \rangle k$ dans le cas réactif est due *principalement* à la réduction de $\langle \rho \rangle$ par le dégagement de chaleur qu'à la réduction de $\langle \rho \rangle$ et k par la compressibilité. Ces résultats sont en accord avec ceux reportés dans la littérature [101, 107, 124]. Cette analyse peut être aussi appliquée à l'équation de transport de l'ensrophie, des contraintes de Reynolds ainsi qu'à l'équation de transport de la variance d'un scalaire.

La figure 7.44 montre les termes les plus importants intervenant dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (5.17). Le dégagement de chaleur réduit de manière systématique ces termes. Cette diminution est plus ou moins constante avec la compressibilité. La proposition effectuée par McMurtry *et al.* [107] dans laquelle le dégagement de chaleur peut incrémenter le terme de pression-dilatation provoquant une augmentation du niveau d'énergie cinétique turbulente n'est pas supportée par les résultats de la figure 7.44(b). S'il existe une augmentation de ce terme dans le cas réactif, elle reste limitée et, finalement, ce terme devient négligeable par rapport au reste.

La figure 7.45(a) montre le rapport entre le terme de pression-dilatation et production, préalablement intégrés dans la direction transversale selon (6.11), en fonction du nombre de Mach convectif. Ce rapport est du même ordre de grandeur que celui du cas inerte et décroît très légèrement avec la compressibilité. Autrement dit, la diminution de ce terme est sensiblement plus importante que la réduction du terme de production dans le cas réactif tandis que le contraire est constaté dans le cas inerte. Ces résultats diffèrent de ceux des simulations de couches de mélange réactives conduites avec une chimie infinie

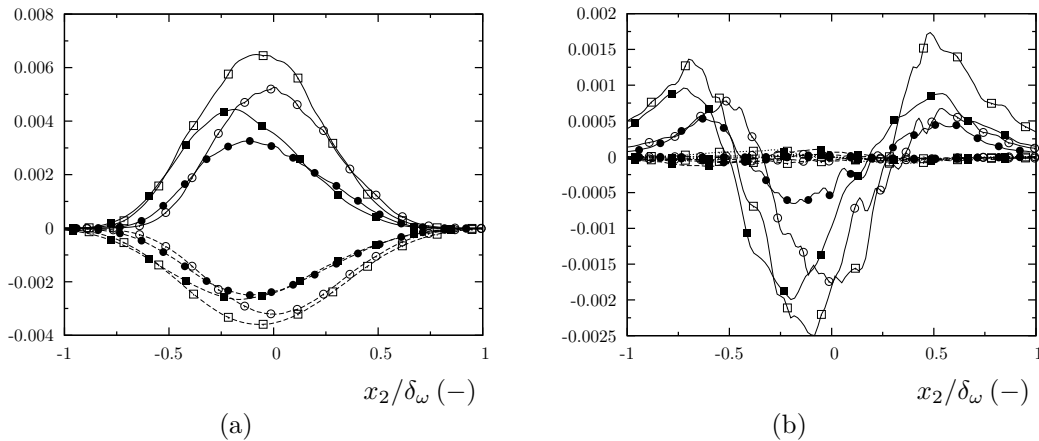


FIGURE 7.44 – Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport turbulent (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique (· · ·). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.43.

[100], qui montrent une augmentation de cette quantité d'un ordre de grandeur dans le cas réactif comparé au cas inerte. A nouveau, les résultats obtenus avec une chimie infiniment rapide surestiment ces quantités par rapport aux résultats obtenus avec chimie détaillée. Les résultats présentés dans la figure 7.45(b) confirment une augmentation du rapport entre le terme de dissipation et de production de l'énergie cinétique turbulente avec la compressibilité et le taux de dégagement de chaleur. Ces résultats sont cohérents par rapport à ceux de la figure 7.44(a), qui montrent une réduction plus importante du terme de production comparée au terme de dissipation.

7.7.6 Equations de transport des composantes du tenseur de Reynolds

La figure 7.46 montre les profils moyens de contraintes de Reynolds des simulations réactives et inertes. En général, le dégagement de chaleur diminue les niveaux des profils de manière similaire avec le nombre de Mach convectif. Il n'y a pas un effet de superposition sauf pour la composante normale dans le sens de l'envergure (voir figure 7.46(c)), qui présente des valeurs maximales similaires pour les deux régimes de compressibilité étudiés.

L'étude des anisotropies à travers les relations (6.19)–(6.20) est effectuée et reportée dans la figure 7.47. Les résultats révèlent que le dégagement de chaleur n'a pas une influence significative dans les composantes b_{33} et b_{12} . Pour les composantes b_{11} et b_{22} , le dégagement de chaleur diminue la différence entre les profils à différent nombre de Mach convectif.

Les figures 7.48–7.51 montrent les termes principaux de l'équation de transport des contraintes de Reynolds (5.18) pour les simulations réactives et inertes à différent nombre de Mach convectif. Le rôle de chacun de ces termes est le même que celui déjà expliqué dans le chapitre précédent. A la lumière des résultats obtenus, il peut être déduit que le dé-

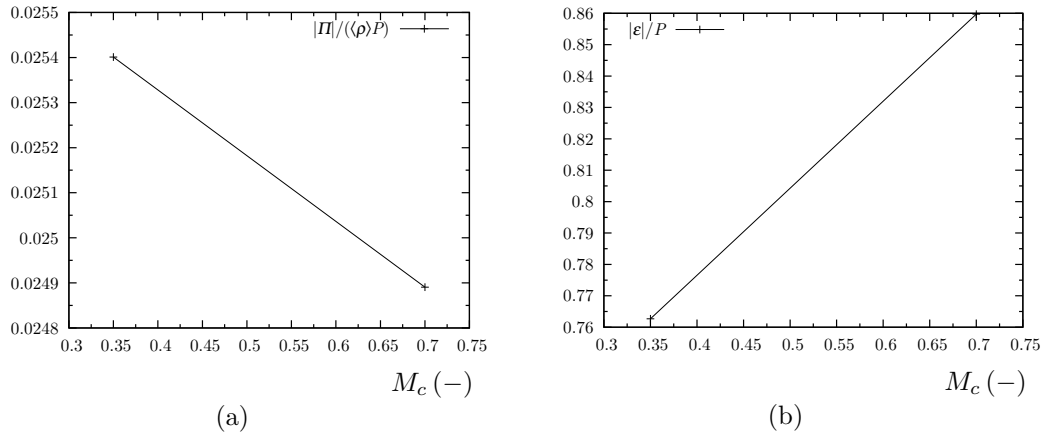


FIGURE 7.45 – Rapports des quantités intégrales correspondantes au bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente.

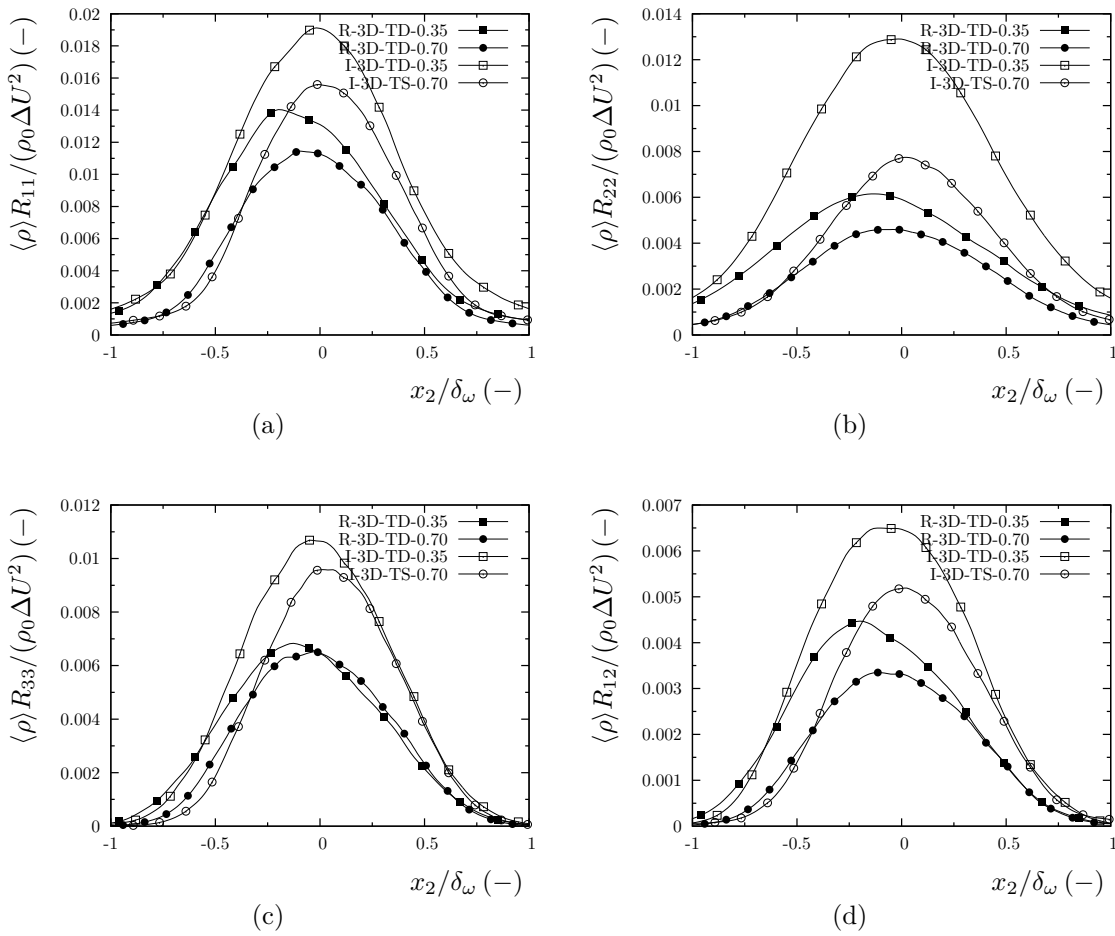


FIGURE 7.46 – Contraintes de Reynolds normalisées par $\rho_0 \Delta U^2$.

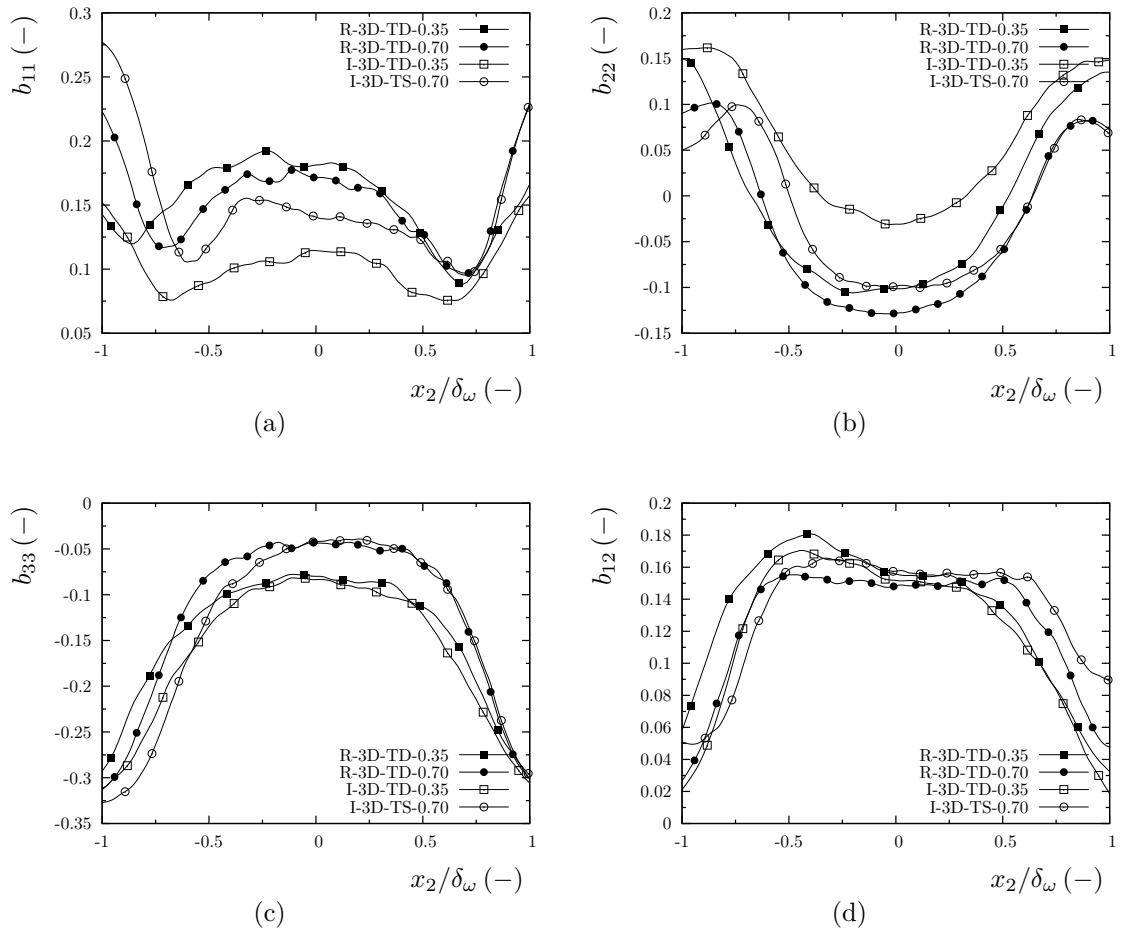


FIGURE 7.47 – Anisotropies.

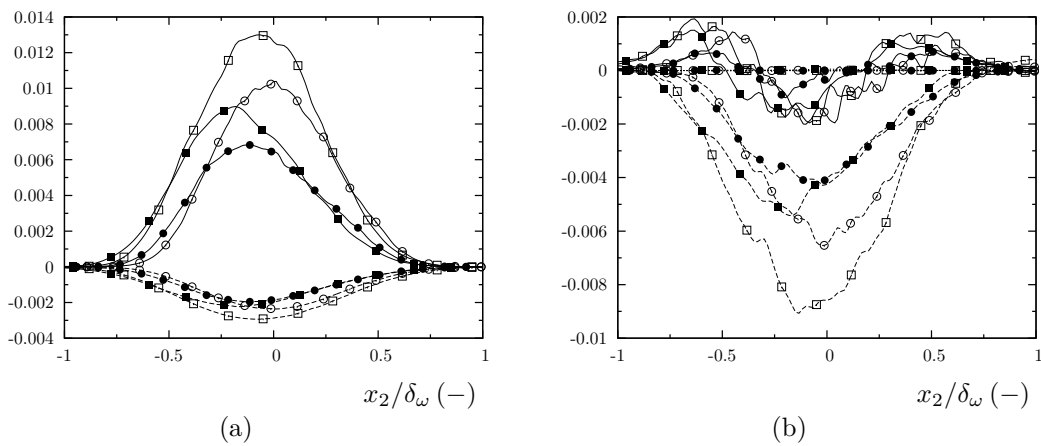


FIGURE 7.48 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{11}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Figure (a) : terme de production (—) et de dissipation (- -). Figure (b) : terme de transport (—), de pression-dilatation (- -) et de flux massique ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.47.

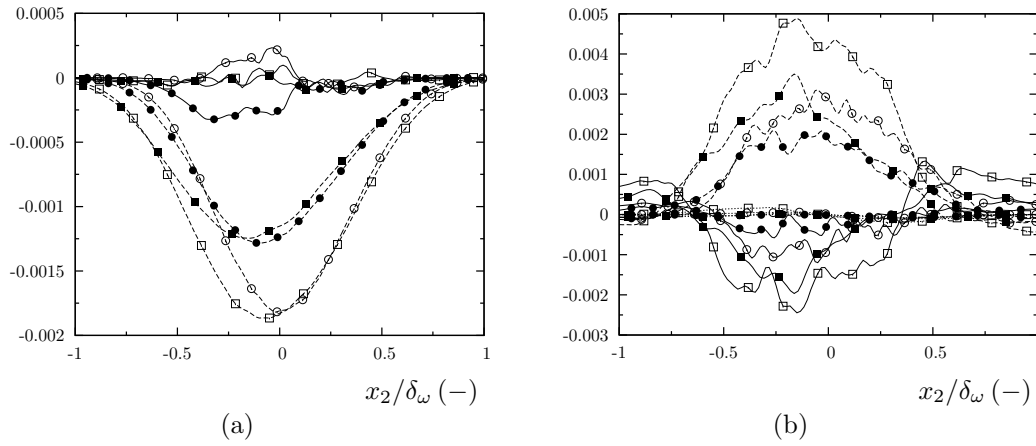


FIGURE 7.49 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{22}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.

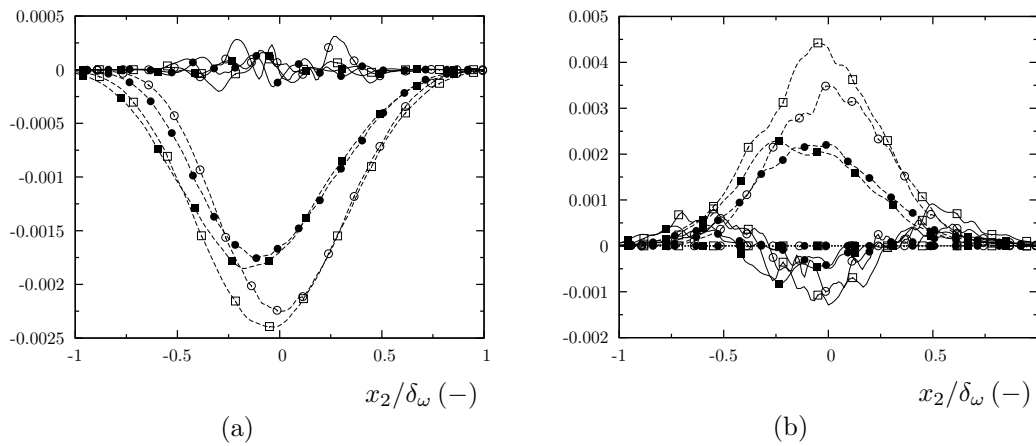


FIGURE 7.50 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{33}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.

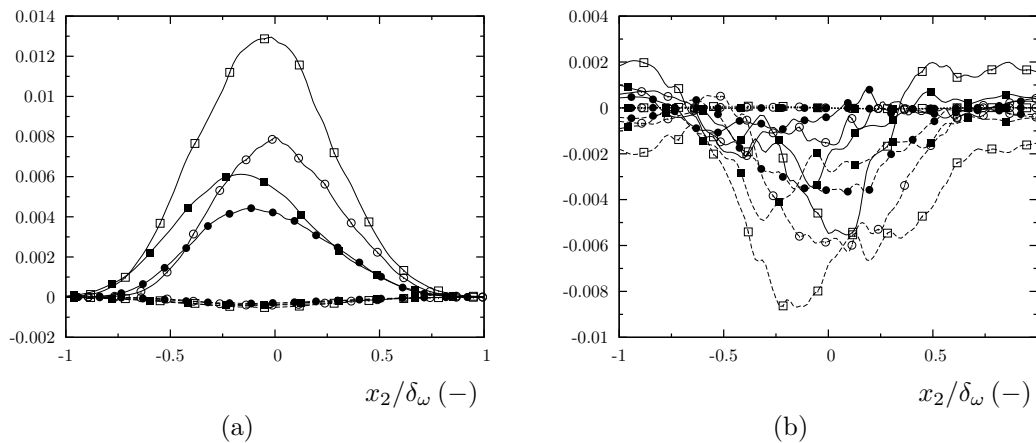


FIGURE 7.51 – Bilan de l'équation de transport de $\langle \rho \rangle R_{12}$ normalisé par $\rho_0 \Delta U^3 / \delta_\omega$. Les symboles et les lignes sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.48.

gagement de chaleur réduit toutes les composantes du tenseur de Reynolds. Le tableau 7.4 reporte les réductions par effet de dégagement de chaleur des termes sources principaux des contraintes du tenseur de Reynolds. Les ordres de grandeur obtenus sont comparables à ceux de l'énergie cinétique turbulente et à ceux reportés par Mahle [100]. En général, la réduction des termes est plus significative à un nombre de Mach convectif plus faible, comme le confirment les termes T_{33} et P_{12} . Cependant, cette réduction n'est pas si marquée que celle constatée dans [100] où l'influence de la compressibilité est très faible. L'influence de la compressibilité et le taux de dégagement de chaleur sur le terme de dissipation reste très faible. Ces réductions d'entre 30% et 50% sont équivalentes à celles de la masse volumique moyenne. Ces résultats confirment que la diminution des niveaux provoquée par le dégagement de chaleur sont principalement une conséquence d'une réduction de la masse volumique moyenne par le dégagement de chaleur.

Les termes des bilans présentés précédemment sont intégrés dans la direction transversale selon la relation (6.11) et les résultats sont présentés dans la figure 7.52. Comme attendu, les valeurs de ces quantités sont diminuées du fait du dégagement de chaleur et les pentes des lignes des figures 7.52(a)–7.52(c) sont beaucoup moins prononcées comparées au cas inerte.

D'après Mahle *et al.* [101], dans les couches de mélange réactives temporelles la diminution du terme de pression-dilatation (6.22) est le responsable de la réduction du taux de croissance de l'épaisseur de quantité de mouvement [100]. Une étude similaire à celle présentée précédemment dans la section 6.6.6 est effectuée ici pour vérifier les possibles causes qui provoquent une diminution de Π_{11} . Les figures 7.53(a)–7.53(b) montrent la valeur rms normalisée des fluctuations de pression et du gradient de vitesse, respectivement, des simulations réactives et inertes. Le coefficient de corrélation entre les fluctuations de pression et du gradient de vitesse (6.23) reste assez faible et similaire à celui obtenu dans le cas inerte. La figure 7.53(d) montre la réduction des valeurs rms de p' , $\partial u_1''/\partial x_1$ et Π_{11} , intégrées dans la direction transversale et normalisées par leur valeur incompressible à $M_c = 0.35$. Contrairement aux simulations inertes, la diminution des fluctuations de pression contribue plus à la réduction de Π_{11} que celle du gradient de vitesse. Néanmoins, ces deux contributions restent toujours d'importance relativement comparable.

TABLEAU 7.4 – Réduction des termes sources principaux des contraintes du tenseur de Reynolds par effet du dégagement de chaleur.

M_c	P_{11}	T_{22}	T_{33}	P_{12}
0.35	31%	30%	49%	54%
0.70	33%	30%	37%	44%

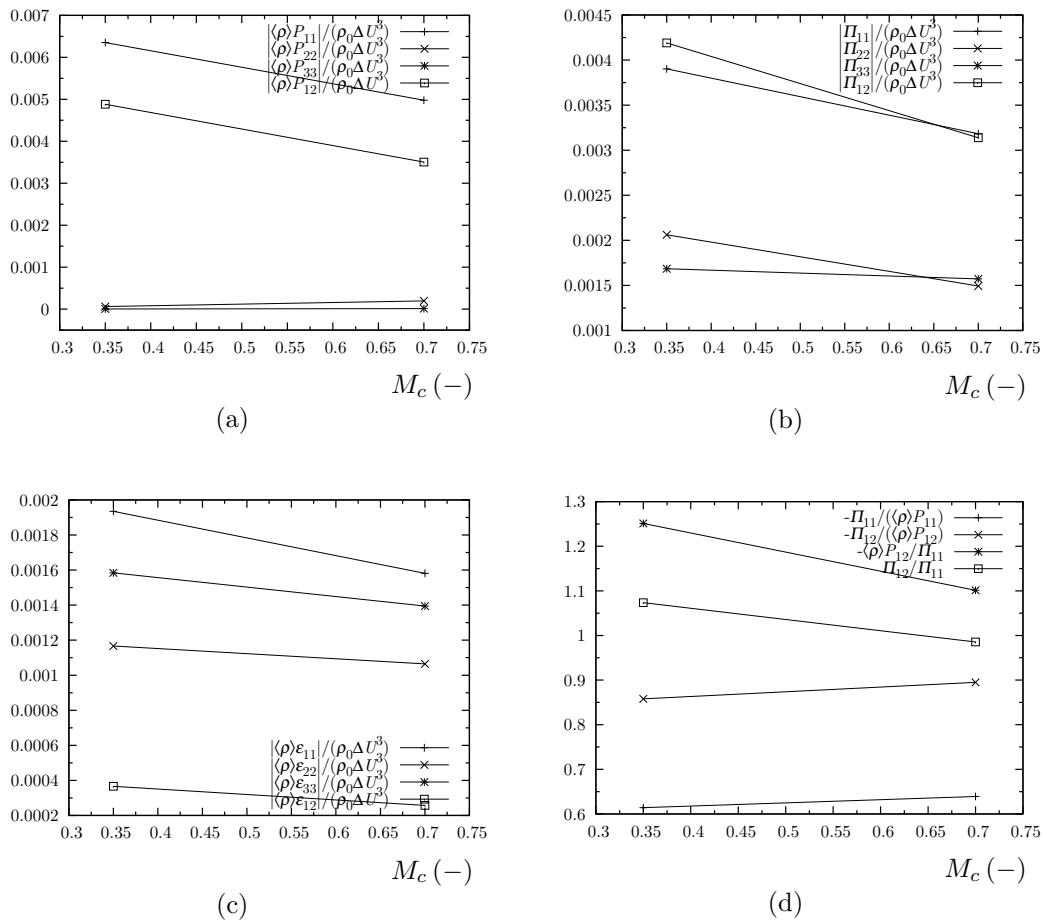


FIGURE 7.52 – Quantités intégrales correspondantes à l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds.

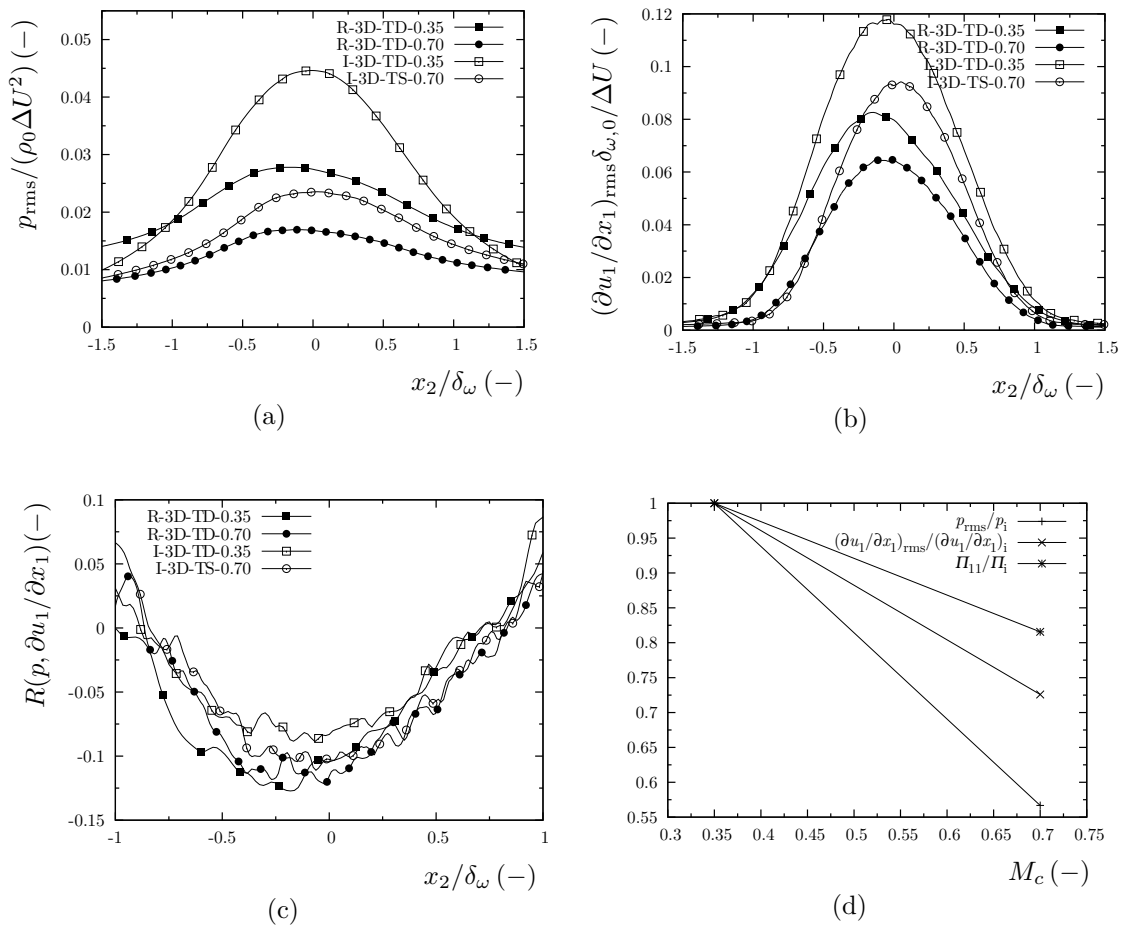


FIGURE 7.53 – Analyse du comportement des quantités qui composent le terme de pression-dilatation Π_{11} .

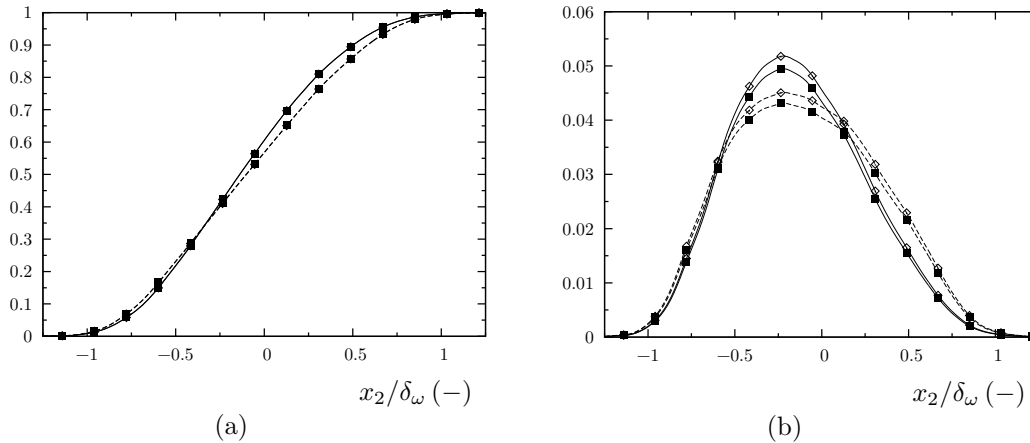


FIGURE 7.54 – Cas R-3D-TD-0.35. Valeur moyenne (a) et variance (b) de la fraction de mélange transportée (■) et la variable de mélange calculée (◇). Moyenne au sens de Favre (—) et au sens de Reynolds (- -).

7.8 Effet de la compressibilité et le dégagement de chaleur sur le mélange scalaire

7.8.1 Variables moyennes et fluctuantes

L'étude du mélange scalaire est fondamentale pour la compréhension des processus de combustion car les réactions chimiques ont lieu quand les réactifs se mélangent à l'échelle moléculaire. L'étude sur l'évolution d'un scalaire passif, *e.g.* variable ou fraction de mélange, est très intéressante et le comportement de cette quantité à différents niveaux de compressibilité et dégagement de chaleur est un des objectifs de cette section. Pour la simulation R-3D-TD-0.35, une nouvelle équation de transport d'un scalaire passif comprise entre 0 et 1 a été ajoutée au système d'équations (2.1)–(2.4) en suivant une procédure similaire à celle proposée par Pitsch & Peters [131]. Cette équation de transport additionnelle s'écrit

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho z u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial z}{\partial x_j} \right), \quad (7.8)$$

et correspond à celle d'un scalaire passif avec un coefficient de diffusion $D = \lambda/(\rho c_p)$, *i.e.* hypothèse $Le = 1$. Dans la simulation R-3D-TD-0.70, cette équation de transport n'a pas été résolue, mais la valeur instantanée d'un scalaire comprise entre 0 et 1 peut être obtenue à partir du champ instantané des espèces en utilisant la relation (6.25). Dans la suite, le scalaire passif transporté (7.8) sera appelé "fraction de mélange", tandis que le scalaire calculé à partir de l'expression (6.25) sera appelé "variable de mélange".

La figure 7.54 montre la valeur moyenne et la variance de la fraction de mélange transportée et la variable de mélange calculée à partir des toutes les espèces du mélange. La différence entre ces deux variables est limitée : la variance de la variable de mélange est *surestimée* d'environ 4% par rapport à la fraction de mélange. Ces résultats sont valables indépendamment de l'opérateur de moyenne utilisé. Les différences observées

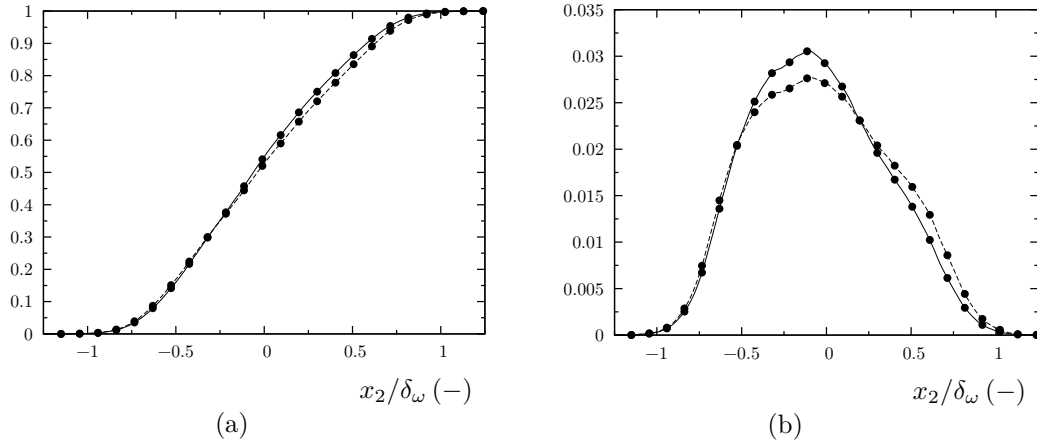


FIGURE 7.55 – Cas R-3D-TD-0.70. Valeur moyenne (a) et variance (b) de la variable de mélange calculée (\bullet). Moyenne au sens de Favre (—) et au sens de Reynolds (- -).

entre les profils moyennés au sens de Favre et au sens de Reynolds de la figure 7.54(a) sont provoquées par les fluctuations de masse volumique au sein de la couche de mélange réactive. Ces différences sont plus importantes que celles observées dans le profil moyen de vitesse longitudinale (voir figure 7.31). Le profil moyen au sens Favre de la figure 7.54(a) est au dessus du profil au sens de Reynolds dans le côté combustible ($x_2 > 0$) et légèrement en dessous du côté oxydant. En effet, la corrélation entre la masse volumique et la fraction de mélange intervenant dans l'équation

$$\langle z \rangle_f - \langle z \rangle = \frac{\langle \rho' z' \rangle}{\langle \rho \rangle} \quad (7.9)$$

est positive dans le courant de combustible où des valeurs plus grandes de ρ correspondent à des valeurs plus grandes de z . Cette corrélation devient nulle au sein de la couche de mélange et change de signe dans le courant d'oxydant où des valeurs plus grandes de ρ correspondent à des valeurs plus faibles de z (voir figure 7.32(a)).

Les résultats présentés dans la figure 7.54 démontrent que la variable de mélange calculée à partir de l'équation (6.25) fournit une très bonne estimation de la fraction de mélange transportée (7.8) avec une hypothèse de nombre de Lewis égal à l'unité. En supposant que ces résultats sont valables pour une couche de mélange réactive avec un nombre de Mach convectif plus élevé, *e.g.* $M_c = 0.70$, la variable de mélange peut être utilisée à nouveau. La figure 7.55 montre la valeur moyenne et la variance de la variable de mélange calculée à partir du champ des espèces pour ce régime de compressibilité. Comme la valeur de la variance diminue avec la compressibilité à cause d'une réduction des fluctuations, il paraît logique que l'écart entre la variable de mélange et la fraction de mélange suive la même tendance. Cependant, une vérification rigoureuse doit être effectuée pour valider ce raisonnement. Enfin, pour ce cas réactif, les différences entre la valeur moyenne au sens de Reynolds et au sens de Favre se réduisent d'avantage avec la compressibilité.

La figure 7.56 montre les profils moyennés au sens de Favre des fractions massiques des espèces principales constituant le mélange. Par rapport aux simulations inertes, où la présence de radicaux était négligée, les simulations réactives comptent aussi avec la présence de 5 radicaux : H, O, OH, HO₂ et H₂O₂. Dans la suite, l'évolution des radicaux hydroxyde (OH) et hydroperoxyde (HO₂) est étudiée car ces deux espèces chimiques contribuent de manière importante dans le processus d'auto-allumage [88, 104, 180]. Tous les profils sont normalisés entre 0 et 1 et les courbes appartenant au cas inerte sont aussi représentées pour faciliter la comparaison entre les cas réactif et inerte. Dans les simulations réactives, la consommation d'oxygène et d'hydrogène pour produire de la vapeur d'eau est significativement supérieure à plus bas régime de compressibilité. Le profil moyen de la fraction massique d'azote est aussi légèrement influencé par le dégagement de chaleur et la compressibilité. En général, au fur et à mesure que le nombre de Mach convectif augmente, les différents profils se décalent vers des valeurs positives de l'axe des ordonnées x_2 . L'évolution des radicaux retenus est en revanche complètement différente de celle des autres espèces étudiées. La valeur moyenne de la fraction massique d'hydroxyde ne semble pas en effet être influencée par la compressibilité tandis que, au contraire, les niveaux de fraction massique d'hydroperoxyde changent complètement avec la compressibilité.

En général, la variance des fractions massiques augmente avec le dégagement de chaleur, influencée par les réactions chimiques au sein de la couche de mélange. Néanmoins, ces fluctuations sont ensuite diminuées par l'effet de la compressibilité, comme le montre la figure 7.57. Cette réduction est rencontrée dans les cas inertes et diffère des résultats obtenus par Mahle [100], pour lesquels le dégagement de chaleur inhibe l'effet stabilisateur de la compressibilité, ce qui se traduit par une certaine superposition des profils de variance dans le cas réactif. A la différence des cas inertes, dans les cas réactifs les profils obtenus à $M_c = 0.35$ ne présentent pas deux maxima locaux, ce qui équivaut à un englobement plus faible des réactifs comme attendu dans les couches de mélange réactives [100, 124]. L'allure des profils est plus pointue et les pics se positionnent à des endroits différents en fonction de l'espèce considérée. Par exemple, le pic de la variance de la fraction massique d'oxygène est le seul qui se situe proche de la zone où la température moyenne est maximale, tandis que les pics de la fraction massique d'hydrogène ou encore de vapeur d'eau se rapprochent de l'écoulement de combustible. La variance de la fraction massique d'azote ne subit pas des changements importants car cette espèce est passive dans le processus de combustion. L'application de la moyenne au sens de Reynolds à la fraction massique d'azote (non montrée ici) conduit pratiquement aux mêmes résultats, avec une très légère diminution des pics de variance dans le cas réactif, similaire à celle déjà constatée dans la fraction et la variable de mélange (figures 7.54(b) et 7.55(b)). Ces résultats confirment bien que le dégagement de chaleur n'influence pas beaucoup les niveaux des fluctuations des variables passives en comparaison de celles des espèces impliquées dans le processus de combustion. Enfin, la variance de l'espèce hydroxyde présente des variations importantes en fonction de la compressibilité, contraire à sa valeur moyenne, tandis que la fraction massique de l'hydroperoxyde présente un pic importante proche de la région à haute température dans le régime le plus compressible.

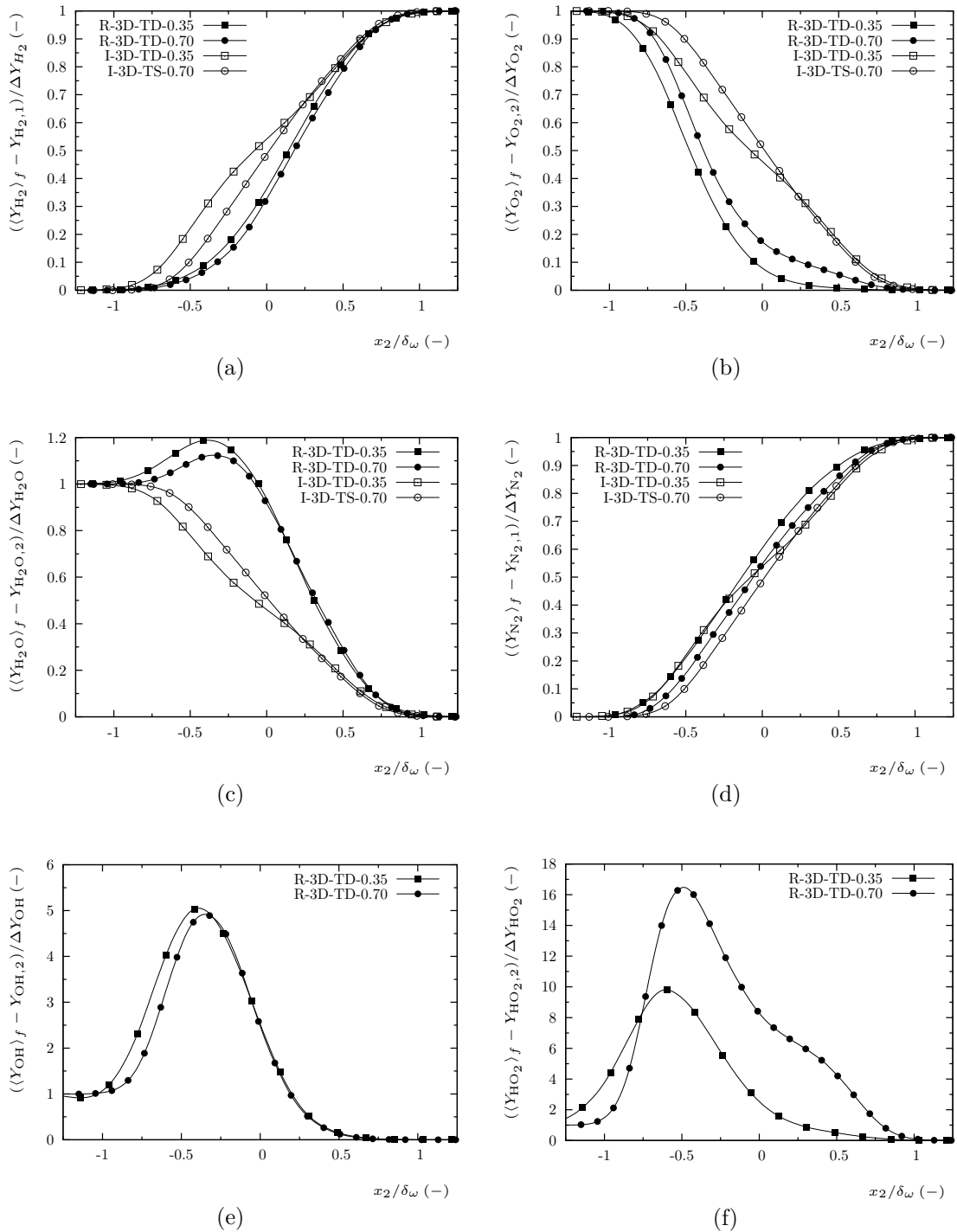


FIGURE 7.56 – Profils moyens des espèces.

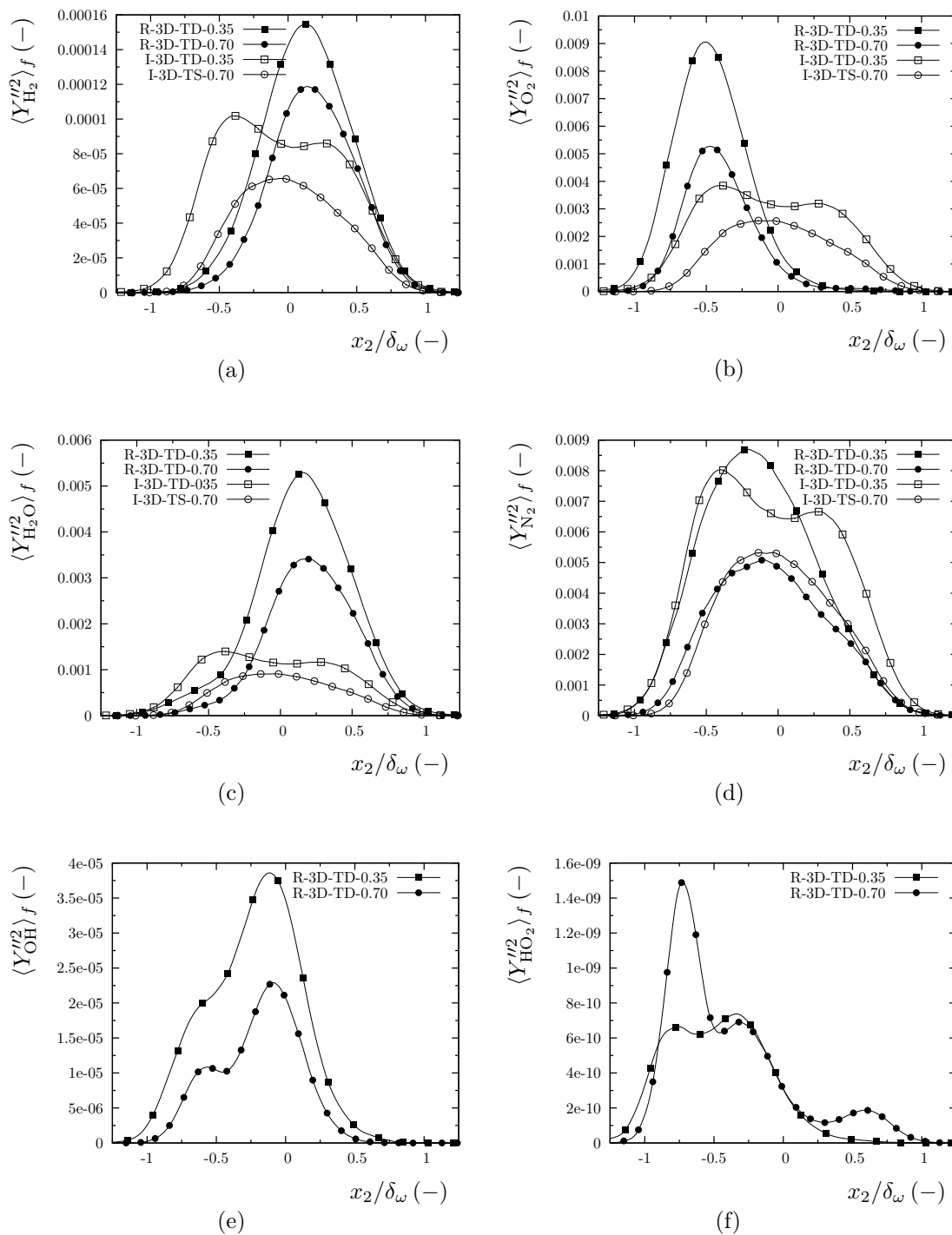


FIGURE 7.57 – Profils de variance des espèces.

7.8.2 Pdfs des variables scalaires

Pantano *et al.* [124] ont trouvé des pdfs non marchantes pour des couches de mélange inertes et des pdfs marchantes pour des couches de mélange réactives équivalentes. Ils ont associé ce changement aux effets provoqués par le taux de dégagement de chaleur, qui favorise l'apparition des pdfs marchantes, ce qui a été vérifié par diverses expériences [8, 110, 158]. Les figures 7.58–7.59 montrent les fonctions de densité de probabilité (pdfs) des espèces principales composant le mélange, pour les deux nombres de Mach convectifs retenus, en suivant la même procédure décrite dans la section 6.7.2. Les quatre premières pdfs présentent une allure très différente de celle du cas inerte équivalent (figures 6.41–6.42). En commençant par l'azote, il est évident qu'il se produit un changement de comportement de la pdf à $M_c = 0.35$. Elle devient marchante dans le cas réactif, ce qui est en accord avec les références bibliographiques données ci-dessus. A $M_c = 0.70$, les pdfs d'azote du cas inerte et réactif se confondent, en faisant sa distinction pratiquement impossible.

Pour le régime quasi incompressible (figure 7.58) les pdfs d'hydrogène, d'oxygène et de vapeur d'eau présentent en général des valeurs maximales plus faibles que celles du cas inerte pour les deux nombres de Mach convectif retenus. Cette diminution est due à la forme plus large que présentent les profils des pdfs des couches de mélange réactives, ce qui est en accord avec les niveaux des variances supérieurs des cas réactifs, présentés dans la figure 7.57. La probabilité de trouver de l'hydrogène consommé par le processus de réaction devient importante dans des plans x_2 - x_3 avec $\langle z \rangle_f \leq 0.4$. La pdf d'oxygène révèle que cette quantité peut adopter deux valeurs très probables : soit elle est nulle car elle a été complètement consommée ($\langle z \rangle_f \geq 0.3$), soit elle a une valeur correspondante à l'écoulement d'oxydant ($\langle z \rangle_f \leq 0.2$). Ces résultats montrent que l'oxygène est consommé de préférence vers le côté combustible ($x_2 > 0$) et sont cohérents avec ceux illustrés dans la figure 7.56(b), qui montrent que la plus grande consommation d'oxygène a lieu vers $x_2 \gtrsim 0$. Les régions les plus probables pour rencontrer la vapeur d'eau produite par la combustion sont situées dans des plans x_2 - x_3 avec $0.1 \leq \langle z \rangle_f \leq 0.7$. La présence de vapeur d'eau est plus remarquée dans le côté oxydant, *i.e.* valeurs de $\langle z \rangle_f$ plus faibles, comme le montre la figure 7.58(c). La présence d'un pic situé en $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.17$ correspond à la composition de vapeur d'eau dans le courant d'oxydant. Les pdfs des radicaux montrent une certaine accumulation de ces espèces chimiques vers des valeurs $Y_{\text{OH}} = 0.014$ et $Y_{\text{HO}_2} = 5.55 \cdot 10^{-5}$.

La figure 7.59 montre que la compressibilité augmente les niveaux des pdfs des cas réactifs du même rapport que dans les simulations inertes. Les pdfs sont plus pointues que celles obtenues pour $M_c = 0.35$, ce qui est consistant avec une diminution générale de la variance avec la compressibilité (voir figure 7.57). Un changement de comportement se produit dans la pdf d'oxygène, qui se rapproche de celle d'hydrogène. Cette relaxation est attribuée à la consommation d'oxygène qui ne limite ici pas autant la combustion que dans la simulation R-3D-TD-0.35. Ceci est confirmé par la diminution de production de vapeur d'eau avec la compressibilité, illustrée dans les figures 7.56(c) et 7.59(c). Les

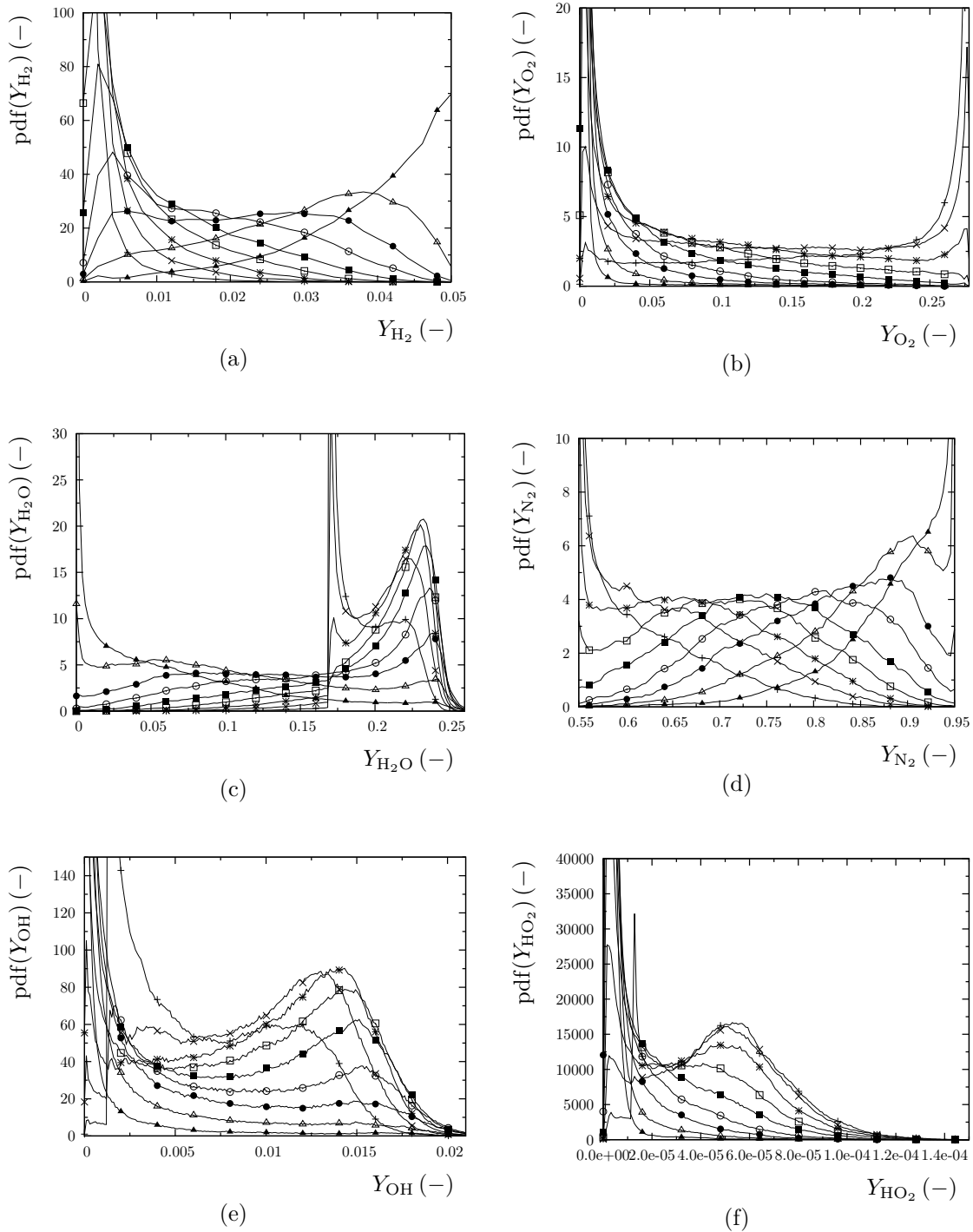


FIGURE 7.58 – Cas R-3D-TD-0.35. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.1$ (+), 0.2 (\times), 0.3 (*), 0.4 (\square), 0.5 (\blacksquare), 0.6 (\circ), 0.7 (\bullet), 0.8 (\triangle), 0.9 (\blacktriangle).

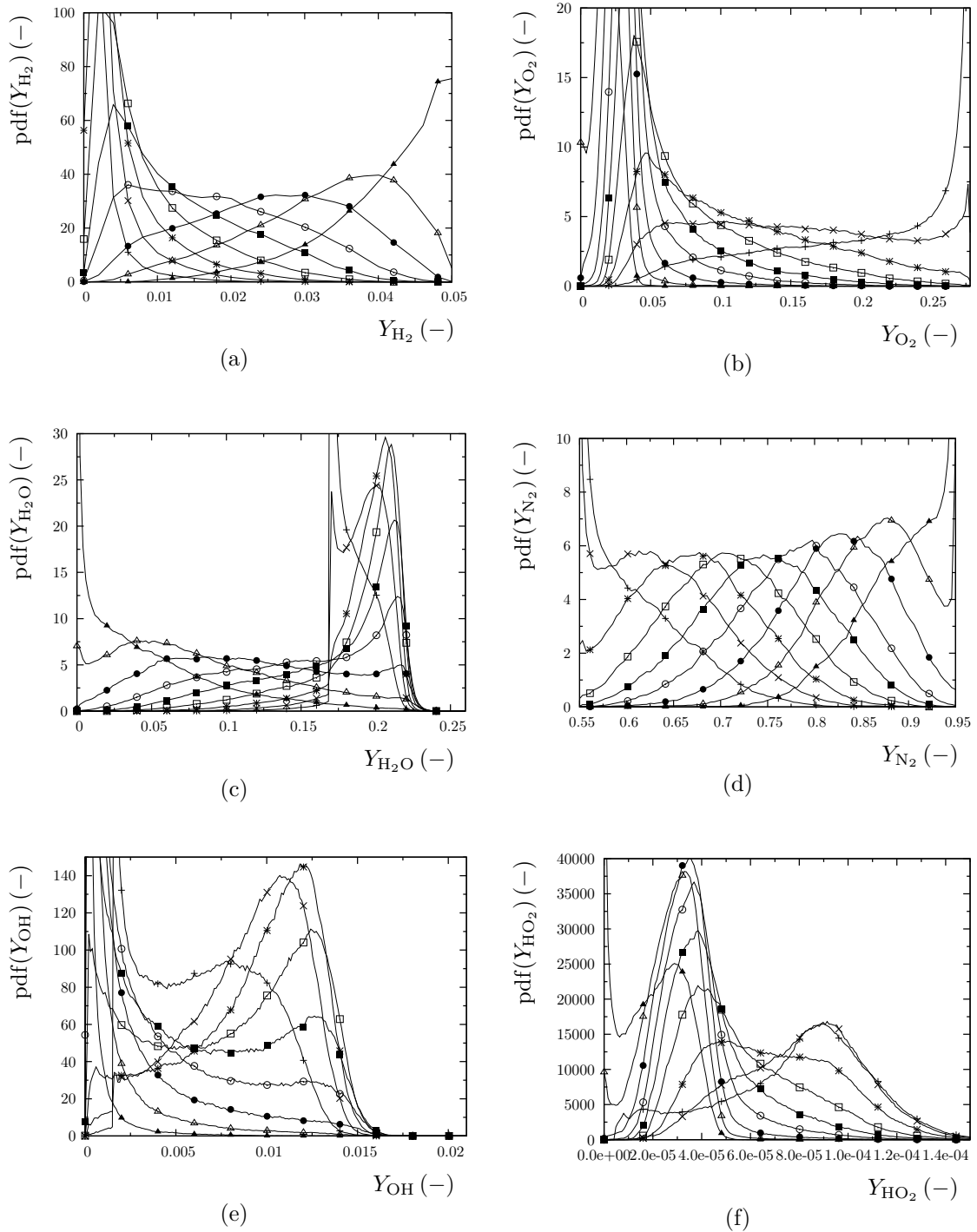


FIGURE 7.59 – Cas R-3D-TD-0.70. Pdfs des fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.58.

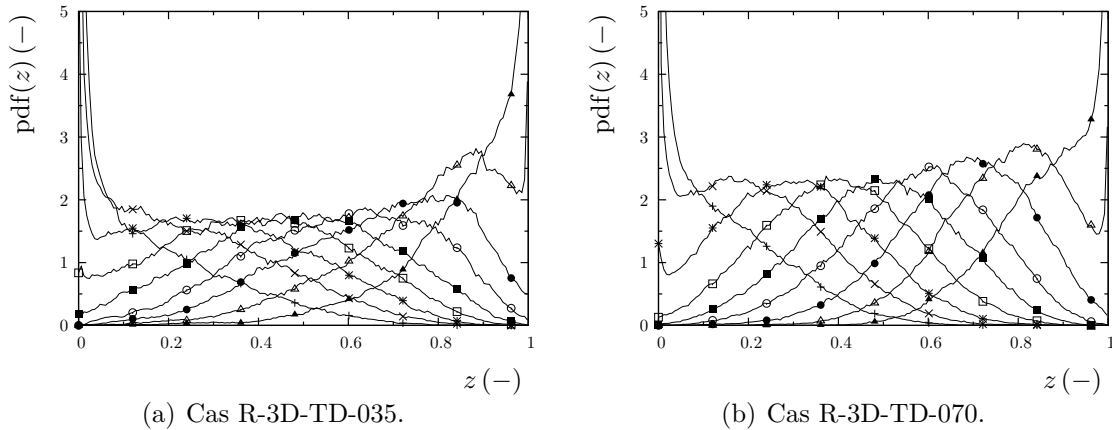


FIGURE 7.60 – Pdfs de la fraction de mélange (a) et la variable de mélange (b) dans différents plans $\langle z \rangle_f$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.58.

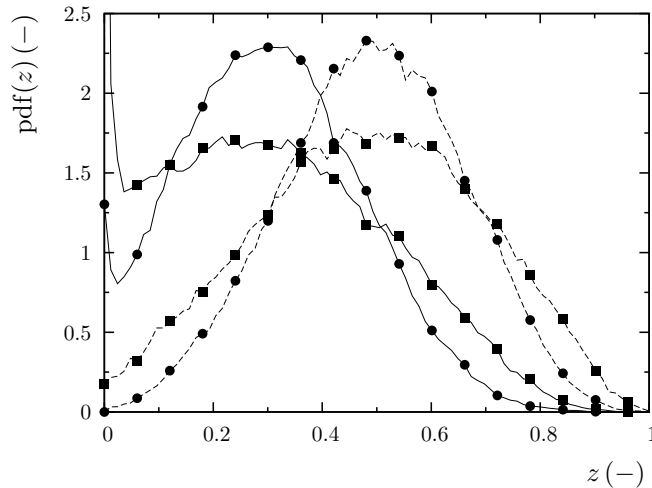


FIGURE 7.61 – Pdf de la fraction de mélange (cas R-3D-TD-0.35) et la variable de mélange (cas R-3D-TD-0.70) fractions massiques dans différents plans $\langle z \rangle_f = 0.3$ (—), 0.5 (- -), et différents $M_c = 0.35$ (■), 0.70 (●).

pics de la pdf d'hydroxyde deviennent plus prononcés et se décalent légèrement vers des valeurs de fraction massique plus faibles. La pdf du radical hydroperoxyde présente deux pics à $Y_{\text{HO}_2} = 3 \cdot 10^{-5}$ et $Y_{\text{HO}_2} = 9 \cdot 10^{-5}$. Le deuxième pic change de position avec la compressibilité tout en conservant sa valeur maximale.

Pour démontrer le caractère marchant des pdfs selon Mungal & Dimotakis [115], les pdfs de la fraction massique (cas R-3D-TD-0.35) et de la variable massique (cas R-3D-TD-0.70) sont tracées en fonction de la variable correspondant dans la figure 7.60. Les pics des pdfs se situent à la valeur de z correspondant au plan dans lequel elles ont été obtenues, confirmant ainsi le caractère marchante des pdfs.

La figure 7.61 compare les pdfs de la variable z pour les simulations réactives à différents nombres de Mach convectif. L'effet de la compressibilité sur la forme des pdfs n'est pas négligeable. Comme dans le cas inerte, la compressibilité réduit les fluctuations des

variables scalaires et, en conséquence, la forme des pdfs dévient plus étroite et pointue. A nouveau, la compressibilité a un rôle plus importante avec l'utilisation d'une chimie détaillée, contrairement aux résultats obtenus utilisant une chimie infiniment rapide [101].

7.8.3 Equation de transport de la variance d'un scalaire

L'équation de transport de la variance d'un scalaire (6.26) montrée dans la section 6.7.3 peut être réutilisée dans les simulations réactives. Cependant, un terme additionnel chimique doit être considéré pour les espèces réactives. Dans la suite, ce terme ne sera pas pris en compte car, pour la majorité des espèces considérées, son influence est considérée comme étant négligeable par rapport aux autres termes intervenant dans le bilan. Les résultats présentés ci-dessous confirment cette hypothèse.

La figure 7.62 montre la contribution des termes intervenant dans l'équation (6.26), pour les principales espèces considérées. Les niveaux de ces termes sont légèrement supérieurs à ceux des simulations inertes pour les trois premières espèces. Ceci est attribué à l'augmentation des fluctuations scalaires qui compensent la réduction de masse volumique moyenne dans le cas réactif. Les courbes correspondantes à l'azote présentent des niveaux légèrement inférieurs aux simulations inertes, car cette espèce n'intervient pas dans la réaction. Les bilans des cas réactifs présentent une forme plus étroite que les bilans des cas inertes et, à l'exception de l'oxygène, le terme de dissipation est le terme puits le plus important. Il peut être vérifié facilement que les bilans des quatre premières espèces se ferment assez bien sans prendre en compte l'influence du terme source chimique. En conséquence, il en est déduit que ce terme est négligeable pour ces espèces. Cependant, ceci n'est plus le cas pour les radicaux OH et HO₂. En effet, le terme de dissipation scalaire correspondant à ces deux quantités ne compense pas les autres termes du bilan, ce qui suggère que le terme de réaction devient le terme source le plus important pour ces radicaux.

La figure 7.63 montre les contributions les plus importantes du terme de dissipation scalaire (6.27). Les résultats obtenus ont la même tendance que ceux présentés dans la section 6.7.3 : la contribution moyenne est complètement négligeable par rapport à l'instantanée. A nouveau, il est important de remarquer que la compressibilité affecte de manière différente chaque espèce.

L'équation de transport de la fraction (ou variable) de mélange peut aussi être étudiée pour les simulations réactives présentées dans ce chapitre. Cette équation s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \langle \frac{1}{2} \rho z''^2 \rangle = & - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \rho u_k'' z''^2 \rangle - \langle \rho u_k'' z'' \rangle \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} z'' \rangle - \langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} \frac{\partial z''}{\partial x_k} \rangle, \end{aligned} \quad (7.10)$$

où le premier terme à droite de l'égalité est le transport turbulent, le deuxième est le terme de production turbulente, le troisième le terme de diffusion moléculaire et le dernier est le terme de dissipation scalaire. Pour la simulation R-3D-TD-0.35 le coefficient de diffusion

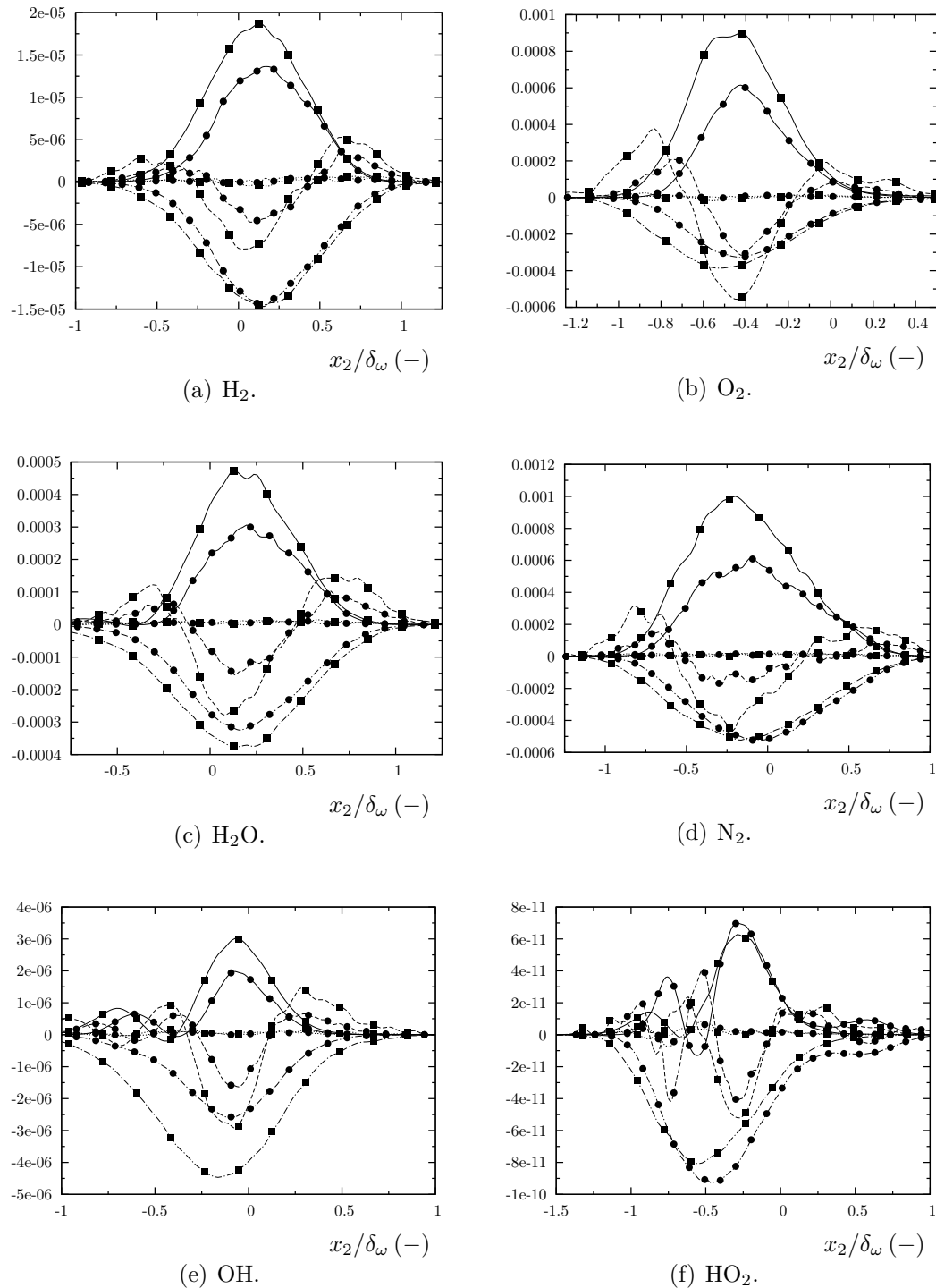


FIGURE 7.62 – Bilan de l'équation de transport de la variance d'un scalaire, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production $(-)$, de transport $(- -)$, de diffusion $(\cdot \cdot \cdot)$ et de dissipation $(- \cdot -)$. Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.

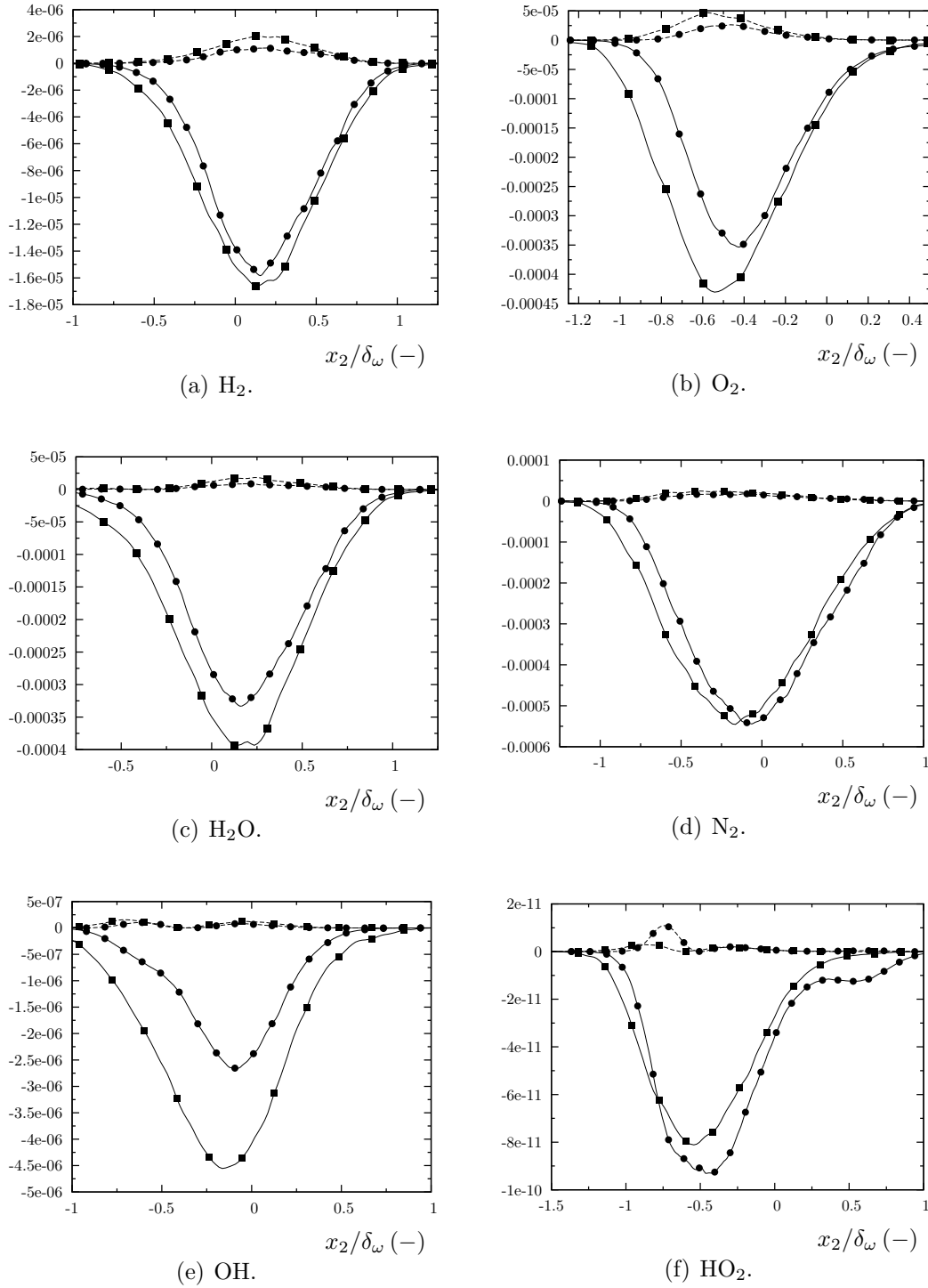


FIGURE 7.63 – Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_{Y_α} normalisée par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Contribution instantanée (—) et moyenne (- -). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.

de la fraction de mélange transportée (7.8) est $D = \lambda/\rho c_p$, *i.e.* Lewis unitaire, tandis que pour la simulation R-3D-TD-0.70 le coefficient de diffusion de la variable de mélange est calculé à partir d'une moyenne des flux massiques diffusifs [128, 129]. La variable de mélange calculée à partir de la relation (6.25) est supposée suivre l'équation de transport

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho z u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \right), \quad (7.11)$$

avec un coefficient de diffusion moyen donné par

$$\rho D \|\nabla z\| = \frac{\sum_{\gamma} \|\mathbf{a}_{\gamma}\|}{\sum_{\gamma} |a_{\gamma,c} - a_{\gamma,o}|}, \quad (7.12)$$

avec

$$a_{\gamma i} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\rho Y_{\alpha} V_{\alpha i} N_{\alpha \gamma} A_{\gamma}}{W_{\alpha}}, \quad i = 1, \dots, 3. \quad (7.13)$$

Le terme de dissipation scalaire ϵ_z de l'équation (7.10) peut se décomposer sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \epsilon_z = -\left\langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} \frac{\partial z''}{\partial x_k} \right\rangle &= -\underbrace{\left\langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} \frac{\partial z}{\partial x_k} \right\rangle}_{\text{I}} + \underbrace{\left\langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} \right\rangle \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k}}_{\text{II}} = \\ &= -\underbrace{\left\langle \rho D \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k} \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k} \right\rangle}_{\text{III}} - 2 \underbrace{\left\langle \rho D \frac{\partial z''}{\partial x_k} \right\rangle \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k}}_{\text{IV}} \\ &= -\underbrace{\left\langle \rho D \frac{\partial z''}{\partial x_k} \frac{\partial z''}{\partial x_k} \right\rangle}_{\text{V}} + \left\langle \rho D \frac{\partial z}{\partial x_k} \right\rangle \frac{\partial \langle z \rangle_f}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (7.14)$$

ce qui permet d'étudier séparément la contribution instantanée des 5 termes composant cette quantité.

La figure 7.64 montre les contributions des termes de l'équation (7.10). A $M_c = 0.35$, les différences entre la fraction de mélange transportée et la variable de mélange calculée sont négligeables comme le montre la figure 7.64(a). Les deux bilans sont assez bien équilibrés pour les deux régimes de compressibilité. Le terme de dissipation scalaire ϵ_z reste pratiquement inchangé avec le nombre de Mach convectif comme c'était le cas pour les simulations inertes.

La figure 7.65 montre la contribution de différentes quantités au terme de dissipation scalaire ϵ_z . Comme dans les simulations inertes, le terme II correspondant à la contribution instantanée est le plus important. Ce terme peut être ensuite décomposé en trois termes. Les deux premières, termes III et IV, sont très similaires entre eux et s'annulent pratiquement. Le terme V correspond à la contribution fluctuante et constitue, comme attendu, la quasi totalité de la dissipation scalaire.

Pour conclure avec cette section, la possible utilisation de la variable de mélange calculée (6.25) comme substitut de la fraction de mélange (7.8) est à nouveau justifiée

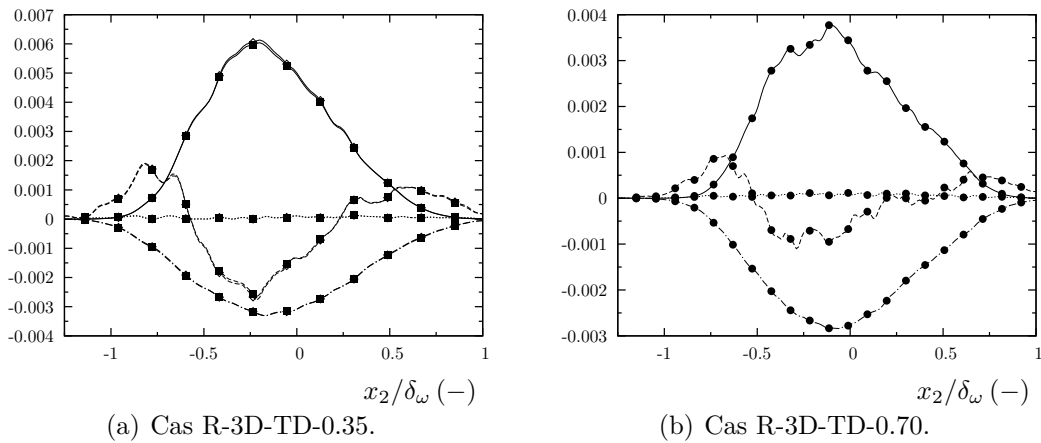


FIGURE 7.64 – Bilan de l'équation de transport de la variance de la fraction et la variable de mélange, normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Terme de production (—), de transport (- -), de diffusion ($\cdot \cdot \cdot$) et de dissipation (- · -). Figure (a) : fraction de mélange transportée (■) et variable de mélange calculée (\diamond). Figure (b) : variable de mélange calculée (\bullet).

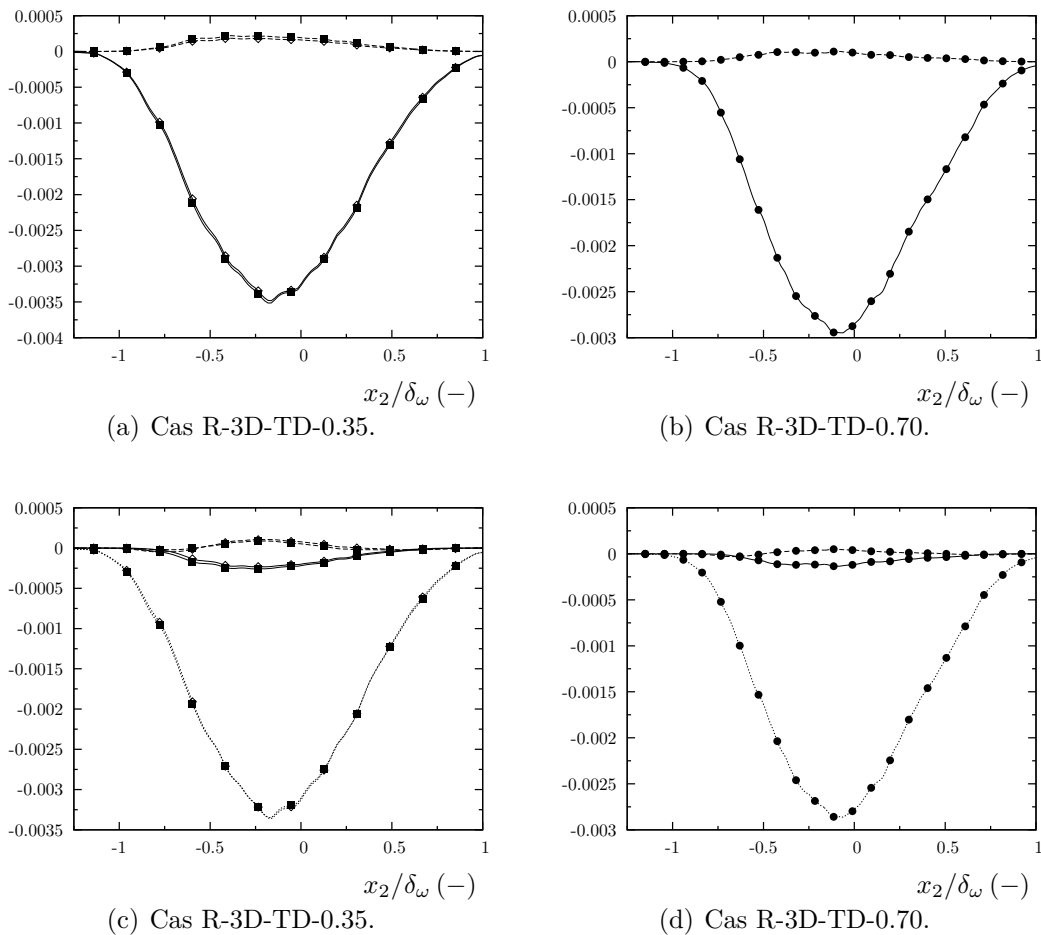


FIGURE 7.65 – Décomposition du terme de dissipation scalaire ϵ_z , normalisé par $\rho_0 \Delta U / \delta_\omega$. Figures (a)–(b) : terme I (—) et II (- -). Figures (c)–(d) : terme III (—), IV (- -) et V ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.64.

pour la simulation R-3D-TD-0.35.

7.8.4 Flux scalaires

Les figures 7.66–7.67 montrent les flux scalaires $\langle \rho u_k'' Y_\alpha'' \rangle$ pour les principales espèces et différentes valeurs du nombre de Mach convectif, en fonction de $x_2/\delta_{\omega,0}$ et z , respectivement. L'effet dû au dégagement de chaleur contribue à augmenter les niveaux des flux pour les principales espèces. Cette augmentation dépend de l'espèce considérée. Cependant, l'effet de la compressibilité provoque la réduction de l'intensité des fluctuations des espèces (voir figure 7.56) et, en conséquence, des flux scalaires. Enfin, la figure 7.68 présente l'évolution des flux scalaires $\langle \rho u_k'' z'' \rangle$. Les résultats confirment à nouveau qu'à $M_c = 0.35$ la variable de mélange constitue une très bonne approximation de la fraction de mélange.

L'hypothèse de “loi gradient” sur les couches de mélange réactives est vérifiée à l'aide de la figure 7.69. Comme annoncé dans le chapitre précédent, cette figure illustre le comportement des termes correspondant aux composantes longitudinale et transversale du flux $\langle u_i'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_i)$. La composante transversale est toujours négative et, contrairement aux simulations inertes, les niveaux minimum se situent à différentes valeurs de la fraction massique en fonction du régime de compressibilité. De plus, la compressibilité ne contribue pas à la diminution de ces pics, comme c'était le cas dans les couches inertes. La composante longitudinale oscille autour de zéro. On notera que les niveaux de flux diminuent notablement avec le dégagement de chaleur. Enfin, il peut être conclu que les couches de mélange réactives et inertes vérifient la loi gradient pour les régimes de compressibilité considérés dans ce travail.

7.9 Etude des shocklets

La figure 7.70 montre les champs instantanés de dilatation et du gradient normalisé de pression pour chaque niveau de compressibilité retenu, dans des plans x_1-x_2 placés en $x_3 = L_3/2$. Ces champs ne présentent pas des fortes diminutions de dilatation. A $M_c = 0.70$, les gradients de pression sont moins marqués dans le courant supérieur de combustible par rapport à ceux observés dans le cas inerte équivalent (figure 6.52(d)). Le dégagement de chaleur semble donc diminuer la présence des forts gradients de pression dans les écoulements parallèles.

7.10 Récapitulatif

Le but de ce chapitre était l'étude par simulation numérique directe des couches de mélange compressibles réactives tridimensionnelles se développant spatialement et naturellement. Une description détaillée des termes de transport moléculaire et de la cinétique chimique a été effectuée. Les simulations réactives considérées sont équivalentes à celles du chapitre précédent en termes de mélange et compressibilité. La prise en compte

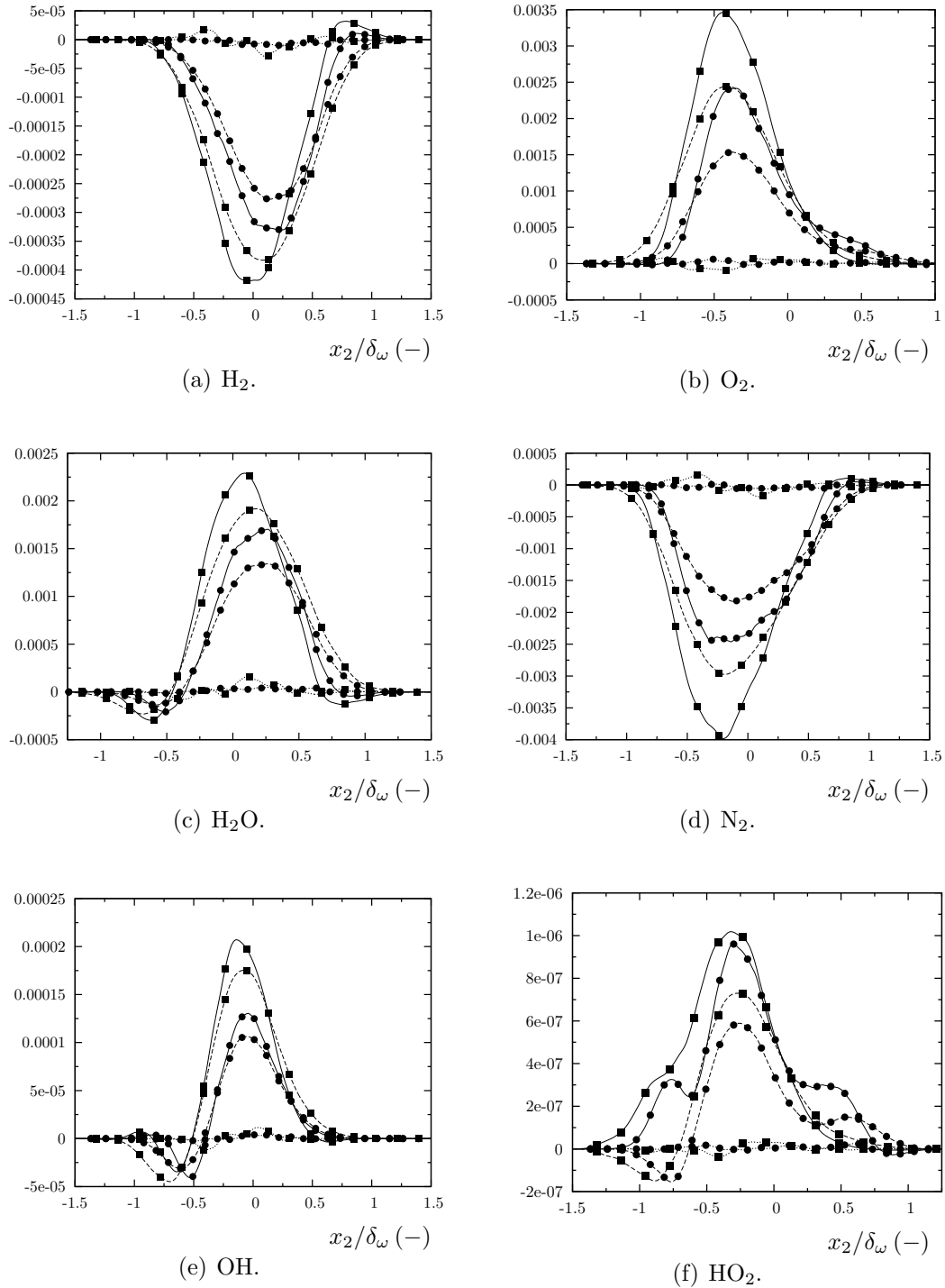


FIGURE 7.66 – Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot \cdot \cdot$). Les symboles sont identiques à ceux utilisés dans la figure 7.61.

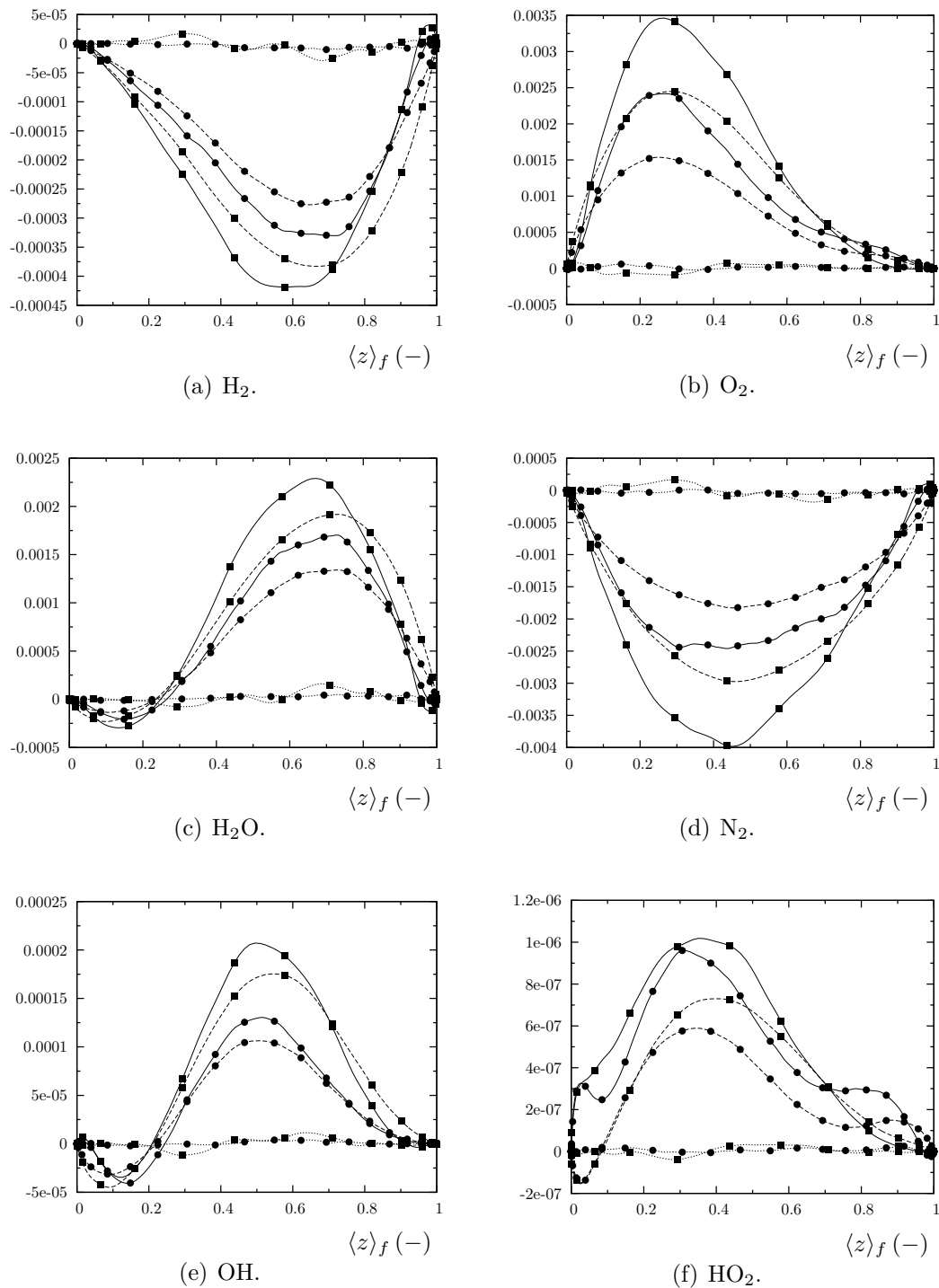


FIGURE 7.67 – Profils de flux scalaires, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la variable de mélange. Lignes et symboles comme dans la figure 7.66.

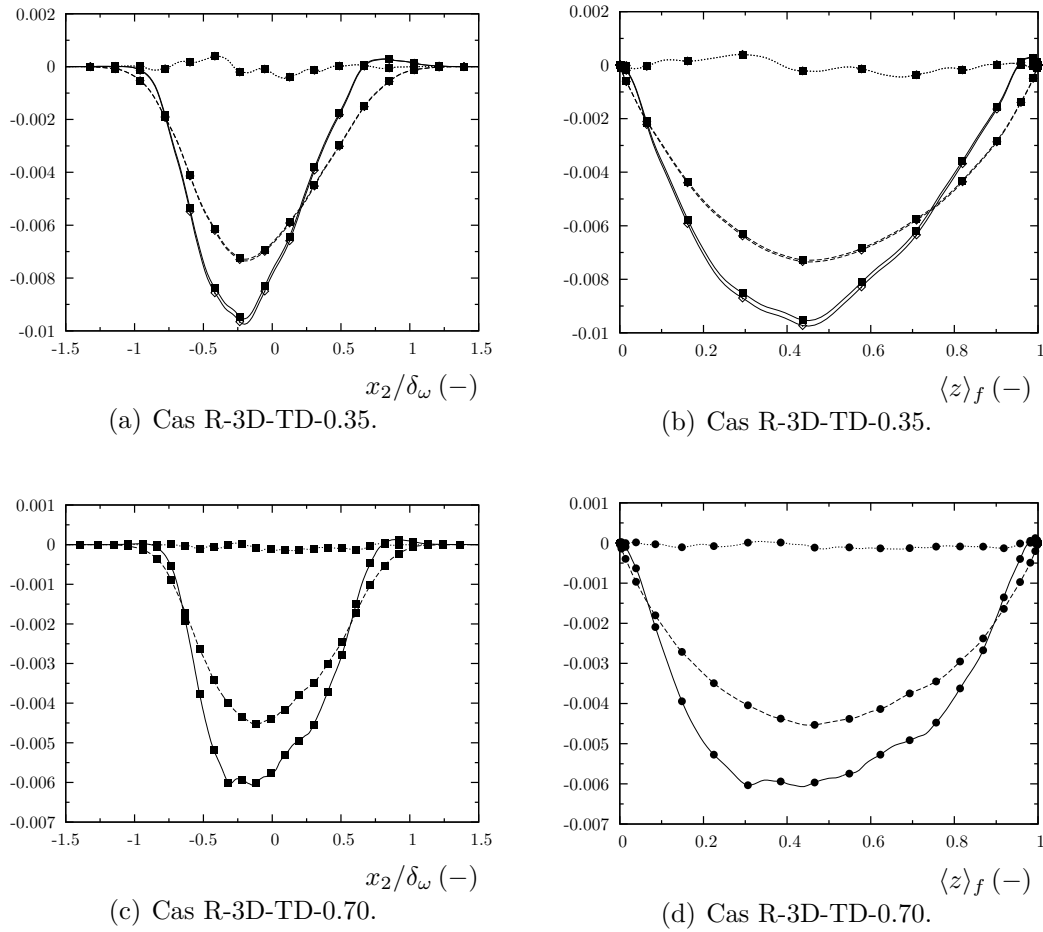


FIGURE 7.68 – Profils de flux scalaires de la fraction et la variable de mélange, normalisés par $\rho_0 \Delta U$ et tracés en fonction de la coordonnée transversale et la variable de mélange. Composante longitudinale (—), transversale (- -) et selon l'envergure ($\cdot \cdot \cdot$). Figures (a)–(b) : fraction de mélange transportée (■) et variable de mélange calculée (◇). Figures (c)–(d) : variable de mélange calculée (●).

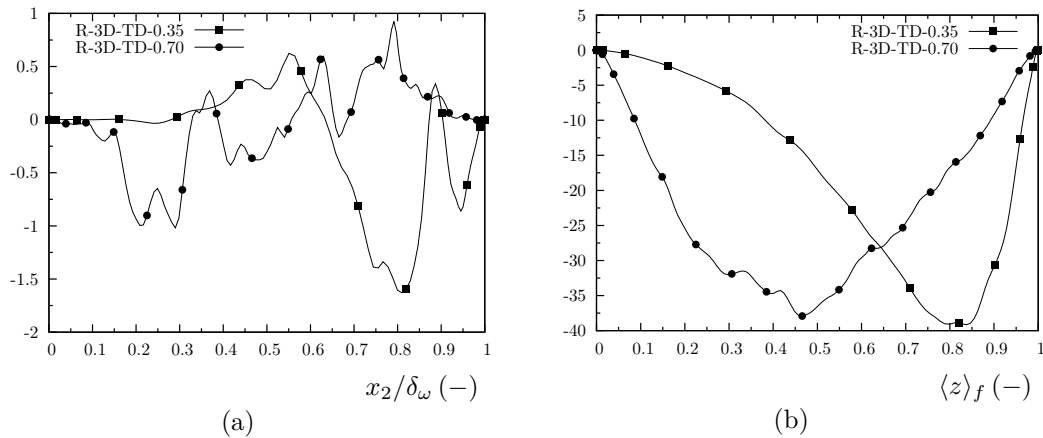


FIGURE 7.69 – Vérification de la loi gradient. Composante longitudinale de flux (a) : $\langle u_1'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_1) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$. Composante transversale de flux (b) : $\langle u_2'' z'' \rangle_f (\partial \langle z \rangle_f / \partial x_2) / (\Delta U / \delta_{\omega,0})$.

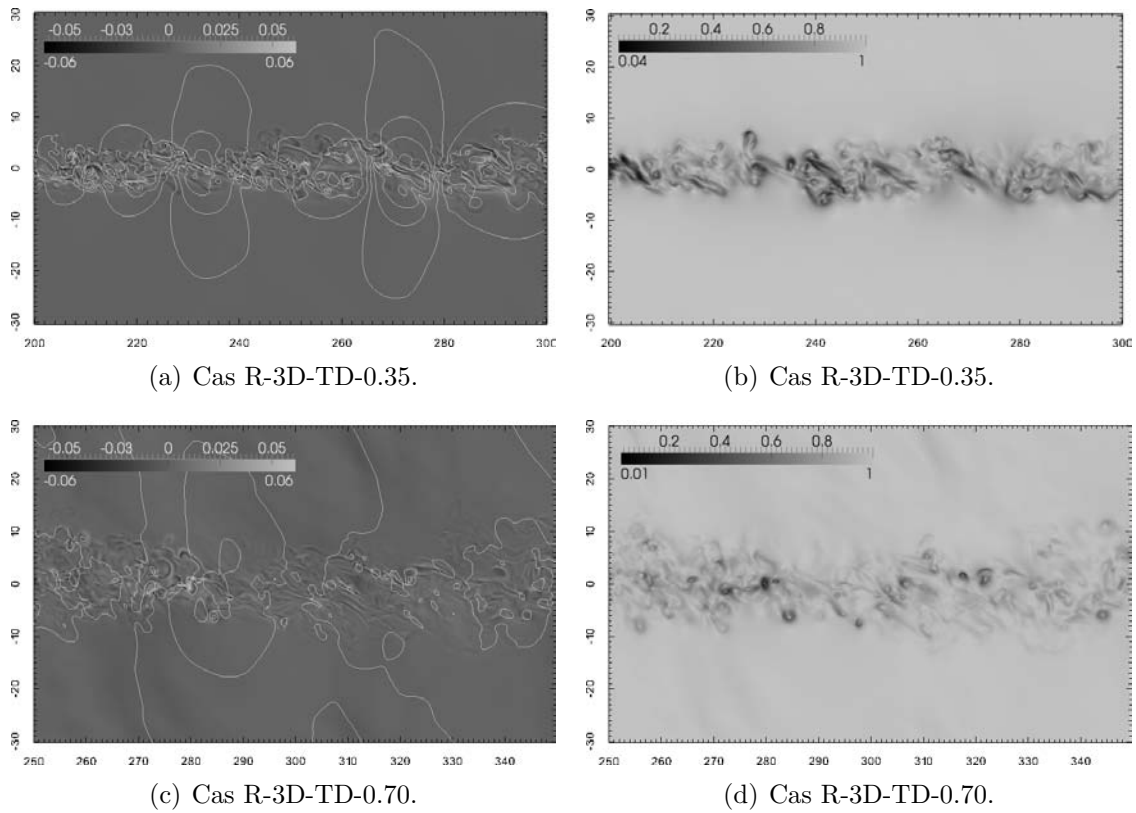


FIGURE 7.70 – Champs instantanés de dilatation normalisés par $\Delta U/\delta_{\omega,0}$ avec superposition des isolignes de pression (figures (a) et (c)) et champs instantanés de gradient normalisé de pression (figures (b) et (d)).

des termes sources chimiques des équations de Navier-Stokes permet l'auto-inflammation du mélange. Pour la simulation conduite à $M_c = 0.35$ (R-3D-TD-0.35), une équation de transport additionnelle d'un scalaire passif avec un coefficient de diffusion issu de l'hypothèse $Le = 1$ a été rajoutée au système d'équations de Navier-Stokes. Un des faits observés les plus remarquables est que le temps fini imposé par la cinétique chimique détaillée et la longueur finie du domaine de calcul utilisé empêche l'auto-inflammation de la couche de mélange à $M_c = 1.10$ et, en conséquence, l'étude complète des effets produits par la compressibilité et le dégagement de chaleur sur la structure des couches de mélanges réactives a été effectuée uniquement pour les simulations de couches de mélange réactives à $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$.

Ces deux simulations ont été conduites sur des temps de calcul suffisamment grands et en utilisant des tailles des domaines appropriées pour atteindre l'état d'autosimilarité. L'étude des corrélations en deux points a révélée la présence d'un pic de corrélation dans la simulation R-3D-TD-0.35. L'analyse ultérieure de ce pic a démontrée qu'il ne s'agit pas d'un problème de taille de domaine dans la direction d'homogénéité, mais de l'effet du dégagement de chaleur sûr la croissance des instabilités de la couche de mélange. Dans cet état d'autosimilarité, le taux de croissance de l'épaisseur de vorticit  evolue de mani re lin aire. Un r sultat tr s important obtenu dans ce travail est la confirmation de que l' paisseur de vorticit  de la couche de m lange ne semble pas  tre tr s affect e pour les couches de m lange r actives consid r es dans ce travail. Par rapport aux couches inertes, les cas r actifs pr sentent une l g re diminution   $M_c = 0.35$ et une augmentation plus significative   $M_c = 0.70$. Les ordres de grandeurs des variations des taux de croissance sont similaires aux variations des contraintes du tenseur de Reynolds. En g n ral, les r sultats obtenus ici sont en accord avec des  tudes exp rimentales mais plus en d saccord avec des  tudes num riques r centes r alis es   partir des simplifications sur la cin tique chimique. Une analyse portant sur la conservation de l'enthalpie totale de l' coulement a notamment montr e que l' paisseur de quantit  de mouvement ne peut pas  tre utilis e pour mesurer efficacement le taux de croissance des couches de m lange r actives se d veloppant spatialement. Les champs instantan s de temp rature et les vid os r alis s des simulations montrent une combustion entretenue de la couche de m lange   $M_c = 0.35$ tandis qu'  $M_c = 0.70$ des auto-inflammations et extinctions locales se produisent au sein de la couche de m lange. Une caract ristique qui peut  tre attribu e   l'impact du d gagement de chaleur sur la structure des couche de m lange r actives est le lissage g n ral des champs instantan s par rapport aux champs inertes.

Une  tude plus  labor e sur l'auto-inflammation   diff rentes r gimes de compressibilit  a  t  effectu e pour mieux comprendre les cons quences de la compressibilit  sur les inflammations et extinctions locales au sein de la couche de m lange. Cette  tude a port  sur les  tapes  l mentaires impliqu es dans les taux de production des certaines esp ces interm diaires, les niveaux du taux de dissipation scalaire, le nombre de Damk hler et l'indice de Takeno, entre autres. Les r sultats obtenus confirment que l'auto-inflammation de l' coulement a lieu dans des r gions o  les gradients de combustible et d'oxydant sont oppos s,   des valeurs de fraction de m lange proches, mais l g rement plus petites, que

la fraction de mélange la plus réactive pouvant être déduite *a priori* d'un calcul PSR. De plus, il a été montré que, pour des couches de mélange supersoniques, des distributions *classiques* de type log-normale ne peuvent pas s'appliquer sur certaines variables d'intérêt pratique pour la combustion, comme c'est le cas du nombre de Damköhler ou du taux de dissipation scalaire.

Les effets provoqués par la compressibilité sur les couches de mélange réactives ont un impact comparable à celui des cas inertes, ce qui est à relier à l'emploi d'une cinétique chimique détaillée. Des résultats correspondant à des simulations de couches de mélange réactives temporelles conduites avec une chimie infiniment rapide présentent un comportement assez similaire à différents nombres de Mach convectif et les profils de certaines quantités semblent ainsi se superposer les uns aux autres : ce qui a été nommé ici comme "effet de superposition". Avec l'utilisation d'une chimie détaillée, le champ moyen de température présente des valeurs plus faibles avec la compressibilité, contrairement aux simulations inertes. Ainsi, l'augmentation de température par frottement visqueux avec M_c n'est pas suffisante pour produire les conditions favorables à une combustion soutenue au sein de la couche de mélange. Ces conditions sont d'autant moins favorables que le nombre de Mach convectif augmente : à $M_c = 1.10$ l'auto-ignition de l'écoulement n'a simplement pas lieu dans le domaine de calcul utilisé. Le dégagement de chaleur provoque une augmentation des fluctuations de nature entropique de masse volumique et température par rapport aux cas inertes. La diminution du nombre de Mach turbulent et Mach de gradient dans les cas réactifs est aussi constatée tandis que la corrélation entre ces deux quantités ne semble pas être influencée par le dégagement de chaleur.

L'étude des équations de transport de l'enstrophie, de l'énergie cinétique turbulente et les contraintes du tenseur de Reynolds a montré que les bilans présentent, en général, des niveaux plus faibles des diverses contributions, en conséquence à la fois du dégagement de chaleur et de la compressibilité. Cette diminution a été principalement reliée à la réduction de la valeur moyenne de la masse volumique (ou "effet de masse volumique moyenne"), en conséquence de l'augmentation de la température de l'écoulement. Ainsi, avec un changement de normalisation adéquat, il est possible de séparer, jusqu'à un certain niveau, les effets de dégagement de chaleur et compressibilité, comme il a été montré pour l'énergie cinétique turbulente. La réduction des termes composant les équations de transport avec le dégagement de chaleur et la compressibilité n'est cependant pas comparable à la diminution du taux de croissance des couches de mélange réactives. Ainsi, les résultats obtenus dans ce travail ne confortent pas complètement les conclusions tirées par d'autres auteurs.

L'influence de la compressibilité et du dégagement de chaleur sur le mélange scalaire a été aussi abordé dans les couches de mélanges réactives. Un intérêt particulier a été placé sur la définition de la "variable de mélange" en tant qu'un scalaire passif calculé *a posteriori* pour remplacer la "fraction de mélange" transporté par l'écoulement. Les résultats obtenus suggèrent que cette variable de mélange est une très bonne approximation de la fraction de mélange transportée. Les profils moyens des espèces chimiques présentent une allure assez différente du cas inerte et les niveaux des variances des espèces

réactives augmentent par rapport à ceux des cas inertes, de par leur participation au processus de réaction. Par contre, la variance de l'azote (espèce passive du point de vue de la combustion) présente des niveaux similaires au cas inerte. Les radicaux hydroxyde et hydroperoxyde suivent des évolutions très différentes aux quatre espèces principales : H_2 , O_2 , H_2O et N_2 . Dans les cas réactifs, la pdfs de la fraction (ou variable) massique ainsi que celle de l'azote montrent un comportement de type marchante, ce qui est confirmé rigoureusement par la pdf de z . A $M_c = 0.35$, les pdfs non marchantes du cas inerte deviennent marchantes dans le cas réactif. Ces pdfs montrent aussi que la probabilité de trouver de l'hydrogène ou de l'oxygène consommé, ou même de la vapeur d'eau produite dans le processus de combustion, est très dépendante de la position transversale, définie avec une valeur moyenne de la fraction massique. Pour les radicaux considérés, le régime de compressibilité change de manière non négligeable la forme des pdfs. L'effet de la compressibilité a été étudié sur le champ scalaire, en révélant que son principal effet est la réduction des fluctuations, ce qui conduit à des valeurs de variance affaiblies et des distributions des pdfs plus pointues et étroites. L'étude des termes formant l'équation de transport de la variance d'un scalaire a permis de vérifier que les termes sources chimiques de cette équation peuvent être négligés pour les espèces principales composant le mélange. Par contre, l'allure des bilans correspondant aux radicaux suggère que l'influence de ces termes sources n'est pas négligeable. L'analyse des termes de l'équation de transport de la variance de la fraction et variable de mélange a été aussi effectuée, en montrant que le terme puits le plus important est celui de la dissipation scalaire. La contribution la plus importante de ce terme est associée à sa partie fluctuante. Finalement, l'analyse des flux scalaires a été effectuée avec des résultats assez proches de ceux obtenus dans le cas inerte : la compressibilité diminue l'intensité des flux entre $M_c = 0.35$ et $M_c = 0.70$ et l'hypothèse de loi gradient est bien vérifiée sur ce type d'écoulements réactifs.

Finalement, une analyse des champs instantanés de dilatation et du gradient de pression normalisé a permis de vérifier que la présence des variations importantes de pression ou dilatation négative dans des régions en dehors de la couche de mélange était réduite par le dégagement de chaleur.

Chapitre 8

Conclusions générales et perspectives

Ce travail a été consacré à l'étude par simulation numérique directe des couches de mélange inertes et réactives turbulentes, bidimensionnelles et tridimensionnelles. L'influence de la compressibilité ainsi que le dégagement de chaleur produit par deux types de cinétiques chimiques différentes sur le transport turbulent, le mélange scalaire et l'auto-inflammation des couches de mélanges, a été aussi abordé. La réalisation de ces études a été possible grâce au développement, dans le cadre de cette thèse, des outils de calcul numérique CREAMS et POSTCREAMS. Ces codes ont été développés dans une forme générique pour l'étude des mélanges de gaz réactifs, ce qui permet leur possible application sur différents types d'autres problèmes physiques d'intérêt pour la combustion turbulente. L'outil numérique CREAMS a été vérifié rigoureusement à partir de sous-problèmes fondamentaux, puis appliqué et validé sur des couches de mélange bidimensionnelles incompressibles et compressibles, inertes et réactives. La dernière étape d'application de ce code a concerné les couches de mélange tridimensionnelles inertes et réactives.

Les conclusions générales tirées de ces travaux peuvent être directement appliquées au fonctionnement des statoréacteurs et superstatoréacteurs. Dans ces moteurs, l'hydrogène est injecté dans la chambre de combustion et des couches de mélange se développent entre l'hydrogène et le courant d'oxydant. Une combustion subsonique non prémélangée peut avoir lieu dans les moteurs ramjet, tandis que dans les moteurs scramjet la combustion se développe dans des régimes supersoniques. Etant bien connu que la combustion est moins efficace à des hautes vitesses (compressibilité), une étude minutieuse et détaillée sur l'interaction entre la compressibilité et le dégagement de chaleur est nécessaire. L'objectif de ce travail a été l'obtention de nouveaux résultats permettant d'étudier les mécanismes impliqués dans ce processus de couplage.

La simulation bidimensionnelle des couches de mélange constitue une simplification de la physique mise en jeu dans les couches de mélange tridimensionnelles planes. Les résultats obtenus ont confirmé la surestimation des contraintes du tenseur de Reynolds, due au manque d'une direction d'envergure selon laquelle l'étirement tourbillonnaire peut se produire ou, encore, l'impossibilité d'effectuer des simulations à très haut nombre de Mach convectif car les instabilités des couches de mélange deviennent tridimensionnelles. L'utilisation d'une chimie globale et une chimie détaillée a aussi permis de vérifier que

la première surestime largement l'activité chimique : surestimation des champs de température et sous-estimation des délais d'auto-inflammation. Les conséquences sont dramatiques : les taux de croissance des couches de mélange sont fortement diminués de manière erronée, comparés à ceux obtenus en considérant une chimie détaillée. Le taux de croissance des couches réactives simulées avec une chimie détaillée montrent une évolution très dépendante du type de combustion ayant lieu dans la couche de mélange, qui est influencée par la compressibilité. Pour les couches bidimensionnelles, une corrélation entre le taux de croissance et les niveaux d'entropie a été trouvée. Finalement, la technique d'impact par choc a démontrée être très efficace du point de vue de la combustion, en augmentant le taux de croissance et en accélérant le processus de combustion en aval de l'onde de choc.

Les simulations tridimensionnelles de couches de mélange turbulentes inertes ont permis d'étudier plus finement l'influence de la compressibilité sur le développement de ce type d'écoulements. Il a été vérifié que l'augmentation de la compressibilité, mesurée avec le nombre de Mach convectif M_c , diminue le taux de croissance des couches de mélange. D'autres études ont déterminé que la réduction des fluctuations de pression provoquent une diminution du terme de pression-dilatation, ce dernier étant directement impliqué dans la diminution du taux de croissance. En suivant ces observations, une étude de cette quantité a révélé que la diminution des fluctuations de pression et du gradient de vitesse contribuent en fait de façon égale à la diminution de la contribution de pression-dilatation.

Les simulations tridimensionnelles des couches de mélange turbulentes réactives ont permis d'analyser l'influence de la compressibilité avec le dégagement de chaleur. Les résultats obtenus en considérant une chimie détaillée ont montré des différences notables par rapport à d'autres études portant sur des couches de mélange réactives temporelles conduites sous l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide. La première différence fondamentale concerne l'effet de la compressibilité sur la structure turbulente des couches de mélange réactives. Tandis que dans les études précédentes la compressibilité n'avait pas une influence très significative en présence de dégagement de chaleur, les résultats obtenus dans ce travail montrent que la compressibilité à un impact équivalent à celui observé pour les cas inertes. La considération d'une chimie détaillée a des conséquences importantes sur le processus de combustion et la comparaison avec d'autres études numériques n'est pas tout à fait satisfaisante pour certaines quantités analysées. Par exemple, les taux de croissance des couches de mélange réactives ne semblent pas garder une très forte dépendance au dégagement de chaleur. A différence des résultats obtenus dans d'autres études numériques, la compressibilité réduit la possibilité d'avoir une couche de mélange réactive. Sur certaines variables, le dégagement de chaleur a un effet similaire à la compressibilité, *e.g.* légère réduction des contraintes du tenseur de Reynolds ou des fluctuations de pression, tandis que d'autres variables subissent un effet contraire, *e.g.* augmentation des nombres de Mach turbulent et Mach gradient ou des fluctuations des espèces réactives. La réduction des termes des équations de transport a été principalement associée à un "effet de masse volumique moyenne", car la valeur de $\langle \rho \rangle$ diminue fortement par l'augmentation de température. Contrairement aux résultats obtenus par d'autres auteurs, la diminu-

tion du terme de pression-dilatation avec le dégagement de chaleur ne semble pas être attribuée à la diminution du taux de croissance de la couche de mélange. L'augmentation des nombres de Mach gradient et turbulent ainsi que la faible réduction des contraintes du tenseur de Reynolds présentent une corrélation plus appropriée au comportement du taux de croissance de la couche de mélange réactive. Il a aussi été montré que la substitution de la "fraction de mélange" par une "variable de mélange" calculée en post-traitement de données statistiques est tout à fait possible. La conclusion générale tirée des couches de mélange réactives conduites avec une chimie détaillée est que les effets de dégagement de chaleur sont très dépendant du régime de compressibilité considéré, qui conduit à une combustion différente.

L'analyse de l'auto-inflammation de la couche de mélange à différents degrés de compressibilité a montré des tendances similaires à celles déjà constatées dans d'autres études numériques portant sur les caractéristiques de l'auto-ignition dans des mélanges d'hydrogène-air. Les principaux résultats obtenus suggèrent que l'auto-allumage de l'écoulement et la structure de flamme dépendent de la compétition entre le degré de mélange de combustible et d'oxydant et le délai d'auto-inflammation.

Les perspectives et futurs travaux liés aux simulations tridimensionnelles turbulentes des couches de mélange inertes et réactives sont nombreuses. Les bases de données générées peuvent être réutilisées pour examiner plus en détail les effets provoqués par le dégagement de chaleur et la compressibilité. Un des points qui pourrait être traité est la dépendance entre les perturbations aléatoires utilisées pour accélérer le déclenchement naturel des instabilités de la couche de mélange et le dégagement de chaleur, évitant ainsi l'augmentation des corrélations en deux points. Il serait très intéressant de regarder, par exemple, le rapport des volumes entraînés dans la couche de mélange. Cette étude ne peut s'effectuer que sur le développement spatial des couches de mélanges, comme celles présentées ici, et à la connaissance de l'auteur, une telle étude numérique n'a jamais été réalisée auparavant sur des couches de mélange réactives. Dans les simulations bidimensionnelles, l'influence des différentes approximations chimiques a été vérifiée. Cependant, les différences entre transport détaillé et simplifié n'ont été constatées que sur une section appartenant à une couche de mélange. Les effets dus au transport moléculaire pourraient aussi être analysés plus en détail sur des couches de mélanges tridimensionnelles inertes et réactives. L'analyse de la structure de la turbulence inhomogène par effet du dégagement de chaleur, *i.e.* caractérisation de la topologie de la turbulence à travers de l'étude de l'alignement du vecteur de vorticit  avec les directions principales du tenseur de gradient de vitesse, peut  tre aussi abord e   partir des bases des donn es des couches de m lange r actives. En outre, l'influence de la compressibilit  et du taux de d gagement sur le tenseur de gradient de vitesse peut  tre aussi  tudi e.

Cette  tude peut aussi  tre utile aux simulations LES (*large eddy simulations*) ou RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) et   sa mod lisation dont elles sont tributaires. La v rification *a priori* et *a posteriori* des mod les de turbulence et de combustion incorpor s dans ce type de simulation pourra  tre directement effectu e gr ce aux DNS r alis es dans ce travail. L'interaction choc-turbulence pr sent e dans les simulations bidimension-

nelles n'a pas pu être traitée dans le cas tridimensionnel pour des contraintes de temps. L'intérêt du choix de l'approche hybride WENO-centré du code CREAMS était néanmoins précisément au cœur de la simulation de ce type d'écoulements. Ainsi, il sera utile d'étudier ce cas en détail car cette technique a démontrée être très efficace pour les couches de mélange réactives bidimensionnelles.

Les perspectives du code de calcul CREAMS et son outil de post-traitement POST-CREAMS développés dans le cadre de cette thèse sont aussi nombreuses. Actuellement, ce code constitue un outil de travail qui regroupe des méthodes numériques à haute précision et descriptions physiques détaillées des processus de combustion et transport turbulent des mélanges des gaz. Ce code est maintenant utilisé pour la DNS, mais l'incorporation envisagée d'un modèle de turbulence approprié permettra d'effectuer des LES. Ce code est mise à disposition du laboratoire de combustion et il est déjà utilisé dans un travail de thèse portant sur des jets réactifs fortement sous-détendus. Une seconde thèse consacrée à la LES d'écoulements compressibles réactifs va débiter. Le développement de l'outil POSTCREAMS est aussi une tâche à prendre en compte dans l'avenir. Cet outil est indispensable pour la visualisation et le post-traitement des bases de données et il doit être adapté à chaque type d'écoulement, *e.g.* couches de mélange, jets. . . mais ceci est une autre histoire et ce travail s'effectuera progressivement dans le cadre de thèses en cours et à venir.

Annexe A

Adimensionnement des équations de Navier-Stokes

Pour obtenir des domaines de variation proches de l'unité, où les erreurs d'arrondi et de troncature sont les plus faibles, les équations de Navier-Stokes (2.1)–(2.4) présentées dans la section 2.2 sont adimensionnées [11]. Les variables adimensionnelles de ce nouveau système d'équations (indiquées par l'exposant *) sont liées aux variables dimensionnelles par des valeurs de référence (indiquées par l'indice ref). Ces valeurs de référence, qui ne correspondent pas nécessairement à un véritable état physique, sont calculées partiellement à partir d'un état qui est, lui, physique où les relations de gaz parfait sont vérifiées, dit état à l'infini (indiqué par l'indice ∞). Bien qu'il n'y ait pas de restriction dans le choix de l'état à l'infini, il est pratique de choisir l'état des gaz frais comme état à l'infini ou celui de l'espèce majoritaire. Pour des raisons de compatibilité et, en tenant compte du nombre de degrés de liberté réellement disponibles, les relations suivantes sont imposées dans cet état de référence : $T_{\text{ref}} = T_{\infty}$, $W_{\text{ref}} = W_{\infty}$, $p_{\text{ref}} = p_{\infty}$, $\rho_{\text{ref}} = \rho_{\infty}$, $c_{p_{\text{ref}}} = c_{p_{\infty}}$, $u_{\text{ref}} = c_{\infty}/\sqrt{\gamma_{\infty}}$, $L_{\text{ref}} = L_{\infty}$, $t_{\text{ref}} = L_{\text{ref}}/u_{\text{ref}}$, $\mu_{\text{ref}} = \mu_{\infty}$, $\lambda_{\text{ref}} = \lambda_{\infty}$ et $D_{\text{ref}} = D_{\infty}$.

Le jeu de variables choisit permet de vérifier l'égalité entre les adimensionnements physique et acoustique, i.e. $p_{\text{ref}} = \rho_{\text{ref}} u_{\text{ref}}^2$. Les nombres adimensionnés de Reynolds, Mach, Prandtl et Lewis peuvent être redéfinis comme : $Re = \rho_{\text{ref}} L_{\text{ref}} u_{\infty} / \mu_{\text{ref}}$, $M = u_{\infty} / c_{\infty}$, $Pr = c_{p_{\text{ref}}} \mu_{\text{ref}} / \lambda_{\text{ref}}$ et $Le = \lambda_{\text{ref}} / (\rho_{\text{ref}} c_{p_{\text{ref}}} D_{\text{ref}})$. Finalement, les équations (2.1)–(2.4) sont réécrites sous la forme

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \rho^* u_j^*}{\partial x_j^*} = 0, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial \rho^* u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \rho^* u_i^* u_j^*}{\partial x_j^*} + \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} = \frac{M \sqrt{\gamma_{\infty}}}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}^*}{\partial x_j^*}, \quad i = 1, \dots, 3, \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial \rho^* e_t^*}{\partial t^*} + \frac{\partial (\rho^* e_t^* + p^*) u_j^*}{\partial x_j^*} = \frac{M \sqrt{\gamma_{\infty}}}{Re} \left(\frac{\partial u_i^* \tau_{ij}^*}{\partial x_j^*} - \frac{\partial q_j^*}{\partial x_j^*} \right), \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{\partial \rho^* Y_{\alpha}}{\partial t^*} + \frac{\partial \rho^* Y_{\alpha} u_j^*}{\partial x_j^*} = - \frac{M \sqrt{\gamma_{\infty}}}{Re Le Pr} \frac{\partial \rho^* Y_{\alpha} V_{\alpha j}^*}{\partial x_j^*} + \rho^* \dot{\omega}_{\alpha}^*, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (\text{A.4})$$

avec l'équation d'état du mélange donnée par $p^* = \rho^* T^* / W^*$. Les expressions d'autres

quantités telles que le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij}^* , les composantes du vecteur de flux de chaleur q_j^* et les vitesses de diffusion $V_{\alpha i}^*$ restent inchangées. Le taux de production de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce est donné par $\dot{\omega}_\alpha^* = \dot{\omega}_\alpha/t_{\text{ref}}$.

Annexe B

Forme caractéristique des équations de Navier-Stokes

Pour l'utilisation du schéma numérique de discrétisation spatiale WENO, il est approprié d'exprimer la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes sous forme caractéristique. De manière générale, la partie hyperbolique du système (2.1)–(2.4) peut s'exprimer sous forme conservative comme

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} = 0, \quad (\text{B.1})$$

où Q est le vecteur des variables conservées

$$Q = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho e_t, \rho Y_1, \dots, \rho Y_N)^t, \quad (\text{B.2})$$

et F_j est le vecteur des flux convectifs dans la direction j

$$F_j = u_j Q + p(0, \delta_{1j}, \delta_{2j}, \delta_{3j}, u_j, 0, \dots, 0)^t. \quad (\text{B.3})$$

L'équation (B.1) peut être réécrite de la façon suivante

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial x_j} = 0, \quad (\text{B.4})$$

et la matrice jacobienne du système dans la direction j est donnée par

$$A_j = \frac{\partial F_j}{\partial Q} = \frac{\partial F_j}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial Q}, \quad (\text{B.5})$$

avec U étant le vecteur des variables primitives

$$U = (\rho, u_1, u_2, u_3, e_t, Y_1, \dots, Y_N)^t. \quad (\text{B.6})$$

L'expression analytique des vecteurs propres de la matrice jacobienne du système (B.5) doit être connue lors de la procédure de calcul des flux caractéristiques du schéma WENO.

Dans la suite, l'expression analytique de la matrice jacobienne A_j est donnée pour la première direction de l'espace ($j = 1$). Les expressions pour les autres directions de l'espace peuvent être obtenues de manière analogue. De plus, toutes les grandeurs présentées dans la suite ont été préalablement adimensionnées conformément à la procédure décrite dans l'annexe A (pour des raisons de simplicité, l'indice * ne sera pas utilisé).

La matrice de passage $P = \partial U / \partial Q$ est donnée par

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_2 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ e_t & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \rho c_v & \rho \psi_1 & \rho \psi_2 & \cdots & \cdots & \rho \psi_N \\ Y_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho & 0 \\ Y_N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

avec $\psi_\alpha = h_\alpha - T/W_\alpha$ et la matrice des flux $G_1 = \partial F_1 / \partial U$ s'exprime comme

$$G_1 = \begin{pmatrix} u_1 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1^2 + T/W & 2\rho u_1 & 0 & 0 & \rho/W & \rho T/W_1 & \rho T/W_2 & \cdots & \cdots & \rho T/W_N \\ u_1 u_2 & \rho u_2 & \rho u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1 u_3 & \rho u_3 & 0 & \rho u_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1 h_t & \rho(u_1^2 + h_t) & \rho u_1 u_2 & \rho u_1 u_3 & \rho u_1 c_p & \rho u_1 h_1 & \rho u_1 h_2 & \cdots & \cdots & \rho u_1 h_N \\ u_1 Y_1 & \rho Y_1 & 0 & 0 & 0 & \rho u_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1 Y_2 & \rho Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho u_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho u_1 & 0 \\ u_1 Y_N & \rho Y_N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho u_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

avec $h_t = h + k$ et $k = u_i u_i / 2$. Les deux matrices précédentes contiennent information sur les chaleurs spécifiques, enthalpies et fractions massiques de chaque espèce. Dans ces matrices, la présence des chaleurs spécifiques à volume constante (ou pression constante) provient de la dérivation de l'énergie (ou enthalpie) par rapport à la température :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e_t}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left(\rho \int_{T^0}^T \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha c_{v\alpha}(T) dT - \rho \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha \frac{T^0}{W_\alpha} + \rho \Delta h_{f\alpha}^0 + \rho \frac{u_i u_i}{2} \right) \\ &= \rho \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha c_{v\alpha}(T) = \rho c_v. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Le produit matriciel de ces deux matrices amène finalement à l'expression de la matrice jacobienne (B.12) avec $\gamma_1 = 1 - \gamma$, $\gamma_3 = 3 - \gamma$ et $\xi_\alpha = (h_\alpha - \gamma \psi_\alpha) / (\gamma - 1)$. Cette matrice

peut être ensuite diagonalisée, $A_1 = R_1 \Lambda_1 R_1^{-1}$, avec

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} u_1 - c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & u_1 + c & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

et

$$R_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_1 - c & u_1 & u_1 + c & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_2 & u_2 & u_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u_3 & u_3 & u_3 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ h_t - cu_1 & k & h_t + cu_1 & u_2 & u_3 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ Y_1 & 0 & Y_1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ Y_2 & 0 & Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ Y_N & 0 & Y_N & 0 & 0 & -1/\xi_N & -\xi_1/\xi_N & \cdots & -\xi_{N-2}/\xi_N & -\xi_{N-1}/\xi_N \end{pmatrix}, \quad (\text{B.11})$$

et son inverse R_1^{-1} donnée par (B.13). Les variables suivantes sont utilisées pour simplifier l'écriture de R_1^{-1} : $b_1 = \gamma - 1/c^2$, $b_2 = kb_1$, $\chi = b_2 - b_1 h_t$, $\eta_{\alpha,\beta} = -b_1 Y_\alpha \xi_\beta$ pour $\alpha \neq \beta$ et $\eta_{\alpha,\alpha} = 1 - b_1 Y_\alpha \xi_\alpha$.

La forme caractéristique du système hyperbolique (B.1) est obtenue par multiplication de la matrice de vecteurs propres à droite R_j^{-1} . Le nouveau système d'équations s'exprime comme

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F_{s_j}}{\partial x_j} = 0, \quad j = 1, \dots, 3, \quad (\text{B.14})$$

où $W = R_j^{-1} Q$ est le vecteur des variables caractéristiques et $F_{s_j} = R_j^{-1} F_j$ est le vecteur des flux caractéristiques.

$$\begin{aligned}
 & \text{(B.12)} \\
 & A_1 = \begin{pmatrix}
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -(\gamma_1 k + u_1^2) & \gamma_3 u_1 & \gamma_1 u_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_1 \xi_1 & 0 & \dots & -\gamma_1 \xi_N \\
 -u_1 u_2 & u_2 & u_1 & \gamma_1 u_3 & -\gamma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -u_1 u_3 & u_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -(\gamma_1 k + h_t) u_1 & h_t + \gamma_1 v_1^2 & \gamma_1 u_1 u_2 & \gamma_1 u_1 u_3 & \gamma u_1 & -\gamma_1 u_1 \xi_1 & -\gamma_1 u_1 \xi_2 & -\gamma_1 u_1 \xi_N & 0 & \dots & 0 \\
 -u_1 Y_1 & Y_1 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -u_1 Y_2 & Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -u_1 Y_N & Y_N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & u_1
 \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{R}_1^{-1} = \begin{pmatrix}
(b_2 + u_1/c)/2 & -(b_1 u_1 + 1/c)/2 & -(b_1 u_3)/2 & b_1/2 & (b_1 \xi_1)/2 & (b_1 \xi_2)/2 & \dots & \dots & (b_1 \xi_N)/2 \\
1 - b_2 & b_1 u_1 & b_1 u_3 & -b_1 & -b_1 \xi_1 & -b_1 \xi_2 & \dots & \dots & -b_1 \xi_N \\
(b_2 - u_1/c)/2 & -(b_1 u_1 - 1/c)/2 & -(b_1 u_3)/2 & b_1/2 & (b_1 \xi_1)/2 & (b_1 \xi_2)/2 & \dots & \dots & (b_1 \xi_N)/2 \\
-u_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
-u_3 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
(1 + \chi)k & -(1 + \chi)u_1 & -(1 + \chi)u_2 & (1 + \chi) & \chi \xi_1 & \chi \xi_2 & \dots & \dots & \chi \xi_N \\
-b_2 Y_1 & b_1 Y_1 u_1 & b_1 Y_1 u_2 & -b_1 Y_1 & \eta_{1,1} & \eta_{1,2} & \dots & \dots & \eta_{1,N} \\
-b_2 Y_2 & b_1 Y_2 u_1 & b_1 Y_2 u_2 & -b_1 Y_2 & \eta_{2,1} & \eta_{2,2} & \dots & \dots & \eta_{2,N} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\
-b_2 Y_{N-2} & b_1 Y_{N-2} u_1 & b_1 Y_{N-2} u_2 & -b_1 Y_{N-2} & \eta_{N-2,1} & \dots & \dots & \eta_{N-2,N-1} & \eta_{N-2,N} \\
-b_2 Y_{N-1} & b_1 Y_{N-1} u_1 & b_1 Y_{N-1} u_2 & -b_1 Y_{N-1} & \eta_{N-1,1} & \dots & \dots & \eta_{N-1,N-1} & \eta_{N-1,N}
\end{pmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Annexe C

Mécanismes réactionnels

C.1 Mécanisme réactionnel de Marinov *et al.*

TABLEAU C.1 – Mécanisme réactionnel de Marinov *et al.* (1995) [102]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme $k_f = AT^\beta \exp(-E_A/RT)$ en s-cm³-cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes : H₂, O₂, H₂O.

Nb.	Réaction	A	β	E_0
01	$2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2\text{O}$	$1.10 \cdot 10^{19}$	0.00	16077

C.2 Mécanisme réactionnel de Ó Conaire *et al.*

TABLEAU C.2 – Mécanisme réactionnel de Ó Conaire *et al.* (2004) [119]. 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.

Nb.	Réaction	A	b	E ₀
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 : $k(\text{H}_2) = 1.30$, $k(\text{H}_2\text{O}) = 14$.

C.3 Mécanismes réactionnels de Kee *et al.*

TABLEAU C.3 – Mécanisme réactionnel de Kee *et al.* (1993) [85]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme $k_f = AT^b \exp(-E_A/RT)$ en unités s-cm³-cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes : H₂, O₂, H, O, OH, HO₂, H₂O₂, H₂O.

Nb.	Réaction	A	b	E ₀
01	H ₂ + O ₂ ⇌ 2OH	1.70 · 10 ¹³	0.00	47780
02	OH + H ₂ ⇌ H ₂ O + H	1.17 · 10 ⁹	1.30	3626
03	H + O ₂ ⇌ OH + O	5.13 · 10 ¹⁶	-0.816	16507
04	O + H ₂ ⇌ OH + H	1.80 · 10 ¹⁰	1.00	8826
05	H + O ₂ + M ⇌ HO ₂ + M ^a	2.10 · 10 ¹⁸	-1.0	0
06	H + 2O ₂ ⇌ HO ₂ + O ₂	6.70 · 10 ¹⁹	-1.42	0
07	OH + HO ₂ ⇌ H ₂ O + O ₂	5.00 · 10 ¹³	0.00	1000
08	H + HO ₂ ⇌ 2OH	2.50 · 10 ¹⁴	0.00	1900
09	O + HO ₂ ⇌ O ₂ + OH	4.80 · 10 ¹³	0.00	1000
10	2OH ⇌ O + H ₂ O	6.00 · 10 ⁸	1.30	0
11	H ₂ + M ⇌ 2H + M ^b	2.23 · 10 ¹²	0.50	92600
12	O ₂ + M ⇌ 2O + M	1.85 · 10 ¹¹	0.50	95560
13	H + OH + M ⇌ H ₂ O + M ^c	7.50 · 10 ²³	-2.60	0
14	H + HO ₂ ⇌ H ₂ + O ₂	2.50 · 10 ¹³	0.00	700
15	2HO ₂ ⇌ H ₂ O ₂ + O ₂	2.00 · 10 ¹²	0.00	0
16	H ₂ O ₂ + M ⇌ 2OH + M	1.30 · 10 ¹⁷	0.00	45500
17	H ₂ O ₂ + H ⇌ HO ₂ + H ₂	1.60 · 10 ¹²	0.00	3800
18	H ₂ O ₂ + OH ⇌ H ₂ O + HO ₂	1.00 · 10 ¹³	0.00	1800

^aEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 21$, $k(\text{H}_2) = 3.3$.

^bEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 6$, $k(\text{H}) = 2$, $k(\text{H}_2) = 3$.

^cEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 20$.

TABLEAU C.4 – Mécanisme réactionnel de Kee *et al.* (1996) [86]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme $k_f = AT^b \exp(-E_A/RT)$ en unités s-cm³-cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes : H₂, H, O₂, O, OH, HO₂, H₂O₂, H₂O, N, N₂, NO.

Nb.	Réaction	A	b	E ₀
01	H ₂ + O ₂ ⇌ 2OH	0.170 · 10 ¹⁴	0.00	47780
02	OH + H ₂ ⇌ H ₂ O + H	0.117 · 10 ¹⁰	1.30	3626
03	O + OH ⇌ O ₂ + H	0.400 · 10 ¹⁵	-0.50	0
04	O + H ₂ ⇌ OH + H	0.506 · 10 ⁵	2.67	6290
05	H + O ₂ M ⇌ HO ₂ + M ^a	0.361 · 10 ¹⁸	-0.72	0
06	OH + HO ₂ ⇌ H ₂ O + O ₂	0.750 · 10 ¹³	0.00	0
07	H + HO ₂ ⇌ 2OH	0.140 · 10 ¹⁵	0.00	1073
08	O + HO ₂ ⇌ O ₂ + OH	0.140 · 10 ¹⁴	0.00	1073
09	2OH ⇌ O + H ₂ O	0.600 · 10 ⁹	1.30	0
10	2H + M ⇌ H ₂ + M ^b	0.100 · 10 ¹⁹	-1.00	0
11	2H + H ₂ ⇌ 2H ₂	0.920 · 10 ¹⁷	-0.60	0
12	2H + H ₂ O ⇌ H ₂ + H ₂ O	0.600 · 10 ²⁰	-1.25	0
13	H + OH + M ⇌ H ₂ O + M ^c	0.160 · 10 ²³	-2.00	0
14	H + O + M ⇌ OH + M ^c	0.620 · 10 ¹⁷	-0.60	0
15	2O + M ⇌ O ₂ + M	0.189 · 10 ¹⁴	0.00	-1788
16	H + HO ₂ ⇌ H ₂ + O ₂	0.125 · 10 ¹⁴	0.00	0
17	2HO ₂ ⇌ H ₂ O ₂ + O ₂	0.200 · 10 ¹³	0.00	0
18	H ₂ O ₂ + M ⇌ 2OH + M	0.130 · 10 ¹⁸	0.00	45500
19	H ₂ O ₂ + H ⇌ HO ₂ + H ₂	0.160 · 10 ¹³	0.00	3800
20	H ₂ O ₂ + OH ⇌ H ₂ O + HO ₂	0.100 · 10 ¹⁴	0.00	1800
21	O + N ₂ ⇌ NO + N	0.140 · 10 ¹⁵	0.00	75800
22	N + O ₂ ⇌ NO + O	0.640 · 10 ¹⁰	1.00	6280
23	OH + N ⇌ NO + H	0.400 · 10 ¹⁴	0.00	0

^aEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 18.6$, $k(\text{H}_2) = 2.86$, $k(\text{N}_2) = 1.26$.

^bEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 0$, $k(\text{H}_2) = 0$.

^cEfficacité du troisième corps : $k(\text{H}_2\text{O}) = 5$.

Bibliographie

- [1] F. S. Alvi, A. Krothapalli & D. Washington. Experimental study of a compressible countercurrent turbulent shear layer. *AIAA J.* **34**, 728–735 (1996).
- [2] C. Appel, J. Mantzaras, R. Schaeren, R. Bombach & A. Inauen. Catalytic combustion of hydrogen-air mixtures over platinum : validation of hetero/homogeneous chemical reaction schemes. *Clean Air* **5**, 21–44 (2004).
- [3] K. E. Atkinson. *An introduction to numerical analysis*. Wiley, New York (1989).
- [4] A. Attili & F. Bisetti. Statistics and scaling of turbulence in a spatially developing mixing layer at $Re_\lambda = 250$. *Phys. Fluids* **24** (2012).
- [5] K. T. Aung, M. I. Hassan & G. M. Faeth. Flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen/air flames at normal temperature and pressure. *Combust. Flame* **109**, 1–24 (1997).
- [6] D. S. Balsara & C.-W. Shu. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *J. Comput. Phys.* **106**, 405–452 (2000).
- [7] T. Bar-Kohany & K. Dahan. CFD simulation of hydrogen release, dispersion and auto-ignition in enclosures. Dans : *Proc. MCS 7* (2011).
- [8] R. Barlow, G. Fiechtner, C. Carter & J. Chen. Experiments on the scalar structure of turbulent CO/H₂/N₂. *Combust. Flame* **120**, 549–569 (2000).
- [9] S. Barre, C. Quine & J. P. Dussauge. Compressibility effects on the structure of supersonic mixing layers : experimental results. *J. Fluid Mech.* **259**, 47–78 (1994).
- [10] M. Barrère & A. Mestre. Stabilisation de la flamme en combustion supersonique. *La recherche aérospatiale* **1**, 1–13 (1988).
- [11] M. Baum. *Etude de l'allumage et de la structure des flammes turbulentes*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (1994).
- [12] J. H. Bell & R. D. Mehta. Development of a two-stream mixing layer from tripped and untripped boundary layers. *AIAA J.* **28**, 2034–2042 (1990).

- [13] R. W. Bilger. The structure of diffusion flames. *Combust. Sci. Technol.* **13**, 155–170 (1976).
- [14] G. A. Blaisdel, N. N. Mansour & W. C. Reynolds. Numerical simulation of compressible homogeneous turbulence. Technical report, TF-50, Stanford University (1991).
- [15] D. W. Bogdanoff. Compressibility effects in turbulent shear layers. *AIAA J.* **21**, 926–927 (1983).
- [16] C. Bogey. *Calcul direct du bruit aérodynamique et validation de modèles acoustiques hybrides*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon (2000).
- [17] J. P. Bonnet, J. R. Debiusschop & O. Chambres. Experimental studies of the turbulent structure of supersonic mixing layers. *AIAA Pap. 1993-217* (1993).
- [18] R. Borges, M. Carmona, B. Costa & W. S. Don. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.* **227**, 3191–3211 (2008).
- [19] R. Breidenthal. Structure in turbulent mixing layers and wakes using a chemical reaction. *J. Fluid Mech.* **109**, 1–24 (1981).
- [20] F. K. Browand & T. R. Troutt. The turbulent mixing layer : geometry of the large scale vortices. *J. Fluid Mech.* **158**, 485–509 (1985).
- [21] G. L. Brown & A. Roshko. On density effects and large structures in turbulent mixing layers. *J. Fluid Mech.* **64**, 775–781 (1974).
- [22] P. N. Brown, G. D. Byrne & A. C. Hindmarsh. VODE : a variable-coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **10**, 1038–1051 (1989).
- [23] S. P. Burke & T. E. W. Schumann. Diffusion flames. *Ind. Eng. Chem.* **64**, 775–816 (1928).
- [24] D. R. Buttsworth. Interaction of oblique shock waves and planar mixing regions. *J. Fluid Mech.* **306**, 43–57 (1996).
- [25] R. Cabra, J.-Y. Chen, R. W. Dibble, A. N. Karpetis & R. S. Barlow. Lifted-methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combust. Flame* **143**, 491–506 (2005).
- [26] P. Chassaing, R. A. Antonia, F. Anselmet, L. Joly & S. Sarkar. *Variable density fluid turbulence*. Springer (2002).
- [27] A. Chaudhuri, A. Hadjadj, A. Chinnayya & S. Palerm. Numerical study of compressible mixing layers using high order WENO schemes. *J. Sci. Comput.* **47**, 170–197 (2011).

- [28] T. S. Cheng, J. A. Wehrmeyer & R. W. Pitz. Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame. *Combust. Flame* **99**, 157–173 (1994).
- [29] N. T. Clemens & M. G. Mungal. Large-scale structure and entrainment in the supersonic mixing layer. *J. Fluid Mech.* **284**, 171–216 (1995).
- [30] N. Crnjaric-Zic, S. Vukovic & L. Sopta. On different flux splittings and flux functions in WENO schemes for balance laws. *J. Comput. Phys.* **35**, 1074–1092 (2005).
- [31] F. Davoudzadeh, H. McDonald & B. E. Thompson. Accuracy evaluation of unsteady CFD numerical schemes by vortex preservation. *Comput. Fluids* **24**, 883–895 (1995).
- [32] M. J. Day, W. C. Reynolds & N. N. Mansour. The structure of the compressible reacting mixing layer : insights from linear stability analysis. *Phys. Fluids* **10**, 993–1007 (1998).
- [33] M. J. Day, N. N. Mansour & W. C. Reynolds. Nonlinear stability and structure of compressible reacting mixing layers. *J. Fluid Mech.* **446**, 375–408 (2001).
- [34] J. de Charentenay & J. Ern. Multicomponent transport impact on turbulent premixed H_2/O_2 flames. *Combust. Theoret. Model.* **6**, 439–462 (2002).
- [35] J. R. Debisschop & J. P. Bonnet. Mean and fluctuating velocity measurements in supersonic mixing layers. *Eng. Turbul. Model. Exp.* **2**, 467–478 (1993).
- [36] R. Deiterding. A parallel adaptive method for simulating shock-induced combustion with detailed chemical kinetics in complex domains. *Comput. Struct.* **87**, 769–783 (2009).
- [37] P. E. Dimotakis. On the convection velocity of turbulent structures in supersonic shear layers. *AIAA Pap. 1991-1724* (1991).
- [38] P. E. Dimotakis. The mixing transition in turbulent flows. *J. Fluid Mech.* **409**, 69–98 (2000).
- [39] P. E. Dimotakis & G. L. Brown. The mixing layer at high Reynolds numbers : large structure dynamics and entrainment. *J. Fluid Mech.* **78**, 535–560 (1976).
- [40] J. Doom & K. Mahesh. Direct numerical simulation of auto-ignition of a hydrogen vortex ring reacting with hot air. *Combust. Flame* **156**, 813–825 (2009).
- [41] D. R. Dowdy, D. B. Smith & S. C. Taylor. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **23**, 325–332 (1990).
- [42] T. Echehki & J. H. Chen. Direct numerical simulation of auto-ignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures. *Comb. Flame* **134**, 169–191 (2003).

- [43] F. N. Egolfopoulos & C. K. Law. An experimental and computational study of the burning rates of ultra-lean to moderately-rich $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ laminar flames with pressure variations. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **23**, 333–340 (1990).
- [44] G. S. Elliot & M. Samimy. Compressibility effects in free shear layers. *Phys. Fluids* **2**, 1231–1240 (1990).
- [45] G. S. Elliot, M. Samimy & S. A. Arnette. Study of compressible mixing layers with filtered Rayleigh scattering based visualizations. *AIAA J.* **30**, 2567–2569 (1993).
- [46] A. Ern & V. Giovangigli. Fast and accurate multicomponent transport property evaluation. *J. Comput. Physics* **120**, 105–116 (1995).
- [47] A. Ern & V. Giovangigli. Eglib : A general-purpose fortran library for multicomponent transport property evaluation. Technical report, CERMICS (2004).
- [48] I. Fedioun & N. Lardjane. Temporal linear stability analysis of three-dimensional compressible binary shear layers. *AIAA J.* **43**, 111–123 (2005).
- [49] R. P. Fedkiw, B. Merriman & 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).
- [50] R. P. Fedkiw, B. Merriman & S. Osher. High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry. *J. Comput. Phys.* **132**, 175–190 (1997).
- [51] L. F. Figueira da Silva, B. Deshaies, M. Champion & M. René-Corail. Some specific aspects of combustion in supersonic H_2 -air laminar mixing layers. *Combust. Sci. Technol.* **89**, 317–333 (1993).
- [52] Y. Fouillet. *Contribution à l'étude par expérimentation numérique des écoulements cisailés libres : effets de compressibilité*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble (1991).
- [53] J. B. Freund, S. K. Lele & P. Moin. Compressibility effects in a turbulent annular mixing layer. Part 1. Turbulence and growth rate. *J. Fluid Mech.* **421**, 229–267 (2000).
- [54] J. B. Freund, P. Moin & S. K. Lele. Compressibility effects in a turbulent annular mixing layer. Part 2. Mixing of a passive scalar. *J. Fluid Mech.* **421**, 269–292 (2000).
- [55] S. Fu & Q. Li. Numerical simulation of compressible mixing layers. *Int. J. Heat Flow* **27**, 895–901 (2006).
- [56] P. Gerlinger, K. Nold & M. Aigner. Investigation of hydrogen-air reaction mechanisms for supersonic combustion. *AIAA Pap. 2008-4682* (2008).

- [57] P. Gerlinger, K. Nold & M. Aigner. Influence of reaction mechanisms, grid spacing, and inflow conditions on the numerical simulation of lifted supersonic flames. *Int. J. Num. Meth. Fluids* **62**, 1357–1380 (2010).
- [58] O. Gicquel, D. Thevenin & N. Darabiha. Influence of differential diffusion on super-equilibrium temperature in turbulent non-premixed hydrogen/air flames. *Flow Turbul. Combust.* **73**, 307–321 (2004).
- [59] P. Givy. Model-free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energ. Combust.* **15**, 1–107 (1989).
- [60] S. G. Goebel & J. C. Dutton. Velocity measurements of compressible, turbulent mixing layers. *AIAA J.* **29**, 538–546 (1991).
- [61] D. Goodwin. Cantera : objet oriented software for reacting flows. Technical report, <http://cantera.github.io/docs/sphinx/html/index.html>.
- [62] R. Gordon, A. Masri, S. Pope & G. Goldin. A numerical study of auto-ignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated co-flow. *Combust. Theory Model.* **11**, 351–376 (2007).
- [63] S. Gottlieb & C.-W. Shu. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Math. Comput.* **67**, 73–85 (1998).
- [64] J. F. Grcar, J. B. Bell & M. S. Day. The Soret effect in naturally propagating, premixed, lean, hydrogen-air flames. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **32**, 1173–1180 (2009).
- [65] A. Hadjadj & A. Kudryavtsev. Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *J. Turbul.* **6**, 16 (2005).
- [66] J. L. Hall, P. E. Dimotakis & H. Rosemann. Experiments in nonreacting compressible shear layers. *AIAA J.* **31**, 2247–2254 (1993).
- [67] 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).
- [68] A. Harten. ENO schemes with subcell resolution. *J. Comput. Phys.* **83**, 148–184 (1989).
- [69] A. Harten, B. Engquist, S. Osher & S. Chkravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *J. Comput. Phys.* **71**, 231–303 (1987).
- [70] C. R. Hartsfield. *Reactive shear layer mixing and growth rate effects on afterburning properties of axisymmetric rocket engine plumes*. Thèse de doctorat, Naval Post-graduate School (2006).

- [71] A. K. Henrick, T. D. Aslam & J. M. Powers. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes : achieving optimal order near critical points. *J. Comput. Phys.* **207**, 542–567 (2005).
- [72] J. C. Hermanson. *Effects of heat release in a turbulent, reacting shear layer*. Thèse de doctorat, California Institute of Technology (1985).
- [73] J. C. Hermanson & P. E. Dimotakis. Effects of heat release in a turbulent, reacting shear layer. *J. Fluid Mech.* **199**, 333–375 (1989).
- [74] R. Hilbert & D. Thévenin. Influence of differential diffusion on maximum flame temperature in turbulent nonpremixed hydrogen/air flames. *Comb. Flame* **138**, 175–187 (2004).
- [75] D. J. Hill & 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).
- [76] A. C. Hindmarsh. LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers. *ACM SIGNUM Newsletter* **15**, 10–11 (1980).
- [77] J. O. Hirschfelder & C. F. Curtiss. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York (1969).
- [78] H. Huh & J. F. Driscoll. Shock-wave-enhancement of the mixing and the stability limits of supersonic hydrogen-air jet flames. *Symp. Int. Combust.* **26**, 2933–2939 (1996).
- [79] H. Im, J. Chen & C. Law. Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows. *Symp. Int. Combust.* **27**, 1047–1056 (1998).
- [80] T. L. Jackson & C. E. Grosch. Inviscid spatial stability of a compressible mixing layer. *J. Fluid Mech.* **208**, 609–637 (1989).
- [81] T. L. Jackson & M. Y. Hussaini. An asymptotic analysis of supersonic reacting mixing layers. *Combust. Sci. Technol.* **57**, 129–140 (1988).
- [82] J. Jeong & F. Hussain. On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.* **285**, 69–94 (1995).
- [83] G.-S. Jiang & C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comput. Phys.* **126**, 202–228 (1996).
- [84] Y. Ju & T. Niioka. Ignition analysis of unpremixed reactants with chain mechanism in a supersonic mixing layer. *AIAA J.* **31**, 863–868 (1993).
- [85] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke & J. A. Miller. A fortran program for modeling steady laminar one dimensional premixed flames. Technical report, Sandia National Laboratories (1993).

- [86] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin, J. A. Miller & 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).
- [87] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin, J. A. Miller & H. K. Moffat. A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase multicomponent transport properties. Technical report, Sandia National Laboratories (1996).
- [88] T. Kreutz & C. Law. Ignition in nonpremixed counterflow using hydrogen versus heated air : computational study with detailed chemistry. *Combust. Flame* **104**, 157–175 (1996).
- [89] O. C. Kwon & G. M. Faeth. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames : measurements and predictions. *Combust. Flame* **124**, 590–610 (2001).
- [90] S. Lee, S. K. Lele & P. Moin. Eddy shocklets in decaying compressible turbulence. *Phys. Fluids* **3**, 657–664 (1991).
- [91] S. K. Lele. Direct numerical simulation of compressible free shear flows. *AIAA Pap.* 1989–374 (1989).
- [92] B. Lewis & G. von Elbe. *Combustion, flames and explosions of gases, Third Edition*. Academic Press, New York (1987).
- [93] R. Liska & B. Wendroff. Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations. *J. Sci. Comput.* **25**, 995–1017 (2003).
- [94] X.-D. Liu, S. Osher & T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.* **115**, 200–212 (1994).
- [95] A. Liñán. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astron.* **1**, 1007–1039 (1976).
- [96] A. Liñán & A. Crespo. An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies. *Comb. Sci. Technol.* **14**, 95–117 (1976).
- [97] G. Lodato, P. Domingo & L. Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* **227**, 5105–5143 (2008).
- [98] H. D. Ma, H. L. Pan & Q. Wang. Numerical simulations of transitional and turbulent flows in plane mixing layers. *Comput. Mech.* , 93–106 (2009).
- [99] U. Maas & J. Warnatz. Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures. *Combust. Flame* **74** (1988).

- [100] I. Mahle. *Direct and large-eddy simulation of inert and reacting compressible turbulent shear layers*. Thèse de doctorat, Technische Universität München (2007).
- [101] I. Mahle, H. Foysi, S. Sarkar & R. Friedrich. On the turbulence structure in inert and reacting compressible mixing layers. *J. Fluid Mech.* **593**, 171–180 (2007).
- [102] N. M. Marinov, C. K. Westbrook & W. J. Pitz. Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen. *8th Int. Symp. Transp. Prop.* (1995).
- [103] C. Markides & E. Mastorakos. An experimental study of hydrogen autoignition in a turbulent co-flow of heated air. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **130**, 883–891 (2005).
- [104] C. N. Markides. Autoignition in turbulent flows. Technical report, Cambridge University Engineering Department (2003).
- [105] E. Mastorakos. Ignition of turbulent non-premixed flames. *Prog. Energ. Combust.* **35**, 57–97 (2008).
- [106] E. Mastorakos, T. A. Baritaud & T. J. Poinso. Numerical simulations of auto-ignition in turbulent mixing flows. *Combust. Flame* **109**, 198–223 (1997).
- [107] P. A. McMurtry, J. J. Riley & R. Metcalfe. Effects of heat release on the large-scale structure in turbulent mixing layers. *J. Fluid Mech.* **199**, 297–332 (1989).
- [108] A. Michalke. On spatially growing disturbances in an inviscid shear layer. *J. Fluid Mech.* **23**, 521–544 (1965).
- [109] J. A. Miller, R. E. Mitchell, M. D. Smooke & 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. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **19**, 181–196 (1982).
- [110] M. F. Miller, C. T. Bowman & M. G. Mungal. An experimental investigation of the effects of compressibility on a turbulent reacting mixing layer. *J. Fluid Mech.* **356**, 25–64 (1998).
- [111] R. S. Miller, C. K. Madnia & P. Givi. Structure of a turbulent reacting mixing layer. *Combust. Sci. Technol.* **99**, 1–36 (1994).
- [112] R. S. Miller, K. G. Harstad & J. Bellan. Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen. *J. Fluid Mech.* **436**, 1–39 (2001).
- [113] T. Miyauchi & M. Tanahashi. Direct numerical simulation of chemically reacting turbulence. Dans : *Lect. notes Phys.* **449**, 45–58 (1995).
- [114] M. A. Mueller, R. A. Yetter & F. L. Dreyer. Flow reactor studies and kinetic modeling of the H_2/O_2 reaction. *Int. J. Chem. Kinet.* **31**, 113–125 (1999).

- [115] M. G. Mungal & P. E. Dimotakis. Mixing and combustion with low heat release in a turbulent shear layer. *J. Fluid Mech.* **148**, 349–382 (1984).
- [116] A. Mura & J. F. Izard. Numerical simulation of supersonic non premixed turbulent combustion in a scramjet combustor model. *J. Propul. Power* **26**, 858–868 (2010).
- [117] D. K. Ngomo Otogo. *Modélisation des écoulements réactifs dans les microsystèmes énergétiques*. Thèse de doctorat, L’Institut National des Sciences Appliquées de Rouen (2010).
- [118] M. Nishioka & C. K. Law. A numerical study of ignition in the supersonic hydrogen-air laminar mixing layer. *Combust. Flame* **108**, 199–219 (1997).
- [119] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz & C. K. Westbrook. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *Int. J. Chem. Kin.* **36**, 603–622 (2004).
- [120] N. A. Okong’o & J. Bellan. Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer : heptane and nitrogen. *J. Fluid Mech.* **464**, 1–34 (2002).
- [121] P. L. O’Neill, D. Nicolaides, D. Honnery & J. Soria. Autocorrelation functions and the determination of integral length with reference to experimental and numerical data. Dans : *15th Australian Fluid Mechanics Conference* (2004).
- [122] E. S. Oran, T. R. Young & J. P. Boris. Weak and strong ignition. I. Numerical simulations of shock tube experiments. *Combust. Flame* **48**, 135–148 (1982).
- [123] C. Pantano & S. Sarkar. A study of compressibility effects in the high-speed turbulent shear layer using direct simulation. *J. Fluid Mech.* **451**, 329–371 (2002).
- [124] C. Pantano, S. Sarkar & F. A. Williams. Mixing of a conserved scalar in a turbulent reacting shear layer. *J. Fluid Mech.* **481**, 291–328 (2003).
- [125] D. Papamoschou. Evidence of shocklets in a counterflow supersonic shear layer. *Phys. Fluids* **7**, 233–235 (1995).
- [126] D. Papamoschou & A. Roshko. The compressible turbulent shear layer : an experimental study. *J. Fluid Mech.* **197**, 453–477 (1988).
- [127] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge (2000).
- [128] C. D. Pierce. *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion*. Thèse de doctorat, Stanford University (2001).
- [129] C. D. Pierce & P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion. *J. Fluid Mech.* **504**, 73–97 (2004).
- [130] S. Pirozzoli. Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction. *J. Comput. Phys.* **178**, 81–117 (2002).

- [131] H. Pitsch & N. Peters. A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust. Flame* **114**, 26–40 (1998).
- [132] O. Planché. *A numerical investigation of the compressible reacting mixing layer*. Thèse de doctorat, Stanford University (1992).
- [133] T. Poinso & D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion, Second Edition*. Edwards (2005).
- [134] S. A. Ragab & J. L. Wu. Linear instabilities in two-dimensional compressible mixing layers. *Phys. Fluids* **1**, 957–966 (1989).
- [135] M. René-Corail. *Etude numérique d'une couche de mélange supersonique d'hydrogène et d'air : conditions d'allumage et structure de la combustion*. Thèse de doctorat, ENSMA et Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées (1995).
- [136] C. L. Ribault. Large eddy simulation of passive scalar in compressible mixing layers. *Int. J. Heat Mass Tran.* **51**, 3514–3524 (2008).
- [137] J. J. Riley, R. W. Metcalfe & S. A. Orszag. Direct numerical simulations of chemically reacting turbulent mixing layers. *Phys. Fluids* **29**, 406–422 (1986).
- [138] M. M. Rogers & R. D. Moser. Direct simulation of a self-similar turbulent mixing layer. *Phys. Fluids* **6**, 903–923 (1994).
- [139] T. Rossmann, M. G. Mungal & R. K. Hanson. Evolution and growth rate of large-scale structures in high compressibility mixing layers. *J. Turbul.* **3** (2002).
- [140] K. Salari & P. Knupp. Code verification by the method of manufactured solutions. Technical report, SAND2000-1444 (2000).
- [141] M. Samimy, M. F. Reeder & G. S. Elliot. Compressibility effects on large structures in free shear flow. *Phys. Fluids* **4**, 1251–1258 (1992).
- [142] N. D. Sandham & W. C. Reynolds. Compressible mixing layer : linear theory and direct simulation. *AIAA J.* **28**, 618–624 (1989).
- [143] N. D. Sandham & H. C. Yee. A numerical study of a class of TVD schemes for compressible flows. Technical report, NASA 102194 (1989).
- [144] S. Sarkar. The pressure-dilatation correlation in compressible flows. *Phys. Fluids* **2**, 2674–2682 (1992).
- [145] S. Sarkar. The stabilizing effect of compressibility in turbulent shear flow. *J. Fluid Mech.* **282**, 163–186 (1995).
- [146] S. Sarkar. The high-speed turbulent shear layer. Dans : *Variable density fluid turbulence, fluid mechanics and its applications* **69**, 235–259 (2002).

- [147] T. Schmitt, A. Ruiz, L. Selle & B. Cuenot. Numerical investigation of destabilization of supercritical round turbulent jets using large eddy simulation. Dans : *EUCASS Proceedings Series* **2**, 225–238 (2011).
- [148] B. Sekar & H. S. Mukunda. A computational study of direct simulation of high speed mixing layers without and with chemical heat release. *Symp. Int. Combust.* **23**, 707–713 (1990).
- [149] M. F. Shahab, G. Lehnasch, T. B. Gatski & P. Comte. Statistical evaluation of the shock wave boundary layer interaction phenomenon. *Flow Turbul. Combust.* **86**, 369–397 (2011).
- [150] Y. Shen & G. Zha. Improved seventh-order WENO scheme. *AIAA Pap. 2010-1451* (2010).
- [151] J. Shi, Y.-T. Zhang & C.-W. Shu. Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures. *J. Comput. Phys.* **186**, 690–696 (2003).
- [152] C.-W. Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Technical report, ICASE (1997).
- [153] C.-W. Shu, T. A. Zang, G. Erlebacher, D. Whitaker & S. Osher. High-order ENO schemes applied to two- and three-dimensional compressible flow. *Applied Num. Math.* **9**, 75–71 (1992).
- [154] M. D. Slessor, M. Zhuang & P. E. Dimotakis. Turbulent shear-layer mixing : growth-rate compressibility scaling. *J. Fluid Mech.* **414**, 35–45 (2000).
- [155] G. A. Sod. Survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.* **27**, 1–31 (1978).
- [156] B. W. Spencer & B. G. Jones. Statistical investigation of pressure and velocity in the turbulent two-stream mixing layer. *AIAA J.* , 613 (1971).
- [157] S. Stanley & S. Sarkar. Simulations of spatially developing two-dimensional shear layers and jets. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics* **129**, 141–163 (1997).
- [158] S. Starner, R. Bilger, M. Long, J. Frank & D. Marran. Scalar sdissipation measurements in turbulent jet diffusion flames of air diluted methane and hydrogen. *Combust. Sci. Technol.* **9**, 121–147 (1997).
- [159] A. Stoukov. *Etude numérique de la couche de mélange réactive supersonique*. Thèse de doctorat, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen (1996).
- [160] A. Stoukov, M. Gorokhovski & D. Vandromme. Numerical study of auto-ignition and combustion in supersonic hydrogen-air mixing layer. Dans : *IUTAM Symposium on Combustion in Supersonic Flows* , 119–134 (1995).

- [161] J. C. Strikwerda. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Wadsworth, Belmont (1989).
- [162] D. R. Stull & H. Prophet. *JANAF Thermochemical Tables, Second Edition*. NSRDS-NBS 37, U.S. Department of Commerce/National Bureau of Standards (1971).
- [163] K. W. Thompson. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.* **68**, 1–24 (1987).
- [164] V. A. Titarev & E. F. Toro. Finite-volume WENO schemes for three-dimensional conservation laws. *J. Comput. Phys.* **201**, 238–260 (2004).
- [165] S. D. Tse, D. L. Zhu & C. K. Law. Morphology and burning fluxes of expanding spherical flames in H₂/O₂/inert mixtures up to 60 atmospheres. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **28**, 1793 (2000).
- [166] J. M. Vedovoto, A. Silveira Neto, A. Mura & 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).
- [167] R. Vicquelin. *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2010).
- [168] R. Vicquelin, B. Fiorina, S. Payet, N. Darabiha & O. Gicquel. Coupling tabulated chemistry with compressible CFD solvers. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **33**, 1481–1488 (2011).
- [169] S. Vorontsov, V. Zabaikin, A. Smogolev & P. Tret'yakov. Vortex structures in combustion of hydrogen in a supersonic air stream. *Combust. Explos. Shock Waves* **39**, 119–123 (2003).
- [170] A. W. Vreman, N. D. Sandham & K. H. Luo. Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics. *J. Fluid Mech.* **320**, 235–258 (1996).
- [171] B. Vreman, H. Kuerten & B. Geurts. Shocks in direct numerical simulation of the confined three-dimensional mixing layer. *Phys. Fluids* **7**, 2105–2107 (1995).
- [172] P. Vuillermoz, E. S. Oran & K. Kailasanath. The effect of the chemical reaction time on a supersonic reactive mixing layer. *Symp. Int. Combust.* **24**, 395–403 (1992).
- [173] Z. Warhaft. Passive scalars in turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **32**, 203–240 (2000).
- [174] C. K. Westbrook & F. L. Dryer. Chemical kinetic modelling of hydrocarbon combustion. *Prog. Energ. Combust.* **10**, 1–57 (1984).

- [175] I. Wygnanski & H. E. Fiedler. The two-dimensional mixing region. *J. Fluid Mech.* **41**, 327–361 (1970).
- [176] Z. Xu & C.-W. Shu. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference WENO schemes. *J. Comput. Phys.* **205**, 458–485 (2005).
- [177] H. Yamashita, M. Shimada & T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. Dans : *Proc. Combust. Inst.* **29**, 27–34 (1996).
- [178] H. Yang. An artificial compression method for ENO schemes : the slope modification method. *J. Comput. Phys.* **89**, 125–160 (1990).
- [179] H. C. Yee, M. Vinokur & M. J. Djomehri. Entropy splitting and numerical dissipation. *J. Comput. Phys.* **162**, 33–81 (2000).
- [180] C. S. Yoo, R. Sankaran & J. H. Chen. Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated coflow : flame stabilization and structure. *J. Fluid Mech.* **640**, 453–481 (2009).
- [181] S. Zhang, S. Jiang & C.-W. Shu. Improvement of convergence to steady state solutions of Euler equations with the WENO schemes. *J. Sci. Comput.* **47**, 216–238 (2010).
- [182] V. Zhukov. Verification, validation, and testing of kinetic mechanisms of hydrogen combustion in fluid-dynamic computations. *ISRN Mech. Eng.* (2012).
- [183] J. L. Ziegler, R. Deiterding, J. E. Shepherd & D. I. Pullin. An adaptive high order hybrid scheme for compressive, viscous flows with detailed chemistry. *J. Comput. Phys.* **230**, 7598–7630 (2011).

Résumé

Cette étude est consacrée à l'analyse des écoulements réactifs supersoniques cisailés et, plus particulièrement, des couches de mélange compressibles pouvant se développer dans les moteurs ramjet et scramjet. Des méthodes numériques appropriées ont été implémentées et vérifiées pour aboutir au développement d'un code de calcul numérique massivement parallèle, appelé CREAMS (*compressible reactive multi-species solver*). Ce dernier a été spécialement conçu pour conduire des simulations numériques haute précision (simulations numériques directes ou DNS) de ce type d'écoulements. Une attention particulière a été portée à la description des termes de transport moléculaire et des termes sources chimiques de façon à considérer la description physique la plus fidèle possible des mélanges des gaz réactifs à haute vitesse, au sein desquelles les temps caractéristiques chimiques et de mélange aux petites échelles sont susceptibles d'être du même ordre de grandeur. Les simulations des couches de mélange bidimensionnelles et tridimensionnelles, inertes et réactives, confirment l'importance des effets associés à la compressibilité et au taux de dégagement de chaleur. Les résultats ainsi obtenus diffèrent en certains points de ceux issus d'autres simulations qui introduisaient certaines hypothèses simplificatrices : développement temporel, emploi d'une chimie globale ou encore lois de transport simplifiées. En revanche, ils reproduisent certaines tendances déjà observées dans un certain nombre d'études expérimentales conduites dans des conditions similaires.

Mots clé : Moteurs-Combustion, Allumage, Ecoulement cisailé, Simulation par ordinateur, Compressibilité, Combustion supersonique, Couche de mélange, Simulation numérique directe

Abstract

This study is devoted to the analysis of supersonic reactive shear flows and, in particular, compressible mixing layers that can develop inside the ramjet and scramjet engines. Appropriate numerical methods have been implemented and tested to achieve the development of a massively parallel numerical solver, called CREAMS (*compressible reactive multi-species solver*). This tool was designed to conduct high-precision numerical simulations (direct numerical simulations or DNS) of such flows. Particular attention was paid to the description of the molecular transport terms and chemical source terms to consider the most accurate physical description of reactive gas mixtures at high velocity, in which the chemical and mixing time scales, corresponding to the smallest scales of the flow, are susceptible to be of the same order of magnitude. Simulations of two- and three-dimensional, inert and reactive, mixing layers confirm the importance of the effects associated with compressibility and rate of heat release. The results obtained differ in some points from other simulations which introduced simplifying assumptions such as temporal development, use of a global chemistry or a simplified description of the molecular transport terms. Nevertheless, they reproduce some trends already observed in several experimental studies conducted under similar conditions.

Key words: Motors-Combustion, Ignition, Shear flow, Computer simulation, Compressibility, Supersonic combustion, Mixing layer, Direct numerical simulation