

Modélisation de la combustion turbulente diphasique par une approche eulérienne-lagrangienne avec prise en compte des phénomènes transitoires

Laurent Gomet

► To cite this version:

Laurent Gomet. Modélisation de la combustion turbulente diphasique par une approche eulériennelagrangienne avec prise en compte des phénomènes transitoires. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechique - Poitiers, 2013. Français. NNT: 2013ESMA0022 . tel-00944872

HAL Id: tel-00944872 https://theses.hal.science/tel-00944872

Submitted on 11 Feb2014

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 :

Laurent GOMET

Modélisation de la combustion turbulente diphasique par une approche Eulérienne-Lagrangienne avec prise en compte des phénomènes transitoires

Directeur de thèse : Arnaud MURA Co-encadrant : Vincent ROBIN

Soutenue le 4 Décembre 2013 devant la Commission d'Examen

Jury

Mme.	P. DOMINGO	Directrice de Recherche au CNRS Rouen	Rapporteur
М.	B. MERCI	Professeur à l'Université de Gand	Rapporteur
М.	M. CHAMPION	Directeur de Recherche au CNRS Poitiers	Examinateur
М.	B. FIORINA	Maître de Conférence à l'Ecole Centrale Paris	Examinateur
М.	A. MURA	Chargé de Recherche au CNRS Poitiers	Examinateur
М.	J. REVEILLON	Professeur à l'Université de Rouen	Examinateur
М.	V. ROBIN	Maître de Conférence à l'Université de Poitiers	Examinateur

Remerciements

Une thèse de doctorat est une aventure à part entière, riche en rencontres qui influencent le reste de notre vie. Ce paragraphe est l'occasion de laisser une trace de l'aspect humain de ce morceau de vie, aspect qui peut sembler négligeable par rapport au contenu scientifique du travail présenté dans ce manuscrit mais qui est intimement lié à ce dernier.

Je tiens donc à commencer par exprimer ma reconnaissance à monsieur Michel Champion pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, ainsi qu'à madame Pascale Domingo et monsieur Bart Merci pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail en acceptant d'en être les rapporteurs.

Je tiens aussi à remercier monsieur Didier Saucereau pour m'avoir initié au monde merveilleux de N3S_NATUR et pour les cafés que je lui devais dois devrai.

J'aimerais dire un grand merci à Vincent Robin pour les échanges chaleureux que nous avons eu tout au long de ces trois années, ainsi que pour les sandwichs inter-TP. J'exprime aussi ma sincère gratitude à monsieur Arnaud Mura, tant pour ses qualités humaines que scientifiques. Je souhaite à tous les doctorants d'avoir un directeur de thèse aussi intègre et compétent.

Merci aussi aux collègues de bureau pour la bonne ambiance qui y a régné durant ces trois années. Merci à Pedro Martinez pour ses cours d'espagnol, sa mauvaise foi et ses aventures nocturnes, à Romain Buttay pour ses tourbillons et ses blagues belges même lorsqu'il "n'avait pas le temps" et merci à Jocelyne pour ses pauses MS-Office.

Enfin, je tiens à remercier ma famille et en particulier mes parents, sans qui ce travail n'aurait pas vu le jour, pour leur soutien sans faille ainsi que mes beaux-parents pour leurs questions intéressées. Un grand merci à ma relectrice qui se reconnaîtra mais, n'ayant pas pu prendre en compte toutes ses remarques tant sa relecture a été minutieuse, je ne la nommerai pas pour ne pas nuire à sa réputation. Je tiens aussi à écrire un petit mot pour remercier mes grands-parents qui, même s'ils n'en ont pas conscience ont eu un impact non négligeable sur ce travail. Merci à mon frère pour m'avoir écouté, relu, écouté, critiqué, écouté et s'être déplacé pour ma soutenance.

Pour terminer je veux remercier ma femme, Estelle, pour m'avoir suivi dans cette aventure alors qu'elle ne savait pas dans quoi elle mettait les pieds. Sans elle, ce travail n'aurait jamais vu le jour. Merci pour ton organisation sans faille, merci pour ton soutien quotidien, merci d'avoir fait l'effort de comprendre ce qu'était une approche Eulérienne-Lagrangienne et merci pour notre merveilleuse fille, Laélia, qui a été un moteur pour terminer la rédaction de ce manuscrit.

Table des matières

Introduction

Ι	Gé	énéral	ités	17
1	Mo	délisat	ion Aérothermochimique	19
	1.1	Hypot	hèses	. 19
	1.2	Équat	ions instantanées	. 20
		1.2.1	Lois de conservation	. 20
		1.2.2	Lois de comportement	. 21
		1.2.3	Relations de Rankine Hugoniot	. 24
	1.3	Équat	ions moyennées	. 24
		1.3.1	Description statistique de la turbulence	. 24
		1.3.2	Équations moyennées ou filtrées	. 29
		1.3.3	Fermeture des équations	. 29
2	Intr	oducti	ion au mélange scalaire	39
	2.1	Introd	luction	. 39
	2.2	Phéno	ménologie	. 39
	2.3	Scalai	re passif	. 43
		2.3.1	Valeur moyenne	. 46
		2.3.2	Variance	. 46
	2.4	Milieu	ı monophasique gazeux	. 46
		2.4.1	Méso-mélange	. 46
		2.4.2	Micro-mélange	. 50
3	Mo	délisat	ion de la combustion turbulente	55
	3.1	Flamn	ne de diffusion	. 56
		3.1.1	Fraction de mélange	. 56
		3.1.2	Chimie infiniment rapide	. 57
		3.1.3	Prise en compte de la turbulence	. 58

1

3.2	Flamr	ne de diffusion étirée, flammelettes	59
	3.2.1	Flamme de diffusion étirée	59
	3.2.2	Prise en compte de la turbulence	61
3.3	Chimi	e finie	61
	3.3.1	Réacteur imparfaitement agité	61
	3.3.2	Application à la combustion non prémélangée	63
3.4	Modél	isation lagrangienne dans l'espace des compositions	67
	3.4.1	Une représentation de la flamme turbulente	68
	3.4.2	Equations lagrangiennes dans l'espace des compositions	68
	3.4.3	Fluctuations induites par la turbulence	69
	3.4.4	Retour sur la physique prise en compte	70
II A	Allume	eur torche	73
Conte	exte		75
	4 11		70

4	Aut	o-allur	nage et Écoulements Supersoniques réactifs	79
	4.1	Phéno	ménologie et principes de modélisation	79
		4.1.1	Auto-inflammation	79
		4.1.2	Déroulement temporel de l'allumage	80
		4.1.3	Ecoulement à grandes vitesses	82
	4.2	Modél	isation lagrangienne dans l'espace des compositions	83
		4.2.1	Une représentation possible de l'auto-allumage	83
		4.2.2	Temps d'auto-allumage en écoulement supersonique $\ . \ . \ . \ . \ .$	85
		4.2.3	Echelle caractéristique temporelle de la convection	87
		4.2.4	Evaluation du taux de production chimique	90
5	App	olicatio	ons, flammes jets supersoniques	93
	5.1	Flamn	ne jet supersonique de Cheng (CHENG et al., 1994)	93
		5.1.1	Description du cas test	93
		5.1.2	Evaluation du temps caractéristique des fluctuations du champ sca-	
			laire	95
	5.2	Flamn	ne jet supersonique de Beach (BEACH, 1972)	103
		5.2.1	Description du cas test	103
		5.2.2	Résultats numériques	104
	5.3	Temps	de résidence	106

Conclusions

III Combustion diphasique

Co	Contexte 113			
6	Eco	uleme	nts diphasiques et brouillards de gouttelettes	115
	6.1	Equat	ions de transport en milieu multi-phasique	115
		6.1.1	Bilan local monophasique	116
		6.1.2	Bilan diphasique	116
		6.1.3	Equations locales en phase gazeuse pour un milieu diphasique \ldots	121
	6.2	Mélan	ge scalaire diphasique	122
		6.2.1	Fraction de mélange	122
		6.2.2	Variance de la fraction de mélange	127
		6.2.3	Taux de dissipation scalaire	127
	6.3	Descri	ption du Spray	128
		6.3.1	Structure de la phase liquide	129
		6.3.2	Différentes approches	130
	6.4	Equat	ion d'évolution du spray	131
		6.4.1	Théorie cinétique	132
		6.4.2	Equation d'évolution du spray	132
		6.4.3	Résolution de l'équation du spray	133
		6.4.4	Modèles physiques employés	135
	6.5	Coupl	$age eulérien/lagrangien \dots \dots$	137
	6.6	Comb	ustion diphasique	141
		6.6.1	Structure des flammes non-prémélangées diphasiques	141
		6.6.2	Modélisation de la combustion diphasique	144
	6.7	Conclu	usion	148
7	App	olicatio	on à un cas test diphasique représentatif	151
	7.1	Flamn	ne diphasique subcritique : MASCOTTE A10	151
		7.1.1	Description du banc d'essai	151
		7.1.2	Point de fonctionnement A-10 et configuration de calcul	153
	7.2	Résult	$zats numériques \ldots \ldots$	155
		7.2.1	Résultats qualitatifs	156
		7.2.2	Prise en compte des effets de dissociation	158
		7.2.3	Résultats quantitatifs	159
		7.2.4	Influence de l'évaluation du mélange local	161

111

I٧		Entrée	es multiples	169
Co	onte	xte		171
8	Mé	lange 1	multi-entrées	173
	8.1	Introd	luction	173
	8.2	Une fr	raction de mélange multi-entrées	174
		8.2.1	Fraction de mélange standard à deux entrées	174
		8.2.2	Extension à N entrées, concept d'injecteur fictif	176
		8.2.3	Description de l'injecteur fictif	178
		8.2.4	Représentations filtrées	181
	8.3	Analy	se préliminaire de la réponse du modèle	184
		8.3.1	Cas tests non réactifs, $Da ightarrow 0$	184
		8.3.2	Chimie infiniment rapide, $Da o \infty$	193
9	Ap	plicatio	on à une flamme de type JHC diluée par l'air ambiant	197
	9.1	Flamı	me jet de Dally	197
		9.1.1	Description du montage expérimental	197
		9.1.2	Description de la configuration de calcul	198
		9.1.3	Modélisation de la combustion turbulente	199
	9.2	Résul	tats numériques	200
		9.2.1	Analyse de la prise en compte de la troisième entrée	200
		9.2.2	Sensibilité du modèle aux variations de composition du co-cours	ant . 204
	9.3	Appro	oche injecteur fictif couplée au modèle MIL	207
		9.3.1	Injecteur fictif	207
		9.3.2	Tabulation générale du temps chimique	208
		9.3.3	Application à la flamme de Dally	210
Co	onclu	isions		211
\mathbf{C}	oncl	usion	s et Perspectives	212
Bi	blic	ograpi	hie	222
\mathbf{A}	nne	xes		237
\mathbf{A}	Dét	ails de	es expressions du modèle à chimie brusque	241
	A.1	Suppo	ort de la trajectoire chimie brusque	243

	A.2	Trajec	toire chimie brusque	. 243
	A.3	Taux o	le production moyens	. 244
	A.4	Conser	vativité du modèle	. 245
в	Dét	ails de	la dérivation de l'équation de transport de la variance de	la
	frac	tion d	e mélange en milieu diphasique	247
\mathbf{C}	Moo	dèles d	'évaporation d'une goutte	251
	C.1	Evapo	ration d'une goutte isolée	. 251
		C.1.1	La loi du d_s^2	. 251
		C.1.2	Approche énergétique	. 252
		C.1.3	Approche "écoulement de Stefan"	. 253
		C.1.4	Retour à la loi du d_s^2	. 255
	C.2	Prise e	en compte du chauffage de la goutte	. 256
	C.3	Prise e	en compte des effets convectifs.	. 259
		C.3.1	Approche empirique	. 259
		C.3.2	Approche théorique	. 261
D	Tau	x de p	roduction chimique pour le cas de la flamme de Dally.	263

Table des figures

1	Logique de développement Pierre Précieuses	4
2	La famille de lanceurs Ariane	7
3	Schéma typique d'un moteur à cycle expander	10
1.1	Schéma d'un échantillonnage temporel et fonction densité de probabilité correspondante pour deux signaux différents	25
2.1	Schéma de principe de la transformation du boulanger (a) état initial (b) étirement à surface constante (c) coupure et pliage ramenant à la surface initiale (d) deuxième étirement (e) état du mélance après 2 transformations	41
2.2	Spectres de l'énergie des fluctuations de vitesse (continu) et spectre de l'énergie des fluctuations du scalaire (pointillés)	43
2.3	Représentation schématique des formes de la fonction densité de probabilité d'un scalaire passif ξ pour différents types d'écoulement, d'après R. W. Bilger (BILGER, 1980)	45
3.1	Variation de la fraction massique d'oxydant, Y_O , de combustible, Y_F , et de la température, T , en fonction de la fraction de mélange, approximation de Burke et Schumann.	58
3.2	Variation de la fraction massique d'oxydant, Y_O , de combustible, Y_F , et de la température, T , en fonction de la fraction de mélange pour une chimie	
	à l'équilibre. En trait fin l'approximation de Burke et Schumann	59
3.3	Schéma d'une flamme de diffusion à contre courant	60
3.4	Schéma d'un réacteur homogène imparfaitement mélangé ou PaSR (Par-	
	tially Stirred Reactor).	62
3.5	Domaine de définition $\mathcal{D}_{(\xi,Y)}$ dans l'espace des compositions (ξ,Y)	64
3.6	Effet de la variation du temps de mélange, τ_{mel} , sur la trajectoire lagran- gienne dans l'espace des compositions obtenue à partir d'un calcul de PaSR.	65
3.7	Effet de la variation du temps de résidence, $\tau_{\rm res}$, sur la trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions obtenue à partir d'un calcul de PaSR.	65

3.8	Représentation de la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions. Comparaison entre la trajectoire calculée en PaSR et la tra-	
	jectoire approximée avec l'hypothèse de chimie brusque	67
3.9	Schéma de la première étape de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique.	75
3.10	Maillages retenus pour la simulation des jets sous-détendus après applica-	
0.20	tion de la méthode AMA. Partie basse : champ de nombre de Mach	76
3.11	Solution stationnaire. Haut : Champ de vitesse axiale movenne. Bas :	
-	Champ de température movenne, a) Isoligne Ma=2, b) Structure en dia-	
	mant en aval du disque de Mach. c) Positionnement de la flamme en bordure	
	du "tonneau" de Mach	77
4.1	Courbe de temps d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange	
	pour les conditions de l'expérience de Cabra (CABRA et al., 2002)	80
4.2	Schéma d'une flamme non-prémélangée stabilisée par auto-allumage. Tra-	
	cés de la trajectoire des particules fluides dans l'espace (T,ξ) . Adapté de	
	(VICQUELIN, 2010)	81
4.3	Analyse de la pertinence de l'hypothèse de chimie brusque avec une ap-	
	proche réacteur, les conditions des simulations sont celles de l'expérience	
	de Cabra (CABRA et al., 2002)	82
4.4	Trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions $(Y-\xi)$ (haut) et	
	évolution temporelle de la variable d'avancement (bas) obtenus à partir de	
	calculs en PaSR pour différents temps de mélange τ et temps de résidence	~ .
	τ_{res} . (conditions de CABRA et al. (2002))	84
4.5	PDF jointe de l'enthalpie totale et de la fraction de mélange obtenue par	
	DNS dans le cas d'une couche de mélange turbulente réactive supersonique	
	présentant un nombre de Mach égal à 2.4 (LUO et BRAY, 1998)	86
4.6	Illustration dans l'espace physique des trajectoires de particules fluides is-	
	sues des courants d'oxydant ou de combustible pure vers la composition	~ -
. –	$\xi_1, \ldots, \xi_{n-1}, \ldots, \xi_{n-1},$	87
4.7	Schema de principe de l'implementation du modèle à chimie brusque avec	0.0
	prise en compte de l'auto-allumage	92
5.1	Schéma du dispositif expérimental de Cheng (CHENG et al., 1994)	94
5.2	Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numé-	
	rique de la flamme de Cheng (CHENG et al., 1994)	95
5.3	Profils transverses de la fraction molaire moyenne \widetilde{X}_{H_2O} et de la tempé-	
	rature moyenne \widetilde{T} pour différentes abscisses X/d_j en aval de l'injecteur.	
	Comparaisons entre les résultats issus de la simulation numérique et les	
	données expérimentales.	96

5.4	Champs de SDR moyen calculés avec un modèle de relaxation linéaire, $C_{\xi} = 0.5$,(gauche) ou en résolvant son équation de transport (droite). Profils radiaux de rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} et termes de production/destruction de l'équation de transport du SDR moyen pour différentes abscisses en aval de l'injection	98
5.5	a) Champs de variance de la fraction de mélange calculés avec : l'équation de transport du SDR moyen (gauche), un modèle de relaxation linéaires des fluctuations scalaires (droite). b) Variation radiale de la variance de la fraction de mélange calculée avec l'équation de transport du SDR $\tilde{\xi}''^2$ ou le modèle de relaxation linéaire des fluctuations $\tilde{\xi}''^2_{relax}$, termes de production $P_{\tilde{\xi}''^2}$ et de dissipation de la variance, tracés pour différentes abscisses en aval de l'injection	100
5.6	Profils radiaux de fraction molaires d' H_2O , \tilde{Y}_{H_2O} , et de température moyenne, \tilde{T} , pour différentes abscisses en aval de l'injection.	101
5.7	Profils de rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} et des termes sources normalisés de production / destruction de l'équation de transport du SDR moyen tracés en fonction de la coordonnée axiale normalisée, X/d_j , le long de la ligne stoechiométrique $\tilde{\xi} = \xi_{\rm st}$	102
5.8	Schéma du dispositif expérimental de Beach (BEACH, 1972)	103
5.9	Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numé- rique de la flamme de Beach (BEACH, 1972)	104
5.10	Rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} tracé le long de l'iso- ligne stoechiométrique $\tilde{\xi} = \xi_{st}$ en fonction de la distance axiale normalisée X/d_j	105
5.11	Profils transverses de fraction massique de H_2O , H_2 , O_2 et N_2 pour différentes abscisses X/d_j en aval de l'injection. Comparaison entre la simulation numérique, avec l'équation de transport du SDR moyen ou avec l'hypothèse de relaxation linéaire des fluctuations, et les données expérimentales de (BEACH, 1972).	106
5.12	Champ de temps de résidence associé au combustible, $\hat{\tau}_{res}^{\xi=1}$,(haut) et à l'oxydant, $\hat{\tau}_{res}^{\xi=0}$, (bas) calculés pour la configuration de Cheng (CHENG et al., 1994).	107
5.13	Champ de temps de résidence associé au combustible (haut) et à l'oxydant (bas) calculés pour la configuration de Beach (BEACH, 1972). Cercles : localisation des profils tracés sur la Fig. 5.14	108

5.14	⁴ Profils de temps de résidence tracés en fonction de la fraction de mélange en trois points différents (voir Fig. 5.13 correspondant à des valeurs de fraction de mélange moyenne égales à : $\tilde{\xi} = 0.5$, $\tilde{\xi} = 0.05$ et $\tilde{\xi} = 0.95$ at	
5 1	$X/d_j = 4.25.$	108 114
0.10) Schema de la premiere etape de l'anumage d'un moteur fusée cryotechnique.	114
6.1	Volume de contrôle contenant une interface liquide-gaz	117
6.2	Schéma des différents régimes d'interaction entre le gaz et les gouttes dans un spray tels que définis par O'Rourke (O'ROURKE, 1981) (haut) ou Herr- mann (HERRMANN, 2006; JENNY et al., 2012) (bas).	129
6.3	Liens entre les variables eulériennes (traits épais) et lagrangiennes (traits fins). Modèle de vaporisation (pointillés) composé du modèle d'évaporation de Yao et al. (2003) (gris clair) et de l'approximation mélange	100
6.4	rapide LAW (1982); LAW et SIRIGNANO (1977) (gris fonce) Schéma de la structure moyenne d'une flamme non-prémélangée dipha- sique, l'oxydant est injecté liquide et le combustible est injecté gazeux. Profils radiaux de fractions massiques de liquide Y_l , de vapeur d'oxydant $Y_{Ox,g}$ et de combustible Y_F pour différentes abscisses. D'après (BORGHI et CHAMPION, 2000)	138 142
6.5	Schéma de la structure d'une zone de réaction en milieu diphasique. D'après (BORGHI et CHAMPION, 2000)	142
6.6	Schéma d'une goutte d'oxygène liquide (Lox) dans une atmosphère compo- sée de combustible. Profils de température et de fraction massiques associés dans la phase gazeuse.	143
6.7	Fonction densité de probabilité présumée sous la forme d'une fonction bêta, tracé pour $\tilde{\xi} = 0.4$ et $\tilde{\xi''^2} = 0.01$ (trait pointillé) comparée avec la β - PDF renormalisée pour $\overline{\xi}_{\min} = 0.2$ (trait continu), le domaine de définition correspondant est coloré en gris	146
6.8	Tracés de la fraction massique d'oxygène et de la température de flamme en fonction de la fraction de mélange en considérant la solution de Burke et Schumann, un équilibre entre les espèces majoritaires $(O_2, H_2 \text{ et } H_2O)$ ou en considérant toutes les espèces envisageables	147
6.9	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange afin de déter- miner le domaine d'allumage $[\xi_{J.}; \xi_{J+}]$ dans l'espace de la fraction de mélange (haut). Représentation conventionnelle du modèle MIL (lignes épaisses) dans l'espace des phases (ξ, Y) modifié afin de prendre en compte l'équi- libre chimique (bas).	149

7.1	Boîtier de combustion 10 bar : schéma de principe et montage en fonction- nement (ONERA)
7.2	Domaine de calcul et conditions limites associées
7.3	Champ de pression avec lignes de courant (haut) et champ de nombre de Mach (bas)
7.4	Tracés du spray de gouttelettes calculées colorées par leur température ainsi que des lignes de courant dans la zone de recirculation (haut), spray de gouttelettes superposé au champ de température moyenne (bas), le tout est issu d'une simulation numérique du ses MACCONTER A 10
7.5	Champ de fration massique moyenne de radical hydroxyle OH issu de la simulation (haut) et transformée d'Abel appliqué à la visualisation expérimentale de radical OH CANDEL et al. (1998) (bas).
7.6	Profils de température moyenne à Y=10 mm (gauche) et Y=15 mm (droite) tracés en fonction de la coordonnée axiale X. Symboles : données expé- rimentales et variation mesurée, lignes continues : avec prise en compte des effets de dissociation, lignes discontinues : sans prendre en compte
7.7	les effets de dissociation
7.8	Le champ de $\overline{\xi}_{\min}$ et ses iso-contours, en rouge, lignes de courant et limite de présence des gouttes en poir
7.9	Fonction densité de probabilité de la fraction de mélange en proche injec- teur (ligne continue). Gauche : comparaison avec le cas $\overline{\xi}_{\min} = 0$ en ligne discontinue, Droite : comparaison avec le cas ne prenant pas en compte les fluctuation de mélange induites par la vaporisation en ligne discontinue. 163
7.10	Influence des hypothèses de modélisation sur le champ de température moyen, avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$ (haut), sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation (milieu), avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas) 164
7.11	Influence des hypothèses de modélisation sur le champ de fraction mas- sique moyenne de OH, avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$ (haut), sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation (milieu), avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas)

7.12	Comparaison entre les différents profils radiaux de température corrigée (ligne) et les données expérimentales (symboles) pour différentes abscisses en aval de l'injection. Lignes pointillées : avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$, lignes discontinues : sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation, lignes continues : avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas)	165
7.13	Schéma de la première étape de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique.	171
8.1 8.2	Système à deux entrées et fraction de mélange associée ξ Schéma du mélange entre deux courants oxydants et un courant combus- tible. Le domaine de validité de la définition de la fraction de mélange est coloré en noir pour le mélange entre le combustible et l'air, en gris foncé pour le mélange entre le combustible et l'oxygène et en gris clair pour le mélange entre les trois courants. Les supports de la PDF de la composi- tion sont tracés sur le côté droit de la figure dans l'espace (Y_O, Y_D) et dans l'espace $(\xi, Y_O^{\infty,new})$.	175 183
8.3	Domaine de calcul et conditions limites associées pour la configuration injection parallèle	185
8.4	Champs de traceur d'entrée et de composition des entrées fictives pour la configuration injection parallèle. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.	187
8.5	Champs de fraction massique transportée et reconstruite pour la configura- tion injection parallèle. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de com- bustible pur	188
8.6	Domaine de calcul et conditions limite associées pour la configuration in- jection transverse	190
8.7	Champs de traceur d'entrée et de composition des entrées fictives pour la configuration injection transverse. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.	191
8.8	Champs de fraction massique transportée et reconstruite pour la confi- guration injection transverse. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.	192

8.9	Structure de flamme locale : approximation de Burke-Schumann en fonc-	
	tion de la fraction de mélange. Lignes pointillées : température. Lignes	
	${\bf continues:} fraction\ {\bf massique}\ d'oxydant\ ou\ de\ combustible.\ {\bf Lignes\ \acute{e}paisses:}$	
	structure de flamme avec l'approche injecteur fictif	
8.10	Champs de fraction massique d'eau calculés avec l'approche fraction de mé- lange standard définie à partir d'un injecteur combustible/air (haut), l'ap- proche fraction de mélange standard définie à partir d'un injecteur com- bustible/oxygène pur (bas) et avec l'approche injecteur fictif (milieu).La ligne stoechiométrique est tracée en noir	
9.1	Schéma du montage expérimental de DALLY et al. (2002)	
92	Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numé-	
0.2	rique du cas test de Dally (DALLY et al., 2002). $\dots \dots \dots$	
9.3	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les du calcul (lignes) pour la quantité rms (losange) la valeur moyenne (carrés) de la fraction de mélange, le long de l'axe de symétrie du jet	
9.4	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils issus de la simulation numérique (lignes) pour quatre abscisses différents, $X_1=30$ mm (carrés), $X_2=60$ mm (triangles), $X_3=120$ mm (losanges) and $X_4=200$ mm (cercles) 202	
9.5	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne (losanges) et $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ (carrés) à quatre abscisses différentes x=30 mm, 60 mm, 120 mm and 200 mm. Les résultats obtenus avec une ap- proche injecteur fictif sont tracés en ligne continue et ceux obtenus avec une approche fraction de mélange standard sont tracés en pointillés 203	
9.6	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et celles du calcul (lignes) pour la quantité rms (losange) la valeur moyenne (carrés) de la fraction de mélange, le long de l'axe de symétrie du jet	
9.7	Champs de température moyenne issus de deux simulations numériques utilisant l'approche IF, l'une pour le cas HM3% (gauche) et l'autre pour le cas HM9% (droite)	
9.8	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne (losanges) et $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ (carrés) à trois abscisses différentes x=30 mm, 60 mm, 120 mm. Les résultats obtenus pour le cas HM9% sont tracés en rouge et ceux obtenus pour le cas HM3% sont tracés en noir 207	

9.9	Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'espace des composi-	
	tions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque	208
9.10	Schéma de principe du modèle MIL avec l'approche injecteur fictif	209
9.11	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et celles du calcul	
	(lignes) pour la température moyenne (losange) et la fraction de mélange	
	moyenne (carrés), le long de l'axe de symétrie du jet	210
9.12	Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils	
	axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne	
	(losanges) et Y_{H_2} (carrés) à trois abscisses différentes x=30 mm, 60 mm,	
	120 mm	210
9.13	Schéma de l'architecture du modèle MIL et couplages avec le solveur N3S_NAT	TUR.219
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi-	
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_J; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de	
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es-	
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque	
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242
A.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242
A.1 C.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242
A.1 C.1	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242 256
A.1 C.1 C.2	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242 256
A.1 C.1 C.2	Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimi- tation du domaine d'inflammation $[\xi_{J}; \xi_{J+}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'es- pace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas)	242 256

Liste des tableaux

1	Caractéristiques d'un moteur à cycle expander
2.1	Constantes utilisées pour fermer l'équation de transport du taux de dissi- pation scalaire
5.1	Conditions d'entrée et géométrie de la flamme de Cheng (CHENG et al., 1994)
5.2	Conditions d'entrée et géométrie de la flamme de Beach (BEACH, 1972), voir aussi Evans (EVANS et al., 1978)
7.1 7.2 7.3	Conditions expérimentales pour le banc MASCOTTE
$\begin{array}{c} 8.1\\ 8.2 \end{array}$	Conditions limites pour la configuration injection parallèle
9.1	Conditions d'entrée et géométrie de la flamme de DALLY et al. (2002) 198
C.1	Echelles de temps caractéristiques lors de l'évaporation d'une gouttelette 257

Nomenclature

Lettres latines

C_{ξ}	Rapport du temps caractéristique du mélange sca-
	laire sur le temps caractéristique du mélange turbulent
	$(C_{\xi} \equiv \tau_{\xi}/\tau_{\xi})$
${\cal D}_lpha$	Coefficient de diffusion de l'espèce α
Da	Nombre de Damköhler
d_j	Diamètre de l'injecteur
h_t	Enthalpie totale
k	Energie cinétique turbulente
l_t	Echelle de longueur intégrale de la turbulence
\dot{m}	Flux de masse
M_t	Nombre de Mach turbulent
Ma	Nombre de Mach
p	Pression
P(.)	Fonction densité de probabilité (PDF)
Q	Chaleur spécifique de réaction
Re	Nombre de Reynolds
r_{st}	Rapport de mélange stoechiométrique massique
Sc	Nombre de Schmidt
S_{ij}	Tenseur taux de déformation
t	Temps
Т	Température
u_k	Composante de la vitesse dans la direction k
x_k	Coordonnées cartésienne (dans la direction k)
Y_{lpha}	Fraction massique de l'espèce α

Lettres grecques

$\delta(.)$	Fonction de distribution pic de Dirac
δ_{ij}	Tenseur de Kronecker
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
ϵ_d	Taux de dissipation turbulente dilatationnelle
ϵ_s	Taux de dissipation turbulente solenoïdal
ζ_j	Traceur de la j^{th} entrée, $\zeta_j = \dot{m}_j / \dot{m}_{tot}$
θ	Quantité de temps de résidence
ν	Viscosité cinématique
ξ	Fraction de mélange
Π_d	Terme de pression-dilatation $\Pi_d = \overline{p'(\partial u_i''/\partial x_i)}$
ρ	Masse volumique
$ au_{ m chem}$	Echelle de temps caractéristique de la réaction chi-
	mique
$ au_{ m ign}$	Temps caractéristique de l'allumage
$ au_{ m mel}$	Temps caractéristique du mélange
$ au_{ m res}$	Temps de résidence
$ au_t$	Echelle de temps intégrale de la turbulence
$ au_{\xi}$	Echelle de temps intégrale du champ scalaire
Φ	Dissipation function
χ_{ξ}	Taux de dissipation scalaire (SDR)
ω_{lpha}	Taux de production chimique de l'espèce α

Exposants

EQU	Grandeur relative à la trajectoire d'équilibre
IEM	Grandeur relative à la trajectoire de mélange suivant
	le modèle IEM
ig	Grandeur relative à l'auto-allumage
j	Grandeur relative à la j^{eme} entrée
MAX	Grandeur maximum
MIL	Grandeur relative à la fermeture MIL
$\xi = 1$	Grandeur relative à une particule fluide composée de
	combustible pur
$\xi = 0$	Grandeur relative à une particule fluide composée
	d'oxydant pur
∞	Grandeur relative à l'injection

Indices

ad	Grandeur relative aux conditions adiabatiques
α	Grandeur relative à l'espèce α
D	Grandeur relative à l'espèce inerte ou diluante
eq	Grandeur relative à l'équilibre thermodynamique
k	Grandeur relative à la coordonnée k
F	Grandeur relative à l'espèce combustible
fuel	Grandeur relative au courant combustible
0	Grandeur relative à l'espèce oxydante
OX	Grandeur relative au courant oxydant
Р	Grandeur relative aux produits de combustion
J	Grandeur relative aux sauts MIL
st	Grandeur relative aux conditions stoechiométriques
t	Grandeur relative à la turbulence (ou quantité totale,
	par exemple l'enthalpie totale h_t)
tot	Grandeur relative à la quantité totale (sommation sur
	toutes les entrées)
u	Grandeur relative aux conditions avant réaction
Y	Grandeur relative à la fraction massique des espèces
	réactives
ξ	Grandeur relative à la fraction de mélange

Autres

\overline{q}	Moyenne de Raynolds de la quantité q
$\widetilde{q} = \overline{ ho q} / \overline{ ho}$	Moyenne de Favre de la quantité q
$\widehat{q} = \overline{\rho_{\alpha} q} / \overline{\rho_{\alpha}} = \overline{\rho Y_{\alpha} q} / \overline{\rho Y_{\alpha}}$	Moyenne de la quantité q pondérée par la masse
$q' = q - \overline{q}$	Fluctuation par rapport à la moyenne de Reynolds
$q'' = q - \widetilde{q}$	Fluctuation par rapport à la moyenne de Favre

Acronymes

CFD	Computational Fluid Dynamics (mécanique des		
	fluides numérique		
FMS	Fraction de Mélange Standard		
HM3%	Hydrogène Méthane 3%		
$\mathrm{HM9\%}$	Hydrogène Méthane 9%		
IEM	Interaction par Echange avec la Moyenne		
IF	Injecteur Fictif		
LES	Large Eddy Simulation (simulation des grandes		
	échelles)		
LMSE	Linear Mean Square Estimation		
MIL	Modèle Intermittent Lagrangien		
MILD	Moderate and Intense Low-oxygen Dilution		
MUSCL	Monotone Upwind-centered Scheme for Conservation		
	Law		
PDF	Probability Density Function (fonction densité de pro-		
	babilité)		
PEUL	Probabilistic EUler Lagrange		
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes		
SDR	Scalar Dissipation Rate (taux de dissipation scalaire)		
TVD	Total Variation Diminishing		

Introduction

Introduction

Un peu d'histoire

L'après seconde guerre mondiale

Au sortir de la seconde guerre mondiale, les alliés, qui suspectaient l'existence d'une fusée longue portée, découvrirent l'avancée de la technologie allemande. En effet, en entrant le 11 avril 1945 dans les usines de Peenemünde, les Américains trouvèrent un énorme stock de V2, fusées à ergols liquides (oxygène liquide et alcool) et alimentées par turbopompe. Cette technologie, bien que connue et appliquée sur ce qu'on pouvait qualifier de démonstrateur avait été portée jusqu'à une dimension industrielle par les Allemands. La prise de conscience de la dimension stratégique de ces engins fut immédiate et une centaine de V2 fut ramenée sur le sol américain. Les Soviétiques, conscients eux aussi du potentiel de ces fusées, purent, quant à eux, récupérer des morceaux de V2 sur la base polonaise de Blizna. En juin 1945, les Français ne sont pas à la traîne puisque le Professeur H. Moureu et son équipe parviennent à visiter les installations souterraines de Nordhausen, à assister à des essais moteurs, à procéder à des interrogatoires de prisonniers allemands et à négocier des pièces détachées avec le commandement américain. Parallèlement, les scientifiques allemands ayant participé au développement de ces missiles balistiques sont envoyés dans les pays vainqueurs. Ainsi les Etats-Unis se taillent la part du lion en récupérant le père des V2, Werner Von Braun, ainsi que ses 122 collègues, l'URSS ramène 6000 ingénieurs à Moscou, la Grande-Bretagne qui n'est, à l'époque, pas intéressée par l'espace ne voit que 12 ingénieurs gagner ses côtes et enfin, la France accueille 250 ingénieurs.

A la fin de la seconde guerre mondiale, l'impulsion initiale allemande va permettre aux Etats-Unis et à l'URSS de développer leurs programmes de lanceur militaire qui mènera à la mise en orbite en 1957 du satellite russe Spoutnik et en 1958 du satellite américain Explorer 1, lançant ainsi la course à l'espace.

Du côté français, l'ambition est initialement moins grande. Ne disposant pas de V2 en état de voler, l'effort se concentre sur la compréhension et la reconstitution de ce dernier. Mais dès 1946, le général De Gaulle ordonne l'embauche en tant que contractuels de 123 ingénieurs et techniciens allemands, qui avaient participé au développement des



FIGURE 1: Logique de développement Pierre Précieuses

fusées allemandes, afin de développer un missile sol-air plus puissant que le V2. Parmi eux, Karl-Heinz Bringer qui avait proposé à Von Braun l'utilisation d'un générateur de gaz pour remplacer la turbopompe du V2 et qui exploitera cette piste au sein du LRBA de Vernon. Ce projet est abandonné en 1948 et l'effort est reporté sur le développement d'une fusée sonde baptisée Véronique. Le programme de développement de fusées sondes fut permit à la France de mettre au point une partie de la technologie nécessaire à la propulsion par ergols liquides en particulier en exploitant l'idée de Bringer et en expérimentant par la même occasion les premières déconvenues imputables aux instabilités de combustion basse fréquence. Il fut aussi l'occasion pour la France de mettre un coup de projecteur sur sa volonté d'accéder à l'espace avec pour apothéose, le tir des Véroniques en mars 1959 qui illuminèrent le ciel algérien pendant plus d'une heure ce qui eu un retentissement médiatique sans précédent, les journalistes présentant l'événement comme la réponse française à Spoutnik. Ce programme fut aussi l'occasion de collecter des informations sur la haute atmosphère, ce qui suscita l'intérêt de la NASA nouvellement créée et fut le début d'une collaboration scientifique dans le domaine spatial entre les Etats-Unis et la France.

Une agence spatiale et un lanceur français

Cette même année, le progrès de la mise au point de la bombe nucléaire française exige le développement de vecteurs, i.e. d'engins capables de la transporter jusqu'à son objectif. La SEREB (Société d'Etude et de Recherche Balistique) est alors créée, avec pour

objectif la mise au point des SSBS (Sol Sol Balistique Stratégique). Au début des années 60, la SEREB commence l'étude du SSBS et se rend compte rapidement qu'elle a besoin de développer une famille de véhicules d'essais pour qualifier les sous-systèmes les uns après les autres. Cette famille fut constituée des fameuses Pierres précieuses, initialement prévues à poudre. Mais la validation d'équipements tels que les centrales inertielles rendit nécessaire l'utilisation de la propulsion liquide; une double filière, poudre-liquide se mit alors en place. C'est aussi à cette époque que la France prend conscience que l'accès à l'espace lui est possible à moindre coût puisque, fin décembre 1960, un rapport fait mention de la possibilité de s'appuyer, en lui adjoignant un troisième étage, sur un véhicule d'essai bi-étage nommé Céphée (premier étage liquide et second à poudre) afin de développer un lanceur capable de satelliser une charge de 50kg : ce sont les prémices du projet Diamant. Ce projet fut initialement porté par le SEREB qui voyait en la capacité de la France à mettre en orbite un satellite un moyen d'accroître la crédibilité de sa dissuasion nucléaire. En 1962, le CNES est mis en place en tant que responsable de toute la politique spatiale française, cependant il reste dépendant des militaires en ce qui concerne les lanceurs. Jusqu'en 1966 où il crée sa propre division lanceur et, par la suite, mettra au point le lanceur Diamant B.

Europa

En 1960, le projet de missile Blue Streak est abandonné par les Britanniques. Cependant, pour des raisons de politique intérieure, le premier ministre de l'époque estime nécessaire, compte tenu des fortes sommes engagées, d'utiliser les résultats du projet à des fins autres que militaires. Les Britanniques vont alors rendre visite aux dirigeants européens pour proposer une collaboration afin de mettre au point un lanceur ayant comme premier étage le Blue Streak. Les Français acceptent sous condition d'utilisation d'un second étage français (dérivé d'un étage Emeraude). Le projet Europa est alors né. Les capacités du lanceur ne sont malheureusement pas adaptées au marché des satellites de communication qui est en train de se dessiner. En 1965, la France propose donc une version Europa 2 qui sera mise à l'étude en 1966. Mais le projet Europa 1 continue, avec quelques modifications pour atteindre l'orbite géostationnaire, parmi lesquelles figure le lancement depuis la base de Kourou en Guyane. Après de multiples échecs, des dépassements de budget conséquents et une évidence de plus en plus flagrante du manque de capacité du lanceur, la France propose, en 1968, d'abandonner le projet et de commencer l'étude d'Europa 3. Cependant il faudra attendre 1970 pour que le développement d'Europa 3 soit validé tout comme la finalisation d'Europa 2 et la poursuite de la production d'Europa 1. Entre temps, dans les années 60, une équipe dirigée par Heinz Bringer met au point le moteur M40, démonstrateur précurseur du moteur M55Viking. En 1969, il sera finalement testé avec succès sur le banc d'essais de la SEP (Société Européenne de Propulsion). C'est le premier moteur Européen à turbopompe. C'est aussi à cette période que le démonstrateur cryotechnique HM4 voit le jour. Finalement le programme Europa est arrêté en 1973 mais il aura permis la mise en place de la base de Kourou ainsi que les premières étapes du développement de moteurs qui feront le succès d'Ariane.

L'aventure Ariane

L'Europe tire plusieurs conclusions de l'échec du programme Europa, dont la principale est qu'un maître d'oeuvre doit gérer le projet pour l'ensemble des partenaires. Fort de son expérience sur le développement du petit lanceur français Diamant et de la prise en charge de 60% du budget du programme par l'Etat Français, le CNES est chargé de cette maîtrise d'oeuvre. Il propose alors en 1973 le projet L3S, adapté des premières études faites pour le projet Europa 3. Pour ce nouveau lanceur le choix est fait d'utiliser au mieux les technologies déjà développées et sûres. Un moteur cryotechnique similaire au HM4 mais développant 7 tonnes de poussée est alors choisi pour le troisième étage, c'est le moteur HM7 développé par la SEP et qualifié en 1979. Les deux autres étages sont choisis à ergols stockables. Deux moteurs dérivés du M40 sont alors mis au point, c'est la famille des moteurs Viking. Sept ans plus tard, en 1980, le lanceur Ariane 1 effectue son premier vol avec succès. C'est cette même année que la décision est prise de passer le projet de développement complémentaire d'Ariane de la phase préparatoire, initiée en 1978, à la phase de développement. Cette évolution, motivée par l'augmentation de masse des satellites, se fait dans la continuité d'Ariane 1 et sans rupture technologique puisque le gain de poussée est obtenu, sans prendre en compte l'adjonction de boosters à ergols solides, en augmentant la pression des chambres de combustion des moteurs Vikings. Cependant, cette augmentation de pression induit une plus forte probabilité d'apparition d'instabilités de combustion que la SEP propose de palier en modifiant la composition du carburant. Ce nouveau lanceur baptisé Ariane 3 fera son premier vol en 1984, mais dès 1981 l'agence spatial européenne décide de développer une version encore plus puissante d'Ariane : Ariane 4. Cette dernière voit sa charge utile croître grâce à l'augmentation légère de la pression chambre des moteurs et par l'adjonction de booster à ergols solide (PAP) ou à ergols liquide (PAL) qui exploitent des moteurs Viking. Le premier vol d'une longue série de succès à lieu en 1988. Entre 1988 et 2003, Ariane 4 est tiré 116 fois et ne connaît que 3 échecs, ce qui en fait un des lanceurs les plus fiables au monde et lui permet d'acquérir une position dominante sur le marché des satellites commerciaux.

En 1985, une nouvelle décision est prise : le développement du lanceur Ariane 5. Alors que les lanceurs précédents n'étaient que des évolutions de leur version antérieure, ce nouveau lanceur, initialement destiné à injecter des charges lourdes en orbite basse, est



FIGURE 2: La famille de lanceurs Ariane

en rupture avec les précédentes architectures et, plutôt que de s'appuyer sur le Viking, le développement d'un nouveau moteur cryotechnique pour le premier étage est entrepris : le moteur Vulcain. Une autre version de ce lanceur pour des charges encore plus lourde est aussi envisagée avec un étage supérieur propulsé par une version modifiée du HM7, le HM7B, qui sera remplacé dans une version future par un moteur cryotechnique novateur : le Vinci.

Enfin, en 2013, une configuration d'Ariane 6 ayant deux étages à ergols solides et un étage cryotechnique utilisant le moteur Vinci est retenue pour un premier lancement horizon 2021.

Les moteurs fusées européens

Comme expliqué précédemment, la France choisit à la fin de la seconde guerre mondiale de s'appuyer sur le V2 pour développer une fusée sonde, le projet Veronique. Le choix est alors fait d'alimenter la chambre de combustion avec des réservoirs d'ergols liquides stockables pressurisés par un générateur de gaz, idée initiale de Heinz Bringer. L'allumage se faisant par une petite quantité d'ergols hypergoliques déposée dans la chambre de combustion. Ce même concept (ergols liquides stockables pressurisés par générateur de gaz et allumés par dépôt d'ergols hypergoliques) est ensuite utilisé pour les moteurs Vexin puis Valois qui propulsent d'Emeraude à Diamant en passant par l'étage Coralie d'Europa. L'augmentation des capacités du lanceur européen va alors nécessiter un changement de conception du moteur. En effet, la pressurisation des ergols par générateur de gaz ne permet pas d'atteindre des pressions importantes, un nouveau moteur est alors mis au point. Le choix d'ergols plus énergétiques, et hypergoliques, est alors fait, ces ergols alimentant la chambre de combustion en passant par une turbopompe fonctionnant grâce à un cycle à flux dérivé. C'est la famille des moteurs Viking, dont 958 moteurs ont volé et seulement deux ont conduit à un échec. Parallèlement, les performances du couple d'ergols Hydrogène/Oxygène font qu'un moteur cryotechnique à flux dérivé fonctionnant avec ce couple est développé par la SEP, le démonstrateur HM4. Ce dernier est alors modifié afin de passer d'une poussée délivrée de 40kN à 60kN et prend le nom de HM7. Une version HM7-B délivrant 70kN est ultérieurement développée. Le moteur Vulcain, qui est développé à partir de la fin des années 80 pour propulser le premier étage d'Ariane 5, fonctionne lui aussi selon le même concept, mais avec une pression chambre 3 fois plus grande, de l'ordre de 110 bar. Il fournit ainsi une poussée 20 fois plus élevée. Enfin, fin des années 90, les études pour un nouveau moteur cryotechnique propulsant l'étage supérieur sont lancées. Ce moteur est en rupture par rapport aux développements précédents puisqu'il fonctionne selon un cycle expander qui n'a jamais été utilisé en Europe. Ce projet ambitieux, nommé Vinci, délivrera une poussée de 180kN, sera muni d'un divergent déployable et pourra être réallumé plusieurs fois en vol. Son premier lancement d'essai est attendu pour 2016.

Contexte de la présente étude

Alors que la lignée des moteurs à ergols stockables a bénéficié de l'expérience empirique allemande, puisqu'issue du V2 et a été développée par modification successives de la version antérieure. La lignée des moteurs cryotechniques est développée ex nihilo sans connaissance approfondie des phénomènes physiques liés à la propulsion cryotechnique. C'est ce douloureux constat que fait la communauté Ariane le 31 mai 1986 à la suite de l'échec du vol V18. En effet, lors de ce vol, le moteur HM7 ne s'est pas allumé. Cet échec faisait suite à celui du vol V15 au cours duquel le moteur HM7 ne s'était pas non plus allumé et aux échecs des vols V12 et V14 qui avaient vu un retard d'allumage de ce même moteur. Ces incidents font alors prendre conscience à la communauté de la nécessité de concevoir, fabriquer et essayer mais avant tout comprendre finement les phénomènes physiques mis en oeuvre au sein des moteurs. Suite aux recommandations de la commission d'enquête sur l'incident du V18, un Programme de Recherches Coordonnées sur la combustion dans les moteurs fusées est créé en 1988 entre le CNES, le CNRS et la SEP. Le développement d'un code de simulation numérique spécifique pour les problèmes d'allumage des moteurs cryotechniques est alors décidé. Deux Groupements De Recherche, le 1075 et le 5240, poursuivent la collaboration entre ces trois entités, la SEP devenant SNECMA entre temps.

Ces GDR ont permis de mettre au point une première catégorie de montages expérimentaux, aidant à la compréhension des phénomènes physiques en vue de leur modélisation, ainsi qu'une seconde catégorie de montages, permettant la validation des modèles implantés dans des outils de simulation numériques, le tout se destinant à être un précieux outil de conception des moteurs cryotechniques et en particulier de leur phase d'allumage. En 2001, lors de la clôture du second GDR, le code de simulation numérique initial, Thésée, a été remplacé par le code N3snatur. L'implémentation de plusieurs modèles développés dans le cadre des GDR est effectuée ou en cours. Une base de données pour la validation des outils numériques est aussi construite grâce au banc mascotte qui fonctionne avec de l'oxygène liquide en régime subcritique et supercritique. Avec le développement d'un moteur avec un cycle expander, la phase d'allumage est encore plus critique puisque ce dernier est réallumable. Des travaux de modélisation ont donc été entrepris afin de mettre au point un outil capable de simuler la phase d'allumage. Ce travail de Thèse est une contribution au développement de cet outil.

Les moteurs à cycle expander

Les moteurs à cycle expander permettent d'envisager un ré-allumage en vol. Ce cycle, inédit en Europe, permet de se passer de source d'énergie complémentaire pour faire fonctionner les turbopompes ¹ puisque cette énergie est directement prélevée au niveau de la chambre de combustion, voir Fig. 3. En effet, la température au sein de la chambre de combustion est telle qu'aucun matériau ne peut y résister. Un système de refroidissement des parois de la chambre de combustion est donc indispensable. L'idée du cycle expander est d'utiliser l'énergie prélevée au niveau des parois de la chambre de combustion afin d'alimenter les turbopompes. Pour cela l'hydrogène liquide, qui devient gazeux lors de son passage dans les canaux de refroidissment de la chambre de combustion, est détendu dans une turbine afin de fournir l'énergie nécessaire au fonctionnement des turbopompes et donc à l'alimentation en ergol de la chambre. La criticité de la phase d'allumage est alors évidente puisque ce qui fourni l'énergie nécessaire à l'alimentation en ergol de la chambre est la combustion qui se déroule au sein de cette même chambre. La capacité de réallumage en vol a aussi imposé l'utilisation d'un allumeur torche qui débite des gaz chauds issus de la combustion d'un mélange pauvre.

^{1.} Les moteurs fonctionnant selon un autre type de cycle ont la plupart du temps une source d'énergie complémentaire, un générateur de gaz pour les cycles à flux dérivés (Aestus, Viking, HM7, Vulcain,...) ou une préchambre pour les cycles à combustion étagée.



FIGURE 3: Schéma typique d'un moteur à cycle expander, d'après http://www.snecma.com/-vinci-r,385-.html

Caractéristiques		
Cycle thermodynamique	Cycle e	expander
Poussée dans le vide	180 kN	
Pression de combustion	$60 \mathrm{bar}$	
Rapport de section	240	
Diamètre sortie de tuyère	$2.20 \mathrm{~m}$	
Hauteur	$2.37 \mathrm{~m}$ (replié)/ $4.20 \mathrm{~m}$ (déployé)	
Ergols	LOx	m LH2
Débits d'ergols	$33.70~\mathrm{kg/s}$	$5.80~{ m kg/s}$
Vitesse de rotation turbopompe	$18000 \ { m tr}/{ m min}$	$90000~{ m tr}/{ m min}$
Puissance turbopompe	350 kW	2800 kW

TABLE 1: Caractéristiques d'un moteur à cycle expander, d'après http://www.snecma.com/-vinci-r,385-.html

Déroulement de la phase d'allumage d'un moteur à cycle expander



L'allumage du moteur commence par une phase de remplissage par un gaz inerte. Cette phase permet de parfaitement contrôler l'atmosphère qui règne au sein du moteur. En effet, si cette atmosphère n'est pas parfaitement contrôlée, il peut y avoir des poches de gaz oxydant piégées dans le moteur, des poches d'air piégées au sol par exemple. Ces poches peuvent alors mener localement à un mélange réactif lorsque l'hydrogène commence à être injecté et entrainer des allumages non contrôlés, ce qui peut avoir des conséquences catastrophiques.



Une fois l'atmosphère interne au moteur contrôlée, l'hydrogène commence à être injecté et l'allumeur torche est allumé. Cet allumeur torche consiste en un jet sonique de gaz chaud oxydant. Ce jet étant sonique, il présente une structure de jet fortement sous détendu. L'écoulement dans le sillage de cette structure compressible étant fortement turbulent, le mélange avec l'hydrogène qui est injecté à sa périphérie s'en trouve grandement amélioré et permet le développement d'une flamme. De plus, la structure de jet fortement sous-détendu fait qu'il existe des zones de fort cisaillement propice à l'auto-allumage, ce qui aide à la stabilisation de la flamme.


L'oxygène liquide commence alors à être injecté. Le jet d'oxygène liquide injecté au centre des injecteurs coaxiaux est alors épluché par un courant d'hydrogène gazeux à haute vitesse. Un spray de gouttelettes se forme ainsi. Ces dernières s'évaporant, un mélange de combustible, l'hydrogène, et d'oxydant, l'oxygène, constitue la phase gazeuse. L'interaction de ce mélange gazeux avec la flamme de l'allumeur torche permet alors d'allumer la première couronne d'injecteurs, la plus proche de l'allumeur. La pression au sein de la chambre étant encore en dessous de la pression critique de l'oxygène, la flamme qui se développe est bien une flamme diphasique.



Le mélange issu des injecteurs de chaque couronne s'allume alors de proche en proche jusqu'à ce que toute la plaque d'injection soit allumée. Cependant, le remplissage du dôme Lox n'est pas instantané. Il en résulte que, dans la phase transitoire, tous les injecteurs ne débitent pas forcement le même mélange puisque le dôme LOx est initialement rempli de gaz inerte. Les hétérogénéités de composition de ces entrées font que l'allumage ne se fait pas de manière homogène sur toute la plaque. La prise en compte de ces hétérogénéités est donc de première importance afin de bien comprendre l'allumage du moteur.



Enfin, une fois que l'ensemble du dôme LOx est rempli et que toute la plaque d'injection est allumée. Le moteur monte en régime jusqu'à arriver à ses conditions nominales de fonctionnement. La pression dans la chambre est alors de l'ordre de quelques dizaines de bars, la combustion se fait donc dans des conditions supercritiques.

Organisation du manuscrit

Ce manuscrit de thèse est une contribution au développement d'un outil numérique pouvant permettre la simulation du transitoire d'allumage d'un moteur à cycle expander. Il a donc été choisi de structurer ce mémoire en s'appuyant sur la séquence temporelle d'allumage du moteur, pour cela il est découpé en quatre parties. Après l'introduction présentant le contexte général de l'étude, la première partie a pour vocation d'établir les bases nécessaires à la compréhension des parties suivantes. Un premier chapitre introduit donc la modélisation de l'aérothermochimie, puis un deuxième chapitre présente le mélange scalaire en écoulement turbulent. Enfin, un troisième chapitre présente une approche de la modélisation de la combustion turbulente s'appuyant sur des échelles caractéristiques de temps.

La deuxième partie s'attache à la modélisation de l'allumeur torche. La torche ayant une structure fortement compressible avec des zones supersoniques, le quatrième chapitre (le premier de cette partie) présente une modélisation de la combustion en écoulement rapide. Une attention particulière est portée à la description des échelles de temps caractéristiques du mélange et du temps de résidence sur lesquelles repose la modélisation proposée par Izard et al. (IZARD et al., 2009). Le cinquième chapitre présente alors les applications de ce modèle sur des flammes jet à haute vitesse dans lesquelles l'autoallumage a été mis en évidence, la flamme de Cheng et al. (CHENG et al., 1994) et la flamme de Beach (BEACH, 1972). Le travail présenté dans cette partie est publié dans (GOMET et al., 2012).

La troisième partie concerne la combustion diphasique. Un premier chapitre introduit les équations de conservation qui régissent ces écoulements et en particulier les termes sources induits par la vaporisation dans la phase gazeuse. Ce chapitre explicite aussi l'approche lagrangienne qui a été retenue pour la simulation de la phase dispersée. Le septième chapitre est dédié à la modélisation de la combustion en écoulement diphasique, en particulier la prise en compte des effets de transitoire de chauffage des gouttes sur le mélange local. Le modèle ainsi introduit est appliqué, dans le huitième chapitre, à la configuration MASCOTTE-A10, flamme cryotechnique représentative des premiers instants de l'allumage du mélange issu des injecteurs (GOMET et al., 2014).

La quatrième partie est dédiée à la propagation de la flamme à toute la plaque d'injection. Pour cela, la prise en compte des hétérogénéités de composition à l'injection est nécessaire. Le neuvième chapitre propose donc une approche à même de prendre en compte ces hétérogénéités en prolongeant la notion de fraction de mélange à un milieu à trois entrées et plus en se basant sur un injecteur fictif localement défini (GOMET et al., 2013). La pertinence de l'approche proposée y est aussi évaluée sur des cas test numériques. Cette approche est ensuite mise en oeuvre, dans le dixième chapitre, pour simuler la flamme jet de Dally et al.(DALLY et al., 2002), montage expérimental possédant trois entrées clairement définies.

Enfin, une synthèse des modèles utilisés et des principaux résultats obtenus est présentée avant de dégager quelques conclusions et perspectives pour la présente étude.

Première partie

Généralités

Chapitre 1

Modélisation Aérothermochimique

1.1 Hypothèses

Ce travail est effectué dans le cadre de la mécanique des milieux continus. On considère donc que le libre parcours moyen des molécules reste inférieur aux dimensions caractéristiques de l'écoulement et que tout effet de gaz raréfié peut être négligé. L'élément infinitésimal de référence correspond ainsi physiquement à une particule fluide infiniment petite par rapport à l'échelle macroscopique, mais dont le volume renferme toujours un nombre suffisamment important de molécules. On peut ainsi y définir statistiquement un état constant pendant les échelles de temps moléculaires (masse moyenne sur l'unité de volume ρ , vitesse barycentrique moyenne \overrightarrow{V} et énergie interne moyenne e). Le *milieu* est considéré comme *fluide*, le champ de déformation macroscopique reste continu sous l'action du champ de contrainte. L'équilibre thermodynamique est supposé toujours établi, c'est-à -dire que les temps caractéristiques du mouvement fluide restent toujours beaucoup plus grands que les temps de relaxation des molécules vers leur niveau d'équilibre. Cette hypothèse est retenue pour la résolution le l'aérodynamique mais pas en ce qui concerne la combustion puisque les réactions chimiques peuvent se dérouler hors équilibre thermodynamique compte tenu des modèles utilisés. Le rayonnement thermique n'est pas pris en compte. La diffusion moléculaire est supposée suivre la loi de Fick, les effets Soret et Dufour sont négligés. Enfin, les valeurs du nombre de Lewis Le sont supposés unitaires. Les termes de diffusion moléculaire étant (à grand nombre de Reynolds) d'un ordre de grandeur très inférieur à ceux de diffusion turbulente, l'erreur commise en retenant ces approximations sera considérée comme minime mais sera tout de même discutée dans la suite du mémoire.

1.2 Équations instantanées

Les équations suivantes constituent la base retenue pour la plupart des travaux effectués en combustion, mais ont été rédigées ici à partir de CANT et MASTORASKOS (2008); REYNOLDS (1987); MERCI et al. (2010).

1.2.1 Lois de conservation

On adopte ici une description eulérienne de l'écoulement. Dans un volume élémentaire fixe Ω , de surface $\partial\Omega$, et de normale unitaire à cette surface \overrightarrow{n} , orientée vers l'extérieur de ce domaine, le principe de conservation d'une quantité physique ϕ se traduit par le bilan :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi dV + \int_{\partial \Omega} \overrightarrow{V} \cdot \overrightarrow{n} \phi dS = \int_{\partial \Omega} \overrightarrow{n} \cdot \overrightarrow{\mathcal{F}}(\phi) dS + \int_{\Omega} \mathcal{S}(\phi) dV$$
(1.1)

Ce bilan peut être interprété physiquement comme suit : la variation de ϕ au cours du temps résulte du mouvement propre du volume fluide (terme convectif) et des actions externes surfaciques (terme diffusif $\vec{\mathcal{F}}$) et volumiques (terme source \mathcal{S}).

On choisit alors comme variables du problème les variables conservatives :

$$\rho, \rho \overrightarrow{V}, \rho E, \rho Y_{\alpha}$$

respectivement la masse volumique, la quantité de mouvement, l'énergie totale massique et la masse volumique de l'espèce α . L'énergie totale est définie comme la somme de l'énergie interne massique e et de l'énergie cinétique par unité de masse :

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2}\rho u_k u_k$$

En appliquant le théorème d'Ostrogradski, on obtient les formes instantanées locales des équations de conservation.

Conservation de la masse pour l'espèce α

La variation de la fraction massique de l'espèce α est due au mouvement propre du fluide mais aussi à la diffusion de l'espèce α dans le fluide ainsi qu'à un terme de production/destruction d'origine chimique.

$$\frac{\partial \rho Y_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_{\alpha}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(J_k^{\alpha} \right) + \rho \omega_{\alpha} \tag{1.2}$$

où J_k^α représente le flux diffusif de masse de l'espèce considérée.

Conservation de la masse totale

On considère qu'il n'y a aucune source de création ou de disparition de masse totale, par conséquent, le flux de masse est directement lié au mouvement propre du fluide. L'équation peut se déduire de l'Eq. (6.30) sachant que la masse totale est la somme de toutes les masses d'espèce, $\rho = \sum_{\alpha} \rho Y_{\alpha}$.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = 0 \tag{1.3}$$

Bilan de quantité de mouvement

En appliquant le principe fondamental de la dynamique, on peut écrire que le produit de la masse par l'accélération d'une particule fluide est égal à la somme des forces extérieures qui lui sont appliquées. Le flux de la quantité de mouvement se décompose donc en une contribution des contraintes normales par unité de surface (pression) et une contribution des contraintes tangentielles (forces visqueuses) reliées au champ moyen par la relation de Newton, ainsi que l'effet des forces volumiques.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k u_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k} + \rho F_i \tag{1.4}$$

avec le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ki}

Bilan d'énergie

La conservation de l'énergie totale ρE est déduite du premier principe de la thermodynamique. La variation de l'énergie totale est égale à la somme de la puissance des forces mécaniques et du flux thermique s'exerçant sur le système.

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k E}{\partial x_k} = \rho u_k F_k - \frac{\partial u_k p}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tau_{ki} u_i) - \frac{\partial q_k}{\partial x_k}$$
(1.5)

avec q_k le flux d'énergie cédé à la cellule

1.2.2 Lois de comportement

Afin de pouvoir résoudre les équations de conservation présentées dans le paragraphe précédent, certains termes doivent être modélisés. Une loi d'état et des lois de comportement sont donc introduites.

Loi d'état

La loi d'état retenue est la loi des gaz parfaits :

$$p = \rho \frac{R}{M} T \tag{1.6}$$

où M est la masse molaire du gaz considéré et $R = 8.314 J mol^{-1} K - 1$ la constante universelle des gaz parfaits¹.

Transport moléculaire

Le fluide est supposé visqueux et newtonien dans tout le domaine. Ainsi le tenseur des contraintes visqueuses suit la loi de Newton :

$$\tau_{ki} = \lambda \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta_{ki} + \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)$$

avec λ le coefficient de viscosité de volume et μ le coefficient de viscosité dynamique moléculaire. De plus, en appliquant l'hypothèse de Stokes, on suppose que les changements de volume des particules fluides s'effectuent sans viscosité, ie $3\lambda + 2\mu = 0$. On obtient donc une expression du tenseur des contraintes fonction de la vitesse instantanée locale :

$$\tau_{ki} = S_{ik} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta_{ki}$$
(1.7)

$$S_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)$$
(1.8)

où S_{ik} est le tenseur taux de déformation.

Enfin, la diffusion d'espèce est supposée suivre la loi de Fick et le flux de chaleur transmis par conduction thermique est supposé suivre la loi de Fourier :

$$\vec{J}_{\alpha} = -\rho_{\alpha} D_{\alpha} \vec{\nabla} Y_{\alpha}$$

$$\vec{q} = -\lambda_T \vec{\nabla} T + \sum_{\alpha} \vec{J}_{\alpha} h_{\alpha}$$
(1.9)

où $D_{\alpha} = a_T/Le_{\alpha}$ est le coefficient de diffusion de l'espèce α , $a_T = \lambda_T/\rho C_p$ est le coefficient de diffusivité thermique et λ_T est le coefficient de conductibilité thermique moléculaire. De plus, si on néglige le flux de chaleur induit par la migration d'espèces d'enthalpies différentes (effets de Lewis), en introduisant le nombre de Prandtl $Pr = \mu C_p/\lambda_T$, l'évaluation du flux conductif de chaleur peut être ramenée à celle de la viscosité :

$$\overrightarrow{q} = -\frac{\mu C_p}{Pr} \overrightarrow{\nabla} T \tag{1.10}$$

Taux de production chimique

Il reste maintenant à préciser la forme prise par le taux de production chimique. La première approche pour sa modélisation consiste à retenir la loi d'Arrhénius.

^{1.} On notera que cette loi peut être mise en défaut dans des conditions critiques ou supercritiques telles que celles rencontrées en conditions de fonctionnement nominales d'un moteur fusée.

En écrivant une réaction chimique élémentaire non réversible sous la forme :

$$\sum_{j=1}^{N} \gamma'_{ji} A_j \longrightarrow \sum_{j=1}^{N} \gamma''_{ji} A_j \tag{1.11}$$

où γ'_{ji} et γ''_{ji} sont les coefficients stoechiométriques de la $j^{\grave{e}me}$ espèce dans la $i^{\grave{e}me}$ réaction et A_j le symbole chimique de l'espèce j. On peut expliciter le taux de production massique de l'espèce j de la manière suivante :

$$\rho\omega_j = \frac{d\rho_j}{dt} = M_j \frac{dC_j}{dt} \tag{1.12}$$

où ρ_j est la masse volumique de la j^{eme} espèce, M_j sa masse molaire et C_j sa concentration molaire. Et, en considérant qu'il y a K réactions élémentaires :

$$\rho\omega_j = \sum_{i=1}^K \omega_{ji} \tag{1.13}$$

Avec ω_{ji} le taux de production massique de l'espèce j dans la réaction i. Enfin, en utilisant la théorie des collisions, ω_{ji} peut être explicité sous la forme :

$$\omega_{ji} = M_j \left(\gamma_{ji}'' - \gamma_{ji}'\right) k \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma_{ji}'}$$
(1.14)

où k est appelé constante de réaction et N le nombre d'espèce intervenant dans la réaction. Le problème de fermeture du terme de production est donc résolu si on connait cette constante k. Cette constante est couramment déterminée en utilisant la loi empirique proposée par Arrhénius :

$$k = \beta T^{\alpha} \exp\left(\frac{-E_{a_i}}{RT}\right) \tag{1.15}$$

où E_{a_i} est l'énergie d'activation de la réaction *i*, c'est-à-dire l'énergie minimale nécessaire aux molécules pour réagir, *R* la constante universelle des gaz parfaits et βT^{α} le facteur de fréquence, ou facteur préexponentiel. Ces constantes sont déterminées expérimentalement et dépendent de la réaction considérée, de la pression et de la température.

Cette modélisation peut être étendue aux réactions réversibles :

$$\sum_{j=1}^{N} \gamma'_{ji} A_j \xleftarrow{k_d}{k_r} \sum_{j=1}^{N} \gamma''_{ji} A_j$$
(1.16)

où k_d est la constante de réaction dans le sens direct (de gauche à droite dans l'équation (1.16)) et k_r dans le sens inverse². Le taux de production massique de l'espèce j dans la réaction i s'écrit alors :

$$\omega_{ji} = M_j \left(\gamma'_{ji} - \gamma''_{ji} \right) \left(k_{d_i} \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma'_{ji}} - k_{r_i} \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma''_{ji}} \right)$$
(1.17)

1.2.3 Relations de Rankine Hugoniot

Les écoulements considérés dans cette étude peuvent être localement supersoniques, la représentation choisie ne doit donc pas être mise en défaut dans des écoulements avec ondes de choc. Cependant, ces ondes de choc ont une épaisseur de l'ordre du libre parcours moyen, leur résolution ne peut donc être conduite compte tenu des hypothèses retenues. Pour pallier ce problème, il convient de compléter les équations de conservation précédentes par les relations de Rankine Hugoniot traduisant la conservation des différentes quantités sur les surfaces de discontinuité.

Soit Σ une surface de discontinuité de normale \overrightarrow{N} se déplaçant à la vitesse $\overrightarrow{U^{\pm}}$. On note par ⁻ et par ⁺ l'expression d'une variable quelconque de part et d'autre de Σ et par $W^{\pm} = \left(\overrightarrow{V} - \overrightarrow{U^{\pm}}\right) \cdot \overrightarrow{N}$ la vitesse relative du choc. Les relations de saut ou relations de Rankine Hugoniot s'écrivent³

ŀ

$$\rho^- W^- = \rho^+ W^+ \tag{1.18}$$

$$\rho^{-}W^{-} \cdot u_{k}^{-} + p^{-} - \tau_{ik}^{-}N_{k} = \rho^{+}W^{+} \cdot u_{k}^{+} + p^{+} - \tau_{ik}^{+}N_{k}$$
(1.19)

$$E^{-}W^{-} + p^{-}u_{i}^{-} - \tau_{ik}^{-}N_{k}u_{i}^{-} = E^{+}W^{+} + p^{+}u_{i}^{+} - \tau_{ik}^{+}N_{k}u_{i}^{+}$$
(1.20)

1.3 Équations moyennées

1.3.1 Description statistique de la turbulence

Caractère aléatoire de la turbulence

La plupart des écoulements rencontrés dans les applications industrielles ou dans la nature sont turbulents. Ce type d'écoulement présente un caractère aléatoire et irrégulier si bien que les variables nécessaires à sa description fluctuent constamment dans l'espace et le temps. C'est pourquoi lorsqu'on mesure, au moyen d'un fil chaud par exemple, un

^{2.} Si la réaction est irréversible $k_r = 0$.

^{3.} Les éventuelles forces volumiques ne sont pas prises en compte dans ces relations.



FIGURE 1.1: Schéma d'un échantillonnage temporel et fonction densité de probabilité correspondante pour deux signaux différents

champ de vitesse dans un écoulement turbulent, on obtient un signal fluctuant semblable à ceux de la figure 1.1.

Le caractère aléatoire de la turbulence fait donc que seul les quantités moyennes sont reproductibles, une approche statistique de l'écoulement semble alors plus appropriée. De plus, du point de vue de l'ingénieur c'est la quantité moyenne qui semble la plus pertinente pour l'estimation du rendement d'un système. Ceci justifie la résolution des équations de transport des quantités moyennées présentées un peu plus loin. Cependant, le dimensionnement de ce même système nécessite aussi de connaître les conditions extrêmes qu'il peut rencontrer au cours de sa mise en oeuvre, l'introduction de la fonction densité de probabilité (PDF) de la quantité considérée est dans ce cas un outil précieux.

Moyenne d'ensemble

Supposons que l'écoulement considéré a un spectre séparé en deux parties nettement distinctes : une bande de basses fréquences ou de régime quasi-permanent, de contribution moyenne variant peu au cours du temps, nettement séparée d'une bande de régimes transitoires de haute fréquence et de contribution moyenne nulle. La valeur instantanée ϕ se décompose alors naturellement en une partie moyenne, $\overline{\phi}$, et une partie fluctuante, ϕ' , c'est la décomposition dite de Reynolds :

$$\phi = \overline{\phi} + \phi' \tag{1.21}$$

Cette partie moyenne, $\overline{\phi}$, est une moyenne statistique, c'est-à-dire qu'elle devrait en toute logique être mesurée en refaisant plusieurs fois la même expérience et en prenant la

moyenne des mesures au même instant. Néanmoins, pour éviter les problèmes engendrés par le fait de refaire la même expérience plusieurs fois (problèmes de temps, de coût, de maîtrise fine des conditions limites...), des écoulements avec des propriétés particulières sont considérés.

 — Si l'écoulement est statistiquement stationnaire, on peut invoquer l'hypothèse d'ergodicité afin d'assimiler la moyenne d'ensemble sur plusieurs réalisations à la moyenne temporelle suivante :

$$\overline{\phi} = \lim_{t_M \to \infty} \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} \phi(t^*) dt^*$$
(1.22)

En réalité le temps de mesure, t_M , ne peut pas être infini. Il doit cependant être plus grand que la plus grande des échelles temporelles de la turbulence ceci pour permettre la convergence de l'intégrale.

 — Si l'écoulement considéré est statistiquement homogène dans une direction, c'est la moyenne spatiale qui est assimilée à la moyenne statistique :

$$\overline{\phi} = \lim_{L_M \to \infty} \frac{1}{L_M} \int_{0}^{L_M} \phi(L^*) dL^*$$
(1.23)

Là aussi, la longueur L_M ne peut être infinie et doit être prise dans la direction d'homogénéité statistique.

Dans les écoulements à masse volumique variable, les équations moyennées avec la moyenne de Reynolds deviennent inextricables. Un autre opérateur de moyenne, appelé moyenne de Favre, a donc été introduit en pondérant la moyenne de Reynolds par la masse volumique :

$$\widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \tag{1.24}$$

Tout comme pour la moyenne de Reynolds la grandeur instantanée peut être écrite sous la forme de sa valeur moyenne et des fluctuations :

$$\phi = \widetilde{\phi} + \phi'' \tag{1.25}$$

A noter quelques propriétés intéressantes découlant de ces définitions, en notant ϕ et ψ

deux variables aléatoires :

$$\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi}$$

$$\overline{\phi'} = \overline{\phi - \overline{\phi}} = 0$$

$$\widetilde{\phi''} = \frac{\overline{\rho\phi''}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho(\phi - \widetilde{\phi})}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} - \widetilde{\phi} = 0$$

$$\widetilde{\phi'} \neq \overline{\phi''} = \overline{\phi} - \widetilde{\phi}$$

$$\overline{\phi}\overline{\psi} \neq \overline{\phi}\overline{\psi}$$

Lorsque la masse volumique est constante, les moyennes de Reynolds et de Favre sont strictement équivalentes. La différence entre la moyenne au sens de Favre et au sens de Reynolds peut être quantifiée par :

$$\widetilde{\phi} - \overline{\phi} = \frac{\overline{\rho' \phi'}}{\overline{\rho}} = -\widetilde{\phi}' = -\overline{\phi''}$$
(1.26)

En l'absence de réaction chimique exothermique, cette différence reste faible lorsque le nombre de Mach est inférieur à cinq et le taux de turbulence modéré (FAVRE, 1965). Dans ce cas, tant qu'aucune réaction chimique endothermique ou exothermique n'entre en jeu, la comparaison des grandeurs moyennes (au sens de Favre) calculées aux grandeurs moyennes mesurées expérimentalement est justifiée. Notons aussi que les mesures obtenues par certaines techniques expérimentales comme la mesure de vitesse par fil chaud sont plus proches des moyennes de Favre tandis que d'autre techniques comme l'anémomètrie Doppler Laser mesurent des moyennes de Reynolds (RIBAULT, 1991). La comparaison calcul/expérience doit donc se faire en gardant ces différences à l'esprit.

Fonction densité de probabilité

Plutôt que de ne considérer que la valeur moyenne $\overline{\phi}$, on peut considérer la probabilité qu'une variable ϕ prenne une valeur donnée ϕ^* . Une fonction densité de probabilité P (Probability Density Function) peut alors être associée à la variable ϕ . Cette PDF est définie telle que la probabilité que $\phi^* < \phi < \phi^* + d\phi^*$ est $P(\phi^*) d\phi^*$ avec ϕ^* la variable d'échantillonnage de ϕ . En définissant b la valeur maximale de ϕ^* , et a sa valeur minimale, on peut écrire la condition de normalisation de P:

$$\int_{a}^{b} P\left(\phi^{*}\right) d\phi^{*} = 1$$

On peut aussi étendre cette PDF à plusieurs variables, on l'appelle alors PDF jointe. Ainsi, pour deux variables par exemple, la probabilité que $\phi_1^* < \phi_1 < \phi_1^* + d\phi_1^*$ et $\phi_2^* < \phi_2 < \phi_2^* + d\phi_2^*$ est $P(\phi_1^*, \phi_2^*) d\phi_1^* d\phi_2^*$.

Enfin, la PDF permet de calculer n'importe quel moment (centré ou non), et en particulier la valeur moyenne. Par exemple en prenant une variable ϕ , avec ϕ^* sa variable d'échantillonnage à valeur entre a et b et $P(\phi^*)$ sa PDF. La valeur moyenne au sens de Reynolds peut s'écrire :

$$\overline{\phi} = \int_{a}^{b} \phi^* P\left(\phi^*\right) d\phi^* \tag{1.27}$$

De même si $f(\phi)$ est une fonction de ϕ , on peut écrire :

$$\overline{f(\phi)} = \int_{a}^{b} f(\phi^{*}) P(\phi^{*}) d\phi^{*}$$
(1.28)

On peut aussi étendre cette définition à la moyenne de Favre :

$$\widetilde{f(\phi)} = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_{a}^{b} \rho f(\phi^*) P(\phi^*) d\phi^* = \int_{a}^{b} f(\phi^*) \widetilde{P}(\phi^*) d\phi^*$$
(1.29)

avec $\widetilde{P} = \rho P / \overline{\rho}$

La PDF $P(\phi^*)$ permet donc de déterminer toutes les grandeurs moyennes associées à la variable ϕ . Malheureusement, la manière d'évaluer cette fonction n'est pas simple. Elle doit être soit transportée, mais le coût de calcul est très élevé, soit présumée, mais la forme de celle-ci doit être choisie avec précaution.

Filtrage des équations

Une dernière approche du calcul d'un écoulement multi-échelles est de ne considérer que les grandeurs filtrées temporellement ou spatialement. Cette approche permet de s'affranchir de l'hypothèse de séparation nette du spectre de l'écoulement en introduisant de manière plus ou moins arbitraire cette séparation par l'intermédiaire d'un filtre. La grandeur filtrée $\overline{\phi}$ est alors introduite telle que :

$$\overline{\phi(r)} = \int \phi(r') F(r-r') dr'$$
(1.30)

où F est le filtre spatial ou temporel qui peut prendre différentes formes (filtre passe haut dans l'espace spectral, boite ou gaussien dans l'espace physique par exemple).

On peut aussi étendre cette définition de "filtre de Reynolds" à un "filtre de Favre" :

$$\overline{\rho}\widetilde{\phi}\left(r\right) = \int \rho\phi\left(r'\right)F\left(r-r'\right)dr'$$
(1.31)

Par l'intermédiaire de ces filtres on se retrouve avec des états moyens différents de la moyenne d'ensemble. Cependant, en séparant les échelles grâce au filtre on décompose les grandeurs de la même manière⁴ en une composante filtrée et son complément. Les fluctuations autour de la grandeur filtrée au sens de Reynolds et la grandeur filtrée au sens de Favre, sont alors notées ϕ' et ϕ'' respectivement.

1.3.2 Équations moyennées ou filtrées

Les équations suivantes sont les équations instantanées moyennées ou filtrées. Les grandeurs moyennes ou filtrées le sont au sens de Favre :

$$\rho = \overline{\rho} + \rho', \ p = \overline{p} + p', \ u_i = \widetilde{u}_i + u_i'', \ Y_\alpha = \widetilde{Y_\alpha} + Y_\alpha''$$

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_k}{\partial x_k} = 0 \tag{1.32}$$

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_k \widetilde{u}_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \left(\overline{\tau_{ki}} - \left(\overline{\rho u_k u_i} - \overline{\rho} \widetilde{u}_k \widetilde{u}_i\right)\right)}{\partial x_k} + \overline{\rho} \widetilde{F}_i \tag{1.33}$$

Conservation de la masse pour l'espèce α

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y_{\alpha}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_k} \widetilde{Y_{\alpha}}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_k}} - \left(\overline{\rho u_k Y_{\alpha}} - \overline{\rho} \widetilde{u_k} \widetilde{Y_{\alpha}} \right) \right) + \overline{\rho} \widetilde{\omega_{\alpha}}$$
(1.34)

Bilan d'énergie

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{E}}{\partial x_k} = -\frac{\partial \widetilde{u_k}\overline{p}}{\partial x_k} + \overline{\rho u_k F_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\tau_{ki} u_i} - \left(\overline{\rho u_k E} - \overline{\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{E}\right)\right) - \frac{\partial \overline{q_k}}{\partial x_k}$$
(1.35)

1.3.3 Fermeture des équations

Les équations bilan moyennées ou filtrées font apparaître de nouveaux termes qui ne sont pas fermés. Ces termes sont dus au transport, par les fluctuations de l'écoulement,

^{4.} Les propriétés des grandeurs filtrées ne sont pas les mêmes que celles des variables moyennées. En particulier la propriété d'idempotence n'est pas applicable ($\overline{\phi} \neq \overline{\phi}$ et $\overline{\phi'} \neq 0$)

des grandeurs considérées. Par analogie avec la diffusion moléculaire, Boussinesq (BOUS-SINESQ, 1877) propose d'introduire un coefficient de viscosité turbulente pour modéliser l'effet diffusif de la turbulence. Cette approche est non seulement la plus simple mais aussi la plus couramment utilisée. D'autres approches sont aussi envisageable comme le transport de ces quantités mais ne sont pas explicitées ici. Pour plus d'information, on peut consulter SCHIESTEL (2006)

Contrainte turbulente et tensions de Reynolds

L'analogie de Boussinesq consiste à considérer la contrainte turbulente comme étant localement proportionnelle à la déformation du champ moyen, ainsi :

$$\left(\overline{\rho u_k u_i} - \overline{\rho} \widetilde{u_k} \widetilde{u_i}\right) = -\mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k}\right) + \frac{2}{3} \mu_t \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_j} \delta_{ki} + \frac{2}{3} \overline{\rho} k \delta_{ki}$$
(1.36)

avec,

- μ_t la viscosité dynamique turbulente, analogue de la viscosité dynamique μ pour les contraintes visqueuses. Cependant, contrairement à la viscosité moléculaire qui est une propriété du fluide, la viscosité turbulente est une propriété de l'écoulement turbulent.
- $k = \frac{1}{2}u''_iu''_i$ l'énergie cinétique turbulente associée aux fluctuations de vitesse dues à la turbulence.

En s'appuyant sur cette analogie, le tenseur de Reynolds nécessite deux nouvelles variables pour être fermé. Plusieurs modélisations sont alors envisageables :

- Une modélisation algébrique qui utilise la longueur de mélange de Prandtl.
- Une modélisation à une équation où la longueur de mélange de Prandtl est utilisée pour déterminer la viscosité turbulente conjointement à k, cette dernière variable étant quant à elle transportée.
- Une modélisation à deux équations de transport, comme le modèle k- ϵ .

C'est ce dernier type de modèle qui est le plus couramment utilisé dans les codes de calcul industriel et qui est retenu dans le cadre de ce travail.

Modèle k- ϵ standard

Dans le modèle k- ϵ standard, la viscosité turbulente est supposée suivre la relation de Prandtl-Kolmogorov :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{1.37}$$

avec

 $-C_{\mu} = 0.09$, une constante de modélisation obtenue expérimentalement.

 $-\epsilon$, le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

Pour fermer les équations statistiques, il faut donc connaître l'énergie cinétique turbulente ainsi que sa dissipation. L'équation de transport de l'énergie cinétique des fluctuations de vitesse de la turbulence k est obtenue en combinant l'équation instantanée de la vitesse u_i multipliée par u_i et moyennée pour obtenir une équation pour $\widetilde{u_i u_i}$. En faisant de même avec l'équation moyennée, on obtient une équation pour $\widetilde{u_i u_i}$. La différence entre ces deux équations conduit à une équation pour k, les forces de volumes sont ici négligées.

$$\frac{\partial \overline{\rho}k}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_{k}}k}{\partial x_{k}} = \underbrace{-\overline{\rho u_{i}''u_{k}''}\frac{\partial \widetilde{u_{i}}}{\partial x_{k}}}_{\Pi_{d}} - \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{i}''u_{i}''u_{k}''} + \overline{p'u_{i}''}\delta_{ik} - \overline{\mu S_{ik}u_{i}''}\right)}_{\overline{\mu}S_{ik}} + \underbrace{\overline{p'u_{i}''}}_{\overline{\rho}\overline{\epsilon}} - \underbrace{\overline{\rho u_{i}''}}_{\overline{\rho}\overline{\epsilon}} + \underbrace{\overline{\rho u_{i}''}}_{\overline{\rho}\overline{\epsilon}}\right) (1.38)$$

avec $S_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i} \right)$. Le dernier terme du membre de droite est le terme de dissipation moléculaire qui traduit la dissipation de l'énergie cinétique turbulente par les frottements visqueux. Ce terme s'écrit :

$$\overline{\rho}\epsilon = \underbrace{\frac{1}{2}\overline{\mu\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}\right)^2}}_{1} - \underbrace{\frac{2}{3}\overline{\mu\left(\frac{\partial u_k''}{\partial x_k}\right)^2}}_{2}$$
(1.39)

La première contribution ϵ_S est appelée "dissipation solénoidale" et la seconde ϵ_C , purement compressible, "dissipation dilatationnelle". Certains résultats de DNS tendent à montrer que l'influence de la compressibilité sur la partie solénoidale reste négligeable.

Turbulence incompressible Si on néglige les effets de compressibilité, l'équation (1.38) se simplifie en :

$$\frac{\partial \overline{\rho}k}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_k k}{\partial x_k} = P_k + D_k - \overline{\rho\epsilon_S}$$
(1.40)

Les termes du membre de droite et leurs fermetures sont explicités comme suit :

Termes de production

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

$$-\overline{\rho}\widetilde{u_{i}''u_{j}''}\frac{\partial\widetilde{u_{i}}}{\partial x_{j}} = \left[\mu_{t}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial\widetilde{u}_{i}}{\partial x_{i}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\overline{\rho}k\right]\frac{\partial\widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} \qquad (1.41)$$
$$= 2\mu_{t}S_{ij}^{*}S_{ij}^{*} - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij}$$

faisant donc intervenir, en régime compressible, non plus le tenseur des déforma-

tions mais son déviateur :

$$S_{ij}^* = \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\right)$$
(1.42)

En suivant l'hypothèse de Boussinesq, ce terme représente une transformation (irréversible) d'énergie cinétique moyenne en énergie cinétique de turbulence.

Terme diffusif

 D_k est le terme de diffusion. On distingue un flux de diffusion turbulent, un flux de diffusion par les fluctuations de pression et un flux de diffusion moléculaire. On néglige en général ce dernier devant les flux de diffusion turbulente et on modélise les termes qui subsistent sous la forme d'un transport par gradient :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\rho} \frac{\widetilde{u''_i u''_j u''_j}}{2} + \overline{p' u''_i} \delta_{ij} - \overline{\mu} S_{ij} u''_i \right] = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}$$
(1.43)

où σ_k est analogue à Sc_t/Pr_t . On ne prend pas en compte explicitement la corrélation $\overline{p'v''_j}$ dans le transport de l'énergie cinétique turbulente. Ce terme est alors intégré dans les termes diffusifs, eux-mêmes fermés par une approche gradient.

Termes de dissipation

Le terme de dissipation moléculaire $\overline{\rho}\epsilon_S$ s'écrit en moyenne de Favre :

$$\overline{\rho}\epsilon_S = \frac{1}{2}\overline{\mu} \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}\right)^2 \tag{1.44}$$

Il est possible de déterminer une équation de transport exacte pour $\overline{\rho}\epsilon_S$, mais le formalisme de Favre complique sérieusement le calcul (VANDROMME, 1983). Il est préférable de postuler qu'à tout mécanisme dans le transport de k peut correspondre un mécanisme équivalent dans le transport de ϵ . Le modèle k- ϵ reposant sur l'idée d'une turbulence en équilibre spectral, on peut relier ϵ à k par un temps caractéristique pris égal à k/ϵ et écrire une équation "empirique" pour ϵ de la forme :

$$L(\epsilon) = \frac{\epsilon}{k} \left(Prod_{\epsilon} - Dissip_{\epsilon} \right)$$
(1.45)

où $L(\epsilon)$ regroupe les termes instationnaires, de convection, et de diffusion. Une forme classique est :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\epsilon_{s}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_{j}}\epsilon_{s}\right) = \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\overline{\rho}\frac{\mu_{t}}{\sigma_{\epsilon_{s}}}\frac{\partial\epsilon_{s}}{\partial x_{j}}\right) + C_{\epsilon_{1}}\overline{\rho}\frac{\epsilon_{s}}{k}P_{k} - C_{\epsilon_{2}}\overline{\rho}\frac{\epsilon_{s}^{2}}{k} - C_{\epsilon_{3}}\overline{\rho}\frac{\partial\widetilde{u_{k}}}{\partial x_{k}}\epsilon_{s} \quad (1.46)$$

avec le terme de production P_k le même terme que dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente et les deux autres termes les termes puits. Pour plus de détails on peut consulter l'ouvrage de TENNEKES et LUMLEY (1972).

Turbulence en écoulement compressible Lorsque l'écoulement est compressible, les termes précédemment négligés pour une turbulence non compressible ne peuvent plus l'être. L'effet des fluctuations de pression ainsi que la partie compressible de la dissipation moléculaire doivent être pris en compte.

Pression-dilatation

Ce terme Π_d , couramment dénommé pression-dilatation ou terme de pression dilatationnelle, représente le travail additionnel dû aux fluctuations simultanées de la pression et du volume fluide. Il caractérise un échange réversible entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie interne du fluide et est associé à un terme puits de k lors d'une interaction choc-turbulence, voir (VANDROMME, 1997; LOYAU, 1996; DELAMARE, 1992). En combinant les équations pour l'entropie et les fluctuations de masse volumique,(ZEMAN, 1990) propose en ne retenant que les termes dominants de modéliser ce terme en le reliant à la variance de la pression selon :

$$\overline{p'\frac{\partial u''_i}{\partial x_i}} = -\frac{1}{2\gamma\overline{p}}\frac{d\overline{p''^2}}{dt}$$
(1.47)

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

$$\Pi_d \equiv \overline{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}} = \begin{cases} -2 \ C_{\Pi_d} \ \overline{\rho} \ S^*_{ij} S^*_{ij} \ k^2/\epsilon \quad \text{pou} \ M_t > M_{tc} \\ 0 \qquad \text{sinon} \end{cases}$$

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

$Interaction\ turbulence-pression$

L'interaction entre le flux de masse turbulent et le gradient moyen de pression, terme G, apparaît également. Ce terme de production se réécrit comme :

$$G = -\overline{u_i''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} = -\frac{1}{\overline{\rho}}\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial x_i}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}$$
(1.48)

où la constante σ_t doit être fixée entre 0,7 et 1 selon BAILLY et COMTE-BELLOT (2003).

Une autre modélisation proposée par SHYY et KRISHNAMURTY (1997) s'écrit :

$$G = \frac{2M_t}{M_t - 1} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma \overline{p}}\right) \left[\left(\frac{\mu_t C_p}{P r_t}\right) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \widetilde{u_j} \overline{\rho u_j'' u_i''} \right] \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$$
(1.49)

On notera que l'influence de ce terme sera négligée dans la suite.

Dissipation dilatationnelle

Concernant la modélisation de la dissipation dilatationnelle, Zeman fait l'hypothèse qu'à grand nombre de Mach turbulent, un champ initialement solénoidal est profondément modifié par l'apparition de "shocklets". L'hypothèse de l'existence d'une infinité de telles microstructures de chocs apparaissant au sein des tourbillons de l'écoulement est confortée par certains travaux de simulation numérique directe (PAPAMOSCHOU, 1995) mais aussi dans les expériences (ROSSMANN et al., 2002). En dissipant "anormalement" une partie de l'énergie cinétique k sur des temps caractéristiques très courts (de l'ordre de l'échelle de temps dissipative), elles vont directement affecter le taux de dissipation dilatationnelle ϵ_c sans modifier ϵ_s . Suivant cette hypothèse, l'idée est alors d'assimiler le saut de vitesse $\Delta U = u_1 - u_2$ ayant lieu à travers chaque micro-choc observable en DNS, à la variation des fluctuations de vitesse considérée dans l'approche RANS $\Delta u' = c_0 \sqrt{2/(\gamma+1)} \left((m^2-1)/m \right)$ où c_0 est la vitesse du son évaluée par rapport aux conditions génératrices et m = $U_1/c_0\sqrt{(\gamma+1)/2}$, le nombre de Mach en amont du choc. En considérant que la dissipation compressible intervient à faible nombre de Reynolds sur une échelle de longueur représentative de l'épaisseur du choc λ apparaissant dans le tourbillon d'échelle de longueur caractéristique L, on peut relier par ailleurs le saut de vitesse à la viscosité locale de l'écoulement. Le taux de dissipation dilatationnelle apparaît ainsi comme une fraction de la dissipation solénoidale :

$$\widetilde{\epsilon_c} \propto \left(\frac{k^3}{L}\right) \frac{1}{M_t^3} \left(\frac{m^2 - 1}{m}\right)^3 \left(\frac{c_k}{c}\right)^3 \tag{1.50}$$

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

$$\frac{1}{M_t^4} \int_1^\infty \left(\frac{m_1^2 - 1}{m_1}\right)^3 p(m_1) dm_1 \tag{1.51}$$

où la pondération est donnée par :

$$F(M_t, K) = \frac{1}{M_t^4} \int_1^\infty \left(\frac{m_1^2 - 1}{m_1}\right)^3 p(m_1) dm_1$$
(1.52)

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

$$\epsilon_{c} = 0.75 F(M_{t}) \epsilon_{s} \quad \text{avec} \begin{cases} F(M_{t}) = 1 - e^{-\left[\frac{M_{t} - M_{t_{0}}}{\sigma_{0}}\right]} &, M_{t} \ge M_{t_{0}} \\ F(M_{t}) = 0 &, M_{t} \le M_{t_{0}} \end{cases}$$

où $M_{t_0} = 0.1 \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}$ et $\sigma_0 = 0.6$.

Pour finir, on notera que le modèle k- ϵ standard, bien que largement utilisé, présente tout de même un certain nombre de limitations. Ainsi, il est incapable de prendre en compte la courbure des lignes de courant et la rotation d'ensemble du référentiel. De plus, il conduit à une forte surestimation de l'énergie turbulente dans les couches limites en aval des points d'arrêt et retarde fortement les décollements, c'est l'anomalie aux points d'arrêt. Enfin, il n'est pas valide dans les régions de proche paroi et requiert donc un traitement particulier. On remarquera néanmoins qu'il n'est pas le seul à présenter des faiblesses de ce point de vue.

Modèle non-linéaire quadratique

Le modèle k- ϵ standard présente donc un certain nombre de limitations dont certaines peuvent être imputées à la forme supposée linéaire du tenseur de Reynolds via l'analogie de Boussinesq. Lumley a montré que cette analogie constitue en fait le premier terme de l'expression d'un développement du tenseur de Reynolds à un ordre supérieur (LUMLEY, 1970). Plusieurs autres lois ont alors été proposées, une revue non exhaustive mais comportant plus de détails peut être trouvée dans le livre de Roland Schiestel (SCHIESTEL, 2006). Parmi les lois proposées on peut citer celle de Shih et al. (SHIH et al., 1995b) qui permet d'améliorer la prédictibilité du modèle k- ϵ standard, en particulier pour les écoulement massivement décollés ou les couches de mélange fortement cisaillées. Cette loi est une loi non-linéaire quadratique qui s'appuie sur la théorie de la distorsion rapide et assure la propriété de réalisabilité. Son expression est donnée par :

$$\left(\overline{\rho u_k u_i} - \overline{\rho} \widetilde{u_k} \widetilde{u_i}\right) = \frac{2}{3} \overline{\rho} k \delta_{ki} - C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} 2S_{ik}^* + 2C_2 \frac{k^3}{\epsilon^2} \left(-S_{ij}^* \Omega_{jk} + \Omega_{ij} S_{jk}^*\right)$$
(1.53)

 C_{μ} s'exprime de la même façon que dans le modèle k- ϵ réalisable de Shih (SHIH et al., 1995a), c'est une fonction du temps turbulent τ_t :

$$C_{\mu} = \frac{1}{A_0 + A_S^* \frac{U^* k}{\epsilon}}$$
(1.54)

Les autres coefficients sont exprimés comme suit :

$$C_2 = \frac{\sqrt{1 - 9C_{\mu}^2 \left(\frac{S^*k}{\epsilon}\right)^2}}{C_0 + 6\frac{S^*k}{\epsilon}\frac{\Omega^*k}{\epsilon}}$$
(1.55)

$$S_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \qquad S_{ik}^* = S_{ik} - \frac{1}{3} S_{jj} \delta_{ik} \qquad \Omega_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} - \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i} \right) A_S^* = \sqrt{6} \cos\phi \quad \phi = \frac{1}{3} \arccos\left(\sqrt{6}W^*\right) \qquad W^* = \frac{S_{ij}^* S_{jk}^* S_{ki}^*}{(S^*)^3} \qquad (1.56) S^* = \sqrt{S_{ik}^* S_{ik}^*} \quad U^* = \sqrt{S_{ik}^* S_{ik}^* + \Omega_{ik}^* \Omega_{ik}^*} \quad \Omega^* = \sqrt{\Omega_{ik}^* \Omega_{ik}^*}$$

Enfin, les deux constantes qui apparaissent dans ces expressions sont paramétrées dans un écoulement à cisaillement homogène et dans un écoulement de couche limite. Les valeurs suivantes sont alors obtenues :

$$A_0 = 6.5 \qquad C_0 = 1.0 \tag{1.57}$$

Cette loi de comportement plus précise permet de corriger certains problèmes majeurs rencontrés avec le modèle k- ϵ standard. Cependant, il doit aussi être calibré et perd de sa robustesse. Enfin, son comportement étant moins prévisible, il doit aussi être utilisé avec beaucoup de précaution.

Flux turbulents scalaires

Ces flux sont associés au transport des scalaires par les fluctuations du champ de vitesse. Il s'agit des flux turbulents de fraction massique d'espèce et d'énergie. Ils sont le plus souvent fermés en utilisant l'hypothèse de transport par le gradient moyen :

$$\overline{\rho u_k'' Y_\alpha''} = -\frac{\mu_t}{Sc_{\alpha t}} \frac{\partial \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_k}$$
(1.58)

où

— μ_t est la viscosité turbulente estimée à partir du modèle de turbulence

- $Sc_{\alpha t}$ est le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce α .

Cependant, cette modélisation reste limitée et des travaux aussi bien théoriques qu'expérimentaux ont montré qu'on pouvait, sous certaines conditions, observer un transport à contre gradient. Ces flux sont discutés plus en détail dans le chapitre consacré au mélange scalaire

Terme source chimique

En utilisant la définition (1.13) et (1.17), ainsi que la loi d'Arrhénius (1.15), le taux de production instantané est entièrement déterminé. Cependant, cette loi dépend de la température et de la composition locale et elle est fortement non linéaire. Au sein d'une maille de calcul, la contribution principale au taux de réaction est due aux points chauds de la maille. Néanmoins, la température moyenne de la maille peut demeurer assez basse alors qu'il existe en son sein des points très chauds. Il en résulte que le taux de réaction peut être très fortement sous estimé.

$$\widetilde{\omega}_j(T,\rho,Y_1,...,Y_N) \neq \omega_j\left(\widetilde{T},\widetilde{\rho},\widetilde{Y}_1,...,\widetilde{Y}_N\right)$$
(1.59)

Le modèle de combustion turbulente doit donc intégrer les effets des fluctuations locales de température (et de composition).

Chapitre 2

Introduction au mélange scalaire

2.1 Introduction

L'étude de l'advection d'un scalaire passif présente un intérêt aussi bien théorique que pratique. En effet, l'équation régissant ce phénomène peut être interprétée comme un modèle simplifié des équations de Navier-Stokes (MOISY, 2000) permettant de restituer de manière simplifiée la compétition entre les effets inertiels et les effets moléculaires. Elle est donc un bon candidat d'étude pour le développement d'approche théoriques paliant les insuffisances de la théorie de Kolmogorov concernant l'intermittence (ANSELMET et al., 1998). De plus, de nombreux phénomènes physiques, tels que l'advection d'un polluant dans l'air ou des algues sur la surface de l'océan ou encore, sous certaines hypothèses, l'advection des grains de sable par le vent ou l'eau, fournissent d'autres exemples d'advection passive.

Ce chapitre n'a pas pour ambition d'être un état de l'art exhaustif des travaux concernant le mélange scalaire mais plutôt celle de fournir une courte introduction jetant les bases nécessaires à la compréhension des phénomènes et notions mis en jeux par le mélange scalaire. Le mélange scalaire est de toute première importance pour la combustion, en particulier lorsqu'elle est non-prémélangée. En effet, avant de pouvoir réagir chimiquement, les molécules de combustible et d'oxydant doivent se rencontrer et cette rencontre n'est possible que par le biais de l'action des processus de mélange moléculaire.

2.2 Phénoménologie

En dépensant une énergie par unité de masse de l'ordre de $\sim U^2$, un volume de fluide de taille L se voit imposer un mouvement de vitesse U. Le temps nécessaire pour dissiper cette énergie est $\tau^d \sim L^2/\nu$, avec ν la viscosité du fluide. Si on considère maintenant une instabilité capable de produire des échelles inférieures en un temps typique d'advection $\tau^a \sim L/U$, on constate que cette dernière aura largement le temps d'intervenir avant que la viscosité n'agisse. On peut alors introduire le nombre de Reynolds comme le rapport entre ces deux temps :

$$Re = \frac{\tau^d}{\tau^a} = \frac{UL}{\nu} \tag{2.1}$$

Il est alors évident que dans la situation où $Re \gg 1$, la viscosité est incapable de dissiper l'énergie imposée avant que les instabilités ne perturbent l'écoulement. Ce dernier est alors dominé par les effets d'inertie et subit des instabilités qui transfèrent l'énergie à des échelles où la viscosité opère en un temps plus court. C'est avec cette image en tête que la théorie de la turbulence a été développée.

Dans la théorie pour la turbulence homogène et isotrope développée par Kolmogorov en 1941 (KOLMOGOROV, 1941), on considère que l'énergie turbulente produite aux grandes échelles est transférée jusqu'aux petites échelles où elle est dissipée sous l'effet du frottement visqueux. Trois gammes d'échelles sont ainsi définies :

- Les grandes échelles dont les propriétés sont spécifiques à chaque écoulement et qui sont responsables de la production d'énergie turbulente à un taux ϵ
- Les échelles intermédiaires dont les propriétés sont indépendantes de l'écoulement considéré et pour les quelles l'énergie est transférée des grandes vers les petites échelles à un taux ϵ
- Les plus petites échelles dont les propriétés sont elles aussi universelles et qui sont responsables de la dissipation de l'énergie par frottement visqueux à un taux ϵ .

Une vue de l'esprit de la turbulence peut ainsi être empruntée à Richardson (RICHARD-SON, 1926); les tourbillons d'une certaine échelle sont transportés sans déformation par les tourbillons beaucoup plus grand et transportent sans déformer les tourbillons beaucoup plus petits. Seuls des tourbillons de tailles comparables peuvent interagir entre eux et transférer de l'énergie entre échelles. Cette énergie étant produite par les tourbillons les plus grands et dissipée par les tourbillons les plus petits.

> "Big whorls have little whorls that feed on their velocity, and little whorls have smaller whorls and so on to viscosity."

> > Lewis Fry Richardson, 1926.

La turbulence est donc caractérisée par une gamme très large d'échelles (d'autant plus grande que le nombre de Reynolds l'est), néanmoins limitées par les dimensions finies de l'écoulement et par l'action de la viscosité moléculaire.

La présence d'un scalaire passif dans l'écoulement ne va pas modifier le comportement de la turbulence de cet écoulement, la théorie de Kolmogorov reste donc toujours valide. Si on considère l'injection d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent, le champ



FIGURE 2.1: Schéma de principe de la transformation du boulanger (a) état initial (b) étirement à surface constante (c) coupure et pliage ramenant à la surface initiale (d) deuxième étirement (e) état du mélange après 2 transformations.

scalaire va être étiré entre les différents tourbillons faisant apparaître des feuillets de plus en plus minces jusqu'à ce que le champ scalaire arrive à des échelles où la diffusion moléculaire peut contre balancer l'effet de la turbulence. C'est d'ailleurs ce qu'avait intuité O. Reynolds lorsqu'il déclara, au cours d'une conférence en 1894 (REYNOLDS, 1894), que le mélange était essentiellement le résultat de l'étirement et du pliage. Une représentation imagée du phénomène de mélange peut être celle du mécanisme du boulanger, le mélange se déroulant de manière analogue au boulanger qui pétrie sa pâte en l'étirant puis en la repliant sur elle même (voir Fig. 2.1).

Il faut d'ailleurs noter que ce qui rend le mélange efficace n'est pas tant l'augmentation de la surface sur laquelle la diffusion se produit, que la diminution de la longueur caractéristique suivant laquelle la diffusion doit agir, cette dernière n'étant efficace que là où le gradient est fort. Cette échelle à laquelle la diffusion du scalaire agit, tout comme l'échelle intégrale, peuvent être différentes de la plus petite, respectivement la plus grande, échelle de la turbulence. Pour chacun des deux champs (vitesse et scalaire), deux échelles caractéristiques sont alors introduites, celles des grandes structures et celles des petites structures.

L'échelle des grande structures est aussi appelée échelle intégrale ou échelle d'injection (d'énergie), et est notée l_t . Elle représente la taille des plus grandes structures turbulentes et est, pour le champ de vitesse, de l'ordre de grandeur de la largeur de l'écoulement, une bonne évaluation peut être le demi diamètre hydraulique. Une définition plus rigoureuse peut être donnée à partir de la corrélation des fluctuations de vitesse en deux points (TENNEKES et LUMLEY, 1972). Ainsi, si on mesure simultanément en deux points de l'espace assez proches l'évolution temporelle d'une variable turbulente, on observe une corrélation entre les deux signaux expérimentaux. L'échelle caractéristiques l_t correspond alors à la distance à partir de laquelle les deux signaux deviennent indépendant. Pour le champ scalaire, cette échelle intégrale, notée l_{ξ} , représente l'échelle à laquelle l'énergie des fluctuations scalaires est produite et dépend de la façon dont est injecté ce scalaire.

L'échelle des plus petites structures est aussi appelée échelle dissipative et "échelle interne" par Kolmogorov. Elle représente la taille des plus petites structures turbulente. Dans sa théorie, Kolmogorov a défini cette échelle, maintenant appelée échelle de Kolmogorov et notée η . Elle est obtenue par analyse dimensionnelle et peut être reliée à l'échelle intégrale de la manière suivante :

$$\eta = \alpha l_t R e_t^{\frac{-3}{4}} \tag{2.2}$$

où Re_t est le nombre de Reynolds de la turbulence :

$$Re_t = \frac{k^{\frac{1}{2}}l_t}{\nu} \tag{2.3}$$

 α est une constante (usuellement 1.35) et ν est la viscosité cinématique du fluide. Si le nombre de Schmidt du scalaire, $Sc = \nu/D_{\xi}$, est supérieur à 1, Sc > 1, l'échelle équivalente pour le champ scalaire est l'échelle de Batchelor, notée ici $\eta_{\xi,B}$, est définie comme :

$$\eta_{\xi,B} = \eta S c_{\xi}^{\frac{-1}{2}} \tag{2.4}$$

Si le nombre de Schmidt du scalaire est inférieur à 1, Sc < 1, l'échelle équivalente est l'échelle de Corrsin, notée ici $\eta_{\xi,C}$, et définie comme :

$$\eta_{\xi,C} = \eta S c_{\xi}^{\frac{3}{4}} \tag{2.5}$$

Ces deux échelles correspondent à l'échelle à laquelle la diffusion moléculaire se produit.

Pour mettre en évidence ces différences entre le champ scalaire et le champ de vitesse, on peut tracer le spectre énergétique des fluctuations de vitesse et du scalaire pour différentes échelles intégrales scalaires et différentes échelles dissipatives scalaires comme sur la figure 2.2.



FIGURE 2.2: Spectres de l'énergie des fluctuations de vitesse (continu) et spectre de l'énergie des fluctuations du scalaire (pointillés)

Outre les différences d'échelle d'injection et de dissipation de l'énergie, les statistiques des champs de vitesse et du scalaire peuvent différer et il a été mis en évidence une intermittence (alternance de zones de forte dissipation et de zones calmes) plus élevée pour le champ scalaire que pour le champ de vitesse. A cela s'ajoute des phénomènes non prévu par la théorie de Kolmogorov comme la cascade inverse qui fait transiter de l'énergie des petites échelles vers les grandes. Malgré tout, cette vision de la turbulence, largement acceptée, est suffisante pour traduire de façon représentative les phénomènes rencontrés dans la plupart des applications pratiques et sert de base pour la suite de ce travail.

2.3 Scalaire passif

Dans un écoulement, il existe de multiples variables scalaires telles que la température ou une fraction massique d'espèce chimique par exemple. Ce scalaire est dit passif s'il n'est soumis, au sein de l'écoulement pour lequel il est défini, qu'aux phénomènes d'advection et de diffusion. Son équation de transport instantanée s'écrit alors :

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

On considérera en outre que les modifications de ξ n'affectent pas notablement la masse volumique et donc pas le champ de vitesse, i.e. l'écoulement. Si le nombre de Reynolds introduit précédemment n'est pas trop élevé, la gamme d'échelles turbulentes n'est pas trop élevée et on peut alors résoudre cette équation en les prenant toutes en compte, c'est le principe de la simulation numérique directe. A fort nombre de Reynolds turbulent, la résolution de toutes les échelles reste hors de portée des capacités de calcul actuelles, mais une approche statistique peut être envisagée. Une résolution générale de la dynamique d'un tel scalaire est alors possible en résolvant l'équation de transport de la PDF associée à ce dernier (POPE, 1985). Cette équation de transport peut, par exemple, être dérivée en utilisant la méthode de Lundgren (LUNDGREN, 1967). On obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \widetilde{P} \left(\xi^*; \boldsymbol{x}, t \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{P} \left(\xi^*; \boldsymbol{x}, t \right) \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} D \frac{\partial}{\partial x_i} \widetilde{P} \left(\xi^*; \boldsymbol{x}, t \right) \right) \\
- \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \langle u_i'' | \xi^* \rangle \widetilde{P} \left(\xi^*; \boldsymbol{x}, t \right) \right) \\
- \frac{\partial^2}{\partial \xi^* \partial \xi^*} \left(\overline{\rho} \langle D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} | \xi^* \rangle \widetilde{P} \left(\xi^*; \boldsymbol{x}, t \right) \right)$$
(2.7)

où $\widetilde{P}(\xi^*; \boldsymbol{x}, t)$ est la fonction densité de probabilité du scalaire ξ à la position \boldsymbol{x} et à l'instant t, ξ^* est la variable probabiliste de l'espace d'échantillonnage du scalaire. Cependant les méthodes à PDF nécessitent des hypothèses de fermeture (POPE, 1985). On peut aussi se contenter de reconstruire la dynamique de l'écoulement à partir des termes l'influençant au premier ordre en se limitant à sa valeur moyenne $\tilde{\xi}$ et à sa variance $\tilde{\xi}''^2$. Pour y parvenir il est nécessaire de connaître l'évolution de l'allure de la PDF du scalaire au sein de l'écoulement. Une représentation schématique en est donnée sur la figure 2.3. Ainsi, la PDF du scalaire évolue d'un pic de Dirac en $\xi = 1$, dans les zones où le scalaire est pur, vers une distribution Gaussienne en turbulence homogène isotrope (THI).

Plusieurs formes de PDF ont été proposées pour retranscrire cette évolution, parmi celles-ci on peut citer la PDF "pics et rectangles" de Borghi et al. (BORGHI et MOREAU, 1977; BORGHI et DUTOYA, 1978), la gaussienne clipée (LOCKWOOD et NAGUIB, 1975), la bimodale ou la β proposée par Janicka et Kollman (JANICKA et KOLLMAN, 1978). Alors que la PDF bimodale n'est justifiée que dans les premiers instants du mélange et que les mesures expérimentales et les DNS ont montré que la gaussienne est adaptée en THI, S. Girimaji (GIRIMAJI, 1991) a montré que la PDF- β est la forme la moins restrictive puisque qu'elle reproduit bien ces deux cas limites et a une évolution continue entre celles-ci.

Dans la suite de ce travail, la pdf du scalaire passif est donc présumée sous la forme d'une PDF- β . Afin de la déterminer entièrement, les deux premiers moments du scalaire, sa valeur moyenne $\tilde{\xi}$ et sa variance $\tilde{\xi''}^2$, doivent être connues. Pour cela, chacune de ces deux quantités est transportée.



Couche de mélange :

FIGURE 2.3: Représentation schématique des formes de la fonction densité de probabilité d'un scalaire passif ξ pour différents types d'écoulement, d'après R. W. Bilger (BILGER, 1980)

1

0

ξ

ξ

1

ō

1

È

2.3.1 Valeur moyenne

L'équation de transport de la valeur moyenne du scalaire ξ s'obtient directement en moyennant son équation de transport instantanée.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \widetilde{\xi} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_k \widetilde{\xi} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \right)$$
(2.8)

Outre les termes d'accumulation, de convection par le champ de vitesse moyen et de diffusion, un terme de flux turbulent $\overline{\rho u_k'\xi''}$ apparaît dans le membre de droite de l'équation. Ce terme représente la convection du scalaire par les fluctuations du champ de vitesse et doit être fermé au moyen d'une modélisation adaptée.

2.3.2 Variance

La variance $\widetilde{\xi''^2}$ est une grandeur très importante puisqu'elle caractérise la dispersion des valeurs du scalaire autour de sa valeur moyenne. Son équation de transport exacte peut être obtenue à partir de l'équation de transport instantanée du scalaire eq. (2.6). En utilisant la même méthode que celle employée dans l'annexe B, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho \xi''^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{u}_k \overline{\rho \xi''^2} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \right) \\ -2\overline{\rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} - 2\overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}$$
(2.9)

Là encore apparaissent un terme d'accumulation, un terme de convection dans le membre de gauche de l'équation et un terme de diffusion moléculaire dans le membre de droite. Les trois autres termes du membre de droite, le transport turbulent, le terme de dissipation ainsi que le terme de production par le gradient moyen doivent encore être fermés en utilisant une modélisation adaptée pour le flux turbulent et le terme de dissipation moléculaire.

2.4 Milieu monophasique gazeux

2.4.1 Méso-mélange

Comme précisé précédemment, le flux turbulent représente la convection du scalaire par les fluctuations du champs de vitesse. C'est donc lui qui va permettre le mélange à grande échelle, le méso-mélange, l'étirement et les plis identifiés dans le mécanisme du boulanger (Fig. 2.1). Cependant, ce terme nécessite de connaître l'ensemble des longueurs caractéristiques de l'écoulement pour pouvoir être fermé. Ces dernières n'étant pas accessibles avec une approche statistique, le flux turbulent doit être fermé avec un modèle adapté.

Diffusion moléculaire et diffusion turbulente

D'après la théorie cinétique des gaz, on peut montrer que le coefficient de diffusion d'une espèce est de la forme :

$$D = C\overline{u}\lambda\tag{2.10}$$

Avec C une constante, \overline{u} la vitesse relative moyenne des particules et λ le libre parcours moyen c'est-à-dire la distance que parcourt une particule avant de rentrer en collision avec une autre. En faisant une analogie avec la théorie cinétique des gaz, on peut considérer que le mouvement moyen des particules fluides est régit par l'écoulement moyen et que la turbulence produit une sorte d'agitation de ces particules fluides sous l'influence des différents tourbillons. Les particules fluides vont donc avoir une vitesse relative de l'ordre des fluctuations de vitesse $u' = \sqrt{k}$ et vont avoir un libre parcours moyen de l'ordre de la distance entre deux tourbillons l_t . Prandtl et Kolmogorov ont alors proposé d'exprimer la viscosité turbulente selon la relation qui porte maintenant leurs noms :

$$\nu_t \sim C_\mu \sqrt{k} \ l_t \tag{2.11}$$

où C_{μ} est une constante qui vaut, par exemple, 0.09 dans le modèle k- ϵ standard mais peut être fonction d'un temps caractéristique de la turbulence comme dans le modèle k- ϵ réalisable de Shi (SHIH et al., 1995a). En poursuivant l'analogie avec la théorie cinétique des gaz, on peut postuler que la diffusion turbulente agit en suivant une loi gradient, comme la loi de Fick pour la diffusion moléculaire d'espèce ou la loi de Fourier pour la diffusion de chaleur :

$$\overline{\rho}\widetilde{u_i'\xi''} = -\overline{\rho}D_{t,\xi}\frac{\partial\overline{\xi}}{\partial x_i}$$
(2.12)

Le coefficient $D_{t,\xi}$ étant le coefficient de diffusion turbulente. Si ξ est une espèce on peut écrire $D_{t,\xi} = \nu_t/Sc_t$ où Sc_t est le nombre de Schmidt turbulent en général pris égal à 0.7 (LAUNDER, 1976). Si le scalaire ξ représente l'enthalpie, $D_{t,\xi} = \nu_t/Pr_t$ où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent de l'ordre de l'unité.

Cette approche, appelée loi gradient, est largement utilisée tant pour des raisons historiques que pour des raisons de simplicité. Cependant, elle s'appuie sur une analogie qui n'est pas toujours justifiée. En effet, dans la théorie cinétique des gaz on suppose que le libre parcours moyen est très petit devant les échelles macroscopiques de l'écoulement, or dans le cas d'un écoulement turbulent, les tourbillons peuvent être de la taille des échelles caractéristiques du champ moyen et l'analogie semble alors être mise en défaut. Une so-
lution plus générale peut alors être de transporter ces flux turbulent afin de les évaluer localement.

Equation de transport du flux

Plusieurs formes de l'équation de transport pour les composantes du flux turbulent de fraction de mélange existent en fonction des auteurs et de leur choix de modélisation des différents termes. Ainsi, la forme la plus courante lorsque sa résolution est envisagée est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' \xi''} \right) = D_i^{\xi} + P_i^{\xi} - \overline{\rho} \epsilon_i^{\xi} + H_i^{\xi} + \psi_i^{\xi}$$
(2.13)

où :

$$D_{i}^{\xi} = -\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho u_{k}'' u_{i}'' \xi''} - \overline{u_{i}'' \rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{k}} - \overline{\xi'' \tau_{ik}} \right)$$

$$P_{i}^{\xi} = -\overline{\rho u_{k}'' u_{i}''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} - \overline{\rho u_{k}'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{k}}$$

$$\overline{\rho} \epsilon_{i}^{\xi} = \overline{\tau_{ik}} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{k}} + \overline{\rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{k}} \frac{\partial u_{i}''}{\partial x_{k}}$$

$$H_{i}^{\xi} = -\overline{\xi''} \frac{\partial p}{\partial x_{i}}$$

$$\psi_{i}^{\xi} = \overline{u_{i}'' \omega}$$

$$(2.14)$$

En particulier, ce regroupement de terme permet de modéliser la contribution diffusive par l'intermédiaire d'un modèle gradient généralisé (DALY et HARLOW, 1970) :

$$D_{i}^{\xi} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(C_{\xi} \frac{k}{\epsilon} \overline{\rho u_{k}'' u_{j}''} \frac{\partial \widetilde{u_{i}'' \xi''}}{\partial x_{j}} \right)$$
(2.15)

Afin de montrer le lien entre l'équation de transport et la fermeture des flux turbulent grâce au modèle de diffusion gradient, l'équation de transport pour les composantes du flux turbulent de fraction de mélange est considérée dans la forme proposée par BORGHI et CHAMPION (2000), en faisant l'hypothèse d'un grand nombre de Reynolds et d'un grand nombre de Péclet.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho u_i'' \xi''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' \xi''} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho u_i'' u_k'' \xi''} \right) - \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} + \widetilde{\xi}'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \epsilon_i^{\xi}$$
(2.16)

Le premier terme du côté droit de l'équation représentant le flux de diffusion turbulente, le second et le troisième étant des termes de production et le dernier terme étant un terme de dissipation qui s'exprime :

$$D_{i} = 2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_{k}} \frac{\partial u_{i}''}{\partial x_{k}} + \xi'' \frac{\partial p'}{\partial x_{i}}$$
(2.17)

Ce terme de dissipation nécessite une fermeture. Launder (LAUNDER, 1976) propose, à cause de sa signification physique, de le fermer en le reliant à une échelle de temps liée aux fluctuations du champs de vitesse τ_t et au flux turbulent $\widetilde{u''_i\xi''}$:

$$\overline{\rho}\epsilon_i^{\xi} = \overline{\rho}C_D \frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{\tau_t} \tag{2.18}$$

 C_D étant une constante. Comme le fait remarquer T. Mantel (MANTEL, 1993), cette fermeture paraît contestable et Borghi et Escudié (BORGHI et ESCUDIÉ, 1984) proposent de faire aussi intervenir l'échelle de temps intégrale des fluctuations du champs du scalaire τ_{ξ} . D'autres termes de cette equation doivent aussi être fermés par des modèles, pour plus de détail le livre de B. Launder (LAUNDER, 1976) peut être consulté.

Une approche simple pour fermer cette équation consiste à supposer l'équilibre entre les termes de production et le terme de dissipation pour un écoulement incompressible. On peut alors écrire :

$$\overline{\rho}C_D \frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{\tau_t} = -\overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_k}$$
(2.19)

Si on se place en turbulence homogène isotrope, on peut écrire :

$$\overline{\rho}C_{D}\frac{\widetilde{u_{i}'\xi''}}{\tau_{t}} = -\overline{\rho}u_{i}''u_{i}''\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{i}} - \overline{\rho}u_{k}''\xi''\frac{\partial\widetilde{u_{i}}}{\partial x_{k}}$$

$$\overline{\rho}C_{D}\frac{\widetilde{u_{i}''\xi''}}{\tau_{t}} = -\overline{\rho}\frac{2}{3}k\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{i}} - \overline{\rho}u_{k}''\xi''\frac{\partial\widetilde{u_{i}}}{\partial x_{k}}$$
(2.20)

Enfin, si on ne s'intéresse qu'à une couche de mélange scalaire, c'est-à-dire sans gradient de vitesse, on peut écrire :

$$\overline{\rho}C_{D}\frac{\widetilde{u_{i}'\xi''}}{\tau_{t}} = -\overline{\rho}\frac{2}{3}k\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{i}}$$

$$\overline{\rho}\widetilde{u_{i}'\xi''} = -\overline{\rho}\frac{2}{3}k\frac{\tau_{t}}{C_{D}}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{i}}$$

$$\overline{\rho}\widetilde{u_{i}'\xi''} = -\overline{\rho}\frac{2}{3C_{D}}\frac{k^{2}}{\epsilon}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{i}}$$
(2.21)

La diffusivité turbulente étant définie comme

$$D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t} \tag{2.22}$$

et la viscosité turbulente définie par

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{2.23}$$

avec C_{μ} un paramètre dépendant du modèle k- ϵ retenu. Le modèle de diffusion gradient est alors retrouvé,

$$\overline{\rho}\widetilde{u_i''\xi''} = -\overline{\rho}D_t \frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_i} \tag{2.24}$$

et, par identification, le nombre de Schimdt turbulent $Sc_t = \frac{3C_D C_{\mu}}{2}$.

On constate donc que la loi gradient ne repose pas sur la simple analogie avec la théorie cinétique des gaz mais peut être retrouvée, sous certaines hypothèses, à partir de l'équation de transport des flux. Ces hypothèses, restrictives, doivent être gardées à l'esprit lors de l'utilisation de la loi gradient.

2.4.2 Micro-mélange

Comme précisé précédemment, la variance d'un scalaire représente la dispersion des valeurs de ce scalaire autour de la valeur moyenne de ce dernier. Une production de variance traduit l'inhomogénéité du mélange local et l'augmentation de la ségrégation. A l'inverse, une destruction de cette variance va traduire une homogénéisation du mélange local. Ainsi la dissipation scalaire qui apparaît dans l'équation de transport de la variance, Eq (2.9), comme un terme de destruction de cette dernière peut être interprétée comme le taux de mélange à l'échelle moléculaire (BILGER, 2004). Ce taux de dissipation scalaire est donc de toute première importance en combustion, et ce d'autant plus si la chimie est infiniment rapide puisque dans ce cas c'est uniquement le mélange qui détermine la composition locale. Le taux de dissipation scalaire moyen est défini par :

$$-2\overline{\rho\epsilon_{\xi}} = -\overline{2\rho D}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}$$
(2.25)

où D est la diffusivité moléculaire du scalaire et où la convention d'Einstein sur les indices répétés a été adoptée.

D'abord postulée pour un scalaire passif par Zeman et Lumley (ZEMAN et LUMLEY, 1976), l'équation de transport du taux de dissipation scalaire a ensuite été analysée par Mantel et Borghi (MANTEL et BORGHI, 1994) pour la dissipation d'un scalaire réactif dans le cadre de la modélisation des flammes plissées de prémélange. Une analyse d'ordre de grandeur a permis de mettre en évidence les termes dominants à haut nombre de Reynolds. On peut alors écrire, en négligeant les termes d'ordre inférieur en Reynolds :

$$\frac{\partial \overline{\rho \epsilon_{\xi}}}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial \widetilde{u}_{k} \overline{\rho \epsilon_{\xi}}}{\partial x_{k}}}_{II} = -\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho u_{k}'' \epsilon_{\xi}} \right)}_{IV} - \underbrace{2 \overline{\rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{i}} \frac{\partial u_{k}''}{\partial x_{i}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_{k}}}_{V} - \underbrace{2 \overline{\rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{i}} \frac{\partial \widetilde{\xi}''}{\partial x_{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{i}}}_{VI} - \underbrace{2 \overline{\rho D} \frac{\partial \xi''}{\partial x_{i}} \frac{\partial \widetilde{\xi}''}{\partial x_{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{i}}}_{VII} \right)}_{VIII} \qquad (2.26)$$

où tous les termes du membre de droite de l'équation requièrent une modélisation appropriée. Les effets de l'étirement par la turbulence VII et la courbure locale VIII sont les termes dominant d'ordre $Re_t^{\frac{1}{2}}$. Les trois autres termes sont d'ordre Re_t^0 . Ils représentent physiquement l'effet de la diffusion turbulente IV, la production par le gradient de la concentration moyenne V et la production par le gradient de la vitesse moyenne VI.

Relaxation linéaire

Comme pour l'équation de transport du flux turbulent, une approche simple de l'équation de transport de la dissipation scalaire peut être adoptée en faisant l'hypothèse d'équilibre entre le terme de production dû à l'étirement par la turbulence *VII* et le terme de dissipation *VIII*. Cette hypothèse est d'ailleurs justifiable par l'analyse d'ordre de grandeur conduite sur cette équation puisque ces deux termes dominent à grand nombre de Reynolds. On ferme alors les deux termes comme suit (MURA et al., 2007, 2003) :

$$\underbrace{\frac{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i}}_{VII}}_{VII} = -\alpha \overline{\rho \epsilon_{\xi}} \frac{\epsilon}{k}$$
(2.27)

$$\underbrace{\frac{2\rho D^2 \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k}}_{VIII}}_{VIII} = \beta \overline{\rho \epsilon_{\xi}} \frac{\widetilde{\epsilon_{\xi}}}{\widetilde{\xi''^2}}$$
(2.28)

avec α et β deux constantes. Puis, on écrit l'équilibre entre ces deux termes :

$$\alpha \frac{\epsilon}{k} - \beta \frac{\widetilde{\epsilon_{\xi}}}{\widetilde{\xi''^2}} = 0 \tag{2.29}$$

où $\tilde{\epsilon_{\xi}} \neq 0$. Le modèle classique de relaxation linéaire pour le taux de décroissance des fluctuations scalaire apparaît alors comme la résultante de cet équilibre :

$$\widetilde{\epsilon_{\xi}} = \frac{\widetilde{\xi''^2}}{C_{\xi}\tau_t} \tag{2.30}$$

avec $C_{\xi} = \beta/\alpha$, la constante de proportionnalité entre le temps de mélange scalaire et le temps de mélange turbulent. Cette expression de la dissipation scalaire est celle fréquemment utilisée et est parfaitement justifiée dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (THI). Cependant, dans le cas du développement d'une couche de mélange par exemple, les conditions de THI ne sont adaptées que dans la zone où la turbulence est pleinement développée.

Transport du taux de dissipation scalaire

Afin de pouvoir évaluer correctement le taux de dissipation scalaire même dans les zone ou l'hypothèse de THI est inadaptée, les termes négligés dans l'équation (2.26) doivent aussi être pris en compte. Cependant, ces termes doivent être modélisés. Plusieurs formes d'équation de transport peuvent être trouvées dans la littérature (NEWMAN et al., 1981; ELGHOBASHI et LAUNDER, 1983; JONES et MUSONGE, 1988; MANTEL et BORGHI, 1994; MURA et al., 2003, 2009; CHAKRABORTY et al., 2011), mais les formes les plus anciennes ne prennent pas en compte tous les termes mis en évidence par l'analyse d'ordre de grandeur de Mantel et Borghi (MANTEL et BORGHI, 1994). C'est pourquoi l'équation (2.26) est utilisée et fermée avec les modèles qui suivent.

Le terme IV, qui représente le flux turbulent, est fermé en utilisant l'hypothèse de diffusion turbulente suivant une loi gradient.

$$-\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k''\epsilon_{\xi}}\right)}_{IV} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D_t\frac{\partial\epsilon_{\xi}}{\partial x_k}\right)$$
(2.31)

Le terme V, qui représente la production par le gradient de scalaire moyen, est modélisé par $C_{P\xi}\overline{\rho u_k'\xi''}(\tilde{\epsilon}/\tilde{k})\partial\tilde{\xi}/\partial x_k$ avec $C_{P\xi} = 1$, (JONES et MUSONGE, 1988; MANTEL, 1993). De plus, afin d'être cohérent avec la fermeture du terme IV, le flux turbulent est là encore fermé avec une hypothèse de diffusion turbulente.

$$-\underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial u_k''}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}}_{V} = -C_{P\xi} \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} = C_{P\xi} \frac{\overline{\rho} \nu_t}{\operatorname{Sc}_t} \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \left(\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)^2$$
(2.32)

Le terme VI, qui est le terme de production par les gradients de vitesse moyenne, est quant à lui mis sous la forme $C_{Pu}\overline{\rho u''_i u''_k}(\tilde{\chi}_{\xi}/\tilde{k})\partial \tilde{u}_k/\partial x_i$ avec $C_{Pu} = 2$, (MANTEL, 1993) et où $\overline{\rho u''_i u''_k}$ est modélisé en utilisant l'hypothèse de Boussinesq.

$$-\underbrace{2\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}}_{VI} = C_{Pu} \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\widetilde{\chi}_{\xi}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}$$

$$= -C_{Pu} \overline{\rho} \left(\nu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\widetilde{k} - \nu_t \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_j} \right) \delta_{ik} \right) \frac{\widetilde{\epsilon}_{\xi}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}$$

$$(2.33)$$

Les termes VII et VIII sont fermés avec les mêmes modèles que ceux utilisés pour retrouver le modèle de relaxation linéaire en THI (MURA et al., 2007). Finalement, l'équation modélisée est la suivante :

$$\frac{\partial \overline{\rho \epsilon_{\xi}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{k} \widetilde{\epsilon}_{\xi} - \frac{\overline{\rho} \nu_{t}}{\mathrm{Sc}_{t}} \frac{\partial \widetilde{\epsilon}_{\xi}}{\partial x_{k}} \right) = C_{P\xi} \frac{\overline{\rho} \nu_{t}}{\mathrm{Sc}_{t}} \frac{\widetilde{\epsilon}}{\widetilde{k}} \left(\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} \right)^{2}$$

$$+ C_{Pu} \overline{\rho} \left(\nu_{t} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{k}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{i}} \right) + \frac{2}{3} \left(\widetilde{k} - \nu_{t} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}} \right) \delta_{ik} \right) \frac{\widetilde{\epsilon}_{\xi}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{i}}$$

$$+ \alpha \frac{\overline{\rho} \widetilde{\epsilon}_{\xi}}{\tau_{t}} - \beta \frac{\overline{\rho} \widetilde{\epsilon}_{\xi}^{2}}{\widetilde{\xi}''^{2}}$$

$$(2.34)$$

Les valeurs des constantes utilisées sont répertoriées dans le tableau 2.4.2.

Constantes	$C_{P\xi}$	C_{Pu}	α	β
Valeurs	1	2	1	2

 TABLE 2.1: Constantes utilisées pour fermer l'équation de transport du taux de dissipation scalaire.

Chapitre 3

Modélisation de la combustion turbulente

Introduction

La combustion est une réaction exothermique entre un réducteur, le combustible, et un oxydant, la plupart du temps l'oxygène¹. Deux types de combustion sont envisageables suivant que les réactifs sont initialement mélangés ou non. Cette étude étant menée dans le cadre des moteurs fusées et les réactifs utilisés dans ceux-ci étant non prémélangés, la combustion prémélangée n'est pas envisagée dans ce travail. Afin que la réaction puisse se produire, l'oxydant et le réducteur doivent donc être mis en contact pendant un temps suffisamment long. De plus, une fois que la réaction chimique s'est amorcée, la combustion ne peut être entretenue que si une quantité suffisante de réactifs est encore disponible. Deux phénomènes rentrent alors en compétition, la disponibilité des réactifs et la réaction chimique. Comme expliqué précédemment (voir le chapitre sur le mélange scalaire), le phénomène de mélange se fait à plusieurs échelles et on peut donc le séparer en une contribution macroscopique, à grandes échelles, une mésoscopique, sous l'effet des fluctuations de la turbulence, et une microscopique, à l'échelle moléculaire. Plutôt que de considérer ces processus, on peut aussi considérer les mécanismes qui permettent ces mélanges, la convection et la diffusion. Finalement, la description la plus simple de la combustion turbulente est la compétition entre trois temps caractéristiques :

- un temps caractéristique de convection τ_{conv} , représentant l'apport de réactifs par l'écoulement
- un temps caractéristique de la diffusion moléculaire τ_{diff} , représentant la mise en présence des réactifs à l'échelle moléculaire

^{1.} Dans les moteurs fusée des oxydants plus exotiques, comme la peroxyde d'hydrogène ou le tétra-fluorohydrazine, ont aussi été employés.

— un temps caractéristique de la chimie τ_{chem} , représentant la mise en contact des réactifs de manière efficace pour la réaction chimique

La combustion peut alors se produire si le temps caractéristique de la chimie est localement plus petit, ou du même ordre de grandeur que celui de la diffusion moléculaire et de la convection.

3.1 Flamme de diffusion

La combustion non prémélangée est souvent associée à la flamme de diffusion dont le nom provient du fait que le temps τ_{diff} est limitant et donc impose sa dynamique. Pour de telles conditions, Hawthorne *et al.* (HAWTHORNE et al., 1949) ont montré que le problème de la flamme de diffusion est analogue à un problème de mélange non-réactif équivalent où la zone de réaction se situe aux endroits où le mélange est à la stoechiométrie. L'approche classique pour ce type de problème consiste donc à décrire le mélange en considérant le transport d'un scalaire passif et d'y superposer l'effet de la chimie.

3.1.1 Fraction de mélange

Ce scalaire passif peut être défini de plusieurs façons. Une définition générale ainsi que son extension dans le cas de système avec plus de deux entrées sont développées dans le chapitre 8. Cependant, et afin de ne pas surcharger cette section, il sera fait un bref rappel avec la définition "historique" de la fraction de mélange telle qu'elle est introduite à partir de la variable de Schvab-Zel'dovich. Pour cela, on considère une réaction chimique globale irréversible

$$r_{st}F + O \longrightarrow (1 + r_{st})P \tag{3.1}$$

où r_{st} est le coefficient stoechiométrique massique de la réaction $(r_{st} = \gamma'_O \mathcal{M}_O / \gamma'_F \mathcal{M}_F)$. Les taux de consommation chimiques du combustible et de l'oxydant sont alors reliés par $\omega_O = \omega_f / r_{st}$. Grâce à cette relation, une combinaison des fractions massique de combustible et d'oxydant permet d'obtenir un scalaire passif. C'est ainsi que la variable de Schvab-Zeldovich est souvent présentée. Elle peut alors être définie par :

$$Z_F = Y_F - \frac{1}{r_{\rm st}} Y_O \tag{3.2}$$

avec Y_F la fraction massique de combustible et Y_O celle d'oxydant. Ce scalaire passif est ensuite normalisé de façon à être unitaire dans le courant de combustible et nul dans le courant d'oxydant. Pour cela on introduit ces deux courants tels que Z_F soit égal à Z_F^{ox} dans le courant d'oxydant et Z_F^{fuel} dans le courant de combustible. La définition de la fraction de mélange est ainsi obtenue :

$$\xi = \frac{Z_F - Z_F^{\text{ox}}}{Z_F^{\text{fuel}} - Z_F^{\text{ox}}} \tag{3.3}$$

Finalement, le mélange non réactif entre l'oxydant et le combustible est entièrement décrit par la fraction de mélange, celle-ci étant unitaire dans le combustible pur, nulle dans l'oxydant pur et ayant la valeur $\xi_{st} = -Z_F^{ox}/(Z_F^{fuel}-Z_F^{ox})$ pour un mélange stoechiométrique.

Pour un mélange non réactif $(Da \rightarrow 0)$, les fractions massiques d'espèce peuvent donc s'écrire :

$$Y_F = Y_F^{\infty} \xi$$

$$Y_O x = Y_{Ox}^{\infty} (1 - \xi)$$

avec Y_F^{∞} la fraction massique de combustible dans l'entrée combustible et Y_{Ox}^{∞} la fraction massique d'oxydant dans l'entrée oxydante.

3.1.2 Chimie infiniment rapide

Une fois le mélange inerte décrit, et donc la composition locale du mélange connue, grâce à la fraction de mélange, la zone de réaction peut être située sur l'isoligne $\xi = \xi_{st}$. Reste alors à caractériser la chimie afin de décrire entièrement l'écoulement réactif.

Approximation de Burke-Schumann

Une première approche de l'évolution de la composition sous l'effet de la réaction chimique est l'approximation de Burke et Schumann (BURKE et SCHUMANN, 1928). Cette approche reposant sur une hypothèse de réaction chimique globale irréversible représente la limite asymptotique pour laquelle le nombre de Damköhler associé à la diffusion $Da_{diff} = \tau_{diff}/\tau_{chem}$, est infiniment grand. On considère alors que si de l'oxydant ou du combustible sont en présence, la réaction chimique se fait jusqu'à ce que l'un des deux réactifs ne soit plus disponible. On peut alors tracer la composition en fonction de la fraction de mélange comme sur la figure 3.1. L'évolution de la température est aussi tracée sur la figure 3.1 en faisant l'hypothèse que la capacité thermique massique de chaque espèce est une constante.

Cette structure de flamme est valable dans la totalité de l'écoulement et permet donc complètement décrire l'écoulement réactif, l'espace physique étant relié à cette structure de flamme par l'intermédiaire de la fraction de mélange.



FIGURE 3.1: Variation de la fraction massique d'oxydant, Y_O , de combustible, Y_F , et de la température, T, en fonction de la fraction de mélange, approximation de Burke et Schumann.

Chimie à l'équilibre

L'approximation précédente ne prend pas en compte les effets de dissociation qui peuvent se produire à hautes températures. En effet, cette approximation s'appuie sur une réaction chimique globale irréversible. Afin de s'affranchir de cette hypothèse et de généraliser cette approche au cas d'une cinétique chimique complexe, il faut considérer la chimie à l'équilibre. La même approche que précédemment est alors utilisée. Une structure de flamme représentant la composition du mélange réactif à l'équilibre en fonction de la fraction de mélange est supposée. Un exemple de cette structure de flamme est reporté sur la figure 3.2.

Cette structure de flamme est, elle aussi, valable dans la totalité de l'écoulement et permet donc d'entièrement décrire l'écoulement réactif, l'espace physique étant, là encore, relié à cette structure de flamme par l'intermédiaire de la fraction de mélange.

3.1.3 Prise en compte de la turbulence

Lorsque l'hypothèse de chimie infiniment rapide est faite, la température et les fractions massiques d'espèces sont uniquement dépendantes de la fraction de mélange. L'hypothèse de chimie infiniment rapide en écoulement turbulent se limite donc à prendre en compte les fluctuations du champ de fraction de mélange. Pour cela on pondère simplement par la PDF de la fraction de mélange les différentes variables, $\phi(\xi)$, dépendant de cette fraction de mélange.

$$\widetilde{\phi} = \int_0^1 \phi(\xi) \widetilde{P}(\xi) d\xi \tag{3.4}$$



FIGURE 3.2: Variation de la fraction massique d'oxydant, Y_O , de combustible, Y_F , et de la température, T, en fonction de la fraction de mélange pour une chimie à l'équilibre. En trait fin l'approximation de Burke et Schumann.

3.2 Flamme de diffusion étirée, flammelettes

Comme précisé précédemment, la considération de la flamme de diffusion n'est pertinente que si le temps caractéristique de la diffusion est le temps limitant. Cependant, il peut arriver que la flamme soit perturbée par l'écoulement et localement étirée par la divergence de ce dernier, cela pouvant conduire, si l'étirement est trop grand, à l'extinction.

3.2.1 Flamme de diffusion étirée

Afin de bien comprendre la structure d'une flamme étirée, nous allons considérer une flamme de diffusion stationnaire établie dans un écoulement incompressible à point d'arrêt, entre un injecteur de combustible et un injecteur d'oxydant, comme celle présentée sur la figure 3.3.

Le champ d'écoulement d'une telle configuration est fonction de la vitesse des jets, V, de leur taille et de leur écartement, d. Afin de s'affranchir de ces conditions, on peut introduire l'étirement

$$a = \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y} \approx \frac{V}{d}$$
(3.5)

qui est homogène à l'inverse d'un temps. On constate alors qu'augmenter la vitesse des jets produit le même effet que rapprocher les deux buses. L'inverse de l'étirement peut donc être interprété comme un temps caractéristique de la convection, ou un temps de résidence, $\tau_{\rm res}$. Ainsi, si l'étirement augmente, le temps de résidence diminue, et la flamme se maintient jusqu'à ce que ce $\tau_{\rm res} < \tau_{\rm chem}$ où se produit l'extinction. C'est d'ailleurs ce qui est observé expérimentalement et est quantifiée par la courbe de réponse à l'étirement, la



FIGURE 3.3: Schéma d'une flamme de diffusion à contre courant.

fameuse "courbe en S".

Un des intérêts de cette flamme est aussi qu'elle peut être résolue analytiquement. Ainsi en utilisant des coordonnées de similarité (DIXON-LEWIS et al., 1985; PETERS et KEE, 1987) ou non (PETERS, 2000), le profil de fraction de mélange peut être entièrement déterminé et donc le taux de dissipation scalaire.

$$\chi_{\xi} = \frac{a}{2\pi} \exp\left(-\frac{y^2}{l_D^2}\right) \quad \text{avec} \quad l_D = \sqrt{\frac{\mathcal{D}}{2a}} \tag{3.6}$$

Cette quantité est importante car elle caractérise le micro-mélange et donc l'efficacité avec laquelle l'oxydant et le combustible sont mis en contact. On note que, dans ce cas particulier, il est contrôlé par l'injection de quantité de mouvement à grande échelle a = V/d. De plus, Bilger (BILGER, 1976) a montré que, dans une flamme de diffusion, le taux de production de chaque espèce pouvait se mettre sous la forme :

$$\omega_Y = -\rho \chi_\xi \frac{d^2 Y}{d\xi^2} \tag{3.7}$$

qui montre la relation étroite entre ω_Y et la courbure dans l'espace des composition si bien que, pour une chimie infiniment rapide, comme la flamme se localise à la stoechiométrie :

$$\omega_Y = -\rho \left. \chi_\xi \right|_{\rm st} \left. \frac{d^2 Y}{d\xi^2} \right|_{\rm st} \tag{3.8}$$

avec $\chi_{\xi}|_{st} = \frac{a}{2\pi} \exp\left(-y_{\text{flame}}^2/l_D^2\right)$ où y_{flame} est la position sur l'axe y où le mélange est stoechiométrique. La connaissance du taux de dissipation scalaire χ_{ξ} ainsi que la relation entre la composition et la fraction de mélange $Y(\xi)$ permettent donc d'évaluer le taux de production chimique.

3.2.2 Prise en compte de la turbulence

Peters (PETERS, 1983) et Kuznetsov (KUZNETSOV, 1982) ont proposé d'interpréter les flammes non prémélangée turbulente comme une collection de flammes laminaires planes étirées par la turbulence mais dont la structure interne ne reste que peu modifiée. Comme présenté dans le paragraphe précédent, la structure de ces flammes dépend uniquement de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire. On peut ainsi construire, *a priori*, une bibliothèque de flammelettes fonction de ces paramètres, $\omega_Y(\xi, \chi_{\xi}|_{st})$. Le taux de production local moyen est alors évalué comme suit :

$$\widetilde{\omega}_Y = \int_0^1 \int_0^\infty \omega_Y(\xi, \chi_{\xi|_{\mathrm{st}}}) \widetilde{P}(\xi, \chi_{\xi|_{\mathrm{st}}}) d\xi d\chi_{\xi|_{\mathrm{st}}}$$
(3.9)

avec $P(\xi, \chi_{\xi}|_{st})$ la PDF jointe de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie.

Il est aussi intéressant de noter que comme le taux de dissipation scalaire et l'étirement sont reliés entre eux par l'équation (3.6), prendre en compte la statistique du taux de dissipation scalaire permet par la même occasion de prendre en compte l'effet de plusieurs étirements sur la flamme.

3.3 Chimie finie

La considération de la flamme de diffusion étirée permet donc de prendre en compte un temps caractéristique de la convection, $\tau_{\rm res}$. Cependant cette approche implique une structure de flamme particulière qui n'est adaptée que dans des cas particuliers, pour plus de détail on peut consulter (BORGHI et CHAMPION, 2000).

3.3.1 Réacteur imparfaitement agité

S'affranchir d'une structure de flamme ainsi que de l'hypothèse de chimie infiniment rapide nécessite de considérer la PDF jointe de la fraction massique d'espèce et de l'enthalpie, $\tilde{P}(\boldsymbol{\psi}^*;t)$ avec $\boldsymbol{\psi}^*$ l'espace des échantillons associé au vecteur composition scalaire $\boldsymbol{\phi}$ composé des fractions massiques et de l'enthalpie. Cependant, la résolution de son équation de transport, qui présente l'intérêt de ne pas nécessiter de fermeture particulière



FIGURE 3.4: Schéma d'un réacteur homogène imparfaitement mélangé ou PaSR (Partially Stirred Reactor).

pour le taux de production chimique, est très coûteuse. En effet, cette résolution repose sur une méthode de Monte-Carlo qui n'est pertinente que si un grand nombre d'échantillon statistique est considéré et ceci dans chaque cellule de notre calcul.

Afin de limiter le coût de la résolution de l'équation de transport de $P(\psi^*; t)$, on va résoudre une forme plus simple de l'équation d'évolution de la PDF du vecteur composition. Pour cela, on va considérer que la zone de réaction est localement assimilable à un réacteur imparfaitement mélangé, Partially Stirred Reactor (PaSR) en anglais. Avec cette approche, la zone de réaction n'est plus considérée comme ayant une structure physique particulière, comme cela peut être le cas avec une hypothèse de flammelette, mais comme étant le siège de plusieurs phénomènes ou processus physiques en compétition : la convection, le mélange jusqu'au petites échelles et la réaction chimique. L'équation d'évolution de la PDF fait alors intervenir quatre termes. Deux d'entre eux sont fermés, il s'agit du terme de variation temporelle et du terme d'évolution sous l'effet de la chimie. Les deux autres doivent être modélisés, le terme de convection et le terme de micro-mélange.

- **Convection** Comme on considère localement un réacteur, la convection n'a pour effet que de renouveler le mélange qu'il contient. Le terme de convection se limite donc à un terme d'entrée/sortie du réacteur. Si le temps caractéristique de la convection, $\tau_{\rm res}$, est petit, le mélange va être renouvelé rapidement et la PDF n'aura pas le temps d'évoluer sous l'effet des autres processus. A l'inverse, s'il est grand, le temps de renouvellement du mélange sera infiniment grand et tout se passera comme si le réacteur n'était plus ouvert mais fermé.
- **Réaction chimique** Ce terme fait évoluer la composition du mélange sous l'effet de la réaction chimique. Le temps caractéristique associé, τ_{chem} , dépend du mécanisme cinétique considéré.
- Micro-mélange Il traduit le mélange à petite échelle et il est associé à la diffusion moléculaire. Plusieurs modèles de micro-mélange existent, la qualité du modèle

pouvant être évaluée par le nombre de propriétés souhaitées qu'il respecte (FOX, 2003). Cependant, cette qualité va de pair avec la complexité et donc une augmentation du coût de calcul. C'est pourquoi le modèle IEM-LMSE (VILLERMAUX et DEVILLON, 1972; DOPAZO et O'BRIEN, 1974) est considéré dans cette étude. Ce modèle bien que simple traduit deux caractéristiques essentielles du mélange aux petites échelles, le mélange est d'autant plus efficace que l'intensité de la turbulence est élevée et la diffusion est d'autant plus importante que l'on est éloigné de la valeur moyenne locale. Il permet de surcroit, d'obtenir un certain nombre de résultats analytiques.

Finalement, la forme fermée de l'équation d'évolution de la PDF de la composition dans le réacteur imparfaitement mélangé s'écrit comme suit.

$$\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{P}(\boldsymbol{\psi}^{*};t) = - \underbrace{\widetilde{P}(\boldsymbol{\psi}^{*};t) - \widetilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi}^{*})}_{\tau_{res}} - \underbrace{\sum_{i=1}^{i=N} \frac{\partial}{\partial \psi_{i}^{*}} \left(\omega_{\phi_{i}}(\boldsymbol{\psi}^{*})\widetilde{P}(\boldsymbol{\psi}^{*};t) \right)}_{i=1} - \underbrace{\sum_{i=1}^{i=N} \frac{\partial}{\partial \psi_{i}^{*}} \left(\frac{\widetilde{\phi}_{i} - \psi_{i}^{*}}{\tau_{\phi_{i}}} \widetilde{P}(\boldsymbol{\psi}^{*};t) \right)}_{\text{micro-mélange}} \tag{3.10}$$

Dans l'équation (3.10), N est la dimension du vecteur composition, $\tau_{\rm res}$ est l'échelle caractéristique du temps de résidence dans le réacteur et τ_{ϕ_i} est l'échelle caractéristique du temps de mélange associé au scalaire ϕ_i . On considère ici que cette échelle est la même pour toutes les espèces, ce qui est cohérent avec une hypothèse de nombre de Lewis unitaire, et donc $\tau_{\phi_i} = \tau_{\rm mel}$, un temps caractéristique du mélange. Enfin, $\tilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi}^*)$ représente la PDF jointe à l'entrée du réacteur. Ainsi, si le réacteur est alimenté par un courant d'oxydant et un courant de combustible, cette PDF est donnée par :

$$\widetilde{P}_{in}(\boldsymbol{\psi}^*) = M\delta\left(\boldsymbol{\phi}^* - \boldsymbol{\phi}(\xi=0)\right) + (1-M)\delta\left(\boldsymbol{\psi}^* - \boldsymbol{\phi}(\xi=1)\right)$$
(3.11)

avec M la fraction massique de courant d'oxydant entrante, $\psi(\xi = 0)$ et $\psi(\xi = 1)$ représentent, respectivement, la composition dans le courant d'oxydant et le courant de combustible.

3.3.2 Application à la combustion non prémélangée

L'équation d'évolution de la PDF de la composition en réacteur imparfaitement mélangé est alors résolue avec une approche de Monte Carlo. La composition en entrée du réacteur ainsi que les temps caractéristiques de résidence et de mélange sont représentatifs



FIGURE 3.5: Domaine de définition $\mathcal{D}_{(\xi,Y)}$ dans l'espace des compositions (ξ,Y) .

de ceux utilisés dans l'étude de Ren et Pope (REN et POPE, 2004). Le schéma cinétique de Jachimowski (JACHIMOWSKI, 1988) est utilisé afin de prendre en compte la chimie complexe de la combustion de l'hydrogène dans de l'air.

Domaine de définition

Dans cette section, la chimie n'est pas considérée comme infiniment rapide. Par conséquent, toutes les compositions entre l'état non brûlé et l'état totalement brûlé sont envisageables. Afin de pouvoir décrire correctement la composition du fluide, deux variables sont alors nécessaires :

- une variable de mélange, la fraction de mélange ξ , permettant de qualifier la quantité de combustible et d'oxydant disponibles dans le mélange avant réaction
- une variable d'avancement, une fraction massique de réactif Y, permettant de quantifier l'avancement de la réaction et donc la quantité de réactifs brûlés et disponible.

Le domaine de variation de la composition du fluide est alors tracé sur la figure 3.5. Ce domaine est borné par la limite de mélange pure ou de réaction infiniment lente, $Da \rightarrow 0$, et la limite de chimie infiniment rapide ou tous les réactifs ont brûlés, $Da \rightarrow \infty$. Tous les couples de variable de ce domaine de variation sont alors envisageables.

Trajectoire dans l'espace des compositions

Les résultats stationnaires de la résolution de l'équation (3.10) obtenus pour différents temps de mélange et de résidence sont présentés, respectivement, sur la figure 3.6 et la figure 3.7. Sur ces figures, les demi-droites correspondant au mélange pur sont tracées en pointillés, les demi-droites correspondant à l'état complètement brûlé sont en trais



FIGURE 3.6: Effet de la variation du temps de mélange, τ_{mel} , sur la trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions obtenue à partir d'un calcul de PaSR.



FIGURE 3.7: Effet de la variation du temps de résidence, τ_{res} , sur la trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions obtenue à partir d'un calcul de PaSR.

pleins et la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions est tracée en traits pleins épais. Cette trajectoire représente, pour les valeurs de fraction de mélange supérieures à celle correspondant à la stoechiométrie, le chemin emprunté par une particule fluide ayant initialement une composition associée au mélange combustible ($\xi = 1$) et dont la composition évolue sous l'effet du modèle de mélange. De la même manière, pour les valeurs de fraction de mélange inférieures à celle correspondant à la stoechiométrie, le chemin correspond à celui d'une particule ayant initialement une composition associée au mélange oxydant ($\xi = 0$).

Ces résultats mettent alors en évidence l'influence de ces différents temps. Ainsi, si le temps caractéristique du mélange, $\tau_{\rm mel}$, diminue, la particule fluide va voir sa composition évoluer plus rapidement vers la moyenne. Cette particule va donc atteindre une valeur de ξ proche de la valeur moyenne avant d'avoir complètement brûlé. C'est bien ce qu'on observe en comparant les trois trajectoires dans l'espace des compositions correspondant à un temps de résidence $\tau_{\rm res} = 1.0 \ 10^{-3}s$. Les particules fluides gagnent la droite de combustion complète de manière plus direct dans l'espace des compositions pour le temps de mélange le plus grand. Il est aussi intéressant de noter que les particules quittent la droite de combustion complète pour des valeurs de ξ différentes. Ceci traduit le fait que dans un cas, pour le temps de mélange le plus grand, la réaction est brusque, c'est-à-dire qu'une fois

que la particule a commencé à réagir, elle le fait complètement et les réactifs qui peuvent lui être apportés par le mélange sont aussi brûlés quasi-instantanément. Dans l'autre cas, pour le temps de mélange le plus petit, le mélange est tellement rapide que la réaction n'a pas le temps d'aller jusqu'à son terme avant que d'autres réactifs ne soient apportés à la particule fluide, le mélange et la réaction se font en même temps. Concernant le temps de résidence, son influence est identifiable en comparant les trois trajectoires correspondant à un temps de mélange $\tau_{\rm mel} = 7.0 \ 10^{-4} s$. En effet, une diminution du temps de résidence induit un rétrécissement du domaine de valeur de fraction de mélange pour lequel les particules fluides brûlent. Cependant, il ne modifie en rien la façon dont la particule fluide va passer de la droite de mélange à la droite de combustion complète.

Hypothèse de chimie brusque

Une forme approchée de la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions, telle que présentée sur les figures 3.6 et 3.7, peut être obtenue par plusieurs demi-droites. En effet, les particules fluides semblent voir leur composition évoluer le long des droites de mélange jusqu'au moment où elles s'allument et rejoignent très rapidement la droite de combustion complète. L'hypothèse de chimie brusque est alors introduite : les particules fluides mettent un temps fini avant de brûler mais une fois qu'elles ont commencé à brûler, elles le font très rapidement jusqu'à atteindre l'état complètement brûlé. En faisant cette hypothèse, la trajectoire dans l'espace des compositions a pour unique support la droite de mélange et la droite de chimie infiniment rapide. La comparaison entre la trajectoire calculée et la trajectoire approchée est présentée sur la figure 3.8.



FIGURE 3.8: Représentation de la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions. Comparaison entre la trajectoire calculée en PaSR et la trajectoire approximée avec l'hypothèse de chimie brusque.

En plus de simplifier la forme de la trajectoire dans l'espace des compositions, l'hypothèse de chimie brusque permet d'introduire une relation entre la variable d'avancement et la variable de mélange, $Y^{\text{MIL}}(\xi)$. Cette relation qui repose sur la droite de mélange IEM et la droite de chimie infiniment rapide est entièrement paramétrée par la position des sauts d'allumage de la particule ξ_{J} et ξ_{J+} . Ainsi en connaissant la position de ces sauts, la résolution de l'équation d'évolution de la PDF de la composition n'est plus nécessaire si on fait l'hypothèse d'une chimie brusque.

3.4 Modélisation lagrangienne dans l'espace des compositions

La section précédente a permis de mettre en évidence que le caractère fini de la chimie pouvait être introduit par une relation particulière entre la variable d'avancement et la variable de mélange. L'objectif de cette démarche étant d'être capable d'évaluer de la meilleure façon possible le taux de production moyen, on va essayer de l'exprimer avec une approche lagrangienne dans l'espace des compositions afin d'exploiter au mieux cette relation. Le modèle présenté dans cette section est un modèle lagrangien dans l'espace des compositions basé sur la proposition de Borghi et Gonzalez (BORGHI et GONZALEZ, 1986). Plus de détails sur l'expression du taux de production peuvent être trouvés dans l'annexe A et dans (MURA et DEMOULIN, 2007).

3.4.1 Une représentation de la flamme turbulente

Le caractère fini de la chimie semble donc pouvoir être pris en compte simplement en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque. Cependant, cette hypothèse n'est utile que si l'emplacement des sauts d'allumage peut être déterminé sans résoudre l'équation d'évolution de la PDF de mélange.

Dans l'introduction de ce chapitre il a été précisé que la combustion est le siège d'une compétition entre trois temps caractéristiques. Un temps de diffusion caractérisant le mélange intime entre les différents réactifs, un temps de convection qui traduit l'apport de nouveaux réactifs sous l'influence des grandes structures de l'écoulement turbulent, et enfin, un temps caractéristique de la chimie qui est représentatif de la rapidité des réactions chimiques. Considérons alors un écoulement réactif turbulent où de grandes structures tourbillonnaires apparaissent. Ces tourbillons vont interagir avec la flamme. Les réactifs qui se situent au niveau de la flamme vont donc y rester jusqu'à ce qu'un tourbillon passe et vienne les renouveler. Ces derniers n'ont donc le temps de réagir qu'entre deux passages de tourbillon. De plus, si on considère l'effet de la turbulence sur le processus de mélange, on constate que plus la turbulence est forte, plus elle favorise le mélange entre réactifs (cf mécanisme du boulanger dans le chapitre sur le mélange scalaire). On peut alors relier le temps de résidence et le temps de mélange, introduits pour le PaSR, à un temps caractéristique des fluctuations induites par la turbulence.

On introduit alors un temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire considéré, τ_{ξ} qui est le temps caractéristique associé aux tourbillons et donc un temps de résidence pour les réactifs, et un temps caractéristique de la chimie, τ_{chem} . Deux situations sont alors envisageables :

- Si $\tau_{\xi} < \tau_{\text{chem}}$, les tourbillons renouvellent le mélange avant que la réaction n'est pu avoir lieu, l'effet est le même que celui produit par un temps de résidence tendant vers zéro dans un PSR. La réaction chimique n'a donc pas le temps de se produire.
- Si $\tau_{\xi} > \tau_{\text{chem}}$, la réaction chimique a le temps de se produire entre deux passages de tourbillons, l'effet est le même que celui produit par un temps de résidence tendant vers l'infini dans un PSR. La réaction chimique est complète.

Cette comparaison de temps caractéristiques permet donc de déterminer l'emplacement des sauts d'allumage dans l'espace des compositions et cela sans résoudre l'équation d'évolution de la PDF de la composition mais en comparant deux temps caractéristiques.

3.4.2 Equations lagrangiennes dans l'espace des compositions

Considérons une particule fluide. La composition de cette particule fluide peut être entièrement déterminée à partir d'une variable d'avancement, Y, et d'une variable de mélange, ξ . L'évolution de la composition de cette particule va donc être régie par deux équations :

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau_{\xi}} \quad \text{et} \quad \frac{dY}{dt} = \frac{\tilde{Y} - Y}{\tau_{Y}} + \omega_{Y} \tag{3.12}$$

La valeur de la fraction de mélange associée à la particule fluide va évoluer sous l'effet du micro-mélange alors que la valeur de la variable d'avancement va varier à la fois sous l'effet du micro-mélange et de la réaction chimique. Les termes de micro-mélange doivent être fermés car ils nécessitent non seulement la connaissance de la composition de la particule considérée mais aussi celles des particules voisines avec lesquelles elles échangent. Dans les équations (3.12), ces termes sont représentés par le modèle classique d'échange avec la moyenne IEM-LMSE (VILLERMAUX et DEVILLON, 1972; DOPAZO et O'BRIEN, 1974). Ces équations peuvent alors être reformulées de manière à obtenir une expression locale dans l'espace des compositions du taux de production chimique.

$$\omega_Y(\xi, Y) = \frac{dY}{d\xi} \frac{\left(\tilde{\xi} - \xi\right)}{\tau_{\xi}} - \frac{\left(\tilde{Y} - Y\right)}{\tau_Y}$$
(3.13)

De plus en invoquant l'hypothèse de chimie brusque, la relation $Y^{\text{ML}}(\xi)$, on peut ramener la dépendance du taux de production à la seule variable de mélange. Notons aussi que, comme la variable de mélange et la variable d'avancement sont linéairement liées, les deux temps caractérisant leur mélange sont du même ordre de grandeur et peuvent être supposés égaux, ² $\tau_Y = \tau_{\xi}$.

$$\omega_Y^{\text{MIL}}(\xi) = \frac{1}{\tau_{\xi}} \left[\frac{d}{d\xi} \left(Y^{\text{MIL}}(\xi) \right) \left(\widetilde{\xi} - \xi \right) - \left(\widetilde{Y} - Y^{\text{MIL}}(\xi) \right) \right]$$
(3.14)

Finalement, si on adopte la vision de la flamme turbulente précédemment introduite, l'expression de la trajectoire lagrangienne avec chimie brusque, $Y^{\text{MIL}}(\xi)$, est connue. Le taux de production local dans l'espace des compositions est alors entièrement déterminé.

3.4.3 Fluctuations induites par la turbulence

Si on considère que le mélange réactif est localement une collection de particules fluides ayant des compositions différentes ou non, la composition moyenne locale n'est autre que la somme de toutes les compositions de ces particules fluides. Le fait que les particules aient une composition différente est dû a un historique différent. Cependant, bien qu'elles ne soient pas toutes injectées depuis le même temps (elles ont un age différent dans l'espace des compositions), on suppose qu'elles empruntent toutes la même trajectoire dans l'espace des compositions. La connaissance de la PDF de la fraction de mélange

^{2.} Cette condition est même nécessaire pour garantir que le terme source s'annule sur les droites de mélange IEM

locale permet alors d'entièrement déterminer la composition moyenne locale. Finalement le taux de production moyen s'exprime comme suit.

$$\widetilde{\omega}_{Y}^{\text{MIL}} = \int_{0}^{1} \frac{1}{\tau_{\xi}} \left[\frac{d}{d\xi} \left(Y^{\text{MIL}}(\xi) \right) \left(\widetilde{\xi} - \xi \right) - \left(\widetilde{Y} - Y^{\text{MIL}}(\xi) \right) \right] \widetilde{P}(\xi) d\xi \qquad (3.15)$$

Dans cette expression intervient le temps caractéristique des fluctuations du champs scalaire. C'est ce même temps caractéristique qui a permis de déterminer l'expression de la trajectoire lagrangienne avec chimie brusque, $Y^{\text{MIL}}(\xi)$, en permettant de localiser les sauts d'allumage dans l'espace des compositions. La trajectoire Y^{MIL} est donc aussi une fonction de ce temps, $Y^{\text{MIL}}(\xi, \tau_{\xi})$. Ce dernier a été supposé connu et unique, cependant on peut considérer que dans un écoulement turbulent, ce temps n'est pas unique puisqu'il existe plusieurs échelles de tourbillons et donc de fluctuations. Une PDF de ce temps devrait, en toute rigueur, être introduite. Le taux de production s'exprimerait alors :

$$\widetilde{\omega}_{Y}^{\text{MIL}} = \int_{0}^{1} \int_{0}^{\infty} \frac{1}{\tau_{\xi}} \left[\frac{d}{d\xi} \left(Y^{\text{MIL}}(\xi, \tau_{\xi}) \right) \left(\widetilde{\xi} - \xi \right) - \left(\widetilde{Y} - Y^{\text{MIL}}(\xi, \tau_{\xi}) \right) \right] \widetilde{P}(\xi, \tau_{\xi}) d\xi d\tau_{\xi} \quad (3.16)$$

Cependant, dans le cadre de ce travail, le temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire est considéré unique et c'est l'expression (3.15) qui est utilisée.

3.4.4 Retour sur la physique prise en compte

La modélisation présentée dans cette section permet donc de prendre en compte la compétition entre la chimie et le mélange dans des flammes non-prémélangées turbulentes en s'appuyant sur la considération locale d'un réacteur imparfaitement mélangé. Cependant, alors que le PaSR introduit trois temps caractéristiques, un pour le mélange, $\tau_{\rm mel}$, un pour le temps de résidence, $\tau_{\rm res}$, et un pour la chimie, $\tau_{\rm chem}$. Le modèle à chimie brusque présenté ici n'en considère que deux, un temps caractéristique des fluctuations du champs scalaire, τ_{ξ} , et un temps chimique, $\tau_{\rm chem}$. Malgré tout, il est capable de reproduire les comportements physique attendus.

Tout autre temps caractéristique du PaSR étant gardé constant, l'augmentation du temps de résidence va permettre aux compositions ayant des temps caractéristiques de la chimie plus grand de brûler. Dans l'approche chimie brusque, cela se traduit par une augmentation de l'espace entre les sauts avec l'augmentation du temps caractéristique des fluctuations scalaire. Quant au temps de mélange, sa diminution va favoriser le mélange. Dans l'approche chimie brusque, cela se traduit par une augmentation de la fréquence de mélange dans l'expression du taux de production.

Ainsi, dans la vision de la flamme turbulente adoptée, une augmentation du temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire traduit un temps plus grand entre le passage de deux tourbillons. La réaction chimique aura donc plus de temps pour se produire mais le mélange se fera moins. Le modèle traduit bien cette tendance puisque une augmentation du temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire induit une augmentation de l'espace entre les sauts, et donc potentiellement plus de particules fluides qui vont brûler, mais une diminution de la fréquence de mélange dont le taux de production chimique est directement proportionnel.

Conclusions

La modélisation de la flamme non-prémélangée turbulente présentée dans ce chapitre s'appuie sur la considération locale d'un PaSR. L'introduction d'une hypothèse de chimie brusque permet d'éviter la résolution de l'équation d'évolution de la PDF de la composition dans ce PaSR en introduisant une relation entre la variable d'avancement et la variable de mélange. Cette relation est une trajectoire lagrangienne privilégiée dans l'espace des compositions. En s'appuyant sur cette trajectoire, l'évolution de la composition des particules fluides est considérée et permet d'expliciter le taux de production chimique de chaque espèce en fonction de l'unique fraction de mélange. Une approche à PDF présumée permet ensuite d'évaluer le taux de production moyen. L'intérêt majeur de cette approche est qu'elle ne suppose pas de structure particulière de la flamme dans l'espace physique. De plus, étant basée sur un PaSR, elle est capable de restituer l'extinction par étirement.

Deuxième partie Allumeur torche

Contexte

Physique de l'écoulement

Dans cette partie, la première phase d'allumage du moteur fusée est étudiée. Un schéma représentatif de ce qui se passe au sein de la chambre de combustion durant cette phase est présenté sur la figure 3.9. L'hydrogène est tout d'abord injecté afin d'éviter tout contact entre un mélange oxydant chaud et la paroi de la chambre de combustion et ainsi préserver cette dernière d'une éventuelle détérioration. La pression dans la chambre de combustion est à ce moment très faible (1bar au sol ou quelques centièmes de bar pour un allumage dans le vide spatial) par rapport à sa pression en conditions de fonctionnement nominale (quelques dizaines à une centaine de bar).



FIGURE 3.9: Schéma de la première étape de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique. L'allumeur est ensuite mis en marche. Il en existe deux catégories, pyrotechniques et cryotechniques. Les deux ont pour but d'allumer le mélange avec un jet de gaz chauds. La différence entre les deux technologies réside en la manière d'obtenir ce jet. Pour le premier type d'allumeur, il est obtenu à partir de la combustion d'ergols solides (souvent appelés poudres). Pour le second, c'est une petite chambre de combustion fonctionnant avec un mélange pauvre pour obtenir un jet oxydant chaud. Dans le cas de moteur réallumable, l'allumeur cryotechnique est préférable pour des raisons de gain de masse, l'allumeur pyrotechnique devant avoir plusieurs "charges de poudre".

Une fois l'allumeur cryotechnique mis en marche, la pression au sein de cette petite chambre de combustion est de l'ordre de la di-

zaine de bar, par conséquent, lorsque les gaz chauds débouchent dans la chambre de combustion du moteur fusées, le jet présente les caractéristiques d'un jet fortement sous détendu, le rapport de pression entre l'allumeur et la chambre pouvant dépasser la dizaine. Le jet allumeur a alors les caractéristiques d'un écoulement supersonique fortement compressible, avec présence d'une bouteille de Mach. De plus, une injection coaxiale d'hydrogène permet de refroidir l'injection centrale de gaz chaud. Cette circulation d'hydrogène débouche ensuite dans la chambre de combustion de manière a former une couronne d'hydrogène autour du jet allumeur. Une couche de mélange fortement cisaillée apparaît alors et permet d'obtenir des conditions propices à l'auto-allumage, qui lui-même permet la stabilisation d'une flamme autour de la bouteille de Mach. On obtient ainsi une flamme qui permet, par la suite, de propager l'allumage aux injecteurs périphériques. Ce système d'allumage est aussi appelé allumage torche.

La simulation de cette phase de l'allumage nécessite donc la prise en compte des effets de compressibilité sur l'écoulement, pour restituer le développement de la bouteille de Mach, et de la physique le l'auto-allumage dans des couches de mélange présentant de très fort taux de cisaillement.

Travail précédent

Le travail présenté dans ce manuscrit fait suite à celui de la Thèse de J.F. Izard (IZARD, 2009) qui a permis, entre autre, de mettre au point une méthodologie de simulation des jets fortement sous détendus à l'aide du logiciel N3S_NATUR couplé à la méthode de remaillage AMA (Anisotropic Mesh Adaptation) proposée par Dolejsi (DOLEJŠÍ et FELCMAN, 2004). Une illustration de ce travail est présenté sur la figure 3.10. On pourra se reporter à IZARD et MURA (2009) pour plus de détails.



FIGURE 3.10: Maillages retenus pour la simulation des jets sous-détendus après application de la méthode AMA. Partie basse : champ de nombre de Mach.

Une proposition de modélisation de la combustion turbulente en écoulement super-

sonique basée sur une approche lagrangienne dans l'espace des compositions a aussi été introduite dans ce travail et exploitée afin de simuler l'allumage de la torche. Une illustration du résultat de cette simulation est présentée sur la figure 3.11.



FIGURE 3.11: Solution stationnaire. Haut : Champ de vitesse axiale moyenne. Bas : Champ de température moyenne. a) Isoligne Ma=2, b) Structure en diamant en aval du disque de Mach. c) Positionnement de la flamme en bordure du "tonneau" de Mach.

Objectifs

Le travail précédemment effectué a donc permis de mettre au point une méthodologie de simulation de l'allumeur torche basée sur une approche lagrangienne dans l'espace des compositions. Après un rappel des principes de ce modèle basé sur la comparaison de temps caractéristiques, on se propose d'améliorer la description de ces temps. Une équation de transport du temps de résidence des particules fluides pures est ainsi introduite. Une équation de transport de la dissipation des fluctuations du champ scalaire pour la fraction de mélange est aussi considérée afin de mieux évaluer le temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire.

Chapitre 4

Auto-allumage et Écoulements Supersoniques réactifs

4.1 Phénoménologie et principes de modélisation

4.1.1 Auto-inflammation

L'auto-inflammation se produit lorsque les conditions de pression et de température d'un mélange sont telles que ce dernier s'allume spontanément sans apport extérieur d'énergie, une revue détaillée du phénomène a été proposée par MASTORAKOS (2009). Ce phénomène est fortement dépendant des interactions chimie turbulence et il a été mis en évidence que, dans un écoulement, cet auto-allumage se produit dans les zone de faible dissipation scalaire mais pas forcément à la stoechiométrie (MASTORAKOS et al., 1997). En effet, les vitesses de réaction étant fortement non-linéaires avec la température, une légère augmentation de celle-ci peut entraîner une augmentation forte de la vitesse de réaction induisant une augmentation du dégagement de chaleur et ainsi de suite. Ce phénomène est appelé emballement thermique et peut expliquer l'auto-allumage. Il permet aussi de comprendre pourquoi l'auto-allumage ne se produit pas pour une fraction de mélange à la stoechiométrie ξ_{st} , mais pour une valeur particulière de la fraction de mélange, la "most reactive mixture fraction" (fraction de mélange la plus réactive), notée ξ_{MR} , qui correspond à la composition pour laquelle la température du mélange avant toute réaction est la plus propice au dégagement de chaleur compte tenu de cette composition (concentration et température). La valeur de cette fraction de mélange peut être déterminée a priori à l'aide d'une série de calcul d'allumage en réacteur homogène comme fait dans (STANKOVIĆ et al., 2011), les conditions initiales de ces calculs correspondant au mélange inerte entre le combustible, souvent froid, et l'oxydant, la plupart du temps chaud. Une courbe de temps d'allumage, $\tau_{ign}(\xi)$, en fonction de la fraction de mélange peut donc être tracée. La valeur



FIGURE 4.1: Courbe de temps d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange pour les conditions de l'expérience de Cabra (CABRA et al., 2002).

 ξ_{MR} correspond alors au mélange ayant le temps d'allumage le plus faible (MASTORAKOS, 2009). Un exemple d'estimation de ξ_{MR} est présenté sur la figure 4.1 pour la flamme de Cabra (CABRA et al., 2002) qui est une flamme subsonique de méthane dans laquelle se produit de l'auto-allumage.

Considérons un écoulement tel que celui schématisé sur la figure 4.2, où un oxydant chaud se mélange avec un combustible froid et où peut se produire de l'auto-allumage. Les deux courants vont d'abord se mélanger sans qu'il n'y ait de réaction chimique. La trajectoire des particules fluides dans l'espace (T,ξ) va alors se situer sur la droite de mélange en pointillés sur la figure 4.2. Ceci correspond au temps $\tau = \tau_0$ sur le schéma. En s'éloignant de l'injection, l'âge des particules fluides va augmenter, c'est-à-dire que le temps depuis lequel elles ont été injectées dans l'écoulement augmente. Il arrive alors un moment où une particule fluide a été injectée depuis suffisamment de temps pour qu'elle puisse s'auto-allumer, *i.e.*, le temps qui s'est écoulé depuis son injection est supérieur ou égal au temps nécessaire à son auto-inflammation dans les conditions dans lesquelles elle se trouve. Comme la composition la plus propice à l'auto-allumage (le temps chimique,ou temps d'allumage, le plus petit) est celle correspondant à $\xi_{\rm MR}$, c'est sur cette iso-ligne que ce phénomène va se produire en premier. Ceci correspond au temps $\tau = \tau_1$ sur le schéma. En s'éloignant encore un peu plus de l'injection, d'autres compositions vont pouvoir s'autoallumer et une flamme va se stabiliser autour de la stoechiométrie. Ceci correspond au temps $\tau = \tau_2$ sur le schéma.

4.1.2 Déroulement temporel de l'allumage

Afin de mieux comprendre le phénomène d'auto-allumage, nous allons suivre l'évolution de la température le long de la ligne iso- ξ correspondant à la stoechiométrie. Pour cela, on considère un réacteur parfaitement agité, PSR (Perfectly Stirred Reactor en an-



FIGURE 4.2: Schéma d'une flamme non-prémélangée stabilisée par auto-allumage. Tracés de la trajectoire des particules fluides dans l'espace (T, ξ) . Adapté de (VICQUELIN, 2010)

glais), et on va suivre l'évolution de sa température au cours du temps. En effet, suivre l'évolution des grandeurs caractérisant l'état local du mélange le long d'une ligne iso- ξ revient à considérer l'évolution temporelle d'un mélange sous le seul effet de la chimie et donc de considérer l'évolution d'un mélange donné au sein d'un PSR. Comme nous nous intéressons ici à l'auto-allumage, il semble approprié de considérer des conditions qui sont propices à ce dernier. C'est pourquoi nous allons utiliser comme conditions pour le mélange avant combustion, les conditions de l'expérience de Cabra (CABRA et al., 2002) dont la flamme est stabilisée par auto-allumage (DOMINGO et al., 2008).

L'évolution de la température du mélange stoechiométrique correspondant aux conditions de l'expérience de Cabra est tracée sur la figure 4.3(a). On constate alors que la température ne varie pas de plus de 50 K durant la période d'induction qui dure un peu moins de τ_{ign} , puis, la monté en température de plus de 1000K se produit en un intervalle de temps $\Delta \tau$. Le passage de l'état non brûlé, qui se situe sur la droite de mélange dans l'espace des compositions, à l'état complètement brûlé, qui se situe sur la droite d'équilibre dans l'espace des compositions dure $\Delta \tau$ mais a lieu à un temps τ_{ign} après l'injection, voir la figure 4.3(a). Ce passage d'un état à l'autre, $\Delta \tau$, est très court devant τ_{ign} . Une simulation de l'évolution de la composition le long de chaque ligne iso- ξ est alors





(a) Evolution de la température et de la fraction massique d'oxygène d'une particule fluide à la stoechiométrie en fonction du temps

FIGURE 4.3: Analyse de la pertinence de l'hypothèse de chimie brusque avec une approche réacteur, les conditions des simulations sont celles de l'expérience de Cabra (CABRA et al., 2002).

conduite¹. Le rapport $\Delta \tau / \tau_{ign}$ est ensuite tracé en fonction de la fraction de mélange sur la figure 4.3(b). Outre le fait que l'auto-allumage ne peut se produire que sur une plage restreinte de valeur de la fraction de mélange, cette courbe met en évidence que le rapport entre le temps d'induction et de réaction ne dépasse pas cinq pour cent. Le "temps de réaction" semble donc rester négligeable par rapport au temps d'induction. Ceci justifie l'hypothèse de chimie brusque utilisée pour modéliser l'évolution de la composition au sein du PSR : le long des lignes iso- ξ les particules fluides mettent un temps fini pour s'auto-allumer mais brûlent ensuite très rapidement jusqu'à atteindre l'état complètement brûlé.

4.1.3 Ecoulement à grandes vitesses

Considérons maintenant une couche cisaillée à grandes vitesses. Dans ce type d'écoulement, l'hypothèse d'une énergie cinétique négligeable par rapport à l'enthalpie statique n'est plus justifiée, la détermination de $\xi_{\rm MR}$, tout comme l'évaluation du temps d'induction en fonction uniquement de la fraction de mélange, n'est alors plus possible *a priori* sans connaître le champ de température de l'écoulement inerte. En effet, dans la zone de cisaillement entre deux courants, la conversion possible de l'énergie cinétique en énergie thermique sous l'effet du frottement visqueux peut induire une élévation locale non né-

^{1.} La simulation n'est menée que pour 5 secondes d'évolution au sein du PSR. Les auto-allumages se produisant pour un temps d'induction de plus de 5 secondes ne sont pas pris en compte ici.

gligeable de la température. Celle-ci n'est alors plus uniquement le résultat du mélange entre le courant de combustible et d'oxydant. L'évaluation de $\xi_{\rm MR}$ à partir d'une série de calcul en réacteur homogène est donc susceptible de conduire à un résultat erroné. Une solution possible consiste alors à tabuler le temps d'auto-allumage à partir d'une série de calculs en réacteur homogène mais non plus en fonction de la fraction de mélange seulement mais aussi en fonction de la température locale et de la pression, $\tau_{\rm ign}(\xi, T, P)$. Ainsi l'écoulement étant calculé, si la température locale prenant en compte l'échauffement dû au cisaillement est connue et grâce à la tabulation $\tau_{\rm ign}(\xi, T, P)$, on peut correctement évaluer $\xi_{\rm MR}$. Une fois la position de ce nouveau $\xi_{\rm MR}$ prenant en compte l'échauffement dû aux frottement visqueux connue, le déroulé de l'auto-allumage est le même que dans le cas où l'énergie cinétique peut être négligée. Le problème est alors reporté sur la détermination de la température locale prenant en compte si prenant en compte l'échauffement dû

4.2 Modélisation lagrangienne dans l'espace des compositions

4.2.1 Une représentation possible de l'auto-allumage

L'auto-allumage peut donc être vu comme la compétition entre deux temps caractéristiques, un temps caractéristique de l'allumage, τ_{ign} , et le temps depuis lequel la particule fluide considérée est dans l'état considéré, ce temps pouvant être interprété comme l'âge de la particule fluide τ_{age} .

- Si $\tau_{age} < \tau_{ign}$, la particule fluide n'est pas dans l'état considéré depuis suffisamment longtemps pour que l'emballement thermique ait eu lieu, il n'y a donc pas d'auto-allumage.
- Si $\tau_{age} > \tau_{ign}$, la particule fluide est dans l'état considéré depuis suffisamment longtemps pour que l'emballement thermique ait eu lieu et donc qu'il y ait auto-allumage.

Si ces deux temps sont connus, l'hypothèse de chimie brusque permet donc de décrire entièrement la composition de la particule.

Cependant, les particules fluides ne subissent pas uniquement l'effet des réactions chimiques mais aussi celui du mélange avec les autres particules fluides. Une particule fluide voit donc sa composition, ainsi que sa température, évoluer jusqu'à ce qu'elle soit depuis assez longtemps dans des conditions propices à l'auto-allumage. Afin d'illustrer cette évolution, plusieurs calculs de PaSR ont été effectués pour des temps de résidence et de mélange différents. Les résultats obtenus sont tracés sur la figure 4.4.


FIGURE 4.4: Trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions $(Y-\xi)$ (haut) et évolution temporelle de la variable d'avancement (bas) obtenus à partir de calculs en PaSR pour différents temps de mélange τ et temps de résidence τ_{res} . (conditions de CABRA et al. (2002))

L'influence des temps caractéristiques régissant les différents termes de l'équation d'évolution de la PDF de la composition au sein du PaSR est la même que celle déjà présentée dans le chapitre 3 sur la modélisation de la combustion. Toutefois, elle est réécrite ici pour faciliter la lecture du manuscrit. Une diminution du temps de résidence réduit le domaine d'inflammabilité et une diminution du temps de mélange fait tendre plus rapidement les particules fluides vers la composition moyenne. Les trajectoires dans l'espace des compositions sont elles aussi semblables, les particules fluides restent sur la droite de mélange jusqu'à ce qu'elle commence à brûler. A ce moment là, elles gagnent rapidement la droite d'équilibre. L'hypothèse de chimie brusque semble donc fournir ici aussi une bonne approximation de la trajectoire lagrangienne des particules fluides dans l'espace des compositions sur la courbe d'évolution temporelle de la variable d'avancement d'une particule fluide. Sur ces courbes figurent le temps d'auto-alllumage, τ_{ign} , et le temps, $\Delta \tau$, mis par la particule pour passer de la courbe de mélange pur, trajectoire IEM en pointilés, à la courbe d'équilibre. Le rapport de ces deux temps n'excède pas dix pour cent, c'est-à-dire que les particules mettent environ dix fois plus de temps à se mélanger avant réaction qu'elles ne mettent à réagir. Il semble aussi que l'augmentation du temps de mélange tend à améliorer la validité de l'hypothèse de chimie brusque.

L'hypothèse de chimie brusque permet donc d'approximer de manière pertinente la trajectoire des particules fluides dans l'espace de compositions. Cependant, sa mise en oeuvre pratique repose sur la connaissance du domaine d'inflammabilité du mélange, et donc la connaissance du temps de résidence et du temps d'auto-allumage.

4.2.2 Temps d'auto-allumage en écoulement supersonique

BRAY et al. (1994) et LUO et BRAY (1998) suggèrent que, si une relation linéaire entre l'enthalpie totale h_t et la fraction de mélange ξ peut être établie, les méthodes de PDF présumée $\tilde{P}(\xi)$ d'usage courant pour des cas à faible nombre de Mach peuvent être étendues à la description de la combustion dans des écoulements rapides en remplaçant l'enthalpie statique par l'enthalpie totale. Afin de pouvoir écrire une telle relation entre l'enthalpie totale et la fraction de mélange, certaines hypothèses sont néanmoins nécessaires. Le nombre de Lewis et de Prandtl doivent être unitaires et les effets introduits par les variations temporelles de pression doivent être négligeables. En effet en l'absence de force extérieure et en supposant le nombre de Lewis unitaire pour toutes les espèces :

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(h + \frac{u_k^2}{2} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho a_T \frac{\partial h}{\partial x_k} + \rho u_i \tau_{ki} \right) + \frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.1)

De plus, en négligeant $\partial p/\partial t$, en considérant le nombre de Lewis et de Prandtl unitaires ainsi qu'une direction privilégiée de l'écoulement, i.e. $u \gg v, w$,

$$\rho u_i \tau_{ki} = \mu \left(u_i \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \mu u_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \approx \rho a_T \frac{\partial u^2/2}{\partial x_k}$$
(4.2)

L'équation d'advection diffusion de l'enthalpie totale $h_t = h + u^2/2$ peut alors être explicitée :

$$\rho \frac{D}{Dt}(h_t) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial h_t}{\partial x_k} \right)$$
(4.3)

Enfin en utilisant le modèle de micro-mélange IEM :

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(h_t \right) \approx \frac{1}{\tau} \left(\widetilde{h}_t - h_t \right) \tag{4.4}$$

Les équations lagrangiennes pour ξ et h_t étant semblables, une relation linéaire entre ces deux variables peut être envisagée. Ceci est d'ailleurs corroboré par des résultats de DNS représentés sur la figure 4.2.2 (LUO et BRAY, 1998).

Pour un système à deux entrées, combustible pur $(\xi = 1)$ et oxydant pur $(\xi = 0)$, on peut



FIGURE 4.5: PDF jointe de l'enthalpie totale et de la fraction de mélange obtenue par DNS dans le cas d'une couche de mélange turbulente réactive supersonique présentant un nombre de Mach égal à 2.4 (LUO et BRAY, 1998).

donc écrire :

$$h_t = h_t\left(\xi\right) = \frac{\xi}{\tilde{\xi}}\left(\tilde{h}_t - h_{t0}\right) + h_{t0} \qquad \text{si}\,\xi \in \left]0;\tilde{\xi}\right] \tag{4.5}$$

$$= \frac{1-\xi}{1-\widetilde{\xi}} \left(\widetilde{h}_t - h_{t1}\right) + h_{t1} \quad \text{si}\,\xi \in \left[\widetilde{\xi}; 1\right[\tag{4.6}$$

avec $h_{t0} = h_t(0)$, l'enthalpie totale de l'oxydant pur et $h_{t1} = h_t(1)$, l'enthalpie totale du combustible pur. On peut alors évaluer la température en prenant en compte l'effet d'échauffement visqueux. En effet, en supposant que la fluctuation de pression p' est négligeable devant la pression moyenne \overline{p} et que l'énergie des fluctuations est négligeable devant l'énergie du mouvement moyen, la température statique peut être exprimée de la façon suivante :

$$T_{\rm frott} = \frac{h_t\left(\xi\right) - \widetilde{u}_k \widetilde{u}_k/2}{\overline{c}_p} \tag{4.7}$$

avec \overline{c}_p , la capacité thermique massique du mélange qui compose la particule fluide.

Une tabulation du temps d'auto-allumage, $\tau_{ign}(\xi, T, P)$, est alors construite en effectuant une série de calcul d'allumage à l'aide du logiciel Senkin (LUTZ et al., 1988) où la composition, par l'intermédiaire de la fraction de mélange, la température et la pression varient. Le temps caractéristique de la chimie est alors reconstruit localement comme une fonction de la fraction de mélange en extrayant de la tabulation précédente la courbe correspondant à la température prenant en compte les effets de frottement visqueux, Eq. (4.7), et la pression locale.

$$\tau_{ign}(\xi) = \tau_{ign}(\xi, T_{frott}, \overline{p}) \tag{4.8}$$

4.2.3 Echelle caractéristique temporelle de la convection

Dans l'espace physique, cette échelle temporelle est l'âge de la particule fluide depuis son injection, c'est-à-dire le temps qu'elle a mis pour arriver à sa position depuis l'instant où elle a quitté l'injecteur.



FIGURE 4.6: Illustration dans l'espace physique des trajectoires de particules fluides issues des courants d'oxydant ou de combustible pure vers la composition ξ .

Dans l'espace des compositions, c'est le temps mis par une particule lagrangienne pour atteindre la composition donnée ξ depuis le courant d'oxydant pur ou depuis le courant de combustible pur. Cependant, l'historique de la particule dans l'espace physique n'est pas connu, une même composition pouvant être obtenue de plusieurs façons. Les seules informations disponibles sont alors sa composition ainsi que sa trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions : la trajectoire de mélange IEM. Par conséquent, la façon la plus simple d'évaluer ce temps caractéristique consiste à intégrer l'évolution lagrangienne le long de la trajectoire IEM dans l'espace des compositions. De plus, en l'absence d'information concernant l'évolution de l'échelle temporelle caractéristique du mélange τ , celle-ci est considérée comme constante.

On peut donc écrire :

$$\int_{0}^{\tau_{\rm res}(\xi)} \frac{dt}{\tau_{\xi}} = \int_{0}^{\xi} \frac{d\xi^*}{\tilde{\xi} - \xi^*} \quad \text{si} \quad \xi \in \left]0; \tilde{\xi}\right]$$
(4.9)

$$\int_{0}^{\epsilon_{\rm res}(\xi)} \frac{dt}{\tau_{\xi}} = \int_{1}^{\xi} \frac{d\xi^*}{\widetilde{\xi} - \xi^*} \quad \text{si} \quad \xi \in \left[\widetilde{\xi}; 1\right[$$
(4.10)

D'où

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(1 + \frac{\xi}{\tilde{\xi} - \xi}\right) \quad \text{si} \quad \xi \in \left[0; \tilde{\xi}\right] \tag{4.11}$$

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(\frac{\widetilde{\xi}-1}{\widetilde{\xi}-\xi}\right) \qquad \text{si} \quad \xi \in \left]\widetilde{\xi};1\right] \tag{4.12}$$

C'est l'expression proposée par (IZARD, 2009). Notons que le choix du modèle de micromélange IEM impose qu'en $\xi = \tilde{\xi}$ le temps de convection soit infiniment grand, ce qui n'est pas compatible avec notre modèle. Pour pallier ce problème, on choisi de fixer $\tau_{\rm res}\left(\tilde{\xi}\right) = \tau_{\rm res}\left(0.999\,\tilde{\xi}\right)$.

L'évaluation précédente de l'échelle temporelle caractéristique de la convection est faite en faisant l'hypothèse simplificatrice que les particules fluides d'oxydant pur ou de combustible pur ne se trouvent qu'en sortie d'injecteur. Cependant, puisque le mélange est imparfait, il existe potentiellement, au sein du mélange, des particules fluides qui ne se sont pas mélangées. Il est donc plus juste de considérer localement un temps de vie de ces particules "pures". On écrit alors :

$$\int_{\tau_{\rm res}^{\xi=0}}^{\tau_{\rm res}(\xi)} \frac{dt}{\tau_{\xi}} = \int_{0}^{\xi} \frac{d\xi^*}{\tilde{\xi} - \xi^*} \quad \text{si} \quad \xi \in \left]0; \tilde{\xi}\right]$$
(4.13)

$$\int_{\tau_{\rm res}^{\xi=1}}^{\tau_{\rm res}(\xi)} \frac{dt}{\tau_{\xi}} = \int_{1}^{\xi} \frac{d\xi^*}{\widetilde{\xi} - \xi^*} \quad \text{si} \quad \xi \in \left[\widetilde{\xi}; 1\right]$$
(4.14)

où $\tau_{\rm res}^{\xi=0}$ et $\tau_{\rm res}^{\xi=1}$ correspondent au temps que met une particule fluide composée, respectivement, d'oxydant pur ou de combustible pur pour arriver à l'endroit de l'écoulement considéré. L'expression du temps de séjour est alors donnée par :

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(1 + \frac{\xi}{\tilde{\xi} - \xi}\right) + \tau_{\rm res}^{\xi=0} \quad \text{si} \quad \xi \in \left[0; \tilde{\xi}\right] \tag{4.15}$$

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(\frac{\overline{\xi}-1}{\overline{\xi}-\xi}\right) + \tau_{\rm res}^{\xi=1} \qquad \text{si} \quad \xi \in \left]\widetilde{\xi};1\right] \tag{4.16}$$

La difficulté réside alors dans le calcul de ce temps de vie τ_{sej} ($\xi = 1$) et τ_{sej} ($\xi = 0$). Pour cela une équation de transport de la quantité de temps de résidence, θ , est écrite à partir des travaux de Ghirelli et Leckner (GHIRELLI et LECKNER, 2004) eux-mêmes basés sur les premières analyses de Sandberg (SANDBERG, 1981; SANDBERG et SJÖBERG, 1983). La quantité de temps de résidence est définie telle que sa variation infinitésimale, $d\theta$, soit le produit de la masse infinitésimale, dm, et du temps de résidence, $\tau_{\rm res}$, de l'élément fluide considéré. Pour les écoulements multi-espèce réactifs, on peut particulariser cette quantité pour une espèce α , elle devient alors $d\theta_{\alpha} = dm Y_{\alpha} \tau_{\rm res}^{Y_{\alpha}}$ avec Y_{α} la fraction massique de l'espèce α et $\tau_{\rm res}^{Y_{\alpha}}$ son temps de résidence. En s'appuyant sur la moyenne introduite par Ghirelli et Leckner (GHIRELLI et LECKNER, 2004) et en faisant l'hypothèse habituelle de diffusion moléculaire négligeable par rapport à la diffusion turbulente, l'équation de transport de la quantité de temps de résidence de l'espèce α s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y}_{\alpha} \widehat{\tau}_{res}^{Y_{\alpha}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_{k} \widetilde{Y}_{\alpha} \widehat{\tau}_{res}^{Y_{\alpha}}}{\partial x_{k}} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho} D_{t} \frac{\partial \widetilde{Y}_{\alpha} \widehat{\tau}_{res}^{Y_{\alpha}}}{\partial x_{k}} \right) + \overline{\rho} \widetilde{Y}_{\alpha} + \overline{\rho} \Omega_{\theta_{\alpha}}$$
(4.17)

Pour rappel, la moyenne introduite par Ghirelli et Leckner est définie comme suit pour la quantité ϕ .

$$\widehat{\phi} = \frac{\overline{\rho Y_{\alpha} \phi}}{\overline{\rho Y_{\alpha}}} = \frac{\overline{\rho Y_{\alpha} \phi}}{\overline{\rho} \widetilde{Y_{\alpha}}} = \frac{\overline{\rho} \widetilde{Y_{\alpha} \phi}}{\overline{\rho} \widetilde{Y_{\alpha}}} = \frac{\widetilde{Y_{\alpha} \phi}}{\widetilde{Y_{\alpha}}}$$
(4.18)

C'est donc une moyenne pondérée par la masse de l'espèce α , i.e. $\rho_{\alpha} = \rho Y_{\alpha}$. Le terme source dû à la réaction chimique s'exprime quant à lui par :

$$\Omega_{\theta_{\alpha}} = \omega_{\alpha} \tau_{\text{res}}^{Y_{\alpha}} \quad \text{si} \quad \omega_{\alpha} < 0$$

$$\Omega_{\theta_{\alpha}} = 0 \quad \text{si} \quad \omega_{\alpha} > 0 \quad (4.19)$$

Ce terme source réactif a une grande importance lorsqu'on considère une variable réactive. En effet, si on considère une espèce particulière, le combustible par exemple, la réaction chimique va faire diminuer sa quantité. La quantité de temps de résidence, $\overline{\rho} \widetilde{Y}_{\alpha} \widehat{\tau}_{res}^{Y_{\alpha}}$, doit donc diminuer elle-aussi car, si elle reste constante, comme la quantité de combustible a diminué, le temps de résidence du combustible va être artificiellement augmentée. Ne pas prendre en compte ce terme source chimique induirait donc un vieillissement sous l'effet de la réaction. Si on considère maintenant une espèce qui apparaît sous l'effet de la réaction, les produits de combustion par exemple, l'âge de ces derniers est initialement nul, le terme source doit donc l'être lui aussi.

Le temps qui nous intéresse ici est le temps de résidence, ou l'âge, d'une particule fluide pure, c'est-à-dire une particule fluide dont la composition correspond à $\xi = 1$ ou $\xi = 0$. On introduit alors la quantité de temps de résidence de la masse issue de l'entrée de combustible ou de l'entrée d'oxydant, respectivement $\hat{\tau}_{res}^{\xi=1}$ et $\hat{\tau}_{res}^{\xi=0}$. Comme la fraction de mélange est un scalaire passif, le terme réactif disparait dans l'équation de transport de ces quantités.

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{\xi} \widehat{\tau}_{\text{res}}^{\xi=1}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_k \widetilde{\xi} \widehat{\tau}_{\text{res}}^{\xi=1}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{\xi} \widehat{\tau}_{\text{res}}^{\xi=1}}{\partial x_k} \right) + \overline{\rho} \widetilde{\xi}$$
(4.20)

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{\rho}\left(1-\widetilde{\xi}\right)\widehat{\tau}_{res}^{\xi=0} + \frac{\partial}{\partial x_k}\overline{\rho}\widetilde{u}_k\left(1-\widetilde{\xi}\right)\widehat{\tau}_{res}^{\xi=0} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D_t\frac{\partial}{\partial x_k}\left(1-\widetilde{\xi}\right)\widehat{\tau}_{res}^{\xi=0}\right) + \overline{\rho}\left(1-\widetilde{\xi}\right)$$
(4.21)

Finalement, en négligeant les fluctuations de ce temps de résidence par rapport à la valeur moyenne de ce dernier, on obtient une évaluation du temps de résidence des particules fluides pures. Dans le cadre de l'approche LES de Enjalbert et al. (ENJALBERT et al., 2012), l'écoulement est supposé suffisamment bien résolue pour que la variation de temps de résidence en sous maille soit négligeable. Cependant, dans la présente approche, les fluctuations du temps de résidence doivent être prises en compte puisque seules les grandeurs moyennes d'un point de vue statistique sont résolues, le temps de résidence en fonction de ξ est alors donnée par :

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(1 + \frac{\xi}{\widetilde{\xi} - \xi}\right) + \widehat{\tau}_{\rm res}^{\xi=0} \quad \text{si} \quad \xi \in \left[0; \widetilde{\xi}\right] \tag{4.22}$$

$$\tau_{\rm res}\left(\xi\right) = \tau_{\xi} \ln\left(\frac{\widetilde{\xi}-1}{\widetilde{\xi}-\xi}\right) + \widehat{\tau}_{\rm res}^{\xi=1} \qquad \text{si} \quad \xi \in \left]\widetilde{\xi}; 1\right] \tag{4.23}$$

4.2.4 Evaluation du taux de production chimique

La comparaison des deux échelles temporelles τ_{ign} et τ_{res} , précédemment introduites, permet donc de déterminer, grâce à l'hypothèse de chimie brusque, le domaine d'autoinflammation. Le taux de production est ensuite calculé en considérant que les particules situées dans le domaine d'auto-inflammation sautent instantanément de la droite de mélange IEM vers la droite d'équilibre. Le taux de production est donc la contribution de tous les sauts de ces particules, ces derniers étant calculés de la même manière que pour les sauts du modèle à chimie brusque standard, voir annexe A

Un schéma de principe du couplage du modèle à chimie brusque avec le code de mécanique des fluides numérique est présenté sur la figure 9.13. Ce schéma met en évidence

la simplicité de mise en oeuvre du modèle. En effet, une fois la tabulation du temps chimique fourni, le modèle ne nécessite pas de paramétrage particulier de constante de modélisation. A titre d'exemple, on peut remarquer qu'il est intrinsèquement capable de reproduire le comportement induit par une variation du taux de dissipation scalaire. Le temps de mélange scalaire augmentant avec une diminution du taux de dissipation scalaire, le temps de mélange est plus grand dans les zones de faible dissipation scalaire. Or, dans la présente modélisation, le temps de résidence est proportionnel au temps de mélange scalaire, voir Eq. (4.22)-(4.23). Le temps de résidence est donc plus grand dans les zones où le temps de mélange scalaire est plus grand et donc dans les zones où le taux de dissipation scalaire est plus petit. Comme le domaine d'inflammabilité est déterminé par la comparaison entre le temps de résidence et le temps d'auto-allumage, l'auto-allumage se fait préférentiellement dans les zone où le temps de résidence est le plus élevé et le temps d'auto-allumage le plus faible. Finalement, l'auto-allumage se fait prioritairement dans les zone avec un taux de dissipation scalaire faible (temps de résidence élevé) et pour une fraction de mélange égale à $\tau_{\rm MR}$ (temps d'auto-allumage faible). Le comportement observé par Mastorakos et al. (MASTORAKOS et al., 1997) est donc bien retrouvé avec le modèle à chimie brusque.



Code CFD (N3S_Natur)

Modèle chimie brusque

FIGURE 4.7: Schéma de principe de l'implémentation du modèle à chimie brusque avec prise en compte de l'auto-allumage.

Chapitre 5

Applications, flammes jets supersoniques

Comme précisé précédemment, l'allumeur torche consiste en un jet de gaz chaud constitué d'un mélange oxydant et entouré d'une couronne d'hydrogène qui, dans un premier temps, est sonique. La flamme jet étudiée par Cheng (CHENG et al., 1994) fournit, de ce point de vue, un cas test représentatif. En effet, ce montage expérimental consiste en une injection d'hydrogène sonique entourée d'un courant d'air vicié supersonique chaud. Les conditions ainsi obtenues permettent l'observation d'auto-allumage et la stabilisation d'une flamme non-prémélangée détachée.

5.1 Flamme jet supersonique de Cheng (CHENG et al., 1994)

5.1.1 Description du cas test

Ce brûleur, représenté schématiquement sur la figure 5.1, consiste en un jet d'hydrogène sonique entouré d'un co-courant annulaire d'air vicié chaud à Mach 2. Ce dernier est issu de la combustion d'un mélange pauvre au sein d'une chambre de combustion primaire interne au brûleur. Les produits de combustion sont ensuite détendus dans une tuyère convergente/divergente jusqu'à atteindre Mach 2 et une température de 1250K en sortie. Les courants ainsi obtenus débouchent à l'air libre sous une pression de 1.12 bar pour celui d'hydrogène et 1.07 bar pour l'air vicié. Cette légère surpression fait alors apparaître un système d'ondes de compression et d'expansion successives d'assez faible amplitude, mais qui peuvent néanmoins provoquer localement une légère augmentation de la pression. Les conditions de fonctionnement sont résumées dans le tableau 5.1.1.



et al., 1994).	tif expérimenta	FIGURE 5.1:
	al de Ch	Schéma
	eng	du
	(CHENG	disposi-

$0.00072~\mathrm{m}$	e l'injecteur :	Epaisseur des lèvres de
$0.00236~\mathrm{m}$	$r d_j$:	Diamètre de l'injecteu
$0.01778 \mathrm{\ m}$		Diamètre extérieur D :
0.580	0	Y_{N_2}
0.175	0	Y_{H_2O}
0.245	0	Y_{O_2}
0	1.0	Y_{H_2}
		Fractions massiques :
1420	1780	Vitesse, m/s
107000	112000	Pression, Pa
1250	545	Température, K
		Ma
2.0	1.0	Nombre de Mach,
Air vicié	Jet d'hydrogène	

DSi- TABLE 5.1: Conditions d'entrée et géométrie de NG la flamme de Cheng (CHENG et al., 1994).

MÖBUS et al., 2003; BOIVIN et al., 2012; MOULE, 2013). référence, on peut par exemple citer (BAURLE et al., 1995; BAURLE et GIRIMAJI, 2003; de combustion supersonique, comme le montre le nombre important d'étude y faisant est aujourd'hui considérée comme un cas test de référence pour la validation de modèles base de données constituée par l'ensemble de ces mesures fait que la flamme jet de Cheng radical OH pour plusieurs abscisses obtenus par mesure RAMAN et LIF. Enfin, Dancey les valeurs moyennes et RMS de la température, des espèces majoritaires ainsi que le profils de vitesse obtenus par LDA. Cheng et al. (CHENG et al., 1994) ont ensuite publié molécules de diazote et de dioxygène qui ont été mesurées par DRASC ainsi que des 1988) ont présenté des profils de température moyenne et de concentration moyenne des été documentées dans la littérature. Tout d'abord Jarrett et al. (JARRETT JR et al., de combustion supersonique. Plusieurs mesures concernant ce montage expérimental ont (DANCEY, 1996) a mesuré les profils radiaux de vitesse moyenne et RMS par LDA. La Cette expérience a été développée afin de servir de cas test pour la validation de modèle

limites associées sont présentés sur la figure 5.2. Le maillage non-structuré associé à ce de ce montage est menée. Le domaine de calcul correspondant ainsi que les conditions thodologie retenue pour la majorité des précédentes études, une simulation axisymétrique métriques. périmental ainsi que les mesures effectuées avec une autre méthode sont fortement axisy-Bien que les mesures de Cheng et al. présentent une légère dissymétrie, le montage ex-Ainsi, pour limiter le coût de la simulation numérique et pour suivre la mé-



FIGURE 5.2: Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numérique de la flamme de Cheng (CHENG et al., 1994)

domaine est composé d'environ 45000 noeuds et 90000 éléments trigonaux. Il est raffiné a priori dans la zone centrale du jet, zone (2), et en proche injecteur, zone (1). Une zone tampon, zone (3), est aussi ajoutée autour du jet afin de correctement capturer le développement de la couche de mélange. Les entrées supersoniques sont traitées avec une condition de Dirichlet alors que le flux de masse ainsi que la température sont imposés à l'entrée subsonique 3. Une condition limite mixte permettant l'entrée et la sortie du fluide est appliquée sur la frontière supérieure du domaine, cela pour éviter la création d'une zone de recirculation au sein de la zone tampon. Enfin, comme l'écoulement en sortie du domaine est à la fois subsonique et supersonique un traitement spécial doit être appliqué. Cette condition dénommée condition de compatibilité en pression dans N3S_NATUR, elle correspond à une condition limite parfaitement non réfléchissante pour les zones supersoniques et à une condition limite parfaitement réfléchissante avec un niveau de pression imposé à l'infini pour les zones subsoniques. Pour plus de détails, on pourra consulter (MARTIN et CHARGY, 2001).

5.1.2 Evaluation du temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire

Le modèle de combustion précédemment introduit est fortement dépendant de la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions. L'approximation de cette trajectoire repose sur l'hypothèse de chimie brusque qui n'est utilisable que si l'emplacement des sauts d'allumage des particules fluides dans l'espace des compositions est connu. L'emplacement de ces sauts est, quant à lui, déterminé par la comparaison d'un temps chimique avec un temps mécanique. Or, ce temps mécanique est dépendant du temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire. Ce temps étant défini comme $\tau_{\xi} = \tilde{\xi}''^2 / \tilde{\chi}_{\xi}$, l'hypothèse de fermeture du taux de dissipation scalaire apparaît donc comme un point



FIGURE 5.3: Profils transverses de la fraction molaire moyenne \widetilde{X}_{H_2O} et de la température moyenne \widetilde{T} pour différentes abscisses X/d_j en aval de l'injecteur. Comparaisons entre les résultats issus de la simulation numérique et les données expérimentales.

critique du modèle.

Afin d'évaluer l'influence de cette hypothèse de fermeture sur la réponse du modèle de combustion, le taux de dissipation scalaire est tout d'abord fermé en utilisant la modélisation usuelle de relaxation linéaire, $\tilde{\chi}_{\xi} = \tilde{\xi''}^2/\tau_{\xi}$ avec $\tau_{\xi} = C_{\xi}\tau_t$. Plusieurs calculs ont alors été menés en faisant varier la valeur de la constante C_{ξ} . L'influence de la valeur retenue sur les profils de fraction molaire moyenne d' H_2O et de température moyenne est illustrée sur la figure 5.3. Dans cette figure, les profils sont tracés pour $C_{\xi} = 2.0$ et $C_{\xi} = 0.25$, ces valeurs ont été choisies pour encadrer la valeur habituelle de $C_{\xi} = 0.5$, introduite par Béguier et al. (BÉGUIER et al., 1978). Aucune différence ne semble être induite par la variation de cette valeur pour la première abscisse $X/d_j = 0.85$, ce qui était attendu puisqu'aucune réaction chimique ne se produit à cet endroit. En s'éloignant de l'injection, pour $X/d_j = 10.8$ et $X/d_j = 21.5$, un pic de température dont l'amplitude dépend de la valeur de C_{ξ} apparaît. Ce pic de température est associé au phénomène d'auto-allumage qui se produit dans la couche cisaillée, l'influence de la constante C_{ξ} sur le processus de combustion n'est donc plus négligeable.

La valeur de C_{ξ} influence donc de manière non négligeable le développement de la flamme.

De plus, bien que Béguier *et al.* (BÉGUIER et al., 1978) avancent une valeur particulière de cette constante pour une turbulence pleinement développée, elle ne semble pas justifiée en champ proche de l'injecteur. En effet, les échelles caractéristiques d'injection de la turbulence et du scalaire ne sont pas forcément les mêmes, supposer que la constante de proportionnalité entre le temps intégral de la turbulence et le temps caractéristique intégral du champ scalaire ne varie pas au sein de l'écoulement est donc susceptible de mener à une évaluation erronée du mélange en proche injecteur. Afin d'évaluer les limites de l'approche C_{ξ} constant, deux calculs ont été menés, un où le taux de dissipation scalaire (SDR pour Scalar Dissipation Rate) est transporté et un où il est fermé par un modèle de relaxation linéaire avec une valeur constante $C_{\xi} = 0.5$. Les champs de SDR obtenus sont présentés sur la figure 5.4. Bien que ces deux champs soient similaires loin de l'injecteur, ils diffèrent significativement dans le sillage immédiat de l'injecteur, en particulier en ce qui concerne leurs valeurs maximales. Pour faciliter l'analyse de cette différence nous allons nous intéresser à l'évolution, à différentes abscisses, des termes modélisés de production/destruction qui apparaissent dans l'équation de transport du SDR moyen.

Une valeur positive implique une production de SDR moyen alors qu'une valeur négative traduit une destruction. Les profils sont alors tracés sur la droite de la figure 5.4. A la première abscisse, $X/d_j = 2$, le terme (V) de production par le gradient moyen de la fraction de mélange ainsi que le terme (VIII) associé aux effets de dissipation moléculaire sont dominants. En s'éloignant de l'injecteur et au fur et à mesure que X/d_i augmente, la contribution associée au terme (V) diminue et ce sont les termes (VII) et (VIII) qui deviennent dominants. Une analyse d'ordre de grandeur menée par Mantel et Borghi (MANTEL et BORGHI, 1994) avait déjà permis d'identifier ces deux termes comme étant les deux termes dominants du bilan de $\tilde{\chi}_{\xi}$ en turbulence pleinement développée. En champ lointain, le comportement de l'équation de transport du SDR apparaît donc comme étant piloté par l'équilibre entre le terme de production par l'étirement turbulent (VII) et le terme de dissipation associé à la courbure du champ scalaire (VIII). Comme précisé dans le chapitre 2 sur le mélange scalaire, supposer que le SDR n'est régi que par l'équilibre entre ces deux termes (VII) et (VIII) permet de retrouver le modèle de relaxation linéaire. L'hypothèse de proportionnalité entre τ_t et τ_{ξ} est pertinente en champ lointain, *i.e.* en turbulence pleinement développée. Le comportement du rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} est d'ailleurs en accord avec cette remarque puisqu'il tend vers la valeur asymptotique constante égale à 0.5 à mesure qu'on s'éloigne de l'injection.

La fermeture retenue pour le SDR a donc un impact non négligeable sur le champ de ce dernier. Comme le SDR est le terme de dissipation dans l'équation de transport de la variance du scalaire, la fermeture du SDR peut donc avoir un impact sur le champ de variance. Les champs de variance de la fraction de mélange des deux simulations précédentes sont alors présentés sur la figure 5.5a. Le champ de gauche a été obtenu avec



FIGURE 5.4: Champs de SDR moyen calculés avec un modèle de relaxation linéaire, $C_{\xi} = 0.5$,(gauche) ou en résolvant son équation de transport (droite). Profils radiaux de rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} et termes de production/destruction de l'équation de transport du SDR moyen pour différentes abscisses en aval de l'injection.

une équation de transport de la variance pour laquelle le SDR était lui aussi transporté alors que le champ de droite a été obtenu avec une équation de transport de la variance pour laquelle le SDR était fermé avec une hypothèse de relaxation linéaire ($C_{\xi} = 0.5$). La comparaison de ces deux champs met en évidence le fort impact de la fermeture du SDR sur le champ de variance en proche injection. Ceci est confirmé par les profils radiaux de variance tracés sur la figure 5.5b. En effet, pour $X/d_i = 2$, l'amplitude de la variance dépend de l'approximation retenue pour évaluer le SDR. Le niveau de variance calculé avec un SDR transporté est plus élevé que celui calculé avec un SDR fermé avec une hypothèse de relaxation linéaire, cette différence diminuant avec la distance à l'injection. Ce comportement s'explique en comparant les termes de production et de dissipation de l'équation de transport de la variance tracés sur la droite de la figure 5.5b. L'amplitude du terme de dissipation est moins importante lorsque le SDR est transporté alors que l'amplitude du terme de production, $P_{\widetilde{\epsilon''^2}}$, n'est pas affectée par la fermeture du SDR. Ce comportement est d'ailleurs cohérent avec l'évolution de C_{ξ} présentée sur la figure 5.6. En zone proche de l'injection, le rapport du temps scalaire sur le temps turbulent est de l'ordre de l'unité alors qu'avec le modèle de relaxation linéaire il est supposé égal à 0.5. Cette sous-estimation de C_{ξ} induit une sur-estimation du SDR, et donc une sous-estimation de la variance.

En prenant en compte les termes d'ordre de grandeur inférieur en terme de Re_t , l'équation de transport du SDR permet de s'affranchir de l'hypothèse d'équilibre entre la production par l'étirement turbulent (VII) et la dissipation associée à la courbure du champ scalaire (VIII) et donc d'étendre le domaine d'utilisation de la fermeture du SDR moyen à la zone en proche injection.

Deux simulations sont alors conduites, l'une en fermant le SDR moyen avec un modèle de relaxation linéaire où $C_{\xi} = 0.5$ et l'autre où l'équation de transport du SDR moyen est résolue. Les profils de fraction molaire d' H_2O , \widetilde{X}_{H_2O} , et de température moyenne, \widetilde{T} , sont tracés sur la figure 5.6. Ces tracés ne mettent pas en évidence de différence flagrante et les deux approches semblent à même de capturer correctement le développement de la flamme. En champ proche, aucune différence entre les deux approches n'est visible. Puis, pour $X/d_j = 10.8$, le pic de température dû à l'auto-allumage apparaît quelle que soit l'approche employée même si son amplitude semble un peu élevée, ceci étant légèrement accentué avec la résolution de l'équation de transport. En champ lointain, pour $X/d_j = 42.6$, le modèle de relaxation linéaire induit un niveau de température légèrement plus élevé, mais aucun des deux types de fermeture ne permet d'atteindre les niveaux de température mesurées. Cette sous-estimation de la température en champ lointain apparaît aussi dans les études précédemment menées avec une approche basée sur l'utilisation de la fraction de mélange. Cette différence pourrait alors être attribuée à l'entraînement d'air extérieur par le jet et donc un effet de troisième entrée qui est



FIGURE 5.5: a) Champs de variance de la fraction de mélange calculés avec : l'équation de transport du SDR moyen (gauche), un modèle de relaxation linéaires des fluctuations scalaires (droite). b) Variation radiale de la variance de la fraction de mélange calculée avec l'équation de transport du SDR $\widetilde{\xi''^2}$ ou le modèle de relaxation linéaire des fluctuations $\widetilde{\xi''^2}_{relax}$, termes de production $P_{\widetilde{\xi''^2}}$ et de dissipation de la variance, tracés pour différentes abscisses en aval de l'injection .



FIGURE 5.6: Profils radiaux de fraction molaires d' H_2O , \tilde{Y}_{H_2O} , et de température moyenne, \tilde{T} , pour différentes abscisses en aval de l'injection.

complètement négligée par l'approche à fraction de mélange standard qui repose sur une hypothèse de milieu à deux entrées.

Enfin, l'accord obtenu entre le calcul et les mesures de fraction molaires d' H_2O est moins bon que celui obtenu pour ceux de température. Il est alors important de garder à l'esprit que les profils de fraction molaire issus de la simulation sont des quantités reconstruites à partir des fractions massiques qui sont, elles, transportées. Ainsi, les fluctuations de composition mises en évidence expérimentalement sont complètement ignorées lors de la procédure de reconstruction et elles peuvent donc expliquer, au moins en partie, les différences observées.

Afin de mieux comprendre pourquoi les deux fermetures donnent des résultats similaires, l'évolution du rapport du temps scalaire sur le temps turbulent, C_{ξ} , ainsi que les termes de production/destruction du membre de droite de l'équation de transport du SDR moyen, sont tracés le long de l'iso-ligne stoechiométrique, $\xi = \xi_{st}$, sur la figure 5.7. En proche injection, le terme (V), qui représente la production induite par le gradient moyen de fraction de mélange, le terme (VIII), qui est le terme de dissipation, et (VII), qui est la production par l'étirement turbulent du champ de concentration, sont dominants. La



FIGURE 5.7: Profils de rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} et des termes sources normalisés de production / destruction de l'équation de transport du SDR moyen tracés en fonction de la coordonnée axiale normalisée, X/d_j , le long de la ligne stoechiométrique $\tilde{\xi} = \xi_{st}$.

production de SDR compense sa dissipation et induit donc une augmentation significative du SDR moyen. Puis, autour de $X/d_j \sim 0.2$, le terme de dissipation devient dominant et le SDR moyen diminue rapidement. Au niveau de l'abscisse $X/d_j \sim 1$, les termes (VII) et (VIII) deviennent les plus importants et le restent jusqu'en champ lointain, le SDR moyen se stabilise. Un comportement similaire est observé pour le rapport C_{ξ} . Il augmente rapidement jusqu'à $X/d_j \sim 0.2$ où il commence à diminuer puis se stabilise à l'abscisse $X/d_j \sim 1$ et garde une valeur à peu près constante, $C_{\xi} = 0.5$, jusqu'en champ lointain. Rappelons maintenant que le modèle de relaxation linéaire peut être retrouvé en faisant l'hypothèse d'équilibre entre les termes (VII) et (VIII) de l'équation de transport du SDR moyen. Ce modèle est donc pertinent à partir du moment où ces deux termes sont dominants c'est-à-dire pour $X/d_j > 1$ dans le cas présent. Or, l'auto-allumage, et donc le début de la combustion, se produit aux alentours de $X/d_j \approx 10$, abscisse pour laquelle le mélange est correctement évaluée avec le modèle de relaxation linéaire. Il est donc logique que les deux approches conduisent à des résultats équivalents, voir figure 5.6.

La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen dégénère donc bien vers le modèle de relaxation linéaire des fluctuations du scalaire lorsque ce dernier est pertinent. Cependant, l'intérêt principal du transport du SDR moyen est d'être aussi valable en proche injecteur. C'est pourquoi, dans un second temps, nous allons nous intéresser à la flamme jet de Beach (BEACH, 1972) qui est une flamme jet supersonique



FIGURE 5.8: Schéma du dispositif expérimental de Beach (BEACH, 1972).

	Jet Hydrogène	Air Vicié
Nombre de Mach,	2.00	1.90
Ma		
Température, K	251	1495
Pression, Pa	100000	100000
Vitesse, m/s	2432	1510
Fractions massiques :		
Y_{H_2}	1.0	0
Y_{O_2}	0	0.241
Y_{H_2O}	0	0.281
Y_{N_2}	0	0.478
Diamètre extérieur D		$0.0653 \mathrm{~m}$
Diamètre de l'injecteu	$0.009525 {\rm \ m}$	
Epaisseur des lèvres d	e l'injecteur :	$0.0015~\mathrm{m}$

TABLE 5.2: Conditions d'entrée et géométrie de la flamme de Beach (BEACH, 1972), voir aussi Evans (EVANS et al., 1978).

avec une longueur de lift-off de l'ordre de 2.5 diamètres.

5.2 Flamme jet supersonique de Beach (BEACH, 1972)

5.2.1 Description du cas test

Ce brûleur, représenté schématiquement sur la figure 5.8, consiste en un jet d'hydrogène à Mach 2 entouré d'un co-courant annulaire d'air vicié chaud à Mach 1.9. Ce dernier est issu de la combustion d'un mélange pauvre au sein d'une chambre de combustion primaire interne au brûleur. Les produits de combustion sont ensuite détendus dans une tuyère convergente/divergente jusqu'à atteindre Mach 1.9 et une température de 1495K en sortie de buse. Les courants ainsi obtenus débouchent à l'air libre avec une pression de 1.00 bar. Les conditions de fonctionnement sont résumées dans le tableau 5.2.1.

Cette expérience est la première étude de flamme jet supersonique suffisamment documentée pour permettre son utilisation en tant que cas test pour la validation de modèle de combustion supersonique. Elle peut d'ailleurs être considérée comme une étape classique de validation de tels modèles (BAURLE et al., 1995; HSU et al., 1994; MÖBUS et al., 2003; ZHENG et BRAY, 1994). Cependant, peu de mesure ont étés réalisées et les méthodes utilisables à l'époque n'avaient pas la précision de celles qui ont pu être mises en oeuvre depuis. Ainsi, les concentrations d'espèce majoritaires ont étés mesurées par prélèvement et chromatographie en phase gazeuse et les pressions on étés mesurées grâce à des sondes pitot (BEACH, 1972; EVANS et al., 1978).



FIGURE 5.9: Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numérique de la flamme de Beach (BEACH, 1972).

Afin de limiter le coût de la simulation et comme la majorité des précédentes études, une simulation axisymétrique de ce montage est menée. Le domaine de calcul et les conditions limites associées sont présentés sur la figure 5.9. Le maillage non-structuré associé à ce domaine est composé d'environ 54000 noeuds et 107000 éléments trigonaux. Il est raffiné *a priori* dans la zone centrale du jet, zone (2), et en proche injecteur, zone (1). Une zone tampon, zone (3), est aussi ajoutée autour du jet afin de correctement capturer le développement de la couche de mélange. Comme pour la simulation du cas test de Cheng, les entrées supersoniques sont traitées avec une condition de Dirichlet alors que le flux de masse ainsi que la température sont imposés à l'entrée subsonique 3. Une condition limite mixte permettant l'entrée et la sortie du fluide est appliquée sur la frontière supérieure du domaine pour éviter la création d'une zone de recirculation au sein de la zone tampon. Enfin, comme l'écoulement en sortie du domaine est à la fois subsonique et supersonique, une condition de compatibilité en pression est appliquée à cette frontière.

5.2.2 Résultats numériques

Beach a observé que la flamme avait un délai d'émission de l'ordre de 2.5 diamètres. La flamme qu'il obtient est donc une flamme décollée dont l'ordre de grandeur de la hauteur de décollement est le même que celui du délai d'émission observé. Comme expliqué dans l'analyse des résultats précédents, l'hypothèse de relaxation linéaire des fluctuations du champ scalaire n'est adaptée que si la combustion se produit dans une zone ou l'hypothèse d'équilibre entre le terme de dissipation (VIII) et de production (VIII) de l'équation de transport du SDR moyen est pertinente. Afin d'évaluer la validité de cette hypothèse, le profil du rapport du temps scalaire sur le temps turbulent, C_{ξ} , le long de l'iso-ligne stoechiométrique, $\xi = \xi_{st}$, est tracée sur la figure 5.10. On constate alors que ce rapport se stabilise à l'abscisse $X/d_j \approx 3$. La fermeture du SDR avec le modèle de relaxation linéaire n'est donc pertinente qu'a partir de cet abscisse. Cependant, la combustion se produit



FIGURE 5.10: Rapport du temps scalaire sur le temps turbulent C_{ξ} tracé le long de l'iso-ligne stoechiométrique $\tilde{\xi} = \xi_{st}$ en fonction de la distance axiale normalisée X/d_j .

pour des abscisses plus petites puisque la hauteur de stabilisation est de l'ordre de $2.5d_j$. La résolution de l'équation de transport du SDR moyen semble donc nécessaire. Notons tout de même que C_{ξ} ne varie plus beaucoup après $X/d_j \approx 1.5$, la fermeture du SDR par le modèle de relaxation linéaire devrait donc tout de même donner de bon résultats.

Deux simulations réactives de la flamme jet de Beach sont alors réalisées, l'une en résolvant l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen et l'autre en fermant le SDR moyen avec une hypothèse de relaxation linéaire. Les profils de fraction massique des espèces majoritaires issus de ces simulations sont alors tracés pour différentes abscisses sur la figure 5.11. Les résultats numériques ainsi obtenus sont en bon accord avec les mesures expérimentales. La qualité de l'accord est encore meilleure en champ lointain où la localisation et l'amplitude du pic de vapeur d'eau sont bien calculées. De plus, l'analyse des profils d'espèce inerte, N_2 , permet d'affirmer que l'écoulement est correctement capturé. Cependant, pour le premier plan de mesure en $X/d_i = 8.26$, l'amplitude du profil de fraction massique de dihydrogène est sur-estimée par rapport aux données expérimentales ce qui entraine une sous-estimation de la quantité de vapeur d'eau et d'azote. Cette tendance se retrouve aussi dans les études numériques précédemment menées (HSU et al., 1994; BAURLE et al., 1995; MÖBUS et al., 2003). Cette mauvaise adéquation peut être expliquée par l'incertitude concernant les conditions limites d'entrée, en particulier en présence de radicaux à haute température, comme c'est la cas ici dans le courant d'air vicié. Ainsi, une quantité non négligeable d'hydrogène, d'azote ou de vapeur d'eau peut avoir été transformée en radicaux. De plus, compte tenu de la méthode de mesure par prélèvement, l'état du gaz prélevé a le temps de changer avant de pouvoir être analysé. Les espèces radicalaires étant fortement instables, elles sont susceptibles de se recombiner avant que leur présence ne soit détectée, ce qui pourrait aussi expliquer la plus forte quantité d'eau observée dans les mesures que dans les calculs. Pour finir, il est intéressant de noter que la résolution de l'équation de transport du SDR moyen permet d'améliorer



FIGURE 5.11: Profils transverses de fraction massique de H_2O , H_2 , O_2 et N_2 pour différentes abscisses X/d_j en aval de l'injection. Comparaison entre la simulation numérique, avec l'équation de transport du SDR moyen ou avec l'hypothèse de relaxation linéaire des fluctuations, et les données expérimentales de (BEACH, 1972).

les résultats de la simulation à la première abscisse de mesure, le pic de vapeur d'eau ayant une amplitude plus proche de celle des mesures. Pour les autres abscisses, aucun différence significative n'est observée. Ces résultats sont cohérents avec l'analyse faite de la figure 5.10. Bien que l'utilisation de l'équation de transport du SDR moyen soit justifiée, la faible différence entre la valeur du temps de mélange scalaire obtenu à partir de ce SDR moyen et la valeur de celui obtenu en faisant l'hypothèse de proportionnalité avec le temps intégral de la turbulence n'induit qu'un impact limité sur la qualité de la modélisation du mélange.

5.3 Temps de résidence

Le modèle de combustion supersonique précédemment présenté repose sur la considération d'un temps de résidence localement défini. Comme précisé dans le chapitre 4 consacré à la modélisation de la combustion supersonique, ce temps de résidence est le fruit de deux contributions. L'une correspondant au temps que met une particule fluide



FIGURE 5.12: Champ de temps de résidence associé au combustible, $\hat{\tau}_{res}^{\xi=1}$,(haut) et à l'oxydant, $\hat{\tau}_{res}^{\xi=0}$, (bas) calculés pour la configuration de Cheng (CHENG et al., 1994).

pure pour arriver au point considéré : ce temps caractérise la convection des particules fluides. L'autre traduit le temps que met une particule fluide pure pour arriver à la composition considérée : ce temps caractérise le mélange à petite échelle. L'âge des particules fluides pures est évalué en transportant la quantité de temps de résidence et il est assimilé au temps de résidence moyen d'une particule pure, $\hat{\tau}_{\rm res}^{\xi=0}$ pour une particule issue du courant d'oxydant et donc composée d'oxydant pur et $\hat{\tau}_{\rm res}^{\xi=1}$ pour une particule issue du courant de combustible. Les champs obtenus pour ces deux temps de résidence sont tracés sur la figure 5.12 pour l'expérience de Cheng et sur la figure 5.13 pour l'expérience de Beach. On remarque sur ces champs que le temps de résidence se comporte de la manière attendue : il augmente plus lentement dans les zones où l'écoulement est plus rapide et inversement. Ceci confirme bien l'influence dominante du champ de vitesse sur ce temps de résidence, les particules fluides ne "vieillissant" que sous l'effet de la convection par l'écoulement.

Le temps de résidence total, prenant en compte à la fois le temps de convection et le temps de mélange, est tracé sur la figure 5.14 pour les trois localisations précisées sur la figure 5.13. Ces deux contributions sont clairement visibles. Celle de la convection correspond aux valeurs du temps de résidence en $\xi = 0$, pour une particule issue du courant d'oxydant, et en $\xi = 1$, pour une particule issue du courant de combustible. Celle du mélange permet, quant à elle, de reconstruire le temps de résidence pour les autres valeurs de la fraction de mélange. Alors que la contribution convective est à peu près équivalente pour les trois courbes, la contribution du mélange varie fortement. En effet,



FIGURE 5.13: Champ de temps de résidence associé au combustible (haut) et à l'oxydant (bas) calculés pour la configuration de Beach (BEACH, 1972). Cercles : localisation des profils tracés sur la Fig. 5.14.



FIGURE 5.14: Profils de temps de résidence tracés en fonction de la fraction de mélange en trois points différents (voir Fig. 5.13 correspondant à des valeurs de fraction de mélange moyenne égales à : $\tilde{\xi} = 0.5$, $\tilde{\xi} = 0.05$ et $\tilde{\xi} = 0.95$ at $X/d_j = 4.25$.

ces trois localisations correspondent à des valeurs moyennes de la fraction de mélange différentes et la contribution du mélange au temps de résidence est évaluée grâce à une approche reposant sur le modèle IEM, elle est donc nécessairement différente pour ces trois points. L'allure de la courbe est d'ailleurs directement dictée par le modèle IEM qui impose un temps infini pour mélanger jusqu'à la valeur moyenne ce qui se traduit par le pic autour de la valeur moyenne. Enfin, on peut remarquer que pour cette flamme, ce n'est pas la contribution convective qui permet l'auto-allumage mais la contribution due au mélange. L'approche négligeant la contribution convective proposée par IZARD et MURA (2008) semble donc adaptée pour les flammes supersoniques.

Conclusions

La pertinence, ainsi que la robustesse du modèle MIL à chimie brusque pour décrire la combustion non-prémélangée en écoulement supersonique ont été montrées dans cette partie. Ce modèle a été utilisé conjointement avec une représentation améliorée des échelles caractéristiques de l'écoulement. Ainsi, une équation de transport de la quantité de temps de résidence a été implémentée afin d'évaluer le temps de résidence moyen associé au courant d'oxydant et au courant de combustible. Une équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen a aussi considérée afin d'évaluer le temps de mélange scalaire. Le modèle a alors été appliqué à la simulation de deux flammes supersoniques étudiées par Beach et Cheng et al.. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales. De plus, l'analyse de sensibilité au modèle de fermeture du taux de dissipation scalaire moyen a permis de mettre en évidence les lacunes de l'approche usuelle de fermeture par relaxation linéaire. En effet, cette dernière n'est pertinente qu'en turbulence homogène isotrope et n'est donc pas adaptée en proche injection. La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen et n'est donc pas adaptée en proche injection. La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen et n'est donc pas adaptée en proche injection. La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen et n'est donc pas adaptée en proche injection. La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen est alors proposée afin de palier cette lacune.

L'approche présentée dans cette partie est donc à même de restituer les niveaux de température et les quantités d'espèces majoritaires. Cependant, sa sensibilité aux conditions aux limites de quantité de temps de résidence ne peut être ignorée. En effet, cette quantité permet d'évaluer le temps de résidence moyen et par comparaison avec le temps d'autoallumage, l'endroit de l'écoulement où le mélange s'auto-enflamme. Dans le cadre de cette étude il a été choisi de définir le temps de résidence comme le temps qui s'est écoulé depuis que la particule fluide considérée est entrée dans le domaine de calcul. Cependant les molécules constituant le fluide existent avant l'injection, la période d'induction avant autoinflammation peut donc avoir commencé avant que les molécules en question ne sortent de l'injecteur. Bien que cette limite de l'approche ne semble pas problématique pour les écoulements à haute vitesse, puisque la contribution du temps de vie des particules pure est négligeable, l'utilisation de cette méthode pour les écoulements basse vitesse, où cette même contribution n'est a priori plus négligeable, nécessiterait plus d'investigation de ce coté. La seconde hypothèse forte faite pour l'écriture du modèle est que les particules fluides considérées sont à leur température locale depuis l'injection. Les effets de variation de température au cours de la vie de de ces particules ne sont alors pas pris en compte. Ceci semble particulièrement discutable puisque la température joue un rôle prédominant dans le processus d'auto-allumage. Une solution pourrait alors être d'introduire un vieillissement thermique. Pour cela une équation de transport de "quantité de temps thermique" dépendant du temps depuis lequel la particule est introduite et de la température qu'elle a rencontrée pourrait être résolue. L'idée sous-jacente étant que la particule vieillirait plus rapidement à haute température qu'a basse température. Troisième partie Combustion diphasique

Contexte

Physique de l'écoulement

Dans la partie précédente, nous nous sommes intéressés à la première phase de l'allumage dans laquelle l'allumeur torche est mis en marche. Cette nouvelle partie est consacrée à la deuxième phase de l'allumage d'un moteur fusée. Durant cette phase l'oxygène liquide commence à être injecté. Plusieurs types d'injecteurs existent mais trois grandes familles sont plus courantes pour une application moteur-fusée, voir (ZURBACH, 2004).

- **Injecteurs coaxiaux** Largement utilisés pour le couple d'ergols H_2/LOx , ils présentent de bonnes performances, en particulier en terme de stabilité, mais sont relativement coûteux à réaliser.
- **Injecteur coaxiaux à swirl** Ils sont très utilisés pour le couple d'ergol $K\acute{e}ros \grave{e}ne/LOx$ ou plus largement pour les couples d'ergols stockables gaz liquide ou biliquide, cependant ils peuvent poser problème en paroi.
- **Injecteurs à impact** Ils sont utilisés pour les couples d'ergols stockables biliquide mais restent très délicat à réaliser.

Pour l'application à laquelle cette Thèse est dédiée, les moteurs fusées européens, les injecteurs coaxiaux sont privilégiés. De plus, la pression au sein de la chambre de combustion durant la phase d'allumage est encore basse. L'oxygène liquide se trouve donc dans un état subcritique et les effets de tension de surface ne peuvent pas être négligés, en particulier en ce qui concerne la description de l'atomisation et du spray qui en découle. Un schéma représentatif de ce qui se passe au sein de la chambre de combustion est présenté sur la figure 5.15. L'injecteur considéré étant de type co-axial, le co-courant annulaire d'hydrogène entourant l'injection d'oxygène liquide permet d'atomiser ce dernier. Les gouttes d'oxygène liquide à basse température issues de cette atomisation forment alors un spray et commencent à s'évaporer. Le mélange gazeux d'hydrogène et d'oxygène ainsi obtenu est allumé par interaction avec l'allumeur torche, et la température ainsi que la pression au sein de la chambre de combustion augmentent. De plus, sous l'effet de cet accroissement de température, le flux de chaleur arrivant sur les gouttes de LOx augmente lui aussi, ce qui favorise leur vaporisation. La flamme diphasique présente alors toutes les caractéristiques d'une flamme de diffusion, cette dernière étant localisée à la frontière entre un spray de gouttes d'oxydant baignant dans une atmosphère gazeuse d'oxydant et le combustible gazeux.



FIGURE 5.15: Schéma de la première étape de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique. Dans le cadre de cette partie, seul l'allumage du mélange issu de la première couronne d'injecteurs sera considéré. La phase d'allumage considérée est alors équivalente à l'allumage d'un injecteur coaxial par dépôt d'énergie. Cela nécessite donc d'être capable de décrire aussi fidèlement que possible le spray de gouttelettes tout en prenant en compte les effets qu'induisent ces gouttes sur la phase gazeuse dans laquelle la combustion se produit.

Objectifs

L'objectif de cette partie est donc de mettre au point un outil capable de simuler une flamme de diffusion diphasique telle que celle rencontrée lors de l'allumage d'un moteur fusée. Ce travail s'appuyant sur l'outil de calcul CFD N3S_NATUR et son module CEDILLE, il repose sur une description lagrangienne du spray.

Le transitoire thermique des gouttes composant le spray étant de première importance pour décrire correctement le mélange localement disponible, un modèle de vaporisation incluant ces effets est alors implanté. De plus, le modèle de combustion monophasique présenté dans la première partie de ce manuscrit de Thèse est étendu au cas diphasique en prenant en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation des gouttelettes ainsi que les effets du transitoire thermique de ces dernières sur le mélange localement disponible. Enfin, une correction *a posteriori* est ajoutée afin de prendre en compte les effets de dissociation se produisant à hautes températures.

Chapitre 6

Ecoulements diphasiques et brouillards de gouttelettes

6.1 Equations de transport en milieu multi-phasique

Alors que, lorsqu'il n'y a qu'une seule phase, certaines quantités telle que la densité peuvent être définies partout, dans un milieu à plusieurs phases ces mêmes quantités n'ont de sens que dans la phase au sein de laquelle elles sont définies. Ainsi, dans un milieu liquide/gaz par exemple, la densité a une équation d'évolution dans le liquide et une autre dans le gaz. Il y a donc deux densités différentes, la densité du liquide et la densité du gaz. Ces deux densités pouvant interagir l'une avec l'autre en échangeant de la masse au niveau de l'interface qui les sépare. Si on néglige l'épaisseur des interfaces entre ces deux phases, le milieu peut alors être considéré comme continue par morceaux avec des échanges possibles aux interfaces. Les équations de conservations doivent donc être ré-écrites afin de prendre en compte ces spécificités des milieux multi-phasiques.

Un première méthode a été proposée par Delhaye (DELHAYE, 1974). Elle consiste à considérer les deux milieux de manière distincte en écrivant une équation bilan pour chaque phase et en y adjoignant des conditions limites particulières à l'interface. C'est la même idée que les relations de saut à la traversée d'un choc en écoulement compressible mais l'interface peut apporter de la matière. Cette méthode, bien qu'utilisable pour des milieu avec peu de surface d'interface s'avère vite laborieuse lorsqu'un spray de plusieurs gouttelettes doit être considéré. Drew (DREW, 1983) puis Kataoka (KATAOKA, 1986) ont alors proposé une approche basée sur l'introduction de fonctions indicatrices de phase, permettant ainsi de prolonger la définition des quantités sur l'ensemble du milieu. Lors de l'établissement des équations de transport, la dérivation de cette fonction indicatrice de phase fait apparaître une concentration d'interface locale instantanée qui est ensuite ré-exprimée pour obtenir les termes d'échange aux interfaces. L'obtention de l'ensemble des équations régissant un écoulement multi-phasique turbulent avec cette méthode peut être trouvée dans les Thèses de Naud (NAUD, 2003) et de Beishuizen (BEISHUIZEN, 2008). Plutôt que de reproduire ici le formalisme nécessaire à la dérivation des équations avec la méthode de Drew et Kataoka, et donc refaire le travail de Naud et Beishuizen, les équations de conservation sont établies dans ce qui suit en s'appuyant sur les bilans de distributions associées aux quantités conservées.

6.1.1 Bilan local monophasique

Soit un volume de contrôle \mathcal{V} délimité par une surface \mathcal{A} fixe dans l'espace et soit une quantité F, répartie en chaque point de l'espace avec une densité volumique f dont le taux de production par unité de volume et de temps est W_f . Le flux de F entrant par unité de surface et de temps en chaque point de surface A est le vecteur de flux, noté $\overrightarrow{J_f}$, que multiplie la normale à la surface \overrightarrow{n} , orientée vers l'extérieur de \mathcal{V} .

Le bilan de F sur le volume \mathcal{V} s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} f dV = \int_{\mathcal{V}} W_f dV - \int_{\mathcal{A}} \overrightarrow{J_f} \cdot \overrightarrow{n} dA$$
(6.1)

En appliquant la formule de Green-Ostrogradski, la fonction f étant supposée dérivable sur l'ensemble du domaine \mathcal{V} , et \mathcal{A} étant supposée fixe :

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} W_f d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_f} d\mathcal{V}$$
(6.2)

Enfin, puisque ce que ce bilan doit être vérifié quel que soit le volume arbitraire retenu, et comme la solution du problème fort est systématiquement solution du problème faible associé, on retient la forme forte (ou locale) de ce bilan

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_f} = W_f \tag{6.3}$$

6.1.2 Bilan diphasique

Considérons maintenant un volume de contrôle contenant une interface liquide-gaz S. Le champ de la quantité volumique f, la masse volumique par exemple, présente alors une discontinuité au niveau de l'interface bien qu'il soit continu et dérivable partout ailleurs. On va alors considérer les distributions associées aux quantités volumiques.



FIGURE 6.1: Volume de contrôle contenant une interface liquide-gaz.

Distributions et dérivations

Soit \mathcal{F} la distribution associée à f et $\overrightarrow{J_{\mathcal{F}}}$ la distribution associée au vecteur flux de f, $\overrightarrow{J_f}$. On introduit alors la fonction de Dirac, $\delta_{\mathcal{S}}$, caractérisant la surface \mathcal{S} , qui est nulle partout sauf sur cette surface. De plus, si on considère une variable ϕ définie sur tout l'espace et ayant pour valeur $\phi_{\mathcal{S}}$ à la surface, on a :

$$\int_{\mathcal{V}} \phi \delta_{\mathcal{S}} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{S}} \phi_{\mathcal{S}} d\mathcal{S}$$
(6.4)

Les dérivées, au sens des distributions, d'une grandeur présentant une discontinuité sur une surface S peuvent être écrites en fonction de la dérivée au sens usuel et d'un terme de saut (SCHWARTZ, 1965; APPEL, 2002; RODDIER, 1988) :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} - f|_{\mathcal{S}^{-}}^{\mathcal{S}^{+}} \overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.5)

avec $\{\partial f/\partial t\}$ la dérivée de la fonction f par rapport au temps, au sens usuel, $f|_{S^-}^{S^+} = f^+ - f^-$ le saut de la variable f lors de la traversée de l'interface dans le sens de la normale à la surface, $\overrightarrow{U_S}$ la vitesse de la surface S et \overrightarrow{n} la normale à cette même surface.

Et, en adoptant les mêmes notations, on peut aussi écrire :

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\mathcal{F}}} = \left\{ \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_f} \right\} + \overrightarrow{J_f} |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.6)

Bilan de masse

Afin d'établir cette équation bilan en milieu diphasique, on va introduire la distribution de la masse volumique du gaz telle que :

$$\begin{cases} \Gamma_g = \rho_g \text{ la masse volumique des gaz, si on est dans le gaz} \\ \Gamma_g = 0, \text{ sinon.} \end{cases}$$
(6.7)

Il s'agit du produit de la fonction indicatrice du gaz et de la masse volumique (BORGHI, 2008). De plus, on définit le flux de masse de gaz par unité de surface et de temps :

$$\overrightarrow{J_{\rho_g}} = \rho_g \overrightarrow{u_g} \tag{6.8}$$

et on lui associe la distribution $\overrightarrow{J_{\Gamma_g}}$.

Comme ces distributions sont infiniment dérivables au sens des distributions, on peut appliquer le même bilan que précédemment Eq. (6.1) et passer à la formulation forte Eq. (6.3). On obtient donc l'équation de conservation de la distribution Γ_q .

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = \underbrace{W_{\Gamma_g}}_{=?} \tag{6.9}$$

Cependant, on ne connait pas, *a priori*, l'expression de ce terme source, nous allons le déterminer à partir des deux autres termes. D'après les équations (6.5)-(6.6), on peut écrire :

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial \rho_g}{\partial t} \right\} - \rho_g |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \overrightarrow{U}_{\mathcal{S}} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.10)

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = \left\{ \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_g}} \right\} + \overrightarrow{J_{\rho_g}} \Big|_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.11)

et il vient :

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = \left\{ \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_g}} \right\} + \rho_g |_{\mathcal{S}^-} \overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} \cdot \overrightarrow{n} \,\delta_{\mathcal{S}} - (\rho_g \overrightarrow{u_g})|_{\mathcal{S}^-} \cdot \overrightarrow{n} \,\delta_{\mathcal{S}} \tag{6.12}$$

On obtient alors l'équation de conservation de la masse en phase gazeuse avec prise en compte du terme source d'évaporation :

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = \underbrace{\left\{ \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_g}} \right\}}_{=0} + \underbrace{\rho_g|_{\mathcal{S}^-} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_g}|_{\mathcal{S}^-}\right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}}_{=W_{vap}}$$
(6.13)

Finalement, on peut mettre cette équation sous une forme plus habituelle avec le terme source dû à la vaporisation.

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = W_{vap} \tag{6.14}$$

Le terme source W_{vap} est nul partout sauf à l'interface liquide-gaz comme le confirme la présence de la distribution de Dirac dans son expression. De plus, ce terme source fait apparaître la vitesse de vaporisation dans le gaz : $\overrightarrow{u}_{vap} = \overrightarrow{U}_{S} - \overrightarrow{u}_{g}|_{S^{-}}$ on peut le ré-écrire sous la forme :

$$W_{vap} = \rho_g|_{\mathcal{S}^-} \overrightarrow{u}_{vap} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} = \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}} \tag{6.15}$$

Il s'agit donc bien du flux de masse vaporisée par unité de surface et de temps.

Bilan d'espèce

Pour obtenir l'équation de conservation de l'espèce i, on suit la même démarche que précédemment. On commence par introduire la distribution de la masse volumique de cette espèce i:

$$\begin{cases} \Psi_i = \rho_g Y_{i,g} \text{ la masse volumique de l'espèce } i \text{ dans le gaz, si on est dans le gaz} \\ \Psi_i = 0, \text{ sinon.} \end{cases}$$

De plus, on définit le flux convectif de masse de l'espèce i par unité de surface et de temps :

$$\overrightarrow{J}_{\rho_i,c} = \rho_g Y_{i,g} \overrightarrow{u_g} \tag{6.17}$$

auquel on associe la distribution $\overrightarrow{J}_{\Psi_i}^c$, et on définit le flux diffusif de masse de l'espèce *i* par unité de surface et de temps :

$$\overrightarrow{J}_{\rho_i}^d = -\rho_g D_i \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial x_k} \overrightarrow{u_k}$$
(6.18)

que l'on admet, pour des raisons de simplicité, être correctement représenté par une loi de diffusion de Fick à laquelle on associe la distribution $\overrightarrow{J}_{\Psi_i}^d$.

L'équation de conservation de la distribution Ψ_i s'écrit alors :

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J}_{\Psi_i}^c + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J}_{\Psi_i}^d = \underbrace{W_{\Psi_i}}_{=?}$$
(6.19)

(6.16)
or,

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial \rho_g Y_{i,g}}{\partial t} \right\} - (\rho_g Y_{i,g}) |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \overrightarrow{U}_{\mathcal{S}} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.20)

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_i}^c} = \left\{ \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_i}^c} \right\} + \overrightarrow{J_{\rho_i}^c} \left\{ \overrightarrow{S^+} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} \right\}$$
(6.21)

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_i}^d} = \left\{ \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_i}^d} \right\} + \overrightarrow{J_{\rho_i}^d} |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.22)

d'où

$$\frac{\partial \Psi_{i}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_{i}}^{c}} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_{i}}^{d}} = \left\{ \underbrace{\frac{\partial \rho_{g} Y_{i}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_{i}}^{c}} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\rho_{i}}^{d}}}_{=W_{i,vap}} \right\} + \underbrace{(\rho_{g} Y_{i})|_{\mathcal{S}^{-}} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_{g}}|_{\mathcal{S}^{-}}\right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} + \overrightarrow{J}_{\rho_{i}}^{d}|_{\mathcal{S}^{-}} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}}_{=W_{i,vap}} + W_{\Psi_{i,reac}}$$

$$(6.23)$$

qui peut aussi s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial \Psi_{i}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_{i}}^{c}} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Psi_{i}}^{d}} = \underbrace{\dot{m}_{i}\delta_{\mathcal{S}} - \rho_{g}D_{i}}_{=W_{i,vap}} \underbrace{\frac{\partial Y_{i,g}}{\partial x_{k}}}_{=W_{i,vap}} + W_{\Psi_{i},reac}$$
(6.24)

avec $W_{\Psi_i,reac}$ le taux de production/destruction d'origine chimique pour l'espèce i. En supposant que seule l'espèce α s'évapore, on sait que $W_{i,vap} = 0, \forall i \neq \alpha$, une relation supplémentaire est alors obtenue :

$$\dot{m}_i \delta_{\mathcal{S}} - \rho_g D_i \left. \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial x_k} \right|_{\mathcal{S}^-} n_k \delta_{\mathcal{S}} = 0 \tag{6.25}$$

avec $\dot{m}_i = Y_i \ \dot{m}^{vap}$ alors que pour l'espèce α :

$$\dot{m}_{\alpha}\delta_{\mathcal{S}} - \rho_g D_{\alpha} \left. \frac{\partial Y_{\alpha,g}}{\partial x_k} \right|_{\mathcal{S}^-} n_k \delta_{\mathcal{S}} = \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.26)

avec $\dot{m}_{\alpha} = Y_{\alpha} \dot{m}^{vap}$

Application aux variables physiques conservatives

Les équations obtenues dans la section précédente sont des équations de transport pour les distributions associées aux grandeurs physiques et ne peuvent être exploitées numériquement sous cette forme. Considérons alors la formulation forte de la conservation de la distribution Γ_q comme définie eq. (6.7)

$$\frac{\partial \Gamma_g}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} = W_{vap} = \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.27)

Repassons au bilan sur le volume \mathcal{V} délimité par la surface \mathcal{A} et présentant une discontinuité à la surface \mathcal{S} :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \Gamma_g d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{A}} \overrightarrow{J_{\Gamma_g}} \cdot \overrightarrow{n} d\mathcal{A} = \int_{\mathcal{V}} \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}} d\mathcal{V} \\ = \int_{\mathcal{S}} \dot{m}^{vap} d\mathcal{S}$$

Ce bilan est alors directement exploitable avec une approche de type volumes finis, ce qui n'est pas le cas de la formulation forte à cause du Dirac $\delta_{\mathcal{S}}$. Il reste juste à noter que sur le volume \mathcal{V} la distribution et la variable physique peuvent être confondues pour pouvoir écrire le bilan de la masse volumique dans un volume contenant des gouttelettes de fluide :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho_g d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{A}} \overrightarrow{J_{\rho_g}} \cdot \overrightarrow{n} d\mathcal{A} = \int_{\mathcal{S}} \dot{m}^{vap} d\mathcal{S}$$
(6.28)

6.1.3 Equations locales en phase gazeuse pour un milieu diphasique

Les bilans précédemment présentés permettent donc d'établir, en écoulement à plusieurs phases, les équations de transport des variables conservatives introduites dans le chapitre sur la modélisation aérothermochimique. Cependant, afin de simplifier la lecture des équations dans le cadre de cette Thèse, les équations de transport particularisées à la phase gazeuse sont explicitées dans la suite. Pour l'ensemble de ces équations conservatives, l'effet induit par l'échange entre phases est regroupé sous la forme d'un terme source indicé v. Le système d'équations régissant l'évolution de la phase gazeuse dans un écoulement diphasique n'est donc rien d'autre que celui du cas monophasique auquel on adjoint un terme source diphasique pour chaque équation.

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = \rho \omega_v \tag{6.29}$$

Conservation de la masse pour l'espèce α

$$\frac{\partial \rho Y_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_{\alpha}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(J_k^{\alpha} \right) + \rho \omega_{\alpha} + \rho \omega_v^{\alpha} \tag{6.30}$$

où J_k^{α} représente le flux diffusif de masse de l'espèce considérée.

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k u_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k} + \rho F_i + \rho \omega_v^{u_i}$$
(6.31)

avec le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ki}

Bilan d'énergie

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k E}{\partial x_k} = \rho u_k F_k - \frac{\partial u_k p}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tau_{ki} u_i) - \frac{\partial q_k}{\partial x_k} + \rho \omega_v^E$$
(6.32)

avec q_k le flux d'énergie cédé à la cellule

6.2 Mélange scalaire diphasique

Comme l'objectif principal de ce travail concerne la simulation des flammes non prémélangées, il est donc naturel de déterminer l'équation de conservation de la fraction de mélange en milieu diphasique.

6.2.1 Fraction de mélange

L'obtention de l'équation de transport de la fraction de mélange peut se faire suivant deux approches. La première méthode s'appuie sur l'introduction de la distribution de la fraction de mélange. Le déroulé du calcul est alors similaire à celui présenté dans la section précédente pour le bilan d'espèce. La seconde méthode s'appuie sur les équations de conservation des espèces dans la phase gazeuse d'un écoulement diphasique telle que présenté dans le paragraphe précédent. Le calcul est alors similaire à celui permettant d'obtenir l'équation de conservation de la fraction de mélange dans un écoulement gazeux. Ces deux approches sont détaillées dans la section suivante.

Méthode distribution

Comme précédemment, un bilan dans un volume contenant deux phases est effectué pour la distribution suivante.

$$\Xi = \rho_g \xi \text{ fraction de mélange conservative, si on est dans le gaz}$$

$$\Xi = 0, \text{ sinon.}$$
(6.33)

Les distributions associées aux flux diffusif $\overrightarrow{J}_{\Xi,d}$ et convectif $\overrightarrow{J}_{\Xi,c}$ sont aussi introduites. Finalement, l'équation de transport de la fraction de mélange est obtenue en appliquant les relations de dérivation des distributions eqs. (6.5)-(6.6) :

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Xi,c}} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\Xi,d}} = \underbrace{\left\{ \underbrace{\frac{\partial \rho_g \xi}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\xi,c}} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J_{\xi,d}}}_{+ (\rho_g \xi)|_{\mathcal{S}^-} (\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_g}|_{\mathcal{S}^-}) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} + \overrightarrow{J}_{\xi,d}|_{\mathcal{S}^-} \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}}}_{=W_{\Xi,vap}} \right\}}_{=W_{\Xi,vap}}$$
(6.34)

On peut alors ré-écrire le terme source sous la forme :

$$W_{\Xi,vap} = \xi|_{\mathcal{S}^{-}} \rho_{g}|_{\mathcal{S}^{-}} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_{g}}|_{\mathcal{S}^{-}}\right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} - \rho_{g} D \left.\frac{\partial \xi}{\partial x_{k}}\right|_{\mathcal{S}^{-}} n_{k} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.35)

or,

$$\xi = \frac{Z_F - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \tag{6.36}$$

 donc

$$\left(Z_F^{fuel} - Z_F^{ox} \right) W_{\Xi,vap} = Z|_{\mathcal{S}^-} \rho_g|_{\mathcal{S}^-} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_g}|_{\mathcal{S}^-} \right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} - \rho_g D \left. \frac{\partial Z_F}{\partial x_k} \right|_{\mathcal{S}^-} n_k \delta_{\mathcal{S}} - Z_F^{ox} \underbrace{\rho_g|_{\mathcal{S}^-} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_g}|_{\mathcal{S}^-} \right) \cdot \overrightarrow{n}}_{= \overrightarrow{m}^{vap}} \delta_{\mathcal{S}} - \underbrace{\rho_g D \left. \frac{\partial Z_F^{ox}}{\partial x_k} \right|_{\mathcal{S}^-} n_k \delta_{\mathcal{S}} (6.37)}_{= 0}$$

De plus, la variable de Zel'dovich Z_F est définie telle que $Z_f = Y_F - 1/r_{st}Y_O$, on peut donc écrire :

 $=\dot{m}^{vap}\delta_{\mathcal{S}}$ si du combustible s'évapore, 0 sinon, d'après les équations (6.25)-(6.26)

$$\begin{pmatrix} Z_{F}^{fuel} - Z_{F}^{ox} \end{pmatrix} W_{\Xi,vap} = Y_{F}|_{\mathcal{S}^{-}} \rho_{g}|_{\mathcal{S}^{-}} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_{g}}|_{\mathcal{S}^{-}}\right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} - \rho_{g} D \left. \frac{\partial Y_{F}}{\partial x_{k}} \right|_{\mathcal{S}^{-}} n_{k} \delta_{\mathcal{S}}$$

$$- \frac{1}{r_{st}} \underbrace{\left(Y_{O}|_{\mathcal{S}^{-}} \rho_{g}|_{\mathcal{S}^{-}} \left(\overrightarrow{U_{\mathcal{S}}} - \overrightarrow{u_{g}}|_{\mathcal{S}^{-}}\right) \cdot \overrightarrow{n} \delta_{\mathcal{S}} - \rho_{g} D \left. \frac{\partial Y_{O}}{\partial x_{k}} \right|_{\mathcal{S}^{-}} n_{k} \delta_{\mathcal{S}} \right)$$

$$= \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}} \text{ si de l'oxydant s'évapore, 0 sinon, d'après les équations (6.25)-(6.26) }$$

$$- Z_{F}^{ox} \dot{m}^{vap} \delta_{\mathcal{S}}$$

$$(6.38)$$

En supposant que seul le combustible s'évapore, on obtient :

$$W_{\Xi,vap} = \frac{1 - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \dot{m}_F^{vap} \delta_{\mathcal{S}}$$
(6.39)

alors qu'en supposant que seul de l'oxydant s'évapore :

$$W_{\Xi,vap} = \frac{-1/r_{st} - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \dot{m}_O^{vap} \,\delta_{\mathcal{S}} \tag{6.40}$$

Finalement, on aboutit à l'expression générale suivante :

$$W_{\Xi,vap} = \frac{1 - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \dot{m}_F^{vap} \,\delta_S + \frac{-1/r_{st} - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \,\dot{m}_O^{vap} \,\delta_S$$
$$= \dot{m}_{\xi}^{vap} \,\delta_S \tag{6.41}$$

Dans notre approche, on considère qu'une fraction de mélange égale à l'unité correspond à un courant de combustible pur et, inversement, une fraction de mélange nulle correspond à un courant d'oxydant pur. On a donc $Z_F^{fuel} = 1$ et $Z_F^{ox} = -1/r_{st}$, si bien que l'expression du terme source dans l'équation de transport de la fraction de mélange est :

$$W_{\Xi,vap} = \dot{m}_F^{vap} \,\delta_{\mathcal{S}} \tag{6.42}$$

Méthode traditionnelle

Afin de dériver l'équation de transport de la fraction de mélange, on va procéder de la même manière qu'en écoulement mono-phasique, cf Chap. 3, mais avec les équations diphasiques. On considère un écoulement gazeux dans lequel il y a des gouttelettes composées soit de combustible et de diluant, soit d'oxydant et de diluant. Le terme source de masse peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$\omega_v = \omega_v^F + \omega_v^O + \omega_v^D \tag{6.43}$$

où ω_v^F est le taux d'évaporation massique de combustible, ω_v^O celui d'oxydant et ω_v^D , celui de diluant.

Considérons les équations de conservation des espèces chimiques. La conservation de la fraction massique combustible, Y_F , peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_F}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D}_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} \right) + \rho \Omega_F + \rho \omega_v^F \tag{6.44}$$

où Ω_F est le taux de consommation chimique de l'espèce combustible.

De la même manière, l'équation de transport de la fraction massique d'oxydant, Y_O , est

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_O}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D}_O \frac{\partial Y_O}{\partial x_j} \right) + \rho \Omega_O + \rho \omega_v^O \tag{6.45}$$

où Ω_O est le taux de consommation chimique de l'espèce oxydante.

En faisant l'approximation de Shvab-Zel'dovich (chimie irréversible à une étape¹, nombre de Lewis unitaire pour toute les espèces, etc.), l'équation de transport de la quantité $Z_F = Y_F - Y_O/r_{st}$, souvent appelée variable de Shvab-Zel'dovich, peut être obtenue en effectuant la différence entre

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_F}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} \right) + \rho \omega_v^F + \rho \Omega_F$$

 et

$$\frac{1}{r_{st}} \times \left[\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_O}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial Y_O}{\partial x_j} \right) + \rho \omega_v^O + \rho r_{st} \Omega_F$$

ce qui conduit à

$$\frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Z_F}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial Z_F}{\partial x_j} \right) + \rho \omega_v^F - \frac{1}{r_{st}} \rho \omega_v^O$$
(6.46)

où la contribution associée à la réaction chimique a disparu.

La fraction de mélange ξ est alors obtenue en normalisant la variable de Shvab-Zel'dovich Z_F pour qu'elle soit nulle dans le courant d'oxydant pur et unitaire dans le courant de combustible pur,

$$\xi = \frac{Z_F - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} = \frac{\phi(Y_F/Y_F^{\infty}) - (Y_{Ox}/Y_{Ox}^{\infty}) + 1}{\phi + 1}$$
(6.47)

où $\phi = r_{st}Y_F^{\infty}/Y_{Ox}^{\infty}$, avec Z_F^{fuel} la valeur de Z_F dans le courant d'entrée de combustible and Z_F^{ox} la valeur de Z_F dans celui d'oxydant.

L'équation de transport de la fraction de mélange ξ peut alors être obtenue de

$$EoT(\xi) = \frac{Eq. (6.46) - Z_F^{ox} \times Eq. (6.29)}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}},$$
(6.48)

^{1.} Cela permet d'écrire : $\rho\Omega_O = \rho r_{st}\Omega_F$ avec r_{st} le rapport de masse stoechiométrique.

et en introduisant les Eqs. (6.29), (6.43) et (6.46) dans l'Eq. (6.48), on obtient

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \xi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right)
+ \left(\frac{1 - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \right) \rho \omega_v^F
- \left(\frac{(1/r_{st}) + Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \right) \rho \omega_v^O
- \left(\frac{Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}} \right) \rho \omega_v^D$$
(6.49)

L'équation (6.49) est l'équation de transport de la fraction de mélange en écoulement diphasique. Afin de rester cohérent avec la formulation des équations de transport, l'ensemble des termes sources diphasiques est regroupé dans un seul nommé $\omega_{v,\xi}$ définit comme

$$\rho\omega_{v,\xi} = \left(\frac{1 - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^F - \left(\frac{(1/r_{st}) + Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^{Ox} - \left(\frac{Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^D \quad (6.50)$$

Deux situations sont alors envisageables :

Le combustible est injecté liquide. Dans ce cas les gouttelettes sont composées de combustible et éventuellement de diluant. Le terme source diphasique de la fraction de mélange s'écrit alors :

$$\rho\omega_{v,\xi} = \left(\frac{1 - Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^F - \left(\frac{Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^D \tag{6.51}$$

De plus, si on suppose que les deux constituants de la gouttelette s'évaporent en proportion constante et donc que les proportions de diluant et de combustible dans la goutte sont constantes, on peut écrire

$$\omega_v^F = Y_F^\infty \omega_v \quad \text{et} \quad \omega_v^D = (1 - Y_F^\infty) \,\omega_v \tag{6.52}$$

et le terme source diphasique de l'équation de transport de la fraction de mélange s'exprime comme suit.

$$\rho\omega_{\nu,\xi} = \frac{\phi + 2Y_F^{\infty} - 1}{\phi + 1}\rho\omega_{\nu} \tag{6.53}$$

où Y_F^{∞} est la fraction massique de combustible dans le courant combustible, c'està-dire la fraction massique de combustible dans la gouttelette. Si la gouttelette est composée de combustible pur, le terme source diphasique de la fraction de mélange est identique au terme source diphasique de l'équation de conservation de la masse. L'oxydant est injecté liquide. Dans ce cas les gouttelettes sont composées d'oxydant et éventuellement de diluant. Le terme source diphasique de la fraction de mélange s'écrit alors :

$$\rho\omega_{v,\xi} = -\left(\frac{(1/r_{st}) + Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^O - \left(\frac{Z_F^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{ox}}\right)\rho\omega_v^D \tag{6.54}$$

De plus, si on suppose que les deux constituants de la gouttelette s'évaporent en proportion constante et donc que les proportions de diluant et de combustible dans la goutte sont constantes, on peut écrire

$$\omega_v^O = Y_O^\infty \omega_v \quad \text{et} \quad \omega_v^D = (1 - Y_O^\infty) \,\omega_v \tag{6.55}$$

et le terme source diphasique de l'équation de transport de la fraction de mélange s'exprime comme suit.

$$\rho\omega_{v,\xi} = -\frac{2\left(1 - Y_O^{\infty}\right)}{\phi + 1}\rho\omega_v \tag{6.56}$$

où Y_O^{∞} est la fraction massique d'oxydant dans le courant oxydant, c'est-à-dire la fraction massique d'oxydant dans la gouttelette. Enfin, si la gouttelette est composée d'oxydant pur, le terme source diphasique de la fraction de mélange est alors nul.

6.2.2 Variance de la fraction de mélange

Les détails de la dérivation de l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange sont présentés dans l'annexe B et l'équation obtenue est simplement reportée ici.

$$\frac{\partial \overline{\rho \xi^{"2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \xi^{"2}} \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi^{"2}}{\partial x_{k}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"2}} \right)
- 2 \overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} - 2 \cdot \overline{\rho D} \frac{\partial \xi^{"}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \xi^{"}}{\partial x_{k}} + 2 \cdot \overline{\xi^{"}} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} \right)
+ 2 \left(\overline{\rho \xi \omega_{\xi}^{vap}} - \widetilde{\xi} \overline{\rho} \widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} \right) - \overline{\rho \xi^{2} \omega^{vap}} + \widetilde{\xi}^{2} \overline{\rho \omega^{vap}}$$
(6.57)
contribution diphasique

6.2.3 Taux de dissipation scalaire

L'équation de transport du taux de dissipation scalaire en écoulement diphasique a été obtenue en supposant la diffusivité constante et en faisant l'hypothèse d'écoulement à haut Reynolds, i.e. $\tilde{\chi}_{\xi} \sim \tilde{N}_{\xi}$ avec $\tilde{N}_{\xi} = \overline{\rho \mathcal{D} \partial \xi'' / \partial x_{\alpha} \partial \xi'' / \partial x_{\alpha}} / \overline{\rho}$ l'équation ainsi obtenue est la suivante.

$$\overline{\rho}\frac{D\tilde{\chi}_{\xi}}{Dt} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\overline{\rho}\mathcal{D}\frac{\partial\chi_{\xi}}{\partial x_{j}}\right)}_{(\mathrm{III})} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\overline{\rho}u_{j}''\chi_{\xi}\right)}_{(\mathrm{IV})} - \underbrace{2\overline{\rho\chi_{\xi,u_{j}}^{ii}}\frac{\partial\xi}{\partial x_{j}}}_{(\mathrm{V})} - \underbrace{2\overline{\rho\chi_{\xi}^{ij}}\frac{\partial\tilde{u}_{j}}{\partial x_{i}}}_{(\mathrm{VI})}_{(\mathrm{VI})}$$

$$- \underbrace{2\overline{\rho\chi_{\xi}^{ij}}\frac{\partial u_{j}'}{\partial x_{i}}}_{(\mathrm{VII})} - \underbrace{2\overline{\rho}\mathcal{D}^{2}\frac{\partial^{2}\xi''}{\partial x_{i}\partial x_{j}}\frac{\partial^{2}\xi''}{\partial x_{i}\partial x_{j}}}_{(\mathrm{VIII})}$$

$$+ \underbrace{2\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_{i}}\frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_{j}}\frac{\partial\rho}{\partial x_{i}}\right)}_{(\mathrm{X})}}_{(\mathrm{XI})}$$

$$+ \underbrace{2\rho\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_{i}}\frac{\partial\left(1/\rho\right)}{\partial x_{i}}\frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\rho\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_{j}}\right)}_{(\mathrm{XI})}}_{(\mathrm{XI})}$$

$$+ (\mathrm{XII}) \tag{6.58}$$

où le tenseur croisé scalaire-vitesse et le tenseur taux de dissipation scalaire sont définis par

$$\chi_{\xi,u_k}^{ij} = \mathcal{D}\frac{\partial\xi''}{\partial x_i}\frac{\partial u_k''}{\partial x_j} \quad \text{et} \quad \chi_{\xi}^{ij} = \mathcal{D}\frac{\partial\xi''}{\partial x_i}\frac{\partial\xi''}{\partial x_j} \tag{6.59}$$

Le terme (XII), qui est associé aux effets de vaporisation, est quant à lui défini par

$$(\text{XII}) \equiv \overline{2\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_i}\frac{\partial\rho\omega_{v,\xi}}{\partial x_i}} - \overline{2\mathcal{D}\xi\frac{\partial\xi}{\partial x_i}\frac{\partial\rho\omega_v}{\partial x_i}} + \overline{2\rho\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{\rho}\right)\left(\rho\omega_{v,\xi} - \rho\xi\omega_v\right)} - \overline{\rho\chi_{\xi}\omega_v} \quad (6.60)$$

6.3 Description du Spray

Dans les cas pratiques d'écoulements réactifs multi-phasiques, le combustible ou l'oxydant sont injectés liquide. Cependant, la combustion se produit en phase gazeuse, par conséquent, les chambres de combustion doivent maximiser les échanges entre les différentes phases et en particulier maximiser la vaporisation de la phase liquide. Cette dernière étant directement proportionnelle à la surface d'échange entre les deux phases, les dispositifs d'injection du liquide sont développés afin de produire un spray de gouttelettes les plus fines possible. Ces systèmes reposent sur l'obtention d'un cisaillement, entre la phase liquide et la phase gazeuse en sortie d'injecteur, suffisamment important pour se situer dans le régime d'atomisation tel que décrit par FAETH (1991) et ainsi créer un maximum



FIGURE 6.2: Schéma des différents régimes d'interaction entre le gaz et les gouttes dans un spray tels que définis par O'Rourke (O'ROURKE, 1981) (haut) ou Herrmann (HERRMANN, 2006; JENNY et al., 2012) (bas).

de gouttes le plus rapidement possible. Malgré tout, l'ensemble de la phase liquide n'est pas sous forme de gouttelettes en sortie d'injecteur et la structure du jet liquide puis du spray peuvent être classées en fonction des phénomènes qui peuvent y être négligés ou non.

6.3.1 Structure de la phase liquide

Une représentation schématique de la structure de la phase liquide issue d'un injecteur simple ou coaxial est présenté sur la figure 6.2. Le spray peut donc être découpé en trois zones en fonction du degré d'interaction entre le gaz et les gouttes (HERRMANN, 2006; JENNY et al., 2012).

Spray dense La fin de l'atomisation primaire² et l'atomisation secondaire³ se produisent dans cette zone. Le jet est déstabilisé et des gouttes ou des parcelles de liquide sont arrachées du jet. Dans cette première zone, les interactions entres gouttes sont fréquentes, les effets de collision et de coalescence⁴ entre les gouttelettes ne peuvent donc être négligés. De plus, O'Rourke (O'ROURKE, 1981) propose de subdiviser cette zone en deux en tenant compte des interactions entre la phase liquide et la phase gazeuse. Ainsi, dans la partie la plus proche du jet, le volume

^{2.} L'atomisation primaire est la formation de gouttes ou de filament de liquide à partir du jet liquide.

^{3.} L'atomisation secondaire est la formation de gouttes à partir des filaments ou d'autre gouttes.

^{4.} La coalescence est le fait qu'une ou plusieurs gouttelettes se percutent et s'associent pour donner un nombre inférieur de gouttelette.

occupé par les gouttes est tel que la fraction volumique occupée par ces dernières ne peut être négligée et les équations de transport en phase gazeuse doivent être modifiées en conséquence. Dans la deuxième partie, cette fraction volumique est négligeable et les équations de conservation standards restent adaptées.

- **Spray dilué** Dans ce régime, la distance entre les gouttelettes est suffisamment importante pour que les interactions entre les gouttelettes puissent être négligées. L'effet de ces dernières sur l'écoulement gazeux turbulent doit cependant être pris en compte.
- **Spray très dilué** Le nombre et la taille des gouttelettes sont tels qu'elles n'interagissent plus entre elles. De plus, le champ de vitesse de la phase porteuse (le gaz) n'est plus impacté par la présence de la phase dispersée (les gouttes). Le terme source de l'équation de conservation de la quantité de mouvement disparaît.

Les équations régissant l'évolution du spray peuvent ainsi être simplifiées en fonction de l'importance des phénomènes considérés et donc en fonction de la zone du spray que l'on souhaite modéliser.

6.3.2 Différentes approches

La section précédente a donc introduit différentes zones dans lesquelles la phase condensée a une topologie particulière. Deux descriptions de cette phase sont alors envisageables. La première consiste à considérer la phase condensée comme un milieu continu au même titre que la phase gazeuse. La seconde considère la phase condensée comme un ensemble de particules formant un nuage. Le nombre de variables nécessaires ainsi que la formulation des équations d'évolution associées sont dépendants de l'approche choisie pour décrire le spray. En suivant la classification de Borghi et Champion (BORGHI et CHAMPION, 2000), trois grandes catégories d'approche existent alors⁵, deux approches fluides (LHF et 2FE) et une approche cinétique (SEL).

Locally Homogeneous Fluid : LHF Cette approche proposée par Faeth (FAETH, 1983) considère les gouttes comme une espèce supplémentaire ayant la même température moyenne que la phase gazeuse mais ayant un coefficient de diffusion particulier. En effet, la dispersion des gouttes par l'écoulement est assimilée à la diffusion de l'espèce liquide dans le milieu gazeux. Le coefficient de diffusion est alors calculé en fonction de la fraction volumique de liquide et en prenant en compte la différence de vitesse entre les deux phases. Cette approche permet de modéliser l'évolution d'un spray en ne considérant que deux quantités supplémentaires : la fraction volumique de liquide et le nombre de gouttes par unité de volume.

^{5.} Ce bref descriptif résumant globalement le point de vue adopté dans chaque approche peut être complété par la lecture du chapitre 2 de la Thèse de doctorat de N. Meyers (MEYERS, 2006).

- **Eulérienne à deux fluides : 2FE** Cette approche s'appuie sur une description eulérienne des deux phases, chacune des phases ayant sa propre température, vitesse et densité moyenne et pouvant échanger l'une avec l'autre. Cependant, les différences de températures et de vitesses entre les différentes gouttes doivent être prises en compte. Un coefficient de diffusion représentant la dispersion de ces dernières au sein de la phase liquide ainsi qu'un flux de chaleur inter-goutte sont donc ajoutés. Cette approche permet donc une modélisation plus fine que l'approche LHF puisqu'en plus de considérer la fraction volumique de liquide et le nombre de gouttes par unité de volume, l'approche 2FE considère aussi la quantité de mouvement et la température de la phase liquide.
- Statistique Eulérienne-Lagrangienne : SEL Cette approche considère les deux phases séparément. La phase gazeuse est décrite avec une approche eulérienne et la phase liquide par une approche lagrangienne. Dans cette approche, on fait l'hypothèse que le spray n'est constitué que de gouttes pouvant avoir des tailles des vitesses et des températures différentes. La trajectoire de chaque goutte, ou échantillon de goutte, est alors considérée dans l'espace physique, les quantités caractérisant la goutte évoluent alors en fonction de cette trajectoire. La connaissance exacte du diamètre de chaque goutte est le principal intérêt de cette approche. En effet, les phénomènes régissant l'évolution de chaque goutte et leurs interactions au sein du spray sont fortement dépendants du rayon des gouttes. La meilleure connaissance de ce paramètre améliore alors la description de la phase liquide et donc l'évaluation des échanges entre les deux phases. La description du spray est ainsi plus fidèle.

Chaque approche présente donc des avantages et des inconvénients. L'approche SEL semble plus appropriée pour la description du spray composé de gouttes. Cependant cette approche n'est pas adaptée à la description de la création de ces gouttes à partir du jet liquide. Ce problème est plus aisément modélisable avec les approches eulérienne LHF et 2FE, mais la qualité de description du spray est moindre.

L'outil numérique utilisé dans le cadre du présent travail de Thèse, N3S_NATUR, disposant déjà d'un solveur SEL, CEDILLE, cette approche a été privilégiée. Il faut cependant garder à l'esprit que l'atomisation primaire ne peut être calculée et la taille des gouttes formant le spray doit être considérée comme un paramètre d'entrée de notre simulation.

6.4 Equation d'évolution du spray

L'équation d'évolution du spray suivant cette approche SEL est présentée dans la section suivante.

6.4.1 Théorie cinétique

La théorie cinétique des gaz a été introduite par Maxwell et Boltzmann pour modéliser les gaz raréfiés. Une description détaillée de la théorie peut être trouvée dans (CHAPMAN et COWLING, 1970). Cette théorie décrit l'évolution d'un grand nombre de particules, elle est énoncée en adoptant un point de vue statistique. Ainsi, plutôt que de représenter chaque particule, la fonction de distribution, ou fonction densité de probabilité $\mathcal{F}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t)$, est introduite avec \boldsymbol{x} la position de la particule, \boldsymbol{v} la vitesse de cette particule et t l'instant considéré. La quantité $\mathcal{F}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) dx dv$ correspond alors, dans l'espace des phases $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v})$, à la densité de particules se trouvant dans le volume dx dv centré en $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v})$ à l'instant t. L'évolution de cette fonction est alors donnée par l'équation cinétique de Boltzmann.

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{v}\mathcal{F}) = \mathcal{Q}(\mathcal{F},\mathcal{F})$$
(6.61)

Le membre de gauche de cette équation correspond au vol libre des particules alors que le membre de droite représente les effets de collision entre les particules et est appelé opérateur de collision.

6.4.2 Equation d'évolution du spray

En suivant cette même approche pour un spray, c'est-à-dire en le supposant comme étant une collection de particules ayant une position, une vitesse et une taille différente, Williams (WILLIAMS, 1958, 1985) a écrit l'équation d'évolution pour la fonction densité de probabilité $\mathcal{F}(\boldsymbol{x}, t; r, \boldsymbol{v})$, où \boldsymbol{x} est la position, t le temps, r le rayon, et \boldsymbol{v} la vitesse des gouttes. Chaque goutte pouvant avoir une température différente, cette dernière est, elle aussi, ajoutée dans cette étude. Ainsi, l'équation du spray pour la PDF $\mathcal{F}(\boldsymbol{x}, t; r, T, \boldsymbol{v})$ est considérée.

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{v}\mathcal{F}) + \nabla_{\boldsymbol{r}}(\langle d\boldsymbol{r}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
+ \nabla_{\boldsymbol{T}}(\langle d\boldsymbol{T}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
+ \nabla_{\boldsymbol{v}}(\langle d\boldsymbol{v}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
= \mathcal{Q}(\mathcal{F}, \mathcal{F})$$
(6.62)

Le terme de gauche de l'équation (6.62) réunit différents termes qui correspondent à l'évolution temporelle, la convection des particules dans l'espace physique, les taux de variation de la taille caractéristique r et de la température T ainsi que l'accélération.

Dans le cas d'un écoulement turbulent, les tourbillons présents dans l'écoulement gazeux sont susceptibles de modifier la trajectoire des gouttes qui elles-mêmes peuvent perturber les transferts d'énergie en cascade de la théorie de Kolmogorov. Bien que l'équation (6.62) puisse être résolue dans le cadre d'une simulation directe, le coût de calcul nécessaire à cette résolution est tel qu'une modélisation de la turbulence est nécessaire dans les cas pratiques. Deux échelles caractéristiques des tourbillons sont alors introduites. La première représente les tourbillons de taille suffisante pour être inclus dans la contribution moyenne du champ de vitesse \tilde{u} et est donc déjà prise en compte, la seconde est celle associée aux fluctuations du champ de vitesse autour de cette valeur moyenne u''. En supposant la turbulence homogène isotrope dans la phase gazeuse, l'effet de la turbulence peut se traduire par l'ajout d'un terme de diffusion dans l'équation (6.62) qui devient alors similaire à l'équation de Fokker-Planck.

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{v}\mathcal{F}) + \nabla_{\boldsymbol{r}}(\langle d\boldsymbol{r}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
+ \nabla_{\boldsymbol{T}}(\langle d\boldsymbol{T}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
+ \nabla_{\boldsymbol{v}}(\langle d\boldsymbol{v}/dt \mid \boldsymbol{r}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{v} \rangle \mathcal{F})
+ \nabla_{\boldsymbol{v}}(\mathcal{D}\nabla_{\boldsymbol{v}}\mathcal{F})
= \mathcal{Q}(\mathcal{F}, \mathcal{F})$$
(6.63)

où \mathcal{D} est le coefficient représentant la diffusion turbulente du spray par les petites structures de l'écoulement gazeux et est défini par (CLOUET et DOMELEVO, 1997)

$$\mathcal{D} = \frac{2\widetilde{k}}{d\tau_t} \left(\exp^{-c(r)\tau_t} - 1 + c(r)\tau_t \right)$$
(6.64)

avec k, l'énergie cinétique turbulente, d la dimension de l'espace physique, τ_t le temps turbulent intégral et c(r) l'inverse du temps caractéristique de capture de la particule par l'écoulement. Le spray de particules dans un écoulement turbulent est alors entièrement décrit par l'équation (6.63).

6.4.3 Résolution de l'équation du spray

Bien qu'une résolution de la fonction densité de probabilité par intégration directe de l'équation (6.63) soit possible (O'ROURKE, 1981), le coût de cette résolution fait que cette méthode n'est pas employée en pratique. La méthode la plus courante est de présumer la forme de la PDF pour diminuer le nombre de variables dont elle dépend et donc simplifier la résolution du problème. A titre d'exemple, on peut citer la méthode multirayons de BenDakhlia (BEN DAKHLIA, 2001) où le spray est considéré comme un ensemble de classes de gouttes ayant la même vitesse, le même rayon et la même température, la PDF est alors un peigne de Dirac dans l'espace des phases.

$$\mathcal{F} = \sum_{n=1}^{N_{\text{cla}}} N_n(\boldsymbol{x}, t) \delta\left(r - r_n(\boldsymbol{x}, t)\right) \delta\left(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{x}, t)\right) \delta\left(T - T_n(\boldsymbol{x}, t)\right)$$
(6.65)

où N_{cla} est le nombre de classes de particules, n est l'indice de classe, N_n le nombre de particule de la classe n ayant un rayon r_n une vitesse \boldsymbol{v}_n et une température T_n . La PDF n'est alors plus fonction que de la position \boldsymbol{x} et du temps t.

Le nombre de variable dont dépend la PDF peut encore être diminué en adoptant un point de vue lagrangien, c'est-à-dire en suivant l'évolution de chaque particule dans l'espace physique. Chaque goutte a alors une PDF de la forme

$$\mathcal{F}_{g} = \delta\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{g}(t)\right)\delta\left(r - r_{g}(t)\right)\delta\left(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_{g}(t)\right)\delta\left(T - T_{g}(t)\right)$$
(6.66)

et la PDF du spray est alors aisément exprimable sous la forme suivante.

$$\mathcal{F} = \sum_{g=1}^{N_g} \mathcal{F}_g \tag{6.67}$$

avec N_g le nombre de gouttes dans le spray. En pratique, on ne considère pas chaque goutte mais on représente plutôt le spray comme un ensemble d'échantillons contenant plusieurs gouttes ayant les mêmes caractéristiques.

$$\mathcal{F} = \sum_{e=1}^{N_{\text{échant}}} N_e \mathcal{F}_e \tag{6.68}$$

où $N_{\text{échant}}$ est le nombre d'échantillons indicés e et contenant N_e gouttes ayant une PDF \mathcal{F}_e . Finalement, la PDF du spray n'est plus fonction que du temps t. De plus, si on ne prend pas en compte les phénomènes de collision entre particules, *i.e.* dans le cas d'un spray dilué, la résolution de l'équation (6.63) est alors équivalente à la résolution du système d'équations différentielles lagrangienne suivant (pour chaque échantillon) :

$$\frac{d\boldsymbol{x}_e}{dt} = \boldsymbol{v}_e; \quad \frac{d\boldsymbol{v}_e}{dt} = \boldsymbol{\beta}_e; \quad \frac{dr_e}{dt} = R_e; \quad \frac{dT_e}{dt} = \theta_e \tag{6.69}$$

où \boldsymbol{v}_e incorpore les phénomènes de convection et de dispersion par la turbulence, β_e prend en compte l'effet de la trainée des particules, R_e représente les effets de la vaporisation sur le rayon des gouttes et θ_e est associé aux effets de chauffage incluant la vaporisation, tous ces termes devant être fermés grâce à des modèles adaptés. Proposée par Dukowicz (DUKOWICZ, 1980), cette méthode d'intégration de l'équation du spray est la plus couramment utilisée. La méthode employée dans le module *CEDILLE* est un peu différente, elle repose sur l'approche semi-fluide proposée par Domelevo et Sainsaulieu (DOMELEVO et SAINSAULIEU, 1997). Dans cette méthode la PDF d'un échantillon est présumée sous la forme suivante :

$$\mathcal{F}_{e} = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi\rho r_{e}^{3}} \,\delta\left(r - r_{e}(t)\right) \delta\left(T - T_{e}(t)\right) \Psi\left(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{x}_{e}(t), m_{e}(t)\right) \Theta\left(\boldsymbol{v}; G_{e}(t), \boldsymbol{U}_{e}(t), E_{e}(t)\right) \tag{6.70}$$

où $\Psi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{x}_e(t), m_e(t))$ est une gaussienne centrée en $\boldsymbol{x}_e(t)$ et de second moment $m_e(t)$. $\Theta(\boldsymbol{v}; G_e(t), \boldsymbol{U}_e(t), E_e(t))$ est aussi une gaussienne dont les trois premiers moments sont $G_e(t), G_e(t)\boldsymbol{U}_e(t)$ et $G_e(t)E_e(t)$. Le spray est donc représenté par des échantillons de gouttes au sein desquels la répartition de vitesse et de position est supposée gaussienne. L'évolution de chaque échantillon est alors régi par sept paramètres. Cependant l'utilisation d'un projecteur particulier, de l'espace de la PDF vers l'espace de ses paramètres, introduit une relation qui permet d'assimiler la résolution de l'équation d'évolution de la PDF du spray à la résolution du système (6.69), on trouvera plus de détails dans (DOME-LEVO et SAINSAULIEU, 1997). Cette méthode, un peu particulière, permet de diminuer le nombre d'échantillons nécessaire à l'obtention de la statistique du spray, et donc, de diminuer le coût de la simulation.

6.4.4 Modèles physiques employés

Les méthodes lagrangiennes introduites dans la section précédente reposent donc sur l'équivalence entre l'équation de transport de la PDF du spray et le schéma cinétique équivalent pour chaque échantillon, Eq. (6.69). Cependant, dans les différentes équations différentielles de ce système, les termes responsables de l'évolution des échantillons de gouttes doivent être modélisés. Chaque système représentant un paquet de gouttes, on considère que son évolution est, en moyenne, la même que celle d'une goutte seule.⁶ Ces modèles sont donc construits en analysant le comportement d'une goutte. Plusieurs modèles peuvent être utilisés en fonction de la physique que l'on souhaite représenter, un panorama plus exhaustif des modèles existant peut être trouvé dans (SAZHIN, 2006; JENNY et al., 2012).

Les modèles utilisés dans le cadre de notre étude sont présentés dans la suite.

Terme d'accélération des gouttes Ce terme est uniquement associé à la force de

^{6.} Dans l'appoche semi-fluide de Domelevo et Sainsaulieu, la vitesse moyenne et la position moyenne de chaque paquet de goutte évolue de la même manière qu'une goutte seule bien qu'au sein de l'échantillon chaque goutte ait une évolution qui n'est pas indépendante de celles des autres gouttes de l'échantillon.

traînée induite par l'écoulement sur la particule, l'effet de la gravité est ici négligé.

$$\boldsymbol{\beta}_{e} = \frac{\boldsymbol{\widetilde{u}} - \boldsymbol{v}_{e}}{\tau_{e}} = -\frac{\boldsymbol{U}_{d,e}}{\tau_{e}}, \qquad (6.71)$$

où $U_{d,e}$ est la vitesse de glissement, *i.e.* la vitesse relative entre le gaz et la particule, et τ_e est le temps caractéristique de capture de la goutte par l'écoulement, *i.e.* le temps nécessaire à la goutte pour que sa vitesse soit égale à celle du gaz l'entourant. Ce temps est évalué comme étant :

$$\tau_e = \frac{r_e^2}{C_D(r_e)} \tag{6.72}$$

avec r le rayon de la goutte et $C_D(r)$ le coefficient de traînée de la goutte évaluée d'après la corrélation empirique suivante (O'ROURKE, 1981) :

$$C_D(r) = \frac{9\mu_g}{2\rho_l} \left(\alpha - 2.65 + \frac{1}{6} \alpha R e_e^{0.66} - 1.78 \right)$$
(6.73)

où μ_g est la viscosité de la phase gazeuse, ρ_l est la masse volumique de la phase liquide, $Re_e = \rho_g r |\mathbf{U}_{d,e}| / \mu_g$ le Reynolds particulaire associé à la goutte et $\alpha = V_{gaz} / V_{tot}$ le taux de gaz local. Le taux de gaz local est introduit pour tenter d'étendre la validité de la corrélation aux sprays modérément épais, même si les effets de collision entre gouttes sont négligés.

Terme d'évolution du rayon des gouttes Ce terme est directement lié aux phénomènes

d'échange de masse entre la phase liquide et gazeuse et se met sous la forme suivante.

$$R_e = -\frac{\dot{m}^e}{4\pi\rho_e r_e^2},\tag{6.74}$$

Où \dot{m}^e est le flux de masse vaporisée pour l'échantillon e, ρ_e est la densité des gouttes de l'échantillon et r_e le rayon des gouttes de l'échantillon. R_e est donc directement lié au modèle d'évaporation utilisé. Plusieurs modèles d'évaporation existent dans la littérature, un bref historique non exhaustif est présenté en annexe C et peut être complété par la revue de Sazhin (SAZHIN, 2006) ou la Thèse de Leborgne (LEBORGNE, 1999). Dans la suite de la présente étude, le modèle de Yao *et al.* (YAO et al., 2003) est utilisé avec une approche du type "Rapid-Mixing limit" de Law et Sirignano (LAW, 1976; LAW et SIRIGNANO, 1977; LAW, 1982) pour la température de la goutte. La démarche ayant conduit au choix de ce modèle est présentée dans l'annexe C. On peut tout de même remarquer que, contrairement à la loi du d^2 habituellement utilisée, les effets associés à l'échauffement instationnaire de la goutte ainsi que l'influence de l'écoulement de Stefan sur l'épaisseur de la couche limite thermique et massique sont pris en compte dans ce modèle.

Terme d'évolution de la température des gouttes Ce terme est lui aussi directement lié aux échanges entre la phase liquide et la phase gazeuse. Il est obtenu en faisant un bilan d'énergie au niveau de la goutte, ce bilan étant l'équilibre entre le flux de chauffage provenant du milieu gazeux, l'énergie prélevée à la goutte pour vaporiser une partie du liquide la constituant et l'énergie accumulée au sein de la goutte.

$$\theta_e = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi\rho_l r_e^3 C_{p,l}} \left(Q_h - \dot{m}^e L_v \left(T_e \right) \right), \tag{6.75}$$

où $C_{p,e}$ est la capacité thermique des gouttes constituant l'échantillon, Q_h l'énergie transmise aux gouttes par le gaz environnant et $L_v(T_k)$ la chaleur latente de vaporisation à la température T_e des gouttes constituant l'échantillon.

6.5 Couplage eulérien/lagrangien

Le solveur eulérien retenu pour la présente étude, $N3S_Natur$ (MARTIN et CHARGY, 2001), repose sur une approche mixte volumes finis / éléments finis appliquée à un maillage non structuré. Il résout les équations de transport de la masse volumique $\overline{\rho}$, des composantes de la vitesse \tilde{u}_j , de l'énergie \tilde{e} , et de la fraction massique des espèces chimiques \tilde{Y} sous leur forme conservative. En plus de ces équations, les fluctuations du champ de vitesse turbulent sont caractérisées en utilisant une approche k-epsilon, deux équations de transport additionnelles sont alors résolues, une pour l'énergie cinétique turbulente moyenne \tilde{k} , et une autre pour son taux de dissipation moyen $\tilde{\epsilon}$ (MARTIN et CHARGY, 2001). Il est utilisé conjointement avec le solveur lagrangien, *CEDILLE* (CHARGY, 2011), qui résout l'équation de spray avec une méthode de Monte Carlo.

La phase gazeuse et la phase liquide échangeant l'une avec l'autre, la résolution du système d'équations eulériennes et du système d'équations lagrangiennes doit se faire de manière couplée. Afin de bien comprendre les différents liens entre ces deux systèmes, les relations entre les variables résolues par le solveur eulérien et celles résolues par le solveur lagrangien sont présentées⁷ sur la figure 6.5. Comme l'objectif de cette étude est la simulation de la combustion qui se déroule en phase gazeuse, cette phase est prise comme référence dans la suite de ce paragraphe. La masse transférée de la phase liquide vers la phase gazeuse est donc affectée d'un signe positif.

Ainsi, si on considère un volume V et qu'on suppose que chaque particule stochastique, ou échantillon e, se trouvant dans ce volume a un taux de vaporisation \dot{m}^e , le terme source

^{7.} Pour des raisons de clarté, le couplage retour de la vitesse n'est pas présenté sur cette figure.



FIGURE 6.3: Liens entre les variables eulériennes (traits épais) et lagrangiennes (traits fins). Modèle de vaporisation (pointillés) composé du modèle d'évaporation de Yao et al. YAO et al. (2003) (gris clair) et de l'approximation mélange rapide LAW (1982); LAW et SIRIGNANO (1977) (gris foncé).

de masse induit par la vaporisation peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\overline{\rho\omega_v} = \sum_{e=1}^{N_{\text{cchant}}} \dot{m}^e / V \tag{6.76}$$

où $N_{\text{\acute{e}chant}}$ est le nombre d'échantillons. En adoptant ce point de vue, l'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_j}{\partial x_j} = \overline{\rho \omega_v} \tag{6.77}$$

et tous ses termes sont fermés. Le travail de modélisation est alors reporté sur l'évaluation du taux de vaporisation \dot{m}^e , encadré en pointillés sur la Fig. 6.5. Ce dernier est évalué en utilisant le modèle de Yao et al. (YAO et al., 2003), en gris clair sur la Fig. 6.5 :

$$\dot{m}^{e} = N_{g,e} \cdot \left(2 \pi r_{e} \rho D \left(\frac{\delta_{M} + r_{e}}{\delta_{M}}\right) ln \left(1 + B_{M}\right)\right)$$
(6.78)

où $N_{g,e}$ est le nombre de gouttes contenues dans la particule numérique, r_e le rayon des gouttes de l'échantillon, D le coefficient de diffusion massique de l'espèce évaporante dans le milieu gazeux, δ_M l'épaisseur de la couche limite massique autour de la goutte et B_M le nombre de transfert de Spalding.

L'épaisseur de la couche limite massique est, quant à elle, déterminée à partir de l'expression du nombre de Sherwood qui prend en compte les effets de soufflage. :

$$\delta_M = r_e \left(\frac{B_M Sh}{2 \ln(1+B_M)} - 1\right)^{-1} \tag{6.79}$$

avec Sh le nombre de Sherwood évalué d'après la corrélation de Renksizbulut, voir référence (RENKSIZBULUT et al., 1991) :

$$Sh = 2 + 0.87 Re_e^{1/2} Sc^{1/3} \left(1 - B_M\right)^{-0.7}$$
(6.80)

et où le nombre de Reynolds s'exprime comme suit :

$$Re_e = 2\frac{U_{d,e}r_e}{\nu} \tag{6.81}$$

avec ν la viscosité du gaz entourant la goutte.

Il ne reste alors plus qu'à déterminer le nombre de transfert de masse de Spalding, B_M , ce dernier étant défini comme :

$$B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s}$$
(6.82)

où Y_s est la fraction massique de l'espèce s'évaporant (l'oxygène dans le cas présent),

dans la phase gazeuse en surface de goutte et où Y_{∞} est la fraction massique de l'espèce s'évaporant, dans la phase gazeuse loin de la goutte. Dans l'approche basée sur la théorie du film, décrite par Yao et al. (YAO et al., 2003), le transfert de masse entre le gaz et la goutte est complètement piloté par la diffusion de masse au sein de la couche limite. Il en résulte que la composition hors de cette dernière est considérée comme étant homogène et égale à la composition moyenne dans le volume considéré. On peut alors écrire :

$$Y_{\infty} = \widetilde{Y} \tag{6.83}$$

Finalement, la valeur Y_s est évaluée en faisant l'hypothèse que l'espèce s'évaporant est dans des conditions de saturation à la surface de la goutte. C'est-à-dire que la pression partielle de l'espèce s'évaporant est la pression de saturation correspondant à la température de la goutte T_e :

$$Y_s = Y_{sat}(T_e) \tag{6.84}$$

Cette température de goutte est évaluée à partir de la conservation de l'énergie de la goutte dans un milieu gazeux à la température T_g et en faisant l'hypothèse de mélange rapide du fluide au sein de la goutte, en gris foncé sur la Fig. 6.5.

Dans l'approche considérée, les termes sources dus aux gouttes qui apparaissent dans les équations de conservation de la phase gazeuse, voir par exemple l'Eq. (6.77), sont complètement fermés grâce à la représentation lagrangienne du spray liquide, voir Eq. (6.76).

6.6 Combustion diphasique

Les flammes qui nous intéressent dans cette section sont des flammes de diffusion diphasiques. Ces flammes sont très souvent rencontrées dans les brûleurs industriels au sein desquels le combustible est injecté sous forme de gouttelettes dans un courant d'air. Le combustible s'évapore alors et la phase gazeuse se charge en combustible dans la zone proche des gouttelettes. L'oxydant étant introduit directement à l'état gazeux, l'écoulement adopte souvent une structure similaire à celui d'une flamme non-prémélangée monophasique. Le spray de gouttelettes dans leur vapeur est entouré par de l'oxydant gazeux. Entre ces deux zones, le mélange en phase gazeuse permet l'établissement de réactions chimiques et donc l'apparition d'une flamme. Dans le cas d'un moteur fusée, c'est l'oxydant qui est injecté liquide. Bien que cela change l'expression des termes sources pour les équations de transport relatives à la fraction de mélange et ses différents moments, la structure de la flamme non-prémélangée de spray reste similaire à celle dans le cas d'injection du combustible liquide. Comme la présente étude a pour but d'être appliquée à la combustion dans les moteurs fusées, la phase liquide est supposée composée d'oxydant dans la suite.

6.6.1 Structure des flammes non-prémélangées diphasiques

Un schéma de la structure d'une flamme non-prémélangée diphasique est présentée sur la figure 6.4. Ce schéma met en évidence la similitude entre les flammes non-prémélangées diphasiques et monophasiques. La différence la plus notable étant que la fraction massique de vapeur d'oxydant, espèce constituant les gouttes, n'est pas maximum sur l'axe de la flamme mais, en s'éloignant de ce dernier, augmente puis diminue. Ceci est dû au fait que la vapeur d'oxydant doit d'abord être produite par évaporation avant de pouvoir se mélanger puis réagir chimiquement.

Ce schéma met aussi en évidence quatre zones distinctes. Dans la première, appelée "coeur froid", les gouttes sont présentes en grande quantité, l'évaporation de ces dernières n'a pas encore eu le temps de se produire. Cependant, lorsque la flamme est accrochée aux lèvres de l'injecteur, le flux de chaleur fait que cette zone se limite au dard liquide car les gouttelettes commencent à s'évaporer dès leur apparition. La zone de vaporisation s'étend alors à toute la région entre la zone de réaction et le dard liquide. La phase gazeuse la constituant est majoritairement composée de la vapeur associée à l'espèce constituant les gouttes. La combustion se produit ensuite dans la zone de réaction. La structure de cette zone de réaction est schématisée sur la figure 6.5.

La zone de réaction se situe à la frontière entre un milieu, en moyenne, oxydant et un milieu, en moyenne, réducteur. De la même manière que pour le cas monophasique, la flamme se localise à l'interface entre ces deux milieux, pour un mélange correspondant



FIGURE 6.4: Schéma de la structure moyenne d'une flamme non-prémélangée diphasique, l'oxydant est injecté liquide et le combustible est injecté gazeux. Profils radiaux de fractions massiques de liquide Y_l , de vapeur d'oxydant $Y_{Ox,g}$ et de combustible Y_F pour différentes abscisses. D'après (BORGHI et CHAMPION, 2000)



FIGURE 6.5: Schéma de la structure d'une zone de réaction en milieu diphasique. D'après (BORGHI et CHAMPION, 2000)



FIGURE 6.6: Schéma d'une goutte d'oxygène liquide (Lox) dans une atmosphère composée de combustible. Profils de température et de fraction massiques associés dans la phase gazeuse.

plus ou moins à une composition stoechiométrique. De plus, il apparaît du côté oxydant quelques poches de gaz de combustible entourées d'une flammelette de diffusion et du coté du combustible des gouttes d'oxydant entourées d'une flammelette de diffusion. Enfin on peut noter que la densité de goutte par unité de volume diminue en allant de l'un à l'autre côté de la de la zone de réaction : de l'oxydant vers le combustible. Seules les plus grosses gouttes, ayant un temps caractéristique d'évaporation plus long que celui qui caractérise la traversée de la zone de réaction, traversent cette zone.

Considérons maintenant une goutte seule injectée à une température inférieure à sa température d'ébullition dans un milieu composé de combustible pur. Un schéma d'une telle goutte, ainsi que les profils de température et de fraction massique d'oxydant et de combustible dans la phase gazeuse sont présentés sur la figure 6.6.1. Comme mis en évidence sur les profils de la figure 6.6.1, la fraction massique d'oxydant, et plus généralement d'espèce qui s'évapore, n'est pas unitaire en surface de goutte. En effet, la composition à la surface de goutte est imposée par l'équilibre liquide/vapeur et la formule de Clapeyron, c'est-à-dire que la pression partielle d'oxydant dans le gaz est égale à la pression de saturation correspondant à la température de goutte. Si la goutte est à la température d'ébullition, la pression de saturation est égale à la pression totale et le gaz en surface de goutte est entièrement composé d'oxydant. Cependant, quand la température de goutte est inférieure, la pression de vapeur saturante est inférieure à la pression totale et le gaz en surface de goutte est composé d'un mélange d'oxydant et de combustible. **Il n'existe alors plus de zone de l'écoulement gazeux où l'oxydant est pur.**

Dans un écoulement où se développe une flamme non-prémélangée diphasique telle que celle schématisée sur la figure 6.4, les gouttes, qui n'atteignent pas leur température d'ébullition, sont rencontrées dans la zone proche de l'injection et aussi plus en aval si le temps qu'elles mettent à atteindre leur température d'ébullition est assez long. La distinction entre les différentes zones de la flamme telle que décrite précédemment et, *a fortiori*, la représentation de la zone de réaction au niveau de l'accrochage de la flamme comme décrite dans la figure 6.5, semblent alors discutables. En effet, dans la partie de l'écoulement où les gouttes sont à une température inférieure à leur température d'ébullition, il ne peut y avoir de zone gazeuse où l'oxydant est pur. Dans ces conditions, le milieu entourant les gouttes est un prémélange et on peut s'attendre à ce que la flamme non-prémélangée soit stabilisée, autour de l'injection, par une flamme triple (BORGHI et CHAMPION, 2000).

6.6.2 Modélisation de la combustion diphasique

Bien que la combustion se produise dans un écoulement diphasique, la réaction chimique entre l'oxydant et le réducteur se produit en phase gazeuse. Cependant, le caractère diphasique de l'écoulement modifie l'état local du mélange. Ainsi, l'application directe des modèles de combustion monophasique à la combustion dans un écoulement diphasique semble un peu cavalière. En effet, comme introduit dans le chapitre sur la modélisation de la combustion en écoulement monophasique, la combustion peut être vue comme la compétition entre un temps caractéristique du mélange et un temps caractéristique chimique. Bien que ce dernier temps caractéristique ne soit, *a priori*, pas modifié par le caractère diphasique de l'écoulement, le temps de mélange est lui fortement impacté par la présence de gouttes. Le modèle de combustion doit donc prendre en compte la modification de ce temps caractéristique du mélange. Plusieurs approches de la modélisation de la combustion diphasique ont été envisagées.

L'objectif de ce travail de Thèse étant de développer un modèle de combustion applicable à toute la phase d'allumage, le modèle MIL modifié présenté dans le chapitre 3 est étendu aux écoulements diphasiques en suivant une approche similaire à celle retenue par Demoulin (DEMOULIN, 1999; DEMOULIN et BORGHI, 2000, 2002).

Prise en compte des fluctuations induites par la vaporisation

L'effet des gouttes sur l'homogénéité du mélange est pris en compte par l'intermédiaire de termes sources supplémentaires dans l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange.⁸ La forme de la PDF de la fraction de mélange, présumée sous la forme d'une fonction bêta, prend alors en compte l'augmentation de la ségrégation du mélange induite par la présence de gouttes. Les récentes bases de données DNS de Duret *et al.* (DURET et al., 2012) tendent à montrer qu'une PDF bêta n'est cependant pas la plus adaptée aux écoulements diphasiques. L'allure des PDF issues de ces bases de données

^{8.} Dans le cas de l'évaporation d'oxydant le terme source de l'équation de transport de la fraction de mélange moyenne est nul.

correspond plutôt à la superposition d'une PDF bêta et d'un pic de Dirac représentant la composition en surface de goutte. Ceci est aisément compréhensible puisque la goutte maintient une composition constante à sa surface lorsqu'elle s'évapore, voir section précédente. Cependant, pour des raisons de simplicité et de difficulté d'évaluation du poids de ce pic de Dirac, la forme de la PDF est présumée par une fonction bêta dans cette étude.

Evaluation du temps caractéristique du mélange

Le temps caractéristique du mélange reste quant à lui à évaluer. Dans le cas monophasique, ce temps est habituellement supposé proportionnel au temps intégral de la turbulence, $\tau_{\xi} = C_{\xi}\tau_t$. Comme la présence de gouttes affecte l'écoulement et donc la turbulence, ce temps τ_t prend en compte une partie de l'effet du spray. L'utilisation de l'hypothèse de proportionnalité utilisée dans le cas monophasique semble donc pouvoir être prolongée aux écoulements diphasiques. Cependant, cette évaluation du temps caractéristique du mélange souffre des mêmes handicaps que pour le cas monophasique, voire plus puisqu'un spray contient une multitude de gouttes dont les caractéristiques, notamment le temps de mélange, sont différents. Une approche plus générale consiste donc à évaluer ce temps localement par l'intermédiaire de sa définition $\tau_{\xi} = \tilde{\xi''}/\tilde{\chi}_{\xi}$ et donc à résoudre les équations de transport de ces deux quantités en écoulement diphasique. Ceci est au coeur du travail publié dans la référence (GOMET et al., 2013).

Prise en compte du transitoire thermique des gouttes

Enfin, comme précisé dans la section précédente, tant que les gouttes ne sont pas à leur température d'ébullition, l'écoulement ne peut pas présenter de zone gazeuse où l'oxydant est pur. La fraction de mélange ne varie alors plus dans l'intervalle [0, 1] mais dans $[\xi_{\min}, 1]$.⁹ Cette restriction du domaine de variation de la fraction de mélange doit alors être prise en compte dans le support la PDF de la fraction de mélange (BORGHI, 1996). Chaque goutte ayant sa propre température de surface, elle a aussi sa propre composition de surface. Les bornes du support de la PDF peuvent donc potentiellement avoir autant de valeurs qu'il y a de gouttes. Une façon générale de décrire l'effet de ces bornes serait de considérer leur PDF respective. Cependant, ceci nécessiterait soit de résoudre des équations supplémentaires, ce qui serait coûteux, soit de présumer, leur forme ce qui semble, *a priori*, difficile. L'approche simplifiée utilisée ici correspond à une démarche similaire à celle introduite par Demoulin et Borghi (DEMOULIN et BORGHI, 2000, 2002), seule la valeur moyenne de ξ_{\min} est considérée et le support de la PDF est alors tronqué à cette valeur particulière. Une équation de transport de la quantité moyenne de limite basse de la fraction de mélange, $\overline{\rho}(1-\tilde{\xi})\overline{\xi}_{\min}$, est alors écrite :

^{9.} Si c'est du combustible qui s'évapore, cet intervalle devient $[0, \xi_{\text{max}}]$



FIGURE 6.7: Fonction densité de probabilité présumée sous la forme d'une fonction bêta, tracé pour $\tilde{\xi} = 0.4$ et $\tilde{\xi''}^2 = 0.01$ (trait pointillé) comparée avec la β -PDF renormalisée pour $\bar{\xi}_{\min} = 0.2$ (trait continu), le domaine de définition correspondant est coloré en gris.

$$\frac{\partial \overline{\rho}(1-\widetilde{\xi})\overline{\xi}_{\min}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j(1-\widetilde{\xi})\overline{\xi}_{\min} - \overline{\rho}\frac{\nu_t}{\mathrm{Sc}_t}\frac{\partial(1-\widetilde{\xi})\overline{\xi}_{\min}}{\partial x_j} \right) = \overline{\rho}\overline{\xi_{\min}\omega_v} - \overline{\rho}\overline{\xi_{\min}\omega_{v,\xi}} \quad (6.85)$$

Pour le cas d'évaporation du combustible, on peut se reporter à la thèse de Demoulin (DEMOULIN, 1999). La première contribution du membre de droite de l'équation (6.85) est fermée comme suit :

$$\overline{\rho\xi_{\min}\omega_v} = \sum_{e=1}^{N_{\text{échant}}} \xi_S^e \frac{\dot{m}^e}{V}$$
(6.86)

L'équation (6.86) traduit le fait que le taux de vaporisation est nul partout sauf en surface de goutte où $\xi_{\min} = \xi_S^e$. De plus, comme la goutte est composée d'oxydant, la seconde contribution du membre de droite de l'Eq. (6.85), associée à l'équation de conservation de la fraction de mélange, est nulle.

L'équation (6.85) fournit donc la limite basse du domaine de variation de la fraction de mélange, i.e., $\overline{\xi}_{\min}$. Finalement, afin que le support de la PDF de la fraction de mélange, présumée sous la forme d'une fonction bêta, reste cohérent avec le domaine de variation de la fraction de mélange, la PDF $\widetilde{P}(\xi)$ est renormalisée sur le support restreint correspondant.¹⁰ Une illustration du résultat de cette procédure de renormalisation est illustrée sur la figure 6.7.

^{10.} On peut noter que les fluctuations de ξ_{\min} autour de sa valeur moyenne $\overline{\xi}_{\min}$ ne sont pas prises en compte dans cette procédure de renormalisation.



FIGURE 6.8: Tracés de la fraction massique d'oxygène et de la température de flamme en fonction de la fraction de mélange en considérant la solution de Burke et Schumann, un équilibre entre les espèces majoritaires $(O_2, H_2 \text{ et } H_2O)$ ou en considérant toutes les espèces envisageables.

Influence de la modélisation de l'équilibre chimique

En prenant en compte les fluctuations de composition induites par l'évaporation des gouttes, leur impact sur l'évaluation du temps de mélange ainsi que l'effet du transitoire thermique des gouttes sur le mélange local, le modèle MIL à chimie brusque a pu être étendu à la combustion diphasique. Cependant, dans le cas de la combustion d'hydrogène gazeux en présence d'oxygène liquide, l'hypothèse d'une chimie à l'équilibre reposant sur la solution de Burke et Schumann peut être inadaptée. En effet, cette approximation permet d'obtenir des résultats satisfaisants pour la fraction massique d'oxygène, voir figure 6.8, mais entraîne une surestimation de la température à la stoechiométrie de l'ordre de 2000K, soit environ 60%.

Ainsi, le squelette du modèle MIL à chimie brusque est modifié pour ne pas atteindre des états où l'avancement est supérieur à l'avancement à l'équilibre.¹¹ Plutôt que d'être basée sur l'approximation de Burke et Schumann, la trajectoire d'équilibre chimique dans l'espace des compositions est tabulée à partir d'un calcul d'équilibre basé sur un schéma cinétique détaillé. Comme pour le modèle MIL standard présenté dans le chapitre 3, la trajectoire MIL est alors entièrement déterminée par la position des sauts d'allumage qui sont eux-mêmes déterminés à partir de la comparaison entre le temps caractéristique chimique et le temps de mélange scalaire local, voir la figure 6.9. Cette trajectoire permet

^{11.} La diffusion différentielle étant négligée dans notre approche, les "super-équilibres" observés expérimentalement (MEIER et al., 1996) ne sont pas à envisager dans le cadre de ce travail, pour plus de détails voir (GICQUEL et al., 2005).

alors, grâce au formalisme lagrangien, d'évaluer le taux de production chimique comme suit.

$$\omega_Y^{Eq} = \frac{1}{\tau_{\xi}} \left[\left(\widetilde{\xi} - \xi \right) \frac{d}{d\xi} Y^{Eq}(\xi) - \left(\widetilde{Y} - Y^{Eq}(\xi) \right) \right]$$
(6.87)

Où $Y^{Eq}(\xi)$ est la trajectoire d'équilibre chimique tabulée.

Cependant lorsque les particules brûlent, elles le font jusqu'à ce que la variable d'avancement de la réaction globale ait atteint la valeur d'équilibre. Cette modification permet donc de diminuer la surévaluation de l'avancement de la réaction mais ne permet pas de prendre en compte l'énergie qui reste contenue dans les espèces radicalaires présentes à l'équilibre. La température ainsi obtenue est moins élevée que celle obtenue avec le modèle MIL s'appuyant sur l'approximation de Burke et Schumann mais ne permet pas de restituer la température d'équilibre.

6.7 Conclusion

L'approche proposée dans ce chapitre permet donc de modéliser la combustion turbulente diphasique en prenant en compte le transitoire thermique des gouttes, les fluctuations de mélange induites par l'évaporation de ces dernières, ainsi que l'interaction chimie/turbulence tout en restituant, a posteriori, l'effet des radicaux sur la composition locale après réaction et donc sur le champ de température. Cette approche est mise en oeuvre dans le chapitre suivant.



FIGURE 6.9: Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange afin de déterminer le domaine d'allumage $[\xi_{J,}; \xi_{J+}]$ dans l'espace de la fraction de mélange (haut). Représentation conventionnelle du modèle MIL (lignes épaisses) dans l'espace des phases (ξ, Y) modifié afin de prendre en compte l'équilibre chimique (bas).

Chapitre 7

Application à un cas test diphasique représentatif

Comme précisé dans l'introduction de cette partie, la phase d'allumage qui nous intéresse est assimilable à l'étude d'une flamme cryogénique se développant en aval d'un injecteur co-axial. Dans ce chapitre le modèle de combustion précédemment présenté est donc appliqué à un cas test pertinent : le banc MASCOTTE

7.1 Flamme diphasique subcritique : MASCOTTE A10

7.1.1 Description du banc d'essai

Le banc d'essai de combustion cryotechnique MASCOTTE (Montage Autonome Simplifié pour la Cryocombustion dans l'Oxygène et Toutes Techniques Expérimentales) est, avec le banc P8 situé à Lampoldshausen, l'un des deux montages expérimentaux lourds développés dans le cadre du GDR 1075 et dimensionnés pour pouvoir reproduire les conditions de fonctionnement des moteurs fusées pour le plus grand nombre de paramètres possibles. Ce banc, implanté sur le site de L'ONERA Palaiseau, a été construit, d'une part, pour l'étude des mécanismes élémentaires rencontrés lors de la combustion d'ergols cryogéniques à la sortie d'un injecteur coaxial et, d'autre part, pour la mise au point et l'utilisation de techniques de diagnostics avancés dans des conditions extrêmes. Initialement capable, dans sa version V01 de 1994, d'essais à une pression chambre basse (< 10bar) et utilisant de l'hydrogène à température ambiante, le banc MASCOTTE a vu, avec sa version V02 de 1995 et V03 de 1997, sa plage de pression chambre augmenter jusque 70bar et sa plage de débit d'hydrogène, elle aussi, augmenter grâce à la diminution de la température d'injection de ce dernier. Pour plus d'informations sur le banc et les mesures effectuées, on peut se référer par exemple à (CANDEL et al., 1998; SNYDER et al., 1997). On peut aussi noter que la version V03 a permis la réalisation d'essais de



FIGURE 7.1: Boîtier de combustion 10 bar : schéma de principe et montage en fonctionnement (ONERA).

combustion méthane/oxygène.

Le système est composé d'un injecteur coaxial alimenté dans la partie centrale en oxygène liquide, et en hydrogène gazeux dans la partie annulaire extérieure. L'injecteur, dont la géométrie peut changer suivant les conditions de l'essai, est positionné au centre de la face d'injection carrée de côté 50mm. La longueur de la chambre est de 400mm et une tuyère convergente/divergente, en carbone en configuration basse pression et en cuivre en configuration haute pression, lui est adjointe. A titre d'illustration, un schéma de la chambre de combustion est présenté sur la figure 7.1 ainsi qu'une photo du montage chambre et tuyère en fonctionnement.

Afin de caractériser les conditions expérimentales de chaque essai cinq paramètres ont été introduits : le débit d'oxygène liquide, le débit d'hydrogène gazeux, la pression dans la chambre de combustion au cours de l'essai, le rapport du débit d'oxygène sur le débit d'hydrogène $M = \dot{m}_{O_2}/\dot{m}_{H_2}$ et le rapport des flux de quantité de mouvement à l'injection $J = \rho_{H_2} U_{H_2}^2 / \rho_{O_2} U_{O_2}^2$. Le tableau 7.1 liste les différents points de fonctionnement considérés dans la version V01 du banc MASCOTTE.

Point	Pression [MPa]	Débit Lox $[\rm g/s]$	Débit H_2 [g/s]	J	M
A-1	0.1	50	15	13.4	3.3
C-1	0.1	50	10.0	6.3	5.0
A-10	1.0	50	23.7	14.5	2.1
C-10	1.0	50	15.8	6.5	3.2

TABLE 7.1: Conditions expérimentales pour le banc MASCOTTE.

Dans le cadre de cette étude, seuls les points de fonctionnement où l'oxygène est souscritique sont envisagés et plus particulièrement le point A10 présenté à l'International Workshop on Rocket Combustion Modeling (IWRCM 2001) sous le nom de RCM-2. Ce point de fonctionnement a fait l'objet de multiples études dont une synthèse peut être trouvée dans (HABIBALLAH et al., 2006). Une base de données conséquente réunissant des visualisations de la flamme cryotechnique, des mesures de températures ainsi qu'une caractérisation du spray de gouttelettes d'oxygène a été construite et permet à ce point de fonctionnement d'être aujourd'hui considéré comme un cas test de référence pour la simulation de flammes cryotechniques diphasiques sous-critiques.

7.1.2 Point de fonctionnement A-10 et configuration de calcul

	Injection Lox	Injection H_2
Pression [bar]	-	10
Débit $[g/s]$	50	23.7
Température d'injection [K]	85	287
Vitesse d'injection $[m/s]$	2.18	320
Masse volumique $[m/s]$	1160	0.84

Les paramètres d'injection d'oxygène liquide et d'hydrogène gazeux pour le point A-10 sont résumés dans le tableau 7.2

TABLE 7.2: Conditions expérimentales pour le point A-10.

Bien que, comme précisé dans le paragraphe précédent, la chambre de combustion du banc MASCOTTE ait une section interne carrée, la présente étude est faite en utilisant une géométrie approchée. En effet, suivant les recommandations de l'IWRCM, le diamètre hydraulique de la chambre de combustion est conservé mais cette dernière est supposée axisymétrique. La géométrie ainsi obtenue, voir figure 7.2, est similaire à celle utilisée dans les travaux numériques antérieurs (CHENG et FARMER, 2006; JAY et al., 2006; NICOLE et al., 2009; POUROUCHOTTAMANE et al., 2001; BODÈLE et al., 2001).

Le domaine de calcul utilisé pour cette simulation est un maillage non structuré constitué d'approximativement 26 450 noeuds et 51 400 éléments triangulaires. Il comprend une description détaillée de la tuyère et une zone tampon a été ajoutée en aval de cette dernière afin de faciliter le traitement numérique de la condition limite correspondante.

L'approche lagrangienne choisie dans cette étude pour simuler la phase liquide ne permettant pas de modéliser l'atomisation primaire, des caractéristiques réalistes de vitesse et de rayon des gouttes de Lox doivent être prescrites en entrée de domaine. La méthodologie suggérée au cours du deuxième IWRCM est alors suivie. L'injection des gouttes de Lox est



FIGURE 7.2: Domaine de calcul et conditions limites associées.

supposée se faire le long d'un cône potentiel, aussi appelé dard liquide (Fig. 7.2), qui est assimilé à une paroi. La longueur du dard liquide est approchée par la formule empirique de Hopfinger et al. (HOPFINGER et LASHERAS, 1996) qui est une fonction du diamètre de l'entrée de liquide et du rapport de quantité de mouvement des deux fluides.

$$\frac{L_d}{D_{\text{injecteur}}} = \frac{6}{\sqrt{J}} \tag{7.1}$$

Ce qui conduit dans le cas MASCOTTE A-10 à un dard liquide long de 7.7mm.

Les gouttes sont alors injectées de manière discrète par des injecteurs positionnés sur cette paroi. Dans cette modélisation, proposée par Caré et Ledoux (CARÉ et LEDOUX, 1991) et schématisée sur la Fig. 7.2, les valeurs des angles d'injections sont données par la relation suivante.

$$\theta(x) = \arctan\left(\frac{R_i \left(1 - x/L_d\right)}{x + R_i/\tan(\theta_i)}\right) \quad \text{avec} \quad \tan(\theta_i) = 0.68 \frac{U_{\text{gaz}} - U_{\text{liq}}}{U_{\text{liq}}} \frac{\rho_{\text{gaz}}}{\rho_{\text{liq}}} \tag{7.2}$$

Cependant, et bien que cette formulation soit continue, l'injection des gouttes se fait en pratique de manière discrète : un certain nombre d'injecteurs est défini et positionné à l'avance. L'utilisation directe de cette modélisation impacte donc grandement la structure du spray en proche injection, la position de chaque injecteur ponctuel pouvant être identifiée d'un simple coup d'oeil au spray calculé. Afin d'éviter une signature trop importante de la discrétisation introduite par les injecteurs, le dard liquide est divisé en dix zones de surfaces équivalentes. On suppose alors que chaque zone fourni un dixième du débit total et que les gouttes émises par chaque zone ont des caractéristiques identiques à celles de gouttes issues d'un injecteur situé en leur centre avec l'approche Caré et Ledoux. Le module de la vitesse initiale des gouttes ayant été mesuré expérimentalement à 10 m/s (GICQUEL et TANGUY, 1999) la vitesse des gouttes issues de chaque zone peut être évaluée par conservation du module. Le tableau 7.3 récapitule les angles et vitesses pour chaque zone en ayant pris $\theta_i = 69^\circ$. L'injection ainsi modélisée permet d'éviter une localisation préférentielle des gouttes en proche dard liquide.

	Angle θ	Vitesse Ux $[m/s]$	Vitesse Uy $[\rm m/s]$
Zone 1	52.5	6.1	7.93
Zone 2	40	7.35	6.77
Zone 3	28.2	8.8	4.75
Zone 4	21	9.3	3.7
Zone 5	14.5	9.7	2.5
Zone 6	10	9.8	1.8
Zone 7	6.7	10	1.2
Zone 8	4.2	10	0.7
Zone 9	1.8	10	0.3
Zone 10	1	10	0.05

TABLE 7.3: Caractéristiques des injecteurs surfaciques.

Enfin, suivant les recommandations du second IWRCM les gouttes de Lox sont injectées avec un diamètre de Sauter moyen $d_{32} = 82\mu m$, ce qui est en accord avec la distribution en taille de gouttes mesurée, tronquée à 250 micromètres (GICQUEL et al., 1998).

7.2 Résultats numériques

Bien que la phase transitoire depuis l'allumage jusque la stabilisation de la pression dans la chambre de combustion ait été calculée, seuls les résultats stationnaires sont présentés et comparés aux données expérimentales disponibles. Comme précisé précédemment, la chambre de combustion entière ainsi que la tuyère sont pris en compte pour le calcul. Bien que certaines études antérieures n'aient pas inclus la tuyère dans le domaine de calcul, on s'attend à ce que cette dernière ait un rôle important dans l'établissement des conditions stabilisées au sein de la chambre de combustion. En effet, la tuyère régule l'évacuation des gaz chauds, elle influence donc la pression et la température au sein de la chambre de combustion.


FIGURE 7.3: Champ de pression avec lignes de courant (haut) et champ de nombre de Mach (bas).

7.2.1 Résultats qualitatifs

Après avoir constaté sur la figure 7.3 que la tuyère est bien amorcée, l'écoulement étant sonique au col, et donc que la chambre de combustion est bien isolée des conditions extérieures, i.e. de la zone tampon dans la simulation. On peut s'attarder sur le niveau de pression dans la chambre de combustion. Ce dernier, représenté sur la figure 7.3, étant le résultat de l'équilibre entre l'énergie injectée puis transformée au sein de la chambre et les gaz chauds évacués par la tuyère. Il est un bon indicateur de la qualité globale de la simulation. La pression dans la chambre de combustion ayant le même ordre de grandeur à l'issu du calcul que le niveau de pression mesuré expérimentalement, le calcul semble globalement à même de restituer les mécanismes complexes de cet écoulement. Ceci est aussi confirmé par la topologie des lignes de courant. En effet, elles mettent en évidence une zone de recirculation en proche injection qui a la même forme et la même taille que celle observée expérimentalement. Cette zone de recirculation étant le résultat de la déviation du courant d'hydrogène par le spray de LOx s'évaporant sous l'influence de la flamme et de l'expansion thermique associée, le comportement de la flamme en début de chambre semble donc globalement correctement restitué.

Après avoir considéré la pression qui est une grandeur relativement homogène pour toute la chambre de combustion, il est intéressant d'analyser plus en détails l'évolution d'autres quantités, voir figure 7.4. Sur cette figure sont représentés le spray de gouttes colorées par leur température ainsi que le champ de température de la phase gazeuse. Au premier coup d'oeil, on constate que la flamme semble entourer le spray de gouttes d'oxygène liquide même si un petit nombre de gouttes traverse le front de flamme pour finalement impacter la paroi de la chambre de combustion. Ce comportement est similaire à celui observé expérimentalement et est cohérent avec l'approche de spray dilué utilisé pour la modélisation de cette flamme. Notons tout de même que, bien que des gouttes de LOx frappant la paroi aient été observées expérimentalement, le rebond de ces dernières sur la paroi est le résultat d'un choix arbitraire de modélisation de l'interaction goutte/paroi par un rebond élastique. La représentativité de ce modèle quant au comportement de ces



FIGURE 7.4: Tracés du spray de gouttelettes calculées colorées par leur température ainsi que des lignes de courant dans la zone de recirculation (haut), spray de gouttelettes superposé au champ de température moyenne (bas), le tout est issu d'une simulation numérique du cas MASCOTTE A-10.

gouttes impactantes est donc discutable mais il n'a pas fait l'objet de plus d'investigation dans le cadre des travaux discutés ici.

Si on s'intéresse maintenant plus particulièrement à l'évolution de la température des gouttes, on constate que, bien que l'hypothèse de gouttes à l'ébullition soit acceptable dans le coeur du nuage de gouttes, la prise en compte du transitoire thermique est de toute première importance à la périphérie du spray. En effet, les gouttes qui s'y situent n'atteignent la température d'ébullition que juste avant leur disparition. Négliger le transitoire thermique de ces gouttes mènerait à une surestimation de leur taux d'évaporation et donc une diminution de leur durée de vie. De plus, la composition locale et, par conséquent, la forme de la flamme s'en trouveraient notablement modifiées.

Enfin, la forme de la flamme en proche injecteur est présentée sur la figure 7.5. Sur cette figure, le champ de fraction massique moyenne de radical hydroxyle, i.e., \tilde{Y}_{OH} , a été évalué en utilisant la même méthode que celle explicitée un peu plus loin pour reconstruire la température prenant en compte la présence d'espèces radicalaires. Ce champ de radical OH est comparé à sa visualisation expérimentale après transformé d'Abel. La comparaison de ces deux champs met en évidence la bonne représentation de la forme de la flamme, en particulier la localisation de la bosse que fait la flamme ainsi que le fait qu'elle soit accrochée aux lèvres de l'injecteur. Cependant, le maximum de concentration n'est pas localisé au même endroit sur le champ reconstruit et sur la visualisation expérimentale, ce maximum étant localisé, pour le champ reconstruit, au niveau de la bosse (bump) que fait la flamme alors qu'il se situe près des lèvres de l'injecteur pour le champ expérimental. Une différence similaire a aussi été reportée dans d'autres simulations numériques effectuées pour la même géométrie, voir par exemple l'étude conduite par Cheng et Farmer (CHENG et FARMER, 2006).



FIGURE 7.5: Champ de fration massique moyenne de radical hydroxyle OHissu de la simulation (haut) et transformée d'Abel appliqué à la visualisation expérimentale de radical OH, CANDEL et al. (1998) (bas).

7.2.2 Prise en compte des effets de dissociation

Avant de s'intéresser aux résultats quantitatifs issus de la simulation, il faut revenir sur le modèle de combustion diphasique discuté dans le chapitre précédent. En effet, comme montré sur la figure 6.8, l'hypothèse de Burke et Schumann induit une surestimation de l'avancement et donc une surestimation de la température de flamme. L'influence des réactions chimiques inverses à l'équilibre, qui sont endothermiques, et des espèces radicalaires associées doit donc être prise en compte. C'est pourquoi une tabulation de la variable d'avancement construite à partir d'un calcul d'équilibre chimique complexe, i.e. prenant en compte la présence de radicaux, a été utilisée dans le modèle de combustion. Cependant, le solveur eulérien ne considère que les équations de transport des fractions massiques moyennes de H_2 , O_2 et H_2O avec leurs taux de réaction chimique moyen évalués à partir de $\widetilde{\omega}_{Y_{H_2}} = \widetilde{\omega}_Y / \nu_{O_2}$, $\widetilde{\omega}_{Y_{O_2}} = \widetilde{\omega}_Y$, et $\widetilde{\omega}_{Y_{H_2O}} = (\nu_{H_2O}/\nu_{O_2})\widetilde{\omega}_Y$ avec ν_{O_2} et ν_{H_2O} les coefficients stoechiométriques massiques. Il en découle donc une surévaluation de la concentration de vapeur d'eau dans la simulation et donc une surévaluation de la valeur de la température moyenne.

Afin de compenser cette surestimation tout en restant consistant avec les trajectoires lagrangiennes utilisées dans le modèle de combustion, voir figure 6.9, le champ de température moyenne est estimé comme suit. La température d'équilibre, évaluée à partir d'un calcul d'équilibre complexe, est tout d'abord tabulée comme une fonction de la fraction de mélange. Puis, dans chaque cellule du domaine de calcul, la connaissance de la position des sauts d'allumage, ξ_{J} et ξ_{J+} , permet de déterminer l'évolution lagrangienne de la température $T^{\text{MIL}}(\xi)$. Enfin, la valeur corrigée de la température est obtenue à partir de l'expression de $T^{\text{MIL}}(\xi)$ et de la PDF de la fraction de mélange présumées, $\widetilde{P}(\xi)$.

$$\widetilde{T}(\boldsymbol{x}) = \int_0^1 T^{\text{MIL}}(\xi; \boldsymbol{x}) \widetilde{P}(\xi; \boldsymbol{x}) d\xi$$
(7.3)

A titre d'illustration, les profils axiaux de température moyenne, prenant ou non en



FIGURE 7.6: Profils de température moyenne à Y=10 mm (gauche) et Y=15 mm (droite) tracés en fonction de la coordonnée axiale X. **Symboles** : données expérimentales et variation mesurée, **lignes continues** : avec prise en compte des effets de dissociation, **lignes discontinues** : sans prendre en compte les effets de dissociation.

compte les effets de dissociation, sont tracés sur la figure 7.6 pour deux positions radiales différentes. Comme attendu, les différences observées entre ces deux profils se limitent aux premiers deux tiers de la chambre de combustion pour Y=10mm, et la correction ne joue un rôle qu'aux alentours de X=0.05m pour Y=15mm. En effet, cette correction ne doit agir que là où la vapeur d'eau est produite, c'est-à-dire dans la flamme. C'est pourquoi les niveaux de température obtenus en dehors de cette dernière ne sont pas influencés par la méthode d'évaluation de la température.

7.2.3 Résultats quantitatifs

Comme le montre la comparaison entre les profils axiaux corrigés et les données expérimentales présentées sur la figure 7.6, la simulation permet de retrouver les bons ordres de grandeur de la température au sein de la chambre de combustion. Ceci est aussi confirmé sur le tracé des profils de température radiaux corrigés, en trait plein sur la figure 7.7. La localisation de la flamme ainsi que sa forme sont donc correctement capturées par la simulation numérique.

Ce constat doit tout de même être nuancé par le fait que le niveau de température prédit par la simulation pour le point le plus proche de l'injection (X=10mm et Y=5mm) est largement surestimé. Cette surestimation est aussi trouvée dans certains travaux précédents (CHENG et FARMER, 2006; IZARD et MURA, 2011). La flamme étant accrochée, comme expérimentalement, aux lèvres de l'injecteur, la surestimation ne peut, a priori, pas être attribuée à une mauvaise localisation de son point d'accrochage. Il est alors vraisemblable que ce comportement soit dû à une mauvaise capture de l'ouverture de la flamme par la simulation. C'est d'ailleurs ce que semble confirmer la comparaison entre les champs de radical hydroxyle issus de la simulation et visualisés, voir figure 7.5. En effet, on constate qu'expérimentalement la flamme est plutôt plate en proche injecteur, ce qui n'est pas le cas pour la simulation numérique puisqu'elle s'ouvre déjà au niveau



FIGURE 7.7: Comparaison entre les différents profils radiaux de température corrigée (ligne) et les données expérimentales (symboles) pour différentes abscisses en aval de l'injection. Comparaison entre les résultats obtenus pour différents modèles de fermeture du SDR moyen, **ligne discontinue** : équation de transport modélisée, **ligne continue** : modèle de relaxation linéaire.

de l'injecteur. La simulation numérique surévaluant la température et l'ouverture de la flamme étant en partie pilotée par l'expansion thermique au nez de l'injecteur, la surévaluation de l'ouverture semble provenir d'une mauvaise évaluation du taux de production en proche injecteur. Si on revient maintenant sur le modèle de combustion, on constate qu'il est fortement dépendant de l'évaluation du temps caractéristique du mélange local, or, comme vu dans la partie concernant l'allumeur torche, voir la partie II sur l'allumeur torche, l'hypothèse de relaxation linéaire des fluctuations, menant à la relation $\tau_{\xi} = C_{\xi}\tau_t$, n'est pas adaptée en région proche de l'injecteur, et cela d'autant plus que l'évaporation est susceptible de modifier le temps de mélange scalaire. La mauvaise évaluation du taux de production pourrait donc être attribuée à la mauvaise évaluation du temps de mélange dans cette zone de l'écoulement.

Afin de mieux évaluer ce temps de mélange en proche injecteur, on se propose d'évaluer ce dernier comme $\tau_{\xi} = \tilde{\xi''}/\tilde{\chi}_{\xi}$. Une seconde simulation est alors menée en résolvant l'équation de transport du taux de dissipation scalaire, Eq. (6.58). Pour cela les mêmes modèles que ceux utilisés pour l'équation de transport en milieu monophasique sont utilisés, voir la partie II sur l'allumeur torche, le terme (XII) représentant l'effet de l'évaporation sur le micromélange, Eq. (6.60), reste cependant à fermer. La fermeture de ce terme est d'ailleurs le défi principal quand on cherche à évaluer le taux de dissipation scalaire moyen dans un écoulement diphasique. Plutôt que de le négliger, on se propose ici de le fermer de manière simple en se basant sur le constat que la vaporisation a tendance à augmenter le taux de mélange, i.e. le taux de dissipation scalaire, entre l'oxydant et le combustible en maintenant le gradient de fraction de mélange local dans la phase gazeuse. Le terme (XII) est donc, a priori, un terme de production dans l'Eq. (6.58). Un modèle simple de fermeture linéaire est alors proposé en première approche :

$$(XII) = C_v \overline{\rho \omega_v} \widetilde{\chi}_{\xi} \tag{7.4}$$

où C_v est une constante de modélisation dont la valeur est choisie unitaire, i.e. $C_v = 1.0$. Les profils de température corrigée issus de cette simulation sont alors tracés en traits pointillés sur la figure 7.7 afin d'être comparés à ceux évalués avec le modèle de relaxation linéaire des fluctuations du champ scalaire. On constate alors que l'amélioration de la représentation du mélange en proche injecteur a un impact non négligeable sur le niveau de température. En effet, le taux de dissipation scalaire évalué à partir du modèle de relaxation linéaire est plus élevé que celui évalué en résolvant son équation de transport. Le temps de mélange étant inversement proportionnel au taux de dissipation, la résolution de l'équation de transport mène à une évaluation plus faible du temps de mélange que la fermeture par relaxation linéaire. De plus, le taux de production est proportionnel à la fréquence de mélange, qui est l'inverse du temps de mélange. La résolution de l'équation de transport conduit donc à une évaluation plus faible du taux de production chimique ce qui se traduit par une légère amélioration de la qualité de l'accord entre la simulation et les mesures.

7.2.4 Influence de l'évaluation du mélange local

La modélisation utilisée pour les calculs précédemment présentés repose sur la considération que le processus d'évaporation des gouttes contrôle la composition locale du mélange par l'intermédiaire de la limite basse du domaine de variation de la fraction de mélange, i.e., $\overline{\xi}_{\min}$, et des fluctuations induites par la vaporisation. La suite de ce paragraphe illustre l'influence de chacun de ces paramètres sur le calcul de la flamme MASCOTTE A-10.

Les gouttes d'oxygène liquide émises au niveau du dard liquide le sont à une température de 85K, or la température d'ébullition de l'oxygène à 10bar est de l'ordre de 115K. Les gouttes de LOX voient donc, *a priori*, leur température évoluer de 30K au cours de leur vie. Cependant, compte tenu des flux de chaleur très importants arrivant sur ces gouttes, on s'attend à ce que leur température évolue rapidement pour atteindre la température d'ébullition. Le champ de $\overline{\xi}_{min}$ ainsi que ses iso-contours, en rouge, sont alors tracés sur la figure 7.8. On constate alors que la limite inférieure du domaine de



FIGURE 7.8: Le champ de ξ_{\min} et ses iso-contours, en rouge, lignes de courant et limite de présence des gouttes en noir.

variation est la plus élevée aux lèvres de l'injecteur mais reste significativement non nulle dans toute la zone proche du dard LOx. On peut donc en conclure que, bien que la prise en compte de cette borne inférieure du domaine de variation de la fraction de mélange ne soit pas nécessaire à la bonne évaluation du mélange dans la flamme au-delà de 10mm, elle est primordiale pour correctement prédire la composition au niveau de l'accrochage de la flamme, i.e. dans le sillage de l'injecteur.

L'influence de cette limite basse du domaine de variation de la fraction de mélange est alors présentée sur la figure 7.10. Sur cette figure, le champ le plus haut est le champ de température moyenne issu d'une simulation où $\overline{\xi}_{\min}$ est négligé, i.e. , $\overline{\xi}_{\min} = 0$, alors que celui tracé en bas est issu d'une simulation où $\overline{\xi}_{\min}$ est pris en compte. Cette figure met en évidence le fort impact de $\overline{\xi}_{\min}$ sur le développement de la flamme. Ce constat est confirmé par la figure 7.11, où sont représentés les champs de fraction massique de radical hydroxyle. Le radical OH étant considéré comme un bon indicateur de la position de la flamme, on peut en conclure que $\overline{\xi}_{\min}$ influence non seulement la forme de la flamme mais aussi le point d'accrochage ainsi que le niveau maximum de température de cette dernière. L'influence de ξ_{\min} sur la PDF de la fraction de mélange au point d'accrochage de la flamme, i.e. proche des lèvres de l'injecteur, est alors présentée sur la figure 7.9. Sur cette figure, il est clair que prendre en compte $\overline{\xi}_{\min}$ augmente significativement la probabilité d'obtenir un mélange inflammable, alors que négliger cette limite induit une surestimation de la probabilité autour de zéro, ce qui correspond à un mélange non inflammable. C'est la raison pour laquelle la flamme n'arrive pas à s'accrocher aux lèvres de l'injecteur si $\xi_{\rm min}$ n'est pas pris en compte.

L'influence des fluctuations induites par la vaporisation sur le champ de température et sur le champ de radical OH sont aussi présentés sur les Fig. 7.10 et Fig. 7.11. Bien que



FIGURE 7.9: Fonction densité de probabilité de la fraction de mélange en proche injecteur (ligne continue). **Gauche** : comparaison avec le cas $\overline{\xi}_{\min} = 0$ en ligne discontinue, **Droite** : comparaison avec le cas ne prenant pas en compte les fluctuation de mélange induites par la vaporisation en ligne discontinue.

la forme de la flamme soit assez semblable avec et sans prise en compte de fluctuations induites par la vaporisation, on constate que la longueur et le point d'accrochage de la flamme sont significativement modifiés. La flamme semble être translatée jusqu'au bout du dard LOx. Ce comportement s'explique en observant l'allure de la PDF de la fraction de mélange, tracée sur la droite de la figure 7.9, au point d'accrochage de la flamme. En effet, ignorer les fluctuations induites par la vaporisation induit un mélange assez homogène autour d'une valeur très riche (PDF gaussienne autour de $\xi = 0.97$), alors que si ces mêmes fluctuations sont prises en compte, une petite quantité du mélange est dans des proportions proches de la stoechiométrie ce qui permet de promouvoir la combustion et favorise la stabilisation de la flamme. Lorsque des gouttes s'évaporent, l'interface entre le liquide et le gaz impose qu'une certaine quantité de l'espèce s'évaporant entoure la goutte, et ce qu'importe la composition du milieu gazeux. Ce phénomène contribue donc à augmenter le niveau de fluctuations de la composition (variance de la fraction de mélange $\widetilde{\xi''^2}$) et sa prise en compte est donc nécessaire à une bonne évaluation de la PDF de la fraction de mélange.



FIGURE 7.10: Influence des hypothèses de modélisation sur le champ de température moyen, avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$ (haut), sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation (milieu), avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas).



FIGURE 7.11: Influence des hypothèses de modélisation sur le champ de fraction massique moyenne de OH, avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$ (haut), sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation (milieu), avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas).



FIGURE 7.12: Comparaison entre les différents profils radiaux de température corrigée (ligne) et les données expérimentales (symboles) pour différentes abscisses en aval de l'injection. Lignes pointillées : avec $\overline{\xi}_{\min} = 0$, lignes discontinues : sans prendre en compte les fluctuations de mélange induites par la vaporisation, lignes continues : avec prise en compte des fluctuations de mélange induites par la vaporisation et $\overline{\xi}_{\min} \neq 0$ (bas).

L'analyse qualitative précédente est confirmée par la comparaison entre les profils de température corrigée et les mesures expérimentales tracés sur la figure 7.12. Négliger l'un des phénomènes précédemment cité induit une surestimation de la longueur de flamme. De plus, comme le montrent les profils à $X = 250 \ mm$ et $X = 300 \ mm$, le niveau de température est clairement sous-estimé au voisinage de l'axe de symétrie, alors que les profils de température en fond de chambre sont tous en bon accord avec les mesures. Cela confirme que les phénomènes pris en compte dans le cadre de cette étude sont plutôt associés au transitoire de chauffage des gouttes et au phénomène de vaporisation dont l'importance devient moins significative au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'injection.

Conclusions

Dans cette partie, une approche eulérienne-lagrangienne pour la simulation d'écoulements diphasiques a été présentée et appliquée à la simulation d'une flamme se développant dans le sillage d'un injecteur coaxial cryotechnique hydrogène gazeux (GH2) / oxygène liquide (LOx). Dans la modélisation proposée, le spray de gouttes de LOx est représenté au moyen d'une approche lagrangienne stochastique et une attention particulière a été portée à la prise en compte du transitoire thermique des gouttes et de leur vaporisation. Le taux de production chimique moyen est quant à lui évalué en étendant le modèle MIL à chimie brusque à la combustion en écoulement diphasique. Pour cela, l'effet des fluctuations induites par la vaporisation est pris en compte par l'intermédiaire de termes sources additionnels dans l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange et de sa dissipation. De plus, la restriction du domaine de variation de la fraction de mélange induite par les effets de vaporisation des gouttes en dessous de leur température d'ébullition est aussi pris en compte en renormalisant la PDF de la fraction de mélange. Le modèle ainsi obtenu a permis de calculer le cas A10 du banc MASCOTTE. La forme ainsi que la localisation de la flamme simulée sont en bon accord avec les visualisations expérimentales. Les profils de température issus de la simulation sont aussi en très bon accord avec les mesures expérimentales à l'exception du profil le plus proche de l'injection qui est clairement surestimé. Ce comportement a été attribué à une mauvaise estimation du temps de mélange scalaire. Une équation de transport du taux de dissipation scalaire en écoulement diphasique a alors été écrite et résolue afin d'évaluer ce temps de mélange scalaire. Une légère amélioration de la qualité des résultats a alors été constatée.

Cependant, la simulation n'est toujours pas à même de correctement prédire le niveau de température en ce point. La zone proche de l'injection regroupe les points faibles de l'approche proposée. Plusieurs raisons sont envisageables. Tout d'abord la fermeture qui est proposée pour la contribution diphasique dans l'équation de transport du taux de dissipation scalaire est pour le moins rudimentaire. Une analyse plus poussée est nécessaire afin de pouvoir proposer une fermeture plus adaptée. L'analyse des bases de données issues des DNS de Duret et al. (DURET et al., 2012) et leurs travaux futurs offrent un certain nombre de perspectives dans cette direction. La description de l'injection et en particulier l'atomisation peut aussi être incriminée. Une approche eulérienne pourrait per-

mettre d'améliorer ce point particulier mais au détriment de la description du spray de gouttes. Une approche hybride pourrait aussi être une solution mais de nombreux développements restent à effectuer dans cette direction. Enfin, les lèvres de l'injecteur sont très froides, puisque l'oxygène liquide est injecté à 85K, et ne peuvent, en toute rigueur pas être considérées comme des parois adiabatiques. Comme les pertes de chaleur au niveau de l'injecteur sont susceptibles de modifier la localisation de la flamme et en particulier son point d'accrochage, une analyse plus poussée de cette condition limite et de son impact sur le modèle de combustion serait une voie d'amélioration de la méthodologie de calcul. Pour terminer, on peut noter les travaux de (NICOLE et al., 2009) qui ont montré que l'injection d'un film d'hélium en paroi, afin de protéger le hublot de visualisation, a un impact non négligeable sur la manière dont la flamme s'établit, en particulier en proche injection. Quatrième partie Entrées multiples

Contexte

Physique de l'écoulement

Dans cette partie, la dernière phase d'allumage d'un moteur fusée est étudiée. Un schéma représentatif de ce qui se passe au sein de la chambre de combustion durant cette phase est présenté sur la figure 7.13. Durant cette phase, le dôme LOx continue de se remplir progressivement et les couronnes d'injecteurs se mettent toutes à débiter ce LOx. Les mélanges injectés s'allument alors de proche en proche, les flammes allumées sur la première couronne d'injection allument le mélange issu de la deuxième couronne d'injection et ainsi de suite jusqu'à l'allumage complet de la plaque d'injection.



FIGURE 7.13: Schéma de la première étape de l'allumage d'un moteur fusée cryotechnique.

Cependant, le dôme LOx est initialement rempli d'un gaz inerte. Les injecteurs des différentes couronnes ne se mettent donc pas à débiter de l'oxygène liquide au même instant. De plus, à un instant donné, un injecteur peut débiter de l'oxygène liquide pur alors qu'un autre peut débiter un mélange LOx/inerte. Il en résulte que chaque injecteur de la plaque d'injection a des conditions d'injection qui lui sont propres et qui évoluent avec le temps jusqu'à ce que le dôme LOx soit rempli et que les injecteurs débitent tous du LOx pur. La simulation de cette phase de l'allumage nécessite donc la prise en compte de cette hétérogénéité dans la composition des différents courants oxydant.

Objectifs

L'approche proposée dans les parties précédentes pour la modélisation de la combustion turbulente repose sur la considération de la fraction de mélange, elle n'est pas adaptée à la prise en compte des entrées multiples. On se propose alors dans cette partie d'étendre le domaine d'application de la notion de fraction de mélange aux conditions comportant plusieurs entrées. Cette approche étant générale, sa pertinence est alors évaluée dans le cadre d'un modèle de combustion turbulente simple puis appliquée au modèle MIL afin de pouvoir l'utiliser pour l'ensemble de la phase de l'allumage d'un moteur fusée.

Chapitre 8

Mélange multi-entrées

8.1 Introduction

La combustion non prémélangée est souvent considérée sur les bases du cas limite de la flamme de diffusion qui tire son nom du phénomène qui en impose la dynamique : la diffusion moléculaire (PETERS, 1984). Pour de telles conditions, reposant sur l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide, le problème peut être résolu en découplant le mélange et la chimie. Ce dernier est alors équivalent à un problème de mélange pur auquel se superpose une zone de réaction se localisant aux endroits où le mélange est en proportion stoechiométrique (HAWTHORNE et al., 1949). L'approche standard retenue pour modéliser de telles flammes non-prémélangées repose donc sur la considération d'un scalaire passif, i.e. qui n'est pas impacté par les réactions chimiques.

Plusieurs définitions de ce scalaire passif peuvent être trouvées dans la littérature. Les fonctions de Shvab-Zel'dovich ont ainsi été introduites en se basant sur l'hypothèse d'une chimie globale, avec une seule étape. Puis, une fois convenablement adimensionnée, pour varier entre zéro, dans le courant d'oxydant, et l'unité, dans le courant de combustible, ces fonctions permettent de retrouver la définition standard de la fraction de mélange. L'expression de la fraction de mélange peut aussi être obtenue directement, comme proposé par Bilger (BILGER, 1976), à partir de la conservation des éléments chimiques (conservation des atomes) sans que l'hypothèse d'une chimie globale ne soit nécessaire. Cependant, toutes ces définitions s'appuient sur la même signification physique de la fraction de mélange définie comme le rapport du flux de masse issu du courant de combustible sur la somme des flux de masse issus du courant de combustible et du courant d'oxydant (PE-TERS, 2000). En adoptant ce point de vue, l'hypothèse sous-jacente de deux entrées, une d'oxydant et une de combustible, devient évidente. L'utilisation de la fraction de mélange standard (FMS) n'est donc pas appropriée pour les systèmes impliquant plus de deux entrées.

Les configurations non-prémélangées à plusieurs entrées sont souvent traitées comme si elles n'en avaient que deux afin d'utiliser la FMS ou bien en considérant un scalaire additionnel passif par entrée supplémentaire (FARTOUK et al.; HASSE et PETERS, 2005; CHRISTO et DALLY, 2005; IHME et SEE, 2011). En fait, il existe peu de travaux publiés qui s'efforcent de lever l'hypothèse de deux entrées. Ainsi, on peut citer les travaux expérimentaux de Becker dans lesquels le mélange entre trois entrées est étudié par néphélométrie (BECKER et BOOTH, 1975; BECKER, 1977) et où les relations entre les valeurs moyennes et les variances des traceurs associés à chaque entrée sont explicités. Lockwood et Salooja (LOCKWOOD et SALOOJA, 1981) ont ensuite proposé d'étendre le concept de scalaire passif à une flamme impliquant trois entrées, une de combustible et deux d'oxydant, en considérant deux scalaires passifs et en négligeant les fluctuations du courant d'oxydant qui influence le moins l'écoulement. Ce travail a ensuite été appliqué conjointement avec une hypothèse de chimie infiniment rapide à une étape afin de simuler la flamme de diffusion à trois entrées de Bertrand et al. (BERTRAND et al., 1985).

8.2 Une fraction de mélange multi-entrées

L'objectif de cette section est d'étendre le domaine d'utilisation de la fraction de mélange en levant l'hypothèse de deux entrées. Pour cela, nous allons nous appuyer sur la fraction de mélange standard.

8.2.1 Fraction de mélange standard à deux entrées

Dans un système classique impliquant deux entrées tel que celui présenté sur la figure 8.1, où l'indice *fuel* est associé au courant d'entrée combustible avec un flux de masse \dot{m}_{fuel} et l'indice ox est associé au courant d'entrée oxydant avec un flux de masse \dot{m}_{ox} . La fraction de mélange ξ est définie en tout point comme étant le rapport du flux de masse issu du courant combustible, \dot{m}_{fuel} , sur la somme des deux flux de masse, $\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}$

$$\xi = \dot{m}_{fuel} / \left(\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox} \right) \tag{8.1}$$

de telle manière que $\xi = 0$ dans le courant oxydant et $\xi = 1$ dans le courant combustible. De plus, ces deux courants peuvent contenir d'éventuels diluants tels que l'azote.

En supposant que les diffusivités moléculaires de chaque espèce chimique présente dans les courants d'injection sont égales, la fraction massique de combustible dans le mélange avant réaction, $Y_{F,u}$, est linéairement reliée à la fraction de mélange ξ par

$$Y_{F,u} = Y_F^{\infty} \xi \tag{8.2}$$



FIGURE 8.1: Système à deux entrées et fraction de mélange associée ξ .

où Y_F^{∞} est la fraction massique de combustible dans le courant d'entrée combustible. De la même manière, comme $(1 - \xi)$ représente la fraction de masse locale issue du courant d'entrée oxydant, la fraction massique d'oxydant dans le mélange avant réaction peut être obtenue à partir de

$$Y_{O,u} = Y_O^{\infty}(1 - \xi)$$
(8.3)

où Y_O^{∞} représente la fraction massique d'oxydant dans le courant oxydant.

Dans de tels systèmes impliquant deux entrées, on peut naturellement définir une réaction chimique globale, i.e. à une seule étape :

$$r_{st}F + O \longrightarrow (1 + r_{st})P \tag{8.4}$$

où r_{st} est le rapport stoechiométrique massique. La considération de cette réaction globale permet alors de relier les fraction massiques d'espèces brûlées

$$Y_{F,u} - Y_F = r_{st}(Y_{O,u} - Y_O)$$
(8.5)

où Y_F et Y_O sont respectivement la fraction massique de combustible et la fraction massique d'oxydant à n'importe quel état intermédiaire du processus de combustion (PETERS, 2000). En introduisant les Eq. (8.2) et Eq. (8.3) dans l'Eq. (8.5), on obtient la définition habituelle de la fraction de mélange :

$$\xi = \frac{1}{1+\Phi} \left(\Phi \frac{Y_F}{Y_F^{\infty}} - \frac{Y_O}{Y_O^{\infty}} + 1 \right)$$
(8.6)

où $\Phi = r_{st}Y_F^{\infty}/Y_O^{\infty}$. L'équation de transport de cette quantité scalaire peut alors s'écrire comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\xi\right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\rho u_{i}\xi\right) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\rho \mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_{i}}\right)$$
(8.7)

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusivité moléculaire obtenu en faisant l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire PETERS (2000).

Finalement, la seule connaissance de la valeur de la fraction de mélange locale permet de déterminer la composition locale avant réaction grâce aux Eqs. (8.2) et (8.3). Cependant, cette composition va aussi dépendre des conditions d'injection, Y_F^{∞} et Y_O^{∞} . C'est pourquoi l'expression de la fraction de mélange peut être vue comme étant, en pratique, associée à un injecteur constitué du courant d'entrée oxydant et du courant d'entrée combustible.

8.2.2 Extension à N entrées, concept d'injecteur fictif

La section précédente a permis de rappeler brièvement que le champ de fraction de mélange n'a de signification physique que s'il est associé à un injecteur à deux entrées. On peut d'ailleurs noter qu'un même champ de fraction de mélange peut correspondre à des champs d'espèces complètement différents en faisant varier la composition des entrées de l'injecteur associé à la fraction de mélange, Y_F^{∞} et Y_O^{∞} .

Considérons maintenant un système à N entrées. Dans ce cas, la composition du mélange avant réaction ne peut être reconstruite en s'appuyant uniquement sur les Eqs. (8.2) et (8.3) ainsi que l'expression de la fraction de mélange standard Eq. (8.6).¹ De plus, comme la présente étude se concentre sur les systèmes non-prémélangés, toutes les entrées sont supposées correspondre soit à des courants de combustible, indicés *fuel*, et composés de combustible, de diluant et de produits de combustion, soit à des courants oxydants, indicés *ox* et composés d'oxydant, de diluant et de produit de combustible et l'oxydant. Si la $j^{\text{ème}}$ entrée est une entrée combustible, son flux de masse associé est noté $\dot{m}_{fuel,j}$, alors que si c'est une entrée oxydante son flux de masse associé est noté $\dot{m}_{ox,j}$. Revenons maintenant à la définition de la fraction de mélange comme la fraction de masse locale issue du courant de combustible, Eq. (8.1). Cette définition peut être étendue au mélange multi-entrées en évaluant le flux de masse issu du courant combustible comme la somme de tous les flux de masse issus d'une entrée combustible.

$$\dot{m}_{fuel} = \sum_{j} \dot{m}_{fuel,j} \tag{8.8}$$

De la même manière, le flux de masse issu du courant oxydant est la somme de tous les

^{1.} Une exception notable est le cas où toutes les entrées (N > 2) n'ont pas plus de deux compositions différentes, dans ce cas particulier la définition standard de la fraction de mélange est applicable

flux de masse issus d'une entrée oxydante.

$$\dot{m}_{ox} = \sum_{j} \dot{m}_{ox,j} \tag{8.9}$$

La somme sur j est une somme sur toutes les entrées.

En retenant les mêmes hypothèses que celles utilisées dans le cas à deux entrées, la fraction massique locale de combustible avant réaction $Y_{F,u}$ peut s'exprimer comme suit.

$$Y_{F,u} = \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} Y_{F}^{\infty,j} \right) = \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} \frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} Y_{F}^{\infty,j} \right)$$
$$= \frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} Y_{F}^{\infty,j} \right)$$
$$= \xi \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} Y_{F}^{\infty,j} \right)$$
(8.10)

De la même manière la fraction massique d'oxydant $Y_{O,u}$ est :

$$Y_{O,u} = \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{ox,j}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} Y_{O}^{\infty,j} \right) = \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{ox}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} \frac{\dot{m}_{ox,j}}{\dot{m}_{ox}} Y_{O}^{\infty,j} \right)$$
$$= \left(1 - \frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{ox}} \right) \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{ox,j}}{\dot{m}_{ox}} Y_{O}^{\infty,j} \right)$$
$$= \left(1 - \xi \right) \sum_{j} \left(\frac{\dot{m}_{ox,j}}{\dot{m}_{ox}} Y_{O}^{\infty,j} \right)$$
(8.11)

Si on suppose maintenant une cinétique chimique globale à une étape telle que celle de l'Eq. (8.4), l'Eq. (8.5) reste valide dans le cas à *N*-entrées, l'introduction des Eqs. (8.10) et (8.11) dans l'Eq. (8.5) mène à l'expression de la fraction de mélange suivante :

$$\xi = \frac{1}{1+\Phi} \left(\Phi \frac{Y_F}{Y_F^{\infty,new}} - \frac{Y_O}{Y_O^{\infty,new}} + 1 \right)$$
(8.12)

où les deux quantités suivantes ont été introduites :

$$Y_F^{\infty,new} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} Y_F^{\infty,j} \right) \quad \text{and} \quad Y_O^{\infty,new} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\dot{m}_{ox,j}}{\dot{m}_{ox}} Y_O^{\infty,j} \right) \tag{8.13}$$

et le rapport d'équivalence est donné par $\Phi = \Phi^{new} = r_{st} Y_F^{\infty,new} / Y_O^{\infty,new}$.

Ainsi, la fraction de mélange standard reposant sur l'hypothèse de deux entrées, Eq. (8.6), peut être étendue au cas à N entrées grâce à l'Eq. (8.12). De plus, comme la définition de la fraction de mélange, Eq. (8.1), n'est pas affectée par le nombre d'entrée, l'équation de transport de la fraction de mélange reste une équation de transport de scalaire passif, Eq. (8.7), avec pour condition limite une valeur unitaire dans les entrées combustibles et une valeur nulle dans les entrées oxydantes.

Finalement, l'approche proposée repose en pratique sur l'introduction d'un *injecteur* fictif composé de deux courants, l'un combustible et l'autre oxydant, et caractérisé par deux paramètres : la fraction massique de combustible dans le courant combustible, $Y_F^{\infty,new}$, et la fraction massique d'oxydant, $Y_O^{\infty,new}$, dans le courant oxydant. Cependant, contrairement à l'approche standard à deux entrées, ces deux paramètres sont associés à des conditions locales et peuvent varier d'un endroit à l'autre au sein de l'écoulement.

8.2.3 Description de l'injecteur fictif

Une fois l'approche *injecteur fictif* (IF) introduite, l'expression de la fraction de mélange étant donnée par l'Eq. (8.12), la principale difficulté de mise en oeuvre de cette approche est la détermination de la composition des courants associés à l'*injecteur fictif*, $Y_F^{\infty,new}$ et $Y_O^{\infty,new}$. Deux stratégies sont alors envisageables.

Description par traceur d'entrée

La première méthode possible est de réécrire la composition des courants fictifs comme la somme de la composition de chaque entrée pondérée par leurs contributions locales. La façon la plus naturelle de quantifier la contribution de la $j^{\text{ème}}$ entrée est alors d'introduire la fraction de masse issue de la $j^{\text{ème}}$ entrée (BECKER, 1977), aussi appelée traceur d'entrée ζ_j :

$$\zeta_j = \dot{m}_j / \dot{m}_{tot} \tag{8.14}$$

où \dot{m}_j est le flux de masse provenant de l'entrée j défini comme suit

$$\dot{m}_{fuel,j} = \dot{m}_j \xi^{\infty,j} \tag{8.15}$$

où $\xi^{\infty,j}$ est la valeur de la fraction de mélange dans la $j^{\text{ème}}$ entrée. Et finalement, la composition du courant fictif de combustible peut être exprimée comme :

$$Y_F^{\infty,new} = \sum_j \left(Y_F^{\infty,j} \frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} \right) = \sum_j \left(Y_F^{\infty,j} \frac{\dot{m}_{fuel,j}/\dot{m}_{tot}}{\dot{m}_{fuel}/\dot{m}_{tot}} \right)$$
$$= \frac{\sum_j \left(Y_F^{\infty,j} \dot{m}_{fuel,j}/\dot{m}_{tot} \right)}{\dot{m}_{fuel}/\dot{m}_{tot}} = \frac{\sum_j \left(Y_F^{\infty,j} \dot{m}_{fuel,j}/\dot{m}_{tot} \right)}{\sum_j \dot{m}_{fuel,j}/\dot{m}_{tot}}$$
$$= \frac{\sum_j \left(Y_F^{\infty,j} \zeta_j \xi^{\infty,j} \right)}{\sum_j \zeta_j \xi^{\infty,j}}$$
(8.16)

Ainsi, en supposant que la contribution massique de chaque entrée est connue, la composition des courants de l'injecteur fictif est entièrement déterminée. L'équation de transport du traceur d'entrée pour l'entrée j est :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \zeta_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i \zeta_j \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial \zeta_j}{\partial x_i} \right)$$
(8.17)

avec ζ_j valant 1 dans la $j^{\text{ème}}$ entrée et 0 dans les autres. De plus, la composition de l'entrée fictive oxydante est obtenue à partir de :

$$Y_{O}^{\infty,new} = \frac{\sum_{j} \left(Y_{O}^{\infty,j} \zeta_{j} \left(1 - \xi^{\infty,j} \right) \right)}{\sum_{j} \zeta_{j} \left(1 - \xi^{\infty,j} \right)}$$
(8.18)

Transport de condition limite

L'approche précédente repose sur l'introduction d'un scalaire passif pour chaque entrée. Il en résulte que l'applicabilité aussi bien que l'efficacité de cette méthode peut être altérée avec l'augmentation du nombre d'entrée du système considéré. La seconde approche proposée est alors une alternative plus efficace et moins coûteuse pour les situations comportant un grand nombre d'entrées : le transport de la quantité de condition limite. En effet, la définition de la composition du courant combustible fictif permet d'écrire la relation :

$$Y_F^{\infty,new} = \sum_j \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{fuel}} Y_F^{\infty,j} \right) = \sum_j \left(\frac{\dot{m}_{tot}}{\dot{m}_{fuel}} \frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{tot}} Y_F^{\infty,j} \right)$$
$$= \frac{1}{\xi} \sum_j \left(\frac{\dot{m}_{fuel,j}}{\dot{m}_{tot}} Y_F^{\infty,j} \right)$$

qui peut être reformulée de la manière suivante :

$$\xi Y_F^{\infty,new} = \sum_j \left(\zeta_j Y_F^{\infty,j} \right) \tag{8.19}$$

L'équation (8.19), montre clairement que la composition du courant combustible fictif déterminée à partir du transport de la quantité de condition limite, $\xi Y_F^{\infty,new}$, est identique à celle qui peut être obtenue en transportant les traceurs d'entrée, ζ_j .

La composition de l'entrée combustible fictive peut donc être complètement déterminée à partir du transport de la quantité de condition limite, $\xi Y_F^{\infty,new}$, selon :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\xi Y_{F}^{\infty,new}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\rho u_{i}\xi Y_{F}^{\infty,new}\right) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\rho\mathcal{D}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\xi Y_{F}^{\infty,new}\right)\right),\tag{8.20}$$

et de la fraction de mélange, ξ , transportée selon l'équation (8.7).

De la même manière, la connaissance de la quantité de condition limite $(1-\xi)Y_O^{\infty,new}$, obtenue en résolvant une équation de transport similaire à l'Eq. (8.20), permet de déterminer la composition du courant oxydant fictif, $Y_O^{\infty,new}$.

Expression de la composition locale

Afin de déterminer complètement la composition locale, les fraction massique de combustible, Y_F , d'oxydant, Y_O , de produits de combustion, Y_P et de diluant, Y_D , doivent être connues. Comme le mélange est considéré n'être constitué que de ces quatre composants, ² on peut écrire :

$$Y_F + Y_O + Y_P + Y_D = 1 (8.21)$$

Dans un premier temps, seule la situation non réactive est considérée et deux relations supplémentaires peuvent être introduites.

$$Y_P = \xi \times Y_{P,fuel}^{\infty,new} + (1-\xi) \times Y_{P,ox}^{\infty,new}$$
(8.22)

$$Y_D = \xi \times Y_{D,fuel}^{\infty,new} + (1-\xi) \times Y_{D,ox}^{\infty,new}$$
(8.23)

Cela permet, en utilisant l'approche injecteur fictif, d'obtenir un système de quatre équations, Eqs. (8.12)-(8.21)-(8.22)-(8.23) avec quatre inconnues Y_F , Y_O , Y_P et Y_D . La résolution de ce système permet d'obtenir les expressions suivantes.

$$Y_O = \frac{1 + (1 - \xi) Y_F^{\infty, new} / \Phi_{new} - \xi Y_O^{\infty, new} - Y_{P, ox}^{\infty, new} - Y_{D, ox}^{\infty, new}}{1 + 1/r_{st}}$$
(8.24)

$$Y_{F} = \frac{Y_{F}^{\infty,new}}{\Phi_{new}} \left((1 + \Phi_{new}) \xi + \frac{Y_{O}(\xi)}{Y_{O}^{\infty,new}} - 1 \right)$$
(8.25)

$$Y_{P} = \xi Y_{P,fuel}^{\infty,new} + (1-\xi) Y_{P,ox}^{\infty,new}$$
(8.26)

$$Y_D = \xi Y_{D,fuel}^{\infty,new} + (1-\xi) Y_{D,ox}^{\infty,new}$$
(8.27)

La composition du mélange est ainsi entièrement définie grâce à l'approche injecteur fictif. Cependant les compositions des courants fictifs associés, $Y_O^{\infty,new}$, $Y_F^{\infty,new}$, $Y_{P,ox}^{\infty,new}$, $Y_{P,fuel}^{\infty,new}$, $Y_{D,ox}^{\infty,new}$, $Y_{D,fuel}^{\infty,new}$, et la fraction de mélange locale, ξ doivent être localement

^{2.} Dans l'approche présentée ici, le combustible peut être constitué d'un mélange d'espèce chimique et ne pas être qu'une seule espèce chimique. Ceci est aussi valable pour l'oxydant, les produits de combustion et le diluant.

connues. Comme précisé dans la section précédente, deux stratégies sont alors envisageables, les reconstruire à partir des traceurs d'entrées ou les évaluer à partir du transport de quantité de conditions limites. Dans la suite, seul la première méthode est utilisée.

8.2.4 Représentations filtrées

Le concept d'injecteur fictif a été introduit avec un formalisme instantané. Cependant, dans les configurations d'intérêt pratique, les valeurs du nombre de Reynolds caractéristique de l'écoulement sont telles que seules les approches moyennées (RANS) ou filtrées (LES) sont envisageables.

Fonction densité de probabilité de la composition

Une représentation possible des fluctuations non résolues est l'utilisation de la fonction densité de probabilité (PDF) jointe de la composition $\widetilde{P}(Y_F, Y_O, Y_D, Y_P)$. En utilisant l'approche injecteur fictif, toutes les fractions massiques, Y_F , Y_O , Y_D , Y_P , peuvent être exprimées comme des fonctions de la fraction de mélange, ξ , et des compositions des courants fictifs :

$$Y_{F} = Y_{F} \left(\xi, Y_{F}^{\infty, new}, Y_{O}^{\infty, new}, Y_{D, ox}^{\infty, new}, Y_{P, ox}^{\infty, new}\right)$$

$$Y_{O} = Y_{O} \left(\xi, Y_{F}^{\infty, new}, Y_{O}^{\infty, new}, Y_{D, ox}^{\infty, new}, Y_{P, ox}^{\infty, new}\right)$$

$$Y_{D} = Y_{D} \left(\xi, Y_{D, f}^{\infty, new}, Y_{D, ox}^{\infty, new}\right)$$

$$Y_{P} = Y_{P} \left(\xi, Y_{P, f}^{\infty, new}, Y_{P, ox}^{\infty, new}\right)$$

où $Y_{D,ox}^{\infty,new}$ est la fraction massique de l'espèce diluante dans le courant oxydant fictif et $Y_{P,f}^{\infty,new}$ est la fraction massique de produit de combustion dans le courant combustible fictif. La PDF jointe de la composition peut ainsi être réécrite en fonction de nouveaux paramètres :

$$\widetilde{P}(Y_F, Y_O, Y_D, Y_P) = \widetilde{P}\left(\xi, Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D, ox}^{\infty, new}, Y_{P, ox}^{\infty, new}, Y_{D, f}^{\infty, new}, Y_{P, f}^{\infty, new}\right)$$
(8.28)

De plus, comme la présente étude est conduite dans le cadre de la combustion nonprémélangée, on considère qu'il n'y a pas de combustible dans le courant oxydant et pas d'oxydant dans le courant combustible. Deux nouvelles relations peuvent alors être introduites :

$$Y_F^{\infty,new} + Y_{D,f}^{\infty,new} + Y_{P,f}^{\infty,new} = 1$$
(8.29)

$$Y_{O}^{\infty,new} + Y_{D,ox}^{\infty,new} + Y_{P,ox}^{\infty,new} = 1$$
(8.30)

Cela permet de simplifier l'Eq. (8.28) en :

$$\widetilde{P}(Y_F, Y_O, Y_D, Y_P) = \widetilde{P}\left(\xi, Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D,ox}^{\infty, new}, Y_{D,f}^{\infty, new}\right)$$

$$= \widetilde{P}\left(\xi \left| \left(Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D,ox}^{\infty, new}, Y_{D,f}^{\infty, new}\right)\right) \times P\left(Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D,ox}^{\infty, new} Y_{D,f}^{\infty, new}\right)$$
(8.31)
$$= \mathcal{P}\left(\xi \left| \left(Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D,ox}^{\infty, new} Y_{D,f}^{\infty, new}\right)\right) \right|$$

$$\times P\left(Y_F^{\infty, new}, Y_O^{\infty, new}, Y_{D,ox}^{\infty, new} Y_{D,f}^{\infty, new}\right)$$
(8.32)

Cette analyse est alors illustrée pour un domaine à trois entrées, tel que celui schématisé sur la figure 8.2. La première entrée est un courant oxydant qui débite de l'air, $Y_O^{\infty,1} + Y_D^{\infty,1}$, la deuxième entrée débite un courant combustible pur, Y_F^{∞} , et la dernière entrée débite un courant oxydant composé d'oxygène pur, $Y_O^{\infty,2}$. Ces hypothèses permettent alors d'écrire la PDF jointe de la composition comme suit :

$$\widetilde{P}(Y_F, Y_O, Y_D) = \widetilde{P}(Y_O, Y_D) \qquad \text{puisque } Y_F + Y_O + Y_D = 1$$

$$= \widetilde{P}(\xi, Y_O^{\infty, new}, Y_D^{\infty, new}) \qquad \text{puisque } Y_O = f(\xi, Y_O^{\infty, new}, Y_D^{\infty, new})$$

$$\text{et } Y_D = f(\xi, Y_O^{\infty, new}, Y_D^{\infty, new})$$

$$= \widetilde{P}(\xi, Y_O^{\infty, new}) \qquad \text{puisque } Y_O^{\infty} + Y_D^{\infty} = 1$$

$$= \widetilde{P}(\xi | Y_O^{\infty, new}) P(Y_O^{\infty, new}) \qquad (8.33)$$

Le support de la PDF est illustré sur la Fig. 8.2, avec les variables Y_O et Y_D en haut ainsi que ξ et $Y_O^{\infty,new}$ en bas

Sur la Fig. 8.2, le mélange entre l'air, en noir, et le combustible, en blanc, a une composition qui se situe sur le segment délimité par (0,0) et $(Y_O^{\infty,1},0)$ dans le plan (Y_O,Y_D) et sur la ligne notée $\xi | Y_O^{\infty,1}$ dans l'espace $(\xi, Y_O^{\infty,new})$. Ce mélange obéit alors à l'expression standard de la fraction de mélange :

$$\xi = \xi | Y_O^{\infty,1} = \frac{1}{1+\Phi} \left(\Phi \frac{Y_F}{Y_F^{\infty}} - \frac{Y_O}{Y_O^{\infty,1}} + 1 \right)$$
(8.34)

où $\Phi = r_{st}Y_F^{\infty}/Y_O^{\infty,1}$. De manière similaire, le mélange entre l'oxygène pur, en gris foncé, et le combustible, en blanc, a une composition qui se situe sur le segment délimité par (0,0)et $(Y_O^{\infty,2},0)$ dans le plan (Y_O,Y_D) et sur la ligne notée $\xi|Y_O^{\infty,2}$ dans l'espace $(\xi,Y_O^{\infty,new})$. Ce mélange obéit alors à l'expression standard de la fraction de mélange :

$$\xi = \xi | Y_O^{\infty,2} = \frac{1}{1+\Phi} \left(\Phi \frac{Y_F}{Y_F^{\infty}} - \frac{Y_O}{Y_O^{\infty,2}} + 1 \right)$$
(8.35)

où $\Phi = r_{st}Y_F^{\infty}/Y_O^{\infty,2}$. Enfin, pour la zone de mélange entre les trois entrées, en gris clair sur la figure 8.2, le domaine de variation de la composition est coloré en gris clair dans le plan (Y_O, Y_D) et dans l'espace $(\xi, Y_O^{\infty, new})$. Le mélange correspondant est alors décrit



FIGURE 8.2: Schéma du mélange entre deux courants oxydants et un courant combustible. Le domaine de validité de la définition de la fraction de mélange est coloré en noir pour le mélange entre le combustible et l'air, en gris foncé pour le mélange entre le combustible et l'oxygène et en gris clair pour le mélange entre les trois courants. Les supports de la PDF de la composition sont tracés sur le côté droit de la figure dans l'espace (Y_O, Y_D) et dans l'espace $(\xi, Y_O^{\infty,new})$.

grâce à l'approche injecteur fictif

$$\xi = \xi | Y_O^{\infty, new} = \frac{1}{1 + \Phi} \left(\Phi \frac{Y_F}{Y_F^{\infty, new}} - \frac{Y_O}{Y_O^{\infty, new}} + 1 \right)$$
(8.36)

où $\Phi = r_{st}Y_F^{\infty,new}/Y_O^{\infty,new}$ avec $Y_F^{\infty,new}$ et $Y_O^{\infty,new}$ obtenus à partir des Eqs. (8.16) et (8.18).

Approximation de la PDF jointe

Le support de la PDF jointe de la composition étant maintenant clairement défini, sa forme reste à déterminer. La solution la plus générale consisterait à transporter cette PDF mais le coût de calcul associé serait prohibitif. Une seconde solution est de présumer la forme de cette PDF jointe. Par analogie au cas du mélange binaire, la PDF- β multivariée proposée par Girimaji (GIRIMAJI, 1991) peut être envisagée. Cependant, le coût de calcul de l'intégration numérique nécessaire à sa mise en oeuvre pratique reste un frein. De plus, bien que la forme de la PDF d'un mélange scalaire binaire soit maintenant bien connue, celle d'un mélange entre trois scalaires, voire plus, reste encore une question ouverte. C'est pourquoi, dans un souci d'efficacité, l'hypothèse d'indépendance statistique est utilisée

$$\widetilde{P}\left(\xi, Y_{O}^{\infty, new}\right) = \widetilde{P}\left(\xi | Y_{O}^{\infty, new}\right) P\left(Y_{O}^{\infty, new}\right) \simeq \widetilde{P}\left(\xi\right) P\left(Y_{O}^{\infty, new}\right)$$
(8.37)

La PDF de la fraction de mélange, $\tilde{P}(\xi)$, est alors présumée sous la forme d'une PDF- β . La PDF marginale $P(Y_O^{\infty,new})$ doit aussi être évaluée mais, comme $Y_O^{\infty,new}$ est une quantité reconstruite, sa variance n'est pas aisée à déterminer. On fait alors le choix de négliger les fluctuations de composition du courant fictif et la PDF marginale est exprimée comme suit :

$$P(Y_O^{\infty,new}) = \delta \left(Y_O^{\infty,new} - \overline{Y}_{ox}^{\infty,new} \right)$$
(8.38)

On peut d'ailleurs remarquer que cette hypothèse semble moins restrictive que de négliger les fluctuations de l'entrée la moins influente comme proposé dans les travaux de LOCKWOOD et SALOOJA (1981); BERTRAND et al. (1985).

8.3 Analyse préliminaire de la réponse du modèle

8.3.1 Cas tests non réactifs, $Da \rightarrow 0$

La capacité de l'approche injecteur fictif à décrire le mélange passif dans un système présentant plus de deux entrées est maintenant évaluée. Pour cela, le modèle est implémenté dans le code N3S_NATUR (MARTIN et CHARGY, 2001). La composition locale est alors reconstruite à partir de l'approche injecteur fictif et elle est comparée à la composition issue de la résolution des équations de transport de la fraction massique de chaque espèce.

Configuration injection parallèle Le premier cas test consiste en trois entrées parallèles, voir Fig. 8.3, dont l'une débite un courant combustible et les deux autres un courant oxydant, voir tableau 8.3.1.

Les champs de traceur d'entrée sont alors présentés sur le coté gauche de la figure 8.4. La similitude avec le comportement schématisé sur la Fig. 8.2 est alors évidente. La surface délimitée par les traits pleins continus correspond à la zone de mélange entre les trois entrées. La zone en haut du domaine correspond à la zone de mélange entre l'air et l'hydrogène, alors que la zone en bas représente la zone de mélange entre l'oxygène pur et l'hydrogène. Le noyau de combustible pur est délimité par les traits pointillés. Ces traceurs d'entrée permettent alors de reconstruire localement la composition des courants fictifs, ces derniers sont tracés sur la droite de la figure 8.4. Comme attendu, ces quantités ne varient que dans la zone de mélange entre les trois entrées et dégénèrent vers la composition de l'entrée considérée dans la zone de mélange à deux entrées.



FIGURE 8.3: Domaine de calcul et conditions limites associées pour la configuration injection parallèle.

	Entrée Air	Entrée H_2	Entrée O_2
Température, K	300.0	300.0	300.0
Pression, Bar	1.0	1.0	1.0
Vitesse, m/s	100	50	100
Energie cinétique turbulente k , m ² s ⁻²	10	10	10
Dissipation turbulente ϵ , m ² s ⁻³	100	100	100
Fraction massique d'espèce :			
Y_{H_2}	0.000	1.000	0.000
Y_{O_2}	0.233	0.000	1.000
Y_{H_2O}	0.000	0.000	0.000
Y_{N_2}	0.767	0.000	0.000

TABLE 8.1: Conditions limites pour la configuration injection parallèle.

Les champs de fraction massique moyenne, Y_{O_2} , Y_{H_2} et Y_{N_2} , transportés et reconstruits grâce à l'approche injecteur fictif sont tracés sur la Fig. 8.5. La comparaison entre ces deux champs ne met pas de différence notable en évidence. Ceci est d'ailleurs confirmé par le calcul de la différence entre ces deux champs qui n'excède 0.1% que dans la zone où la fraction massique de l'espèce considérée est négligeable.



Traceurs d'entrée

Composition des entrées fictives

FIGURE 8.4: Champs de traceur d'entrée et de composition des entrées fictives pour la configuration injection parallèle. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.



Fractions massiques transportées

Fractions massiques reconstruites

FIGURE 8.5: Champs de fraction massique transportée et reconstruite pour la configuration injection parallèle. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.

189

Configuration injection transverse Le second cas test consiste en trois entrées, deux parallèles et la dernière transverse, voir Fig. 8.6. Les conditions limites associées à chaque entrée sont listées dans le tableau 8.3.1.

Comme pour le cas test où l'injection est parallèle, les traceurs d'entrée ainsi que les compositions des courants fictifs sont présentés sur la figure 8.7. Là aussi, les traits pleins rouge délimite la zone de mélange entre les trois entrées, au dessus, le mélange est uniquement entre l'Air et l' H_2 , en dessous il est entre l' O_2 et l' H_2 . Dans cette configuration à injection transverse, comme dans la configuration à injection parallèle, la zone dans laquelle les compositions des courants fictifs varient se situe uniquement dans la zone de mélange entre les trois entrées.

Les champs de fractions massiques moyennes transportées et reconstruites grâce à l'approche injecteur fictif sont tracés sur la figure 8.8 et, là encore, le calcul de la différence entre ces deux champs montre que cette dernière est négligeable.

	Entrée Air	Entrée H_2	Entrée O_2
Température, K	300.0	300.0	300.0
Pression, Bar	1.0	1.0	1.0
Vitesse, m/s	25	25	25
Energie cinétique turbulente k , m ² s ⁻²	10	10	10
Dissipation turbulente ϵ , m ² s ⁻³	100	100	100
Fraction massique d'espèce :			
Y_{H_2}	0.000	1.000	0.000
Y_{O_2}	0.233	0.000	1.000
Y_{H_2O}	0.000	0.000	0.000
Y_{N_2}	0.767	0.000	0.000

TABLE 8.2: Conditions limites pour la configuration injection transverse.



FIGURE 8.6: Domaine de calcul et conditions limite associées pour la configuration injection transverse.

Traceurs d'entrée



Composition des entrées fictives

FIGURE 8.7: Champs de traceur d'entrée et de composition des entrées fictives pour la configuration injection transverse. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.


Fraction massique transportée

Fraction massique reconstruite

FIGURE 8.8: Champs de fraction massique transportée et reconstruite pour la configuration injection transverse. Le trait continu rouge délimite la zone de mélange entre les trois courants. Le trait discontinu rouge délimite la zone de combustible pur.



FIGURE 8.9: Structure de flamme locale : approximation de Burke-Schumann en fonction de la fraction de mélange. Lignes pointillées : température. Lignes continues : fraction massique d'oxydant ou de combustible. Lignes épaisses : structure de flamme avec l'approche injecteur fictif.

8.3.2 Chimie infiniment rapide, $Da \rightarrow \infty$

La section précédente a montré que l'approche injecteur fictif permet de reconstruire le mélange local avant réaction, i.e. le cas $Da \rightarrow 0$. Afin de délimiter clairement le domaine de variation de la composition, la seconde limite, $Da \rightarrow \infty$, est maintenant considérée. Ainsi la limite de chimie infiniment rapide, ou approximation de Burke-Schumann, est envisagée pour les deux cas tests précédents.

Pour de telles configurations réactives, l'intérêt d'une structure de flamme reposant sur l'approche injecteur fictif est évident. En effet, si seule la première entrée oxydante est considérée et si l'expression standard de la fraction de mélange est utilisée, la structure de flamme qui en résulte n'est pertinente que dans une partie restreinte de l'écoulement, la partie en noir sur la Fig. 8.2. Pour le reste de l'écoulement, la quantité d'oxygène et donc la température à l'équilibre sont sous-estimées. De la même manière si seule la deuxième entrée oxydant est considérée, la structure de flamme n'est pertinente que dans la partie en gris foncé sur la Fig. 8.2. Ces deux cas délimitent alors le domaine de variation de la concentration d'oxygène et de la température. Ces domaines de variations sont respectivement représentés en gris clair et en gris foncé sur la figure 8.9.

L'approche injecteur fictif permet alors de prendre en compte localement l'influence de toutes les entrées sur la structure de flamme. Un exemple d'une telle structure est représenté sur la figure 8.9. Comme précisé plus haut, la température de flamme locale, T_{ad} , se situe entre celle, T_{ad}^1 , correspondant au cas ou seule l'entrée d'air est considérée et celle, T_{ad}^2 , correspondant au cas ou seule l'entrée d'oxygène pur est considérée. L'expression des températures de flamme est donnée par la relation suivante.

$$T_{ad} = \frac{T_f^{\infty} + \Phi T_{ox}^{\infty}}{1 + \Phi} + \frac{QY_F^{\infty}}{C_p(1 + \Phi)}$$
(8.39)

où T_f^{∞} est la température du courant combustible, T_{ox}^{∞} est la température du courant oxydant, Φ est la rapport d'équivalence et Q la chaleur spécifique de la réaction. Afin de prendre en compte les effets de dissociation qui se produisent à haute température, la chaleur spécifique de la réaction est réévaluée. Un calcul d'équilibre chimique prenant en compte la dissociation est effectué et, en faisant l'hypothèse d'une capacité thermique, C_p , constante, l'Eq. (8.39) est inversée pour permettre d'évaluer une chaleur spécifique de réaction incluant les effets de dissociation.³ Deux calculs d'équilibre permettent alors d'évaluer Q_1 et Q_2 , respectivement la chaleur spécifique de réaction pour un mélange entre le courant oxydant 1 et le combustible, et la chaleur spécifique de réaction pour un mélange entre le courant oxydant 2 et le combustible. On suppose alors que, comme la composition du courant oxydant fictif est inconnue mais limitée par la composition entre les deux autres courants, $Y_O^{\infty,1}$ et $Y_O^{\infty,2}$, la chaleur spécifique de réaction pour un mélange prenant en compte les trois entrées, Q^{new} , comme une variation linéaire entre les deux extrêmes :

$$Q^{new} = Q_1 \left(\frac{Y_O^{\infty, new} - Y_O^{\infty, 2}}{Y_O^{\infty, 1} - Y_O^{\infty, 2}} \right) + Q_2 \left(\frac{Y_O^{\infty, 1} - Y_O^{\infty, new}}{Y_O^{\infty, 1} - Y_O^{\infty, 2}} \right)$$
(8.40)

La structure de flamme décrite dans la section précédente est alors appliquées aux cas tests présentés pour le cas $Da \rightarrow 0$ et les champs moyens de fraction massique d'eau, $\widetilde{Y}_{H_{2O}}$, sont présentés sur la Fig. 8.10. Sur ces figures, il est évident que l'approche à fraction de mélange standard, Eq. (8.6), n'est pas à même de restituer la dissymétrie du champ de composition. L'utilisation de l'approche fraction de mélange standard (FMS) entraîne donc, soit une surestimation, soit une sous-estimation de la quantité d'oxygène localement disponible et induit donc une mauvaise évaluation de la fraction massique moyenne d'eau. C'est ce qu'on peut observer sur les champs haut et bas de la Fig. 8.10. L'approche injecteur fictif (IF) permet, quant à elle, de restituer cette dissymétrie du champ de composition et ainsi de bien évaluer localement la quantité d'oxydant disponible. Ceci est encore plus évident si on observe les lignes stoechiométriques tracées en noir sur la Fig. 8.10. En effet, la ligne stoechiométrique obtenue avec l'approche IF est la même que celle obtenue avec l'approche FMS, dans la zone où la troisième entrée peut être négligée, c'est-à-dire en zone proche de l'injection. Cependant, cette ligne diffère clairement dans

^{3.} En réalité la chaleur de réaction que l'on trouve dans les tables est la bonne et c'est la capacité thermique qui est mal évaluée ici car elle ne prend pas en compte toutes les espèces mais seulement les réactifs et les produits de combustion.



FIGURE 8.10: Champs de fraction massique d'eau calculés avec l'approche fraction de mélange standard définie à partir d'un injecteur combustible/air (haut), l'approche fraction de mélange standard définie à partir d'un injecteur combustible/oxygène pur (bas) et avec l'approche injecteur fictif (milieu).La ligne stoechiométrique est tracée en noir.

la zone de mélange entre les trois entrées et la localisation de $\tilde{\xi} = \xi_{st}$ est un intermédiaire entre celles obtenue avec les deux approches FMS. Ce comportement est encore plus accentué avec l'injection transverse.

Chapitre 9

Application à une flamme de type JHC diluée par l'air ambiant

Le chapitre précédent a posé les bases de l'approche injecteur fictif qui permet l'extension de la notion de fraction de mélange aux systèmes mettant en jeux plus de deux entrées. Bien que la réponse qualitative de l'approche ait été évaluée sur des cas test numériques simples, une validation plus quantitative reste nécessaire. Pour cela, on cherche à comparer les mesures issus d'un montage expérimental aux résultats issus de la simulation numérique mettant en oeuvre l'approche injecteur fictif. Cependant, les flammes étudiées expérimentalement retenues pour la validation de modèle numérique ne sont, en majorité, composées que de deux entrées, ou, du moins, l'influence de la troisième entrée éventuelle reste négligeable dans la zone de mesure. Récemment, des brûleurs académiques ont été développés pour l'étude de la combustion sans flamme. Parmi eux, la configuration étudiée par Dally et al. (DALLY et al., 2002) est composée de trois entrées contrôlées et elle a permis de collecter une quantité significative de données. Cette géométrie est donc reconnue comme un cas test de référence pour les conditions de *combustion sans flamme* et a été le sujet de multiples études expérimentales et numériques ces dernières années.

9.1 Flamme jet de Dally

9.1.1 Description du montage expérimental

Le montage expérimental de Dally et al. est composé d'un brûleur, constitué d'un jet de combustible injecté dans un écoulement co-courant, qui est placé dans la veine d'une soufflerie afin de bien maîtriser l'air entraîné par le jet issu du brûleur, un schéma du montage est présenté sur la figure 9.1. Le combustible est composé d'un mélange de méthane et d'hydrogène avec un rapport de volume 1/2. L'écoulement co-courant est, quant à lui, composé des produits de combustion issus d'une pré-chambre de combustion

		${ m Jet} { m combustible}$	Co-courant	Soufflerie
	Température, K	305	1300	300
	Vitesse, m/s	73.5	3.2	3.2
Air	Fraction massique d'espèce :			
01111111111111111111111111111111111111	Y_{H_2}	0.115	0	0
\rightarrow Co-courant	Y_{CH_4}	0.885	0	0
Fuel	Y_{O_2}	0	0.03 (HM3%) 0.09 (HM9%)	0.233
\rightarrow Co-courant	Y_{H_2O}	0	0.065	0
	Y_{CO_2}	0	0.055	0
$ \rightarrow \text{Air} \subset D$	Y_{N_2}	0	0.85 (HM3%) 0.79 (HM9%)	0.767
	Diamètre intérieur co-courant D :		0.082 m	
	Diamètre intérieur jet d_j :		$0.00425~\mathrm{m}$	

FIGURE 9.1: Schéma du montage expérimental de DALLY et al. (2002).

TABLE 9.1: Conditions d'entrée et géométrie de la flammede DALLY et al. (2002)

et mélangés ensuite avec un mélange d'azote et d'oxygène dont les proportions peuvent être variées. Plusieurs essais ont été effectués en faisant varier cette composition de 3% d'oxygène (cas HM3%) à 9% (cas HM9%) d'oxygène afin d'analyser l'effet de l'oxygénation du co-courant sur la combustion. Enfin, la soufflerie fonctionne avec de l'air à température et pression ambiante. Un récapitulatif de ces conditions est reporté dans le tableau 9.1.

9.1.2 Description de la configuration de calcul

Le domaine de calcul 2D-axisymétrique retenu pour effectuer la simulation numérique ainsi que les conditions limites qui lui sont associés sont reportés sur la figure9.2. Le maillage non-structuré correspondant est composé de 15 000 noeuds et 25 000 éléments triangulaires. Il est rafiné *a priori* dans la zone centrale du jet (2) et dans le sillage de l'injecteur (1) afin de mieux capturer le développement de la couche limite. Le débit massique ainsi que la température ont été imposés pour l'entrée subsonique. De plus, afin de faciliter la convergence numérique, une condition de glissement a été retenue pour le bord supérieur du domaine de calcul. Enfin le niveau de pression moyen est imposé en sortie de domaine.



FIGURE 9.2: Domaine de calcul et conditions limites associées pour la simulation numérique du cas test de Dally (DALLY et al., 2002).

9.1.3 Modélisation de la combustion turbulente

L'approche injecteur fictif précédemment présentée permet de reconstruire la composition du mélange local avant réaction chimique, néanmoins l'approximation de Burke-Schumann n'est pas adaptée à la simulation de la combustion sans flamme. Un autre modèle de combustion doit donc être employé.

On se propose de retenir dans ce qui suit une approximation de type flammelette laminaire étendue à des cas à entrées multiples. Le taux de production chimique instantané est alors évalué à partir de son expression obtenue dans la limite des très grandes valeurs du nombre de Damköhler Da tel qu'obtenu dans l'annexe D :

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} = \rho \omega_Y + \rho \mathcal{D} \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} - \frac{2\rho \mathcal{D}}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Y^\infty}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Y}{\partial Y^\infty}
+ \rho \mathcal{D} \frac{\partial Y^\infty}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Y^\infty}{\partial x_\alpha} \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}} - \frac{\partial Y}{\partial Y^\infty} \frac{\partial \rho \mathcal{D}}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Y^\infty}{\partial x_\alpha} \tag{9.1}$$

En ne s'intéressant qu'au régime stationnaire, compte tenu du fait que, pour cette configuration, l'influence des gradients de Y^{∞} non résolus sont négligeables par rapport à ceux de ξ au sein de chaque maille de calcul, on se propose donc de retenir l'expression suivante du taux de production chimique :

$$\omega_Y = -\mathcal{D}\frac{\partial\xi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\xi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial^2 Y}{\partial\xi^2} = -\chi_\xi\frac{\partial^2 Y}{\partial\xi^2} \tag{9.2}$$

où χ_{ξ} est le taux de dissipation scalaire. La composition est supposée être à l'équilibre chimique, $Y = Y^{eq}$, et elle est tabulée comme une fonction de la température et des

fractions massiques de combustible, d'oxydant, de produit de combustion et de diluant. Elle est alors extraite de cette tabulation générale et exprimée comme une fonction de la fraction de mélange grâce à l'approche injecteur fictif, voir Eqs. (8.24)-(8.27).

$$Y \longrightarrow Y^{eq}(Y_{F,u}, Y_{O,u}, Y_{P,u}, Y_{D,u}, T_{,u})$$

$$(9.3)$$

soit, compte tenu du fait que $Y_{i,u} = Y_{i,u}(\xi)$

$$Y \longrightarrow Y^{eq}(\xi) \tag{9.4}$$

Le taux de dissipation scalaire, qui représente l'effet du mélange moléculaire, est, quant à lui, évalué à partir du modèle le plus simple de micro-mélange, i.e. le modèle IEM-LMSE, de telle manière que le taux de production chimique est finalement exprimé comme suit.

$$\omega_Y = -\frac{\widetilde{\xi} - \xi}{\tau_{\xi}} \frac{\partial^2 Y^{eq}(\xi)}{\partial \xi^2}$$
(9.5)

avec τ_{ξ} le temps de mélange scalaire.¹ Finalement, l'expression précédente est pondérée par la PDF locale de la fraction de mélange afin de déterminer le taux de production moyen.

$$\widetilde{\omega}_Y = \int_0^1 \omega_Y(\xi) \widetilde{P}(\xi) d\xi = -\int_0^1 \frac{\widetilde{\xi} - \xi}{\tau_\xi} \frac{\partial^2 Y^{eq}(\xi)}{\partial \xi^2} \widetilde{P}(\xi) d\xi \tag{9.6}$$

9.2 Résultats numériques

9.2.1 Analyse de la prise en compte de la troisième entrée

Afin d'évaluer la pertinence de l'approche proposée pour la prise en compte de la troisième entrée, le cas maximisant la différence de composition entre le co-courant et l'air de la soufflerie est considéré. Le cas choisi, noté HM3%, correspond à un co-courant ayant une fraction massique d'oxygène valant 3%. En l'absence de données concernant l'écoulement turbulent à froid, la qualité de la capture du taux d'ouverture du jet turbulent est évaluée en suivant les recommandations de Dally (DALLY, 2013), c'est-à-dire en s'appuyant sur les profils de valeur moyenne et de variance de la fraction de mélange. Les profils de ces deux quantités le long de l'axe de symétrie sont présentés sur la Fig 9.3.

La comparaison entre les mesures expérimentales et les profils issus de la simulation permet d'être confiant en la qualité de la simulation de l'écoulement. Ceci est d'ailleurs

^{1.} Le temps de mélange scalaire est évalué, pour ce calcul, à partir de la résolution de l'équation de transport de la variance et du taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange suivant l'expression $\tau_{\xi} = \widetilde{\xi''^2} / \widetilde{\chi}_{\xi}$.



FIGURE 9.3: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les du calcul (lignes) pour la quantité rms (losange) la valeur moyenne (carrés) de la fraction de mélange, le long de l'axe de symétrie du jet.

confirmé par les profils radiaux de valeurs moyenne et de variance de la fraction de mélange présentés sur la Fig 9.4 pour quatre positions axiales différentes. Pour ces profils, les résultats issus de la simulation sont en bon accord avec les mesures expérimentales. Ce constat est tout de même à nuancer pour le profil le plus éloigné de l'injecteur, voir Fig. 9.4a. Le modèle de turbulence utilisé, i.e. le modèle non linéaire quadratique (SHIH et al., 1995b), n'étant pas adapté aux écoulements bas Reynolds, il n'est pas à même de capturer correctement le développement de la seconde couche de mélange qui se développe entre $R/d_j = 3$ et $R/d_j = 6$. On peut aussi noter que le premier profil de valeur rms est clairement surestimé. Cette surestimation découle de l'utilisation de la définition de Bilger, basée sur la fraction massique d'élément pour évaluer la valeur de la fraction de mélange, qui induit une valeur non nulle de la fraction de mélange dans le co-courant. Le gradient de fraction de mélange moyenne est donc sur-évalué dans la présente étude et cela conduit à une surestimation de la production de variance, $P_{\widetilde{\xi''^2}} = 2\overline{\rho}\nu_t/Sc_t\partial\widetilde{\xi}/\partial x_\alpha\partial\widetilde{\xi}/\partial x_\alpha$. Cependant, le champ de variance est bien capturé en champ lointain qui constitue la zone principale d'intérêt dans le cadre de notre étude puisque c'est la zone d'interaction entre les trois entrées.

La comparaison entre les profils issus de la simulation numérique et les résultats expérimentaux ayant permis de valider la qualité de la capture du développement du jet, on se propose d'analyser plus en détail le comportement des profils de température et d'espèces majoritaires. Les profils de température moyenne sont alors tracés sur la Fig. 9.5 pour quatre positions axiales différentes situées en aval de l'injection $X_1=30$ mm, $X_2=60$ mm, $X_3=120$ mm and $X_4=200$ mm. Les résultats issus d'une simulation utilisant l'approche injecteur fictif (IF) sont tracés en trait continu alors que ceux issus d'une simulation s'appuyant sur la définition standard de la fraction de mélange (FMS) sont tracés en trait discontinu. Comme observé expérimentalement, il n'y a pas d'influence significative de la troisième entrée aux deux premières positions X_1 et X_2 . Ceci explique pourquoi l'ap-



FIGURE 9.4: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils issus de la simulation numérique (lignes) pour quatre abscisses différents, $X_1=30$ mm (carrés), $X_2=60$ mm (triangles), $X_3=120$ mm (losanges) and $X_4=200$ mm (cercles).

proche IF et l'approche FMS sont toutes les deux capables de correctement prédire la structure de flamme et donc les niveaux de température correspondant. De plus, on peut remarquer qu'il n'y a pas de différence remarquable entre les deux approches, l'approche IF dégénérant vers l'approche FMS lorsque le cas considéré ne comporte que deux entrées.

Pour les profils plus éloignés, X_3 et X_4 , l'approche FMS n'est plus capable de capturer la structure de flamme et surestime les niveaux de température ainsi que la position de leurs maximum, i.e. la position radiale de la flamme. En effet, pour les abscisses supérieures à 100 mm, le jet central interagit avec le co-courant et l'air de la soufflerie, l'approche FMS n'est donc plus pertinente. L'approche IF, qui est proposée pour prendre en compte le mélange entre les trois entrées, améliore significativement la qualité des résultats pour cette abscisse. Ceci est encore plus évident en champ lointain comme le montre le profil X_4 .

La différence entre les deux approches est alors mise en évidence sur les profils de température moyenne en fonction de la fraction de mélange moyenne tracés sur la droite de la Fig. 9.5. Là encore, l'équivalence des deux approches dans le cas à deux entrées est évidente, voir les deux premières abscisses de la Fig. 9.5. Pour les abscisses suivantes, l'approche FMS est seulement capable de correctement capturer la structure de flamme pour les valeurs élevées de la fraction de mélange. En effet, comme la fraction de mélange est égal à l'unité dans le combustible, les valeurs les plus élevées de la fraction de mélange correspondent aux mélanges ayant la plus grande quantité de combustible, en d'autres termes, le mélange qui est le plus proche du jet central et donc celui qui s'est préférentiellement mélangé avec le co-courant, plutôt qu'avec l'air de la soufflerie. Ceci explique



FIGURE 9.5: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne (losanges) et $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ (carrés) à quatre abscisses différentes x=30 mm, 60 mm, 120 mm and 200 mm. Les résultats obtenus avec une approche injecteur fictif sont tracés en ligne continue et ceux obtenus avec une approche fraction de mélange standard sont tracés en pointillés.

pourquoi négliger la troisième entrée, i.e. l'air de la soufflerie, n'a que peu d'impact pour ces valeurs de la fraction de mélange. Ce qui n'est pas le cas pour les faibles valeurs de la fraction de mélange et ce d'autant moins qu'on s'éloigne de l'injection. En effet, les faibles valeurs de fraction de mélange correspondent à des mélanges ayant eu une forte interaction avec la troisième entrée, l'approche FMS ne pouvant décrire le mélange issu de plus de deux entrées, elle n'est pas adaptée pour représenter cette zone de l'écoulement. L'approche IF permet quant à elle de correctement prédire la structure de flamme aussi bien pour les valeurs élevées que pour les valeurs plus faibles de la fraction de mélange. Une chimie globale à une étape étant considérée, la fraction massique d'espèces carbonées, $Y_{CO_2} + Y_{CO}$, est aussi tracée sur la Fig. 9.5 et elle montre un assez bon accord avec les données expérimentales lorsque l'approche IF est utilisée.

Cependant, et malgré un accord globalement satisfaisant entre les résultats numériques et expérimentaux, l'accord n'est pas parfait pour les fractions massiques d'espèces carbonées ainsi que pour le maximum de température. Le fait que le niveau maximum de température issu de la simulation soit plus élevé que celui mesuré peut être attribué à l'utilisation d'une chimie globale à une étape qui néglige les espèces radicalaires et conduit à des niveaux de température plus élevés. Alors que la surestimation de la fraction massique d'espèces carbonées semble être due à l'hypothèse de nombre de Lewis unitaire qui impose la même diffusivité moléculaire pour le méthane et l'hydrogène et tend à sur-évaluer la quantité locale de méthane avant réaction.

9.2.2 Sensibilité du modèle aux variations de composition du cocourant

La section précédente ayant montré la pertinence de l'approche injecteur fictif pour la simulation de la flamme de Dally, en particulier pour ce qui est de la prise en compte du mélange entre les trois entrées, l'influence de la variation de la composition du cocourant sur la réponse du modèle est évaluée dans cette section. Pour cela, le cas pour lequel la fraction massique d'oxygène dans le co-courant est de 9%, noté HM9%, est maintenant considéré. La comparaison entre les champs de température moyenne issus des simulations du cas HM3% et du cas HM9% sont tracés sur la Fig. 9.7. Sur cette figure, le trait continu rouge représente la ligne iso-température $\tilde{T} = 1350K$. On peut alors diviser ce champ de température en deux zones distinctes. Une première, en dessous de $X/d_j = 25$, où l'influence de la troisième entrée peut être négligée et une seconde, au dessus de $X/d_j = 25$, qui est affectée par le mélange avec l'air de la soufflerie.

Dans le cas HM3%, le co-courant est grandement sous-oxygéné, ce qui est clairement visible sur le champ de température, celui-ci mettant en évidence une augmentation signi-



FIGURE 9.6: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et celles du calcul (lignes) pour la quantité rms (losange) la valeur moyenne (carrés) de la fraction de mélange, le long de l'axe de symétrie du jet.

ficative de son niveau à l'endroit où la troisième entrée interagi avec la flamme. Ceci n'est pas visible pour le cas HM9% pour lequel le taux d'oxygène dans le co-courant est plus élevé. De plus, la flamme est décrochée dans le cas HM3% alors qu'elle est accrochée aux lèvres de l'injecteur dans le cas HM9%. Cependant, bien que ce comportement soit observé expérimentalement, la hauteur de décollement n'est pas correctement prédite par la simulation. Finalement, cette comparaison montre que l'approche proposée dans la présente étude est à même de capturer les effets de variation de la fraction massique d'oxygène dans le co-courant. Ceci est d'ailleurs confirmé par l'analyse des profils de température axiale tracés sur la Fig. 9.6 et des profils de température radiale tracés sur la Fig. 9.8. Ces profils de température montre clairement que l'approche proposée est non seulement capable de reproduire l'incrément de température induit par la variation de la valeur de la fraction massique d'oxygène dans le co-courant mais aussi de prendre en compte, dans les deux cas, les effets de la troisième entrée en champ lointain



FIGURE 9.7: Champs de température moyenne issus de deux simulations numériques utilisant l'approche IF, l'une pour le cas HM3% (gauche) et l'autre pour le cas HM9% (droite).



FIGURE 9.8: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne (losanges) et $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ (carrés) à trois abscisses différentes x=30 mm, 60 mm, 120 mm. Les résultats obtenus pour le cas HM9% sont tracés en rouge et ceux obtenus pour le cas HM3% sont tracés en noir.

9.3 Approche injecteur fictif couplée au modèle MIL

La pertinence de l'approche injecteur fictif pour les problèmes présentant plus de deux entrées ayant été mise en évidence dans la section précédente, nous allons, dans cette section, nous appuyer sur cette approche pour étendre le modèle MIL aux cas multientrées.

9.3.1 Injecteur fictif

L'injecteur fictif ayant été localement défini précédemment, on peut aussi décrire, localement, la trajectoire MIL comme sur la figure 9.9. Sur cette figure, on constate que seul le point M est indépendant de la définition de l'injecteur, la pente de la droite d'équilibre étant influencée par la valeur de la fraction massique d'oxydant à l'injection $Y_{ox}^{\infty,new}$, ainsi que par la valeur de la fraction de mélange à la stoechiométrie ξ_{st}^{new} . De plus, la position des sauts est déterminée en comparant le temps de mélange local au temps caractéristique chimique. Cependant, ce temps chimique est tabulé *a priori* en fonction des conditions d'injection.

La définition de la fraction de mélange n'étant que locale, la tabulation du temps chimique en fonction de cette variable semble difficile. Une tabulation plus générale doit alors être envisagée. Nous construisons une tabulation dépendant de la température et de la composition locale par l'intermédiaire des fractions massiques de chaque espèce.

Enfin, le squelette du modèle MIL (droite IEM, droite d'équilibre et position des sauts) étant entièrement déterminé, le taux de production de la fraction massique d'oxydant est alors calculé de la même manière que pour le modèle MIL standard.



FIGURE 9.9: Représentation de la trajectoire la grangienne dans l'espace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque.

9.3.2 Tabulation générale du temps chimique

Afin de pouvoir utiliser le modèle MIL conjointement avec l'approche injecteur fictif, il faut établir une tabulation du temps chimique indépendante de l'expression de la fraction de mélange, cette dernière n'étant pertinente que localement dans l'approche injecteur fictif.

Comme vu dans le chapitre précédent, on peut connaître localement la composition du mélange en fonction de la fraction de mélange. De plus, on peut reconstruire l'enthalpie des entrées de l'injecteur fictif, $h_f^{\infty,new}$ et $h_{ox}^{\infty,new}$, de la même façon que les autres conditions limites de ce dernier. Par conséquent, l'évolution de la température du mélange inerte en fonction de la fraction de mélange est exprimée ainsi :

$$T(\xi) = \frac{\xi h_f^{\infty,new} + (1-\xi) h_{ox}^{\infty,new}}{C_p(\xi)}$$
(9.7)

Une tabulation générale du temps chimique τ_{chem} en fonction des fractions massiques de chaque espèce considérée, de la pression et de la température va donc permettre de construire localement la courbe $\tau_{chem}(\xi)$ grâce aux relations Eqs. (8.24)-(8.27). La position des sauts peut alors être connue localement, la trajectoire MIL est donc entièrement décrite. La figure 9.10 illustre l'architecture du modèle MIL multi-entrées.



FIGURE 9.10: Schéma de principe du modèle MIL avec l'approche injecteur fictif.



FIGURE 9.11: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et celles du calcul (lignes) pour la température moyenne (losange) et la fraction de mélange moyenne (carrés), le long de l'axe de symétrie du jet.



FIGURE 9.12: Comparaison entre les données expérimentales (symboles) et les profils axiaux issus de la simulation numérique (lignes) pour la température moyenne (losanges) et Y_{H_2} (carrés) à trois abscisses différentes x=30 mm, 60 mm, 120 mm.

9.3.3 Application à la flamme de Dally

Le modèle MIL multi-entrées, couplé au solveur N3S_NATUR est alors mis en oeuvre pour simuler le cas HM9% de la flamme de Dally. Les profils axiaux de fraction de mélange et de température le long de l'axe de symétrie sont alors présentés sur la Fig. 9.11 et montrent que le modèle MIL multi-entrées est capable de prédire correctement la température. Ceci est d'ailleurs confirmé par les profils radiaux de température et de fraction massique d'hydrogène tracés sur la Fig. 9.12. Le modèle MIL reproduit aussi de façon satisfaisante la localisation de la flamme, ainsi que le niveau de température même si l'hypothèse de chimie à une seule étape conduit à surévaluer légèrement la température comme on peut le constater sur les profils correspondant à l'abscisse X_3 de la Fig. 9.12.

Conclusions

Dans cette partie, l'expression de la fraction de mélange dans sa définition standard (FMS) a été étendue aux systèmes comportant trois entrées et plus. L'approche à entrées multiple qui en résulte, appelée approche injecteur fictif (IF), est une approche à PDF présumée qui repose sur la considération d'un injecteur à deux entrées définies localement. Sa capacité à évaluer la composition locale de l'écoulement a d'abord été évaluée sur des cas test numériques puis sur la simulation du brûleur à trois entrées étudié à l'Université d'Adelaïde. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales et l'intérêt de l'approche IF par rapport à l'approche FMS est clairement mis en évidence. Enfin, le modèle MIL à chimie brusque est modifié pour pouvoir être appliqué dans le cadre de l'approche injecteur fictif et a ensuite été appliqué avec succès à la simulation du brûleur de Dally. La mise en oeuvre de cette approche nécessite la connaissance de la PDF jointe de la fraction de mélange et des compositions des entrées fictives. Dans le présent travail l'hypothèse d'indépendance statistique entre ces différentes variables a été invoquée. Cette hypothèse revient à négliger les fluctuations de composition au sein d'un courant d'entrée fictif, ce qui peut poser problème pour certain écoulement, par exemple un écoulement où deux entrées, une de combustible et une d'oxydant, sont préférentiellement mélangées avant d'interagir avec une troisième entrée. Le travail de Mura et Borghi (MURA et BORGHI, 2004) sur les PDF partielles offre une direction envisageable pour proposer de futures améliorations.

Conclusions

Conclusions et perspectives

Conclusions

Les travaux présentés dans ce manuscrit de Thèse portent sur la modélisation de la combustion turbulente en écoulement diphasique, éventuellement à haute vitesse, dans des conditions représentatives de celles rencontrées lors de la phase d'allumage des moteurs fusées, en particulier pour les moteurs à cycle expander. L'approche retenue pour simuler numériquement de telles flammes non-prémélangées doit donc être capable de prendre en compte les phénomènes liés à la compressibilité de l'écoulement, à son caractère diphasique, au mélange turbulent entre un grand nombre d'injecteurs et à la cinétique chimique. Ce travail fait suite à celui effectué durant la Thèse de J.F. Izard (IZARD, 2009), le choix d'une approche URANS, justifié par la grande complexité de la géométrie envisagée ainsi que par les conditions extrêmes rencontrées, est donc conservé.

Du point de vue de la modélisation de la combustion, les effets de cinétique chimique complexe peuvent être pris en compte de manière générale en résolvant l'équation de transport de la PDF de la composition. Cependant, la résolution de cette équation reste assez coûteuse en temps de calcul. L'hypothèse est alors faite, dans le chapitre 3, que la chimie peut être résolue de manière locale au sein d'un PaSR et que ce dernier peut être approximé de manière satisfaisante, et à moindre coût, en invoquant une hypothèse de chimie brusque. Cette hypothèse permet d'introduire une relation particulière entre la variable d'avancement, Y, et la variable de mélange, ξ . Ainsi de faire uniquement porter le problème de détermination de la PDF de la composition, i.e. la PDF jointe de la variable d'avancement et de la variable de mélange, sur la PDF marginale de la variable de mélange. Ceci se fait sans invoquer une hypothèse d'indépendance statistique. Les limites importantes associées à ce type d'hypothèse ont été récemment mises en évidence par CHEVILLARD (2013). Il ne reste alors plus qu'à présumer cette PDF marginale sous la forme d'une PDF- β . Cette approche repose donc sur l'hypothèse de chimie brusque qui traduit le fait qu'une particule fluide met un temps fini avant de s'oxyder, mais, une fois qu'elle s'est enflammée, elle le fait instantanément jusqu'à atteindre l'état complètement brûlé. Comme le temps que met une particule fluide avant de réagir dépend de sa composition, il en résulte que, dans l'espace des phases (ξ, Y) , les compositions les plus éloignées de la stoechiométrie vont correspondre à un état non brûlé alors que celles proches de la stoechiométrie vont correspondre à un état complètement brûlé. Reste alors à déterminer la composition limite entre ces deux états. Pour ce faire, on s'appuie sur la considération physique suivante : pour que la réaction chimique puisse avoir lieu, il faut que les molécules restent un temps suffisamment long en contact avant qu'elles ne soient séparées par le passage d'un tourbillon. La détermination de la composition limite entre l'état brûlé et l'état non brûlé est donc simplement obtenue par comparaison locale entre un temps caractéristique de la chimie et un temps caractéristique du mélange, i.e. un temps de passage entre deux tourbillons. Finalement, en adoptant une description lagrangienne des particules fluides dans l'espace des phases, le taux de production chimique peut être exprimé comme une fonction de ξ et Y uniquement et le taux de production moyen n'est alors que la pondération de ce taux de production chimique par la PDF de la composition. Ce modèle proposé par Borghi et ses collaborateurs (BORGHI et POURBAIX, 1985; BORGHI et GONZALEZ, 1986), baptisé MIL pour Modèle Intermittent Lagrangien, présente l'intérêt de ne pas supposer de géométrie particulière de la flamme. Il sert de socle pour le travail de modélisation de la combustion turbulente discuté dans la présente Thèse.

La seconde partie de notre étude est consacrée aux écoulements fortement compressibles à hautes vitesses. Dans de telles conditions, le mélange est susceptible de s'autoinflammer. Suivant la proposition de IZARD et MURA (2009), l'approche MIL est étendue afin de prendre en compte le phénomène d'auto-allumage. Pour cela, l'approche est conservée mais la détermination de la composition limite entre les états brûlés et non brûlés se fait par comparaison entre un temps d'auto-allumage, prenant en compte les éventuels effets d'élévation de température par frottement visqueux, et un temps de résidence dépendant de la composition. Ce modèle a été utilisé conjointement avec une représentation améliorée des échelles caractéristiques du mélange turbulent. Ainsi, une équation de transport de la quantité de temps de résidence a été implémentée afin d'évaluer le temps de résidence moyen associé au courant d'oxydant et au courant de combustible. Une équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen a aussi été considérée pour déterminer le temps de mélange scalaire. Le modèle a alors été appliqué à la simulation de deux flammes supersoniques étudiées par BEACH (1972) et CHENG et al. (1994). Les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales. De plus, l'analyse de sensibilité au modèle de fermeture du taux de dissipation scalaire moyen a permis de mettre en évidence les lacunes de l'approche usuelle de fermeture par relaxation linéaire. En effet, cette dernière n'est pertinente qu'en turbulence homogène isotrope et n'est donc pas adaptée en champ proche de l'injection. La résolution de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyen est alors proposée afin de pallier cette limitation. Cette

analyse des flammes jets supersoniques a fait l'objet d'un article de synthèse publié dans Combustion Science and Technology l'an passé (GOMET et al., 2012).

La troisième partie s'attache à représenter la combustion en écoulement diphasique et en particulier la prise en compte sur le mélange des effets induits par la vaporisation des gouttelettes et leur transitoire thermique. Pour cela, une approche eulérienne-lagrangienne a été proposée et appliquée à la simulation d'une flamme se développant dans le sillage d'un injecteur coaxial cryotechnique hydrogène gazeux (GH2) / oxygène liquide (LOx). Dans la modélisation proposée, le spray de gouttelettes de LOx est représenté au moyen d'une approche lagrangienne stochastique. Le taux de production chimique moyen est, quant à lui, évalué en étendant le modèle MIL à chimie brusque à la combustion en écoulement diphasique. Pour cela, l'effet des fluctuations induites par la vaporisation est pris en compte par l'intermédiaire de termes sources additionnels dans l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange et de sa dissipation. De plus, la restriction du domaine de variation de la fraction de mélange induite par les effets de vaporisation des gouttes en dessous de leur température d'ébullition est aussi prise en compte en renormalisant la PDF de la fraction de mélange. Le modèle ainsi obtenu a permis de calculer le cas A10 du banc MASCOTTE. La forme, ainsi que la localisation de la flamme simulée, sont en bon accord avec les visualisations expérimentales. Les profils de température issus de la simulation sont aussi en très bon accord avec les mesures expérimentales à l'exception du profil le plus proche de l'injection qui est clairement surestimé. Ce comportement a été attribué à une mauvaise estimation du temps de mélange scalaire. Une équation de transport du taux de dissipation scalaire en écoulement diphasique a alors été écrite et résolue afin d'évaluer ce temps de mélange scalaire. Une légère amélioration de la qualité des résultats a alors été constatée. En comparaison avec les résultats numériques déjà obtenus sur cette configuration, par exemple (CHENG et FARMER, 2006; IZARD et MURA, 2011), l'ensemble des résultats obtenus est très satisfaisant et ils ont fait l'objet d'une publication cette année (GOMET et al., 2014).

Enfin, la quatrième et dernière partie s'intéresse à la prise en compte d'entrées multiples et en particulier l'extension de l'expression de la fraction de mélange pour de tels écoulements. L'approche qui en résulte, appelée approche injecteur fictif (IF), est une approche à PDF présumée qui repose sur la considération d'un injecteur à deux entrées définies localement. Sa capacité à évaluer la composition locale de l'écoulement à d'abord été évaluée sur des cas test numériques puis sur la simulation du brûleur à trois entrées étudié à l'Université d'Adelaïde. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales et l'intérêt de l'approche IF par rapport à l'approche fraction de mélange standard (FMS) est clairement mis en évidence. Enfin, le modèle MIL à chimie brusque a été modifié pour pouvoir être appliqué dans le cadre de l'approche injecteur fictif et a ensuite été mis en oeuvre avec succès à la simulation du brûleur de DALLY et al. (2002). Les résultats ainsi que l'analyse originale correspondante viennent d'être soumis pour publication (GOMET et al., 2013).

En conclusion, le travail présenté dans ce manuscrit de Thèse a permis de développer un modèle de combustion turbulente qui doit permettre de simuler l'allumage d'un moteur fusée depuis l'injection d'un gaz inerte, afin de contrôler l'atmosphère au sein du moteur, jusqu'à l'allumage de l'ensemble de la plaque d'injection. Le modèle correspondant a ensuite été validé par comparaison entre les résultats prédits par la simulation numérique et les données expérimentales pour quatre montages expérimentaux représentatifs de chacune des phases de l'allumage. Un schéma du modèle final ainsi que son couplage avec le solveur Navier Stokes multi-espèce compressible N3S_NATUR est présenté sur la figure 9.13.





Perspectives

Les hypothèses retenues pour la modélisation de chaque phase de l'allumage sont résumées dans les conclusions de chaque partie et les voies éventuelles d'amélioration y sont aussi proposées. D'un point de vue plus global, une première perspective de développement pourrait consister à étendre le modèle de combustion à des conditions transcritiques et supercritiques telles que l'on peut les rencontrer durant la phase de montée en régime qui précède les conditions nominales de vol. Une attention particulière doit alors être portée au mélange turbulent à masse volumique très variable, l'écoulement pouvant présenter de très forts gradients de masse volumique, voir (DEMOULIN et al., 2009). Le modèle ainsi étendu permettrait alors la simulation complète du transitoire d'allumage des moteurs fusées depuis le balayage du gaz inerte jusqu'aux conditions nominales de vol, voire, dans le cas d'un ré-allumage moteur, de simuler l'ensemble du vol avec les allumages successifs.

La simplicité de mise en oeuvre et la robustesse du modèle MIL font de ce modèle à PDF présumée un très bon candidat pour être transposé en tant que modèle de sousmaille dans le cadre de simulations LES. Des travaux sont d'ailleurs entrepris dans ce sens puisque cela constituera l'un des objectifs d'une Thèse conjointe PPRIME/ICARE financée par la chaire Propulsion et Environnement de la fondation scientifique EADS. Pour des applications plus industrielles, l'utilisation d'une approche hybride RANS-LES offrirait une voie d'amélioration originale. Les calculs effectués avec cette approche bénéficieraient à la fois du savoir faire développé en RANS concernant les écoulements en proche paroi et de la meilleure évaluation du macro-mélange qui peut être obtenu via le formalisme LES.

Enfin, il faut garder à l'esprit que la description d'un écoulement turbulent réactif passe non seulement par une bonne modélisation du taux de production chimique mais aussi par une bonne description du mélange turbulent à toutes les échelles. En particulier, le méso-mélange représenté par les flux turbulents. Or, ces flux turbulents sont fermés, la plupart du temps, par un modèle simple reposant sur une hypothèse de diffusion gradient dont on sait qu'elle n'est adaptée qu'à des écoulements très particuliers. Une meilleure évaluation de ces flux semble donc nécessaire. La résolution d'une équation de transport de ces flux pourrait apporter une solution plus générale à leur évaluation. Toutefois, cette solution à un coût supplémentaire et nécessite de proposer des fermetures pour des termes plus complexes. Le développement de modèles algébriques plus élaborés semble donc une voie à privilégier. Les travaux de Robin et al. (ROBIN et al., 2011, 2012; SERRA et al., 2013) offrent de nombreuses perspectives dans ce sens. En effet, pour peu que la masse volumique soit une fonction de la fraction de mélange uniquement, cette approche basée sur l'utilisatoin d'une fraction de mélange permet de prendre en compte l'influence des variations de masse volumique induites par la flamme sur les flux turbulents. Le modèle MIL permettant d'exprimer la composition du mélange réactif en fonction de la fraction de mélange, il pourrait être facilement couplé au modèle pour les flux proposé par Serra

Bibliographie

- ABRAMZON, B. et W. SIRIGNANO. 1989, «Droplet vaporization model for spray combustion calculations», International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 32, n° 9, p. 1605–1618.
- ANSELMET, F., L. DANAILA et P. L. GAL. 1998, «Influence des grandes échelles sur le mélange turbulent d'un scalaire passif», GDR turbulence.
- APPEL, W. 2002, Mathématiques pour la physique et les physiciens, H & K.
- BAILLY, C. et G. COMTE-BELLOT. 2003, Turbulence, CNRS Editions.
- BAURLE, R. et S. GIRIMAJI. 2003, «Assumed pdf turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations», *Combustion and Flame*, vol. 134, n° 1, p. 131–148.
- BAURLE, R., A. HSU et H. HASSAN. 1995, «Assumed and evolution probability density functions in supersonic turbulent combustion calculations», Journal of Propulsion and Power, vol. 11, nº 6, p. 1132–1138.
- BEACH, H. 1972, «Supersonic mixing and combustion of a hydrogen jet in a coaxial hightemperature test gas», dans American Institute of Aeronautics and Astronautics and Society of Automotive Engineers, Joint Propulsion Specialist Conference, 8 th, New Orleans, La, p. 1972.
- BECKER, H. 1977, «Mixing, concentration fluctuations, and marker nephelometry», Studies in convection, vol. 2, p. 45–139.
- BECKER, H. et B. BOOTH. 1975, «Mixing in the interaction zone of two free jets», AIChE Journal, vol. 21, n° 5, p. 949–958.
- BÉGUIER, C., I. DEKEYSER et B. LAUNDER. 1978, «Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence», *Physics of Fluids*, vol. 21, n° 3, p. 307.
- BEISHUIZEN, N. 2008, *PDF* modelling and particle-turbulence interaction of turbulent spray flames, Thèse de doctorat, Delft.

- BEN DAKHLIA, R. 2001, Combustion stationnaire et instationnaire de mélanges diphasiques, Thèse de doctorat.
- BERTRAND, C., F. LOCKWOOD et P. STOLAKIS. 1985, «Prediction of a three rectangular jet turbulent mixing and diffusion flame», *Combustion and Flame*, vol. 61, n° 2, p. 195– 198.
- BILGER, R. 1976, «The structure of diffusion flames», Combustion Science and Technology, vol. 13, nº 1-6, p. 155–170.
- BILGER, R. 1980, «Turbulent flows with nonpremixed reactants», dans *Turbulent Reacting Flows*, Topics in Applied Physics.
- BILGER, R. 2004, «Some aspects of scalar dissipation», Flow, turbulence and combustion, vol. 72, nº 2-4, p. 93–114.
- BODÈLE, E., I. GÖKALP, S. ZURBACH et D. SAUCEREAU. 2001, «Modeling of mascotte 10 bars case with these code», dans *Proceedings of the second International Work*shop on Rocket Combustion Modeling (Atomization, Combustion and Heat Transfer), Lampoldshausen, Germany.
- BOIVIN, P., A. DAUPTAIN, C. JIMÉNEZ et B. CUENOT. 2012, «Simulation of a supersonic hydrogen-air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry», *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 4, p. 1779–1790.
- BORGHI, R. 1996, «The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling», dans 8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion, p. 1–18.
- BORGHI, R. 2008, Les milieux continus multiphysiques hors d'équilibre et leur modélisation, Cépadues.
- BORGHI, R. et M. CHAMPION. 2000, *Modélisation et théorie des flammes*, Editions Technip.
- BORGHI, R. et D. DUTOYA. 1978, «On the scales of the fluctuations in turbulent combustion», dans Proceedings of the Seventeenth Symposium (International) on Combustion, édité par T. C. Institute, p. 235–244.
- BORGHI, R. et D. ESCUDIÉ. 1984, «Assessment of a theoretical model of turbulent combustion by comparison with a simple experiment», *Combustion and Flame*, vol. 56, n^o 2, p. 149–164.

- BORGHI, R. et M. GONZALEZ. 1986, «Applications of lagrangian models to turbulent combustion», *Combustion and Flame*, vol. 63, nº 1, p. 239–250.
- BORGHI, R. et P. MOREAU. 1977, «Turbulent combustion in premixed flames», Acta Astronautica, vol. 4, p. 321–341.
- BORGHI, R. et E. POURBAIX. 1985, «Lagrangian models for turbulent combustion», dans Turbulent Shear Flows 4, Springer, p. 369–380.
- BOUSSINESQ, J. 1877, «Théorie de l'écoulement tourbillant», Mémoires Présentés par Divers Savants, Académie des Sciences, vol. 23, p. 46–50.
- BRAY, K., P. LIBBY et F. WILLIAMS. 1994, «High speed turbulent combustion», Turbulent Reacting Flows, p. 609–638.
- BURKE, S. et T. SCHUMANN. 1928, «Diffusion flames», Industrial & Engineering Chemistry, vol. 20, n° 10, p. 998–1004.
- CABRA, R., T. MYHRVOLD, J. CHEN, R. DIBBLE, A. KARPETIS et R. BARLOW. 2002, «Simultaneous laser raman-rayleigh-lif measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent h2 /n2 jet flame in a vitiated coflow», *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, n° 2, p. 1881–1888.
- CANDEL, S., G. HERDING, R. SYNDER, P. SCOUFLAIRE, C. ROLON, L. VINGERT, M. HABIBALLAH, F. GRISCH et M. PÉALAT. 1998, «Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames», *Journal of Propulsion and Power*, vol. 14, nº 5, p. 826–834.
- CANT, R. et E. MASTORASKOS. 2008, An Introduction to Turbulent Reaction Flows, Imperial College Press.
- CARÉ, I. et M. LEDOUX. 1991, «Study of an airblast coaxial atomizer. Experiments and modelisation», dans *Proceedings of ICLASS-91*, p. 763–770.
- CHAKRABORTY, N., M. CHAMPION, A. MURA et N. SWAMINATHAN. 2011, *Turbulent Premixed Flames*, chap. Scalar dissipation rate approach, Cambridge University Press, p. 74–102.
- CHAPMAN, S. et T. G. COWLING. 1970, The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases, Cambridge university press.
- CHARGY, D. 2011, N3S-NATUR CEDILLE, Manuel théorique et utilisateur, SIMULOG, Cannes La Bocca.

- CHENG, G. C. et R. FARMER. 2006, «Real fluid modeling of multiphase flows in liquid rocket engine combustors», *Journal of Propulsion and Power*, vol. 22, n° 6, p. 1373–1381.
- CHENG, T., J. WEHRMEYER, R. PITZ, O. JARRETT et G. NORTHAM. 1994, «Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame», *Combustion and Flame*, vol. 99, n° 1, p. 157–173.
- CHEVILLARD, S. 2013, Simulation numérique directe pour les moteurs à combustion interne, Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- CHRISTO, F. et B. B. DALLY. 2005, «Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow», *Combustion and Flame*, vol. 142, n^o 1, p. 117–129.
- CLOUET, J.-F. et K. DOMELEVO. 1997, «Solution of a kinetic stochastic equation modeling a spray in a turbulent gas flow», Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, vol. 7, nº 02, p. 239-263.
- DALLY, B. 2013, «Adelaide-Sandia JHC data», Communication personnelle.
- DALLY, B. B., A. KARPETIS et R. BARLOW. 2002, «Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow», *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, nº 1, p. 1147–1154.
- DALY, B. J. et F. H. HARLOW. 1970, «Transport equations in turbulence», *Physics of Fluids*, vol. 13, p. 2634.
- DANCEY, C. 1996, «The turbulent flow field downstream of an axisymmetric mach 2 supersonic burner-LDA measurements», dans Proceedings of the AIAA Joint Propulsion Conference, vol. 32.
- DELAMARE, L. 1992, Modélisation numérique de la propagation d'une flamme turbulente en milieu confiné, Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- DELHAYE, J. 1974, «Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation», *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 1, nº 3, p. 395–409.
- DEMOULIN, F. et R. BORGHI. 2000, «Assumed pdf modeling of turbulent spray combustion», Combustion Science and Technology, vol. 158, nº 1, p. 249–271.
- DEMOULIN, F. et R. BORGHI. 2002, «Modeling of turbulent spray combustion with application to diesel like experiment», *Combustion and Flame*, vol. 129, n° 3, p. 281–293.

- DEMOULIN, F.-X. 1999, Contribution à la modélisation de la combustion turbulente des milieux à deux phases, Thèse de doctorat, Université de Provence-Aix-Marseille I.
- DEMOULIN, F.-X., S. ZURBACH et A. MURA. 2009, «High-pressure supercritical turbulent cryogenic injection and combustion : A single-phase flow modeling proposal», *Journal of Propulsion and Power*, vol. 25, nº 2, p. 452–464.
- DIXON-LEWIS, G., T. DAVID, P. GASKELL, S. FUKUTANI, H. JINNO, J. MILLER, R. KEE, M. SMOOKE, N. PETERS et E. EFFELSBERG. 1985, «Calculation of the structure and extinction limit of a methane-air counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 20, Elsevier, p. 1893–1904.
- DOLEJŠÍ, V. et J. FELCMAN. 2004, «Anisotropic mesh adaptation for numerical solution of boundary value problems», *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, vol. 20, n° 4, p. 576–608.
- DOMELEVO, K. et L. SAINSAULIEU. 1997, «A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field», *Journal of Computational Physics*, vol. 133, nº 2, p. 256–278.
- DOMINGO, P., L. VERVISCH et D. VEYNANTE. 2008, «Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow», *Combustion and Flame*, vol. 152, n° 3, p. 415–432.
- DOPAZO, C. et E. E. O'BRIEN. 1974, «An approach to the autoignition of a turbulent mixture», *Acta Astronautica*, vol. 1, nº 9, p. 1239–1266.
- DREW, D. 1983, «Mathematical modeling of two-phase flow», Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 15, nº 1, p. 261–291.
- DUKOWICZ, J. K. 1980, «A particle-fluid numerical model for liquid sprays», Journal of Computational Physics, vol. 35, nº 2, p. 229–253.
- DURET, B., G. LURET, J. REVEILLON, T. MÉNARD, A. BERLEMONT et F.-X. DE-MOULIN. 2012, «DNS analysis of turbulent mixing in two-phase flows», *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 40, p. 93–105.
- ELGHOBASHI, S. et B. LAUNDER. 1983, «Turbulent time scales and the dissipation rate of temperature variance in the thermal mixing layer», *Physics of Fluids*, vol. 26, n° 9, p. 2415–2419.
- ENJALBERT, N., P. DOMINGO et L. VERVISCH. 2012, «Mixing time-history effects in large eddy simulation of non-premixed turbulent flames : Flow-controlled chemistry tabulation», *Combustion and Flame*, vol. 159, nº 1, p. 336–352.
- EVANS, J. S., C. J. SCHEXNAYDER JR et H. L. BEACH JR. 1978, «Application of a twodimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows», NASA STI/Recon Technical Report N, vol. 78, p. 20463.
- FAETH, G. 1977, «Current status of droplet and liquid combustion», *Progress in Energy* and Combustion Science, vol. 3, nº 4, p. 191–224.
- FAETH, G. 1983, «Evaporation and combustion of sprays», Progress in Energy and Combustion Science, vol. 9, nº 1, p. 1–76.
- FAETH, G. 1991, «Structure and atomization properties of dense turbulent sprays», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 23, Elsevier, p. 1345–1352.
- FARTOUK, A., P. PLION et A. MURA. «A multi-mixture fraction closure for dilute turbulent diffusion flame», dans *Proceedings of the Twenty Third International Colloquium* on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems.
- FAVRE, A. 1965, «Equations des gaz turbulents compressibles», Journal de Mécanique, vol. 4.
- Fox, R. O. 2003, *Computational models for turbulent reacting flows*, Cambridge University Press.
- FRÖSSLING, N. 1938, «Evaporation of falling drops», Gerlands Geiträge zur Geophysik, vol. 52, p. 170–216.
- GHIRELLI, F. et B. LECKNER. 2004, «Transport equation for the local residence time of a fluid», *Chemical Engineering Science*, vol. 59, n° 3, p. 513–523.
- GICQUEL, O., D. THÉVENIN et N. DARABIHA. 2005, «Influence of differential diffusion on super-equilibrium temperature in turbulent non-premixed hydrogen/air flames», Flow, Turbulence and Combustion, vol. 73, nº 3-4, p. 307–321.
- GICQUEL, P., E. PORCHERON et A. BRISSON. 1998, «Caractérisation expérimentale en combustion d'un brouillard LOx-GH2 issu d'un injecteur coaxial.», Rapport de Recherche, ONERA. RT98/6128 DEFA/Y/DMTE.
- GICQUEL, P. et B. TANGUY. 1999, «Faisabilité de mesures de vitesses en phase gazeuse dans le foyer MASCOTTE.», Rapport de Recherche, ONERA. RT120/6128 DEFA/Y/DMTE.

- GIRIMAJI, S. 1991, «Assumed β -pdf model for turbulent mixing : validation and extension to multiple scalar mixing», Combustion Science and Technology, vol. 78, p. 177–196.
- GODSAVE, G. 1953, «Studies of the combustion of drops in a fuel spray?the burning of single drops of fuel», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 4, Elsevier, p. 818-830.
- GOLDSMITH, M. et S. PENNER. 1954, «On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere», *Journal of Jet Propulsion*, vol. 24, nº 4, p. 245–251.
- GOMET, L., V. ROBIN et A. MURA. 2012, «Influence of residence and scalar mixing time scales in non-premixed combustion in supersonic turbulent flows», *Combustion Science* and Technology, vol. 184, n° 10-11, p. 1471–1501.
- GOMET, L., V. ROBIN et A. MURA. 2013, «A multiple-inlet mixture fraction framework for non-premixed and partially premixed combustion», *Soumis*.
- GOMET, L., V. ROBIN et A. MURA. 2014, «Lagrangian modelling of turbulent spray combustion under liquid rocket engine conditions», Acta Astronautica, vol. 94, p. 184– 197.
- HABIBALLAH, M., M. ORAIN, F. GRISCH, L. VINGERT et P. GICQUEL. 2006, «Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the mascotte facility», *Combustion Science and Technology*, vol. 178, nº 1-3, p. 101–128.
- HASSE, C. et N. PETERS. 2005, «A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a di diesel engine», *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, n° 2, p. 2755–2762.
- HAWTHORNE, W., D. WEDDELL et H. HOTTEL. 1949, «Mixing and combustion in turbulent gas jets», dans Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena, vol. 3, Elsevier, p. 266–288.
- HERRMANN, M. 2006, «Two phase flow», CTR summer program tutorial, Stanford University.
- HOPFINGER, E. et J. LASHERAS. 1996, «Explosive breakup of a liquid jet by a swirling coaxial gas jet», *Physics of Fluids*, vol. 8, p. 1696.
- HSU, A., Y.-L. TSAI et M. RAJU. 1994, «Probability density function approach for compressible turbulent reacting flows», *AIAA Journal*, vol. 32, n° 7, p. 1407–1415.

- IHME, M. et Y. C. SEE. 2011, «LES flamelet modeling of a three-stream mild combustor : Analysis of flame sensitivity to scalar inflow conditions», *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, n° 1, p. 1309–1317.
- IZARD, J. et A. MURA. 2008, «A lagrangian model for non-premixed combustion in supersonic turbulent flows», dans Proceedings of the eighteenth International Shock Interaction Symposium.
- IZARD, J. et A. MURA. 2009, «Stabilization of non-premixed flames in supersonic reactive flows», *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 337, p. 362–372.
- IZARD, J.-F. 2009, Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers.
- IZARD, J.-F., G. LEHNASCH et A. MURA. 2009, «A lagrangian model of combustion in high-speed flows : Application to scramjet conditions», *Combustion Science and Technology*, vol. 181, nº 11, p. 1372–1396.
- IZARD, J.-F. et A. MURA. 2011, «Lagrangian modeling of turbulent spray combustion : application to rocket engines cryogenic conditions», dans *Progress in Propulsion Phy*sics, vol. 2, EDP Sciences, p. 207–224.
- JACHIMOWSKI, C. J. 1988, «Analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion», Rapport de Recherche, National Aeronautics and Space Administration, Hampton, VA (USA). Langley Research Center.
- JANICKA, J. et W. KOLLMAN. 1978, «A two-variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent h_2 -air diffusion flames», dans Proceedings of the Seventeenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 421–430.
- JARRETT JR, O., A. D. CUTLER, R. R. ANTCLIFF, T. CHITSOMBOON, C. L. DAN-CEY et J. A. WANG. 1988, «Measurements of temperature, density, and velocity in supersonic reacting flow for CFD code validation», .
- JAY, S., F. LACAS et S. CANDEL. 2006, «Combined surface density concepts for dense spray combustion», *Combustion and Flame*, vol. 144, n° 3, p. 558–577.
- JENNY, P., D. ROEKAERTS et N. BEISHUIZEN. 2012, «Modeling of turbulent dilute spray combustion», *Progress in Energy and Combustion Science*.

- JONES, W. et P. MUSONGE. 1988, «Closure of the reynolds stress and scalar flux equations», *Physics of Fluids*, vol. 31, p. 3589.
- KATAOKA, I. 1986, «Local instant formulation of two-phase flow», International Journal of Multiphase Flow, vol. 12, nº 5, p. 745–758.
- KOLMOGOROV, A. N. 1941, «Dissipation of energy in locally isotropic turbulence», dans Dokl. Akad. Nauk SSSR, vol. 32, p. 16–18.
- KUZNETSOV, V. 1982, «The effect of turbulence on the formation of large superequilibrium concentrations of atoms and free radicals in diffusion flames», Akademiia Nauk SSSR, Izvestiia, Mekhanika Zhidkosti i Gaza, p. 3–9.
- LAUNDER, B. 1976, «Heat and mass transport», dans *Turbulence*, *Topics in Applied Physics*, vol. 12, édité par P. Bradshaw, Springer Verlag, p. 231–287.
- LAW, C. 1976, «Unsteady droplet combustion with droplet heating», *Combustion and Flame*, vol. 26, p. 17–22.
- LAW, C. 1982, «Recent advances in droplet vaporization and combustion», Progress in Energy and Combustion Science, vol. 8, nº 3, p. 171–201.
- LAW, C. et W. SIRIGNANO. 1977, «Unsteady droplet combustion with droplet heating II : Conduction limit», *Combustion and Flame*, vol. 28, p. 175–186.
- LEBORGNE, H. 1999, Modélisation de l'évaporation à haute pression de gouttes multicomposants dans le code KIVA II, Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- LOCKWOOD, F. et A. NAGUIB. 1975, «The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent diffusion flames», *Combustion and Flame*, vol. 24, p. 109–124.
- LOCKWOOD, F. et A. SALOOJA. 1981, «A note on the mixing of three stream diffusion flames», *Combustion and Flame*, vol. 41, p. 217–219.
- LOYAU, H. 1996, Etude numérique et modélisation algébrique des phénomènes d'anisotropie en turbulence statistique, Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- LUMLEY, J. 1970, «Toward a turbulent constitutive relation», *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 41, p. 413–434.
- LUNDGREN, T. 1967, «Distribution functions in the statistical theory of turbulence», *Physics of Fluids*, vol. 10, p. 969–975.

- LUO, K. et K. BRAY. 1998, «Combustion-induced pressure effects in supersonic diffusion flames», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 27, Elsevier, p. 2165– 2171.
- LUTZ, A. E., R. J. KEE et J. A. MILLER. 1988, «Senkin : A fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis», *Sandia National Laboratories Report SAND87-8248*.
- MANTEL, T. 1993, Contribution à la modélisation de la combustion dans les moteurs à allumage commandé avec prise en compte de la phase d'allumage, Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- MANTEL, T. et R. BORGHI. 1994, «A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation», *Combustion and Flame*, vol. 96, n° 4, p. 443– 457.
- MARTIN, R. et D. CHARGY. 2001, Projet N3S-NATUR, Manuel Théorique, SIMULOG, Cannes La Bocca.
- MASTORAKOS, E. 2009, «Ignition of turbulent non-premixed flames», Progress in Energy and Combustion Science, vol. 35, n° 1, p. 57–97.
- MASTORAKOS, E., T. BARITAUD et T. POINSOT. 1997, «Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows», *Combustion and Flame*, vol. 109, n° 1, p. 198–223.
- MEIER, W., S. PRUCKER, M.-H. CAO et W. STRICKER. 1996, «Characterization of turbulent hytvair jet diffusion flames by single-pulse spontaneous raman scattering», *Combustion Science and Technology*, vol. 118, nº 4-6, p. 293-312.
- MERCI, B., E. MASTORAKOS et A. MURA. 2010, Modeling of turbulent combustion, Wiley Online Library.
- MEYERS, N. 2006, Modélisation de la combustion cryotechnique avec prise en compte de l'atomisation primaire du jet d'oxygène liquide, Thèse de doctorat, Université Aix-Marseille II, France.
- MÖBUS, H., P. GERLINGER et D. BRÜGGEMANN. 2003, «Scalar and joint scalar-velocityfrequency monte carlo pdf simulation of supersonic combustion», *Combustion and Flame*, vol. 132, n° 1, p. 3–24.
- MOISY, F. 2000, Etude expérimentale des fluctuations de vitesse de température et de pression en turbulence développée, Thèse de doctorat, Université Paris VI.

- MOULE, Y. 2013, Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs., Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers.
- MURA, A. et R. BORGHI. 2004, «Introducing a new partial pdf approach for turbulent combustion modelling», *Combustion and Flame*, vol. 136, p. 377–382.
- MURA, A., R. BORGHI et al.. 2003, «Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion», *Combustion and Flame*, vol. 133, p. 193–196.
- MURA, A. et F.-X. DEMOULIN. 2007, «Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames», *Combustion Theory and Modelling*, vol. 11, nº 2, p. 227–257.
- MURA, A., V. ROBIN et M. CHAMPION. 2007, «Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames», *Combustion and Flame*, vol. 149, n° 1, p. 217–224.
- MURA, A., V. ROBIN, M. CHAMPION et T. HASEGAWA. 2009, «Small scale features of velocity and scalar fields in turbulent premixed flames», *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 82, nº 3, p. 339–358.
- NAUD, B. 2003, *PDF modeling of turbulent sprays and flames using a particle stochastic approach*, Thèse de doctorat, Delft.
- NEWMAN, G., B. LAUNDER et J. LUMLEY. 1981, «Modelling the behaviour of homogeneous scalar turbulence», *Journal of Fluids Mechanics*, vol. 111, p. 217–232.
- NICOLE, A., G. ORDONNEAU et M. THERON. 2009, «3D Simulation of LOX/GH2 MAS-COTTE test case at 10 bar», dans *Proceedings of the 3rd European conference for aero-space sciences (EUCASS), Versailles, France, July*, vol. 6.
- NISHIWAKI, N. 1955, «Kinetics of liquid combustion processes : evaporation and ignition lag of fuel droplets», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 5, Elsevier, p. 148–158.
- O'ROURKE, P. J. 1981, Collective drop effects on vaporizing liquid sprays, Thèse de doctorat, Princeton University.
- PAPAMOSCHOU, D. 1995, «Evidence of shocklets in a counterflow supersonic shear layer», Physics of Fluids, vol. 7, nº 2, p. 233–235.
- PETERS, N. 1983, «Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion», *Combustion Science and Technology*, vol. 30, n° 1-6, p. 1–17.

- PETERS, N. 1984, «Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion», *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 10, n° 3, p. 319–339.
- PETERS, N. 2000, Turbulent combustion, Cambridge university press.
- PETERS, N. et R. KEE. 1987, «The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism», *Combustion and Flame*, vol. 68, n^o 1, p. 17–29.
- POPE, S. 1985, «Pdf methods for turbulent reactive flows», Progress in Energy and Combustion Science, , nº 11, p. 119–192.
- POUROUCHOTTAMANE, M., F. DUPOIRIEUX, L. VINGERT, M. HABIBALLAH et V. BURNLEY. 2001, «Numerical analysis of the 10 bar MASCOTTE flow field», dans Proceedings of the second International Workshop on Rocket Combustion Modeling (Atomization, Combustion and Heat Transfer), Lampoldshausen, Germany.
- RANZ, W. et W. MARSHALL. 1952, «Evaporation from drops», Chemical Engineering Progress, vol. 48, nº 3, p. 141–146.
- REN, Z. et S. B. POPE. 2004, «An investigation of the performance of turbulent mixing models», *Combustion and Flame*, vol. 136, nº 1, p. 208–216.
- RENKSIZBULUT, M., R. NAFZIGER et X. LI. 1991, «A mass transfer correlation for droplet evaporation in high-temperature flows», *Chemical Engineering Science*, vol. 46, n^o 9, p. 2351–2358.
- REYNOLDS, O. 1894, «On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion.», *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 56, n° 336-339, p. 40-45.
- REYNOLDS, W. C. 1987, «Fundamentals of turbulence for turbulence modeling and simulation», Rapport de Recherche, Defense Technical Information Center.
- RIBAULT, C. L. 1991, Simulation des écoulements turbulents compressibles par une méthode mixte "éléments finis-volumes finis", Thèse de doctorat, Ecole Centrale Lyon.
- RICHARDSON, L. F. 1926, «Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph», Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, vol. 110, nº 756, p. 709-737.
- ROBIN, V., A. MURA et M. CHAMPION. 2011, «Direct and indirect thermal expansion effects in turbulent premixed flames», *Journal of Fluids Mechanics*, vol. 689, p. 149–182.

- ROBIN, V., A. MURA et M. CHAMPION. 2012, «Algebraic models for turbulent transports in premixed flames», *Combustion Science and Technology*, vol. 184, nº 10-11, p. 1718– 1742.
- RODDIER, F. 1988, Distributions et transformation de Fourier, McGraw-Hill, Paris.
- ROSSMANN, T., M. G. MUNGAL et R. K. HANSON. 2002, «Evolution and growth of large-scale structures in high compressibility mixing layers», *Journal of Turbulence*, vol. 3, n^o 9.
- SANDBERG, M. 1981, «What is ventilation efficiency?», *Building and Environment*, vol. 16, n^o 2, p. 123–135.
- SANDBERG, M. et M. SJÖBERG. 1983, «The use of moments for assessing air quality in ventilated rooms», *Building and Environment*, vol. 18, n° 4, p. 181–197.
- SAZHIN, S. S. 2006, «Advanced models of fuel droplet heating and evaporation», Progress in Energy and Combustion Science, vol. 32, nº 2, p. 162–214.
- SCHIESTEL, R. 2006, Méthodes de modélisation et de simulation des écoulements turbulents, lavoisier éd., Hermes science.
- SCHWARTZ, L. 1965, Méthodes mathématiques pour les sciences physiques, Hermann.
- SERRA, S., V. ROBIN, A. MURA et M. CHAMPION. 2013, «Effects of density variations in turbulent diffusion flames», dans Proceedings of the twenty fourth International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems.
- SHIH, T., W. LIOU, A. SHABBIR, Z. YANG et J. ZHU. 1995a, «A new k-ε eddy-viscosity model for high reynolds number turbulent flows. model development and validation», *Computers and Fluids*, vol. 24, nº 3, p. 227–238.
- SHIH, T.-H., J. ZHU et J. LUMLEY. 1995b, «A new reynolds stress algebraic equation model», Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 125, p. 1287– 302.
- SHYY, W. et V. KRISHNAMURTY. 1997, «Compressibility effects in modeling complex turbulent flows», *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 33, nº 9, p. 587–645.
- SIRIGNANO, W. et C. LAW. 1978, «Transient heating and liquid-phase mass diffusion in fuel droplet vaporization», Advances in Chemistry Series, vol. 166, p. 3–26.
- SNYDER, R., G. HERDING, J. C. ROLON et S. CANDEL. 1997, «Analysis of flame patterns in cryogenic propellant combustion», *Combustion Science and Technology*, vol. 124, nº 1-6, p. 331–370.

- SPALDING, D. B. 1953, «The combustion of liquid fuels», dans Symposium (International) on Combustion, vol. 4, Elsevier, p. 847–864.
- STANKOVIĆ, I., A. TRIANTAFYLLIDIS, E. MASTORAKOS, C. LACOR et B. MERCI. 2011, «Simulation of hydrogen auto-ignition in a turbulent co-flow of heated air with les and cmc approach», *Flow*, *Tturbulence and Combustion*, vol. 86, n° 3-4, p. 689–710.
- TENNEKES, H. et J. L. LUMLEY. 1972, A first course in turbulence, MIT press.
- VANDROMME, D. 1983, Contribution à la modélisation de la prédiction d'écoulements turbulents à masse volumique variable, Thèse de doctorat, Université de Lille.
- VANDROMME, D. 1997, «Turbulence modelling for compressible flows and acoustics», dans Lecture series-Von Kàrmàn Institute for fluid dynamics, vol. 3, Von Kàrmàn Institute, p. 1–66.
- VICQUELIN, R. 2010, Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente, Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris.
- VILLERMAUX, J. et J. DEVILLON. 1972, «Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d?interaction phénoménologique», dans Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering, p. 1–13.
- WILLIAMS, F. 1958, «Spray combustion and atomization», *Physics of Fluids*, vol. 1, p. 541.
- WILLIAMS, F. 1985, «Combustion theory : the fundamental theory of chemically reacting flow systems.», *Combustion*.
- WISE, H., J. LORELL et B. J. WOOD. 1955, «The effects of chemical and physical parameters on the burning rate of a liquid droplet», dans *Symposium (International)* on *Combustion*, vol. 5, Elsevier, p. 132–141.
- YAO, G., S. ABDEL-KHALIK et S. GHIAASIAAN. 2003, «An investigation of simple evaporation models used in spray simulations», *Journal of Heat Transfer*, vol. 125, nº 1, p. 179–182.
- ZEMAN, O. 1990, «Dilatation dissipation : The concept and application in modeling compressible mixing layers», *Physics of Fluids A* : *Fluid Dynamics*, vol. 2, p. 178.
- ZEMAN, O. et J. L. LUMLEY. 1976, «Modeling buoyancy driven mixed layers.», Journal of Atmospheric Sciences, vol. 33, p. 1974–1988.

ZHENG, L. et K. BRAY. 1994, «The application of new combustion and turbulence models to h2-air nonpremixed supersonic combustion», *Combustion and Flame*, vol. 99, n° 2, p. 440-448.

ZURBACH, S. 2004, «Les moteurs fusées (partie II)», Neuvième École de Combustion.

Annexes

Annexe A

Détails des expressions du modèle à chimie brusque

La comparaison entre le temps chimique tabulé et le temps caractéristique des fluctuations de la fraction de mélange permet de délimiter le domaine d'inflammation comme montré sur la figure A.1.



FIGURE A.1: Comparaison entre le temps chimique et le temps de mélange : délimitation du domaine d'inflammation $[\xi_{J_{-}}; \xi_{J_{+}}]$ en fonction de la fraction de mélange (Haut). Représentation de la trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions (ξ, Y) en faisant l'hypothèse d'une chimie brusque (bas).

A.1 Support de la trajectoire chimie brusque

La trajectoire de chimie brusque repose sur les droites de mélange et les droites d'équilibre chimique. Le modèle de micro-mélange étant le modèle IEM, la trajectoire de mélange correspond aux branches **AM** et **BM** de la figure A.1. La trajectoire d'équilibre, Y = 0 sur la branche correspondant aux mélanges riches et $Y = Y^{MAX(\xi-\xi_{st})/(1-\xi_{st})}$ sur la branche correspondant aux mélanges pauvres, est, quant à elle, représentée par les segments **AC** et **BC** sur cette même figure.

A.2 Trajectoire chimie brusque

La trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions est approximée par la ligne brisée épaisse sur la figure A.1. Sur cette trajectoire, les particules ont tout d'abord besoin d'un temps fini pour pouvoir s'allumer, pendant ce temps elles suivent la trajectoire de mélange IEM (segments **AD** et **BF**). Puis une fois que l'allumage a eu lieu, elles atteignent instantanément la trajectoire d'équilibre chimique (segments **DE** et **FG**).

En notant $\xi_{J_{-}}$ (respectivement $\xi_{J_{+}}$) la valeur de ξ correspondant à l'inflammation des particules provenant du courant d'oxydant pur, ie le point **A** (respectivement du courant de combustible pur, point **B**), la trajectoire chimie brusque est définie par :

$$Y^{\text{MIL}}(\xi) = \begin{cases} Y^{\text{IEM}}(\xi) & \text{si } \xi < \xi_{\text{J}}. \\ Y^{\text{EQU}}(\xi) & \text{si } \xi \in [\xi_{\text{J}}, \xi_{\text{J}}] \\ Y^{\text{IEM}}(\xi) & \text{si } \xi > \xi_{\text{J}}. \end{cases}$$
(A.1)

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

$$Y^{\text{IEM}}\left(\xi\right) = \begin{cases} Y^{\text{MAX}} - \frac{\left(Y^{\text{MAX}} - \widetilde{Y}\right)\xi}{\widetilde{\xi}} & \text{si } \xi < \widetilde{\xi} \\ \widetilde{Y}\frac{(1-\xi)}{(1-\widetilde{\xi})} & \text{sinon} \end{cases}$$
(A.2)

La droite d'équilibre chimique est tracée en faisant l'hypothèse de chimie infiniment rapide à une étape ou limite de Burke-Schumann (BURKE et SCHUMANN, 1928)

$$Y^{\text{EQU}}\left(\xi\right) = \begin{cases} Y^{\text{MAX}}\left(1 - \frac{\xi}{\xi_{st}}\right) & \text{si}\,\xi < \xi_{st} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(A.3)

A.3 Taux de production moyens

L'expression du taux de production chimique dépend de la portion de la trajectoire considérée : le mélange sur les segments **AD** et **BF**, saut **DE** et **FG**, et équilibre chimique sur les segments **EC** et **GC**.

- Mélange : sur les segments AD et BF, la particule fluide ne réagit pas, le taux de réaction donné par les équations (3.15) et (A.2) est donc nul.
- Saut : la contribution des sauts DE et FG au taux de production doit aussi être pris en compte. L'équation (3.15) permet d'écrire :

$$\omega_Y^{J.}(\xi) = \frac{\left(\tilde{\xi} - \xi_{J.}\right)}{\tau_{\xi}} \left[\frac{\delta Y_{J.}}{\delta \xi_{J.}} - \frac{\left(\tilde{Y} - Y_{J.}\right)}{\left(\tilde{\xi} - \xi_{J.}\right)} \right]$$
(A.4)

$$\omega_Y^{J+}(\xi) = \frac{\left(\widetilde{\xi} - \xi_{J+}\right)}{\tau_{\xi}} \left[\frac{\delta Y_{J+}}{\delta \xi_{J+}} - \frac{\left(\widetilde{Y} - Y_{J+}\right)}{\left(\widetilde{\xi} - \xi_{J+}\right)}\right]$$
(A.5)

Équilibre : En utilisant l'hypothèse d'une étape unique, il peut être montré que :

— sur le segment **EC**, l'équation (A.3) implique que $\frac{dY}{d\xi} = -\frac{Y^{\text{MAX}}}{\xi_{st}}$,

$$\omega_Y^{\text{EQU}}\left(\xi\right) = -\frac{\widetilde{Y}\xi_{st} - Y^{\text{MAX}}\left(\xi_{st} - \widetilde{\xi}\right)}{\tau_{\xi}\xi_{st}} \tag{A.6}$$

— sur le segment **GC**, comme Y = 0 et $\frac{dY}{d\xi} = 0$,

$$\omega_Y^{\text{EQU}}(\xi) = -\frac{\widetilde{Y}}{\tau_{\xi}} \tag{A.7}$$

Le taux de réaction est la somme de ces trois contributions :

$$\omega_Y(\xi) = \underbrace{\omega_Y^{\text{IEM}}(\xi)}_{m\acute{e}lange} + \underbrace{\omega_Y^{\text{J-}}(\xi) + \omega_Y^{\text{J+}}(\xi)}_{sauts J-et J+} + \underbrace{\omega_Y^{\text{EQU}}(\xi)}_{\acute{e}quilibre}$$
(A.8)

Enfin, le taux moyen de production est donné par l'intégrale suivante :

$$\widetilde{\omega} = \frac{\overline{\rho\omega_Y}}{\overline{\rho}} = \int_0^1 \omega_Y(\xi) \,\widetilde{P}(\xi) \,d\xi$$
$$= \widetilde{\omega}_Y^{\text{MIX}} + \widetilde{\omega}_Y^{\text{J}+} + \widetilde{\omega}_Y^{\text{J}-} + \widetilde{\omega}_Y^{\text{EQU}}$$
(A.9)

A.4 Conservativité du modèle

L'hypothèse de chimie brusque a été précédemment introduite par l'intermédiaire d'une relation entre la variable d'avancement et la variable de mélange, $Y^{\text{MIL}}(\xi)$, voir chapitre 3. C'est cette relation qui permet d'évaluer la valeur du taux de production chimique. Ce faisant, elle induit aussi une valeur particulière de la variable d'avancement moyenne :

$$\widetilde{Y}^{\text{MIL}} = \int_0^1 Y^{\text{MIL}}(\xi) \widetilde{P}(\xi) d\xi \qquad (A.10)$$

Cette valeur particulière de la variable d'avancement doit être cohérente avec la valeur de la variable d'avancement transportée \tilde{Y} , *i.e.* $\tilde{Y}^{\text{MIL}} = \tilde{Y}$. Cependant, le fait de considérer localement la flamme comme un PaSR implique d'oublier l'historique de chaque particule fluide dans l'espace physique. En effet, dans l'approche PaSR chimie brusque, le mélange ne se fait qu'avec les particules présentes dans le réacteur et avec un temps caractéristique des fluctuations du champ scalaire qui n'est représentatif que de la turbulence locale. Cependant, les particules fluides ont aussi un vécu dans l'espace physique qui doit être pris en compte mais qui est complètement négligé ici. Il peut alors arriver que les particules soient un peu plus ou un peu moins brûlées que ce qui est considéré avec l'approche locale de la chimie brusque. Afin que l'approche lagrangienne dans l'espace des compositions soit cohérente avec l'évolution eulérienne dans l'espace physique, un facteur de pondération, P^{MIL} , est introduit.

— Si $\widetilde{Y}^{\text{MIL}} > \widetilde{Y}$, l'approximation de la trajectoire dans l'espace des compositions sousévalue le nombre de particule fluide ayant brûlé. Une proportion P^{MIL} de particules est alors rajoutée sur la droite d'équilibre. Cette proportion est évaluée comme suit.

$$P^{\rm MIL} = \frac{\widetilde{Y} - \widetilde{Y}^{\rm EQU}}{\widetilde{Y}^{\rm MIL} - \widetilde{Y}^{\rm EQU}} \tag{A.11}$$

avec $\widetilde{Y}^{\text{EQU}}$, la valeur moyenne de la variable d'avancement sur la trajectoire d'équilibre dans l'espace des compositions. La redistribution des particules se fait en conservant la PDF de la fraction de mélange de telle sorte que :

$$Y(\xi) = P^{\text{MIL}} Y^{\text{EQU}}(\xi) + (1 - P^{\text{MIL}}) Y^{\text{MIL}}(\xi)$$
(A.12)

Et finalement l'expression du taux de production est donnée par :

$$\widetilde{\omega}_Y = P^{\text{MIL}} \widetilde{\omega}_Y^{\text{EQU}} + (1 - P^{\text{MIL}}) \widetilde{\omega}_Y^{\text{MIL}} \tag{A.13}$$

avec $\widetilde{\omega}_Y^{\text{EQU}}$ le taux de production moyen sur la trajectoire d'équilibre chimique, exprimé selon l'équation (3.15) spécifiée sur la trajectoire d'équilibre. — Si $\widetilde{Y}^{\text{MIL}} < \widetilde{Y}$, l'approximation de la trajectoire dans l'espace des compositions sur-évalue le nombre de particules fluides ayant brûlé. Une proportion P^{MIL} de particules est alors rajoutée sur la droite de mélange pur. Cette proportion est évaluée comme suit.

$$P^{\rm MIL} = \frac{\widetilde{Y} - \widetilde{Y}^{\rm MIX}}{\widetilde{Y}^{\rm MIL} - \widetilde{Y}^{\rm MIX}} \tag{A.14}$$

avec $\widetilde{Y}^{\text{MIX}}$, la valeur moyenne de la variable d'avancement sur la trajectoire de mélange pur dans l'espace des compostions. La redistribution des particules se fait en conservant la PDF de la fraction de mélange de telle sorte que :

$$Y(\xi) = P^{\text{MIL}} Y^{\text{MIX}}(\xi) + (1 - P^{\text{MIL}}) Y^{\text{MIL}}(\xi)$$
(A.15)

Et finalement l'expression du taux de production est donnée par :

$$\widetilde{\omega}_Y = (1 - P^{\text{MIL}}) \widetilde{\omega}_Y^{\text{MIL}} \tag{A.16}$$

puisque le taux de production est nul sur la droite de mélange pur, les particules ne faisant que se mélanger.

L'introduction de ce facteur de pondération permet alors de garantir que la valeur moyenne induite par la trajectoire lagrangienne dans l'espace des compositions est cohérente avec la valeur moyenne transportée dans l'espace physique.

Annexe B

Détails de la dérivation de l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange en milieu diphasique

Conservation la variance de la fraction de mélange en présence de gouttelettes.

Equations de transport de ξ

Forme conservative

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k \xi}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) + \rho \omega_{\xi}^{vap} \tag{B.1}$$

Forme non conservative

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k \xi}{\partial x_k} = \xi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \xi \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} + \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial \xi}{\partial x_k} = \xi \rho \omega^{vap} + \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial \xi}{\partial x_k}$$
(B.2)

d'où

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial \xi}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) + \rho \omega_{\xi}^{vap} - \rho \xi \omega^{vap}$$
(B.3)

Equation de transport de $\widetilde{\xi^2}$

Equation de transport de ξ^2

La somme $Eq(B.1)x\xi + Eq(B.3)x\xi$ conduit à :

$$\frac{\partial\rho\xi^2}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_k\xi^2}{\partial x_k} = 2\xi \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial\xi}{\partial x_k}\right) + 2\rho\xi \omega_{\xi}^{vap} - \rho\xi^2 \omega^{vap} \tag{B.4}$$

Le second membre se réécrit :

$$2\xi \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D 2\xi \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \xi}{\partial x_k}$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_k} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \xi}{\partial x_k}$$

Moyennage de l'EDT de ξ^2

$$\frac{\overline{\partial\rho\xi^2}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial\rho u_k\xi^2}}{\partial x_k} = \overline{\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial\xi^2}{\partial x_k}\right)} - \overline{2\rho D \frac{\partial\xi}{\partial x_k} \frac{\partial\xi}{\partial x_k}} + \overline{2\rho\xi\omega_{\xi}^{vap}} - \overline{\rho\xi^2\omega^{vap}} \quad (B.5)$$

$$\frac{\overline{\partial\rho\xi^2}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial\rho}\widetilde{u_k}\widetilde{\xi^2}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial\xi^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k^{"}\xi^2}\right) - 2\overline{\rho D \frac{\partial\xi}{\partial x_k} \frac{\partial\xi}{\partial x_k}} + 2\overline{\rho\xi\omega_{\xi}^{vap}} - \overline{\rho\xi^2\omega^{vap}} \quad (B.5)$$

Equation de transport de $\widetilde{\xi}^{\,2}$

On moyenne l'équation de transport (B.1).

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{\rho}\widetilde{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_k}\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k^{"}\xi^{"}}\right) + \overline{\rho}\widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} \tag{B.6}$$

On multiplie (B.6) par $2.\tilde{\xi}$:

$$2.\widetilde{\xi}\frac{\partial}{\partial t}\overline{\rho}\widetilde{\xi} + 2.\widetilde{\xi}\frac{\partial}{\partial x_k}\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi} = 2.\widetilde{\xi}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k^{"}\xi^{"}}\right) + 2.\widetilde{\xi}\overline{\rho}\widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} \tag{B.7}$$

Un calcul annexe nous fournit :

$$2.\widetilde{\xi}\frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{\xi}}{\partial t} + 2.\widetilde{\xi}.\frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u_{k}}\widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} = \frac{\partial\overline{\rho}\,\widetilde{\xi}^{2}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u_{k}}\,\widetilde{\xi}^{2}}{\partial x_{k}} - \widetilde{\xi}^{2}\left(\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u_{k}}}{\partial x_{k}}\right)$$
$$= \frac{\partial\overline{\rho}\,\widetilde{\xi}^{2}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u_{k}}\,\widetilde{\xi}^{2}}{\partial x_{k}} - \widetilde{\xi}^{2}\,\overline{\rho}\widetilde{\omega}^{vap}$$

Donc, l'équation (B.7) devient :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \,\widetilde{\xi}^{\,2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_{k} \,\widetilde{\xi}^{\,2}}{\partial x_{k}} = 2.\widetilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_{k}} - \overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"}} \right) + 2.\widetilde{\xi} \overline{\rho} \widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} - \widetilde{\xi}^{\,2} \,\overline{\rho} \widetilde{\omega}^{vap} \tag{B.8}$$

Equation de transport de $\widetilde{\xi}^{\prime\prime 2}$

On fait la différence (B.6)-(B.8) pour retrouver l'équation de la variance de la fraction de mélange.

$$\frac{\partial \overline{\rho} \left(\tilde{\xi}^{2} - \tilde{\xi}^{2}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_{k} \left(\tilde{\xi}^{2} - \tilde{\xi}^{2}\right)}{\partial x_{k}} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[\overline{\rho D} \frac{\partial \xi^{2}}{\partial x_{k}} - \overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{2}} \right] - 2 \overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_{k}} \frac{\partial \xi}{\partial x_{k}} - 2 \cdot \widetilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[\overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_{k}} - \overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"}} \right] + 2 \overline{\rho \xi \omega_{\xi}^{vap}} - \overline{\rho \xi^{2} \omega^{vap}} - 2 \widetilde{\xi} \overline{\rho} \widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} + \widetilde{\xi}^{2} \overline{\rho \omega^{vap}} (B.9)$$

On fait apparaître les termes de diffusion turbulente et de production par les gradients moyens :

$$2.\widetilde{\xi}\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{2}}\right) = 2\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}}\widetilde{\xi}\right) - 2\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} - \frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}\xi^{"}} + 2\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}}\widetilde{\xi}\right)$$
$$= -\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}2}\right) - 2\overline{\rho u_{k}^{"}\xi^{"}}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} \tag{B.10}$$

On fait apparaître les termes de diffusion laminaire et de dissipation :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi^2}{\partial x_k} \right) - 2.\widetilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi^2}{\partial x_k} \right) - 2\overline{\xi} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) + 2\overline{\xi^*} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) = 2.\overline{\rho D} \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \xi}{\partial x_k} + 2.\overline{\xi^*} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right)$$
(B.11)

Le second terme de l'équation précédente s'écrit :

$$2.\overline{\xi^{"}}\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_{k}}\right) = 2.\overline{\xi^{"}}\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{k}}\right) + 2.\overline{\xi^{"}}\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\rho D\frac{\partial\xi^{"}}{\partial x_{k}}\right)$$
$$= 2.\overline{\xi^{"}}\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_{k}}\right) + \overline{\frac{\partial}{\partial x_{k}}\left(\rho D\frac{\partial\xi^{"}}{\partial x_{k}}\right)} - 2.\overline{\rho D\frac{\partial\xi^{"}}{\partial x_{k}}\frac{\partial\xi^{"}}{\partial x_{k}}}$$

Finalement, l'équation de transport pour la variance dans un milieu contenant des gouttelettes liquide en évaporation s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho \xi^{"2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \xi^{"2}} \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho D} \frac{\partial \xi^{"2}}{\partial x_{k}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"2}} \right)
- 2 \overline{\rho u_{k}^{"} \xi^{"}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} - 2 \cdot \overline{\rho D} \frac{\partial \xi^{"}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \xi^{"}}{\partial x_{k}} + 2 \cdot \overline{\xi^{"}} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_{k}} \right)
+ 2 \left(\overline{\rho \xi \omega_{\xi}^{vap}} - \widetilde{\xi} \overline{\rho} \widetilde{\omega}_{\xi}^{vap} \right) - \overline{\rho \xi^{2} \omega^{vap}} + \widetilde{\xi}^{2} \overline{\rho \omega^{vap}} \quad (B.12)$$

Annexe C

Modèles d'évaporation d'une goutte

Comme l'a montré la partie concernant le diphasique, la fermeture de tous les termes sources diphasiques nécessite uniquement la connaissance du taux d'évaporation du sprays de gouttelettes composant la phase dispersée. Cette annexe fournit un récapitulatif des différentes approches existantes afin de modéliser l'évaporation d'une goutte ainsi que les différentes hypothèses qui leurs sont associées et leur validité dans le cas qui nous intéresse. Le modèle d'évaporation jugé comme le plus pertinent a alors été retenu dans les calculs présentés.

La modélisation de l'évaporation d'un spray est un problème complexe mettant en jeu de multiples aspects de la physique. Afin de simplifier la compréhension de ces phénomènes nous allons considérer une goutte isolée et faire l'hypothèse que dans le cas d'un spray, l'effet de la proximité d'une goutte évaporante sur une autre ne modifie que la valeur moyenne du mélange au sein du volume considéré.

C.1 Evaporation d'une goutte isolée

C.1.1 La loi du d_s^2

Les premières théories appliquées à la vaporisation d'une goutte isolée, monocomposée dans un environnement gazeux inerte dates des années 50 (GODSAVE, 1953; SPALDING, 1953; GOLDSMITH et PENNER, 1954; WISE et al., 1955). Ces modèles permettent de décrire l'évolution du diamètre d'une goutte moyennant certaines hypothèses.

H1 La phase gazeuse autour de la goutte est quasi-stationnaire, c'est-à-dire que le phénomène d'évaporation est lent devant les phénomènes régissant la phase gazeuse. Il en résulte que l'écoulement s'adapte instantanément aux conditions limites locales et aux dimensions de la goutte.

- H2 Le problème étudié est à symétrie sphérique. La goutte est immobile dans un milieu gazeux infini. Les effets de convection naturelle et forcée sont donc ignorés, seules la diffusion et la conduction interviennent.
- H3 La goutte est constituée d'un unique composant.
- H4 Le taux de changement de phase entre le liquide et sa vapeur est beaucoup plus élevé que le taux de transport dans la phase gazeuse. Il y a donc équilibre thermodynamique entre les phases à la surface de la goutte.
- H5 La pression est supposée constante dans le gaz autour de la goutte.
- **H6** La température de la goutte est uniforme et constante. La période de chauffage de la goutte est donc négligée.
- H7 Les effets Soret (diffusion massique due au gradient thermique), les effets Dufour (flux de chaleur produit par un gradient massique) et les transferts par rayonnement sont négligés.
- H8 Les propriétés physiques (conductivité thermique, coefficient de diffusion de masse...) sont supposées constantes et le nombre de Lewis est supposé unitaire.

La vaporisation d'une goutte isolée, en équilibre dynamique avec le gaz environnant, est la conséquence de l'établissement de transferts massiques et thermiques entre le gaz et le liquide. Deux approches sont alors envisageables, chacune reposant sur la prédominance d'un des deux types de transfert, même si les deux sont en théorie équivalentes.

C.1.2 Approche énergétique

Lorsque la goutte est froide par rapport au gaz qui l'entoure, un transfert de chaleur du gaz vers la goutte s'établit. La goutte étant à une température constante, l'intégralité du flux de chaleur sert au changement de phase.

Conservation de la masse

$$\frac{d\dot{m}^{vap}}{dr} = 0 \text{ avec } \dot{m}^{vap} = 4\pi\rho_G u r_s^2 \tag{C.1}$$

Le débit de vapeur s'échapant de la goutte est donc constant.

Conservation de l'énergie

La chaleur n'étant transmise du gaz vers le liquide que par conduction, on peut écrire :

$$\frac{d}{dr}\left(4\pi\rho_G ur^2 C_{pG}T\right) = \frac{d}{dr}\left(4\pi r^2 \lambda_G \frac{dT}{dr}\right) \tag{C.2}$$

Conditions limites

On suppose la surface à une température connue T_s et l'atmosphère à la température T_{∞}

hors de la zone d'influence de la goutte. De plus, le flux de chaleur arrivant à la surface de la goutte ne sert qu'à vaporiser. On peut alors écrire :

$$\begin{cases} \text{En } r = r_s : T = T_s \\ \text{En } r = \infty : T = T_\infty \end{cases}$$
(C.3)

$$\left(4\pi r_s^2\right)\lambda_G \left.\frac{dT}{dr}\right|_{r=r_s} = \dot{m}^{vap}L_v \tag{C.4}$$

En intégrant une première fois l'Eq. (C.2), on obtient :

$$\dot{m}^{vap}C_{pG}T = 4\pi r^2 \lambda_G \frac{dT}{dr} + Cste \tag{C.5}$$

De plus, d'après la condition limite Eq. (C.4):

$$\dot{m}^{vap}C_{pG}T - \dot{m}^{vap}C_{pG}T_s + \dot{m}^{vap}L_v = 4\pi r^2 \lambda_G \frac{dT}{dr}$$
$$\dot{m}^{vap}C_{pG}(T-A) = 4\pi r^2 \lambda_G \frac{dT}{dr}$$
$$\dot{m}^{vap}\frac{dr}{r^2} = 4\pi \frac{\lambda_G}{C_{pG}}\frac{dT}{(T-A)}$$
(C.6)

l'intégration de cette dernière équation avec la condition limite Eq. (C.3), permet d'exprimer le débit de vapeur :

$$-\frac{\dot{m}^{vap}}{r_s} = 4\pi \frac{\lambda_G}{C_{pG}} ln \left(\frac{T_s - A}{T_\infty - A}\right)$$
$$\dot{m}^{vap} = 4\pi r_s \frac{\lambda_G}{C_{pG}} ln \left(1 + B_T\right)$$
(C.7)

avec le nombre de Spalding thermique :

$$B_T = \frac{C_{pG} \left(T_{\infty} - T_s \right)}{L_v} \tag{C.8}$$

C.1.3 Approche "écoulement de Stefan"

La vaporisation de la goutte peut aussi être induite par le gradient de concentration de l'espèce qui s'évapore, et cela, sans qu'il n'y ait besoin d'un chauffage particulier. Il faut cependant noter que, même si une vaporisation peut se produire si le gaz et la goutte sont à l'équilibre thermique, le changement de phase du liquide constituant la goutte nécessite une absorption d'énergie qui entraine une diminution de la température de la goutte, ceci faisant tendre plus rapidement le mélange goutte/gaz vers l'équilibre thermodynamique.

Dans notre hypothèse de goutte à température constante, l'énergie est puisée dans la phase gazeuse, la température de cette dernière diminue donc, ce qui fait aussi tendre plus rapidement le mélange vers l'équilibre thermodynamique. Ce prélèvement d'énergie dans le gaz semble cependant moins réaliste.

Conservation de la masse

$$\frac{d\dot{m}^{vap}}{dr} = 0 \text{ avec } \dot{m}^{vap} = 4\pi\rho_G u r_s^2 \tag{C.9}$$

Le débit de vapeur s'échapant de la goutte est donc toujours constant.

Conservation de l'espèce vaporisée

$$\frac{d}{dr}\left(4\pi\rho_G u r^2 Y_f\right) = \frac{d}{dr}\left(4\pi r^2 D \frac{dY_f}{dr}\right) \tag{C.10}$$

Conditions limites

On suppose la surface à une fraction massique connue Y_{fs} et l'atmosphère à la composition $Y_{f\infty}$ hors de la zone d'influence de la goutte. De plus, le flux global de vapeur qui s'échappe de la surface dans le gaz n'est rien d'autre que le débit de liquide qui "s'échappe" de la goutte. On peut alors écrire :

$$\begin{cases} \text{En } r = r_s : Y_f = Y_{fs} \\ \text{En } r = \infty : Y_f = Y_{f\infty} \end{cases}$$
(C.11)

$$\dot{m}^{vap}Y_{fs} - \left(4\pi r_s^2\right) D \left.\frac{dY_f}{dr}\right|_{r=r_s} = \dot{m}^{vap} \tag{C.12}$$

En intégrant deux fois l'Eq. (C.10) et en appliquant les conditions limites Eqs. (C.11)-(C.12), on obtient finalement :

$$\dot{m}^{vap} = 4\pi r_s \rho_G D \ln \left(1 + B_M\right) \tag{C.13}$$

avec le nombre de Spalding de masse :

$$B_M = \frac{Y_{fs} - Y_{f\infty}}{1 - Y_{fs}}$$
(C.14)

C.1.4 Retour à la loi du d_s^2

Les deux approches précédentes doivent donner le même résultat pour un même problème. On peut donc identifier les équations (C.7) et (C.13), ce qui nous permet d'obtenir une relation entre B_M et B_T :

$$(1+B_M)^{\phi} = (1+B_T) \tag{C.15}$$

avec le coefficient ϕ donné par :

$$\phi = \frac{\rho_G C_{pG} D}{\lambda_G} = \frac{1}{Le} \tag{C.16}$$

Comme, dans notre approche, le nombre de Lewis est supposé unitaire. Il y a égalité entre les deux nombre de transfert de Spalding, $B_M = B_T = B$. Le débit évaporé est alors noté :

$$\dot{m}^{vap} = 4\pi r_s \rho_G D \ln \left(1 + B\right) \tag{C.17}$$

Enfin, en remarquant que la masse de la goutte s'écrit :

$$m = \frac{4}{3}\pi\rho_{fL}r_s^3 \tag{C.18}$$

et donc que :

$$\dot{m} = 4\pi\rho_{fL}r_s^2 \frac{dr_s}{dt} = 2\pi\rho_{fL}r_s \frac{dr_s^2}{dt}$$
(C.19)

On obtient la loi de régression du diamètre de la goutte :

$$\dot{m} = -\dot{m}^{vap}$$

$$2\pi\rho_{fL}r_s \frac{dr^2}{dt} = -4\pi r_s \rho_G D \ln (1+B)$$

$$\frac{dr_s^2}{dt} = -2\frac{\rho_G}{\rho_{fL}} D \ln (1+B)$$

$$\frac{d}{dt} d_s^2 = -8\frac{\rho_G}{\rho_{fL}} D \ln (1+B)$$
(C.20)

Que l'on peut ré-écrire sous la forme :

$$d_s^2 = d_{s0}^2 - K (C.21)$$

avec d_{s0} le diamètre initial de la goutte et :

$$K = 8 \frac{\rho_G}{\rho_{fL}} D \ln \left(1 + B\right) \tag{C.22}$$

C'est le couple de relation (C.21)-(C.22) qui constituent la loi, dite du d^2 , traduisant l'évolution temporelle du diamètre au carré d'une goutte liquide initialement sphérique placée dans un environnement gazeux au repos.

Dans la deuxième partie des années 50, de nombreuses études expérimentales ont été menées afin d'éprouver la validité de cette loi du d^2 . Il a ainsi été montré que la décroissance linéaire du carré du diamètre d'une goutte n'est pas trop loin de la réalité (BORGHI et CHAMPION, 2000). A titre d'illustration, on peut citer l'expérience de Nishiwaki (NI-SHIWAKI, 1955) dont un résultat est présenté sur la figure C.1.



FIGURE C.1: Evaporation de gouttelettes d'eau de différentes tailles dans un foyer (NI-SHIWAKI, 1955).

La portion initiale, qui ne suit pas la loi du d^2 , illustre le taux d'évaporation plus faible dû au chauffage de la goutte.

C.2 Prise en compte du chauffage de la goutte.

Dans l'approche précédente, la température de la goutte est supposée constante. Cependant, une phase transitoire instationnaire de chauffage existe au début du processus de vaporisation. Ainsi Faeth (FAETH, 1977) propose de comparer les temps représentatifs des différents phénomènes contribuant à cette période de chauffage afin d'évaluer la pertinence de l'hypothèse de température de goutte constante **H6**.

Echelle de temps	Définition
Transitoire phase liquide	$\frac{d^2\lambda_L}{C_{pL}}$
Temps de vie d'une gouttelette	$\frac{d^2 \lambda_L}{C_{pL}} \; \frac{L_v}{C_{pL}(T_{sat} - T_0)}$
Transitoire phase gazeuse	$\frac{\delta^2 \lambda_G}{C_{pG}}$

TABLE C.1: Echelles de temps caractéristiques lors de l'évaporation d'une gouttelette.

Avec T_{sat} la température de saturation, c'est-à-dire la température de la goutte en régime stationnaire, T_0 la température initiale de la goutte et δ "l'épaisseur de film" qui est l'épaisseur gaz entourant la goutte et directement affectée par l'évaporation de la gouttelette. On remarque que le temps de vie d'une gouttelette est égale au temps caractéristique du transitoire thermique du liquide divisé par le rapport du flux de chaleur apporté à la goutte sur la chaleur latente nécessaire à l'évaporation. Lorsque la pression est faible, la température de saturation est elle aussi faible contrairement à la chaleur latente. Le transitoire thermique du liquide est donc négligeable par rapport au temps de vie de la goutte. Lorsque la pression augmente la température de saturation augmente aussi et la chaleur latente de vaporisation diminue. Le transitoire thermique devient donc de moins en moins négligeable par rapport au temps de vie de la goutte. L'objectif de cette étude étant la modélisation de l'allumage dans les moteurs fusées où la pression de fonctionnement est relativement élevée, il est donc nécessaire de prendre en compte ce transitoire thermique de la goutte.

Il est aussi intéressant de noter que comme le rapport de densité du liquide sur la densité du gaz est relativement élevé, la gouttelette a une forte inertie thermique et massique par rapport à celle du gaz. Le transitoire de la phase gazeuse est donc beaucoup plus court que celui de la phase liquide. Ainsi, même en prenant en compte ce dernier, l'hypothèse d'état quasi-stationnaire de la phase gazeuse est toujours justifiée (SIRIGNANO et LAW, 1978).

Afin de prendre en compte la partie du flux thermique incident (du gaz vers la goutte) qui sert a chauffer la goutte, l'hypothèse H6 est modifiée :

H6 La température de la goutte est uniforme et constante.

Un bilan d'énergie au niveau de la goutte donne :

$$\underbrace{Q}_{\text{flux incident}} = \underbrace{Q_c}_{\text{flux de chauffage}} + \underbrace{\dot{m}^{vap} L_v \left(T_s\right)}_{\text{flux de changement de phase}}$$
(C.23)

Le flux de chaleur Q, cédé par le gaz à la goutte, se réduit, d'après les hypothèses précédentes, à un flux de Fourier :

$$Q = -4\pi \left(\lambda r^2 \frac{dT}{dr}\right)_{r=r_s} \tag{C.24}$$

Ce flux peut alors être réécrit en suivant l'approche énergétique précédemment introduite. La condition limite Eq. (C.4) étant maintenant :

$$\left(4\pi r_s^2\right)\lambda_G \left.\frac{dT}{dr}\right|_{r=r_s} = \dot{m}^{vap}L_v + Q_c \tag{C.25}$$

On en déduit la nouvelle expression du nombre de Spalding thermique :

$$B_T = \frac{C_{pG} \left(T_{\infty} - T_s \right)}{L_v + Q_c / \dot{m}^{vap}} \tag{C.26}$$

Le flux de chaleur incident s'écrit donc :

$$Q = \dot{m}^{vap} L_v + Q_c = \dot{m}^{vap} \frac{C_{pG} \left(T_{\infty} - T_s \right)}{B_T}$$
(C.27)

Comme le débit évaporé est considéré comme ayant la même expression que précédemment et que le flux qui sert à chauffer la goutte s'exprime en fonction de la variation de température de cette goutte :

$$Q_c = \rho_L \frac{4}{3} \pi r_s^3 C_{pL} \frac{dT}{dt} \tag{C.28}$$

Le bilan d'énergie de la goutte s'écrit :

$$Q = Q_{c} + \dot{m}^{vap} L_{v} (T_{s})$$
$$\dot{m}^{vap} (T_{s}) \frac{C_{pG} (T_{\infty} - T_{s})}{B_{T} (T_{s})} = \rho_{L} \frac{4}{3} \pi r_{s}^{3} C_{pL} \frac{dT}{dt} + \dot{m}^{vap} (T_{s}) L_{v} (T_{s})$$
(C.29)

avec :

$$\dot{m}^{vap}\left(T_{s}\right) = 4\pi r_{s}\rho_{G}D\,\ln\left(1+B\left(T_{s}\right)\right) \tag{C.17}$$

La température de la goutte est alors évaluée à chaque pas de temps de manière implicite ou explicite à partir de l'Eq. (C.29) discrétisée.

Le modèle ainsi obtenu est appelé *Rapid Mixing Model* par Law et Sirignano (LAW, 1976, 1982; LAW et SIRIGNANO, 1977). La comparaison, de l'influence sur la variation de la surface de la goutte, entre ce modèle, la loi du d^2 est présentée sur la figure C.2. En

comparant avec la figure C.1, on constate que l'évolution de la surface de la goutte en fonction du temps semble plus physique avec le modèle "Rapid Mixing".



FIGURE C.2: Variation temporelle de la surface de la goutte pour différents modèles d'évolution de la température interne de la goutte d'après Law et Sirignano (SIRIGNANO et LAW, 1978).

A noter que, lorsque la température de la goutte est la température d'ébullition, la température de la goutte devient constante et qu'on retombe bien sur la loi du d^2 (les pentes des courbes d'évolution de la surface sur la figure C.2 sont égales pour le modèle de mélange rapide et la loi du d^2).

C.3 Prise en compte des effets convectifs.

Lorsque la goutte possède une vitesse par rapport à l'air qui l'entoure, la symétrie sphérique de l'écoulement est brisée. Les transferts massiques et thermiques entre la goutte et le gaz sont alors modifiés.

C.3.1 Approche empirique

Une première approche se base sur des expériences qui ont été menées pour la vaporisation de gouttes (ou plus exactement de sphères poreuses) en écoulement stationnaire. Elles ont conduit à trouver que la loi du d^2 est toujours valable, mais avec un coefficient modifié, fonction du nombre de Reynolds associé à la goutte (BORGHI et CHAMPION, 2000) :

$$d_s^2 = d_{s0}^2 - \alpha K \tag{C.30}$$

où α est le facteur permettant de prendre en compte la convection autour de la goutte. Pour rester cohérent avec l'approche théorique, ce facteur dépend de l'approche envisagée. Ainsi, Frössling (FRÖSSLING, 1938) propose une relation cohérente avec l'approche "écoulement de Stefan". Le débit évaporé est alors ré-exprimé sous la forme :

$$\dot{m}^{vap} = 2 \ Sh_0 \ \pi r_s \rho_G D \ ln \ (1+B) \tag{C.31}$$

avec le nombre de Sherwood exprimé tel que :

$$Sh_0 = 2\left(1 + 0.276 \ Re_g^{1/2} \ Sc^{1/3}\right)$$
 (C.32)

L'indice $_0$ signifie que le nombre adimensionnel est exprimé sans prendre en compte le soufflage induit par l'évaporation de la gouttelette. Le coefficient α s'exprime alors :

$$\alpha = \frac{Sh_0}{2} \tag{C.33}$$

De leur côté, Ranz et Marshall (RANZ et MARSHALL, 1952) ont proposé une relation similaire mais pour une "approche énergétique" du problème. Le débit évaporé s'exprime alors :

$$\dot{m}^{vap} = 2 N u_0 \pi r_s \frac{\lambda_G}{C_p G} \ln \left(1 + B\right) \tag{C.34}$$

avec le nombre de Nusselt exprimé tel que :

$$Nu_0 = 2\left(1 + 0.278 \ Re_g^{1/2} \ Pr^{1/3}\right) \tag{C.35}$$

Le coefficient α s'exprime alors :

$$\alpha = \frac{Nu_0}{2} \tag{C.36}$$

Cependant, comme le souligne l'indice $_0$, ces approches ne prennent pas en compte l'effet du soufflage induit par l'évaporation sur cette dernière. C'est pourquoi, en se basant sur un raisonnement physique, les résultats des expériences d'évaporation ont été corrélés sous la forme :

$$Sh E_M = 2 + C_M Re^n Sc^m \tag{C.37}$$

Où E_M représente l'effet du soufflage et dépend, au premier ordre, du nombre de Spalding de masse B_M . Une liste des différentes expériences et des coefficients qui en ont été déduits a été établie dans les références (SAZHIN, 2006; RENKSIZBULUT et al., 1991). A titre d'exemple, on peut citer la corrélation de Nafziger et al. (RENKSIZBULUT et al., 1991) :

$$Sh (1 - B_M)^{0.7} = 2 + 0.87 R e^{1/2} S c^{1/3}$$
 (C.38)

On peut alors relier le nombre adimensionnel prennant en compte le soufflage avec celui sans soufflage :

$$Sh = \frac{\ln\left(1 + B_M\right)}{B_M}Sh_0 \tag{C.39}$$

Le débit évaporé s'écrit alors :

$$\dot{m}^{vap} = 2 Sh \pi r_s \rho_G D B_M \tag{C.40}$$

C.3.2 Approche théorique

La seconde approche est due à Abramzon et Sirignano (ABRAMZON et SIRIGNANO, 1989), elle est basée sur la théorie du film. Cette théorie suppose la présence d'un film de gaz, d'épaisseur finie δ , entourant la goutte, au sein duquel les échanges se font exclusivement par transport moléculaire. Cette épaisseur de film δ peut alors être évaluée grâce au nombre de Nusselt Nu pour l'épaisseur du film thermique δ_T ou au nombre de Sherwood Sh pour l'épaisseur du film de transfert de masse δ_M . Pour des particules non évaporantes, les épaisseurs de films sont alors données par :

$$\delta_{T0} = \frac{2r_s}{Nu_0 - 2} \qquad \delta_{M0} = \frac{2r_s}{Sh_0 - 2} \tag{C.41}$$

Abramzon et Sirignano ont proposé d'introduire un facteur correctif, F_T ou F_M , représentant le changement relatif de l'épaisseur de film dû à l'évaporation de la goutte (écoulement de Stefan).

$$F_T = \frac{\delta_T}{\delta_{T0}} \qquad F_M = \frac{\delta_M}{\delta_{M0}}$$
(C.42)

Ce facteur de correction a alors été évalué à partir de calculs de couche limite sur une paroi évaporante. Il permet alors de définir un nouveau nombre de Nusselt Nu^* , ainsi qu'un nouveau nombre de Sherwood Sh^* , modifiés afin de prendre en compte le soufflage induit par l'évaporation.

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{F_T}$$
 $Sh^* = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{F_M}$ (C.43)

Le débit évaporé est alors évalué en substituant, dans les équations (C.31) et (C.34), les nombres adimensionnels, Nu et Sh, par leur expression tenant compte du soufflage, Nu^* et Sh^* .

Cette approche, bien que prenant en compte le soufflage du film dû à l'évaporation, n'est pas rigoureusement juste puisqu'elle s'appuie sur la formulation du taux d'évaporation exprimée dans le cas d'une goutte stagnante qui est issue de la résolution des Eqs. (C.10) et (C.2) avec les conditions limites Eqs. (C.11)-(C.12) et Eqs. (C.3)-(C.4), respectivement. Pour y pallier, Yao et al. (YAO et al., 2003) ont proposés une expression du taux d'évaporation basée sur l'intégration des Eqs. (C.10) et (C.2) non pas entre le rayon de la goutte et un état infini mais entre le rayon de la goutte et l'épaisseur du film considéré. Ils obtiennent alors l'expression du débit évaporé suivant :

$$\dot{m}^{vap} = 2 \pi r_s \rho_G D \left(\frac{\delta_M + r_s}{\delta_M}\right) ln \left(1 + B\right)$$
(C.44)

Comme cette épaisseur de film massique intervient directement dans l'expression du nombre de Sherwood avec soufflage :

$$Sh = 2 \left(1 + \frac{r_s}{\delta_M}\right) \frac{\ln\left(1 + B_M\right)}{B_M} \tag{C.45}$$

L'utilisation d'une corrélation pour le Sh, telle que celle de l'Eq. C.38, permet d'évaluer cette épaisseur de film et le débit évaporé est alors connu.

Conclusions

Le modèle de Yao et al. (YAO et al., 2003) s'appuyant sur la corrélation de Nafziger (RENKSIZBULUT et al., 1991) et utilisé conjointement avec le modèle "Rapid Mixing" (LAW, 1976) semblent les plus aptes à restituer la physique du transitoire d'allumage d'un moteur fusée. Ils ont donc été implémentés dans le code N3S-Natur et utilisés pour simuler le cas MASCOTTE A-10.

Annexe D

Taux de production chimique pour le cas de la flamme de Dally.
Equations de transport de Y

Sous sa forme non conservative, l'équation de transport de la fraction massique Y s'écrit :

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho u \nabla Y = \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y\right) + \rho \omega_Y \tag{D.1}$$

Or on peut exprimer cette fraction massique uniquement en fonction de $Y(\xi, Y^{\infty})$, c'est le cas d'une cinétique chimique rapide dans la limite des très grand *Da*. Les variations de la fraction massique en fonction du temps et de l'espace peuvent donc être ré-écrite comme suit :

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = \frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}}$$
(D.2)

$$\nabla Y = \nabla \xi \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \nabla Y^{\infty} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}}$$
(D.3)

d'où

$$\rho \left(\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} \right) + \rho u \left(\nabla \xi \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \nabla Y^{\infty} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} \right) \\
= \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y \right) + \rho \omega_Y \tag{D.4}$$

Si on s'intéresse au terme traduisant la diffusion $\nabla (\rho \mathcal{D} \nabla Y)$, en faisant l'hypothèse que $\rho \mathcal{D}$ est constant, on peut écrire :

$$\nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y\right) = \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \xi \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}}\right)$$
(D.5)

$$= \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \xi\right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty}\right) \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \nabla \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}}$$

$$= \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \xi\right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \xi \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty}\right) \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \nabla Y^{\infty} \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}}$$

On peut alors faire apparaître l'équation de transport de ξ et une équation d'évolution de Y^{∞} .

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y}{\partial t} &+ \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \rho u \nabla \xi \frac{\partial Y}{\partial \xi} - \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \xi\right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} \\ &+ \rho \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} + \rho u \nabla Y^{\infty} \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} - \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty}\right) \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} \\ &= \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \xi \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \nabla Y^{\infty} \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}} \\ &+ \rho \omega_Y \end{aligned} \tag{D.6}$$

Equation de transport de la quantité de condition limite

Comme vu dans le chapitre 8, l'équation de transport de quantité se condition limite s'écrit comme suit :

$$\rho \frac{\partial \xi Y^{\infty}}{\partial t} + \rho u \nabla \left(\xi Y^{\infty}\right) = \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \left(\xi Y^{\infty}\right)\right)$$
$$\rho \xi \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} + \rho Y^{\infty} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u \xi \nabla Y^{\infty} + \rho u Y^{\infty} \nabla \xi = \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \left(\xi Y^{\infty}\right)\right)$$
(D.7)

Si on s'intéresse au terme traduisant la diffusion $\nabla (\rho \mathcal{D} \nabla (\xi Y^{\infty}))$, en faisant l'hypothèse que $\rho \mathcal{D}$ est constant, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \left(\xi Y^{\infty} \right) \right) &= \nabla \left(\rho \mathcal{D} \xi \nabla Y^{\infty} + \rho \mathcal{D} Y^{\infty} \nabla \xi \right) \\ &= \nabla \left(\rho \mathcal{D} \xi \right) \nabla Y^{\infty} + \rho \mathcal{D} \xi \nabla^2 Y^{\infty} + \nabla \left(\rho \mathcal{D} Y^{\infty} \right) \nabla \xi + \rho \mathcal{D} Y^{\infty} \nabla^2 \xi \mathrm{D.8}) \end{aligned}$$

En réinjectant l'eq. D.8 dans l'eq. D.7, et en remarquant que ξ est un scalaire passif qui suit une équation d'advection diffusion, on peut écrire :

$$\rho \xi \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} + \rho u \xi \nabla Y^{\infty} = 2\nabla \left(\rho \mathcal{D} \xi\right) \nabla Y^{\infty} + \rho \mathcal{D} \xi \nabla^2 Y^{\infty}$$
(D.9)

Finalement on peut écrire l'équation d'évolution de la condition limite Y^{∞} sous l'effet de l'advection et de la diffusion comme :

$$\xi \left(\rho \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} + \rho u \nabla Y^{\infty} - \rho \mathcal{D} \nabla^2 Y^{\infty} \right) = 2\nabla \left(\rho \mathcal{D} \xi \right) \nabla Y^{\infty}$$

$$\xi \left(\rho \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} + \rho u \nabla Y^{\infty} - \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \right) \right) = 2\nabla \left(\rho \mathcal{D} \xi \right) \nabla Y^{\infty} - \xi \nabla \left(\rho \mathcal{D} \right) \nabla Y^{\infty} (D.10)$$

Retour à l'équation de transport de Y

L'eq. D.6 peut être mise sous la forme suivante :

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial Y}{\partial \xi} \left(\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u \nabla \xi - \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla \xi \right) \right)
+ \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} \left(\rho \frac{\partial Y^{\infty}}{\partial t} + \rho u \nabla Y^{\infty} - \nabla \left(\rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \right) \right)
= \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \xi \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \nabla Y^{\infty} \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}}
+ \rho \omega_Y$$
(D.11)

Le premier terme du second membre s'annule compte tenu du fait que ξ est un scalaire passif et la fraction de mélange est forcément non nulle pour $\xi \in [\epsilon; 1 - \epsilon]$ avec ϵ petit dans la zone de flamme. On peut alors écrire :

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} + \left(\frac{2\rho \mathcal{D}}{\xi} \nabla \xi \nabla Y^{\infty}\right) \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}}
- \frac{\partial Y}{\partial Y^{\infty}} \nabla \left(\rho \mathcal{D}\right) \nabla Y^{\infty}
= \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \xi \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^{\infty} \nabla Y^{\infty} \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}}
+ \rho \omega_Y$$
(D.12)

Finalement on obtient :

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} = \rho \omega_Y + \rho \mathcal{D} \nabla \xi \nabla \xi \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2}
- \frac{2\rho \mathcal{D}}{\xi} \nabla \xi \nabla Y^\infty \frac{\partial Y}{\partial Y^\infty} + \rho \mathcal{D} \nabla Y^\infty \nabla Y^\infty \frac{\partial^2 Y}{\partial Y^{\infty^2}}
- \frac{\partial Y}{\partial Y^\infty} \nabla (\rho \mathcal{D}) \nabla Y^\infty$$
(D.13)

Modélisation de la combustion turbulente diphasique par une approche Eulérienne-Lagrangienne avec prise en compte des phénomènes transitoires.

L'allumage d'ergols injectés dans une chambre de combustion, la propagation du noyau de flamme puis sa stabilisation sont autant de paramètres déterminants pour la conception d'un moteur fusée. Pour ce type d'application, il est nécessaire - du point de vue de la modélisation - de tenir compte du couplage existant entre les effets de compressibilité, les processus de mélange turbulent ainsi que de cinétique chimique, dans un environnement diphasique puisque les ergols sont injectés à l'état liquide. Un modèle Lagrangien a été implanté dans le code de calcul compressible N3S-Natur afin de disposer d'un outil numérique capable de simuler le transitoire d'allumage d'un moteur fusée. La physique représentative de chacun des processus physiques impliqués pendant la phase d'allumage a été incorporée puis validée sur des configurations académiques. Ce travail a permis de mettre en évidence l'importance de la description du mélange à petites échelles pour capturer correctement le développement de la flamme. Il a aussi mis en exergue la nécessité de prendre en compte le transitoire thermique des gouttes d'oxygène liquide afin de reproduire fidèlement sa stabilisation. Enfin, il a nécessité l'extension de la notion de fraction de mélange à des cas pratiques présentant plus de deux entrées afin d'être en mesure de simuler la propagation de l'allumage sur la plaque d'injection. Cette approche basée sur l'introduction d'un injecteur fictif est non seulement utile pour la simulation de l'allumage des moteurs-fusées mais peut aussi être employée dans tout autre système impliquant le mélange entre des courants de réactifs issus de deux entrées ou plus.

MOTS CLEFS : Combustion, Combustion turbulente, Ecoulement diphasique, Flammes non prémélangées, Entrées multiples, Fraction de mélange, Taux de dissipation turbulente

Two-phase flows turbulent combustion modelling based on an Eulerian-Lagrangian approach including transient effects.

In the field of liquid rocket propulsion, ignition, propagation and stabilization of the flame are of first importance for the design of the engine. Computational fluid dynamics (CFD) solvers, may provide a great deal of help to proceed with the primary design choice but need to be fed with suited physical models. Important modelling efforts are therefore required to provide reliable computational representations able to take into account compressibility effects, turbulent mixing and chemical kinetics in two-phase flows since ergols are injected at the liquid state. A Lagrangian model has been implemented in the compressible solver N3S-Natur so as to obtain a computational tool able to compute the transient ignition of rocket engines. The physical processes involved at each step of this ignition sequence have been integrated and validated on academical configurations. Three significant contributions raised from this work. First of all, it is highlighted that the description of the micro-mixing is of first importance to correctly capture the flame development. This study also emphasized the need to consider the transient heating of liquid oxygen droplets in order to accurately compute the flame stabilisation. Finally, the notion of mixture fraction must be extended to practical devices implying more than two inlets. The proposed approach, which is based on the introduction of a fictive injector, is not only well suited to rocket engine ignition application but also to deal with other practical devices implying two inlets and more.

KEYWORDS: Combustion, Turbulent combustion, Two-phases flows, Non-premixed flames, Multiple inlets, Mixture fraction, Scalar dissipation rate