HAL
open science

Modélisation des traînées de condensation par interaction entre l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique

Jean-Charles Khou

▶ **To cite this version:**

Jean-Charles Khou. Modélisation des traînées de condensation par interaction entre l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2016. Français. NNT : 2016PA066164 . tel-01403100

HAL Id: tel-01403100

https://theses.hal.science/tel-01403100

Submitted on 25 Nov 2016

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.

Université Pierre et Marie Curie

Ecole doctorale de Sciences mécaniques, acoustique, électronique et robotique de Paris

ONERA/EMI, Palaiseau

Modélisation des traînées de condensation par interaction entre l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique

par

Jean-Charles KHOU

Thèse de doctorat de Physique

Dirigée par :
François GARNIER, Professeur de l'École de Technologie Supérieure à l'Université du Québec

Présentée et soutenue publiquement le 1er juin 2016

Devant un jury composé de :

Rapporteurs :

Pierre BRANCHER, Professeur de l'Université Paul Sabatier

Roberto PAOLI, Professeur de l'University of Illinois at Chicago

Examinateurs :

Ivan DELBENDE, Maître de conférences à l'UPMC

Laurent JACQUIN, Directeur de Recherche à l'ONERA

Philippe MIRABEL, Professeur honoraire de l'Université de Strasbourg

Olivier PENANHOAT, Coordinateur technique Emissions & Environnement à SNECMA

Weeded GHEDHAIFI, Ingénieur de Recherche à l'ONERA

Except where otherwise noted, this work is licensed under
http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/

À mes parents,

à mon petit frère,

et à tous ceux qui me sont chers.

Remerciements

Cette thèse a été réalisée à l'Office Nationale d'Études et Recherches Aérospatiales (ONERA), dans l'unité Émissions Moteurs et Impact environnemental du Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée. Je remercie tout d'abord le directeur du département, Mohammed Habiballah, de m'y avoir accueilli et de m'avoir permis de mener mon projet à bien. Je remercie également le directeur du département de Mesures Physiques, Michel Lefebvre, de m'avoir accueilli dans son département durant la première année de ma thèse.

Je remercie le Conseil pour la Recherche Aéronautique Civile (CORAC) et la Direction Générale de l'Aviation Civile qui ont financé cette thèse à travers le projet Traînée de Condensation et Climat (TC2). Ces travaux ont bénéficié d'un accès aux moyens de calcul du Très Grand Centre de Calcul (TGCC) au travers de l'allocation de ressources 2014-t2014017254 attribuée par le Grand Équipement National de Calcul Intensif (GENCI).

Je remercie chaleureusement François Garnier, professeur de l'École de Technologie Supérieure, d'avoir accepté de diriger cette thèse. Sa bonne humeur habituelle et son soutien aussi bien scientifique que moral m'ont été d'une très grande importance tout le long de ce projet.

J'exprime toute ma gratitude à Weeded Ghedhaïfi, ingénieure de recherche à l'ONERA, qui m'a encadré et suivi au quotidien pendant mon stage et ma thèse. Ses conseils scientifiques toujours pertinents et son investissement sans réserve dans ce projet ont été indispensables à la réalisation de ces travaux. Je la remercie pour son soutien, son attention et sa patience sans faille, notamment dans les moments les plus difficiles de la thèse. Je la remercie également pour les très bons moments passés ensemble ; je suis particulièrement fier de t'avoir fait goûter du tofu.

Je remercie mon équipe de travail, à commencer par Xavier Vancassel, chef d'unité, qui m'a accueilli dans son équipe. Ses connaissances scientifiques très pointues en microphysique m'ont été d'une aide très précieuse, merci également pour les plaisanteries pendant les petits déjeuners et les pauses café. Je remercie David pour les nombreuses conversations amicales

que nous avons partagées sur des sujets variés, et Manu pour sa bonne humeur inaltérable, son humour déplacé, et aussi pour ses précieux conseils en mécanique des fluides. Je tiens aussi à remercier Carolina, Delphine et Alexandre, anciens doctorants de l'équipe, et Nicolas, Saïda et Thomas, anciens stagiaires, pour les bons moments partagés pendant cette aventure. Enfin, je souhaite une bonne continuation à Ismael, la dernière recrue de l'équipe.

Merci aussi à Jun et Pierre, doctorants d'autres équipes, avec qui j'ai pu partager les hauts et les bas d'une thèse. Merci également à Florian pour son soutien moral et pour m'avoir tenu compagnie sur le chemin du retour.

Je remercie mes anciens collègues de couloirs du 8e étage de Châtillon, Philippe, Laurent, Arnaud, Patrice, Aurélie, Magalie, Bruno, Hélène, Sylvie, Martine et Michelle pour m'avoir mis à l'aise pendant mon stage et au début de ma thèse.

Je remercie également mon professeur Olivier Penanhoat de m'avoir introduit au monde de la recherche aéronautique, et grâce à qui j'ai pu réaliser mon stage et donc ma thèse.

Enfin, j'adresse un remerciement du fond du cœur à mes amis et à ma famille pour m'avoir encouragé et soutenu tout au long de ma scolarité et pour avoir toujours cru en moi.

Table des matières

Introduction 1
Chapitre I. Physique des traînées de condensation 7
I.1 Mécanismes de dilution du panache 8
I.1.1 État de l'atmosphère à l'altitude de vol 8
I.1.2 Les régimes d'évolution du panache 10
I.1.3 Les tourbillons de sillage 18
I.1.4 La dilution du panache 25
I.2 Transformations chimiques dans le panache 31
I.2.1 Les constituants chimiques du carburant et de la tropopause 31
I.2.2 Les espèces organiques 34
I.2.3 Les espèces azotées 37
I.2.4 Les espèces hydroxyles 38
I.2.5 Les espèces soufrées 39
I.3 Processus microphysiques 42
I.3.1 L'activation des suies 43
I.3.2 Formation des cristaux de glace 45
Chapitre II. Modélisation 51
II.1 Simulations numériques 53
II.1.1 Choix de l'approche de simulation numérique 53
II.1.2 Logiciel CEDRE 54
II.2 Équations de l'écoulement 57
II.2.1 Equations de Navier-Stokes 57
II.2.2 Approche Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) 61
II.3 Transformations chimiques dans le panache 69
II.3.1 Mécanisme réactionnel 69
II.3.2 Modélisation de la vitesse de réaction 72
II.4 Processus microphysiques 79
II.4.1 Transport des particules de suies 79

II.4.2 Activation des suies 82
II.4.3 Condensation et évaporation 89
II.5 Méthodes numériques 97
II.5.1 Discrétisation spatiale 97
II.5.2 Intégration temporelle 110
Chapitre III. Résultats 115
III.1 Présentation du domaine de calcul 117
III.1.1 Géométrie de l'avion 117
III.1.2 Géométrie du domaine de calcul 119
III.1.3 Maillage du domaine de calcul 120
III.2 Validation des aspects aérodynamiques 124
III.2.1 Propriétés du calcul 124
III.2.2 Propriétés du tourbillon de sillage 126
III.2.3 Propriétés de l'interaction jet/tourbillon 133
III.2.4 Énergie cinétique turbulente du jet 136
III.2.5 Dilution du panache 138
III.3 Validation des transformations chimiques au sein du panache 141
III.3.1 Domaine de calcul simplifié 141
III.3.2 Comparaison des concentrations des espèces 144
III.3.3 Intégration d'une géométrie réaliste d'avion 148
III.4 Evaluation des processus microphysiques 152
III.4.1 Configuration de calcul 152
III.4.2 Saturation en eau du panache 155
III.4.3 Activation des suies 158
III.4.4 Formation des cristaux de glace 166
III.5 Etudes de sensibilité 176
III.5.1 Humidité relative 176
III.5.2 Teneur en soufre du carburant 188
III.5.3 Diamètre des particules de suie 199
III.5.4 Densité de particules de suie 204
Conclusions et perspectives 213
Bibliographie 213
Annexes 229
Annexe 1. Calcul des caractéristiques du moteur CFM-56 et des effluents 230

Annexe 2. Critère de Schmidt-Appleman 232
Table des illustrations 229
Table des tableaux viii

Nomenclature

Caractères usuels

A_{act}	Surface de suie activée	m^2
A_{con}	Superficie transversale de la traînée de condensation	m^2
A_r	Facteur pré-exponentiel pour la loi d'Arrhenius	-
A_s	Surface totale d'une particule de suie	m^2
A_{sat}	Epaisseur du panache de sursaturation	m^2
b	Envergure de l'avion	m
b_0	Distance initiale séparant les deux tourbillons	m
c	Vitesse du son	$\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
c_p	Capacité thermique	$\mathrm{J} \cdot \mathrm{K}^{-1} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$
$C_{i,m}$	Concentration molaire de l'espèce E_i	$\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-3}$
$C_{i,m,0}$	Concentration molaire de l'espèce E_i dans l'état initial	$\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-3}$
d	Facteur de dilution	-
d_{jet}	Diamètre du jet	m
D_{con}	Facteur de déclenchement de la condensation	-
D_p	Diamètre d'une particule	m
D_s	Diamètre d'une particule de suie sèche	m
D_{vol}	Diamètre d'une particule volatile	m
D_{diff}	Coefficient de diffusion	$\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$
e_t	Energie totale	$\mathrm{J} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$
E_i	Espèce i	-
EI	Indice d'émission	$\mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$
f	Densité de flux d'Euler	-
F_a	Poussée de l'aéronef	$\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-2}$
F	Fraction de particules se trouvant dans une zone sursaturée	-
F_i	Flux d'Euler à travers les faces de la cellule i	-
g	Accélération de la pesanteur	$\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-2}$

h_i	Enthalpie de l'espèce i	$\mathrm{J \cdot kg^{-1}}$
h_t	Enthalpie totale	$\mathrm{J \cdot kg^{-1}}$
I	Intensité turbulente	-
J_n	Matrice jacobienne des flux	-
$J_{r,1}$	Liste des indices des réactants de la réaction r	-
$J_{r,2}$	Liste des indices des produits de la réaction r	-
k	Energie cinétique turbulente	$\mathrm{J \cdot kg^{-1}}$
k_B	Constante de Boltzmann	$\mathrm{m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}}$
K_r	Constante de vitesse de réaction chimique	$\mathrm{mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}}$
l	Longueur de mélange	m
$\dot{m}_{car}$	Débit de consommation de carburant	$\mathrm{kg \cdot s^{-1}}$
M	Masse de l'avion	Kg
$\mathcal{M}$	Masse molaire du mélange	$\mathrm{kg \cdot mol^{-1}}$
M_a	Nombre de Mach	-
$\mathcal{M}_i$	Masse molaire de l'espèce E_i	$\mathrm{kg \cdot mol^{-1}}$
$m_{mol,i}$	Masse d'une molécule de l'espèce E_i	Kg
m_p	Masse d'une particule	kg
n	Concentration molaire	$\mathrm{mol \cdot m^{-3}}$
n_{cel}^{int}	Nombre de cellules internes du maillage	-
n_{cel}^{lim}	Nombre de cellules limites du maillage	-
n_{cel}^{tot}	Nombre total de cellules du maillage	-
n_e	Nombre d'espèces	-
n_r	Nombre de réactions	-
n_u	Nombre de variables primaires	-
n_q	Nombre de variables secondaires	-
n_z	Nombre de scalaires des équations de Navier-Stokes	-
Na	Nombre d'Avogadro	$\mathrm{mol^{-1}}$
N_s	Densité de particules de suie	$\mathrm{\# \cdot m^{-3}}$
N_{sat}	Nombre de particule dans un état saturé dans un plan transversal	-
N_{tot}	Nombre de particules total dans un plan transversal	-
N_{vol}	Densité de particules volatiles	$\mathrm{\# \cdot m^{-3}}$

N_{vol}^{col}	Densité de particules volatiles collectées	$\# \cdot \mathrm{m}^{-3}$
p	Pression	Pa
p_{liq}^{sat}	Pression de vapeur saturante de l'eau liquide	Pa
p_{sol}^{sat}	Pression de vapeur saturante de la glace	Pa
p_v	Pression partielle de vapeur d'eau	Pa
q	Matrice de variables conservatives	-
Q	Pouvoir calorifique du carburant	$\mathrm{J{\cdot}kg^{-1}}$
Q_p	Pouvoir calorifique effectif du carburant	$\mathrm{J{\cdot}kg^{-1}}$
Q_T	Pouvoir calorifique chauffant du carburant	$\mathrm{J{\cdot}kg^{-1}}$
Q_{ext}	Coefficient d'extinction	-
r_c	Rayon visqueux du tourbillon	m
r_p	Rayon d'une particule	m
r_s	Rayon d'une particule de suie sèche	m
r_{vol}	Rayon d'une particule volatile	m
R	Constante des gaz parfaits	$\mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$
R_{pan}	Taux de dilution du panache	-
Re	Nombre de Reynolds	-
R_p	Constante spécifique d'un gaz	$\mathrm{J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}}$
s	Taux de production massique	$\mathrm{kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}}$
s_{liq}	Saturation en eau par rapport à la phase liquide	
s_{col}	Taux de collecte des particules volatiles	$\# \cdot \mathrm{m}^{-3} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
s_{ads}^{i}	Taux d'adsorption de l'adsorbat i	$\mathrm{kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}}$
S	Matrice des sources volumiques	-
S_{act}	Surface de suie activée	m^2
t	Temps	s
t_0	Temps de référence	s
t_d	Temps caractéristique de descente des tourbillons	s
t_l	Matrice de temps de relaxation	s
T	Température	K
T_a^r	Température d'activation de la réaction r	K
u	Matrice de variables primaires	-
u_{imp}	État imposé pour les conditions limites	-

$\hat{u}_l$	État à la frontière de la cellule limite	-
v	Vitesse	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$
$\overline{v_{th}}$	Vitesse quadratique moyenne des molécules	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$
V	Vitesse de l'avion	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$
V_i	Volume de la cellule i	$\mathrm{m^3}$
W_r	Taux d'avancement de la réaction r	$\mathrm{mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}}$
$W_{t,i}$	Taux de production molaire total de l'espèce E_i	$\mathrm{mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}}$
y_i	Fraction massique de l'espèce i	-
z	Scalaires supplémentaires du système d'équations de Navier-Stokes	-

Caractères grecs

α	Conductivité thermique du mélange	$\mathrm{W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}}$
α_{ads}	Constante d'adsorption	-
α_c	Coefficient d'accommodation	-
α_r	Coefficient pour la loi d'Arrhenius pour la réaction r	-
β	Coefficient d'extinction optique	$\mathrm{m^{-1}}$
δ	Longueur caractéristique de l'écoulement	m
γ	Coefficient isentropique	-
Γ	Circulation du tourbillon	$\mathrm{m^2 \cdot s^{-1}}$
Γ_0	Circulation de référence du tourbillon	$\mathrm{m^2 \cdot s^{-1}}$
η	Efficacité de propulsion	-
η_c	Taux de conversion chimique	-
λ_i	Libre parcours moyen	m
λ_w	Longueur d'onde	m
μ	Viscosité dynamique	$\mathrm{Pa \cdot s^{-1}}$
μ_r	Indice de réfraction	-
ν	Viscosité cinématique	$\mathrm{m^2 \cdot s^{-1}}$
$\nu_{r,1,j}$	Coefficient stœchiométrique molaire du réactant E_j dans la réaction r	-
$\nu_{r,2,j}$	Coefficient stœchiométrique molaire du produit E_j dans la réaction r	-

$\nu_{r,j}$	Coefficient algébrique de l'espèce E_j dans la réaction r	-
ϕ	Densité de flux de Navier-Stokes	-
ϕ_c	Densité de flux de diffusion thermique	$\mathrm{J \cdot m^{-2}}$
Φ_i	Flux de Navier-Stokes à travers les faces de la cellule i	-
θ_{act}	Fraction de surface activée	-
θ_{ads}	Fraction de surface activée par le processus d'adsorption	-
θ_{col}	Fraction de surface activée par le processus de collecte	-
ρ	Masse volumique	$\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$
σ_0	Densité de sites disponibles pour l'adsorption	$\mathrm{m^{-2}}$
τ	Tenseur des contraintes visqueuses	Pa
τ_c	Temps caractéristique d'équilibre thermique	s
τ_d	Temps caractéristique d'équilibre dynamique	s
τ_p	Flux de frottement pariétal	$\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}}$
τ_v	Epaisseur optique	-
$\vec{\omega}$	Vecteur vorticité	$\mathrm{s^{-1}}$

Indices

r, θ, z	Coordonnées polaires usuelles
x, y, z	Coordonnées cartésiennes usuelles

Introduction

La réduction de l'impact environnemental dû aux activités humaines constitue l'un des plus grands défis auquel l'humanité est confrontée au XXIe siècle, tant en raison de ses répercussions sur nos sociétés et sur la planète que sur l'ampleur de la coordination et de la coopération requise au niveau mondial pour y faire face. Dans ce contexte, le changement climatique et la dégradation de la qualité de l'air engendrés par l'aviation dont le trafic augmente de 5% par an [*ICAO*, 2013] sont au cœur des préoccupations de la communauté scientifique. Parmi les multiples facteurs participant à l'impact environnemental de l'aviation, la contribution des traînées de condensation présente encore, à ce jour, de nombreuses incertitudes.

Figure 1 : Photographie d'une traînée de condensation laissée dans le sillage d'un avion de ligne à réaction.

Les traînées de condensation sont des panaches blancs observables généralement par beau temps dans le sillage des avions à réaction (Figure 1). Elles sont constituées de cristaux de glace, formés par la condensation de la vapeur d'eau issue des effluents émis par les moteurs et de l'atmosphère à l'altitude de vol. Leur durée de vie est variable, selon les conditions météorologiques ; elles peuvent ainsi s'estomper quelques secondes seulement après leur formation, par sublimation de la glace mais également persister pendant plusieurs heures, s'étendant alors pour former des nuages induits de type cirrus (voir Figure 2).

Figure 2 : Photographie de traînées de condensation persistantes se transformant en cirrus artificiels.

Source : [Photo : Roo Reynolds].

Les cirrus, qu'ils soient naturels ou induits par les traînées de condensation persistantes, prennent l'apparence de banc de nuages fins voilant le ciel. Les cirrus induits participent à l'augmentation d'origine anthropique de la nébulosité régionale, perturbant le bilan radiatif terrestre. Ces nuages réfléchissent en effet une partie du rayonnement solaire. Par ailleurs, ils absorbent puis réémettent les rayonnements thermiques infrarouges provenant du soleil et de la planète. Il en résulte un forçage radiatif qui peut d'une part augmenter la température de l'atmosphère, et d'autre part chauffer ou refroidir la surface terrestre. Le forçage radiatif mesure le bilan net d'énergie faisant suite à une perturbation de l'équilibre énergétique de la Terre. Bien que celui induit par les traînées de condensation soit très variable en fonction des conditions environnantes, les différentes études sur leur impact radiatif convergent vers un forçage radiatif globalement positif à long terme. Cela signifie que les traînées de condensation causent une augmentation générale de la température terrestre. Ainsi, au regard du trafic aérien actuel, les estimations les plus récentes de forçage radiatif net des traînées de condensation en incluant les cirrus induits donne $+0{,}05\ \mathrm{W{\cdot}m^{-2}}$ pour l'année 2011 [*IPCC*, 2013], avec toutefois un indice de confiance qualifié de faible. Le forçage radiatif exercé par les cirrus induits représente actuellement une part modeste du forçage radiatif net total d'origine anthropique qui s'élève à $+2{,}29\ \mathrm{W \cdot m^{-2}}$ pour l'année 2011. Il demeure cependant en constante augmentation

en raison de la densification rapide du trafic aérien mondial. Ce dernier double en effet tous les 15 ans [*ICAO*, 2013].

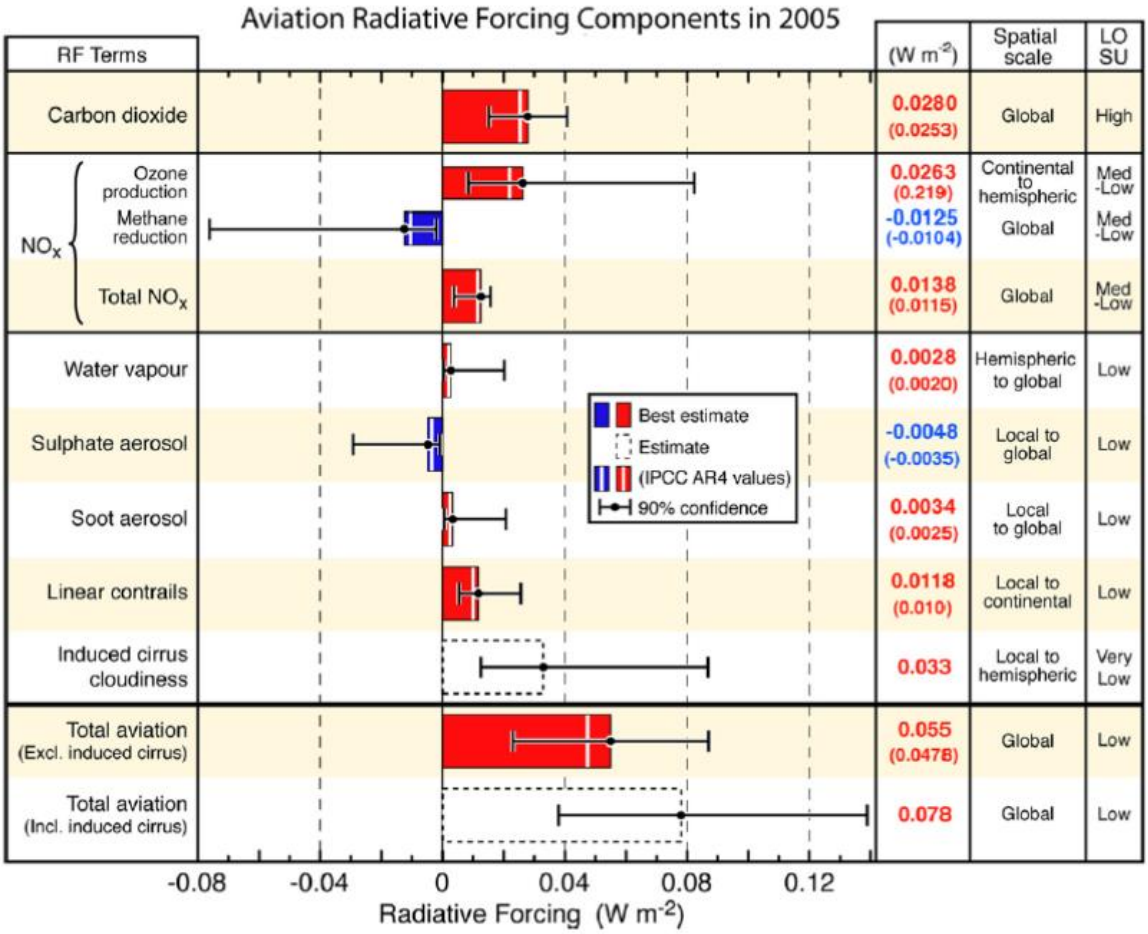

Figure 3 : Estimations des forçages radiatifs des différents facteurs dus à l'aviation de la période préindustrielle à 2005. Les valeurs à droite correspondent aux valeurs de l'IPCC AR4 [*IPCC*, 2007] (entre parenthèses) et aux valeurs actualisées d'après *Lee et al.*, [2010]. L'échelle spatiale géographique de l'impact radiatif ainsi que l'état des connaissances scientifiques (LOSU : *Level Of Scientific Understanding*) sont indiqués à droite du tableau.

Source : [*Lee et al.*, 2010]

Le Groupe d'Experts Intergouvernemental sur l'évolution du Climat (GIEC) – IPCC en anglais pour *Intergovernmental Panel on Climate Change* – met régulièrement à jour les estimations des forçages radiatifs des différents facteurs impactant le bilan radiatif de l'aviation (voir Figure 3). Outre les cirrus induits, le dioxyde de carbone semble être le principal contributeur au forçage radiatif de l'aviation avec une valeur estimée à $0{,}028\ \mathrm{W{\cdot}m^{-2}}$. Cela représente environ le double de la contribution des traînées de condensation linéaires ($0{,}0118\ \mathrm{W{\cdot}m^{-2}}$), c'est-à-dire sans prendre en compte celle des cirrus induits. Les estimations

du forçage radiatif des cirrus induits présentent de fortes incertitudes, l'état actuel des connaissances suggère que leur contribution pourrait dépasser celle du dioxyde de carbone.

Les premières recherches sur le phénomène des traînées de condensation datent du début des années 1940 [*Schmidt*, 1941]. On distingue les études portant sur la détermination de l'impact environnemental des traînées de condensation et celles portant sur la compréhension des processus physiques impliquées dans leur formation et leur développement. Les premières visent principalement à évaluer et prédire le forçage radiatif des cirrus. Pour cela, les scientifiques ont notamment besoin de mesurer et de prédire l'extension spatiale et l'épaisseur optique des zones couvertes.

L'extension spatiale des cirrus est actuellement calculée à partir d'observations satellites (par exemple [*Spichtinger et al.*, 2003; *Gettelman et al.*, 2006]) et/ou de modèles climatiques de type GCM (*General Circulation Model*) (par exemple [*Marquart et Mayer*, 2002; *Ponater et al.*, 2002]), qui présentent encore de nombreuses incertitudes [*Lee et al.*, 2010]. Par exemple, l'état des connaissances actuel ne permet pas encore de distinguer les cirrus naturels de ceux induits par les traînées de condensation, ce qui complique davantage encore l'évaluation de leur impact, d'où l'incertitude importante sur la contribution des cirrus induits dans le calcul du forçage radiatif.

La détermination de l'épaisseur optique des traînées de condensation présente également encore de grandes incertitudes. Elle dépend des propriétés microphysiques des cristaux de glace composant la traînée de condensation ou le cirrus, comme leur concentration ou leur taille. Or, la mesure et l'estimation de ces grandeurs au niveau global est difficile compte tenu de la grande variabilité observée.

L'étude des processus physiques intervenant dans la formation et dans l'évolution des traînées de condensation dans le panache des avions vise, d'une part, à fournir les données sur les propriétés microphysiques et dynamiques des traînées de condensation nécessaires à l'évaluation du forçage radiatif et d'autre part, à donner les moyens d'élaborer des stratégies de mitigation de l'impact environnemental des traînées de condensation. Présentement, les principaux processus et paramètres environnementaux impliqués dans la formation des cristaux de glace dans le panache des avions sont relativement bien connus. Ainsi, l'occurrence des traînées de condensation est décrite de manière fiable par le critère de Schmidt-Appleman révisé

[*Schmidt*, 1941; *Appleman*, 1953; *Schumann*, 1996], en fonction d'un certain nombre de paramètres relatifs aux propriétés du moteur et du carburant et aux conditions atmosphériques.

À l'échelle des particules, les principaux processus microphysiques conduisant à la condensation de la vapeur d'eau dans le panache des avions sont également connus [*Kärcher*, 1998; *Kärcher et al.*, 2015]. D'importantes incertitudes persistent en revanche dans l'évaluation des propriétés microphysiques des traînées de condensation. Ces dernières sont notamment le contenu en glace, la densité des cristaux de glace, la distribution en taille, le diamètre effectif ou encore la forme géométrique des cristaux de glace et des suies qui constituent les principaux noyaux de nucléation [*Heymsfield et al.*, 2010]. Les scientifiques manquent notamment de données quantitatives sur les propriétés microphysiques et thermodynamiques initiales des traînées de condensation desquelles dépendent fortement leur évolution dans le sillage de l'avion. Les mesures in situ de ces propriétés lors de la formation des traînées de condensation sont de fait extrêmement difficiles à mettre en œuvre. Les simulations numériques sont ainsi largement utilisées pour fournir des données quantitatives sur les propriétés microphysiques des traînées de condensation précédemment cités.

Au regard de l'état actuel des connaissances, des recherches supplémentaires sont donc encore nécessaires afin de répondre aux défis environnementaux posés par les traînées de condensation. Les principaux objectifs sont d'améliorer les moyens d'évaluation et de prédiction des tailles et concentrations de glace des traînées de condensation afin de pouvoir mieux évaluer leur impact radiatif et de proposer des solutions de mitigation. Dans ce contexte, cette thèse s'inscrit dans l'étude des processus physiques impliqués dans les premiers instants de la vie du panache, correspondant à la phase de formation des traînées de condensation. Les événements se produisant durant les premières secondes après l'émission des effluents pourraient avoir une influence significative sur les caractéristiques des traînées de condensation et des cirrus induits. L'objectif de la thèse est de développer, à partir d'un code de simulation de mécanique des fluides existant, un outil de simulation numérique capable de reproduire les écoulements tridimensionnels autour et dans le sillage d'une configuration réaliste d'un avion de transport civil en incluant le jet du moteur, ainsi que les réactions chimiques et les processus microphysiques se déroulant dans le panache. La mise en œuvre de cet outil devrait alors permettre d'améliorer la compréhension du couplage des processus dans le champ proche et d'évaluer l'impact des paramètres environnementaux et des caractéristiques des effluents sur les propriétés des cristaux de glace formés. Par ailleurs, cet outil pourrait à terme être utilisé

pour tester et évaluer des stratégies de mitigation technologique et opérationnelle de l'impact des traînées de condensation sur l'environnement, basées par exemple sur l'utilisation de carburants alternatifs ou encore sur la modification de la configuration de l'avion.

Ce mémoire de thèse est organisé en trois chapitres. Le premier est consacré à la description détaillée des processus physiques susmentionnés dans l'état actuel des connaissances. Nous décrivons ensuite, dans le deuxième chapitre, la modélisation des processus aérodynamiques et chimiques et l'intégration des modèles microphysiques dans le code de calcul CEDRE de l'ONERA, utilisé pour la réalisation des simulations numériques. Enfin, les résultats des simulations numériques sont exposés dans le dernier chapitre. Une première partie sera dédiée à la validation de l'outil de simulation, en évaluant la précision de la simulation de chacun des trois processus physiques impliqués, à savoir l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique. La seconde partie présente les résultats d'études de sensibilité afin d'évaluer la réactivité de l'outil et l'influence des différents paramètres environnementaux et des caractéristiques des effluents sur les propriétés des traînées de condensation formées.

Chapitre I.

Physique des traînées de condensation

Les traînées de condensation sont formées de cristaux de glace issus de la condensation de vapeur d'eau dans la haute troposphère et la basse stratosphère. Elles se forment généralement à la suite du passage d'un avion, émettant dans l'atmosphère des particules de suies constituant des noyaux de condensation [*Kärcher et al.*, 1996b]. Les processus conduisant à la formation des traînées de condensation impliquent des phénomènes physiques complexes dépendant des conditions thermodynamiques de l'atmosphère. De nombreux modèles décrivant leur formation ont été élaborés (par exemple [*Kärcher et al.*, 1996b; *Lewellen et Lewellen*, 2001; *Paoli et al.*, 2004]) afin de mieux comprendre quels phénomènes physiques interviennent dans le processus et comment ils interagissent entre eux. L'objectif final étant de pouvoir prédire leur apparition et leur évolution en fonction des différents paramètres impliqués, notamment dans le but d'évaluer et de maîtriser leurs effets.

La formation des traînées de condensation dans le panache d'un avion est principalement pilotée par l'interaction de trois phénomènes physiques; la dynamique dans le sillage de l'avion, les transformations chimiques des effluents et les processus microphysiques [*Kärcher et al.*, 1996b]. Ces derniers désignent les phénomènes physiques qui ont lieu à l'échelle microscopique, principalement au niveau des particules composant les effluents de l'avion. Afin de pouvoir prendre en compte les effets des différents paramètres, il est avantageux de pouvoir modéliser ces trois processus simultanément car les grandeurs caractérisant chacun des phénomènes sont dans un rapport de dépendance mutuelle. L'aérodynamique influe de manière importante sur la formation des traînées de condensation en pilotant la dilution du panache [*Schumann et al.*, 1998]. Les transformations chimiques se produisant dans le panache en expansion modifient sa composition [*Kärcher et al.*, 1996a], qui est un paramètre important agissant sur les processus microphysiques. Enfin, ces derniers contribuent à modifier les propriétés des différentes particules composant le panache, conduisant lorsque les conditions locales le permettent à la condensation de la vapeur d'eau [*Kärcher et al.*, 1998a].

I.1 Mécanismes de dilution du panache

La combustion du kérosène dans les moteurs d'avion libère dans l'atmosphère ambiante des effluents sous la forme d'un jet chaud ($T \approx 500$ K) en sortie de tuyère. La dispersion de ces effluents apporte les éléments pouvant déclencher la formation de cristaux de glace. Les processus de dilution, en contribuant de manière importante à l'évolution de l'état thermochimique du panache, jouent donc un rôle déterminant dans la formation des traînées de condensation.

Dans cette partie, nous commençons par présenter la structure de l'atmosphère terrestre et la partie qui est impactée par l'activité aéronautique. Puis nous décrivons le processus de dispersion des effluents dans l'atmosphère en détaillant les différents régimes de d'évolution du panache. Nous nous intéressons ensuite aux structures tourbillonnaires générées par les avions qui modifient de manière importante le processus de dispersion des effluents dans l'atmosphère. Enfin, nous introduisons les outils qui permettent de caractériser la dilution du panache, c'est-à-dire le phénomène de dispersion des effluents dans l'atmosphère.

I.1.1 État de l'atmosphère à l'altitude de vol

L'atmosphère terrestre constitue l'enveloppe gazeuse qui sépare notre planète du vide spatiale. D'une épaisseur d'environ 100 km, elle peut être divisée en quatre tranches principales comprises entre des altitudes différentes marquant des points d'inversion de température (voir Figure 4). En partant de l'altitude la plus basse, ces tranches sont respectivement la troposphère, la stratosphère, la mésosphère et la thermosphère.

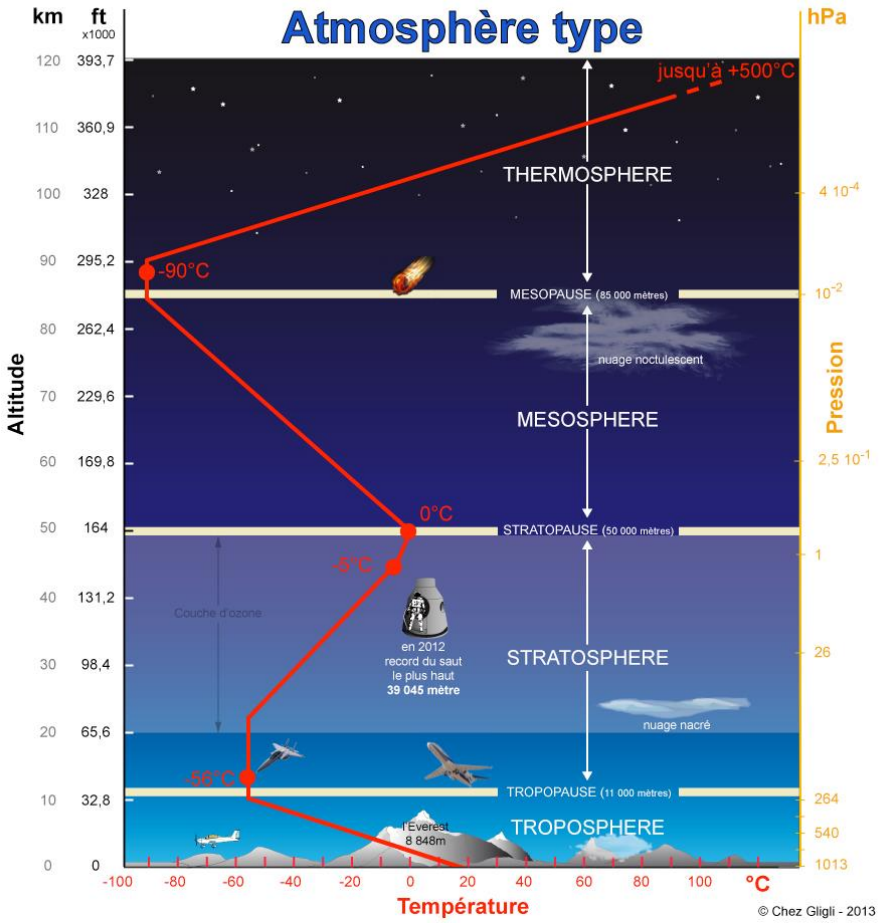

Figure 4 : Illustration de l'évolution de la température selon l'altitude et la pression dans une atmosphère standard.

Les avions commerciaux que nous étudions dans cette thèse évoluent dans la troposphère et la basse stratosphère, c'est-à-dire à des altitudes comprises entre 0 km au décollage et 14000 m en régime de croisière. Plus précisément, en vol de croisière, les avions se situent dans une zone à la lisière entre la troposphère et la stratosphère, appelée la tropopause. Ils montent à des altitudes aussi élevées car la faible densité de l'air (elle diminue à mesure que l'altitude augmente) permet de réduire les frottements et par conséquent d'économiser du carburant. La tropopause correspond à une zone dans laquelle la température est relativement stable, comprise entre -50 °C et -65 °C, alors qu'elle observe une décroissance à partir du sol et une augmentation dans la stratosphère. Il s'agit donc de la zone la plus froide de la basse atmosphère, notamment propice à la formation de cristaux de glace.

I.1.2 Les régimes d'évolution du panache

Nous nous intéressons aux processus de dilution que subissent les effluents une fois éjectés des tuyères dans l'air de la tropopause. Le développement du panache se décompose communément en quatre phases [*Miake-Lye et al.*, 1993; *Garnier et al.*, 1997b; *Gerz et Ehret*, 1997] correspondant à différentes dynamiques de dispersion complexes (Figure 5). Ces quatre régimes de dilution sont chronologiquement le régime jet, le régime tourbillonnaire, le régime de dispersion et le régime de diffusion. Nous décrivons ici les spécificités de chacun de ces régimes par rapport aux processus de dilution que subit le panache.

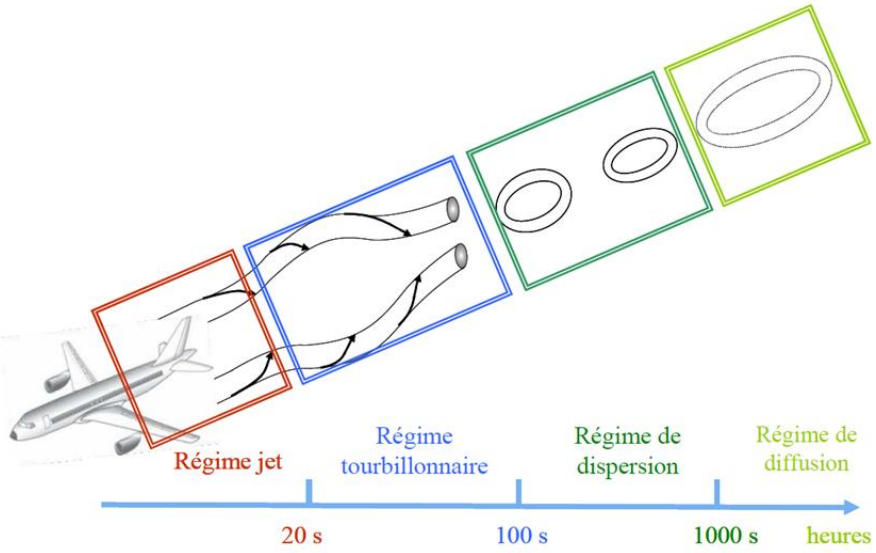

Figure 5 : Régimes de dilution du panache dans le sillage d'un avion
Source : [*Guignery*, 2010]

I.1.2.1 Le régime jet

Le régime jet correspond aux premiers instants ($t \in [0; \sim 20\ \mathrm{s}]$) après l'éjection des effluents de la tuyère du moteur. Selon *Hoshizaki* [1972], au départ, la dynamique de dispersion des effluents correspond à celle d'un jet ordinaire dans l'air ambiant. Les tourbillons de sillage, en cours de formation, n'ont alors que peu d'influence sur le panache. L'expansion du panache est donc majoritairement dominée la transition turbulente du jet.

Au bout de quelques dixièmes de secondes, les effluents commencent à subir l'attraction des tourbillons de sillages générés par l'avion [*Gerz et Ehret*, 1997; *Brunet et al.*, 1999]. Ces derniers sont alors en cours de formation, issus de l'enroulement de la nappe de vorticité en

bout d'aile. Les tourbillons de sillage jouent ainsi un rôle important dans les processus de dilution et leur formation sera détaillée dans une sous-partie dédiée. Pendant cette phase, les effluents sont donc progressivement entraînés en direction du sillage des bouts d'ailes. Ces mécanismes de dispersion sont confirmés par les études numériques de *Paoli et al.* [2003] et de *Ferreira Gago et al.* [2002] sur l'interaction jet/tourbillon en champ proche. Les auteurs montrent ainsi l'existence, dans le régime jet, d'une transition nette entre deux phases distinctes. La première phase, dite de jet, correspond à l'expansion d'un jet chaud dans l'atmosphère froid, sans subir l'influence des tourbillons de sillage. S'ensuit la seconde phase, dite d'entraînement, caractérisée par l'interaction du jet avec le tourbillon de sillage en cours de formation dans le sillage des bouts d'aile.

Peu d'études expérimentales de ce régime de dilution ont pu être effectuées en conditions réelles de vol, principalement en raison des conditions extrêmes qui rendent les expériences in situ très difficiles à mettre en œuvre. Toutefois, des études ont pu être menées en soufflerie. Ainsi, les résultats expérimentales de *Brunet et al.* [1999] et de *Wang et al.* [2000] montrent que les jets deviennent asymétriques sous l'effet des tourbillons de sillage. Ils sont compressés dans la direction verticale et étirés dans la direction horizontale. Dans le régime jet, les tourbillons de sillage exercent donc une influence notable sur l'étirement du panache.

Parallèlement, des études fondamentales et numériques montrent que les tourbillons de sillage et la distance séparant le jet du tourbillon sont des paramètres qui influent de manière importante sur la dispersion des effluents dès les premiers instants du panache [*Garnier et al.*, 1997b; *Gerz et Ehret*, 1997; *Paoli et al.*, 2003]. Les auteurs soulignent également la contribution importante de la turbulence créée par le jet éjecté à grande vitesse ($v \approx 450\ \mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$) et celle issue des autres parties de l'avion sur le taux de dilution du panache.

Une première caractérisation de l'état de turbulence de l'écoulement est réalisable en évaluant le nombre de Reynolds Re définit par $\mathrm{Re} = VL/\nu$ où V, L, et ν représentent la vitesse, une longueur caractéristique et la viscosité cinématique de l'écoulement, respectivement. Ainsi, un nombre de Reynolds élevé, typiquement supérieur à 10^4 [*Dimotakis*, 2000], indique une turbulence pleinement développée, correspondant à un taux de dilution maximal des effluents. Dans le cas des avions commerciaux, en considérant une vitesse de croisière de $240\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, un diamètre de jet en sortie de tuyère de $1\ \mathrm{m}$, et une viscosité cinématique de l'air à $10\ \mathrm{km}$ d'altitude de $3{,}525 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{m^2 \cdot s^{-1}}$, le nombre de Reynolds dans le jet présente un

ordre de grandeur de Re $\approx 6{,}8 \cdot 10^6$. La turbulence se révèle être donc pleinement développée et les taux de dilution dans le régime jet sont par conséquent très élevés, notamment dans la couche de cisaillement entre le jet et l'atmosphère ambiante.

La Figure 6 permet d'illustrer l'effet du taux de turbulence sur le processus de dispersion en visualisant expérimentalement la dispersion de deux jets circulaires présentant des nombre de Reynolds différents [*Dimotakis*, 2000]. La figure de gauche montre un jet avec Re $\approx 2{,}5 \cdot 10^3$ et la figure de droite un jet avec Re $\approx 10^4$. Les constituants des jets apparaissent en blanc tandis que le fluide du réservoir dans lequel les jets sont injectés apparaît en noir. Des poches de fluide issues du réservoir sont observables dans la région turbulente dans le cas à bas Reynolds. Celles-ci témoignent d'une dispersion moins importante par rapport à celle dans le cas à haut Reynolds, qui présente une dispersion beaucoup plus homogène du fluide issu du jet. En somme, le taux de dilution du panache des avions dans l'atmosphère dans le régime jet est fortement dépendant des caractéristiques de la turbulence du jet en sortie de tuyère et du fluide environnant.

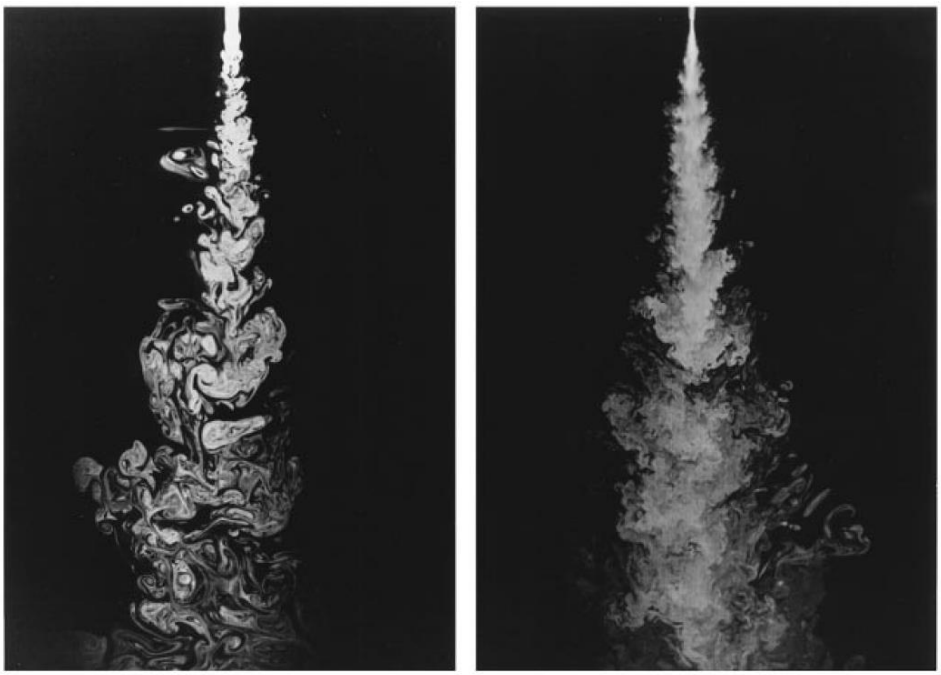

Figure 6 : Visualisation du plan de symétrie d'une interaction jet circulaire-fluide à des niveaux de turbulence différents. (À gauche) Re $\approx 2{,}5 \cdot 10^3$. (À droite) Re $\approx 10^4$.

Source : [*Dimotakis*, 2000]

Les mesures expérimentales de *Ricou et Spalding* [1961] montrent que les mécanismes de dispersion dans les premiers instants du panache sont en outre impactés par la température

élevée des gaz en sortie de moteur. Les écarts importants de température ont pour effet d'amplifier la différence de densité entre les fluides composant le jet chaud et l'air froid qui l'entoure, entraînant une augmentation de l'intensité turbulente et du taux de dilution du panache.

I.1.2.2 Le régime tourbillonnaire

Le deuxième régime de dilution du panache, appelée régime tourbillonnaire, débute lorsque les tourbillons de sillage se sont formés ($t \in [\sim 20\text{ s} ; \sim 100\text{ s}]$) (voir Figure 5). Les multiples structures tourbillonnaires naissant pendant le régime jet ont fusionné pour former des tourbillons contrarotatifs en bouts d'aile. Le régime tourbillonnaire se distingue alors par le contrôle des processus de dispersion par la dynamique tourbillonnaire, l'influence de la turbulence atmosphérique devenant alors négligeable.

Gerz et Ehret [1997] montrent que dans cette phase de développement du panache, ce dernier est entraîné dans les tourbillons de sillage qui se sont à présent suffisamment étendus pour interagir mutuellement. L'interaction des deux structures tourbillonnaires induit alors un déplacement de l'ensemble vers le bas (voir Figure 7), entraînant avec elles les effluents piégés à l'intérieur des tourbillons. Ces résultats confirment les observations d'*Hoshizaki* [1972] qui note un étirement des traînées de condensation dans la direction verticale, sous l'influence des tourbillons contrarotatifs.

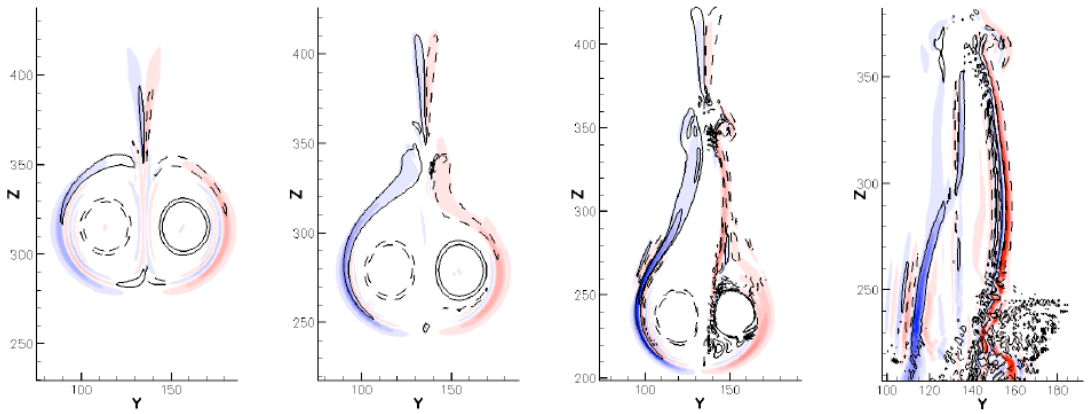

Figure 7 : Isocontours de la source de vorticité axiale au centre des tourbillons et champ de vorticité axiale généré autour. De gauche à droite : $t = 20$ s, 80 s, 100 s, 120 s.

Source : [*Paugam et al.*, 2010]

Les simulations numériques de *Paugam et al.* [2010] montrent que durant le mouvement de descente du panache entraîné, une partie des effluents est libérée de l'attraction des tourbillons de sillage. Les effluents libérés forment alors un panache dit secondaire qui retourne à l'altitude de vol de croisière pour se diffuser ensuite rapidement dans l'atmosphère ambiante. Simultanément, le panache primaire, c'est-à-dire celui encore « piégée » dans les tourbillons est transportée par ces derniers jusque dans le champ lointain. Ce phénomène peut être observé sur les traînées de condensation comme celle de la Figure 8 lorsque l'humidité relative ambiante est suffisamment élevée pour mettre en évidence les panaches primaire et secondaire. Sur la photographie, la partie droite de la traînée de condensation est plus opaque. Il s'agit du panache primaire qui est plus dense car piégé et transporté par les tourbillons de sillage. Quant à la partie gauche, elle correspond au panache secondaire contenant les effluents relâchés lors du mouvement de descente des tourbillons de sillage. Elle apparaît plus transparente et diffuse car les effluents libérés sont dispersés plus rapidement dans l'atmosphère.

Figure 8 : Photographie d'une traînée de condensation dans le régime tourbillonnaire, mettant en évidence les panaches primaire et secondaire.

Source : [Photo : Margy Lutz]

Le mécanisme de libération des effluents serait dû, selon *Paugam et al.* [2010], à la formation de vorticité induite par l'interaction des tourbillons de sillage avec la stratification de densité ambiante. Les simulations numériques réalisées par ces auteurs mettent ainsi en évidence l'apparition de structures tourbillonnaires supplémentaires en périphérie des vortex principaux, montrées dans la Figure 7. Ces dernières se déplacent vers le haut, dans le sens opposé aux vortex principaux, entraînant une partie des effluents avec elles. Selon *Gerz et al.* [1998] qui observent le même phénomène dans leur étude numérique, le panache secondaire ainsi formé représente de 10 à 30% de la masse totale du panache avant séparation.

I.1.2.3 Le régime de dispersion

Tandis que le panache secondaire se diffuse rapidement dans l'atmosphère, le panache primaire reste sous l'influence des tourbillons de sillage, qui entrent à présent dans une deuxième phase d'interaction mutuelle. Cette nouvelle étape du développement du panache, appelé régime de dispersion ($t \in [\sim 100; \sim 1000\ \mathrm{s}]$), est marquée par une destruction progressive des tourbillons de sillage par des perturbations d'origine atmosphérique.

Lewellen et Lewellen [1996], en réalisant des simulations numériques tridimensionnelles d'évolution de panache d'avion, montrent que les paramètres atmosphériques tels que le cisaillement du vent, la stratification et la turbulence perturbent le processus d'interaction mutuelle des tourbillons contrarotatifs. Ces perturbations sont à l'origine de l'apparition d'instabilités sinusoïdales appelées instabilités de Crow [*Crow*, 1970]. Ces dernières prennent la forme d'anneaux tourbillonnaires allongés (Figure 9), et occasionnent, à terme, la destruction des tourbillons marginaux. Durant cette phase d'instabilités, les structures tourbillonnaires poursuivent leur descente tout en diffusant les effluents qu'ils renferment, sous l'action de la turbulence atmosphérique et de la stratification. Cela donne naissance à une suite périodique de bouffées de panache, communément appelées « puffs » (bouffée en anglais), visibles sur la photographie de la Figure 10.

Figure 9 : Photographie de la destruction d'une traînée de condensation causée par une instabilité de Crow.

Source : [Photo : Brian Barrett]

Figure 10 : Photographie d'une traînée de condensation dans le régime de dispersion illustrant la formation de « puffs ».

Source : [Photo : Carol Clark]

Selon l'étude de *Lewellen et Lewellen* [2001], la durée des instabilités est principalement dépendant de l'intensité des perturbations atmosphériques. Les tourbillons de sillage finissent par être détruites, diffusant rapidement les effluents précédemment retenus dans l'atmosphère dans la direction transverse à l'écoulement [*Paugam et al.*, 2010]. Cela met fin au régime de dispersion.

I.1.2.4 Le régime de diffusion

Le régime de diffusion s'établit à la suite de la désagrégation complète des tourbillons de sillage. La turbulence induite par le passage de l'avion s'est alors dissipée et les processus

de dilution se poursuivent, désormais contrôlés par les caractéristiques de l'atmosphère ambiante. Ces dernières correspondent notamment à la turbulence atmosphérique, la stratification et le cisaillement du vent. Des études numériques [*Dürbeck et Gerz*, 1996] et des observations in situ [*Schlager et al.*, 1997] montrent que durant le régime de diffusion, le panache s'étend sous des conditions normales de turbulence atmosphérique avec un coefficient de diffusion horizontale de l'ordre de $20\ \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$ et un coefficient de diffusion verticale de l'ordre de $0{,}2\ \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$.

Des études numériques [*Ehret et Oertel*, 1998; *Gerz et al.*, 1998] montrent que la stratification de l'atmosphère ne joue un rôle considérable dans la diffusion des effluents que lorsque le cisaillement du vent est faible ($< 0{,}002\ \mathrm{s}^{-1}$), ce qui est rarement le cas. Pour un cisaillement du vent modéré, la concentration des effluents retrouve une valeur identique à celle du fond atmosphérique après 2 à 12 heures. Cette variabilité dépend à la fois de la turbulence atmosphérique et du cisaillement du vent. *Dürbeck et Gerz* [1996] montrent que, dans les zones présentant une turbulence pleinement développée accompagnée d'un fort cisaillement, le taux de diffusion horizontale du panache peut tripler et le taux de diffusion verticale peut être multiplié par un facteur 20 par rapport à une situation normale.

En conclusion, la dilution du panache d'un avion dans l'atmosphère est un processus extrêmement complexe. Elle peut être divisée en quatre régimes principaux, chacun étant caractérisé par le contrôle du processus de dispersion par un phénomène lié à la dynamique de l'écoulement. Dans les trois premiers régimes de dilution, les tourbillons de sillage générés par l'avion jouent un rôle déterminant. Ces structures tourbillonnaires qui évoluent simultanément avec le développement du panache, exerce une forte attraction sur celui-ci. Cette interaction, appelée jet/tourbillon, contribue ainsi pour la plus grande partie du taux de dilution.

Du point de vue de l'étude de l'état de dispersion du panache, le contrôle de la dilution par l'interaction jet/tourbillon implique que sa modélisation à un instant donné ne peut être réalisée fidèlement sans la connaissance de sa situation en amont. *Lewellen et Lewellen* [1996] constatent par exemple que les extensions verticales et horizontales du panache en champ lointain se révèlent largement tributaires des spécificités de l'aéronef qui l'a engendré. Cette thèse qui s'intéresse à la modélisation du panache en champ proche prend donc tout son sens dans la mesure où les informations récoltées seront également précieuses pour les études du champ lointain.

I.1.3 Les tourbillons de sillage

Nous avons vu que tout au long du développement du panache dans l'atmosphère ambiante, les processus de dispersion sont fortement influencés par les tourbillons de sillage générés par l'avion. Ces derniers, naissant aux extrémités des ailes (voir Figure 11), sont également appelés tourbillons marginaux. Il s'agit d'une structure turbulente matérialisée par une rotation du fluide dans les plans orthogonaux à la direction du vol. Dans cette sous partie, nous commençons par présenter les enjeux posés par la problématique des tourbillons de sillage. Puis nous décrivons les mécanismes aérodynamiques menant à la formation de ces structures tourbillonnaires. Enfin, nous détaillons les outils de modélisation permettant de caractériser leurs propriétés.

Figure 11 : Visualisation d'un tourbillon de sillage crée par le passage d'un avion léger à travers un panache de fumée rouge
Source : NASA Langley Research Center – EL – 1996-00130

I.1.3.1 Enjeux de l'étude des tourbillons de sillage

A l'origine, les turbulences de sillage induites par les tourbillons marginaux ont été essentiellement étudiées dans le cadre de la sécurité aérienne autour des aéroports. En raison de leur intensité, les tourbillons de sillage perturbent tout avion les traversant, pouvant causer des mouvements de roulis incontrôlés. Le danger survient principalement dans les phases de vol à faible marge de manœuvre, à savoir notamment pendant les phases de décollage et d'atterrissage. La durée de vie des tourbillons de sillage peut atteindre plusieurs dizaines de minutes. En conséquence, les capacités de trafic des aéroports s'en trouvent affectées. En effet, afin de prévenir les accidents, les autorités aériennes internationales imposent des distances de sécurité minimales entre deux avions consécutifs en fonction de leur poids. La relation entre le

poids de l'avion et l'intensité des tourbillons générée sera détaillée dans la partie consacrée aux mécanismes de leur formation.

Ces problématiques ont motivé de nombreux travaux de recherche sur les mécanismes de formation et de développement des tourbillons de sillage. Le but étant principalement d'acquérir les moyens permettant de réduire leur intensité et leur durée de vie [*Saffman*, 1993; *Harris et al.*, 2000; *Gerz et al.*, 2002; *Jacquin et Pantano*, 2002]. Par exemple, les constructeurs aéronautiques ont conçu des composants appelés winglets placés en bouts d'ailes (voir Figure 12). Ces ailettes verticales permettent de récupérer une partie de l'énergie tourbillonnaire, diminuant ainsi l'intensité des tourbillons générés. Cela permet entre autres de diminuer les distances de sécurité nécessaires entre les avions.

Figure 12 : Winglet au bout d'une aile d'un A350

La prise en compte de la formation des traînées de condensation s'avère également essentielle pour l'étude de la formation des traînées de condensation. En effet, la taille et le pouvoir d'attraction des tourbillons marginaux augmentent à mesure qu'ils se développent dans le sillage de l'avion. L'interaction avec les jets provenant des moteurs devient alors de plus en plus importante, ce qui influence fortement le processus de dispersion du panache (voir Figure 13). En impactant cette dispersion, les tourbillons de sillage vont exercer une influence majeure sur les propriétés de dispersion des effluents ainsi que sur les propriétés thermodynamiques du panache, qui conditionnent la formation des cristaux de glace.

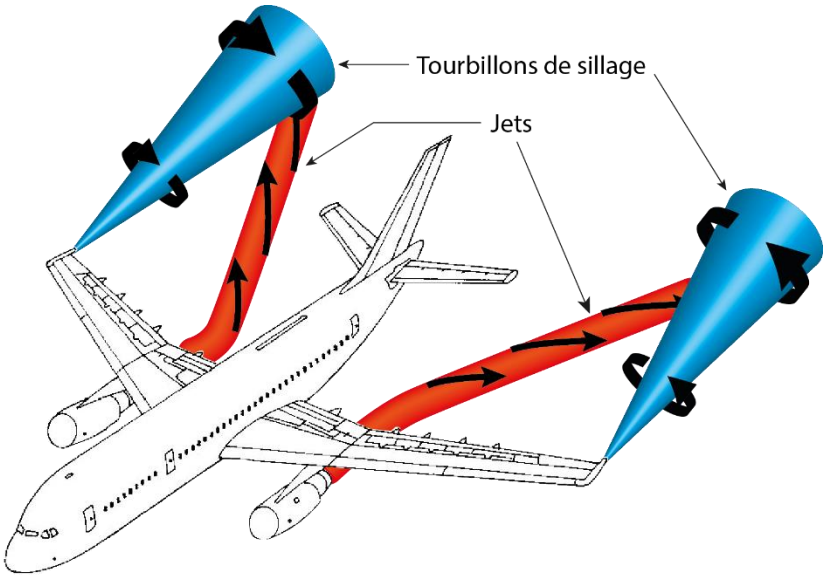

Figure 13 : Schéma simplifié décrivant l'interaction du tourbillon de sillage avec le panache.

I.1.3.2 Mécanismes de formation

La formation des tourbillons de sillage est le résultat de la déviation d'un écoulement d'air par un profil d'aile. Cette déviation produit une dépression sur l'extrados (dessus de l'aile) de même qu'une surpression sur l'intrados (dessous de l'aile), induisant un contournement de l'air autour du saumon (partie latérale de l'aile) et du bord de fuite (voir Figure 14).

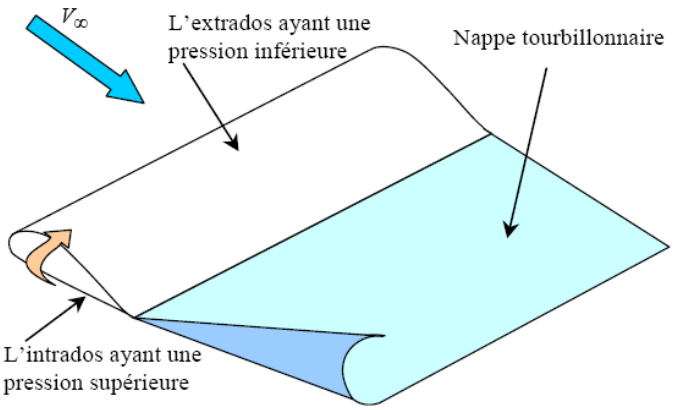

Figure 14 : Schéma simplifié de la formation d'un tourbillon marginal

Le tourbillon de sillage est donc une conséquence directe de la force permettant de sustenter l'avion, appelée portance. Un bilan de quantité de mouvement permet de montrer que le flux de quantité de mouvement du tourbillon de sillage est l'opposé de la force de portance qui l'a généré. Plaçons-nous dans le cas d'un avion en vol de croisière, c'est-à-dire en mouvement de translation horizontale uniforme. Les forces verticales se compensant, le poids

de l'avion est opposé à la force de portance. Ainsi, le flux de quantité de mouvement du tourbillon de sillage généré par l'avion est égal à son poids. L'intensité d'un tourbillon de sillage est donc proportionnelle au poids de l'avion qui le génère. La puissance d'un tourbillon de sillage représente alors environ un tiers de la puissance du moteur, permettant de compenser l'attraction terrestre. Les deux tiers restant étant dédié à la propulsion de l'avion.

I.1.3.3 Caractérisation

Comme indiqué dans les paragraphes précédents, les tourbillons de sillage représentent, au-delà des problématiques de sécurité aérienne, un sujet essentiel dans l'étude de la formation des traînées de condensation. Afin de pouvoir les étudier, nous détaillons dans le paragraphe suivant les principaux outils permettant de les caractériser et de les comparer. Pour cela, nous définissons un repère (O, x, y, z) ayant pour origine le centre de gravité de l'avion. Les axes de ce repère correspondent respectivement à la direction du mouvement de l'avion, à la profondeur et à l'altitude.

Du point de vue de la structure de l'écoulement, les tourbillons de sillage sont caractérisés par un mouvement de rotation, en bloc, de l'air autour d'un point central fixe situé en aval du bout d'aile [*Gerz et al.*, 2002]. La vitesse tangentielle $v_\theta = \sqrt{v_y^2 + v_z^2}$ apparaît de ce fait comme la variable naturelle permettant de caractériser cet écoulement tourbillonnaire. Au point $M(x, y, z)$, elle correspond à la composante de la vitesse tangente au cercle de rayon $r = \sqrt{y^2 + z^2}$, dans le plan normal à la direction de déplacement de l'avion. Nous introduisons ici un repère polaire local (O', r, θ), facilitant la description du tourbillon de sillage dans ce plan. L'origine O' du repère correspond au point fixe central du tourbillon, r représente la distance radiale $r = \|\overrightarrow{O'M}\|$ et θ l'angle $(\overrightarrow{O'y}, \overrightarrow{O'M})$(voir Figure 15). Dans ce repère, le tourbillon de sillage peut être défini par le tracé de son profil de vitesse tangentielle, correspondant à l'évolution de v_θ en fonction de la distance radiale (voir par exemple la Figure 16). Elle peut être décomposée en deux zones distinctes. En partant du centre du tourbillon, v_θ augmente jusqu'à atteindre un maximum, définissant la zone du noyau visqueux et le rayon visqueux r_c. Dans une situation idéale, le noyau visqueux correspond à la région dans laquelle le fluide est en rotation solide autour de l'axe central. La zone extérieure ($r > r_c$) correspond à une zone de relaxation dans laquelle la vitesse tangentielle diminue progressivement jusqu'à atteindre celle de l'écoulement ambiant.

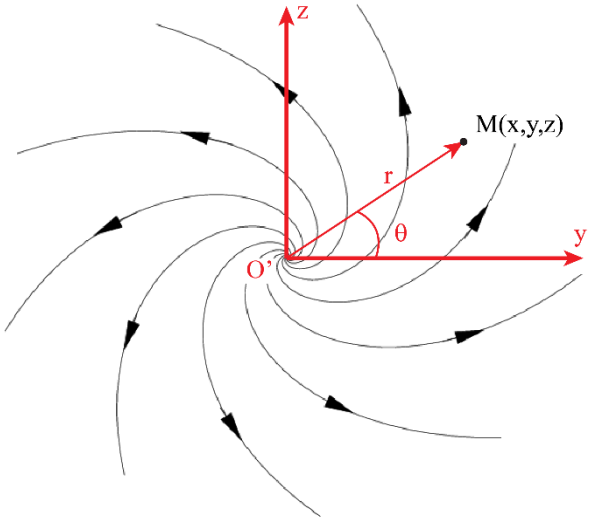

Figure 15 : Schématisation du repère polaire local dans un plan transversal contenant le tourbillon de sillage.

Concernant la force du tourbillon, son intensité locale peut être caractérisée par la vorticité axiale $\omega_x = \overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{v} \cdot \overrightarrow{e_x} = \partial v_z/\partial y - \partial v_y/\partial z$, mesurant la vitesse angulaire locale du fluide. Son intégration sur l'ensemble du tourbillon fournit une évaluation de son intensité globale :

$$\Gamma = \oint v_\theta \mathrm{d}s = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} \omega_x(r,\theta)\, r\, \mathrm{d}r\, \mathrm{d}\theta \qquad \text{(I.1.1)}$$

Γ peut être comparée à la circulation théorique Γ_0, correspondant à la circulation d'un des deux tourbillons générés par l'avion en vol de croisière, déduite de la portance :

$$\Gamma_0 = \frac{Mg}{\rho b_0 V} \qquad \text{(I.1.2)}$$

Avec

- M la masse de l'avion
- g la norme de l'accélération de la pesanteur
- b_0 la distance initiale séparant les deux tourbillons marginaux, à savoir l'envergure de l'avion.

Γ_0 représente la circulation produite par la moitié d'un avion réel, c'est-à-dire en incluant tous ses constituants (fuselage, empennages, etc.). Dans les simulations numériques, cela sert de référence pour évaluer la circulation d'un tourbillon de sillage simulé.

Il existe également un autre critère permettant de caractériser le tourbillon de sillage qui consiste à évaluer l'évolution de son expansion spatiale au cours de son développement. En effet, la taille du tourbillon augmente progressivement dans le sillage de l'avion, correspondant à un étalement de sa circulation dans le plan transversal. Cette taille peut être définie géométriquement comme le diamètre du disque renfermant 99% de la circulation totale du tourbillon. En résumé, un tourbillon de sillage est caractérisé aussi bien par ses propriétés dans le plan transversal à chaque instant, que par son expansion dans le sillage de l'avion en fonction du temps.

Dans la littérature, un certain nombre de modèles ont été élaborés dans le but de reproduire le champ de vitesse tangentielle créé par la déviation de l'air par une aile. Parmi ceux-ci, nous pouvons citer les deux modèles les plus fréquemment utilisés, à savoir le modèle de Rankine et celui de Lamb-Oseen. Nous donnons dans la suite l'expression de leur vitesse tangentielle.

Pour le modèle de Rankine, elle s'écrit :

$$v_\theta(r) = \frac{\Gamma_0}{2\pi r_c}\frac{r}{r_c} \quad \text{si } |r| < r_c \tag{I.1.3}$$

$$v_\theta(r) = \frac{\Gamma_0}{2\pi r} \quad \text{si } |r| > r_c \tag{I.1.4}$$

Pour le modèle de Lamb-Oseen [*Lamb*, 1932, p592, §334a], on a :

$$v_\theta(r) = \frac{\Gamma_0}{2\pi r}\left[1 - \exp\left(-\left(\frac{r}{r_c}\right)^2\right)\right] \tag{I.1.5}$$

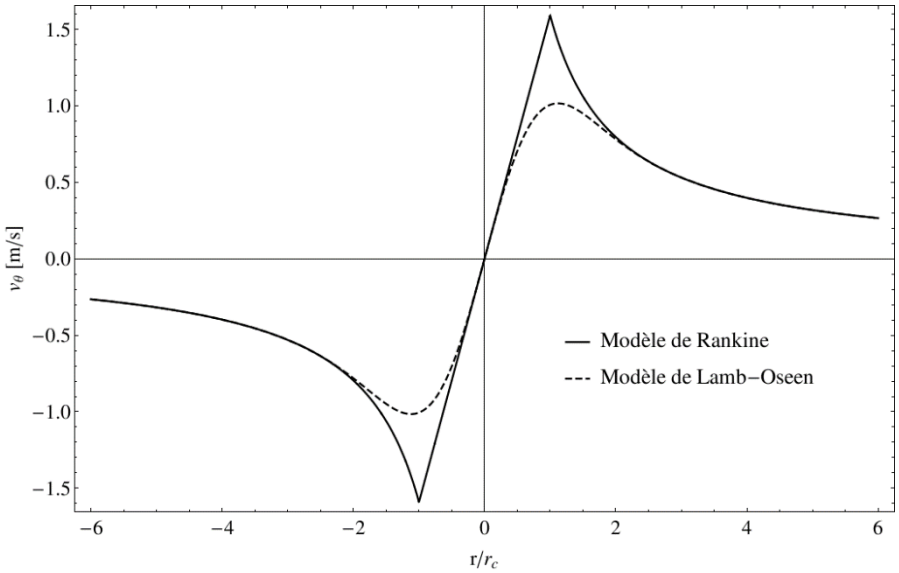

Figure 16 : Profils de vitesse tangentielle des tourbillons de Rankine et de Lamb-Oseen avec $\Gamma_0 = 10\ \mathrm{m^2s^{-1}}$ et $r_c = 1$ m

Le tourbillon de Rankine décrit par les équations (I.1.3) et (I.1.4) est un tourbillon idéal faisant intervenir un cœur de vorticité de dimension finie. C'est-à-dire que le noyau visqueux ($r < r_c$) est constitué d'une vorticité constante $\Gamma_0/(\pi r_c^2)$, tandis que l'écoulement extérieur ($r > r_c$) est irrotationnel. L'utilisation de ce modèle découle de sa simplicité. Toutefois, ce modèle est peu réaliste en raison de la discontinuité de son profil de vorticité, incompatible avec la présence de viscosité dans un tourbillon de sillage réel.

Le tourbillon de Lamb-Oseen (voir Figure 16) décrit par l'équation (I.1.5), améliore la fidélité de description du tourbillon de sillage en introduisant un profil de vorticité gaussien $\Gamma_0/(\pi r_c^2)\exp(r^2/r_c^2)$. Ce modèle est très fréquemment utilisé dans la simulation des tourbillons de sillage, en y ajoutant une loi de diffusion visqueuse $r_c^2(t) = 4\nu t$, où ν est la viscosité cinématique du fluide. Ceci permet de décrire une diffusion réaliste du tourbillon de sillage dans le temps. Enfin, le modèle de Lamb-Oseen possède l'avantage d'être une solution de l'équation de Navier-Stokes.

Les modèles de tourbillon de sillage présentent ainsi l'intérêt d'être commodément utilisables comme données d'entrée d'un calcul, permettant de s'affranchir de la simulation de leur formation [*Gerz et Ehret*, 1997; *Paoli et al.*, 2013]. Toutefois, ils ne permettent pas par exemple d'étudier l'influence des spécificités géométriques d'un profil d'aile sur les tourbillons de sillage qu'il forme. Les caractéristiques des tourbillons générés seront en effet uniques selon les différentes configurations possibles de l'aile (forme géométrique, angle d'attaque, présence

de winglet, vitesse de l'écoulement, etc.). Ainsi, l'utilisation de ces modèles de tourbillons de sillage ne sera pas suffisante si l'on souhaite par exemple étudier l'influence du type d'avion sur le processus de formation des traînées de condensation. Les variations engendrées sur les caractéristiques des tourbillons de sillage vont conduire à une modification des concentrations des effluents et de la température dans le panache dû à des interactions jet/tourbillon différentes. Cela aboutira, in fine, à des propriétés de traînées de condensation différentes.

I.1.4 La dilution du panache

Comme nous l'avons vu, la dispersion des effluents dans le sillage d'un avion s'effectue selon un processus dynamique tridimensionnel complexe impliquant des interactions entre le jet, les tourbillons de sillage et l'atmosphère ambiante. Cependant, l'état de développement du panache peut être caractérisé de manière simple par une grandeur mesurant son niveau de dispersion global dans l'atmosphère. La caractérisation de la dispersion des effluents, également appelé la dilution du panache, fournit alors un outil précieux pour situer son état de dispersion.

Cette grandeur est appelée le taux de dilution et mesure à un instant donné la masse d'air ambiant qui est mélangée aux effluents issus de la combustion du carburant, pour former le panache. Elle est donc définit par :

$$R_{pan} = \frac{m_{pan}}{m_{car}} \tag{I.1.6}$$

Avec m_{pan} la masse du panache et m_{car} la masse de carburant consommée. R_{pan} augmente donc à mesure que le panache se dilue dans l'atmosphère.

Dans le but de déterminer R_{pan} à partir de données mesurables en vol, *Schumann et al.* [1998] montrent qu'il peut être estimé à partir de l'écart entre la température du panache et celle de l'atmosphère ambiante ΔT, ou encore, à partir du diamètre du panache D.

$$R_{pan} = \frac{c_p\,\Delta T}{Q_T} = \frac{\pi\,\rho\,V\,D^2}{4\,\dot{m}_{car}} \tag{I.1.7}$$

Avec :

- c_p la capacité thermique à pression constante des gaz dans le panache ;

- Q_T le pouvoir calorifique chauffant du carburant ;
- ρ la masse volumique du panache ;
- $\dot{m}_{car}$ la consommation massique du carburant.

Q_T représente une partie du pouvoir calorifique Q du carburant. Elle correspond à l'énergie thermique dégagée par la combustion. La partie restante, appelée pouvoir calorifique effectif du carburant Q_p, correspond à celle transformée en énergie mécanique, permettant de propulser l'avion. Nous pouvons donc écrire :

$$Q_T = Q - Q_p \tag{I.1.8}$$

Le pouvoir calorifique du kérosène vaut $Q = (43{,}2 \pm 0{,}2) \cdot 10^6\ \mathrm{J \cdot kg^{-1}}$ pour le kérosène Jet A-1 classique, utilisé dans les avions commerciaux. Q_p peut être calculé en connaissant l'efficacité de propulsion η selon :

$$Q_p = \eta Q \tag{I.1.9}$$

L'efficacité de propulsion est propre à chaque moteur, et dépend également du régime de celui-ci. Elle peut être déduite des paramètres du moteur (voir Annexe 1).

Pour les moteurs modernes, il est usuel de prendre $\eta \approx 0{,}3$ en régime de croisière [*Schumann et al.*, 1998]. En combinant les relations (I.1.8) et (I.1.9), Q_T se calcule comme :

$$Q_T = (1 - \eta)Q \tag{I.1.10}$$

Le calcul du taux de dilution du panache à partir des températures s'écrit alors :

$$R_{pan} = \frac{c_p\, \Delta T}{(1 - \eta)Q} \tag{I.1.11}$$

L'utilisation du taux de dilution pour caractériser un panache est intéressante car elle renvoie des valeurs identiques à un instant donné pour des panaches produits par des avions différents. Autrement dit, le taux de dilution permet de caractériser un panache, indépendamment de l'avion dont il est issu. Cette propriété en fait un outil de choix pour situer l'état de dispersion d'un panache quelconque.

Une autre méthode permettant de caractériser la dispersion des effluents consiste à évaluer le facteur de dilution d à partir de la concentration d'une espèce du panache. d resprésente la concentration de l'espèce à un instant donné dans le panache, par rapport à sa concentration initiale à la sortie de la tuyère. Ainsi, le facteur de dilution d'une espèce i est défini par :

$$d = \frac{m_{pan}^{i} - m_{amb}^{i}}{m_{mot}^{i} - m_{amb}^{i}} \tag{I.1.12}$$

Avec :

- m_{pan}^{i} la concentration de l'espèce i dans le panache à l'instant t ;
- m_{amb}^{i} la concentration de l'espèce i dans l'air ambiant ;
- m_{mot}^{i} la concentration de l'espèce i en sortie de tuyère.

Contrairement au taux de dilution, le facteur de dilution diminue à mesure que le panache se dilue dans l'atmosphère.

Bien qu'extrêmement simple à évaluer, cette grandeur présente l'inconvénient de dépendre de la richesse dans la chambre de combustion et du taux de dilution du moteur. La richesse correspond au rapport de mélange entre le comburant, ici l'air, et le carburant. Quant au taux de dilution du moteur, il s'agit du rapport entre les débits primaire et secondaire en sortie du moteur pour les réacteurs double flux équipant les avions modernes. Or la richesse et le taux de dilution sont des caractéristiques spécifiques au moteur et au régime de vol. Le facteur de dilution ne permet donc pas de comparer rigoureusement deux panaches d'avion quelconques.

Le facteur et le taux de dilution d'un panache sont liés par la relation suivante :

$$d = \frac{R_{pan,sor}}{R_{pan}} \tag{I.1.13}$$

Avec $R_{pan,sor}$ le taux de dilution du panache en sortie de moteur qui vaut pour les turbopropulseurs d'avion entre 50 et 70.

La Figure 17 reporte les taux de dilution déduits de mesures in situ sur plus de 70 panaches différents issus d'une large variété d'avions rencontrés dans l'espace aérien international. À partir de ces mesures, une expression empirique donnant l'évolution du taux de dilution en fonction du temps a été établie par *Schumann et al.* [1998] :

$$R_a = 7000\left(\frac{t}{t_0}\right)^{0,8}, \quad t_0 = 1\ \mathrm{s} \tag{I.1.14}$$

Cette interpolation numérique apparaît sur la Figure 17 en point-traitillés et sert de référence dans l'étude des panaches d'avion. Selon l'auteur, l'écart maximal relevé par rapport à cette moyenne pour une mesure individuelle de taux de dilution est d'un facteur 5. Nous remarquons que les différences par rapport aux valeurs données par l'interpolation augmentent régulièrement avec l'âge du panache. D'après *Schumann et al.* [1998], ceci est notamment dû à la difficulté à localiser les pics de concentration dans un panache âgé en raison de son étirement spatial.

Concernant l'influence des conditions météorologiques sur la dilution, notamment dans le régime de diffusion ($t > 1000$ s), cette interpolation est valable pour une turbulence atmosphérique et un cisaillement du vent faibles, ainsi qu'une stratification stable. Il s'agit d'une raison pratique, des conditions plus extrêmes ne permettent en effet pas de mettre en œuvre les mesures in situ. Lorsque les conditions atmosphériques sont plus agitées, par exemple avec un cisaillement du vent plus important, il faut s'attendre à des taux de dispersion du panache plus importants. Les taux de dilution résultant seront alors considérablement plus élevés.

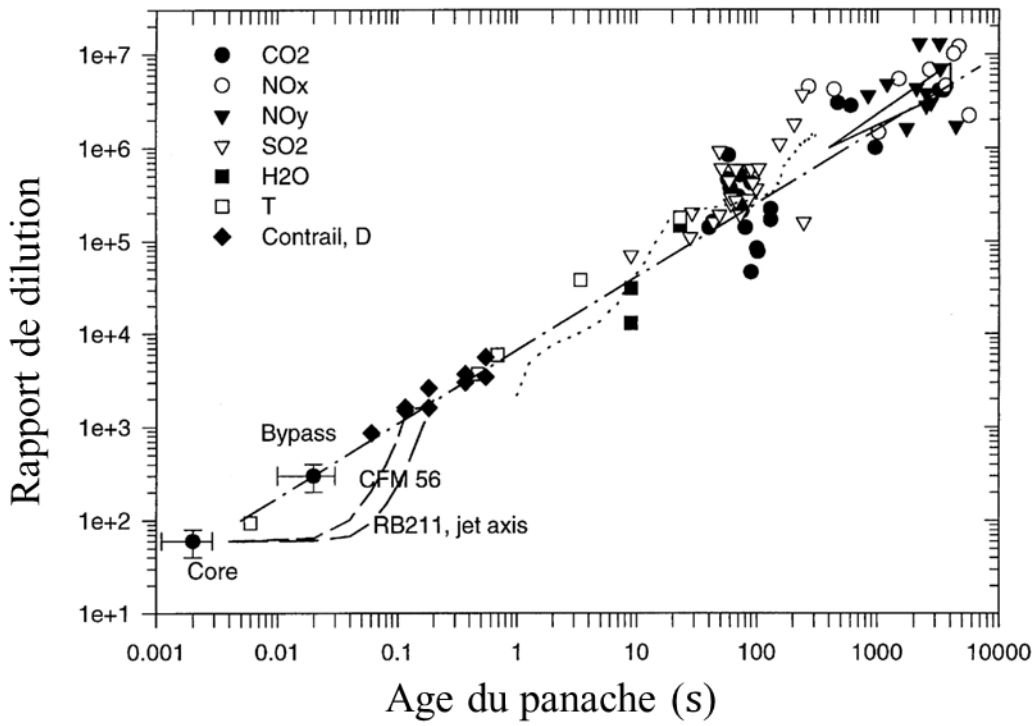

Figure 17 : Taux de dilution d'un échantillon de panaches obtenus à partir de différents paramètres. La droite en traitillés correspond à l'interpolation des mesures donnée par *Schumann et al.* [1998].

L'interpolation de *Schumann et al.* [1998] est très utilisée dans les travaux requérant la modélisation d'un panache d'avion. Elle permet par exemple en première approximation de s'affranchir de simuler le développement d'un panache et d'utiliser à la place un panache modélisé à l'aide de ce taux de dilution moyen. Une autre utilisation de cette interpolation dans les travaux de modélisation consiste à comparer les valeurs de taux de dilution obtenues par les simulations numériques afin de vérifier la qualité de la simulation des processus de dispersion dans le panache. Sur la Figure 17, les résultats obtenus par les études numériques de *Gerz et Ehret* [1997] (la courbe en pointillés) se trouvent ainsi en accord avec l'interpolation numérique de *Schumann et al.* [1998].

Les deux courbes en traitillés apparaissant à $t < 1$ s sont issues des travaux de simulation numérique de *Garnier et al.* [1997a] effectués pour deux types de moteurs : le CFM56 et le RB211. Elles montrent un écart notable avec les taux de dilution issus de l'interpolation. La raison de cette différence réside dans le fait qu'il s'agit de taux de dilution calculés numériquement au centre du jet. Les auteurs indiquent qu'au début du régime jet, lorsque les concentrations demeurent encore inhomogènes dans un plan transverse du panache, les taux de dilution relevés au centre du panache sont inférieurs à ceux relevés à sa périphérie.

En effet, lorsque la turbulence du jet n'est pas encore pleinement développée dans tout le jet, l'intensité turbulente, et donc les taux de dispersion à la frontière du jet sont plus élevés qu'au centre du jet, du fait de la présence d'un cisaillement plus important [*Dimotakis*, 2000]. En somme, d'après *Schumann et al.* [1998], le taux de dilution local est une fonction croissante avec la distance radiale à partir du centre du jet. Il est donc normal que les taux de dilution calculés au centre du jet soit inférieur au taux de dilution moyen donné par l'interpolation numérique.

En résumé, bien que les mécanismes de dispersion d'un panache dans l'atmosphère soient issus d'un processus complexe, son état de dilution à un instant donné peut être caractérisé simplement par la valeur du taux de dilution. Ce dernier peut être évalué à partir des écarts de température entre le panache et l'air ambiant ou encore à partir du diamètre du panache. Il présente alors l'avantage de donner des valeurs indépendantes de l'avion qui produit le panache, ce qui permet de situer l'état de dispersion d'un panache quelconque.

L'interpolation numérique des taux de dilution de *Schumann et al.* [1998] constitue une référence pour caractériser la dilution des panaches d'avion. Dans cette thèse, elle sera très utile pour la vérification de la bonne simulation de la dilution du panache, par la comparaison des taux de dilution obtenus.

I.2 Transformations chimiques dans le panache

La composition chimique des panaches d'avion joue un rôle essentiel dans le processus de formation des traînées de condensation. Elle conditionne évidemment le processus de condensation de la vapeur d'eau sur des noyaux de nucléation pour former des cristaux de glace mais intervient également dans divers processus en amont, qui seront détaillés dans la partie suivante consacrée aux processus microphysiques. L'étude des transformations chimiques dans le panache est donc indispensable pour comprendre l'ensemble des mécanismes intervenant dans la formation des traînées de condensation.

Initialement constitué des produits de combustion du carburant avec l'air, le panache intègre rapidement les constituants de l'air ambiant à mesure qu'il se dilue dans l'atmosphère. La présence de tous ces composés déclenche alors de nombreuses réactions chimiques qui modifient continuellement la composition du panache.

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'évolution chimique du panache pendant son développement dans le sillage de l'avion. Dans un premier temps, nous présentons les sources déterminant la composition initiale du panache, à savoir le carburant utilisé et les constituants de l'air ambiant. Nous détaillons ensuite, regroupés par famille de composés (carbonées, azotées, hydroxylées et soufrées), les principales espèces présentes dans le panache au cours de son développement et leur mécanismes de formation.

I.2.1 Les constituants chimiques du carburant et de la tropopause

Dans l'aviation civile, le carburant utilisé par les avions commerciaux est le kérosène. Ce dernier représente en réalité une famille de mélanges d'hydrocarbures composées d'alcanes ($\mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}$) où n est compris entre 10 et 16. Parmi eux, le kérosène surnommé Jet A-1, dont le rapport carbone/hydrogène moyen est de $1{:}\,1{,}9$, est le plus fréquemment utilisé. Le choix de ce carburant est principalement motivé par son fort pouvoir calorifique et ses propriétés aux basses températures. Son pouvoir calorifique, c'est-à-dire l'énergie libérée par la combustion d'un kilogramme de combustible, vaut ainsi $Q = 43{,}15\ \mathrm{MJ} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$. À titre de comparaison, le pouvoir calorifique du bois s'élève à seulement $Q = 15\ \mathrm{MJ} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$. L'utilisation d'un carburant à haut pouvoir calorifique tel que le kérosène autorise de fait une plus grande autonomie à masse embarquée égale par rapport à d'autres combustibles. Quant à ses propriétés aux basses

températures, la présence d'additifs antigivrage lui confère un point de congélation très bas ($-47°C$ pour le jet A-1), indispensable au regard des altitudes de vol des avions à réaction.

Comme nous l'avons vu dans la partie I.1.1, les avions commerciaux évoluent en régime de croisière dans la tropopause, correspondant à la couche de transition entre la haute troposphère et la basse stratosphère, à une altitude moyenne de 11 km. La pression moyenne dans la tropopause est de $P \approx 24000$ Pa, soit plus de quatre fois moins élevée qu'au niveau de la mer. Cela signifie que les quantités de gaz composant la troposphère sont également bien inférieures à celles au sol. De manière générale, la pression atmosphérique est continument décroissante avec l'altitude. À titre d'information, indiquons simplement que les $9/10^{\text{èmes}}$ de la masse atmosphérique se situent en dessous de 16 km. Concernant la composition de la tropopause, elle est constituée principalement d'air sec à plus de 98%, le reste correspondant à de la vapeur d'eau et d'autres impuretés. L'air sec est composé principalement d'azote (78%), d'oxygène (21%), de dioxyde de carbone et de gaz rare comme l'argon. Quant à la vapeur d'eau, elle est présente en quantités variables, selon les conditions météorologiques. Enfin, les impuretés correspondent aux polluants qui peuvent être d'origine naturelle (éruption volcanique, végétation…) ou anthropique (transport, industrie…). Parmi les polluants dits primaires, c'est-à-dire directement émis dans l'air, on recense entre autres des oxydes de carbone, de soufre et d'azote, des composés organiques volatiles, des particules solides et des métaux lourds. Sont également présents des espèces dites secondaires, c'est-à-dire formées par transformation chimique de certains polluants primaires, comme l'ozone. Ce dernier est ainsi issu de la transformation photochimique des composés carbonés et des composés azotés sous l'action du rayonnement solaire. Les émissions de plus en plus importantes des polluants ont pour conséquence une augmentation de la concentration d'ozone troposphérique.

Les émissions des avions sont issues de la combustion du kérosène avec l'air ambiant, formant ainsi le panache initial. Pour bien comprendre, plaçons-nous dans un premier temps dans le cas idéal d'une combustion stœchiométrique et complète d'un kérosène composé uniquement de l'hydrocarbure $C_{12}H_{26}$. Une combustion stœchiométrique signifie simplement que le combustible et le comburant sont dans des proportions stœchiométriques, c'est-à-dire qu'une réaction totale consomme tous les réactifs. Une combustion complète signifie que les produits formés ne peuvent plus être oxydés par une réaction de combustion. Le comburant étant de l'air, la réaction de combustion s'écrit :

$$C_{12}H_{26} + \frac{37}{2}O_2 + \frac{139}{2}N_2 \rightarrow 12\ CO_2 + 13\ H_2O + \frac{139}{2}N_2 \qquad (I.2.1)$$

La combustion complète du kérosène produit donc du dioxyde de carbone (CO_2) et de la vapeur d'eau (H_2O). Les proportions indiquées dans l'équation (I.2.1) correspondent à des quantités de matière. En convertissant en masse, cela signifie que la combustion complète d'un kilogramme de ce kérosène consommerait 17 kg d'air et produirait 3,1 kg de CO_2 et 1,3 kg de vapeur d'eau. Cela permet d'introduire la notion d'indice d'émission d'une espèce IE_i, très utilisée dans le domaine des sciences de l'environnement. Il est défini comme la masse m_i de l'espèce E_i émise par la combustion d'une masse m_{carb} de carburant :

$$IE_i = \frac{m_i}{m_{carb}} \qquad (I.2.2)$$

En réalité, la combustion du kérosène dans les moteurs d'avion n'est ni stœchiométrique, ni complète. En effet, pour des raisons d'efficacité de combustion, la proportion entre carburant et comburant correspond à un mélange pauvre, c'est-à-dire avec un excès d'air par rapport aux quantités d'hydrocarbures. En outre, la réaction est incomplète, c'est-à-dire qu'elle ne produit pas seulement du CO_2 et du H_2O mais un certain nombre d'autres d'espèces encore oxydables. Ces dernières sont données dans le Tableau 1 qui recense les espèces dites primaires, c'est-à-dire présentes en sortie de tuyère, avec leur indice d'émission respectif. Les espèces issues de la combustion incomplète correspondent principalement au monoxyde de carbone (CO), aux hydrocarbures imbrulés (HC) et aux suies. Elles sont ainsi présentes en sortie de tuyère malgré un mélange pauvre dans la chambre de combustion. En effet, bien que l'air soit en excès, ce dernier et le carburant ne sont pas prémélangés avant la combustion, le mélange n'est donc pas parfait. Il en résulte alors des zones riches dans lesquelles la combustion est incomplète, d'où l'émission de produits non totalement oxydés.

Tableau 1 : Bilan des émissions d'espèces primaires dans l'atmosphère par l'aviation [*Lee et al.*, 2010]

Espèces	Indice d'émission, $g \cdot kg^{-1}$ (plage)	Taux d'émission (2004), $Tg \cdot an^{-1}$	Base de comparaison, $Tg \cdot an^{-1}$	Source de la base de comparaison
Kérosène		224 (180-224)	3817	Production totale de pétrole
CO_2	3160	700	26500	Emission totale de CO_2 d'origine anthropique
H_2O	1240	275	525000	Evaporation de H_2O de la surface terrestre
NO_x	14 (12-17)	3	170 ± 20	Emission totale

Suie	0,025 (0,01-0,05)	0,006	12	Combustion d'énergie fossile et de biomasse
SO_2	0,8 (0,6-1,0)	0,18	130	Combustion d'énergie fossile
CO	3 (2-3)	0,67	1500	Emission totale d'origine anthropique
HC	0,4 (0,1-0,6)	0,09	90	Emission totale d'origine anthropique

Une première analyse du Tableau 1 montre que les espèces primaires majoritaires correspondent bien entendu au dioxyde de carbone (CO_2) et à la vapeur d'eau (H_2O). Toutefois, les autres espèces émises ne peuvent être négligées. Même en quantités faibles, elles constituent d'importantes sources de pollution atmosphérique. Nous détaillerons dans les paragraphes suivants leur impact sur l'environnement. Le Tableau 1 fournit également les émissions totales d'origine anthropique afin de servir de base de comparaison. Nous pouvons ainsi remarquer que les quantités de polluants émises par l'aviation restent relativement faibles, le CO_2 ne représentant par exemple que 2,6% de l'émission total. Toutefois, il est nécessaire de préciser que les émissions dues à l'aviation présentent la spécificité d'être la principale source de pollution en haute troposphère et basse stratosphère.

Enfin, le Tableau 1 révèle la présence d'espèces supplémentaires, en plus de celles issues de la combustion incomplète. Ces composés correspondent aux espèces azotées (NOx) et au dioxyde de soufre (SO_2), qui font donc également partie du panache initial. Nous verrons que ce dernier joue par ailleurs un rôle majeur dans les processus microphysiques conduisant à la formation de traînées de condensation. Dans les paragraphes suivants, nous détaillons par famille d'espèces l'évolution chimique de ces composés dans le panache au cours de son développement.

I.2.2 Les espèces carbonées

Les espèces organiques du panache correspondent aux composés contenant des atomes de carbones. Le Tableau 1 montre ainsi que le CO_2 est le composé organique majoritaire issu de la combustion du kérosène, avec un indice d'émission moyen de $3160\ \mathrm{g \cdot kg^{-1}}$. Les autres, produits en quantité minoritaire, proviennent de la combustion incomplète du kérosène et correspondent essentiellement au CO, aux HC et aux particules de suie.

Les HC correspondent à la famille de composés organiques constitués uniquement d'atomes de carbone (C) et d'hydrogène (H). Plusieurs campagnes de mesures expérimentales ont été réalisées dans le but de déterminer le type et la quantité des HC émis par les moteurs

aéronautiques. Peu d'entre elles ont été menées dans des conditions réelles de vol en raison de la difficulté de mise en œuvre [*F. Slemr*, 2001]. Ainsi, la majorité des campagnes expérimentales de mesures de concentration des HC en sortie de turboréacteur ont été conduites ex situ [*Anderson et al.*, 2006; *Knighton et al.*, 2007]. Elles mettent en évidence la présence d'alcanes et d'alcènes dont les chaînes carbonées s'étendent majoritairement de deux à six carbones. Sont également détectés des composés aromatiques monocycliques tels que le benzène (C_6H_6), le toluène (C_7H_8) et le styrène (C_8H_8) ainsi que hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) comme le naphtalène ($C_{10}H_8$). Les hydrocarbures réagissent principalement avec les composés du panache contenant de l'oxygène pour former des dérivés tels que des aldéhydes, des alcools ou des acides carboxyliques dont la présence est également détectée dans le panache.

Concernant leur concentration dans le panache, toutes les études montrent que les quantités des HC émises dépendent fortement de la puissance du moteur. Les indices d'émission ont ainsi tendance à diminuer lorsque la poussée augmente. Des données plus précises sur les indices d'émissions sont toutefois difficiles à obtenir car très dépendantes du type de moteur.

Le moteur émet également des éléments carbonés sous forme de particules solides non volatiles, appelées des suies. Ce sont des agrégats de particules primaires constituées d'un mélange de carbone graphitique, et de composés organiques (voir Figure 18). Les particules primaires quasi sphériques sont formées durant la combustion du kérosène, la majorité présentant des diamètres variant de 30 à 60 nm [*Delhaye et al.*, 2007]. Ces particules s'agrègent par la suite pour former des agrégats pouvant atteindre un diamètre équivalent de 100 nm. Le diamètre équivalent étant défini comme le diamètre qu'aurait la sphère de volume équivalent à celui d'une particule de suie.

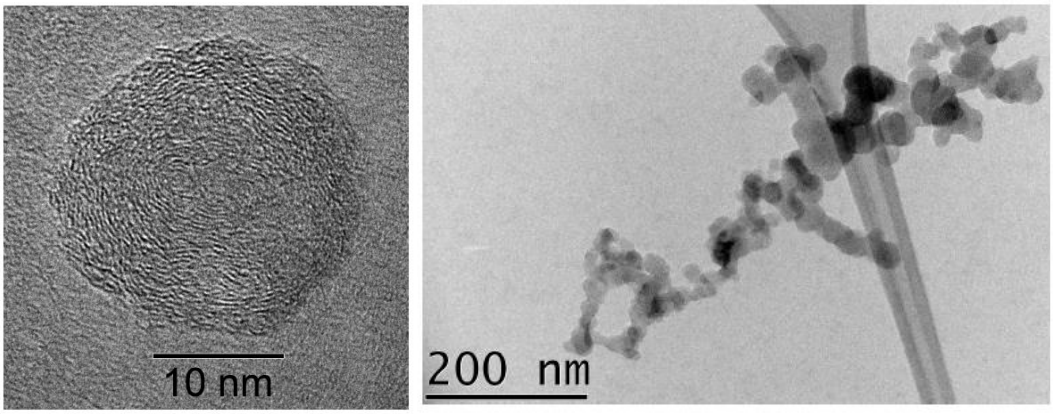

Figure 18 : (À gauche) Structure d'une particule primaire de suie et (à droite) structure d'un agrégat de suie, observées par Microscopie Electronique en Transmission (MET).

Source : [*Lottin*, 2013]

L'indice d'émission des suies aéronautiques varie entre $0{,}01$ et $0{,}05\ \mathrm{g \cdot kg^{-1}}$ (voir Tableau 1), suivant le moteur utilisé et les conditions de vol. Par exemple, les moteurs les plus modernes émettent moins de suies, notamment grâce à une meilleure conception du dispositif de combustion, comme l'amélioration de la qualité du mélange dans la chambre de combustion. Les quantités de suie émises sont les plus faibles en régime de croisière, avec un indice d'émission moyen de $0{,}025\ \mathrm{g \cdot kg^{-1}}$ (voir Tableau 1). Les particules étant solides, leur quantité peut également être mesurée en termes de nombre. Les moteurs d'avion modernes émettent ainsi entre 10^{14} et 10^{15} particules de suie par kilogramme de carburant brulé [*Petzold et al.*, 1999].

Les composés organiques jouent un rôle majeur dans l'impact environnemental de l'aviation. Le CO_2 fait ainsi parti des six gaz à effet de serre règlementés par l'Organisation Internationale de l'Aviation Civile (OACI), chargée de définir une politique de réduction des émissions dues à l'aviation. Les particules de suie, bien que ne figurant pas sur la liste, agissent également sur le réchauffement climatique mais de manière indirecte à travers la formation de traînées de condensation (voir la section I.3.2I.2.4). D'autre part, en tant que particules fines, elles ont un effet sur la santé en entraînant une augmentation des pathologies respiratoires. Quant aux impacts du CO et des HC, elles agissent principalement sur la qualité de l'air aux alentours des aéroports [*Lee et al.*, 2010].

I.2.3 Les espèces azotées

Les espèces nitrées majoritaires émises par les moteurs d'avions sont le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO_2) sous forme gazeuse à hauteur de $14\ \mathrm{g} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ au total (voir Tableau 1). En raison de leur impact important sur l'environnement, que nous aborderons par la suite, un grand nombre d'études ont été menées sur les émissions relatives à l'aviation. Celles-ci comprennent aussi bien des mesures en sortie de tuyère, que des études théoriques et numériques. Par exemple, des mesures au sol par échantillonnage des effluents d'un moteur fournissent une estimation de la part de NO_2 par rapport à la quantité totale de NOx émise. La part de NO_2 est ainsi comprise entre 0 et 15% en vol de croisière selon le modèle de moteur utilisé [*Schulte et al.*, 1997]. Pour les autres régimes moteur, la part de NO_2 augmente, pouvant s'élever jusqu'à 80% à basse puissance [*Wormhoudt et al.*, 2007]. Les études de modélisation ont quant à elles permis d'élaborer des algorithmes prédictifs simples de calcul d'indice d'émission des NOx (par exemple [*DuBois et Paynter*, 2006])

L'émission d'espèces azotées dans l'atmosphère contribue notamment à la formation d'ozone (O_3) dans le panache après réaction photochimique. Les molécules NO issues des effluents primaires sont en premier lieu oxydées par les radicaux hydroperoxyles (HO_2) en NO_2. Ces derniers subissent une photolyse pour former des atomes d'oxygène (O) qui réagissent avec les molécules de dioxygène (O_2) pour former O_3 [*Lee et al.*, 2010]. Des mesures dans le panache en vol de croisière ont également détecté de petites quantités d'acide nitreux (HNO_2) et d'acide nitrique (HNO_3) [*Miller et al.*, 2003]. Ces derniers sont respectivement formés par oxydation des composés primaires NO et NO_2, par les radicaux hydroxyles (HO) présents dans le panache.

La connaissance des concentrations en espèces azotées libérées dans l'atmosphère est d'une importance considérable pour l'étude de l'impact environnemental en général. En raison de leur participation importante à la pollution engendrée par l'aviation, les émissions de NO_x font l'objet, au même titre que le CO_2, d'un processus de régulation par l'OACI. À l'échelle régionale, les NO_x prennent part à la pollution acide par dépôt sous forme de retombées sèches ou humides (pluies acides), provoquant une altération des écosystèmes et la corrosion des matériaux. Elles contribuent également à la contamination des eaux par eutrophisation, c'est-à-dire un appauvrissement du milieu aquatique dû à la prolifération d'algues dans des eaux trop chargées en nutriments. Enfin, concernant les effets sur la santé, il s'agit d'un gaz toxique et irritant qui pénètre dans les ramifications les plus fines des voies respiratoires.

L'ozone, qui est comme décrit dans le paragraphe précédent un polluant issu de l'émission des NOx, a aussi un impact important sur l'environnement. Produit dans la troposphère, il piège en effet une partie de la chaleur réémise par la Terre, et contribue de ce fait à l'effet de serre. L'ozone constitue également un agent oxydant fortement actif et très toxique. Il est de fait responsable des brouillards photochimiques, dits « smog », irritant les yeux et les voies respiratoires.

Du point de vue de la formation des traînées de condensation, *Shonija et al.* [2007] suggère que les molécules de HNO_3 présentes dans le panache pourraient contribuer, sous certaines conditions thermodynamiques, à l'activation des suies permettant la condensation de la vapeur d'eau (voir la section I.2.4). Ce processus doit toutefois encore être confirmé. Autrement, les NOx interviennent indirectement dans le processus de formation des traînées de condensation en régulant les concentrations de radicaux OH dans le panache. En effet, ces derniers sont consommés pour former du NO_2, HNO_2 et HNO_3, diminuant ainsi les réserves de OH disponibles pour la formation d'autres composés intervenant dans les processus microphysiques. Par exemple, l'appauvrissement des radicaux OH dans le panache limite l'oxydation des espèces soufrées qui jouent un rôle important dans l'activation des particules de suie.

I.2.4 Les espèces hydroxyles

Nous classons dans la catégorie des espèces hydroxyles les composés du panache contenant au moins une entité OH, c'est-à-dire un atome d'oxygène lié à un atome d'hydrogène. Hormis la vapeur d'eau, les espèces hydroxyles libérées dans l'atmosphère en sortie de tuyère sont principalement OH, HO_2 et le peroxyde d'hydrogène (H_2O_2). Parmi ces espèces, les radicaux OH sont particulièrement importants pour la chimie du panache, car ils sont impliqués dans la majorité des réactions d'oxydation des autres espèces chimiques comme les NOx ou les SOx.

Des mesures en vol permettent de calculer un indice d'émission de OH compris entre $0{,}32$ et $0{,}39\ \mathrm{g \cdot kg^{-1}}$ [*Tremmel et al.*, 1998]. Ces valeurs ont été déduites au moyen d'un modèle de dilution, à partir des mesures de concentration des espèces oxydées dans le panache. Cependant, des mesures directes au sol à la sortie d'une chambre de combustion sur un banc de mesure [*Wilson et al.*, 2004], révèlent des concentrations beaucoup plus faibles d'OH. Cette différence de concentration s'explique par le fait que la majorité des molécules OH formées

lors de la combustion est consommée dans la tuyère pour former de la vapeur d'eau et du NO_2. Ces réactions se produisent ainsi avant la libération des radicaux dans l'atmosphère comme le montre l'étude de *Böckle et al.* [1999].

Les radicaux OH jouent un rôle indirect dans le processus de formation des traînées de condensation. En effet, ils interviennent notamment dans la formation des molécules HNO_2, HNO_3 et d'acide sulfurique (H_2SO_4), qui favorisent l'activation des suies permettant la condensation de la vapeur d'eau.

I.2.5 Les espèces soufrées

La détection d'oxydes de soufre (SO_x) dans les effluents, par exemple au moyen de spectrométrie de masse in situ par *Arnold et al.* [1998], s'explique par la présence naturelle de soufre dans le carburant. Lors de la combustion du kérosène, le soufre contenu dans le carburant est principalement oxydé en dioxyde de soufre (SO_2) [*Brown et al.*, 1996]. Il s'agit du principal élément soufré émis dans l'atmosphère par les moteurs d'avions, avec un indice d'émission moyen de $0{,}8\,\mathrm{g}\cdot\mathrm{kg}^{-1}$ pour la flotte aérienne mondiale (voir Tableau 1). Notons que les carburants utilisés présentent une grande variabilité de teneur en soufre selon leur provenance et la méthode de production.

Même si les composés soufrés sont utiles aux moteurs comme agent lubrifiant, leur impact important sur la pollution atmosphérique ont conduit les autorités de régulation à imposer une étape de désulfuration en vue de réduire leurs émissions. Par exemple, les règlementations européennes imposent une limitation à 3300 ppm, c'est-à-dire que la quantité de soufre contenue dans les kérosènes utilisés dans l'Union Européenne ne doit pas dépasser 3,3 grammes par kilogramme de carburant. Le secteur du transport aérien s'oriente vers une multiplication des vols utilisant une fraction de carburants alternatifs, notamment issus de la biomasse. Ces carburants seront vraisemblablement sans teneur en soufre, ce qui devrait fortement réduire les composés soufrés des effluents.

Les composés soufrés sont très peu présents à l'état naturel dans la tropopause. Des mesures expérimentales par spectrométrie de masse [*Hunton et al.*, 2000] montrent ainsi qu'il y a une équivalence entre la quantité de composés soufrés dans le panache et la concentration de soufre dans le carburant utilisé. Autrement dit, les indices d'émission des espèces soufrées sont exclusivement déterminés par la teneur en soufre des carburants. Une petite partie du SO_2

initialement présent dans le panache se trouve oxydée en trioxyde de soufre (SO_3), et en acide sulfurique (H_2SO_4). Le premier est formé très rapidement dans le panache ($t < 5$ ms) lorsque la température diminue [*Brown et al.*, 1996]. SO_3 interagit ensuite avec H_2O pour former H_2SO_4, avec un temps caractéristique de l'ordre de 10 ms, dépendant du taux d'humidité dans le panache [*Reiner et Arnold*, 1993]. Le taux de conversion de SO_2 en SO_3 et en H_2SO_4, dépendant de la teneur en soufre du carburant, a été estimé par des simulations numériques entre 2% et 10%, selon les modèles utilisés [*Brown et al.*, 1996; *Tremmel et Schumann*, 1999]. Ces résultats sont confirmés par des mesures de concentration de SO_3 et H_2SO_4 au sol, rapportant un taux de conversion de $2{,}3 \pm 1{,}2\%$ pour une teneur en soufre de 1270 ppmm [*Katragkou et al.*, 2004; *Vancassel et al.*, 2004]. Nous retrouvons également des valeurs similaires lors de mesures en vol, relevant un taux de conversion compris entre $2{,}9 \pm 1{,}6\%$ et $3{,}3 \pm 1{,}8\%$ pour une teneur en soufre de 56 ppmm [*Curtius et al.*, 2002].

La détermination de ce taux de conversion permet de déduire les concentrations d'acide sulfurique dans le panache, qui jouent un rôle important dans les processus microphysiques entraînant la formation de traînées de condensation. D'une part, les molécules de H_2SO_4 contribuent à l'activation des particules de suie par adsorption moléculaire (voir I.2.4). D'autre part, de par sa pression de vapeur saturante très basse, H_2SO_4, en présence de vapeur d'eau, constitue le plus important précurseur d'aérosols dans le panache [*Reiner et Arnold*, 1993]. Les particules volatiles formées participent également à l'activation des particules de suie en étant collectées par ces dernières (voir I.2.4). Des mesures en vol de particules ultrafines [*Schröder et al.*, 1998] ont ainsi relevé, à teneur en soufre équivalente, une réduction nette du nombre de particules ultrafines lors de la formation de traînées de condensation. Dans ce dernier cas, les particules d'acide sulfurique formées ont été collectées par les particules de suie avant de former des cristaux de glace.

Les campagnes de mesure en vol SULFUR 1-7 [*Schumann et al.*, 2002] ont permis d'étudier l'influence de la teneur en soufre des carburants sur les quantités de particules dans le panache. Par exemple, la comparaison entre l'utilisation de deux carburants à teneur en soufre différente (170 ppm et 5500 ppm) révèle une augmentation globale du nombre de particules. Dans le cas de l'utilisation du carburant à haute teneur en soufre, les auteurs constatent une augmentation de 25% des particules de taille supérieure à 7 nm et de 50% des particules de taille supérieure à 18 nm. Ils montrent qu'elles sont essentiellement issues de deux phénomènes. D'une part de la nucléation hétérogène de l'acide sulfurique et de la vapeur d'eau

sur les suies, et surtout de la nucléation homogène de gouttelettes d'acide sulfurique, coagulant également en partie avec les suies (voir la section I.2.4) [*Schumann et al.*, 1996].

Concernant les effets sur la santé, le dioxyde de soufre est un gaz incolore, toxique et fortement irritant et pour les voies respiratoires. Il forme ainsi des brouillards entraînant une inflammation des bronches avec un spasme qui provoque une altération de la fonction respiratoire. Du point de vue de la pollution de l'environnement, les produits soufrés contribuent, à l'instar des composés azotés, aux pluies acides et au phénomène d'eutrophisation des eaux. Ils sont également responsables de la corrosion des matériaux, des noircissements et des encroûtements des bâtiments.

I.3 Processus microphysiques

Nous nous intéressons dans cette partie aux processus microphysiques à l'origine de la formation des traînées de condensation. Les processus microphysiques désignent l'ensemble des phénomènes, intervenant à une échelle microscopique, voire nanoscopique, conduisant à la formation et à la croissance de cristaux de glace dans le panache. Ces dernières sont principalement formées par la condensation de la vapeur d'eau sur des particules solides nanométriques. Ce phénomène de formation de particules sur un support préexistant s'appelle la nucléation hétérogène, à l'opposé de la nucléation homogène qui désigne la formation de particules en l'absence de support. Nous prenons en compte dans cette thèse exclusivement la nucléation hétérogène de glace car la transition de phase en l'absence de support solide nécessite le franchissement d'une barrière énergétique beaucoup plus importante [*Kärcher et al.*, 1998b]. De ce fait, en présence de particules solides pouvant constituer des noyaux de condensation, la formation de glace par nucléation hétérogène est le mode largement privilégié.

Au départ du processus de formation des traînées de condensation, la combustion du kérosène produit et libère dans l'atmosphère de nombreuses particules de suies sur lesquelles la vapeur d'eau est susceptible de se condenser. Cependant, ces suies constituées principalement de carbone sont initialement hydrophobes, c'est-à-dire que leur surface a tendance à repousser l'eau. La condensation directe de la vapeur d'eau à leur surface est donc impossible dans les conditions usuelles d'humidité rencontrées en vol de croisière [*Wyslouzil et al.*, 1994]. Les particules de suies peuvent toutefois acquérir des propriétés hydrophiles par des processus microphysiques faisant intervenir d'autres composés, elles sont alors dites activées. Parmi ces processus, l'activation des suies par les espèces soufrées présentes dans le panache est le plus susceptible de se produire. Elle sera détaillée dans la suite de cette partie.

Au sein du panache, la vapeur d'eau provient d'une part des effluents issus de la combustion du carburant et d'autre part de l'atmosphère ambiante. Lorsque le panache se refroidit, l'air qui le compose devient de plus en plus saturé en eau. En effet, la capacité de l'air à contenir de l'eau en phase vapeur diminue avec la température. Si un seuil limite de saturation est atteint, l'eau est susceptible de se condenser sur les particules de suies activées et forme alors des particules de glace. Ces dernières vont ensuite croître en fonction de la saturation de l'air en eau dans le panache mais peuvent également se vaporiser si l'humidité relative devient trop basse.

Dans cette partie, nous présentons en premier lieu les processus d'activation des suies par adsorption des oxydes de soufre et par collecte des volatiles d'acide sulfurique. Puis, nous détaillons les phénomènes de condensation et d'évaporation de la vapeur d'eau sur les particules de suies.

I.3.1 L'activation des suies

La combustion incomplète de carburant aéronautique libère dans l'atmosphère des particules de suies sèches et hydrophobes [*Wyslouzil et al.*, 1994]. Les saturations en vapeur d'eau atteintes dans le panache ne sont généralement pas suffisamment élevées, pour permettre leur condensation à la surface de ces suies fraîchement nucléées. Néanmoins, l'observation de traînées de condensation suggère l'existence de mécanismes d'interactions microphysiques entre les particules de suies et les aérosols du panache. Ces dernières contribueraient à altérer les propriétés d'hydratation de la surface des suies, les rendant alors hydrophiles.

Parmi les éléments composant le panache, les oxydes de soufre se révèlent être les composés majoritairement responsables de l'activation des particules de suie. Par exemple, *Chughtai et al.* [1999] montrent que l'utilisation de kérosène à haute teneur en soufre induit une hydratation nettement supérieure de la surface des suies. D'autres espèces chimiques telles que les oxydes d'azote sont également susceptibles d'activer les particules de suies [*Tabor et al.*, 1993]. L'activation par les oxydes d'azote reste néanmoins beaucoup moins fréquente que celle par les oxydes de soufre. *Mirabel et Katz* [1974] montrent par exemple que la nucléation de gouttelettes HNO_3/H_2O, capables d'activer les particules de suies, nécessite une pression partielle d'acide 25 à 300 fois supérieure à celle permettant la nucléation de gouttelettes H_2SO_4/H_2O. Pour cette raison, nous nous intéresserons ici uniquement aux modes d'activation des particules de suie par les composés soufrées.

L'activation de la surface des suies par les composés soufrées peut se réaliser selon deux procédés, soit par adsorption des agrégats moléculaires gazeux SO_3 et H_2SO_4, soit par collecte des particules volatiles liquides H_2SO_4/H_2O, nucléées en amont dans le panache [*Brown et al.*, 1996; *Kärcher*, 1998] (voir Figure 19). Dans le premier cas, les molécules de SO_3 et de H_2SO_4 se fixent sur des sites présents à la paroi des particules de suies. Elles subissent ensuite une nucléation hétérogène rapide avec les molécules d'eau ambiantes, rendant la surface couverte de la particule de suie hydrophile. Dans le deuxième cas, l'activation est réalisée par collecte de particules volatiles, c'est-à-dire par la coagulation brownienne entre particules de

suies et aérosols liquides soufrés. Ce processus correspond à une adhésion par collision, en raison de l'agitation thermique des aérosols soufrés [*Pruppacher et Klett*, 1997]. La formation des aérosols soufrés sera abordée dans le paragraphe suivant. La collecte de particules volatiles aboutit, à l'instar de l'adsorption, à la couverture d'une portion de la surface de la particule de suie par des composés solubles, rendant la suie hydrophile [*Wyslouzil et al.*, 1994]. Que ce soit par adsorption ou par collecte, le degré d'activation des suies augmente avec la concentration des composés soufrés impliqués.

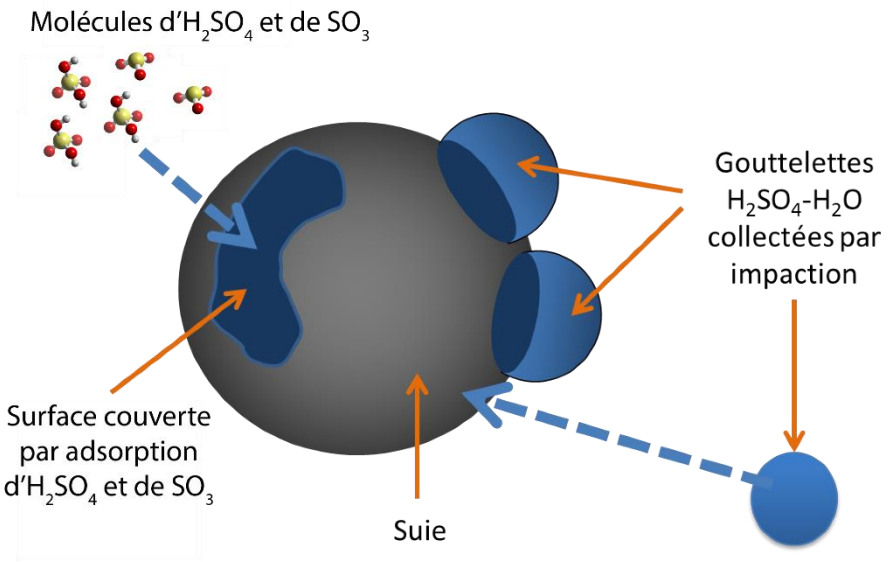

Figure 19 : Schéma décrivant les modes d'activation des suies par les composés soufrées

Nous ferons ici quelques remarques sur la formation des gouttelettes d'acide sulfurique hydratées (H_2SO_4-H_2O) dans le panache. La pression de vapeur saturante de l'acide sulfurique étant très basse, la condensation des molécules gazeuses d'acide sulfurique en présence de vapeur d'eau en gouttelettes est possible dans les conditions atmosphériques de vol [*Mirabel et Katz*, 1974; *Reiner et Arnold*, 1993]. On parle alors de nucléation binaire homogène. Les particules formées grossissent ensuite par auto-coagulation (collision entre gouttelettes d'acide sulfurique) et par condensation de la vapeur d'eau [*Kärcher*, 1998]. Les molécules d'acide sulfurique constituent ainsi des agents de nucléation très efficaces. *Roth et al.* [1994] montrent que l'injection d'une concentration de seulement 1 ppmv de SO_2 dans un réacteur à flux laminaire contenant des radicaux OH à une humidité relative de 50%, suffit à produire une quantité suffisante d'acide sulfurique pour former des aérosols sulfatés. Comme indiqué précédemment, les particules de H_2SO_4-H_2O se retrouvent par la suite collectées par coagulation à la surface des suies, les rendant ainsi hydrophiles.

L'activation des suies est un processus très rapide, étant donné qu'en général, quelques dixièmes de seconde suffisent pour obtenir une couverture moyenne d'un dixième de la surface des suies par une monocouche moléculaire de soufre [*Kärcher et al.*, 1996b, 1998a]. Dans les modèles, cette quantité correspond au seuil usuellement adopté au-delà duquel une particule est considérée activée, permettant une baisse importante de la sursaturation nécessaire à leur hydratation [*Wyslouzil et al.*, 1994].

I.3.2 Formation des cristaux de glace

La condensation de la vapeur d'eau a lieu à la surface des suies activées lorsque le panache se trouve sursaturé en eau. Afin d'illustrer ce phénomène, la Figure 20 représente l'évolution de la pression partielle de vapeur d'eau lorsqu'elle est en équilibre avec sa phase condensée. Cette dernière peut être la phase liquide ou solide. La pression partielle correspond à la pression qu'aurait la vapeur d'eau seule, c'est-à-dire si tous les autres constituants de l'air du panache étaient retirés. Lorsque l'air se trouve saturé en vapeur d'eau, cette dernière est susceptible de se condenser et un équilibre avec la phase condensée s'installe. La pression partielle de vapeur d'eau atteint alors une valeur d'équilibre maximale (par exemple au point B), appelée pression de vapeur saturante. Le rapport de saturation définit comme le rapport entre la pression partielle et la pression de vapeur saturante d'un composé gazeux permet ainsi de mesurer la saturation de l'air par ce composé. Par exemple, pour la vapeur d'eau par rapport à sa phase liquide, il s'écrit :

$$s_{liq} = \frac{p_v}{p_{liq}^{sat}(T)} \tag{I.3.1}$$

Avec

- p_v la pression partielle de vapeur d'eau ;
- $p_{liq}^{sat}(T)$ la pression de vapeur saturante de l'eau par rapport à sa phase liquide.

Le diagramme de la Figure 20 montre que la pression de vapeur saturante diminue lorsque le panache se refroidit. Ainsi, en considérant une quantité fixe de vapeur d'eau contenue dans le panache, une chute suffisante de température sature ce dernier (passage du point A au point B) et conduit à la formation d'une phase condensée. C'est ce phénomène qui déclenche la formation de cristaux de glace dans le panache d'un avion. Le critère de Schmidt-Appleman stipule ainsi qu'une traînée de condensation se forme dans le panache en expansion lorsque le

mélange, constitué des effluents et d'air ambiant, atteint un rapport de saturation par rapport à l'eau liquide supérieur à l'unité [*Appleman*, 1953; *Schumann*, 1996]. La fiabilité de ce critère de formation de traînée de condensation visible a été confirmée par de nombreuses observations au sol et en vol, résumées dans le rapport de l'*IPCC* [1999].

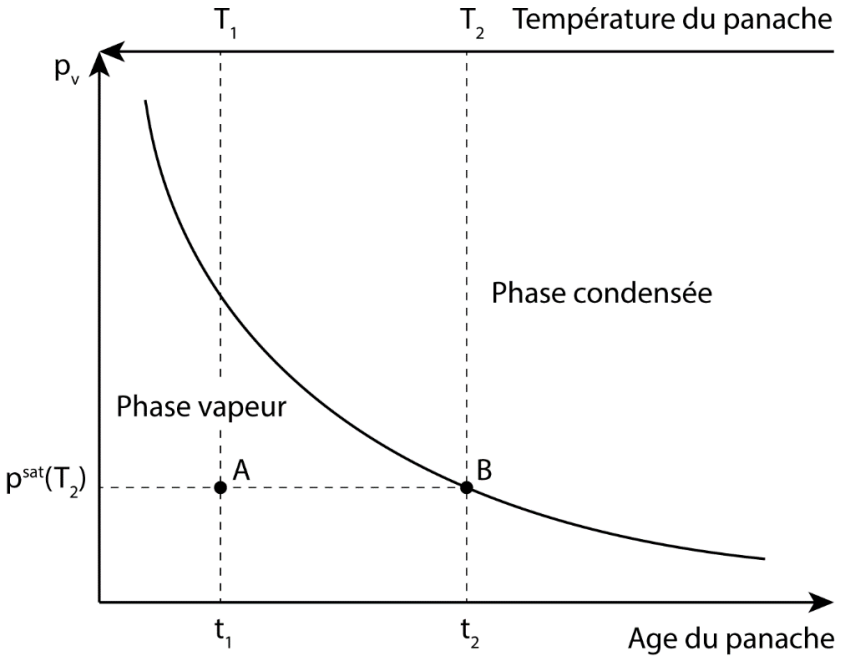

Figure 20 : Schéma illustrant l'évolution de la pression de vapeur saturante en fonction de l'âge et de la température du panache.

La formation des cristaux de glace débute ainsi généralement à partir d'une demi envergure derrière la sortie moteur de l'avion (voir Figure 21), soit à partir de 0,1 s après l'éjection des gaz [*Kärcher*, 1994]. En fonction des conditions atmosphériques, cela correspond au temps nécessaire pour que les effluents chauds et humides du panache se refroidissent suffisamment en se mélangeant à l'air froid ambiant, créant des conditions de sursaturation dans le panache.

Figure 21 : Traînées de condensation formées dans le sillage d'un B747 en vol de croisière. Source : [Photo : Sigurdur Benediktsson]

Parmi les divers aérosols du panache susceptibles de participer au processus de formation de cristaux de glace [*Schumann et al.*, 1996], les particules de suies constituent les principaux noyaux de condensation [*Kärcher et al.*, 1996b]. En effet, la condensation sur les autres aérosols, et notamment sur les particules volatiles liquides plus hydrophiles, se trouve relativement défavorisée pour deux raisons différentes. Premièrement, du point de vue énergétique, la nucléation homogène de glace est difficile sur un mélange acide liquide par rapport à la nucléation hétérogène de glace sur un support solide. Deuxièmement, la condensation sur les aérosols liquides se trouve de surcroît défavorisée en raison de leur taille trop petite par la barrière de Kelvin. Cette dernière correspond au phénomène d'augmentation de la pression de vapeur saturante au voisinage d'une interface liquide-gaz présentant une forte courbure par rapport à une interface plane (voir par exemple [*Pruppacher et Klett*, 1997]). De ce fait, la condensation sur une particule de petite taille, donc possédant une courbure importante, requiert une pression de vapeur supérieure à celle nécessaire sur une particule plus grosse. Par exemple, les gouttelettes fraîchement nucléées à la sortie des tuyères présentent usuellement un rayon de l'ordre de deux nanomètres. Par conséquent, l'effet Kelvin entraîne une augmentation de la pression de vapeur saturante de plus d'un ordre de grandeur par rapport à une surface plane. Les suies sèches activées présentent quant à elles des rayons nettement plus propices à la condensation de la vapeur d'eau (≈ 20 nm). La barrière de Kelvin ne représentent alors qu'une augmentation de 10% environ de la pression de vapeur saturante par rapport à une surface plane [*Kärcher et al.*, 1996b]. La condensation sur les aérosols liquides de plus petite taille requiert donc une pression partielle de vapeur d'eau beaucoup plus importante.

Considérons un cas où l'atmosphère est assez humide pour déclencher la formation de cristaux de glace dans le panache. Les propriétés de ces derniers évoluent continuellement dans le panache sous l'influence des interactions complexes des paramètres thermodynamiques environnants [*Gleitsmann et Zellne*, 1998]. La majorité des modélisations prédisent des concentrations maximales de glace de l'ordre de 10^4 à 10^5 particules par centimètre cube [*Kärcher et al.*, 1996b]. Les mesures expérimentales in situ des traînées de condensation au déclenchement de la congélation sont malheureusement difficilement réalisables et avec des résultats pour le moment discutables. Elles demeurent malgré tout indispensables pour évaluer la fidélité avec laquelle les modèles parviennent à représenter les processus physiques se produisant lors de la formation des cristaux de glace.

Plus en aval, l'influence des tourbillons de sillage augmentent les taux de dispersion et le refroidissement du panache. Les modèles prédisent alors, selon les conditions ambiantes, une diminution de la concentration maximale des cristaux de glace à environ $10^3 - 10^4\ \#/\mathrm{cm}^{-3}$ dans un panache âgé de $0{,}5\ \mathrm{s}$ et une augmentation du diamètre des particules jusqu'à $1\ \mu\mathrm{m}$ [*Paoli et Garnier*, 2005]. La diminution du pic de concentration des particules de glace est due à la dilution du panache dans l'atmosphère qui a tendance à disperser les particules avec l'expansion du panache.

Ensuite, dans le régime tourbillonnaire, les tourbillons de sillage « piège » une partie des particules de glace et les entraînent vers le bas jusqu'à plusieurs centaines de mètre (voir I.1.2.2). Ces cristaux de glace subissent alors une compression adiabatique en raison de l'élévation de la pression ambiante. L'augmentation de température qui en résulte peut alors induire, lorsque l'humidité relative ambiante est assez basse, une sublimation de la glace, diminuant les concentrations et les tailles des particules dans cette zone [*Lewellen et Lewellen*, 2001].

Concernant les cristaux de glace encore présents dans le panache, lorsque l'humidité relative de l'atmosphère demeure suffisamment élevée pour que le panache reste saturé en eau, les traînées de condensation persistent au-delà du régime de diffusion. Les perturbations turbulentes induites par le passage de l'avion et des jets des moteurs se sont alors estompées. L'évolution des propriétés microphysiques des cristaux de glace se trouve par conséquent entièrement contrôlée par les conditions atmosphériques. La turbulence atmosphérique et le cisaillement du vent déterminent la dilution des concentrations de particules. Dans le même temps, la croissance de ces dernières est régulée par l'humidité relative ambiante. Des

observations in situ des propriétés microphysiques de traînées de condensation âgées d'une heure dans la haute troposphère par *Schröder et al.* [2000] des concentrations pouvant atteindre $100\ \mathrm{cm}^{-3}$ et des diamètres moyens compris entre 10 et $20\ \mu\mathrm{m}$.

Les propriétés microphysiques des particules dans les traînées de condensation, et notamment leur concentration et leur taille constituent des données essentielles pour l'étude de leur impact radiatif. Elles permettent par exemple de déterminer l'épaisseur optique de la traînée de condensation qui mesure son degré de transparence. En physique des aérosols, l'épaisseur optique reflète la fraction de rayonnement de la lumière qui est diffusée ou absorbée par les particules composant la traînée de condensation. Elle permet donc de caractériser quantitativement la contribution des traînées de condensation sur le bilan radiatif terrestre. L'épaisseur optique, qui mesure le degré de transparence d'un milieu, constitue également un paramètre permettant de définir un critère de visibilité. *Kärcher et al.* [1996b] caractérise une traînée de condensation visible à l'œil nu par une épaisseur optique supérieure à $3 \cdot 10^{-2}$ Cette valeur n'étant qu'une indication, car la visibilité réelle dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces dernières incluent la longueur d'onde de la lumière, les conditions de visibilité (brouillard, nuages…), l'angle de vue ou encore la distance entre l'observateur et la traînée de condensation. La notion d'épaisseur optique et notamment la manière de la calculer sera abordée plus en détail dans le chapitre suivant.

Chapitre II. Modélisation

L'utilisation de la mécanique des fluides numériques (ou Computational Fluid Dynamics (CFD)) a été retenue dans cette thèse pour l'étude numérique de la formation des traînées de condensation. Cette approche consiste à intégrer au calcul de l'écoulement tridimensionnel du fluide autour et dans le sillage de l'avion le calcul des réactions chimiques et des processus microphysiques dans le panache. La prise en compte de l'écoulement est importante, nous avons en effet présenté dans le chapitre précédent l'intensité des interactions aérodynamiques dans le champ proche des avions, et leur rôle majeur dans le processus de formation des traînées de condensation.

Nous avons par ailleurs décidé d'effectuer une simulation couplée des trois principaux processus physiques intervenant dans la formation des cristaux de glace en champ proche, à savoir la dilution des effluents, les transformations chimiques des espèces, et les processus microphysiques sur les particules. Cette approche présente l'avantage de prendre en compte les éventuelles synergies entre ces processus. Par exemple, la condensation de la vapeur d'eau du panache en glace engendre une diminution de la pression partielle du gaz, ce qui peut induire une rétroaction sur les transformations chimiques des espèces du panache.

Le code de calcul CEDRE de l'ONERA a été choisi pour réaliser les simulations numériques. Cette plateforme de simulation multi-physique intégrant déjà des modèles pour la simulation de l'écoulement et des transformations chimiques, l'un des objectifs de la thèse a été d'implémenter dans le code les modèles nécessaires pour la simulation des processus microphysiques conduisant à la formation des cristaux de glace. Le code CEDRE constitue alors un outil unique de simulation de l'ensemble des processus physiques intervenant dans la formation d'une traînée de condensation dans le champ proche d'un avion.

Dans ce chapitre dédié aux modélisations, nous commençons par justifier le choix de la simulation numérique tridimensionnelle spatiale et présentons les caractéristiques du logiciel CEDRE utilisée pour les simulations. Puis, nous décrivons en deux parties les modèles que nous utilisons pour la simulation de l'écoulement et des transformations chimiques. Dans une troisième partie, nous détaillons les modèles que nous avons intégrés au code existant, permettant la simulation des processus microphysiques dans le panache. Enfin, dans une

dernière partie, nous indiquons les méthodes numériques utilisés pour résoudre les problématiques liés à la discrétisation spatiale du domaine de calcul et à l'intégration temporelle des équations.

II.1 Simulations numériques

II.1.1 Choix de l'approche de simulation numérique

Dans la littérature existante, la grande majorité des simulations numériques de formation des traînées de condensation utilisent des modèles dits adimensionnels ou 0D, ou des modèles tridimensionnels munis d'une configuration simplifiée d'avion.

Les premiers correspondent à une modélisation des processus microphysiques s'appliquant en un point fictif (appelé communément *box model* en anglais). Ce type de simulation est généralement caractérisé par une modélisation fine des processus microphysiques, accompagnée d'une paramétrisation des processus de dilution que le caractère adimensionnel du modèle ne permet pas de simuler. Autrement dit, cela revient à simuler les processus microphysiques sur une particule fluide possédant des caractéristiques moyennes de l'écoulement qui sont importées de l'extérieur dans la simulation. Cette approche peu coûteuse en ressources de calcul reproduit les processus microphysiques avec une grande fidélité mais présente l'inconvénient de ne pas pouvoir bien prendre en compte des phénomènes tridimensionnels importants comme par exemple l'interaction entre le jet et le tourbillon ou encore l'effet de la turbulence dans le sillage de l'avion.

Les modèles dits tridimensionnelles correspondent à des simulations réalisées dans un domaine de calcul tridimensionnel représentant l'espace du panache. Ils permettent ainsi de simuler les caractéristiques de l'écoulement. La majorité des études de la littérature utilisant des simulations tridimensionnelles sont de type instationnaire. Le domaine de calcul contient généralement une portion du panache et des conditions limites périodiques sont imposées aux faces limites dans les trois directions de l'espace pour étudier le panache entier (voir par exemple l'étude de *Paoli et Garnier* [2005]). Cette approche, appelée simulation temporelle, revient à modéliser un domaine de calcul qui se « déplace » dans le sens de l'écoulement. Les modèles tridimensionnelles adoptent généralement une modélisation moins détaillée des processus microphysiques en raison des coûts de calcul. Ils présentent en revanche l'avantage de pouvoir simuler les effets des propriétés aérodynamiques de l'écoulement comme celles précitées. Toutefois, cette approche ne permet pas de simuler l'écoulement en champ très proche, c'est-à-dire autour de l'avion et à la sortie des moteurs en raison de la présence de géométries complexes. À titre d'exemple, les tourbillons de sillage jouant un rôle important

dans la dilution du panache, sont dans ce type de simulation généralement initialisés par des modèles analytiques au lieu d'être générés effectivement par le maillage d'une aile d'avion.

Dans cette thèse, nous nous proposons d'adopter une approche originale et complémentaire par rapport aux deux méthodes présentées précédemment. Nous choisissons de réaliser des simulations tridimensionnelles dites spatiales, c'est-à-dire avec un domaine de calcul fixe incluant une géométrie d'avion réaliste. La présence de cette dernière permet entre autres de générer des tourbillons de sillage à partir d'un profil d'aile choisi par l'utilisateur, sans avoir besoin de recourir à des modèles analytiques. Nous pourrons ainsi étudier les processus physiques dans les zones correspondant au champ très proche, comme la naissance des tourbillons de sillage et le début de l'interaction jet/tourbillon. Par ailleurs, cette méthode présente également l'avantage de donner les moyens d'étudier les influences spécifiques à la configuration de l'avion. Ces spécificités pouvant être, par exemple, la forme du profil d'aile ou des sorties moteurs, ou bien encore la position des moteurs sur la structure de l'avion.

Les simulations numériques que nous nous proposons de réaliser intègrent le couplage des trois processus physiques principaux intervenant dans la formation des traînées de condensation en champ proche : les processus aérodynamiques, chimiques et microphysiques. Le choix de la réalisation d'un outil de simulation complet répond à l'objectif de comprendre et d'évaluer l'importance relative de chaque paramètre impliqué dans l'interaction de l'ensemble des processus.

II.1.2 Logiciel CEDRE

Durant cette thèse, toutes les simulations numériques ont été obtenues en utilisant le logiciel de calcul CEDRE développé à l'ONERA [*Refloch et al.*, 2011]. Ce dernier est une plateforme multi-physique initialement destinée aux domaines de l'énergétique et de la propulsion pour les applications de recherche mais également industrielles. Du fait de son approche multi-physique, ce type de code est particulièrement intéressant pour la simulation de la formation et de l'évolution des traînées de condensation. Le code CEDRE se compose de plusieurs solveurs, chacun orienté vers la résolution de phénomènes physiques particuliers. Parmi les solveurs disponibles, nous utilisons le solveur eulérien de gaz réactifs appelé CHARME. Ce dernier permet, entre autres, le couplage entre la simulation des processus dynamiques d'un écoulement compressible multi-espèces et celle des processus de transformations chimiques subies par les composés.

Nous avons, dans le cadre de cette thèse, développé dans ce solveur les modèles microphysiques qui seront présentés dans ce chapitre, permettant de simuler la formation des cristaux de glace dans le panache. Les modèles développés s'appuient ainsi sur l'architecture existante du code CEDRE et plus particulièrement du solveur CHARME, tirant profit d'un environnement adapté au couplage de modèles cinétiques.

Du point de vue des performances de calcul, le code CEDRE présente l'avantage d'être un programme parallélisé. Il est ainsi possible de partitionner le domaine de calcul global en plusieurs sous-domaines (voir Figure 22) comportant moins de cellules sur lesquels l'utilisateur peut choisir d'affecter un ou plusieurs processeurs. La multiplication (jusqu'à une certaine limite) du nombre de processeurs a pour effet d'augmenter la vitesse globale d'un calcul, en répartissant la tâche entre les différents processeurs travaillant parallèlement.

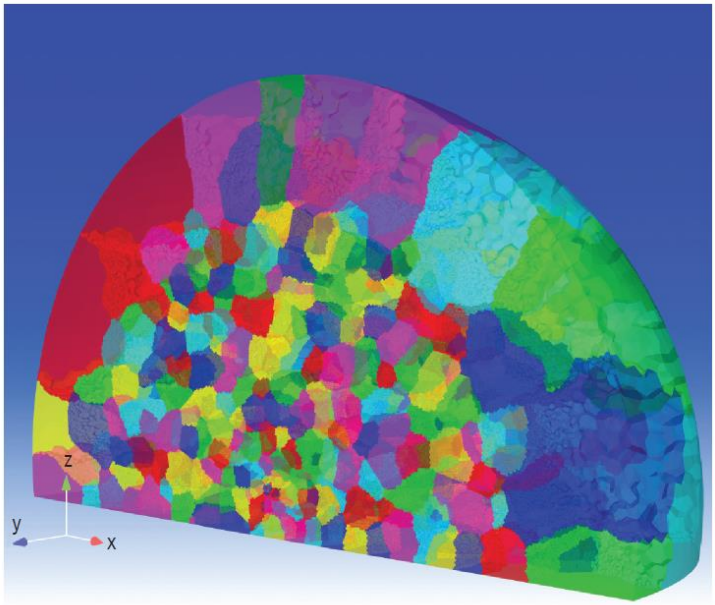

Figure 22 : Exemple de partitionnement d'un domaine de calcul en 256 sous-domaines avec le code CEDRE.

Source : [*Refloch et al.*, 2011]

L'indice de performance de calcul du code CEDRE a été évalué en fonction du nombre de processeurs utilisés pour différents cas de calcul [*Refloch et al.*, 2011]. La capacité d'un logiciel à accroître sa performance de calcul avec des ressources supplémentaires (ici des processeurs) sous une charge accrue est appelée scalabilité. Les auteurs montrent que la scalabilité du code CEDRE est supra-linéaire jusqu'à environ 600 processeurs utilisés en parallèles. Cela signifie qu'en utilisant 600 processeurs par exemple, la durée du calcul sera

plus de 600 fois inférieure à la durée nécessaire pour effectuer la même simulation avec un seul processeur.

II.2 Équations de l'écoulement

L'écoulement du fluide autour de l'avion et dans son sillage est décrit par des équations de conservations de quantités caractérisant ce fluide. Dans cette partie, nous commençons par présenter ces équations, appelées équations de Navier-Stokes. Nous verrons ensuite que la résolution numérique des équations précitées s'avère très couteuse en ressources informatiques, notamment à cause du problème posé par la résolution de la turbulence. Afin de pouvoir effectuer les simulations numériques au regard des ressources disponibles, nous nous proposons d'adopter une modélisation des effets de la turbulence, appelée l'approche Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS).

II.2.1 Equations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes régissant le comportement du fluide se composent des équations de conservation de la masse, de conservation de la quantité de mouvement et de conservation de l'énergie. Toutes les équations présentées dans ce paragraphe sont formulées en coordonnées cartésiennes (O, x_1, x_2, x_3). Par ailleurs, nous adoptons la notation d'Einstein permettant d'écrire, pour les grandeurs f_i et g_i où i se réfère à une coordonnée :

$$f_i g_i \equiv \sum_{i=1}^{3} f_i g_i \qquad \text{(II.2.1)}$$

Nous considérons une particule fluide du mélange constitué d'une seule phase vapeur contenant les espèces E_i. L'équation de conservation de la masse globale s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho v_j\right) = 0 \qquad \text{(II.2.2)}$$

Avec

- t le temps ;
- ρ la masse volumique du mélange ;
- $\vec{v}$ la vitesse de l'écoulement.

La concentration massique ρ_i de chaque espèce du mélange composé de n_e espèces s'écrit $\rho_i = \rho y_i$ où y_i représente la fraction massique de l'espèce E_i. Les fractions massiques sont liées par la relation :

$$\sum_{i=1}^{n_e} y_i = 1 \tag{II.2.3}$$

À chacune des espèces E_i correspond une équation de conservation de la masse qui s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{diff}^i \frac{\partial y_i}{\partial x_j}\right) + s_i \tag{II.2.4}$$

Avec

- s_i le terme source massique de l'espèce E_i ;
- D_{diff}^i le coefficient de diffusion massique de l'espèce E_i.

s_i inclut entre autres le taux de réaction de l'espèce E_i, résultant de la transformation chimique des espèces que nous détaillerons par la suite. Cette quantité peut être positive ou négative, selon qu'il s'agit d'un terme de production ou de consommation de l'espèce E_i. Notons que la somme des équations (II.2.4) pour toutes les espèces E_i donne l'équation (II.2.2). La densité de flux de diffusion de masse de l'espèce E_i dans l'équation (II.2.4) suit une loi de Fick de la forme :

$$\overrightarrow{\Phi_{Diff}^i} = -\rho D_{diff}^i \vec{\nabla} y_i \tag{II.2.5}$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement provient de la deuxième loi de Newton. Elle relie l'accélération de la particule fluide aux forces surfaciques et volumiques qu'elle subit et s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g \delta_{i3} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\mu \tau_{ij}) \tag{II.2.6}$$

Avec

-p la pression du fluide ;

-g l'accélération de la pesanteur ;

-δ_{ij} le symbole de Kronecker valant 1 si $i = j$ et 0 sinon ;

-μ la viscosité dynamique du fluide ;

-τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses.

Dans l'équation (II.2.6), la pression p du fluide, considéré comme un gaz parfait, est liée à la masse volumique et à la température par :

$$p = \rho R_s T \tag{II.2.7}$$

Avec R_s la constante spécifique du gaz définie par $R_s = R/\mathcal{M}$ où $\mathcal{M}$ est la masse molaire du mélange.

La viscosité du mélange μ est évaluée comme la moyenne arithmétique des viscosités μ_i de chaque espèce E_i, pondérée par les fractions massiques respectives y_i :

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_e} y_i \mu_i \tag{II.2.8}$$

Quant à la viscosité dynamique μ_i d'une espèce E_i, elle est évaluée en fonction de la température T en suivant une loi de Sutherland :

$$\mu_i = \mu_i^0 \frac{T_i^0 + T_i^1}{T + T_i^1} \left(\frac{T}{T_i^0}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{II.2.9}$$

Avec

- T_i^0 la température de référence fixée ici à $T_i^0 = 298{,}15$ K ;
- μ_i^0 la viscosité dynamique de l'espèce E_i à la température T_i^0 ;
- T_i^1 la température de Sutherland dépendant du gaz considéré.

Le fluide étant supposé newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} est un tenseur symétrique. Il s'écrit en adoptant l'hypothèse de Stokes comme :

$$\tau_{ij} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \tag{II.2.10}$$

Enfin, un bilan de conservation de l'énergie totale e_t du mélange est donné par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j h_t) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha\frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i h_i \rho D_{diff}^i \frac{\partial y_i}{\partial x_j} + \mu\tau_{ij}v_i\right) \tag{II.2.11}$$

Avec

- $h_t = e_t + p/\rho$ l'enthalpie totale du mélange ;
- α la conductivité thermique du mélange ;
- h_i l'enthalpie de l'espèce E_i.

On note dans l'équation (II.2.11) que la densité de flux de diffusion thermique est calculée par une loi de Fourier :

$$\overrightarrow{\phi_c} = -\alpha\vec{\nabla}T \tag{II.2.12}$$

α est évaluée en fonction des conductivités thermiques α_i des espèces constituant le mélange par l'expression suivante :

$$\alpha = \mu\sum_{i=1}^{n_e} y_i \frac{\alpha_i}{\mu_i} \tag{II.2.13}$$

Les conductivités thermiques α_i des espèces E_i étant déterminées par la loi d'Eucken :

$$\alpha_i = \mu_i\left[c_{p,i} + \frac{5}{4}R_{s,i}\right] \tag{II.2.14}$$

Avec $c_{p,i}$ la capacité thermique à pression constante de l'espèce E_i. La variabilité de $c_{p,i}$ en fonction de la température est calculée suivant un ajustement polynomial d'ordre n, sous la forme :

$$c_{p,i}(T) = \sum_{k=0}^{n} a_{i,k} T^k \tag{II.2.15}$$

Les coefficients $a_{i,k}$ étant extraits de la base de données NIST-JANAF [*NIST*, 2013].

En résumé, les inconnus du système d'équations de Navier-Stokes sont au nombre de $5 + n_e$, soit $\left(\rho\,, (v_i)_{i\in[\![1;3]\!]}\,, (y_i)_{i\in[\![1;n_e]\!]}\,, e_t\right)$. Le système d'équations étant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho v_j\right) = 0 \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(\rho y_i) + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho v_j y_i\right) = \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{diff}^{i} \dfrac{\partial y_i}{\partial x_j}\right) + s_i \quad , \quad i \in [\![1\,;\, n_e]\!] \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho v_j v_i\right) = -\dfrac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g \delta_{i3} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu \tau_{ij}\right) \quad , \quad i \in [\![1\,;\, 3]\!] \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho v_j h_t\right) = \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha \dfrac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i h_i \rho D_{diff}^{i} \dfrac{\partial y_i}{\partial x_j} + \mu \tau_{ij} v_i\right) \end{cases} \tag{II.2.16}$$

II.2.2 Approche Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)

Plusieurs approches existent pour résoudre numériquement les équations de Navier-Stokes. Celles-ci se différencient essentiellement par la part des échelles de la turbulence qui est effectivement résolue dans le spectre d'énergie turbulente, les autres échelles étant alors modélisées. Evidemment, plus la part résolue des échelles de la turbulence est importante et plus le coût en termes de ressource de calcul le sera également. Les différentes approches de résolution de la turbulence peuvent être classées en trois axes principaux (voir Figure 23).

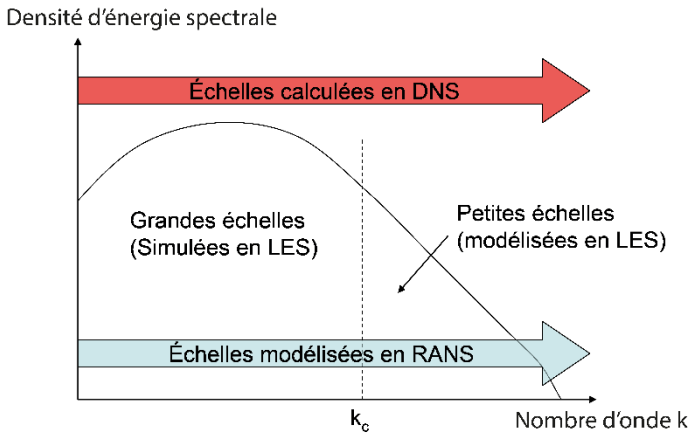

Figure 23 : Représentation classique du spectre d'énergie en turbulence isotrope

La simulation numérique directe (DNS) consiste à résoudre de manière exacte l'ensemble des échelles de longueur de la turbulence. Cette approche nécessite par conséquent une discrétisation spatiale et temporelle extrêmement fine afin de capturer toutes les échelles caractéristiques des tourbillons. Bien que les résultats obtenus soient d'une grande précision en termes de représentation de la turbulence, il s'agit d'une méthode extrêmement coûteuse en ressources de calcul.

La simulation des grandes échelles (LES) est une autre approche couramment utilisée pour les écoulements instationnaires à grand nombre de Reynolds. Elle consiste à ne résoudre de manière exacte que les grandes échelles de la turbulence, où l'essentiel de l'énergie turbulente est produite. Les petites structures, définies par un nombre d'onde de coupure généralement choisie dans la zone inertielle du spectre d'énergie, sont alors modélisées par une loi de « sous maille ». Cette méthode permet d'utiliser des maillages moins fins que ceux utilisés en DNS, mais se révèle tout de même particulièrement coûteuse en présence de parois et d'une géométrie complexe comme celle d'un avion.

Enfin, l'approche dite de Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes moyennées avec une modélisation de toutes les échelles de turbulence. Ce choix possède l'avantage de donner une solution économique en termes de ressources de calcul, notamment en présence de géométries complexes. En effet, elle permet d'adopter une discrétisation spatiale significativement plus large que les deux autres approches présentées précédemment, tout en assurant une résolution satisfaisante de la turbulence. Par ailleurs, de par sa représentation des champs moyennés de la turbulence, elle est particulièrement adaptée pour la simulation d'écoulements stationnaires.

Dans le cas de nos études, nous avons adopté l'approche RANS car elle permet, à un coût numérique raisonnable, de réaliser des simulations nécessitant la prise en compte de plusieurs processus physiques, à savoir l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique. Ci-dessous, nous présentons les équations de Navier-Stokes moyennées résolues par l'approche RANS ainsi que les modèles de fermeture utilisés pour modéliser la turbulence.

II.2.2.1 Equations de Navier-Stokes moyennées

Cette méthode repose sur une approche statistique qui consiste à décomposer l'ensemble des variables physiques en une partie moyenne et une partie fluctuante. Les grandeurs moyennes dans les équations de Navier-Stokes constituent alors les inconnus du système d'équations à résoudre tandis que les grandeurs fluctuantes restantes doivent être modélisées. Dans le cas de fluides compressibles, ce filtrage nécessite l'utilisation de deux écritures de moyenne, à savoir le filtre de Reynolds et celui de Favre.

La moyenne de Reynolds consiste en la décomposition d'une grandeur f en une partie moyenne $\bar{f}$ et une partie fluctuante f' en écrivant :

$$f = \bar{f} + f' \tag{II.2.17}$$

$\bar{f}$ représente la moyenne statistique définie par :

$$\bar{f} = \lim_{\Delta t \to \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t}^{t+\Delta t} f(t)\, dt \tag{II.2.18}$$

La décomposition de Favre s'écrit :

$$f = \tilde{f} + f'' \tag{II.2.19}$$

avec $\tilde{f}$ la moyenne de Favre et f'' sa valeur fluctuante.

Le lien entre la moyenne de Reynolds et la moyenne de Favre est défini par :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \tag{II.2.20}$$

L'approche RANS consiste d'abord à moyenner les équations de Navier-Stokes au sens de Reynolds. Cette opération fait apparaître des grandeurs qui peuvent être réécrite en utilisant la moyenne de Favre afin de faire apparaître les inconnus moyennés (par exemple $\overline{\rho y_k} = \bar{\rho}\widetilde{y_k}$). On obtient alors les équations de Navier-Stokes moyennées :

- Equation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{y_k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\widetilde{v_j}\widetilde{y_k}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_{diff}^{k}\frac{\partial\widetilde{y_k}}{\partial x_j} - \bar{\rho}\widetilde{v_j''y_k''}\right) + \overline{s_k} \qquad \text{(II.2.21)}$$

- Equation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{v_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{v_i}\widetilde{v_j})\\ &= -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \bar{\rho}g\delta_{i3} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\mu\widetilde{\tau_{ij}} - \bar{\rho}\widetilde{v_i''v_j''})\end{aligned} \qquad \text{(II.2.22)}$$

- Equation de la conservation de l'énergie :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{e_t}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{h_t})\\ &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha\frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho}\widetilde{v_j''T''} + \sum_k \widetilde{h_k}\bar{\rho}D_{diff}^{k}\frac{\partial\widetilde{y_k}}{\partial x_j}\right)\\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j}(-\sum\widetilde{h_k}\bar{\rho}\widetilde{v_j''y_k''} + 2\mu\widetilde{\tau_{ij}}\widetilde{v_i} - \bar{\rho}\widetilde{v_i''v_j''}\widetilde{v_i})\end{aligned} \qquad \text{(II.2.23)}$$

Dans l'expression (II.2.23), l'énergie totale moyennée au sens de Favre s'écrit de la manière suivante :

$$\widetilde{e_t} = \tilde{e} + \frac{1}{2}\widetilde{v_k}\widetilde{v_k} + \frac{1}{2}\widetilde{v_k''v_k''} \qquad \text{(II.2.24)}$$

Les équations moyennées obtenues sont très semblables aux équations de départ (II.2.16), mis à part les termes impliquant les grandeurs fluctuantes. Ces derniers correspondent aux termes de corrélation ; $\widetilde{v_k''v_k''}$ représente le tenseur de Reynolds, $\widetilde{v_j''y_k''}$ la diffusion turbulente de l'espèce E_k et $\widetilde{v_j''T''}$ la diffusion turbulente de la chaleur. Par exemple, le tenseur de Reynolds $\widetilde{v_i''v_j''}$ apparaissant dans l'équation de la quantité de mouvement (II.2.22), constitue la seule

différence entre les équations (II.2.6) et (II.2.22). Le tenseur de Reynolds correspond ainsi aux contraintes exercées sur le fluide dues aux vitesses turbulentes. Il présente une signification fondamentale dans la mesure où ces contraintes sont à l'origine des différences entre le champ réel et le champ moyenné.

L'apparition des termes de corrélation ajoute ainsi des inconnus supplémentaires au système d'équations, conduisant au problème dit de fermeture. L'excédent d'inconnus par rapport au nombre d'équations conduit à la modélisation des termes de corrélation représentant des phénomènes turbulents afin de fermer le système. Du point de vue de la mécanique des fluides, nous retrouvons là le principe de l'approche RANS qui consiste à modéliser l'ensemble des échelles de la turbulence.

Le terme de corrélation correspondant au tenseur de Reynolds $\widetilde{v_i'' v_j''}$ est modélisé en adoptant l'hypothèse de Boussinesq :

$$\bar{\rho}\widetilde{v_i'' v_j''} = -\mu_t \widetilde{\tau_{ij}} + \frac{2}{3} k \delta_{ij} \qquad \text{(II.2.25)}$$

Avec

- μ_t la viscosité turbulente ;
- $k = \frac{1}{2}\widetilde{v_k'' v_k''}$ l'énergie cinétique turbulente.

L'hypothèse de Boussinesq permet de donner à l'équation (II.2.22) une forme semblable à l'équation (II.2.6) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{v}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \bar{\rho} g \delta_{i3} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_{eff}\widetilde{\tau_{ij}} - \frac{2}{3} k \delta_{ij}\right) \qquad \text{(II.2.26)}$$

Avec μ_{eff} représentant la viscosité dynamique totale, somme des viscosités laminaire et turbulente $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$. Il reste alors à modéliser la viscosité turbulente μ_t et l'énergie cinétique turbulente k. Ces grandeurs sont déterminées par le modèle de fermeture qui sera détaillé dans la prochaine sous partie.

La diffusion turbulente de l'espèce E_k est modélisée suivant une loi de Fick faisant intervenir la viscosité turbulente μ_t :

$$\bar{\rho}\widetilde{v_j''y_k''} = -\frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t}\frac{\partial\widetilde{y_k}}{\partial x_j} \tag{II.2.27}$$

Avec Sc_t le nombre de Schmidt turbulent, fixé dans cette étude à la valeur usuelle $\mathrm{Sc}_t = 0{,}9$.

De manière analogue, le flux de chaleur turbulent obéit à une loi de Fourier :

$$\bar{\rho}\widetilde{v_j''T''} = -\frac{\mu_t c_p}{\mathrm{Pr}_t}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_j} \tag{II.2.28}$$

Avec Pr_t le nombre de Prandtl turbulent, fixé usuellement à $\mathrm{Pr}_t = 0{,}9$.

II.2.2.2 Modèle de fermeture k-l pour la turbulence

Comme indiqué ci-dessus, la modélisation des inconnus k et μ_t est réalisée par le choix d'un modèle de turbulence. Il en existe un grand nombre dans la littérature, chacun étant plus ou moins adapté à un type d'écoulement. Dans le code CEDRE, les modèles de turbulence disponibles sont le modèle Spalart-Allmaras parmi les modèles à une équation et les modèles $k-\epsilon$, $k-l$ et $k-\omega$ SST parmi les modèles à deux équations. Dans cette thèse, nous avons choisi d'utiliser le modèle $k-l$ qui consiste à introduire deux équations de transports pour les grandeurs k et l. l étant la longueur de mélange, définie par l'hypothèse de Prandtl-Kolmogorov :

$$\mu_t = C_\mu \rho\sqrt{k}l \tag{II.2.29}$$

Où C_μ est une constante fixée usuellement à $C_\mu = 0{,}09$. Le concept de longueur de mélange provient d'une analogie avec le libre parcours moyen tel que défini dans la théorie cinétique des gaz. Nous avons choisi d'utiliser le modèle $k-l$ pour nos applications pour plusieurs raisons. Premièrement, des études sur nos cas de calcul en utilisant différents modèles de turbulence suggèrent que le modèle $k-l$ converge en maillage plus rapidement que le modèle $k-\epsilon$. Par ailleurs, il semblerait qu'il soit plus précis que le modèle $k-\omega$ SST pour la résolution de tourbillons de sillage dans le champ proche d'une aile NACA0012. Le lecteur pourra trouver le détail de ces études dans le rapport d'*Henri-Lheureux* [2015]. Deuxièmement, l'utilisation de la longueur de mélange se révèle pratique du fait qu'il existe dans la littérature

des formules explicitant sa valeur dans des cas spécifiques. Par exemple, pour un jet circulaire, on trouve :

$$l = 0{,}075\delta \tag{II.2.30}$$

Où δ est une longueur caractéristique de l'écoulement.

Les deux équations de transport pour les grandeurs k et l sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k v_i) \\ = \rho P_k - C_\mu^{\frac{3}{4}} \rho \frac{k^{3/2}}{l} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right] \\ - 2\mu \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial k}{\partial x_i}\right)\end{aligned} \tag{II.2.31}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\rho l) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho l v_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_L}\right)\frac{\partial l}{\partial x_i}\right] + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\pi_l \mu_t \frac{l}{k}\frac{\partial k}{\partial x_i}\right) \\ + \kappa^2 C_\mu^{\frac{1}{4}} \rho k^{1/2} - 2k^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial l}{\partial x_i}\right)\end{aligned} \tag{II.2.32}$$

Avec

- $P_k = -\tau_{ij}\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$;
- $\sigma_K = \sigma_L = 1{,}0$.

En conclusion de cette partie sur les équations de l'écoulement, le système d'équations moyennées selon une approche RANS muni du modèle de fermeture $k - l$ comporte $7 + n_e$ équations, et autant d'inconnus $\left(\rho, (v_i)_{i\in[\![1;3]\!]}, (y_i)_{i\in[\![1;n_e]\!]}, e_t, k, l\right)$. Il s'écrit :

Equations de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\widetilde{v_j}\right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{y_k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\widetilde{v_j}\widetilde{y_k}\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_{diff}^{k}\frac{\partial \widetilde{y_k}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t}\frac{\partial \widetilde{y_k}}{\partial x_j}\right) + \overline{s_k} \quad , \quad k \in [\![1; n_e]\!]$$

Equations de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{v_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\widetilde{v_i}\widetilde{v_j}\right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \bar{\rho}g\delta_{i3} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_{eff}\widetilde{\tau_{ij}} - \frac{2}{3}k\delta_{ij}\right) \quad , \quad i \in [\![1; 3]\!]$$

Equations de conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{e_t}) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{h_t}\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha\frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t c_p}{\mathrm{Pr}_t}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_k \widetilde{h_k}\bar{\rho}D_{diff}^{k}\frac{\partial \widetilde{y_k}}{\partial x_j}\right)$$
$$+ \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\sum \widetilde{h_k}\frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t}\frac{\partial \widetilde{y_k}}{\partial x_j} + 2(\mu + \mu_t)\widetilde{\tau_{ij}}\widetilde{v_i} + \frac{2}{3}k\delta_{ij}\widetilde{v_i}\right)$$

Equations de conservation des scalaires de la turbulence :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k v_i) = \rho P_k - C_\mu^{\frac{3}{4}}\rho\frac{k^{3/2}}{l} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right] - 2\mu\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial k}{\partial x_i}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho l) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho l v_i) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_L}\right)\frac{\partial l}{\partial x_i}\right] + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\pi_l\mu_t\frac{l}{k}\frac{\partial k}{\partial x_i}\right) + \kappa^2 C_\mu^{\frac{1}{4}}\rho k^{1/2} - 2k^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial l}{\partial x_i}\right)$$

II.3 Transformations chimiques dans le panache

Dans cette partie, nous présentons les modèles permettant de décrire les transformations des espèces chimiques éjectées par les moteurs dans le champ proche de l'avion. Comme nous l'avons présenté dans la partie I.2, le mélange est constitué d'une multitude d'espèces chimiques. La prise en compte de toutes les espèces chimiques contenues dans le panache engendrerait un coût trop onéreux en ressources de calcul. Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons plus particulièrement aux espèces et aux processus chimiques jouant un rôle essentiel dans la formation des traînées de condensation. Il s'agit notamment des réactions chimiques utiles à la détermination des concentrations de vapeur d'eau et des espèces soufrées dans le panache. Dans les paragraphes suivants, nous présentons dans un premier temps le mécanisme réactionnel retenu puis nous décrivons les modèles permettant d'évaluer les vitesses des réactions composant le mécanisme réactionnel.

II.3.1 Mécanisme réactionnel

Le Tableau 2 présente la liste des réactions chimiques élémentaires considérées pour modéliser les transformations chimiques subies par les espèces présentes dans le panache. Il s'agit d'un mécanisme réactionnel déjà utilisé dans d'autres études portant sur la modélisation des processus chimiques dans les panaches d'avion en champ proche [*Kärcher et al.*, 1996a; *Wang*, 1998]. Il fait interagir 22 espèces en phase gazeuse au moyen de 60 réactions élémentaires dont 41 sont bimoléculaires et 19 sont trimoléculaires. Une réaction bimoléculaire est une réaction faisant interagir deux réactifs différents. De même, une réaction trimoléculaire en fait interagir trois.

Tableau 2 : Liste des 60 réactions en phase gazeuse du mécanisme réactionnel utilisé pour modéliser les transformations chimiques au sein du panache

Numéro	Réaction	A_r $[\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1}]$	α_r	T_a^r [K]
1	$O + O_3 \rightarrow 2\ O_2$	$1{,}21 \cdot 10^{-11}$	0	2125
2	$H + O_3 \rightarrow OH + O_2$	$1{,}15 \cdot 10^{-10}$	0	436
3	$H + OH \rightarrow O + H_2$	$6{,}86 \cdot 10^{-14}$	2,80	1950
4	$H + HO_2 \rightarrow OH + OH$	$2{,}80 \cdot 10^{-10}$	0	440
5	$H + HO_2 \rightarrow H_2 + O_2$	$6{,}90 \cdot 10^{-11}$	0	636,9
6	$H + HO_2 \rightarrow H_2O + O$	$3{,}85 \cdot 10^{-11}$	0,46	677,9
7	$OH + O \rightarrow H + O_2$	$1{,}83 \cdot 10^{-11}$	0	−173,3
8	$OH + O_3 \rightarrow HO_2 + O_2$	$1{,}90 \cdot 10^{-12}$	0	1000

Numéro	Réaction	A_r [$cm^3 \cdot s^{-1}$]	α_r	T_a^r [K]
9	$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	$1{,}11 \cdot 10^{-16}$	1,64	1589
10	$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	$8{,}34 \cdot 10^{-17}$	1,54	−355
11	$OH + HO_2 \rightarrow H_2O + O_2$	$5{,}09 \cdot 10^{-11}$	0	−72,6
12	$OH + H_2O_2 \rightarrow H_2O + HO_2$	$2{,}13 \cdot 10^{-13}$	0,47	179,8
13	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	$2{,}71 \cdot 10^{-11}$	0	224
14	$HO_2 + O_3 \rightarrow OH + 2\ O_2$	$1{,}40 \cdot 10^{-14}$	0	600
15	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$2{,}20 \cdot 10^{-13}$	0	−600
16	$H_2O_2 + O \rightarrow OH + HO_2$	$2{,}33 \cdot 10^{-11}$	0	2814
17	$H_2O_2 + H \rightarrow OH + H_2O$	$1{,}70 \cdot 10^{-11}$	0	1800
18	$H_2O_2 + H \rightarrow HO_2 + H_2$	$1{,}77 \cdot 10^{-11}$	0	2890
19	$NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$	$2{,}14 \cdot 10^{-12}$	0	1408
20	$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	$3{,}70 \cdot 10^{-12}$	0	−240
21	$NO + NO_3 \rightarrow NO_2 + NO_2$	$1{,}80 \cdot 10^{-11}$	0	−110
22	$NO_2 + O \rightarrow NO + O_2$	$6{,}50 \cdot 10^{-12}$	0	−120
23	$NO_2 + O_3 \rightarrow NO_3 + O_2$	$1{,}20 \cdot 10^{-13}$	0	2450
24	$H + NO_2 \rightarrow OH + NO$	$1{,}40 \cdot 10^{-10}$	0	0
25	$NO_2 + NO_3 \rightarrow NO + O_2 + NO_2$	$1{,}91 \cdot 10^{-13}$	0	1696
26	$NO_3 + O \rightarrow NO_2 + O_2$	$1{,}00 \cdot 10^{-11}$	0	0
27	$OH + NO_3 \rightarrow HO_2 + NO_2$	$2{,}30 \cdot 10^{-11}$	0	0
28	$HNO_2 + O \rightarrow OH + NO_2$	$2{,}00 \cdot 10^{-11}$	0	3000
29	$HNO_2 + H \rightarrow NO_2 + H_2$	$2{,}00 \cdot 10^{-11}$	0	3700
30	$HNO_2 + OH \rightarrow H_2O + NO_2$	$1{,}80 \cdot 10^{-11}$	0	390
31	$HNO_3 + O \rightarrow OH + NO_3$	$3{,}00 \cdot 10^{-17}$	0	0
32	$HNO_3 + OH \rightarrow H_2O + NO_3$	$4{,}02 \cdot 10^{-14}$	0	−317,7
33	$SO + O_2 \rightarrow SO_2 + O$	$1{,}55 \cdot 10^{-13}$	0	2288
34	$SO + O_3 \rightarrow SO_2 + O_2$	$4{,}30 \cdot 10^{-12}$	0	1148
35	$SO + OH \rightarrow SO_2 + H$	$8{,}59 \cdot 10^{-11}$	0	0
36	$SO + NO_2 \rightarrow SO_2 + NO$	$1{,}40 \cdot 10^{-11}$	0	0
37	$SO_2 + O_3 \rightarrow O_2 + SO_3$	$3{,}00 \cdot 10^{-12}$	0	7000
38	$SO_3 + O \rightarrow O_2 + SO_2$	$3{,}17 \cdot 10^{-11}$	0	4455
39	$SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$	$1{,}20 \cdot 10^{-15}$	0	0
40	$HSO_3 + O_2 \rightarrow HO_2 + SO_3$	$1{,}23 \cdot 10^{-12}$	0	346,8
41	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	$4{,}44 \cdot 10^{-16}$	0,98	−94
42	$O + O + M \rightarrow O_2$	$5{,}20 \cdot 10^{-35}$	0	−900
43	$O + O_2 + M \rightarrow O_3$	$5{,}26 \cdot 10^{-12}$	−0,0442129	188
44	$H + O + M \rightarrow OH$	$1{,}30 \cdot 10^{-29}$	−1	0
45	$H + O_2 + M \rightarrow HO_2$	$7{,}69 \cdot 10^{-11}$	−0,0111266	0,132
46	$H + H + M \rightarrow H_2$	$1{,}00 \cdot 10^{-03}$	−1,48184	189
47	$H + OH + M \rightarrow H_2O$	$2{,}09 \cdot 10^{-10}$	−0,0172568	76,2
48	$OH + OH + M \rightarrow H_2O_2$	$1{,}50 \cdot 10^{-11}$	−0,00236827	0,125
49	$HO_2 + HO_2 + M \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$2{,}07 \cdot 10^{-13}$	−0,00621038	−603
50	$NO + O + M \rightarrow NO_2$	$5{,}82 \cdot 10^{-12}$	−0,284489	1,92
51	$OH + NO + M \rightarrow HNO_2$	$5{,}22 \cdot 10^{-12}$	−0,00630535	−159
52	$NO_2 + O + M \rightarrow NO_3$	$2{,}94 \cdot 10^{-11}$	−0,0198225	29,8
53	$OH + NO_2 + M \rightarrow HNO_3$	$1{,}94 \cdot 10^{-12}$	−0,00987939	−584
54	$NO_2 + NO_3 + M \rightarrow N_2O_5$	$6{,}68 \cdot 10^{-13}$	−,191491	1,19
55	$N_2O_5 + M \rightarrow NO_2 + NO_3$	$5{,}85 \cdot 10^{+11}$	$-9{,}74 \cdot 10^{-5}$	$9{,}37 \cdot 10^{2}$
56	$HNO_2 + M \rightarrow OH + NO$	$1{,}26 \cdot 10^{+19}$	−1,24028	$2{,}50 \cdot 10^{4}$
57	$HNO_3 + M \rightarrow OH + NO_2$	$2{,}24 \cdot 10^{+15}$	−0,0100234	$2{,}43 \cdot 10^{4}$
58	$SO_2 + O + M \rightarrow SO_3$	$7{,}37 \cdot 10^{-09}$	−0,264953	185

Numéro	Réaction	A_r $[\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1}]$	α_r	T_a^r [K]
59	$SO_2 + OH + M \rightarrow HSO_3$	$2{,}00 \cdot 10^{-12}$	$-0{,}00258083$	$-0{,}775$
60	$CO + O + M \rightarrow CO_2$	$2{,}53 \cdot 10^{-14}$	$0{,}00486928$	$1{,}46 \cdot 10^{1}$

Dans cette thèse, la simulation des transformations chimiques permet entre autres de calculer les concentrations des espèces SO_3 et H_2SO_4 dans le panache. Ces dernières sont en effet fortement impliquées dans les processus microphysiques intervenant dans la formation des traînées de condensation. Dans le mécanisme réactionnel, l'acide sulfurique est produit à partir de l'hydratation de SO_3 (R39), lui-même produit par l'oxydation de SO_2 (R58 et R37) et HSO_3 (R40). Les oxydants rendant ces réactions possibles sont principalement issus des réactions impliquant des radicaux, par exemple par la production de O (R10) dans les premiers instants de la vie du panache, ou encore de radicaux HO_2 (R45). Quant aux autres réactions considérées dans le mécanisme réactionnel, elles interviennent principalement dans la régulation des concentrations d'oxydant. Ces derniers sont notamment impliqués dans la production des espèces soufrées et azotées.

Le choix de ce schéma réactionnel, dans le cadre de la modélisation de la formation des traînées de condensation, repose sur l'optimisation du nombre d'espèces à prendre en compte. Il est le résultat d'un compromis entre :

- d'une part, l'amélioration de la qualité des résultats par la prise en compte du maximum d'espèces chimiques, garantissant une prédiction convenable des concentrations des espèces impliquées dans les mécanismes microphysiques ;
- et d'autre part, le coût de calcul qui augmente en fonction du nombre d'espèces chimiques prises en compte. En effet, à chaque espèce ajoutée dans le mécanisme réactionnel correspond une équation de transport supplémentaire à résoudre.

Nous avons par exemple évalué un mécanisme simplifié, ne comportant que les réactions clés conduisant à la formation des oxydes de soufre [*Reiner et Arnold*, 1993; *Tremmel et Schumann*, 1999] (voir Tableau 3). Les résultats obtenus révèlent des différences de concentration molaire d'acide sulfurique de plus d'un ordre de grandeur à 100 m en aval de la sortie des tuyères par rapport au schéma réactionnel précédemment présenté [*Ghedhaifi et Vancassel*, 2011]. Il n'a par conséquent pas pu être retenu en raison de son incapacité à reproduire avec une fidélité suffisante les évolutions des concentrations d'espèces impliquées dans les processus microphysiques de formation des traînées de condensation.

Tableau 3 : Schéma réactionnel réduit de formation des oxydes de soufre

Numéro	Réaction
1	$SO_2 + O \rightarrow SO_3 + M$
2	$SO_2 + OH + M \rightarrow HSO_3 + M$
3	$HSO_3 + O_2 \rightarrow SO_3 + HO_2$
4	$SO_3 + HO_2 + M \rightarrow H_2SO_4 + M$

Le mécanisme réactionnel utilisé n'intègre pas les réactions photochimiques présentes dans le schéma cinétique complet d'origine. En effet, l'échelle de temps caractéristique de la réaction photochimique la plus rapide, c'est-à-dire la photodissociation de NO_2 et HNO_2, est d'environ 2 minutes alors que le sillage en champ proche que nous nous proposons d'étudier, n'est âgé que de quelques secondes [*Kärcher et al.*, 1996a]. Nous pouvons donc négliger les réactions photochimiques dans le champ proche dans cette étude car elles n'ont pas le temps de se réaliser.

II.3.2 Modélisation de la vitesse de réaction

L'évolution des concentrations des 22 espèces impliquées dans le mécanisme réactionnel du Tableau 2 est, du point de vue de la mécanique des fluides, décrite par autant d'équations de conservation (II.2.21). Dans ces équations, le terme source s_k(on omet ici le filtrage des grandeurs pour simplifier la lecture) représente le taux de réaction (production ou consommation) massique de l'espèce E_k dû aux transformations chimiques. Il dépend des vitesses de réactions chimiques dont nous présentons la modélisation ci-dessous.

Considérons les équations chimiques des n_r réactions du mécanisme réactionnel impliquant l'espèce E_j :

$$\sum_{j \in J_{r,1}} \nu_{r,1,j} E_j \leftrightarrow \sum_{j \in J_{r,2}} \nu_{r,2,j} E_j \quad , \quad r \in [\![1; n_r]\!] \tag{II.3.1}$$

Avec

- $J_{r,1}$ la liste des indices des réactants de la réaction r ;
- $\nu_{r,1,j}$ le coefficient stœchiométrique molaire du réactant E_j dans la réaction r ;
- $J_{r,2}$ la liste des indices des produits de la réaction r ;
- $\nu_{r,2,j}$ le coefficient stœchiométrique molaire du produit E_j dans la réaction r.

On notera $\nu_{r,j}$ le coefficient algébrique de l'espèce E_j dans la réaction r , défini par :

$$\nu_{r,j} = \nu_{r,j,1} \text{ pour } j \in J_{r,1} \text{ et } \nu_{r,j} = -\nu_{r,j,2} \text{ pour } j \in J_{r,2} \qquad \text{(II.3.2)}$$

A chaque réaction r est associé un modèle cinétique, décrit dans les paragraphes suivants, qui permet d'évaluer son taux de réaction molaire W_r en fonction des variables d'état :

$$W_r = W_r(T, C_{i,m}) \qquad \text{(II.3.3)}$$

Où $C_{i,m}$ est la concentration molaire de l'espèce E_i. Nous pouvons alors calculer la contribution de l'ensemble des réactions au taux de réaction molaire total $W_{t,i}$ de l'espèce E_i :

$$W_{t,i} = \sum_{r=1}^{n_r} \nu_{r,i} W_r \qquad \text{(II.3.4)}$$

Le taux de réaction massique par unité de volume, s_i, correspondant à l'espèce E_i peut alors être évalué par :

$$s_i = M_i W_{t,i} \qquad \text{(II.3.5)}$$

Avec M_i la masse molaire de l'espèce E_i.

Deux lois sont généralement utilisées pour modéliser les vitesses de réaction : la loi d'Arrhenius et la loi de Troe. Elles sont présentées ci-dessous.

II.3.2.1 Loi d'Arrhenius

La loi d'Arrhenius est la modélisation la plus couramment utilisée pour évaluer la vitesse d'une réaction chimique en fonction de la température pour les réactions bimoléculaires du type :

$$A + B \leftrightarrow C + D \qquad \text{(II.3.6)}$$

Les taux des réactions sont calculés en fonction de la température et des concentrations molaires $C_{i,m}$ des espèces :

$$W_r(T) = K_r(T) \prod_{i \in J_{r,1} \cup J_{r,2}} \left[C_{i,m}\right]^{\nu_{r,i}} \tag{II.3.7}$$

Avec $K_r(T)$ le coefficient de vitesse de la réaction r. La loi d'Arrhenius donne l'expression de ce coefficient en fonction de la température selon la formulation suivante :

$$K_r(T) = A_r T^{\alpha_r} \exp\left(-\frac{T_a^r}{T}\right) \tag{II.3.8}$$

Avec

- A_r le facteur pré-exponentiel ;
- α_r l'exposant de la température ;
- T_a^r la température d'activation.

En première approximation, les coefficients d'Arrhenius ne dépendent pas de la température. Le Tableau 2 liste les coefficients d'Arrhenius de chacune des réactions prises en compte dans le schéma réactionnel.

La loi d'Arrhenius peut être interprétée physiquement à l'aide de l'énergie d'activation E_a^r de la réaction :

$$E_a^r = RT_a^r \tag{II.3.9}$$

La Figure 24 donne une représentation schématique des niveaux d'énergie impliqués lors d'une réaction chimique. Bien que la réaction permette au système à un état d'énergie donné de parvenir globalement à un niveau d'énergie plus stable, son initiation nécessite le passage par un état de transition de niveau énergétique plus élevé que celui de l'état initial. Cette énergie de transition, appelée énergie d'activation, est fournie par l'agitation thermique à travers les collisions intermoléculaires. En résumé, plus l'énergie d'activation est importante, plus l'état de transition est « difficile » à atteindre, et plus la réaction est lente.

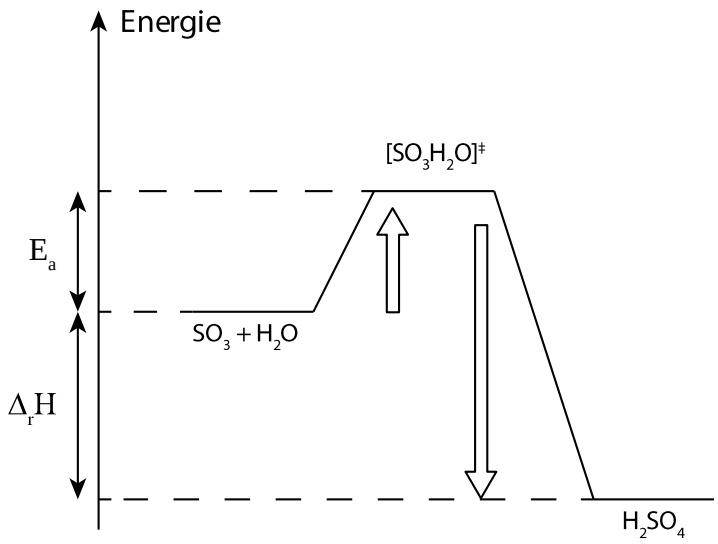

Figure 24 : Schéma énergétique de la réaction $SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$

La loi d'Arrhenius est utilisée pour les réactions (R1) à (R41)du mécanisme réactionnel du Tableau 2. Les paramètres cinétiques utilisés proviennent de la base de données du *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [*Manion et al.*, 2015]. Ils sont majoritairement issus d'interpolations de données disponibles pour différentes plages de température dont celle qui nous intéresse ici, à savoir pour $T \in [200\ \mathrm{K}; 600\ \mathrm{K}]$.

II.3.2.2 Loi de Troe

La loi de Troe est une forme dérivée de la loi d'Arrhenius. Elle est utilisée pour les réactions sensibles à la pression. À la température considérée, l'agitation thermique ne fournit pas suffisamment d'énergie pour que les réactants initient seuls la réaction. Cette dernière peut en revanche être déclenchée par des collisions avec d'autres molécules du système, appelées troisième corps, notées M. Les collisions leur conférant de fait le niveau d'énergie suffisant pour atteindre l'état intermédiaire (voir Figure 25). Durant ce processus, le troisième corps est conservé, c'est-à-dire qu'il ne participe pas chimiquement à la réaction. Dans l'atmosphère, *M* représente le plus souvent l'air, soit principalement les molécules de diazote N_2 et de dioxygène O_2.

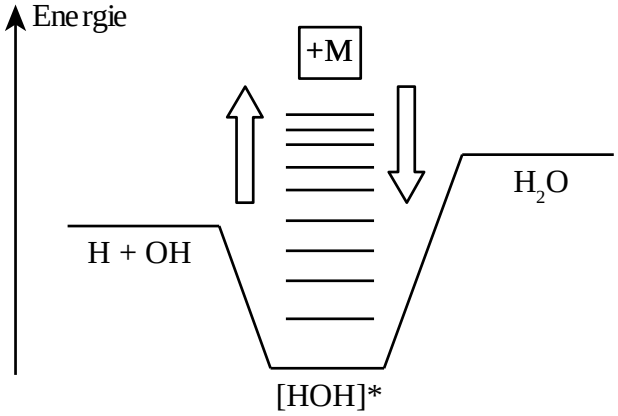

Figure 25 : Schéma énergétique de la réaction $\mathrm{H} + \mathrm{OH} \xrightarrow{M} \mathrm{H_2O}$

La loi de Troe est en fait une combinaison de deux lois d'Arrhenius, représentant deux limites, l'une à basse pression $K_{r,0}(T)$ et l'autre à haute pression $K_{r,\infty}(T)$:

$$K_{r,0}(T) = A_{r,0} T^{\alpha_{r,0}} \exp\left(-\frac{T_a^{r,0}}{T}\right) \tag{II.3.10}$$

$$K_{r,\infty}(T) = A_{r,\infty} T^{\alpha_{r,\infty}} \exp\left(-\frac{T_a^{r,\infty}}{T}\right) \tag{II.3.11}$$

Avec $\left(A_{r,0}\,;\alpha_{r,0}\,;\,T_a^{r,0}\right)$ et $\left(A_{r,\infty}\,;\,\alpha_{r,\infty}\,;\,T_a^{r,\infty}\right)$ les coefficients d'Arrhenius à basse et à haute pression, respectivement. La loi de Troe lie ces deux limites dans une même expression du coefficient de vitesse donnée par :

$$K_r(M,T) = \frac{K_{r,0}(T)\,[M]}{1 + \left(K_{r,0}(T)\,[M]/K_{r,\infty}(T)\right)}\,F \tag{II.3.12}$$

Avec $[M]$ la concentration moléculaire du troisième corps. Dans la formulation de Troe, F s'exprime comme :

$$F = F_c^{\left\{1+\left[\log_{10}\left(K_{r,0}(T)\,[M]/K_{r,\infty}(T)\right)\right]^2\right\}^{-1}} \tag{II.3.13}$$

Avec $F_c = 0{,}6$ [*DeMore et al.*, 1997].

Dans le cadre de cette thèse, le logiciel CEDRE n'offre aujourd'hui que le choix de la loi d'Arrhenius pour la modélisation du coefficient de vitesse. Cette limitation nous a conduits à choisir d'approximer la loi de Troe par une loi d'Arrhenius moyenne sur la plage de

température rencontrée ($T \in [200\ \mathrm{K}\,;\ 600\mathrm{K}]$). Nous profitons du fait que la pression est peu variable dans le panache dans nos cas d'étude. Nous cherchons donc, pour les réactions faisant intervenir un troisième corps (R42) à (R60) (cf. Tableau 2), un ensemble de paramètres $\left(A'_{r,i}\,;\alpha'_{r,i}\,;T_a^{r,i\prime}\right)$ permettant de représenter l'évolution des coefficients de vitesse avec une loi d'Arrhenius. Pour ce faire, nous avons choisi de calculer la concentration de M en utilisant les propriétés de l'air dans les conditions atmosphériques ambiantes correspondant à nos cas d'étude, à savoir $P = 23920$ Pa et $T = 219{,}2$ K :

$$[M] = \frac{P\mathrm{Na}}{RT} \tag{II.3.14}$$

D'où une valeur de $[M]$ égale à $7{,}91 \cdot 10^{23}$ molécules $\cdot\ \mathrm{m}^{-3}$. Les paramètres $\left(A'_{r,i}\,;\alpha'_{r,i}\,;T_a^{r,i\prime}\right)$ interpolés figurent dans le Tableau 2 (réactions (R42) à (R60)). Notons cependant que les coefficients de vitesse des réactions (R42) et (R44) n'ont pas été interpolés, car déjà indépendants de la pression dans le mécanisme original, bien que correspondant à des réactions à trois corps.

Les erreurs relatives maximales sur la plage de température ($T \in [200\ \mathrm{K}\,;\ 600\mathrm{K}]$) dues à l'approximation ci-dessus sont reportées sur la Figure 26 pour chacune des réactions concernées. Nous remarquons que les erreurs relatives sont plutôt faibles. En effet, l'erreur relative maximale constatée pour la réaction (R46) est de seulement 2 % entre la loi d'Arrhenius approchée et la loi de Troe d'origine. La Figure 27 montre la variation du coefficient de vitesse dans la plage de température considérée pour cette réaction, modélisé d'une part, par la loi de Troe dont les paramètres sont donnés par *Wang* [1998], et interpolé d'autre part, par une loi d'Arrhenius. Nous pouvons ainsi observer que les tendances sont semblables.

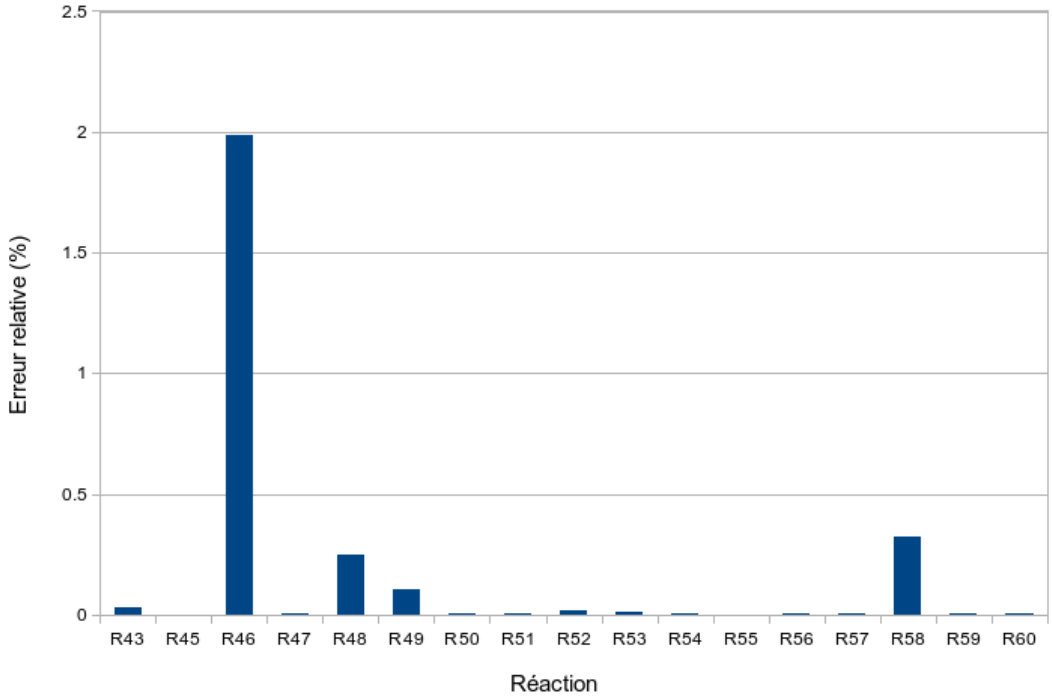

Figure 26 : Diagramme des erreurs relatives induites par l'approximation des coefficients de vitesses par une loi d'Arrhenius pour les réactions impliquant un troisième corps

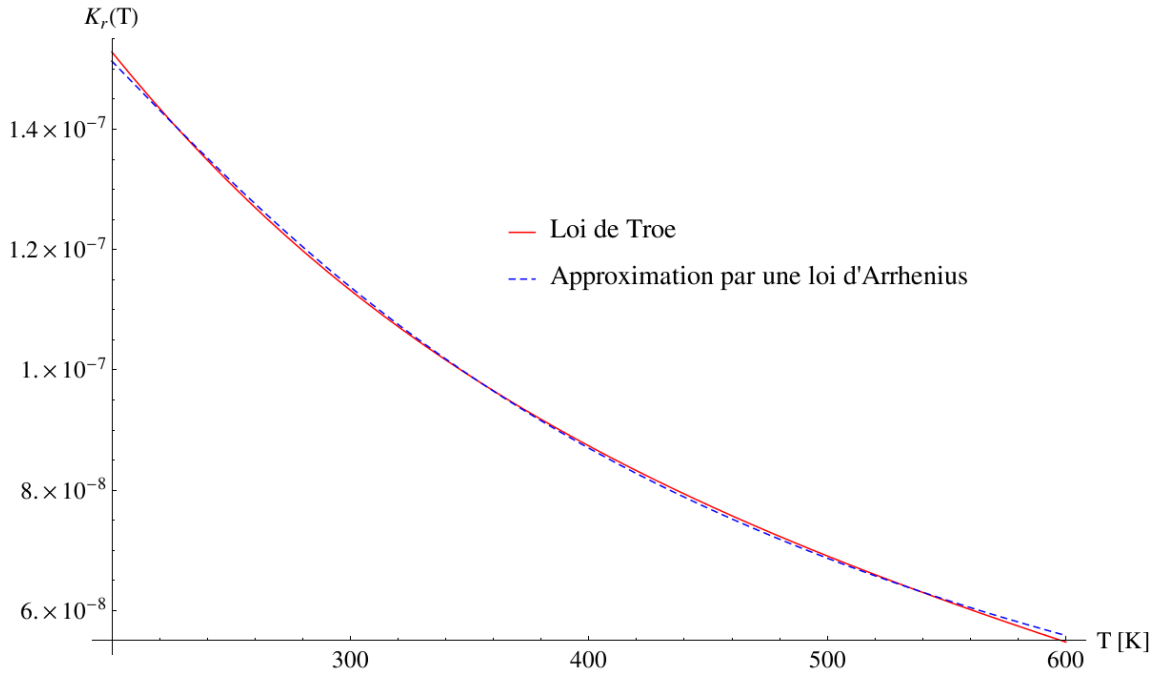

Figure 27 : Evolution du coefficient de vitesse de la réaction H + H + M → H2, déterminé par la loi de Troe et approximé par une loi d'Arrhenius

II.4 Processus microphysiques

La modélisation des transformations chimiques dans le panache nous permet de prédire les concentrations des espèces chimiques, et notamment celles des espèces soufrées et de la vapeur d'eau. Comme nous le verrons dans les paragraphes qui suivent, ces concentrations constituent des paramètres essentiels pour la modélisation des processus microphysiques dans le champ proche des avions. Ici, nous présentons les modèles permettant de décrire les principaux processus microphysiques intervenant dans la formation des traînées de condensation.

Dans un premier temps, nous décrivons les propriétés et le transport des particules de suies dans le panache sur lesquelles ont lieu les processus microphysiques. Ensuite, la modélisation des phénomènes d'activation des particules de suies est présentée. Ils se produisent principalement selon deux voies possibles, qui entraînent une couverture partielle de leur surface par des éléments soufrés. Ces deux voies sont l'adsorption de molécules gazeuses et la collecte de particules volatiles. Une fois activées, les suies constituent, en fonction des conditions thermodynamiques et d'humidité ambiantes, des noyaux de condensation potentiels pour la vapeur d'eau. Les cristaux de glace formés ensuite sont alors le siège de processus de croissance et d'évaporation.

II.4.1 Transport des particules de suies

Les particules de suies constituent les noyaux de condensation de la vapeur d'eau dans le panache. De ce fait, l'évolution de leur position et de leurs propriétés (rayon, densité) doivent être connue en tout point du panache. Dans cette thèse, la modélisation des particules de suie se fait selon une approche eulérienne. Cela signifie que toutes leurs propriétés telles que leur vitesse ou leur densité sont décrites comme des champs de quantités associés aux points du domaine de calcul. Dans cette sous partie, nous détaillons les modèles permettant de décrire l'évolution des particules de suie dans le panache.

En premier lieu, nous adoptons des hypothèses simplificatrices sur les propriétés des suies. De fait, nous considérons les particules de suie du panache comme sphériques bien qu'elles soient constituées en sortie de moteur d'agrégats de particules primaires (voir paragraphe I.2.2). Ces dernières présentent une morphologie complexe qui ne peut pas être décrite par les outils classiques de géométrie euclidienne. La simplification en une forme

sphérique permet de caractériser la taille des particules de suie de manière commode par un diamètre équivalent. Ce dernier correspond alors au diamètre de la sphère de volume égal à celui occupé par l'agrégat de suie. Cette hypothèse peut être justifiée à partir d'un certain âge du panache, par le fait que lors de la formation des particules de glace, l'intensité de la turbulence ambiante privilégie une croissance isotrope des particules. Les inégalités surfaciques d'origine deviennent alors négligeables à mesure que la particule croît. *Kärcher et al* [1996b] montrent ainsi que les cristaux de glace formés par nucléation hétérogène dans le panache se retrouvent assez rapidement assimilables à des sphères.

La seconde hypothèse que nous adoptons consiste à considérer que les particules dans le panache sont continuellement en état d'équilibre dynamique et thermique avec le fluide qui les transporte. Cela signifie que leur vitesse et leur température sont, à chaque instant et en chaque point du domaine, égales à la vitesse et à la température du fluide. Dans le but de justifier cette hypothèse, nous évaluons les temps caractéristiques de mise à l'équilibre dynamique et thermique d'une particule de suie.

Considérons l'équation du mouvement d'une particule de glace dans un fluide, soumise aux seules forces de son poids, de la poussée d'Archimède et des forces de frottement modélisées par une loi de Stokes :

$$m_p \frac{d\vec{v}}{dt} = -3\pi\mu D_p \vec{v} + \left(m_p - \frac{\pi}{6} D_p^3 \rho\right) \vec{g} \qquad \text{(II.4.1)}$$

Avec

- m_p la masse de la particule ;
- $\vec{v}$ la vitesse du fluide ;
- μ la viscosité dynamique du fluide ;
- D_p le diamètre de la particule ;
- ρ la masse volumique du fluide.

Dans l'équation (II.4.1), le terme $-3\pi\mu D_p \vec{v}$ représente la force de frottement et le terme $-\frac{\pi}{6} D_p^3 \rho \vec{g}$ la poussée d'Archimède.

En divisant l'équation (II.4.1) par $3\pi\mu D_p$, nous obtenons :

$$\tau_d \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{v} + \tau_d \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right) \vec{g} \qquad \text{(II.4.2)}$$

Avec τ_d le temps caractéristique associé à la dynamique de la particule :

$$\tau_d = \frac{\rho_p D_p^2}{18\mu} \qquad \text{(II.4.3)}$$

Et ρ_p la masse volumique de la particule. Autrement dit, τ_d est la durée caractéristique nécessaire pour que la particule soit en équilibre dynamique avec le fluide environnant. Elle augmente notamment avec le diamètre de la particule, car cette dernière acquiert une inertie. Les particules de suies, en sortie de tuyère, sont initialement émises avec un diamètre relativement petit, de l'ordre de 40 nm. Leur croissance par nucléation hétérogène de glace les font grossir jusqu'à un diamètre de l'ordre de 1 µm dans le champ proche (1 s après éjection des gaz) lorsque les traînées de condensation se forment [*Kärcher et al.*, 1998a]. À une taille de 1 µm, le temps caractéristique pour atteindre l'équilibre dynamique est estimé selon la relation (II.4.3) à 10^{-6} s.

De manière analogue, le temps caractéristique τ_c du transfert radiatif à travers une particule de rayon r_p est donné par *Chomiak et Gupta* [1989] :

$$\tau_c = \frac{r_p^2 \rho_p c_p}{3\alpha} \qquad \text{(II.4.4)}$$

Avec c_p la capacité thermique de la particule et α son coefficient de conductivité thermique. La capacité thermique de la glace étant de $2{,}06\ \mathrm{kJ \cdot kg^{-2} \cdot K^{-1}}$ et sa conductivité de $2{,}1\ \mathrm{W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}}$ à 0 °C, le temps caractéristique nécessaire pour atteindre l'équilibre thermique se trouve être de l'ordre de 10^{-10} s.

Ainsi, les temps caractéristiques d'équilibre dynamique et thermique son négligeables devant les temps caractéristiques d'évolution microphysique de la particule. Par exemple, le temps caractéristique du processus d'activation des suies est d'environ 10^{-1} s [*Kärcher*, 1998]. L'hypothèse adoptée revient à considérer le comportement des particules solides du panache comme celui d'un gaz du mélange.

Nous pouvons alors modéliser la densité de particules de suie N_s avec un scalaire passif conservatif, dont l'équation de transport s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\widetilde{N_s}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\tilde{v}_i\widetilde{N_s}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}D_{diff}\frac{\partial\widetilde{N_s}}{\partial x_i} - \bar{\rho}\widetilde{v_j''N_s''}\right) \qquad \text{(II.4.5)}$$

Avec D_{diff} le coefficient de diffusion massique du mélange, donné par :

$$D_{diff} = \frac{\mu}{\mathrm{Sc}} \qquad \text{(II.4.6)}$$

Avec Sc le nombre de Schmidt, fixé à 1. L'équation (II.4.5) est ajoutée au système d'équation global résolu dans CEDRE. Le scalaire N_s est dit passif car sa valeur n'affecte pas les propriétés du fluide (par exemple ρ, $\vec{v}$ ou μ) et son équation de transport (II.4.5) ne contient pas de terme source. Autrement dit, nous ne considérons aucune rétroaction de la densité des particules sur les propriétés de l'écoulement.

En résumé, nous pouvons à présent définir un champ de densité de particule de suie $N_s(x, y, z)$, auquel est associé un rayon $r_s(x, y, z)$, correspondant à la taille des particules au point $M(x, y, z)$.

II.4.2 Activation des suies

Nous modélisons ensuite dans CEDRE les processus d'activation se déroulant à la surface des particules de suie, leur conférant des propriétés hydrophiles. Rappelons que deux voies d'activation sont prises en compte : l'adsorption de molécules soufrées et la collecte de particules volatiles (H_2SO_4, H_2O). La couverture des particules de suies est évaluée par la fraction de surface activée θ_{act}, c'est-à-dire le rapport entre la surface de suie activée A_{act} et la surface totale de suie disponible A_s :

$$\theta_{act} = \frac{A_{act}}{A_{suie}} = \theta_{ads} + \theta_{col} \qquad \text{(II.4.7)}$$

Avec

- θ_{ads} la fraction de surface activée par le processus d'adsorption ;
- θ_{col} la fraction de surface activée par le processus de collecte.

Dans l'équation (II.4.7), θ_{act} est la somme des deux contributions à l'activation des suies. θ_{act} quantifie, en chaque position de l'espace ayant une densité de particules de suie non nulle, la fraction surfacique totale de suie ayant acquis des propriétés hydrophiles. Ces surfaces deviennent alors des sites de condensation potentiels. Nous décrivons dans la suite la modélisation de chacun de ces deux processus.

II.4.2.1 Adsorption des molécules SO_3 et H_2SO_4

L'adsorption des molécules de gaz sur les suies est décrite par un modèle de type Langmuir [*Masel*, 1996], en l'absence de désorption. La Figure 28 donne une représentation schématique de ce processus. Les adsorbats (SO_3 et H_2SO_4), présents autour de la particule de suie, peuvent être adsorbés en se fixant sur des sites d'adsorption disponibles à la surface de l'adsorbant (la particule de suie). L'adsorption peut se produire selon différents processus, comme les interactions de Van der Waals ou les interactions dipolaires. À la fin du processus d'adsorption, se forme une monocouche moléculaire recouvrant partiellement la particule de suie.

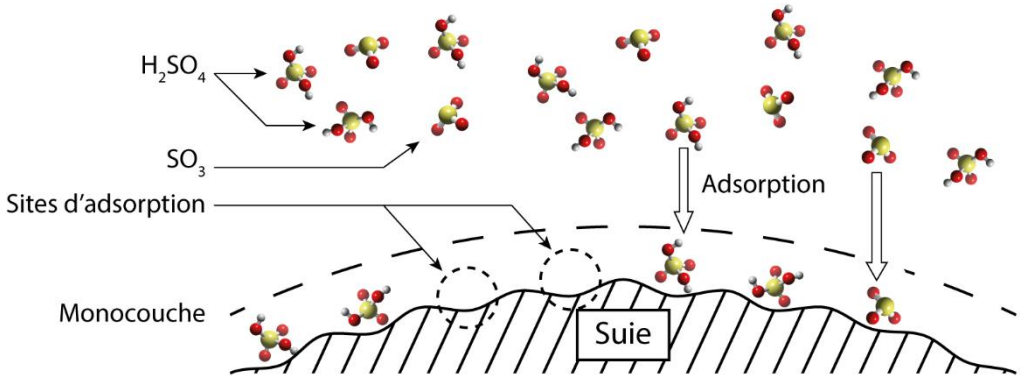

Figure 28 : Schéma du processus d'adsorption des molécules de SO_3 et de H_2SO_4 sur les sites d'adsorption à la surface des particules de suie

La vitesse d'adsorption dépendant des concentrations des adsorbats, le modèle utilisé suit naturellement une approche cinétique. Nous modélisons pour une espèce E_i, initialement dans un état « libre », le passage vers un état « adsorbée », en introduisant une espèce supplémentaire $E_{i,ads}$:

$$E_i \rightarrow E_{i,ads} \qquad \text{(II.4.8)}$$

La modélisation du processus d'adsorption ajoute donc une équation au système pour chacune des espèces adsorbées. L'introduction de ces espèces supplémentaires est nécessaire car cela garantit la conservation de la masse globale des espèces du mélange. Le taux d'adsorption s_{ads}^{i} de l'absorbat E_i, contribuant au terme source s_i de l'équation de conservation de la masse (II.2.21), est donné par *Wong et al.* [2008] :

$$s_{ads}^{i} = -\frac{\pi D_s^2 \alpha_{ads} \rho y_i N_s v_{th,i}}{4M_i} \ (1 - \theta_{act}) \qquad \text{(II.4.9)}$$

Avec

- D_s le diamètre des suies sèches ;
- α_{ads} la probabilité de fixation des molécules sur la suie ;
- $v_{th,i}$ la vitesse quadratique moyenne de l'absorbat E_i (SO_3 et H_2SO_4) ;

α_{ads} est choisie égal à 1 lorsque $T \leq 420$ K et vaut 0 lorsque $T > 420$ K. Cela signifie que les particules de suies ne peuvent être activées par adsorption dans la partie chaude du jet.

$v_{th,i}$ est donnée par exemple par *Pruppacher et Klett* [1997] :

$$v_{th,i} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \, m_{mol,i}}} \qquad \text{(II.4.10)}$$

Avec k_B la constante de Boltzmann et $m_{mol,i}$ la masse d'une molécule de l'espèce E_i.

Dans l'équation (II.4.9), θ_{act} est évaluée en fonction de θ_{ads} et θ_{col} selon l'expression (II.4.7). θ_{ads} est calculée en fonction des fractions massiques des espèces adsorbées $y_{i,ads}$ comme suit :

$$\theta_{ads} = \sum_{i,ads} \frac{\mathrm{Na}\rho y_{i,ads}}{\pi D_s^2 N_s \sigma_0 M_i} \qquad \text{(II.4.11)}$$

Où σ_0 représente la densité surfacique moyenne estimée de sites disponibles à la surface des particules de suie. Celle-ci vaut environ $\sigma_0 \approx 5 \cdot 10^{18}$ m^{-2}. Cette densité est calculée à partir du diamètre moléculaire d'une molécule d'acide sulfurique ($D_{\mathrm{H_2SO_4}} = 0{,}487$ nm) qui nous donne la taille d'un site d'adsorption :

$$\sigma_0 \approx \frac{4}{\pi D_{\mathrm{H_2SO_4}}^2} \tag{II.4.12}$$

Quant à l'expression de θ_{col}, elle dépend du nombre et de la taille des particules volatiles collectées sur la suie. Elle sera donnée dans le paragraphe suivant, dédié à la modélisation du processus de collecte de particules.

Le terme source de l'équation de conservation de masse de l'espèce adsorbé $E_{i,ads}$ s'écrit alors :

$$s_{ads}^{i,ads} = -s_{ads}^{i} \tag{II.4.13}$$

L'équation (II.4.9) montre que le taux d'adsorption augmente avec la fréquence d'impact entre particules de suie et adsorbats. En effet, le taux est proportionnel aux concentrations des éléments mis en jeu et à la vitesse quadratique des absorbats. Il est également proportionnel à la surface médiane de la suie $\pi D_s^2/4$. Plus la particule est grosse, plus fortes seront les chances de collision avec les adsorbats. Le facteur $(1-\theta_{act})$ traduit les effets de ralentissement de l'adsorption, liés à la saturation des sites à la surface de la suie. Il limite également la couverture à une mono couche de molécules, correspondant à $\theta_{act} = 1$. Par ailleurs, rappelons que la couverture surfacique des suies ne se produit pas uniquement par le processus d'adsorption mais également par celui de la collecte des particules volatiles. Autrement dit, la collecte des particules volatiles contribue également à l'effet de saturation, en intervenant dans le facteur $(1-\theta_{act})$

II.4.2.2 Collecte des particules (H_2SO_4, H_2O)

Comme indiqué dans le paragraphe I.3.1, la collecte des particules volatiles se produit en présence de gouttelettes d'acide sulfurique hydratées (H_2SO_4, H_2O) qui ont été formées par nucléation binaire homogène dans les premiers instants du panache. Ces agrégats contribuent à étendre la surface activée des suies par un processus de coagulation. Cette dernière correspond à l'adhérence des particules volatiles soufrées à la surface des suies suite à leur collision, causée par l'agitation thermique.

Dans le cadre de cette thèse, nous ne modélisons pas la simulation des processus de nucléation binaire homogène et de coagulation menant à la formation de particules volatiles dans le panache. Afin d'obtenir les concentrations précises des particules volatiles dans le

panache, il aurait été nécessaire dans un premier temps de prendre en compte en amont la chimie impliquant les éléments ioniques du panache. Ces espèces ioniques jouent en effet un rôle central dans la coalescence des molécules du panache, entraînant la formation d'aérosols soufrées chargés [*Yu et Turco*, 1997]. La présence de micro-particules chargées favorise alors les processus de condensation et de coagulation dans le panache en raison des effets électrostatiques. La concentration des particules (H_2SO_4, H_2O) dépend par conséquent grandement de ces processus.

Afin d'étudier les processus d'activation des particules suie par la collecte de particules volatiles, nous avons choisi d'estimer la concentration et la taille moyenne des particules (H_2SO_4, H_2O) dans le panache de manière simple. La littérature fournit des mesures et des simulations des propriétés de particules volatiles dans les panaches d'avion en fonction de la teneur en soufre du carburant et de l'âge du panache. Par exemple, la Figure 29 présente des résultats de simulation de *Yu et al.* [1999] pour une teneur initiale en carburant de 20 ppm à différents temps de vie du panache. Pour un panache âgé de 0,5 s, les particules volatiles sont principalement regroupées en deux classes en fonction de leur diamètre, à savoir une classe à très petits diamètre (inférieur à 2 nm) et une classe centrée à 3 nm. Les gouttelettes d'acide sulfurique hydratées (H_2SO_4, H_2O) sont principalement représentées dans la première catégorie. La représentation des concentrations de particules (H_2SO_4, H_2O) que nous proposons consiste alors à simuler la présence des particules dans le panache en les injectant directement dans le domaine de calcul à partir de la sortie primaire du moteur. Leur taille correspond à celle donnée par la littérature pour une teneur en soufre donnée et un panache âgé de 0,5 s. L'indice d'émission des particules (H_2SO_4, H_2O) à la sortie du moteur est choisi de manière à ce qu'il soit équivalent, après dilution, à celle donnée par la littérature pour un panache âgé de 0,5 s à la teneur en soufre correspondante. On parle alors d'indice d'émission apparent.

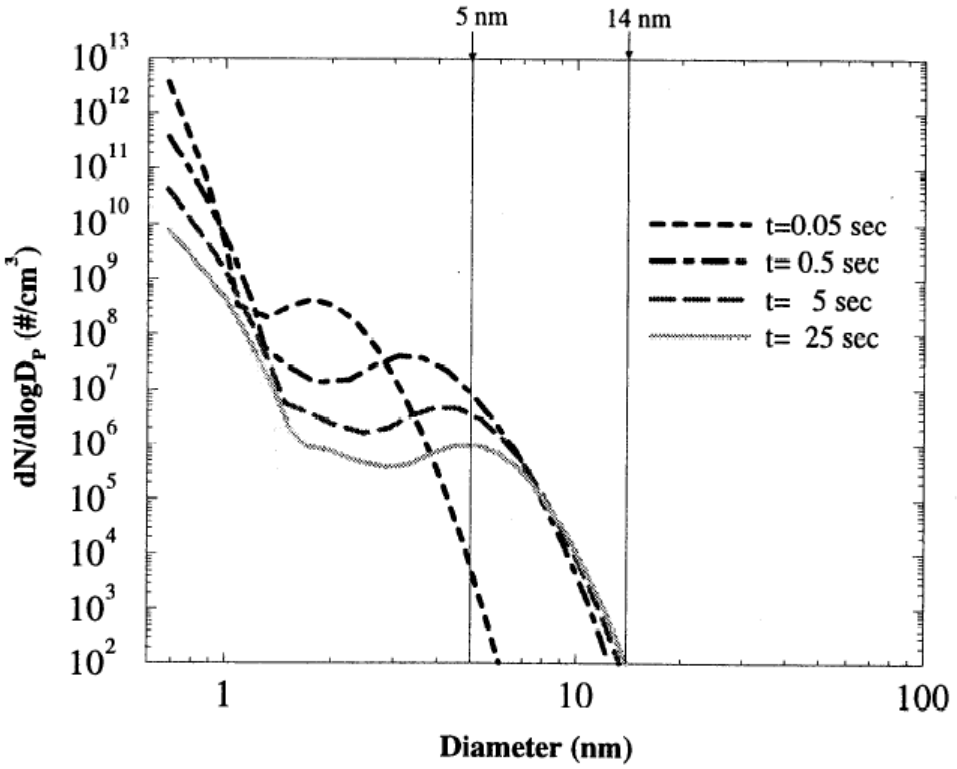

Figure 29 : Distribution en taille des particules volatiles à 4 âges différents du panache, pour une teneur en soufre du carburant de 20 ppm

Source : [*Yu et al.*, 1999]

La modélisation des phénomènes d'activation des suies par collecte nécessite l'introduction de deux quantités conservées supplémentaires. L'une représentant la densité de particules (H_2SO_4, H_2O) N_{vol}, et l'autre la densité de particules (H_2SO_4, H_2O) collectées N_{vol}^{col} à la surface des particules de suies. Ces deux quantités conservées sont régies par des équations de transport s'écrivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho N_{vol}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i N_{vol}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{diff}\frac{\partial N_{vol}}{\partial x_i}\right) - \rho s_{col} \qquad \text{(II.4.14)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho N_{vol}^{col}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i N_{vol}^{col}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{diff}\frac{\partial N_{vol}^{col}}{\partial x_i}\right) + \rho s_{col} \qquad \text{(II.4.15)}$$

Avec s_{col} le taux massique de collecte des particules (H_2SO_4, H_2O) qui est une grandeur positive. Cela signifie qu'une particule volatile, une fois collectée, reste à la surface de la particule de suie.

Les particules (H_2SO_4, H_2O) sont ainsi assimilées à un gaz, ce qui revient à négliger leur inertie propre compte tenu de leur petite taille. s_{col}, qui modélise la vitesse de collecte des particules (H_2SO_4, H_2O), est calculée par une équation de coagulation [*Kärcher*, 1998] :

$$s_{col} = K(D_s, D_{vol})\, N_{vol}\, N_s\, (1 - \theta_{act}) \qquad \text{(II.4.16)}$$

Avec $K(D_s, D_{vol})$ le coefficient de coagulation entre les particules de suie de diamètre D_s et les particules volatiles de diamètre D_{vol}. Ce coefficient décrit la probabilité qu'ont ces particules de coaguler. Ainsi, plus le coefficient est faible, plus les particules auront de chance de rebondir l'une contre l'autre. $K(D_s, D_{vol})$ est donné par la relation de *Fuchs* [1964] :

$$K(D_s, D_{vol}) = \frac{2\pi\,(D_s + D_{vol})\left(D_{diff}^{s} + D_{diff}^{vol}\right)}{\dfrac{(D_s + D_{vol})}{(D_s + D_{vol}) + (\lambda_s^2 + \lambda_{vol}^2)^{1/2}} + \dfrac{4\left(D_{diff}^{s} + D_{diff}^{vol}\right)}{(D_s + D_{vol})\left(v_{th,s}^2 + v_{th,vol}^2\right)^{1/2}}} \qquad \text{(II.4.17)}$$

Avec

- D_{diff}^{i} le coefficient de diffusion de la particule i ;
- λ_i le libre parcours moyen de la particule i

λ_i est donné par :

$$\lambda_i = \frac{8D_{diff}^{i}}{\pi v_{th,i}} \qquad \text{(II.4.18)}$$

Le lecteur pourra trouver davantage d'informations sur les processus de coagulation en consultant par exemple *Pruppacher et Klett* [1997].

De manière analogue à la modélisation de l'adsorption, le taux de collecte augmente avec la fréquence de collision des particules (H_2SO_4, H_2O) avec les particules de suies. De même, le facteur $(1 - \theta_{act})$ de l'équation (II.4.16) limite la couverture de la surface de la suie et permet de prendre en compte les phénomènes de saturation de la surface en éléments soufrés.

La contribution des particules (H_2SO_4, H_2O) collectées à la couverture de la surface des particules de suies est alors déterminée à partir de leur densité :

$$\theta_{col} = \frac{N_{vol}^{col}}{N_s}\frac{\pi r_{vol}^2}{4\pi r_s^2} = \frac{1}{4}\frac{N_{vol}^{col}}{N_s}\left(\frac{r_{vol}}{r_s}\right)^2 \quad \text{(II.4.19)}$$

Avec r_{vol} le rayon des particules (H_2SO_4, H_2O) collectées. Nous rappelons que nous considérons les particules dans le panache comme sphériques. La surface de la particule de suie égale donc $4\pi r_s^2$. Dans l'équation (II.4.19), chaque particule collectée contribue à une couverture πr_{vol}^2 de la surface de la suie. Cette estimation correspond à la surface médiane de la particule (H_2SO_4, H_2O). Finalement, la surface activée totale est obtenue par la somme des deux contributions (voir l'équation (II.4.7)).

II.4.3 Condensation et évaporation

Les surfaces activées des particules de suie sont susceptibles d'être le siège d'une condensation de la vapeur d'eau disponible dans le panache lorsque celui-ci est saturé en eau. Pour que la condensation se produise, il est nécessaire que l'air soit saturé en vapeur d'eau par rapport à l'eau liquide. Nous distinguons ainsi la saturation par rapport à l'eau liquide s_{liq} de celle par rapport à la glace s_{sol}, respectivement par :

$$s_{liq} = \frac{p_v}{p_{liq}^{sat}(T)} \quad \text{(II.4.20)}$$

$$s_{sol} = \frac{p_v}{p_{sol}^{sat}(T)} \quad \text{(II.4.21)}$$

Avec

- p_v la pression partielle de la vapeur d'eau ;
- $p_{liq}^{sat}(T)$ la pression de vapeur saturante de l'eau liquide ;
- $p_{sol}^{sat}(T)$ la pression de vapeur saturante de la glace.

p_v correspond à la contribution de la vapeur d'eau à la pression totale du mélange. Selon la loi de Dalton, valable dans le cadre de l'hypothèse des gaz parfaits, p_v peut être liée à la fraction molaire de la vapeur d'eau x_{vap} et à la pression totale P par :

$$p_v = x_{vap}P \quad \text{(II.4.22)}$$

Les pressions de vapeur saturantes correspondent, à une température donnée, à la pression partielle de vapeur d'eau à laquelle le gaz est en équilibre thermodynamique avec sa phase liquide ou solide. Cette pression de vapeur saturante varie en fonction de la température du milieu et peut être estimée au-dessus d'une interface plane par des relations analytiques comme celles données par *Murphy et Koop* [2005], valables aux températures que nous considérons :

$$\begin{aligned} p_{liq}^{sat,P}(T) = \exp\Big(&54{,}842763 - \frac{6763{,}22}{T} \\ &- 4{,}210\ \ln(T) + 0{,}000367\,T \\ &+ \tanh[0{,}0415(T - 218{,}8)](53{,}878 - \frac{1331{,}22}{T} \\ &- 9{,}44523\ \ln(T) + 0{,}014025\,T\Big), \text{pour } 123\text{ K} < T \\ &< 332\text{ K} \end{aligned} \tag{II.4.23}$$

$$\begin{aligned} p_{sol}^{sat,P}(T) = \exp\Big(&9{,}550426 - \frac{5723{,}265}{T} + 3{,}53068\ln(T) \\ &- 0{,}00728332\,T\Big)\ , \quad \text{pour } T > 110\text{ K} \end{aligned} \tag{II.4.24}$$

Dans le cas de la condensation sur des particules de suies de petites tailles ($r_s \leq 0{,}5$ µm), l'interface entre les deux phases ne peut pas être considérée comme plane en raison de sa forte courbure. Cette dernière modifie considérablement les forces d'interaction entre les molécules avec pour conséquence, une augmentation de la pression de vapeur saturante avec l'augmentation de la courbure de l'interface. Ce phénomène est appelé l'effet Kelvin. Autrement dit, la pression de vapeur nécessaire pour que l'eau se condense sur une petite particule est plus élevée. En prenant en compte l'effet Kelvin, la pression de vapeur saturante $p^{sat,S}$ au-dessus d'une particule de suie de diamètre D_s s'écrit :

$$p^{sat,S}(D_s, T) = \exp\left(\frac{4\sigma M_{\mathrm{H_2O}}}{\rho_{\mathrm{H_2O}} R D_s T}\right) p^{sat,P}(T) \tag{II.4.25}$$

Avec

- $\sigma = 7{,}6 \cdot 10^{-2}\ \mathrm{N \cdot m^{-1}}$ la tension superficielle de l'eau ;
- $M_{\mathrm{H_2O}}$ la masse molaire de l'eau ;
- $\rho_{\mathrm{H_2O}}$ la masse volumique de l'eau en phase condensée.

La Figure 30 représente l'évolution généralement observée des saturations en eau du panache, par rapport à l'eau liquide et par rapport à la glace en fonction de l'âge du panache. En sortie de moteur, les saturations augmentent rapidement à mesure que le panache se dilue dans l'atmosphère ambiante et que la température diminue. Au point A, le panache devient saturé par rapport à l'eau liquide. Le point dit de rosée est atteint, déclenchant la condensation de la vapeur d'eau sur les particules de suies activées. La formation des traînées de condensation commence ainsi par la nucléation hétérogène d'un film d'eau liquide sur les particules de suies préalablement activées qui gèle aussitôt. Dans notre modèle microphysique, ce processus initial très rapide est négligé. Nous faisons l'hypothèse qu'une particule de suie activée se trouve instantanément recouverte d'une couche d'épaisseur infinitésimale de glace lorsque l'air devient sursaturé par rapport à l'eau liquide. Nous entrons alors dans la phase de croissance des particules de glace. Au point B, la saturation en eau de l'air commence à chuter du fait de la consommation de la vapeur d'eau disponible et de la dilution du panache. La croissance des particules se poursuit jusqu'au point C où l'air ne se trouve plus saturé en eau. Lorsque la teneur en eau dans l'air continue de diminuer, une sublimation de la glace se produit, restituant la vapeur d'eau dans l'atmosphère. Notons que les cristaux de glace ne se forment pas avant le point A, lorsque l'air se trouve saturé par rapport à la glace mais pas encore par rapport à la phase liquide. Cette situation se produit car $p_{liq}^{sat}(T) \geq p_{sol}^{sat}(T)$ dès lors que le panache s'est suffisamment refroidi ($T < 273$ K).

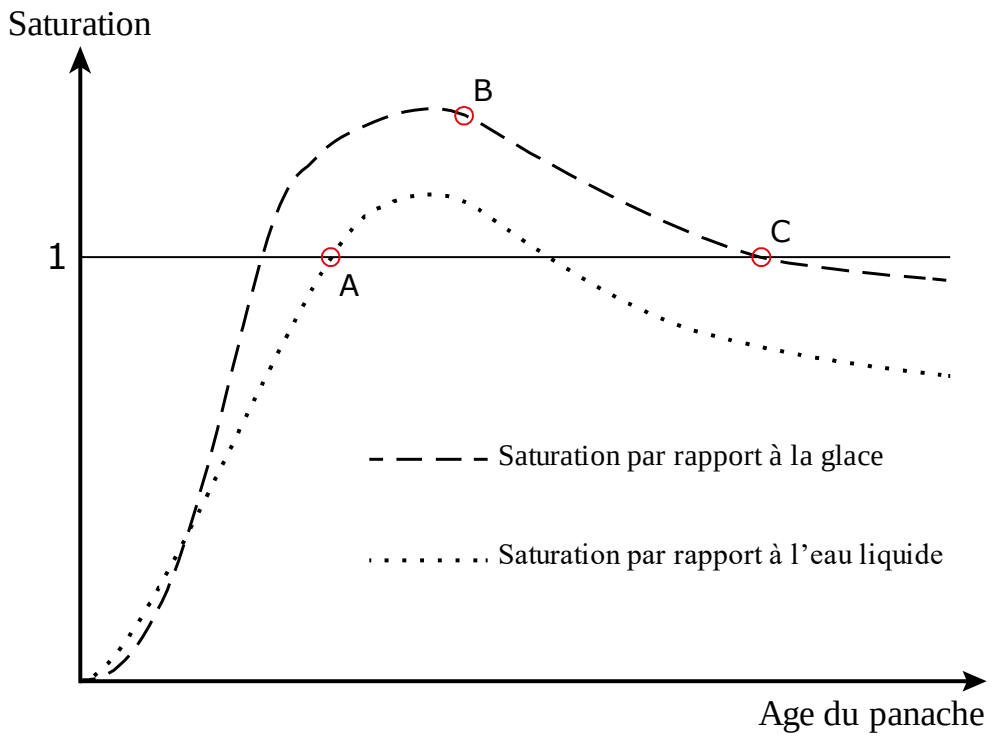

Figure 30 : Schéma de l'évolution temporelle de la saturation en vapeur d'eau du panache dans le cas d'une atmosphère non saturée en eau.

Une fois la particule de glace formée, nous modélisons sa croissance en considérant la condensation et l'évaporation de l'eau à la surface de la particule en fonction de la saturation de l'air en eau par rapport à la glace. Pour cela, nous ajoutons dans le système une espèce supplémentaire $\mathrm{H_2O_{sol}}$ correspondant à la glace, distincte de la vapeur d'eau $\mathrm{H_2O}$. Du fait de la petite taille des particules formées, les propriétés de la glace formée sont assimilées à celles d'un gaz. Nous modélisons alors la croissance de la particule par la transformation suivante :

$$\mathrm{H_2O} \leftrightarrow \mathrm{H_2O_{sol}} \tag{II.4.26}$$

Notons que cette transformation s'effectue dans les deux sens, la glace pouvant également s'évaporer de la surface de la particule. Le taux massique de condensation/évaporation s_{con} contribue dans les équations de conservation de masse (II.2.21) au terme source massique s_i des espèces $\mathrm{H_2O_{sol}}$ et $\mathrm{H_2O}$:

$$s_{\mathrm{H_2O_{sol}}} = s_{con} \tag{II.4.27}$$

$$s_{\mathrm{H_2O}} = s_{chim} - s_{con} \tag{II.4.28}$$

Où s_{chim} représente la contribution des transformations chimiques au terme source de l'équation de conservation de masse de $\mathrm{H_2O}$.

Le terme source de condensation/évaporation est modélisé, par analogie avec la diffusion moléculaire, par une loi de Fick modifiée, appliquée au changement de phase de l'eau. On considère ainsi le vecteur flux de vapeur d'eau $\vec{j_v}$, représentant la masse de vapeur d'eau se transformant en glace, par unité de temps et de surface de particule de suie :

$$\vec{j_v} = -D_{\mathrm{H_2O}}\, G_\alpha(r_p)\, \vec{\nabla}\rho_{\mathrm{H_2O}} \qquad \text{(II.4.29)}$$

Avec

- $D_{\mathrm{H_2O}}$ le coefficient de diffusion de la vapeur d'eau ;
- $G_\alpha(r_p)$ la fonction permettant de prendre en compte la transition d'un régime cinétique vers un régime continu, dépendant du rayon de la particule r_p ;
- $\vec{\nabla}\rho_{\mathrm{H_2O}}$ le gradient de masse volumique de la vapeur d'eau.

$D_{\mathrm{H_2O}}$ est donné par *Hall et Pruppacher*, [1976] :

$$D_{\mathrm{H_2O}} = 0{,}211 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1{,}94} \left(\frac{p_0}{p}\right) \qquad \text{(II.4.30)}$$

Avec $T_0 = 273{,}15$ K et $p_0 = 1{,}01325 \cdot 10^5$ Pa.

G_α est donné par *Sedunov* [1974] :

$$G_\alpha(r_p) = \left(\frac{1}{1+\mathrm{Kn}} + \frac{4\mathrm{Kn}}{3\alpha_c}\right)^{-1} \qquad \text{(II.4.31)}$$

Avec

- $\mathrm{Kn} = \lambda_{air}/r_p$ le nombre de Knudsen où λ_{air} est le libre parcours moyen d'une molécule de l'air du panache ;
- α_c le coefficient d'accommodation de la vapeur d'eau sur de la glace.

Plusieurs valeurs de α_c sont référencées dans la littérature. La condensation se produisant dans des zones froides ($T \leq 230$ K), nous pouvons fixer $\alpha_c = 1$ [*Pruppacher et Klett*, 1997].

Comme indiqué ci-dessus, la fonction G_α permet de prendre en compte les cas où l'hypothèse d'un milieu continu ne peut pas s'appliquer du point de vue de la particule. Lorsque $r_p \gg \lambda_{air}$, la condensation de la vapeur d'eau se produit dans un régime que l'on peut supposer continu. On a alors Kn→0 et $G_\alpha \to 1$, l'expression du flux de vapeur (II.4.31) correspond alors à une loi de Fick habituelle. En revanche, lorsque le libre parcours moyen des molécules de l'air devient important par rapport au rayon de la particule de suie ($\lambda_{air} \gg r_p$), cette dernière « voit » les collisions des molécules de l'air et la condensation de la vapeur d'eau ne peut plus être considérée dans un régime continu. La condensation des molécules d'eau est de fait gouvernée par la théorie cinétique des gaz. Le flux de vapeur d'eau est alors modifié par l'ajout d'un facteur $3\alpha_c/(4\mathrm{Kn})$ pour en tenir compte. Lorsque $\lambda_{air} \gg r_p$, $G_\alpha \sim 3\alpha_c/(4\mathrm{Kn})$. Ainsi, la fonction G_α assure la transition entre le régime continu et le régime cinétique.

En raison de l'invariance par rotation autour du centre des particules de suie, nous pouvons adopter un repère polaire centré au centre des suies et réécrire l'équation (II.4.29) :

$$\vec{j_v}(r) = -D_{\mathrm{H_2O}} G_\alpha(r_p) \frac{\partial \rho_{\mathrm{H_2O}}}{\partial r} \overrightarrow{e_r} \qquad \text{(II.4.32)}$$

Compte tenu de la définition de $\vec{j_v}$, le taux de condensation sur la surface activée des particules de suie s'écrit :

$$\begin{aligned} s_{con} &= -4\pi r_p^2 \theta_{act} N_s \, \vec{j_v}(r_p) \cdot \overrightarrow{e_r} \\ &= 4\pi r_p^2 \theta_{act} \, N_s \, D_{\mathrm{H_2O}} G_\alpha(r_p) \left. \frac{\partial \rho_{\mathrm{H_2O}}}{\partial r} \right|_{r=r_p} \end{aligned} \qquad \text{(II.4.33)}$$

Dans l'équation (II.4.33), le taux de condensation est modélisé de manière à ce que la vapeur d'eau se condense uniquement sur la surface activée des particules de suie. Ainsi, la surface disponible pour la condensation ou l'évaporation pour une suie est égale à $4\pi r_p^2 \theta_{act}$.

Il reste donc à calculer le terme $\partial \rho_{\mathrm{H_2O}}/\partial r|_{r=r_p}$. Pour cela, considérons la diffusion de la vapeur d'eau autour de la particule. L'équation de diffusion de vapeur d'eau s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{H_2O}}(r,t)}{\partial t} - D_{\mathrm{H_2O}} \frac{\partial^2 \rho_{\mathrm{H_2O}}(r,t)}{\partial r^2} = 0 \quad , \quad r \geq r_p \tag{II.4.34}$$

Munie des conditions aux limites :

$$\begin{aligned} \rho_{\mathrm{H_2O}}(r_p, 0) &= \rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat} \\ \rho_{\mathrm{H_2O}}(\infty, 0) &= \rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty} \end{aligned} \tag{II.4.35}$$

Avec

- $\rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat}$ la concentration massique de la vapeur d'eau à l'état saturé ;
- $\rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty}$ la concentration massique de la vapeur d'eau dans l'atmosphère ambiante.

Pruppacher et Klett [1997] montre que le temps caractéristique de la diffusion de vapeur d'eau pour une particule de rayon 0,1 µm est de l'ordre de 10^{-5} s, qui est négligeable devant le temps caractéristique de l'évolution dynamique des particules. Nous pouvons donc adopter une approche quasi-stationnaire et simplifier l'équation (II.4.34) en une équation de Laplace :

$$\frac{\partial^2 \rho_{\mathrm{H_2O}}(r)}{\partial r^2} = 0 \tag{II.4.36}$$

L'équation différentielle admet alors comme solution unique :

$$\rho_{\mathrm{H_2O}}(r) = \rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty} + \left(\rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat} - \rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty}\right) \frac{r_p}{r} \tag{II.4.37}$$

Nous pouvons donc en déduire :

$$\left.\frac{\partial \rho_{\mathrm{H_2O}}}{\partial r}\right|_{r=r_p} = \frac{\left(\rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty} - \rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat}\right)}{r_p} \tag{II.4.38}$$

La combinaison des équations (II.4.33) et (II.4.38) donne :

$$s_{con} = 4\pi r_p \theta_{col}\, N_s\, D_{\mathrm{H_2O}} G_\alpha(r_p) \left(\rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty} - \rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat}\right) \tag{II.4.39}$$

Dans le cadre de l'approximation des gaz parfaits, nous avons, d'après l'équation (II.2.7) :

$$\rho_{\mathrm{H_2O}}^{\infty} = \frac{p_v}{R_{s,\mathrm{H_2O}}\,T}$$

$$\rho_{\mathrm{H_2O}}^{sat} = \frac{p_{sol}^{sat,S}(r_p,T)}{R_{s,\mathrm{H_2O}}\,T} \tag{II.4.40}$$

En combinant les équations (II.4.39) et (II.4.40), nous obtenons:

$$s_{con} = \frac{4\pi r_p \theta_{act} N_s D_{\mathrm{H_2O}} G_\alpha(r_p)\left(p_v - p_{sol}^{sat,S}(r_p,T)\right)}{R_{s,\mathrm{H_2O}}\,T} \tag{II.4.41}$$

Afin de prendre en compte le fait que la croissance des particules sur une suie initialement sèche ne puisse être déclenchée que lorsque l'air est saturé par rapport à l'eau liquide, nous ajoutons au terme s_{con} le facteur de déclenchement de la condensation D_{con} :

$$s_{con} = D_{con}\frac{4\pi r_p \theta_{act} N_s D_{\mathrm{H_2O}} G_\alpha(r_p)\left(p_v - p_{sol}^{sat,S}(r_p,T)\right)}{R_{s,\mathrm{H_2O}}\,T} \tag{II.4.42}$$

Avec :

$$D_{con} = \begin{cases} 1 & \text{si } p_v > p_{liq}^{sat,S}(r_p,T) \text{ ou } r_p > r_s \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{II.4.43}$$

Le processus de croissance peut ainsi débuter sur une suie sèche seulement lorsque $p_v > p_{liq}^{sat,S}(r_p,T)$, ce qui empêche notamment la condensation de la vapeur d'eau sur une suie sèche lorsque l'air est saturé par rapport à l'eau solide mais pas par rapport à l'eau liquide. La condition $D_{con} = 1$ lorsque $r_p > r_s$ permet en revanche de ne pas interrompre le processus de croissance des particules de glace lorsque l'air ne se trouve plus saturé par rapport à l'eau liquide.

En conclusion, l'expression de s_{con} (II.4.42) montre comme attendu que le sens de la transformation dépend du signe de la différence $p_v - p_{sol}^{sat,S}$, c'est-à-dire de la saturation de l'air en vapeur d'eau par rapport à la glace. La vitesse de la transformation est proportionnelle au nombre et à la taille des particules de suies. Plus les particules sont grosses et nombreuses, plus la surface disponible pour le processus de condensation/évaporation est importante.

II.5 Méthodes numériques

La modélisation des processus physiques que nous avons précédemment présentée a permis de mettre en place le système d'équations à résoudre. L'étape suivante de la simulation numérique consiste à déterminer les méthodes par lesquelles ce système d'équations sera numériquement résolu.

Dans cette partie, nous présentons la plateforme de simulation multi-physique CEDRE que nous utilisons dans cette thèse pour réaliser les simulations numériques. Nous décrivons ensuite les méthodes numériques choisies, permettant de transformer les équations différentielles continues du système en équations discrétisées dans l'espace du domaine de calcul et dans le temps de la simulation.

II.5.1 Discrétisation spatiale

Le logiciel CEDRE est un code reposant sur la méthode des volumes finis et utilisant des maillages non structurés. A l'instar des différences finis ou des éléments finis, la méthode des volumes finis est une méthode utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles, correspondant aux équations de Navier-Stokes dans le cas présent. Le principe de ces méthodes de résolutions numériques consiste à réécrire les équations continues dans l'espace sur un maillage discret du domaine continu Ω. Dans ce paragraphe, nous commençons par décrire le principe de la discrétisation de l'espace par l'utilisation de maillage puis nous présentons les schémas numériques que nous avons utilisés dans nos applications.

II.5.1.1 Espace discret du domaine

Nous décrivons dans ce paragraphe les outils permettant de décrire l'espace du domaine de calcul sur lequel repose la méthode des volumes finis. Le domaine continu Ω est discrétisé par un maillage composé d'un pavage fini de cellules qui serviront de base à l'écriture des bilans pour les quantités conservées (voir Figure 31).

CEDRE est un code de calcul utilisant des maillages dits non-structurés. À la différence des maillages structurés, l'organisation des points du maillage ainsi que de la forme des mailles d'un maillage non-structuré n'est pas soumise à la définition d'une règle générale. Autrement dit, un maillage non structuré s'organise simplement sous la forme d'une liste de cellules interconnectées, définies indépendamment des cellules autres que ses voisines directes. Les

voisines directes d'une cellule étant celles qui partagent avec la cellule une face dans un cas tridimensionnel ou une arête dans un cas bidimensionnel. A titre d'exemple, dans la Figure 31, les voisines directes de la cellule 1 sont les cellules 2, 3 et 4. Cela aboutit à la génération de maillage sans contrainte de régularité, ayant une flexibilité suffisante pour mailler des géométries complexes. Toutefois, l'utilisation de maillage non-structuré présente une complexité accrue au niveau des algorithmes numériques du solveur. L'absence de liens mathématiques entre les cellules du domaine engendre en effet la nécessité de numéroter et d'ordonner les cellules, les faces, les arêtes et les nœuds du maillage.

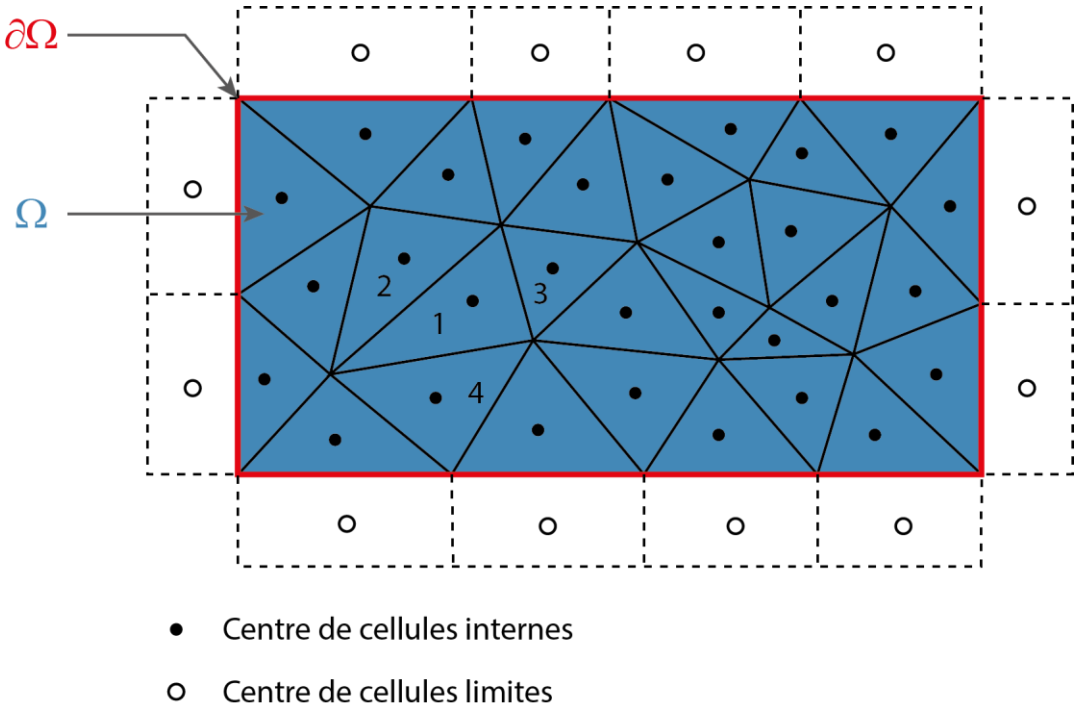

Figure 31 : Description schématique d'un maillage bidimensionnelle non-structuré utilisé par le code CEDRE

Le calcul étant tridimensionnel, l'intérieur du domaine est constitué de n_{cel}^{int} mailles polyèdriques et est limité par une frontière bidimensionnel $\partial\Omega$ constituée de n_{cel}^{lim} mailles surfaciques. Dans CEDRE, la définition des polyèdres est très générale et correspond à un grand nombre de types de cellules. Dans nos calculs, nous utilisons principalement des tétraèdres constitués de 4 sommets et de 4 faces et des prismes à base triangulaire constitués de 6 sommets et de 5 faces. La frontière du domaine est quant à elle principalement décrite par des triangles (voir Figure 32).

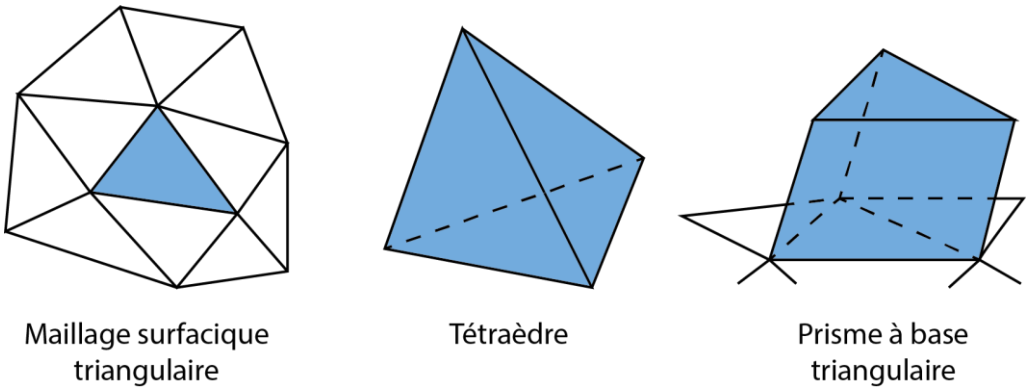

Figure 32 : Exemples de types de cellules utilisés dans CEDRE

Parmi les avantages associés à l'utilisation des tétraèdres, nous pouvons citer la facilité et la rapidité en termes de génération de maillage. En effet, ceci découle du fait que le tétraèdre est l'élément volumique le plus simple, de la même manière que le triangle constitue le plus petit polygone surfacique. L'utilisation des formes géométriques les plus élémentaires facilitent ainsi le maillage des géométries complexes comme celle d'un avion réaliste. Les algorithmes de génération de maillages constitués de cellules triangulaires et tétraédriques sont par ailleurs ceux qui nécessitent le minimum d'intervention de l'utilisateur.

Ce dernier doit cependant porter une attention particulière à la qualité du maillage généré. Par exemple, il doit veiller à conserver, dans un cas général, un rapport d'aspect proche de l'unité afin de garantir une précision suffisante du calcul. Le rapport d'aspect correspond au rapport de la longueur maximale de l'arête d'un élément par rapport à la longueur minimale. Il caractérise ainsi l'étirement ou l'écrasement des cellules du maillage. Dans le cas des tétraèdres par exemple, l'augmentation du rapport d'aspect entraîne nécessairement une augmentation de la distorsion (« skewness » en anglais) de la maille, menant généralement à des erreurs d'interpolation accrues (voir Figure 33).

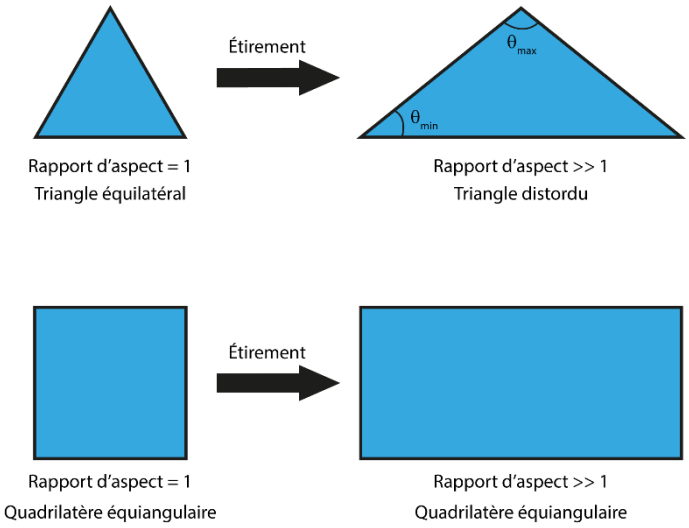

Figure 33 : Illustration de l'effet de distorsion des cellules avec l'augmentation du rapport d'aspect.

Dans les zones du domaine dans lesquelles les grandeurs présentent des gradients importants dans une direction privilégiée, une résolution fine n'est nécessaire que dans la direction du gradient. Des ressources pourraient donc être économisées en employant des cellules avec un rapport d'aspect important. Les petites dimensions des cellules sont alors orientées dans la direction du gradient tandis que les grandes dimensions sont orientées orthogonalement. Cette stratégie s'applique particulièrement dans le cas des écoulements de couche limite car les gradients sont orthogonaux à la paroi. L'utilisation de tétraèdres n'est alors pas préconisée en raison du phénomène de distorsion des mailles expliqué dans le paragraphe précédent. En revanche, d'autres types de cellules comme les prismes sont particulièrement adaptés car leur distorsion n'augmente pas avec le rapport d'aspect (voir Figure 33). Les angles des cellules peuvent donc rester identiques quelle que soit le rapport d'aspect de la cellule, minimisant ainsi les erreurs d'interpolation. Davantage d'informations sur ce sujet est donné par exemple par *Thompson et al.* [1998].

La discrétisation spatiale aux frontières du domaine permet de prendre en compte les conditions aux limites du système d'équations différentielles. Ainsi, pour chacune des n_{cel}^{lim} faces limites du maillage d'origine, CEDRE créé une cellule virtuelle dite limite à laquelle est attaché un état représentatif régi par les conditions aux limites (voir Figure 31). Plus de précisions sur les conditions aux limites seront données dans le paragraphe II.5.1.4. La seule propriété géométrique de la cellule limite qui nous intéresse est la position de son centre par rapport à la cellule « réelle » à laquelle elle est attachée. Deux cas généraux se présentent :

- Lorsque la face limite du maillage représente une frontière réelle du domaine de calcul, comme par exemple une sortie moteur, CEDRE construit des cellules limites d'épaisseur nulle ;
- Lorsque la face limite du maillage représente des frontières artificielles internes au calcul, par exemple dans le cas d'un calcul multidomaine, CEDRE fait coïncider la cellule limite avec la cellule interne du domaine voisin. Le centre de la cellule limite se trouve alors à une distance non nulle de la frontière.

Après création des cellules limites, le maillage final comporte donc $n_{cel}^{tot} = n_{cel}^{int} + n_{cel}^{lim}$ cellules.

II.5.1.2 Discrétisation des équations de Navier-Stokes

Le code CEDRE est, rappelons-le, basé sur la méthode des volumes finis pour la discrétisation spatiale. Cette méthode consiste à intégrer les lois de conservation sur chaque cellule du domaine, en considérant comme degrés de liberté ou inconnus les valeurs moyennes sur l'élément. A chaque instant t et en chaque centre de cellule M_i du domaine de calcul, limites comprises, l'état de l'écoulement du gaz est caractérisé par $n_u = 5 + n_e + n_z$ variables dites primaires suivants :

$$u = \begin{bmatrix} p \\ T \\ \vec{v} \\ y \\ z \end{bmatrix} \tag{II.5.1}$$

Avec n_e le nombre d'espèces du mélange et n_z le nombre de scalaires « supplémentaires » z correspondant dans notre cas aux scalaires des modèles microphysiques et aux scalaires de la turbulence. De l'état u, nous pouvons déduire toutes les autres propriétés de l'écoulement. En particulier les $n_q = 5 + n_e + n_z$ variables dites conservatives suivantes :

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho y \\ \rho \vec{v} \\ \rho e_t \\ \rho z \end{bmatrix} \tag{II.5.2}$$

De même, q caractérise l'état de l'écoulement. Les variables u peuvent également être obtenues à partir des variables q :

$$q = q(u) \Leftrightarrow u = u(q) \tag{II.5.3}$$

Considérons une cellule du maillage constituant un volume de contrôle V_i du domaine Ω. Dans ce volume de contrôle, les équations du système (II.2.16) peuvent se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial q(u)}{\partial t} = -\nabla \cdot [f(u) + \phi(u, \nabla u)] + S(u, \nabla u) \tag{II.5.4}$$

Avec

- f les densités de flux dits d'Euler ;
- ϕ les densités de flux dits de Navier-Stokes ;
- S les sources volumiques.

Les densités de flux d'Euler correspondent aux flux convectifs des équations de Navier-Stokes :

$$f(u) = \begin{bmatrix} \rho\vec{v} \\ \rho\vec{v}y \\ \rho\vec{v}v + p\mathrm{I}_3 \\ \rho\vec{v}e_t + p\vec{v} \\ \rho\vec{v}z \end{bmatrix} \tag{II.5.5}$$

Avec I_3 le tenseur unité de l'espace euclidien R^3. De la même manière, les densités de flux de Navier-Stokes représentent les flux diffusifs, écrites de manière simplifiée :

$$\phi(u, \nabla u) = \begin{bmatrix} \phi_\rho \\ \phi_y \\ \phi_v \\ \phi_e \\ \phi_z \end{bmatrix} \tag{II.5.6}$$

Quant aux sources volumiques, elles sont de la forme :

$$S(u, \nabla u) = \begin{bmatrix} S_\rho \\ S_y \\ S_v \\ S_e \\ S_z \end{bmatrix} \tag{II.5.7}$$

La méthode des volumes finis consistent à résoudre, dans le volume de contrôle V_i limité par une surface fermée A_i, les équations intégrées (II.5.4) :

$$\iiint_{V_i} \frac{\partial q}{\partial t} dV = -\oiint_{A_i} (f + \phi)\vec{n} \cdot d\vec{A} + \iiint_{V_i} S dV \qquad \text{(II.5.8)}$$

Une approche « cell-centered » est adoptée dans le code CEDRE. Cela signifie que les points de discrétisation des champs de quantités q sont localisés au centre de gravité des cellules du maillage. La valeur de la variable q_i dans la cellule i est égale à la moyenne de q sur l'ensemble de la cellule. L'équation (II.5.9) peut donc s'écrire :

$$V_i \dot{q}_i = F_i + \Phi_i + S_i V_i \qquad \text{(II.5.9)}$$

Avec

- F_i et Φ_i respectivement les flux d'Euler et de Navier-Stokes à travers les faces de la cellule i ;
- S_i la source volumique dans la cellule i.

L'écriture des termes de droite de l'équation (II.5.9) en fonction des quantités q nécessite l'évaluation des gradients de ces quantités au centre et à l'interface entre les cellules. D'autre part, les flux d'Euler et de Navier-Stokes étant par définition évalués aux interfaces, ils doivent être approximés en fonction des quantités moyennes aux centres des cellules impliquées. L'évaluation de ces quantités reposent sur les schémas numériques spatiaux choisis que nous exposons dans le prochain paragraphe.

II.5.1.3 Schémas numériques spatiales

Dans ce paragraphe, nous n'entrons pas dans les détails mathématiques des schémas numériques utilisés. En revanche, nous présentons leurs spécificités et les raisons pour lesquelles ils ont été choisis parmi ceux disponibles dans le code CEDRE.

La sélection des schémas numériques commencent par le choix du degré de précision voulu pour l'évaluation des différentes grandeurs calculées. L'augmentation de l'ordre des schémas numériques par exemple, permet d'obtenir une meilleure précision dans le calcul des différentes grandeurs mais multiplie en revanche le nombre d'opérations nécessaires pour

parvenir au résultat. Dans le cadre de cette thèse, nous avons évalué les flux et les gradients en utilisant des schémas numériques spatiaux à l'ordre 2. Cela signifie que l'évaluation des flux dans la cellule i nécessite la connaissance des grandeurs conservatives dans les cellules i et dans les cellules de son premier voisinnage.

Nous avons adopté pour le flux F_i un schéma dit HLLC (Harten-Lax-van Leer-Contact) développé par *Harten et al.* [1983] et modifié par *Toro et al.* [1994], disponible dans le code CEDRE. Ce schéma est classé dans les méthodes dites de *Flux Difference Splitting* (FDS) ou encore appelées solveurs de Riemann car elles donnent une approximation du flux à partir des états discontinus de part et d'autre de l'interface. Le schéma HLLC a été choisi pour sa robustesse dans le calcul de l'approximation du flux d'Euler sur des interfaces présentant des discontinuités importantes de quantités conservées. Dans nos simulations, l'utilisation du schéma HLLC est notamment justifiée par la présence de gradients d'énergie et de quantités de mouvement importants au niveau du jet en sortie primaire du moteur.

Intéressons nous à présent à l'approximation des gradients des quantités u aux centres des mailles. Le code CEDRE utilise pour cela une méthode de moindres carrées. Cette méthode, détaillée par *Leterrier* [2003], consiste à rechercher la reconstruction linéaire polynômiale des quantités u qui minimise, au sens de la norme euclidienne, la différence entre les valeurs interpolées par la reconstruction et les valeurs discrètes utilisées pour l'évaluation des flux. A l'ordre 2, cela consiste à déterminer $\left(\vec{\nabla}u\right)_G$ au barycentre G de la cellule (voir Figure 34) de manière à ce que le champ u ainsi interpolé soit le plus cohérent possible (au sens des moindres carrées) dans les cellules de premier voisinnage. $\left(\vec{\nabla}u\right)_G$ est alors déduit de la relation suivante dans la cellule :

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r_G}) + \left(\vec{\nabla}u\right)_G \cdot (\vec{r} - \vec{r}_G) \qquad \text{(II.5.10)}$$

La formule des moindres carrées pour le calcul des gradients est particulièrement adaptée aux maillages non-structurées étant donné que sa sensibilité à la régularité des maillages est faible.

Concernant les gradients d'interface, il s'agit d'évaluer la valeur du gradient $\vec{\nabla}u$ au centre K de l'interface entre les cellules i et j (voir Figure 34). Cette évaluation est essentielle, elle permet notamment le calcul des flux diffusifs de Navier-Stokes aux interfaces $\Phi_i\left(\left(\vec{\nabla}u\right)_K\right)$.

Le code CEDRE utilise pour l'évaluation des gradients aux interfaces un schéma numérique très polyvalent dans la mesure où il est applicable à n'importe quelle configuration géométrique et à n'importe quel type de maillage non-structuré, éventuellement hybride. Un maillage hybride est un maillage comportant deux ou plusieurs types géométriques de cellules. Nous utilisons par exemple pour cette thèse des maillages volumiques comportant des tétraèdres et des prismes à base triangulaire. L'interpolation aux interfaces est effectuée selon l'expression suivante :

$$\left(\vec{\nabla}u\right)_K = \left(\vec{\nabla}u\right)_H + \theta_g \left[\frac{u_j - u_i}{\|\overrightarrow{G_iG_j}\|} - \left(\vec{\nabla}u\right)_H \cdot \vec{a}\right]\vec{v} \qquad \text{(II.5.11)}$$

Avec

- $\left(\vec{\nabla}u\right)_H$ le gradient barycentrique évalué au point H (voir Figure 34) ;
- u_i et u_j les quantités correspondant aux cellules i et j respectivement, situées de part et d'autre de l'interface ;
- G_i et G_j les barycentres des cellules i et j respectivement ;
- $\vec{a} = \frac{\overrightarrow{G_iG_j}}{\|\overrightarrow{G_iG_j}\|}$;
- $\vec{v}$ et θ_g des données paramétrables selon les irrégularités locales, afin d'éviter que des singularités géométriques n'entraînent des instabilités ou des pertes de précision [*Leterrier*, 2003].

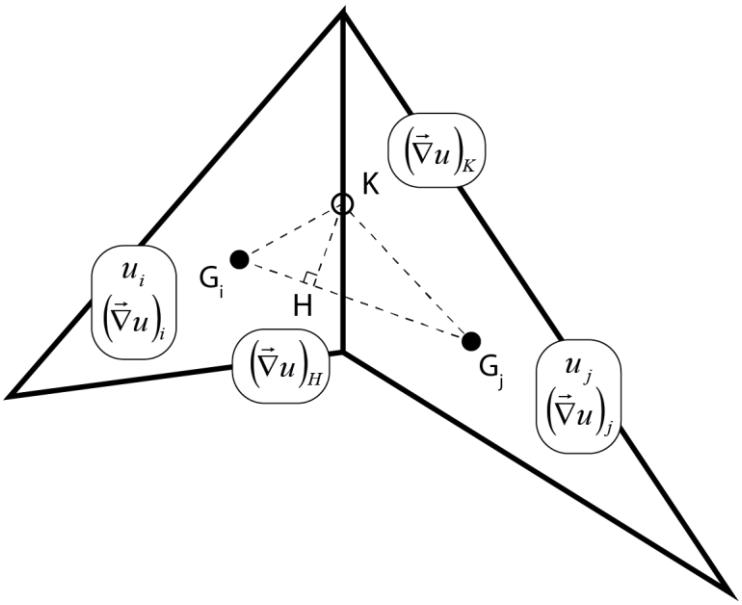

Figure 34 : Schéma descriptif pour le calcul du gradient aux interfaces

Le gradient barycentrique est évalué au point H par la formule d'interpolation d'ordre 1 entre les gradients de maille $(\vec{\nabla}u)_i$ et $(\vec{\nabla}u)_j$:

$$(\vec{\nabla}u)_H = \frac{HG_j}{G_iG_j}(\vec{\nabla}u)_i + \frac{HG_i}{G_iG_j}(\vec{\nabla}u)_j \qquad \text{(II.5.12)}$$

Le schéma d'évaluation du gradient aux interfaces est consistant à l'ordre 1. La consistance ou la robustesse d'un schéma numérique correspond à la propriété qui assure que la solution exacte des équations discrétisées tende vers la solution exacte des équations continues lorsque le pas de discrétisation tend vers zéro. Le lecteur peut trouver la description mathématique détaillée de ce schéma dans la thèse de *Leterrier* [2003].

II.5.1.4 Cas des cellules limites

La résolution numérique des équations de Navier-Stokes nécessitent du point de vue spatial l'imposition de conditions aux limites du domaine Ω. Dans le code CEDRE, le problème est abordé en créant des cellules virtuelles dites limites (voir paragraphe II.5.1.1) aux frontières du maillage d'origine. L'état instantané du système est décrit dans chaque cellule limite par un ensemble de variables naturelles u_l. Ces dernières sont en correspondance avec les quantités conservées q_l, comme décrit au paragraphe II.5.1.2. Les variables représentent, à l'instar des cellules internes, les moyennes dans chaque cellule, des quantités continues.

Le choix des conditions aux limites aux frontières du domaine est réalisé dans CEDRE à travers l'imposition des états dans les cellules limites et des flux à leur frontière avec le domaine interne. Par ailleurs, le rôle des états dans les cellules limites dans l'interpolation à l'intérieur du domaine et dans l'évaluation des flux numériques est le même que celui des états internes. Ainsi, l'état $\hat{u}_l$ à la frontière, c'est-à-dire à l'interface entre la cellule i et la cellule limite l est interpolé suivant :

$$\hat{u}_l = u_i + \left(\vec{\nabla} u\right)_i \cdot (\vec{r}_l - \vec{r}_i) \qquad \text{(II.5.13)}$$

Avec $\vec{r}_l$ la position du centre de la face commune et $\vec{r}_i$ la position du centre de la cellule i.

Pour l'imposition des états dans les cellules limites, les conditions aux limites que nous utilisons dans cette thèse prennent la forme d'une équation de relaxation :

$$t_l \frac{\partial u_l}{\partial t} = \sigma\left(u_{imp} - u_l\right) + (1 - \sigma)(\hat{u}_l - u_l) \qquad \text{(II.5.14)}$$

Avec

- t_l une matrice diagonale composée de n_u temps caractéristiques de relaxation déterminés par le code CEDRE ;
- σ une matrice diagonale composée de n_u valeurs égales à 1 ou 0 selon le type de conditions aux limites choisi ;
- u_{imp} une matrice colonne de taille n_u comportant des valeurs imposées pour certaines variables naturelles selon le type de conditions aux limites choisi.

L'équation (II.5.14) est une équation différentielle de relaxation ayant pour état stationnaire une contrainte algébrique reliant les deux états au centre et à la frontière (u_l et $\hat{u}_l$) à un état imposé u_{imp}. Plus précisément, si une valeur σ_k de la matrice σ est égale à 1, l'état $u_{l,k}$ correspondant dans la cellule limite tend vers l'état imposé $u_{imp,k}$ à l'état stationnaire. Si $\sigma_k = 0$, l'état $u_{l,k}$ tend vers la valeur à la frontière $\hat{u}_l$. Dans ce dernier cas, une continuité du champ u_k du domaine interne est imposée à la cellule limite à l'état stationnaire. Les temps caractéristiques t_l déterminent alors la raideur avec laquelle le champ u_l dans les cellules limites tend vers les conditions aux limites imposées. Plus le temps de relaxation est petit, plus

l'état u_l suit de près u_{imp} ou $\hat{u}_l$. Dès lors, le choix des conditions aux limites à appliquer sur chaque cellule limite est piloté par le jeu de paramètres (t_l, σ, u_{imp}) et la modélisation des flux à la frontière. Ces matrices sont regroupés par sous variables (pression p, température T, vitesse $\vec{v}$, concentrations y et scalaires z) :

$$t_l = \begin{bmatrix} t_{l,p} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & t_{l,T} & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & t_{l,v} I_v & 0 & \vdots \\ \vdots & \cdots & 0 & t_{l,y} I_y & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & t_{l,z} I_z \end{bmatrix}$$

$$u_{imp} = \begin{bmatrix} p_{imp} \\ T_{imp} \\ v_{imp} \\ y_{imp} \\ z_{imp} \end{bmatrix} \qquad \text{(II.5.15)}$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_p & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_T & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \sigma_v I_v & 0 & \vdots \\ \vdots & \cdots & 0 & \sigma_y I_y & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sigma_z I_z \end{bmatrix}$$

Dans nos études, nous utilisons principalement trois types de conditions aux limites. Nous les exposons ici avec le jeu de paramètres (t_l, σ, u_{imp}) et la modélisation des flux associés :

- La condition aux limites d'*Entrée-sortie* vise à représenter diverses catégories d'entrées ou sorties en imposant une valeur choisie ou la continuité, à chacune des variables naturelles u_l. A titre d'exemple, pour un écoulement subsonique, une entrée est physiquement bien définie par T, v, y et z imposés et un gradient de pression nul. Dans le cas d'une sortie, p est imposée et les gradients de T, v, y et z sont nuls. Les jeux de paramètre σ correspondant sont respectivement les suivants :

Entrée : $\sigma_p = 0$, $\sigma_T = 1$, $\sigma_v = 1$, $\sigma_y = 1$, $\sigma_z = 1$ (II.5.16)

Sortie : $\sigma_p = 1$, $\sigma_T = 0$, $\sigma_v = 0$, $\sigma_y = 0$, $\sigma_z = 0$ (II.5.17)

Quant aux flux, ils sont calculés avec les mêmes schémas numériques que sur les faces internes (voir paragraphe II.5.1.3), en fonction des états et gradients sur les deux cellules adjacentes.

- La condition de *glissement sans frottement* ou *Paroi Euler* vise à imposer la continuité avec l'état interne pour l'ensemble des variables naturelles de la cellule limite à l'exception de la vitesse normale du fluide. L'imposition de cette dernière comme identique à la vitesse normale de la paroi correspond à la contrainte d'imperméabilité. Il est possible d'utiliser cette condition en fluide visqueux comme une condition de symétrie lorsque la paroi est immobile. Les processus physiques de part et d'autre de la face limite sont alors supposés identiques. Autrement dit, les flux à travers la face limite sont nuls. Dans nos calculs, cette condition a été imposée au plan de symétrie de l'avion permettant par là même de diviser par deux la taille du domaine de calcul.

  Considérons une face limite constituant une paroi. Cette dernière possède une normale $\vec{n}$ et se déplace à une vitesse donnée $\vec{v}_{par}$. La vitesse du fluide dans la cellule limite $\vec{v}_l$ peut être décomposée en une partie normale à la paroi $\vec{v}_{l,\perp} = (\vec{v}_l \cdot \vec{n})\,\vec{n}$ et une partie tangente $\vec{v}_{l,\parallel} = \vec{v}_l - \vec{v}_{l,\perp}$. La condition de *glissement sans frottement* du code CEDRE consiste donc en la résolution de deux équations différentielles de relaxation :

$$t_l \frac{\partial \vec{v}_{l,\perp}}{\partial t} = \left(\vec{v}_{par} \cdot \vec{n}\right)\vec{n} - (\vec{v}_l \cdot \vec{n})\,\vec{n} \qquad \text{(II.5.18)}$$

$$t_l \frac{\partial \vec{v}_{l,\parallel}}{\partial t} = \tilde{\vec{v}}_{l,\parallel} - \vec{v}_{l,\perp} \qquad \text{(II.5.19)}$$

Ces deux équations peuvent se regrouper pour retrouver une forme équivalente à l'équation (II.5.14) :

$$t_l \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \sigma_v\left[\left(\vec{v}_{par} \cdot \vec{n}\right)\vec{n} - \vec{v}_l\right] + (1-\sigma_v)\left(\tilde{\vec{v}}_{l,\parallel} - \vec{v}_l\right) \qquad \text{(II.5.20)}$$

Avec

$$\sigma_v = \vec{n} \cdot \vec{n}^t \qquad \text{(II.5.21)}$$

Où $\vec{n}^t$ est la transposée du vecteur colonne $\vec{n}$. Les jeux de paramètre u_{imp} et σ s'écrivent pour la condition de *glissement sans frottement* :

$$u_{imp} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \left(\vec{v}_{par} \cdot \vec{n}\right) \vec{n} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \sigma_v & 0 & \vdots \\ \vdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{II.5.22}$$

Quant aux flux, ils sont nuls, excepté la composante normale du flux de quantité de mouvement du fait de la condition d'imperméabilité.

- Enfin, la condition de *paroi Navier-Stokes* permet d'ajouter la condition d'adhérence à la paroi comparée à la condition de *glissement sans frottement*. Du point de vue de l'imposition des états aux limites, ce modèle est strictement identique au *glissement sans frottement* présenté précédemment. La vitesse tangentielle n'est donc pas imposée à une valeur mais est continue à la frontière. La condition d'adhérence est alors prise en compte dans la modélisation des flux pariétaux. Les flux d'Euler sont nuls, excepté la composante normale du flux de quantité de mouvement pour la condition d'imperméabilité. Les flux Navier-Stokes se réduisent au frottement pariétal τ_p modélisé par :

$$\tau_p = \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right)_p = (1+\alpha)\mu \frac{v_i}{y_i} \tag{II.5.23}$$

Avec y_i la distance entre la paroi et le centre de la cellule i et α une constante imposée dans le code CEDRE.

II.5.2 Intégration temporelle

Dans le paragraphe précédent, nous avons exposé les méthodes utilisées pour évaluer les termes de droite de l'équation (II.5.9) en fonction des valeurs des grandeurs au centre des cellules. L'intégration temporelle vise à résoudre numériquement le terme de gauche, en

remplaçant la solution temporelle exacte $q_i(t)$ de l'équation continue par une suite de valeurs discrètes $q_i(t_n)$.

Par soucis de lisibilité, nous considérons dans ce paragraphe uniquement la cellule i et par conséquent omettrons l'indice i pour les variables. Nous adoptons la notation suivante pour toutes les grandeurs :

$$q_i(t_n) = q_n \tag{II.5.24}$$

L'équation (II.5.9) peut alors se mettre sous la forme :

$$V\dot{q_n} = \mathcal{F}(q_n) \tag{II.5.25}$$

Avec

$$\mathcal{F}(q_n) = F(q_n) + \Phi(q_n) + S(q_n)V \tag{II.5.26}$$

L'intégration de l'équation (II.5.25) entre les temps t_n et t_{n+1} donne :

$$V(q_{n+1} - q_n) = \int_n^{n+1} \mathcal{F}(q_n)dt \tag{II.5.27}$$

Plusieurs schémas numériques temporels sont disponibles dans CEDRE pour intégrer le terme de droite de l'équation (II.5.27). Le choix du schéma numérique est effectué en fonction des besoins du calcul. Dans cette thèse, nous étudions des phénomènes stationnaires, c'est-à-dire que les champs de quantité q, une fois établis, ne dépendent plus du temps. Nous privilégions donc les méthodes numériques permettant d'adopter des grands pas de temps. Le but étant de parvenir aux champs stationnaires avec le moins d'étapes possibles, réduisant ainsi les coûts de calcul. Parmi les schémas numériques temporels disponibles dans le code CEDRE, nous avons adopté le schéma implicite d'Euler.

Le caractère implicite du schéma correspond à l'approximation du terme de droite par $\mathcal{F}(q_{n+1})$:

$$V(q_{n+1} - q_n) = \mathcal{F}(q_{n+1}) \tag{II.5.28}$$

Cette méthode peut s'interpréter de plusieurs manières. Du point de vue de l'intégration numérique, cela correspond à l'application de la formule des rectangles à droite basée au point t_{n+1} (voir Figure 35). Du point de vue du développement de Taylor, cela correspond à faire un développement limité rétrograde de la quantité q_{n+1} à l'ordre 1 :

$$q_{n+1} = q_n + \dot{q}_{n+1}(t_{n+1} - t_n) + \mathcal{O}(t_{n+1} - t_n)^2 \qquad \text{(II.5.29)}$$

L'équation (II.5.28) peut ainsi être retrouvée à partir de l'équation (II.5.29) en remplaçant $\dot{q}_{n+1}$ par l'expression de l'équation (II.5.25). Par rapport au schéma explicite dans lequel le terme de droite de l'équation (II.5.27) est remplacé par $\mathcal{F}(q_n)$, la méthode implicite possède l'avantage d'être plus stable. La stabilité est la propriété qui assure que la différence entre la solution numérique obtenue et la solution exacte des équations discrétisées est bornée. En pratique, cela signifie que la méthode implicite permet l'utilisation de pas de temps plus grands par rapport à la méthode explicite tout en évitant que la solution diverge. La solution finale recherchée sera donc atteinte plus rapidement. Remarquons cependant que l'adoption de pas de temps très grands conduit à des solutions intermédiaires qui peuvent être éloignées de la solution de l'équation exacte. Ces états intermédiaires ne correspondent donc pas à des solutions réalistes. Par conséquent, la variable temporelle ne coïncide pas avec le temps au sens physique, on parle alors de pseudo-temps.

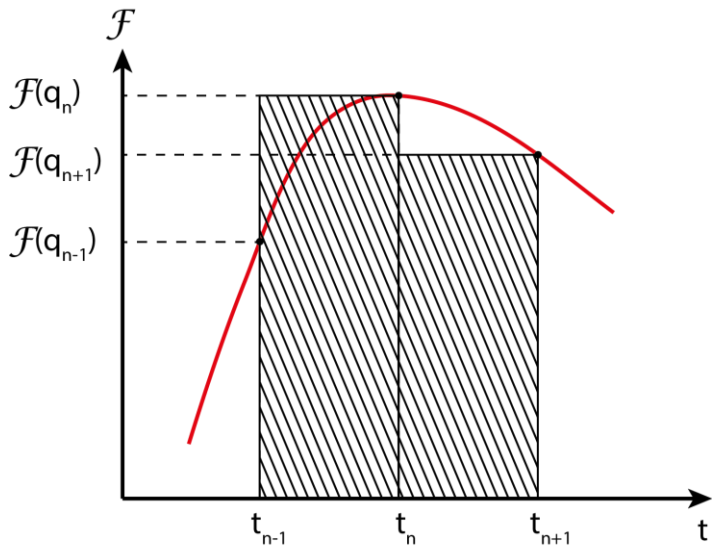

Figure 35 : Schéma descriptif de la formule des rectangles à droite

Les méthodes implicites apportent certes une stabilité supérieure mais leur mise en œuvre est plus complexe. En effet, la résolution numérique de l'équation (II.5.28) requiert la

linéarisation du terme $\mathcal{F}(q_{n+1})$. Pour cela, nous effectuons un développement de Taylor de $\mathcal{F}(q_{n+1})$ autour de l'état q_n à l'ordre 1 :

$$\mathcal{F}(q_{n+1}) = \mathcal{F}(q_n) + J_n(q_{n+1} - q_n) + \mathcal{O}(q_{n+1} - q_n)^2 \qquad \text{(II.5.30)}$$

Avec $J_n$la matrice jacobienne des flux $\mathcal{F}$ par rapport aux états q, de taille (n_q, n_q) :

$$J_n = \left.\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial q}\right|_n = \begin{bmatrix} \left.\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_1}\right|_n & \left.\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_2}\right|_n & \cdots & \left.\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial q_{n_q}}\right|_n \\ \left.\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_1}\right|_n & \left.\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial q_2}\right|_n & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ \left.\frac{\partial \mathcal{F}_{n_q}}{\partial q_1}\right|_n & \cdots & \cdots & \left.\frac{\partial \mathcal{F}_{n_q}}{\partial q_{n_q}}\right|_n \end{bmatrix} \qquad \text{(II.5.31)}$$

Dans l'équation (II.5.31), q_k et $\mathcal{F}_k$ désignent la k-ième composante des matrices colonnes q et $\mathcal{F}$ respectivement. L'équation (II.5.28) à résoudre devient finalement :

$$(V - J_n)(q_{n+1} - q_n) = \mathcal{F}(q_n) \qquad \text{(II.5.32)}$$

La résolution du système linéaire (II.5.32) est réalisée avec la méthode dite « Generalized Minimum Residual » (GMRES) introduite par *Saad et Schultz* [1986]. Comme son nom l'indique, cette méthode repose sur la minimisation des résidus r_i :

$$r_i = Ax_i - b \qquad \text{(II.5.33)}$$

Avec A une matrice réelle, b le vecteur second membre et x le vecteur solution. Il s'agit d'une méthode permettant de résoudre efficacement les systèmes linéaires de grandes tailles. Le lecteur trouvera des informations plus détaillées sur la méthode GMRES implémentée dans le code CEDRE dans la thèse de *Selva* [1998].

Chapitre III. Résultats

Dans ce chapitre dédié à la présentation des résultats de simulation, nous mettons en œuvre les modèles décrits dans le chapitre précédent afin de simuler la formation de traînées de condensation dans le sillage d'un avion. La simulation complète avec le code CEDRE de l'ensemble des processus physico-chimiques menant à la formation d'une traînée de condensation nécessite au préalable la réalisation de plusieurs étapes essentielles.

La première étape consiste à vérifier la capacité du code CEDRE à simuler de manière suffisamment précise les écoulements aérodynamiques dans le sillage d'un avion en vol, jouant un rôle important dans la formation des traînées de condensation En effet, le logiciel CEDRE a été initialement développé pour des applications correspondant à des écoulements internes, comme par exemple la simulation des écoulements dans une chambre de combustion. Par ailleurs, peu d'études ont été réalisées dans le but de valider le code CEDRE pour des écoulements externes. Ces derniers sont particulièrement importants dans l'évolution du panache d'un avion en vol de croisière que nous nous proposons de simuler. De ce fait, une pré-validation du code CEDRE pour ce type d'écoulements s'est avérée nécessaire. Les résultats des simulations réalisées dans ce but, sont présentés et commentés dans la suite de ce chapitre.

Dans un deuxième temps, il est nécessaire de vérifier la validité des champs de concentrations des espèces chimiques dans le panache. Ce dernier est notamment le siège de transformations chimiques qui sont modélisées par un schéma cinétique couplé à un modèle cinétique de CEDRE (voir partie II.3). Cette étape de validation est nécessaire étant donné que les concentrations des espèces chimiques constituent des données d'entrées pour les modèles microphysiques que nous avons implantés. De la précision de la simulation des grandeurs chimiques dépend donc celle des propriétés microphysiques calculées.

Nous utilisons ensuite les modèles microphysiques pour réaliser une simulation de référence avec une configuration de calcul favorable à la formation de traînées de condensation. Le but de cette simulation est de vérifier que les modèles implantés sont effectivement capables de bien décrire les phénomènes physiques conduisant à la formation de cristaux de glace dans le panache. Enfin, nous étudions les réponses du modèle à des variations de paramètres clés influençant les propriétés des traînées de condensation. Ces études paramétriques permettent de

servir un objectif double. D'une part, l'étude de la réponse des modèles à des variations de paramètres constitue un moyen d'évaluation et par conséquent de confirmation des performances des modèles développés. D'autre part, ces études doivent permettre de déterminer de quelles manières les propriétés des traînées de condensation sont impactées par des changements de paramètres d'entrée comme l'humidité relative, la teneur en soufre du carburant, la taille initiale des particules de suie, ou encore leur nombre en sortie de moteur.

III.1 Présentation du domaine de calcul

Dans cette partie, qui constitue un préambule à la présentation des résultats proprement dits, nous décrivons les caractéristiques du domaine de calcul utilisé. Ce dernier définit le cadre dans lequel les simulations numériques sont réalisées. Cette partie est organisée en trois sous-parties dans lesquelles nous présentons respectivement les caractéristiques géométriques de l'avion choisi pour la simulation, les dimensions du domaine de calcul et enfin les spécificités des maillages élaborés.

III.1.1 Géométrie de l'avion

La géométrie de l'avion utilisée pour nos simulations correspond à celle d'un Boeing B737 simplifié (voir Figure 36 et Figure 37), correspondant à un avion de ligne biréacteur. À titre d'information, cet avion de ligne, classé dans la famille des moyen-courriers, est le modèle le plus vendu au monde, avec plus de 8600 livraisons à ce jour [*Bachman*, 2014].

Les caractéristiques de la géométrie utilisée pour nos simulations sont indiquées sur la Figure 37. La géométrie est ainsi principalement composée du fuselage, des empennages horizontal et vertical, des ailes et des moteurs. Les simulations correspondant à des phases de croisière, les volets ainsi que le train d'atterrissage n'ont pas été représentés, ils sont supposés rentrés. Les ailerons et les gouvernes sont supposés réglés à leur position neutre. L'envergure de l'avion, c'est-à-dire la distance séparant les deux bouts d'aile, est de $b = 34$ m. Nous notons que cette géométrie ne possède pas de winglet en bout d'aile qui modifierait probablement la forme et l'intensité des tourbillons de sillage générés. Le moteur est positionné sous l'aile à environ $2/3$ de sa longueur en partant de l'extrémité de l'aile. Ceci donne une distance jet/tourbillon initiale d'environ 11 m.

Pour des raisons de simplification de la configuration de calcul, les mâts n'ont pas été pris en compte dans cette géométrie. Ce sont les dispositifs permettant de rattacher les nacelles des moteurs à l'aile. Le choix de l'absence de mât dans la géométrie est motivé par l'avantage de permettre une modification aisée de la position du moteur sous l'aile pour d'éventuelles études portant sur les effets d'installation. En effet, un repositionnement de la nacelle nécessiterait un travail complexe, et ici superflu, d'ajustement de la forme du mât dépendant de sa position. Nous retiendrons, cependant, que l'absence de cet élément pourrait altérer

l'écoulement de l'air en aval du moteur et qu'une future étude devra évaluer les conséquences de son absence sur les propriétés des traînées de condensation formées.

Figure 36 : Photographie d'un Boeing B737.

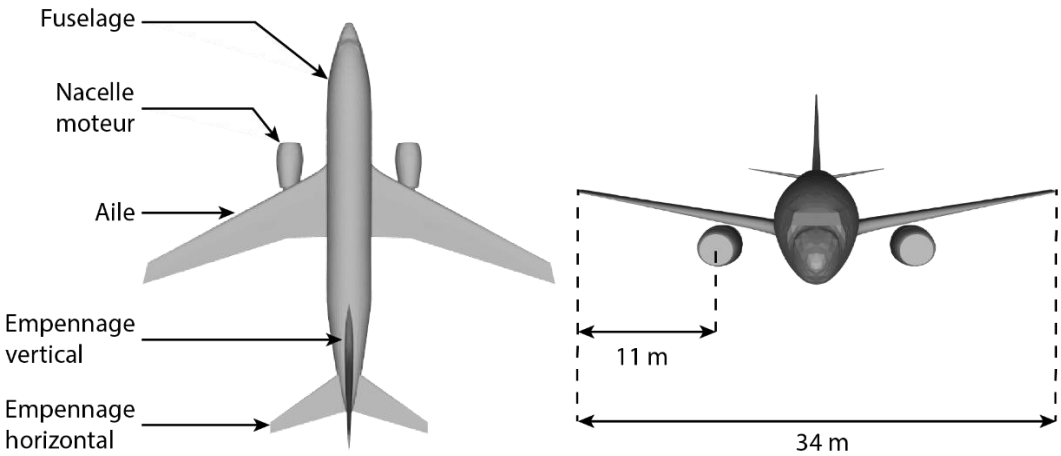

Figure 37 : Description de la géométrie de l'avion utilisée pour les simulations numériques. Vue de dessus (à gauche) et vue de face (à droite).

Nous nous intéressons à présent aux sorties des moteurs, représentées sur la Figure 38. Ce système, dit à double flux, équipe la majorité des moteurs aéronautiques modernes. La sortie primaire, d'une superficie de $0{,}29\ \mathrm{m}^2$, éjecte les produits de combustion tandis que la sortie secondaire, d'une superficie de $1{,}1\ \mathrm{m}^2$, éjecte de l'air ayant circulé autour de la chambre de combustion afin de la refroidir.

Enfin, notons que seule la moitié de la géométrie de l'avion est utilisée pour la simulation, les résultats correspondant à l'autre moitié étant obtenus par symétrie planaire.

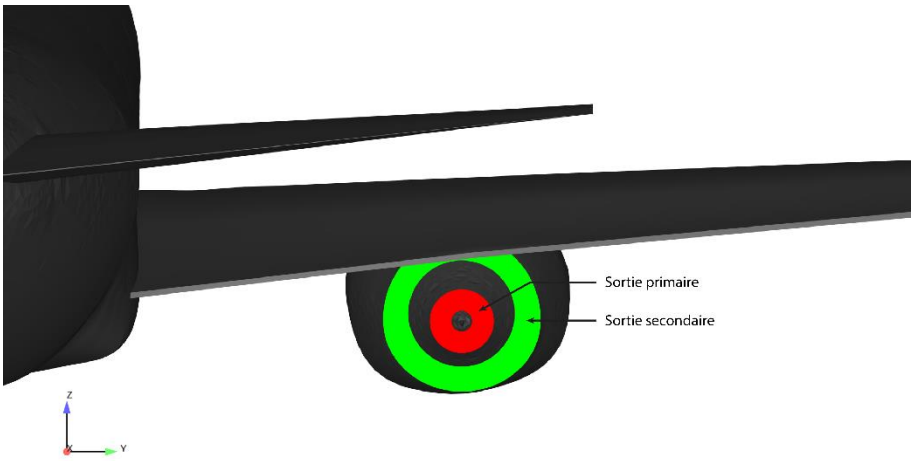

Figure 38 : Description de la géométrie du moteur double flux utilisé pour les simulations numériques.

III.1.2 Géométrie du domaine de calcul

Le domaine de calcul permettant de décrire le champ proche de l'avion est représenté sur la Figure 39. Il correspond à une boîte de forme parallélépipédique, contenant la géométrie du Boeing B737 décrite dans le paragraphe III.1.1. Comme indiqué précédemment, le domaine de calcul ne contient que la moitié de l'avion. Une condition de symétrie est alors imposée à la limite du domaine passant par le plan médian de l'avion. Les dimensions du domaine sont $4{,}5b \times 2b \times 2b$, respectivement dans les directions x, y et z avec $b = 34$ m l'envergure de l'avion (voir Figure 39).

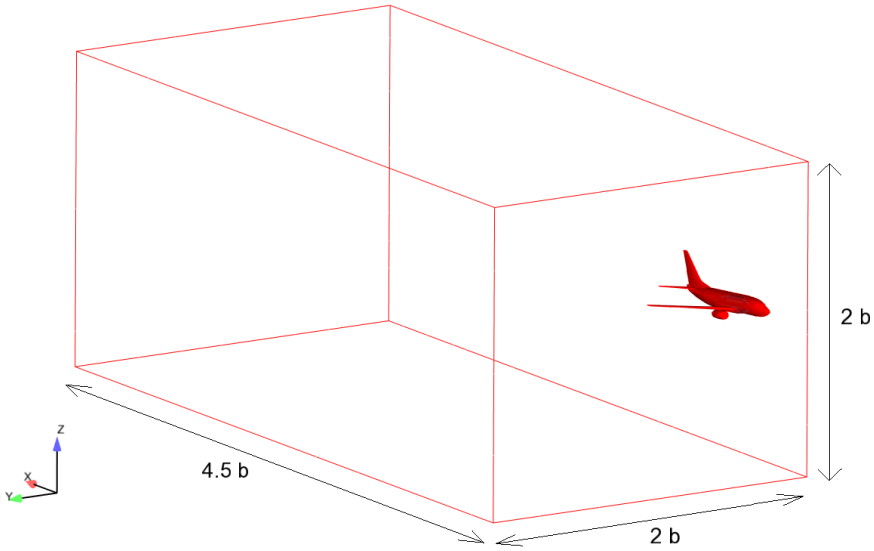

Figure 39 : Description de la géométrie et des dimensions du domaine de calcul.

Les dimensions du domaine de calcul, et notamment celle dans la direction du vol, ont été choisies de manière à prendre en compte le coût des calculs et le temps de restitution des résultats. Compte tenu de ces contraintes, dans le cadre de la mise en œuvre des modèles microphysiques dans le code CEDRE, nous avons choisi de limiter le domaine de calcul à 4 envergures dans le sillage de l'avion, à partir de la sortie moteur. Ceci correspond à une durée de vie du panache d'environ 0,5 seconde, permettant d'étudier la formation des cristaux de glace au début du régime jet (voir paragraphe I.1.2.1). Une fois les modèles microphysiques validés, la taille du domaine de calcul sera amenée à s'étendre dans de futurs travaux.

III.1.3 Maillage du domaine de calcul

La discrétisation spatiale du domaine de calcul est réalisée à travers la génération d'un maillage. Ce dernier décrit la position et la forme des cellules qui serviront de base à l'écriture des équations de bilan pour les quantités conservées. La génération du maillage représente un processus complexe car elle doit être pensée en fonction des phénomènes physiques que nous souhaitons simuler. Dans les études présentées ici, ces phénomènes physiques correspondent par exemple au développement des tourbillons de sillage ou encore à l'entraînement du jet par ces mêmes tourbillons. La taille des cellules doit donc être adaptée à la taille des processus locaux simulés. Ainsi, la discrétisation fine d'une zone du domaine offre une meilleure précision au calcul et permet de limiter la diffusion numérique. En contrepartie, elle augmente le nombre de cellules, entraînant une augmentation du coût du calcul.

La diffusion numérique que nous avons évoquée ci-dessus correspond à une dissipation non désirée des champs de quantités conservées et peut être imputée à plusieurs facteurs. Celle provoquée par le maillage provient du fait que les champs sont réduits à leur moyenne dans une cellule donnée. Plus les dimensions de la cellule sont grandes par rapport aux dimensions caractéristiques du phénomène simulé, plus la « perte d'information » le sera également. La diffusion numérique peut en particulier être importante dans les zones présentant de forts gradients. Un raffinement accru du maillage est alors requis dans ces zones si une diffusion numérique minimale est souhaitée.

Les maillages utilisés dans cette thèse ont été réalisés avec le logiciel ANSYS ICEM, permettant entre autres de construire des maillages non-structurés à partir d'une géométrie quelconque. La Figure 40 présente une illustration du maillage, en faisant apparaître le maillage surfacique de l'avion et deux plans de coupe dans le maillage volumique, à une demi-envergure

et à une envergure derrière la sortie primaire du moteur. Le maillage surfacique de l'avion est composé de triangles et le maillage volumique du domaine principalement de tétraèdres, excepté pour les cellules proches de la paroi de l'aile qui correspondent à des couches de prismes à base triangulaire. L'intérêt de leur utilisation sera abordé par la suite. Le nombre total de cellules volumiques s'élèvent ainsi à environ 27 millions et le nombre de cellules surfaciques à environ 320000.

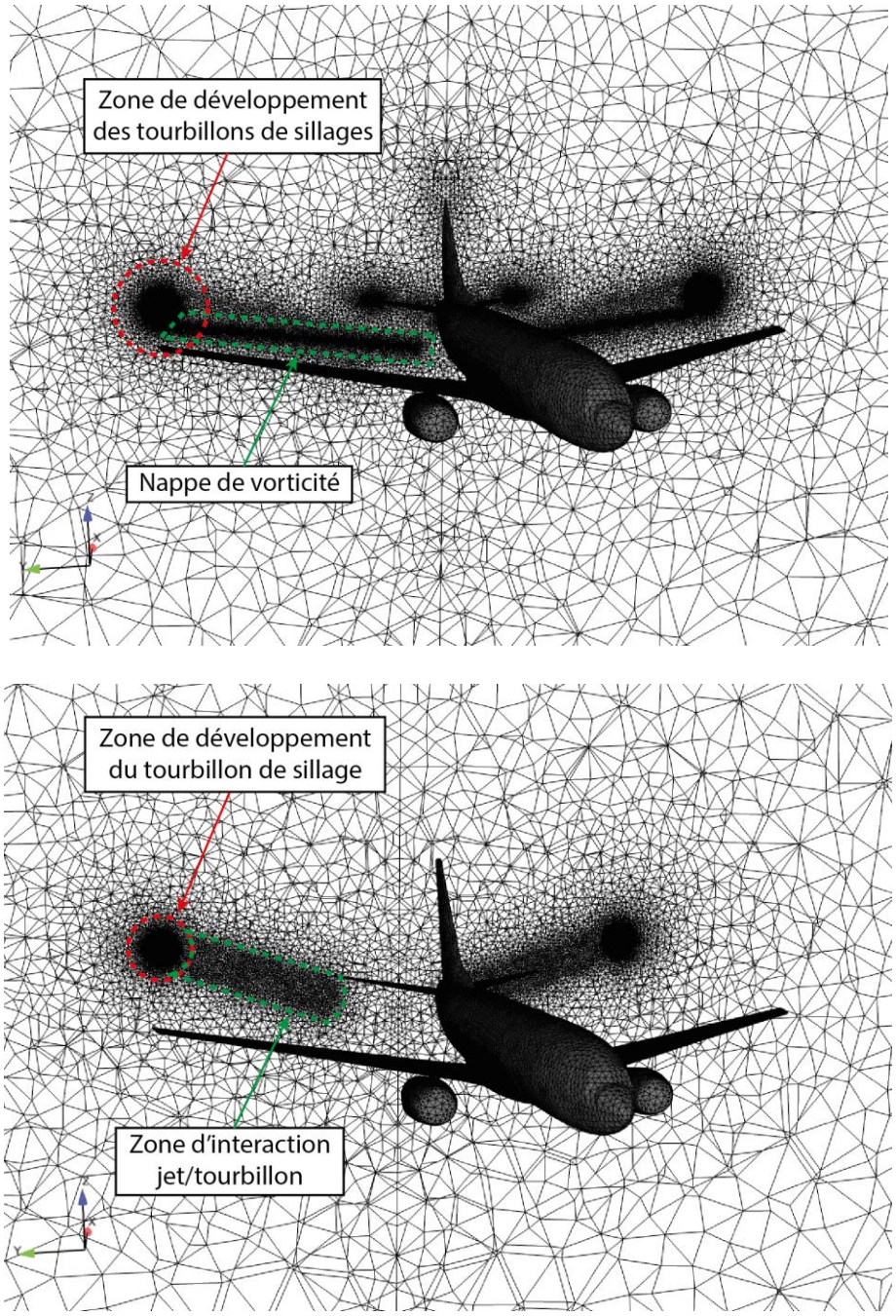

Figure 40 : Représentation du maillage surfacique de l'avion et d'un plan de coupe du maillage volumique à une distance de 0,5 b (haut) et de 1 b (bas) dans le sillage de l'avion.

La répartition spatiale de ces cellules a été étudiée pour résoudre le mieux possible le développement du tourbillon de sillage ainsi que son interaction avec le jet. Ainsi, le maillage surfacique de l'avion a fait l'objet d'une discrétisation particulièrement fine sur l'aile (voir Figure 41), où nait la nappe tourbillonnaire. À titre d'information, la longueur caractéristique d'une cellule sur l'aile est de 10^{-2} m tandis qu'elle est de 1 m sur le fuselage.

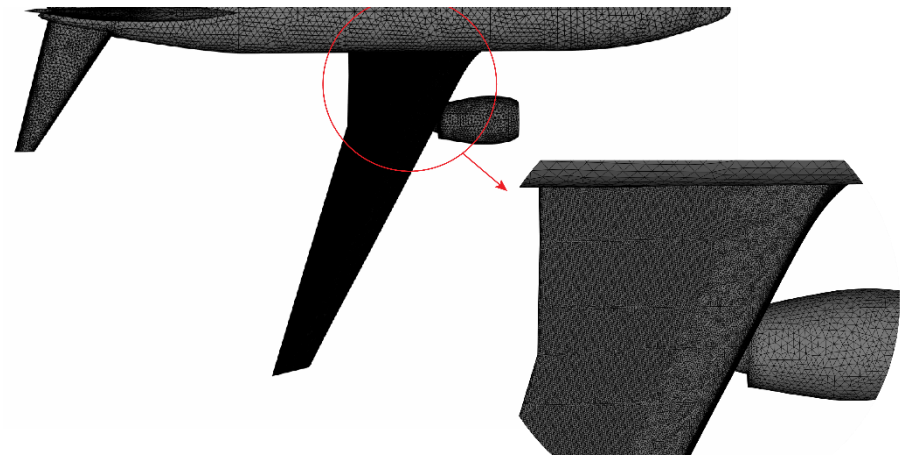

Figure 41 : Visualisation du maillage surfacique de l'avion (vue du dessus). Un zoom montre la discrétisation fine au niveau de l'aile.

En ce qui concerne le maillage volumique, quatre couches de prismes sont disposées autour de la paroi de l'aile, afin de mieux résoudre les flux dans la couche limite (Figure 42). En effet, les prismes présentent l'avantage d'avoir des faces qui restent localement orthogonales ou parallèles à la paroi. Par conséquent, les vecteurs normaux aux faces parallèles aux parois se trouvent alignés avec les gradients des quantités conservées et sont par conséquent alignés aux flux. Cet alignement réduit les erreurs d'interpolation des flux aux interfaces et diminue la diffusion numérique.

Ainsi, du point de vue de la discrétisation spatiale, les prismes sont particulièrement adaptés au maillage de cette zone très fine présentant de forts gradients orthogonaux. En outre, de par leurs propriétés d'orthogonalité, ils autorisent un rapport d'aspect relativement grand. Les prismes sont placés de manière à ce que la dimension « longue » se trouve dans la direction de l'écoulement et que la dimension « courte » se trouve dans la direction des gradients, orthogonaux à la paroi. La première cellule à la paroi présente une hauteur de $5 \cdot 10^{-3}$ m.

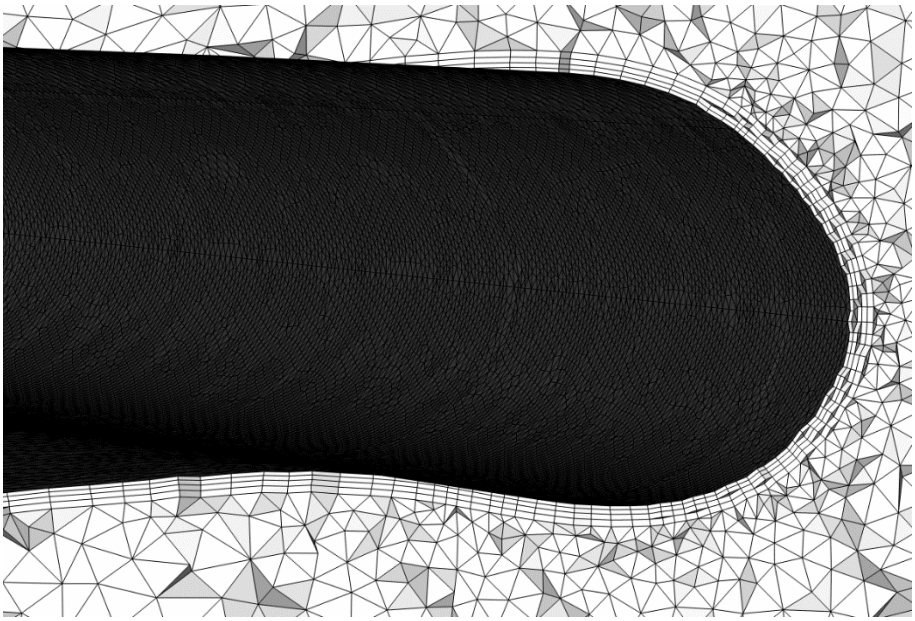

Figure 42 : Coupe longitudinale du maillage volumique au niveau du bord d'attaque de l'aile permettant de visualiser les couches de prismes du maillage.

Afin de simuler les tourbillons de sillage, le maillage est plus particulièrement raffiné dans la zone correspondant à l'emplacement de la nappe de vorticité et dans la zone de développement du tourbillon (voir Figure 40). La longueur caractéristique des cellules dans ces zones est de 0,07 m alors qu'elle est de 6 m dans le champ lointain. De manière analogue, une « zone de raffinement » avec des cellules d'une longueur caractéristique de 0,2 m est placée dans la zone de développement du jet du moteur, ainsi que dans la zone d'interaction entre les jets et les tourbillons de sillage. Le repérage de ces différentes zones de raffinement a été réalisé grâce à des calculs successifs, qui ont permis de localiser les zones d'intérêt. Enfin, la transition entre les petites mailles et les grandes est assurée selon un ratio égal à 1,2. Cela signifie que les cellules de la couche $n+1$ sont contraintes d'avoir au plus un volume égal à 1,2 fois les volumes des cellules de la couche n.

III.2 Validation des aspects aérodynamiques

Cette première étude constitue une étape préalable à la mise en œuvre des modèles microphysiques pour la simulation de la formation des traînées de condensation. Elle vise à valider une simulation numérique de l'écoulement externe du sillage de l'avion, effectuée avec le code CEDRE. Nous évaluons alors la fidélité avec laquelle sont reproduits les champs aérodynamiques de l'écoulement. Nous rappelons que les propriétés aérodynamiques de l'écoulement, notamment influencées par les tourbillons de sillage, déterminent les taux de dilution du panache qui jouent un rôle essentiel dans les processus de formation des cristaux de glace. Ils influencent entre autres les concentrations des espèces chimiques et les températures locales au sein du panache.

Dans cette partie, nous présentons dans un premier temps les propriétés du calcul puis les résultats de l'évaluation des propriétés des tourbillons de sillage et de l'interaction jet/tourbillon obtenues par la simulation numérique. Enfin, le facteur de dilution du panache obtenu est comparé aux résultats de la littérature pour mesurer le degré de fidélité du champ aérodynamique simulé, notamment en termes d'expansion.

III.2.1 Propriétés du calcul

Le domaine de calcul utilisé pour cette simulation correspond à celui présenté dans la partie I.1 (voir Figure 39). Ce calcul vise à évaluer la capacité du code CEDRE à simuler de manière satisfaisante la dilution d'un panache dans l'atmosphère jusqu'à 4 envergures derrière l'avion en vol de croisière. Cela correspond à une durée de vie du panache d'environ 0,5 seconde après éjection des effluents. La Figure 43 donne les principales conditions initiales et aux limites fixées pour ce calcul. Afin de reproduire les conditions du vol de croisière, l'entrée du domaine de calcul est configurée avec une condition d'entrée d'air à une température de 219 K, une pression de 23920 Pa et une vitesse de $237\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$, correspondant à un nombre de Mach de $M_a = 0{,}7$.

La température et la pression choisies correspondent aux propriétés standards de l'atmosphère à une altitude d'environ 11 kilomètres, qui est l'altitude de vol de croisière des avions de ligne à réaction.

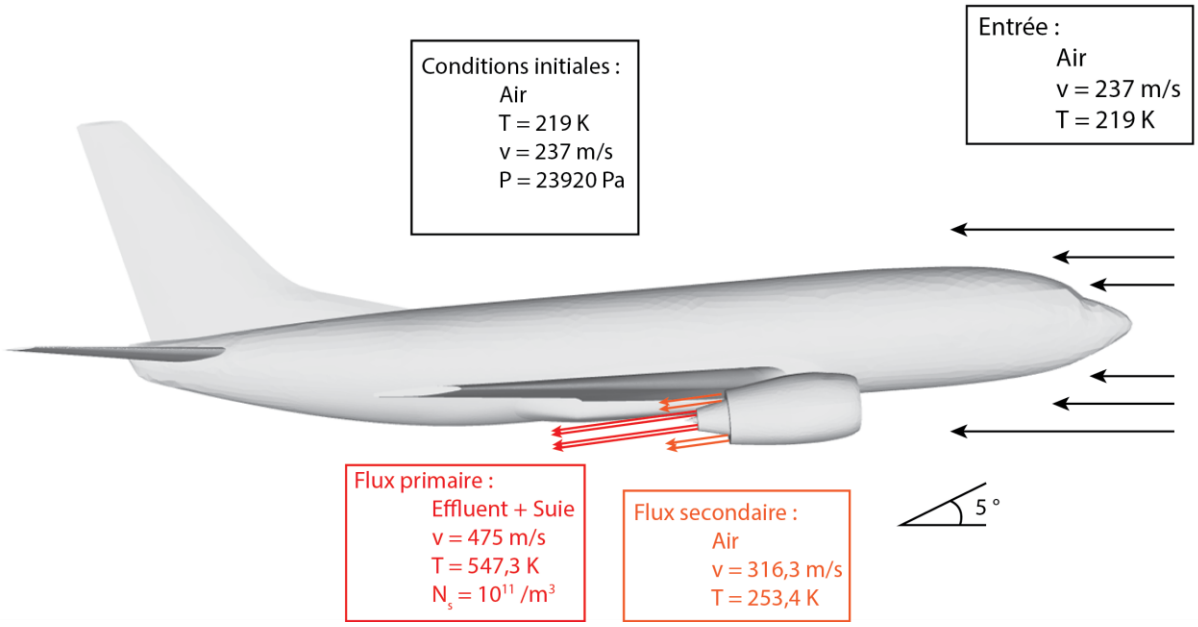

Figure 43 : Description des conditions initiales et aux limites.

Afin de produire la portance correspondant à un régime de croisière, l'assiette de l'avion est réglée à un angle de 5 degrés. L'assiette d'un avion correspond à l'angle formé entre l'axe horizontal et l'axe longitudinale de l'avion (voir Figure 44). Cette valeur correspond à l'assiette usuelle d'un avion de ligne en vol de croisière lorsqu'il est chargé, c'est-à-dire avec le plein de kérosène et de passagers. À une vitesse relative donnée, plus l'assiette de l'avion est importante, plus l'avion produit de la portance, et plus les tourbillons de sillage générés seront intenses. À titre d'information, en fin de vol, l'assiette de l'avion déchargé de son kérosène est typiquement de 3 degrés.

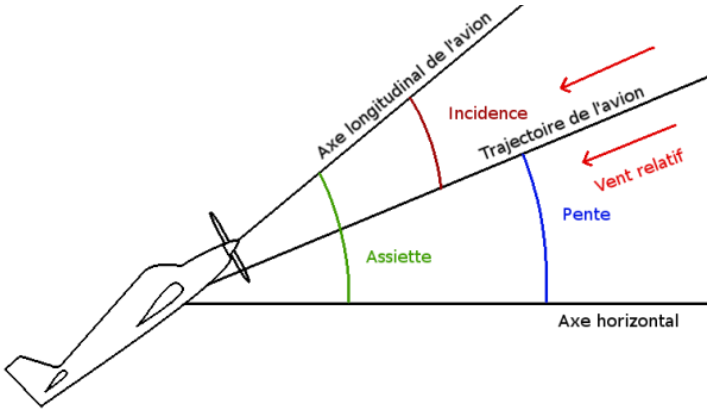

Figure 44 : Schéma explicatif de différents angles décrivant l'orientation d'un avion.

Le panache est formé à partir des effluents émis par la sortie primaire du moteur qui sont représentées par des conditions aux limites d'entrée dans le domaine de calcul. La sortie secondaire éjecte de l'air chaud à une température de $253\ \mathrm{K}$ et à une vitesse de $316\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ tandis que la sortie primaire éjecte des produits de combustion à une température de $547\ \mathrm{K}$ et à une vitesse de $475\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$. Ces valeurs correspondent à celles des sorties d'un moteur CF6, tirées de *Kärcher et al.* [1996a]. Dans cette étude, les effluents sont constitués uniquement d'air et de particules de suies. Ces dernières étant modélisées par un scalaire passif (voir paragraphe II.4.1) de densité $N_s = 10^{11}\ \mathrm{m}^{-3}$, qui est une valeur usuellement mesurée en sortie de tuyère [*Petzold et al.*, 1999]. Ce scalaire passif sera par ailleurs utilisé pour évaluer la dilution du panache simulé. Ce point sera décrit plus en détail dans la sous-partie consacrée à l'étude de la dilution.

Pour information, l'obtention des résultats de cette simulation a nécessité environ 12000 heures de calculs, réparties sur 480 cœurs issus de processeurs cadencés à $2{,}7\ \mathrm{GHz}$.

III.2.2 Propriétés du tourbillon de sillage

III.2.2.1 Structure de l'écoulement

Dans le régime jet, les effluents éjectés du moteur sont mélangés avec l'air extérieur et progressivement aspirés vers le tourbillon marginal généré en bout d'aile. Le développement des tourbillons de sillage doit donc être suffisamment bien simulé car ceux-ci jouent un rôle essentiel dans le développement du panache, notamment sur la dispersion des effluents.

Nous étudions ici les caractéristiques du tourbillon de sillage simulé avec le code CEDRE, généré par la géométrie du Boeing B737. La Figure 45 montre l'isosurface de vorticité $\omega_x = 20\ \mathrm{rad} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ dans le domaine de calcul, permettant entre autres de visualiser la structure de l'écoulement et les zones où se développe le tourbillon. Cela signifie que toutes les cellules du domaine présentant une vorticité égale à $20\ \mathrm{rad} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ sont illustrées en vert. Nous rappelons que la vorticité mesure la vitesse angulaire locale du fluide. Nous pouvons ainsi observer que la vorticité nait sur l'aile et forme une nappe en aval du bord de fuite. L'intensité tourbillonnaire ainsi créée alimente alors le tourbillon se formant au niveau du bout d'aile et se développant dans son sillage.

Il est intéressant de remarquer que le jet du moteur situé sous l'aile a pour effet de séparer la nappe de vorticité en deux parties. Sachant que cette dernière contribue de manière importante à la formation des tourbillons en bout d'aile, il est possible que le jet du moteur puisse avoir une influence sur le développement des tourbillons de sillage. Aussi, la position du moteur pourrait être un paramètre modifiant les caractéristiques du tourbillon de sillage. Cette question pourrait être examinée plus en détail à l'occasion de futures études.

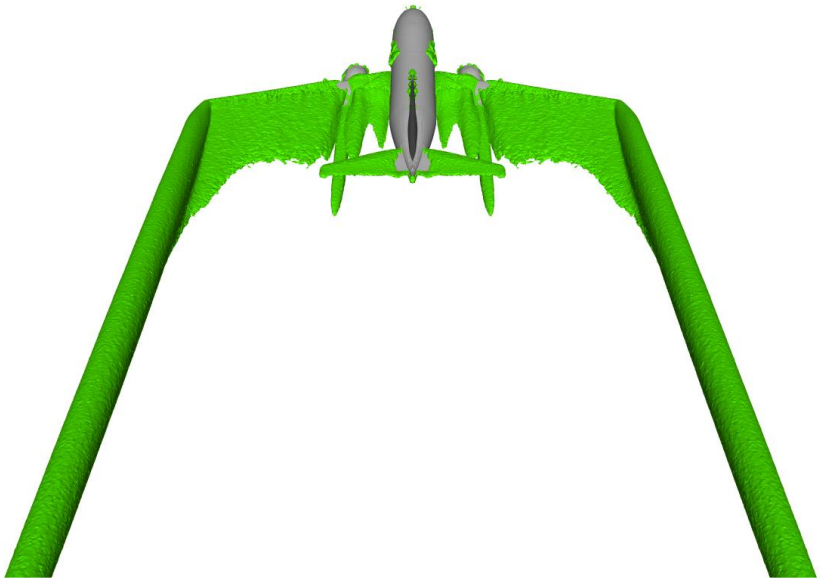

Figure 45 : Visualisation de l'isosurface de vorticité $\omega_x = 20\ \mathrm{rad} \cdot \mathrm{s}^{-1}$.

La formation du tourbillon marginal peut également être visualisée à travers le tracé des lignes de courant à partir du bord de fuite de l'aile (voir Figure 46). Nous remarquons que les lignes de courant se resserrent vers la zone du tourbillon de sillage à mesure que nous nous éloignons de l'avion et qu'à l'inverse, elles se desserrent à proximité du fuselage. Cela montre que l'écoulement est piloté par l'action du tourbillon qui amène la nappe de vorticité à s'enrouler sur elle-même. La mise en évidence de l'état de la nappe de vorticité à intervalles réguliers derrière l'avion par des boules blanches (voir Figure 46) permet de montrer l'expansion spatiale du tourbillon et l'évolution de son niveau d'enroulement. Nous pouvons observer que la taille du tourbillon marginal augmente à mesure que la nappe de vorticité s'enroule autour du cœur du vortex.

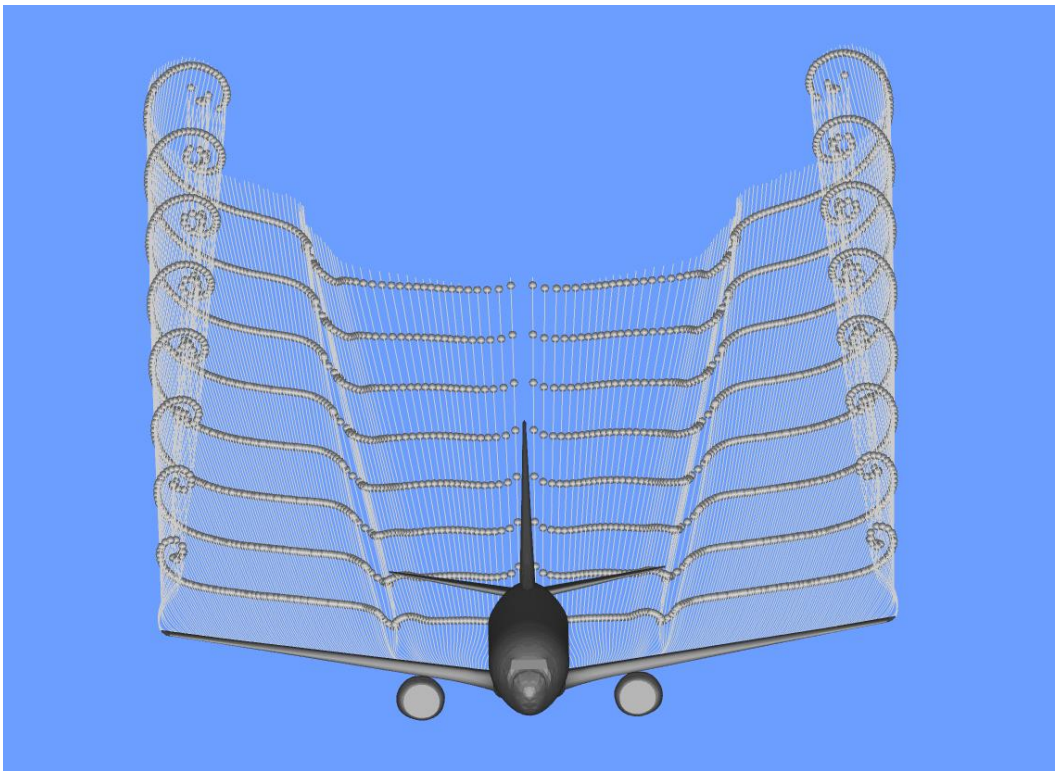

Figure 46 : Visualisation de l'évolution de la nappe de vorticité et du tourbillon de bout d'aile dans le sillage de l'avion.

Il est également intéressant de noter la présence du jet, révélé par la déformation de la nappe de vorticité en aval de la sortie moteur. Le jet semble ainsi dévier fortement les lignes de courant de la nappe de vorticité se trouvant proche du fuselage vers le bas. Cette observation est un indicateur supplémentaire de la possible influence du jet du moteur sur les caractéristiques du tourbillon de sillage. Nous voyons, par ailleurs, qu'à mesure que le panache se développe, la signature du jet dans la nappe de vorticité se déplace vers le cœur du tourbillon, témoignant ainsi de l'attraction exercée par ce dernier sur le jet.

III.2.2.2 Intensité tourbillonnaire

Dans cette simulation numérique, l'avion se trouve en régime de croisière et nous calculons une portance totale de 456 kN à partir des champs de pression à la surface de l'avion. Ceci équivaut à une masse de 46,5 t, ce qui est cohérent au regard des spécificités du Boeing B737. Le calcul de la circulation théorique du tourbillon de sillage (voir relation (I.1.2)) donne $\Gamma_0 = 441\ \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$. Cette valeur peut être comparée à la circulation calculée à une envergure derrière l'avion, égale à $\Gamma = 433\ \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$ en utilisant la relation (I.1.1). 98% de la circulation totale est donc conservée à une envergure derrière l'avion, montrant une bonne concordance entre les circulations calculées et théorique.

La Figure 47 présente l'évolution de la circulation radiale adimensionnée $\Gamma(r)/\Gamma_0$ aux quatre premières envergures dans le sillage de l'avion en fonction de la distance radiale adimensionnéer/r_c où r_c est le rayon visqueux. La circulation du tourbillon de sillage converge à chaque coupe transversale vers une valeur proche de la circulation théorique. La stratégie de simulation numérique adoptée semble ainsi limiter la diffusion numérique de la circulation totale, avec une perte de circulation de l'ordre de 10% à 4 envergures. Les profils de circulation donnent également des informations sur l'état du vortex. Ainsi, à $r/r_c \approx 5$, le changement de pente de la circulation radiale à $x/b = 1$ indique que le tourbillon n'est pas encore totalement formé. En effet, la circulation comprise entre $r/r_c \approx 5$ et $r/r_c \approx 14$ correspond à la circulation contenue dans la nappe de vorticité (entre les points A et B sur la Figure 47). Enfin, il est intéressant de noter l'influence du fuselage sur la structure du tourbillon de sillage dans le champ proche. Nous pouvons effectivement remarquer un dépassement local de la circulation à $r/r_c \approx 15$, qui est lié à l'action de la gouverne horizontale, dont la présence influe sur le champ de vorticité.

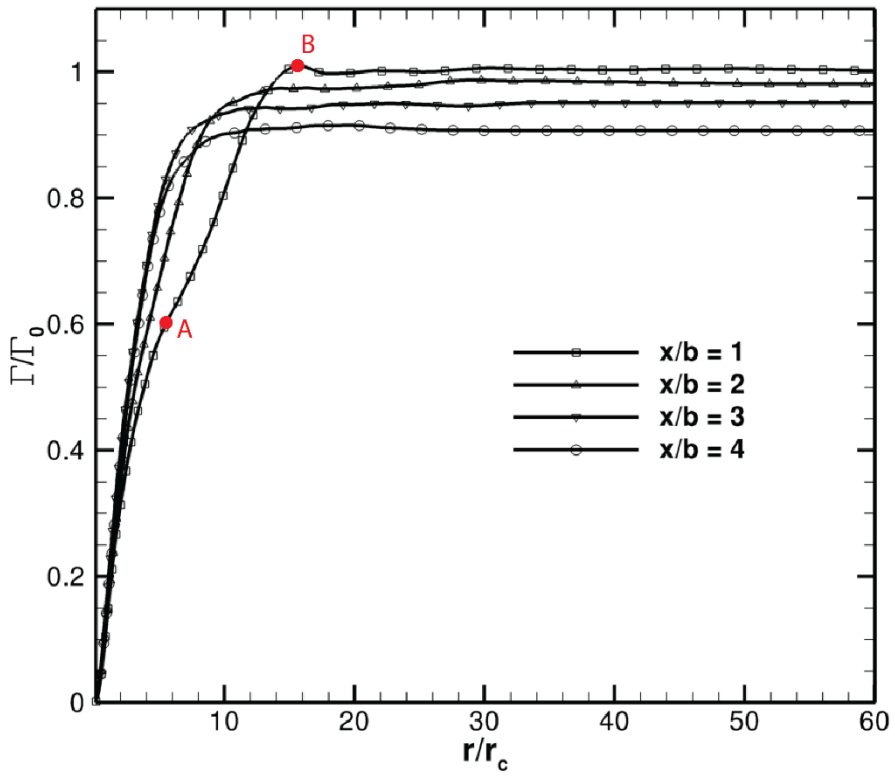

Figure 47 : Evolution de la circulation radiale à plusieurs envergures derrière l'avion.

Afin d'évaluer les propriétés locales des tourbillons de sillage, nous traçons dans la Figure 48 les profils de vitesse tangentielle $v_\theta(r)$ en fonction de la distance radiale à plusieurs

emplacements dans le sillage de l'avion (de $x/b = 0{,}5$ à $x/b = 4$). Nous remarquons qu'à la différence des tourbillons analytiques, (voir par exemple la Figure 16), les profils simulés par une géométrie réaliste d'avion ne sont pas symétriques. La partie gauche du profil, correspondant à la partie proche du fuselage, est en effet fortement influencée par la présence du fuselage de l'avion. Dans cette zone, nous constatons que la vitesse tangentielle prend des valeurs plus basses comparée à la celle correspondant à la partie externe du profil. Par exemple, une vitesse tangentielle quasi-nulle est relevée à $r = -12$ m pour $x/b = 0{,}5$, correspondant à la caractéristique de l'écoulement au voisinage de la gouverne horizontale. Toutefois, à mesure que l'on s'éloigne de l'avion, les profils redeviennent symétriques. Le profil montre alors les tendances attendues pour un tourbillon de sillage [*Köpp*, 1999; *Harris et al.*, 2000]. La Figure 49 montre par exemple les profils de vitesse tangentielle obtenues par *Harris et al.* [2000] par des mesures LIDAR des tourbillons de sillage d'un Airbus A321 à l'aéroport Toulouse Blagnac, ainsi qu'en soufflerie sur une maquette à l'échelle $1/13{,}6$. Nous remarquons en particulier le pic de vitesse tangentielle qui marque la limite entre la zone du noyau visqueux et la zone de relaxation dans laquelle la vitesse tangentielle décroit progressivement jusqu'à atteindre la vitesse de l'écoulement ambiant.

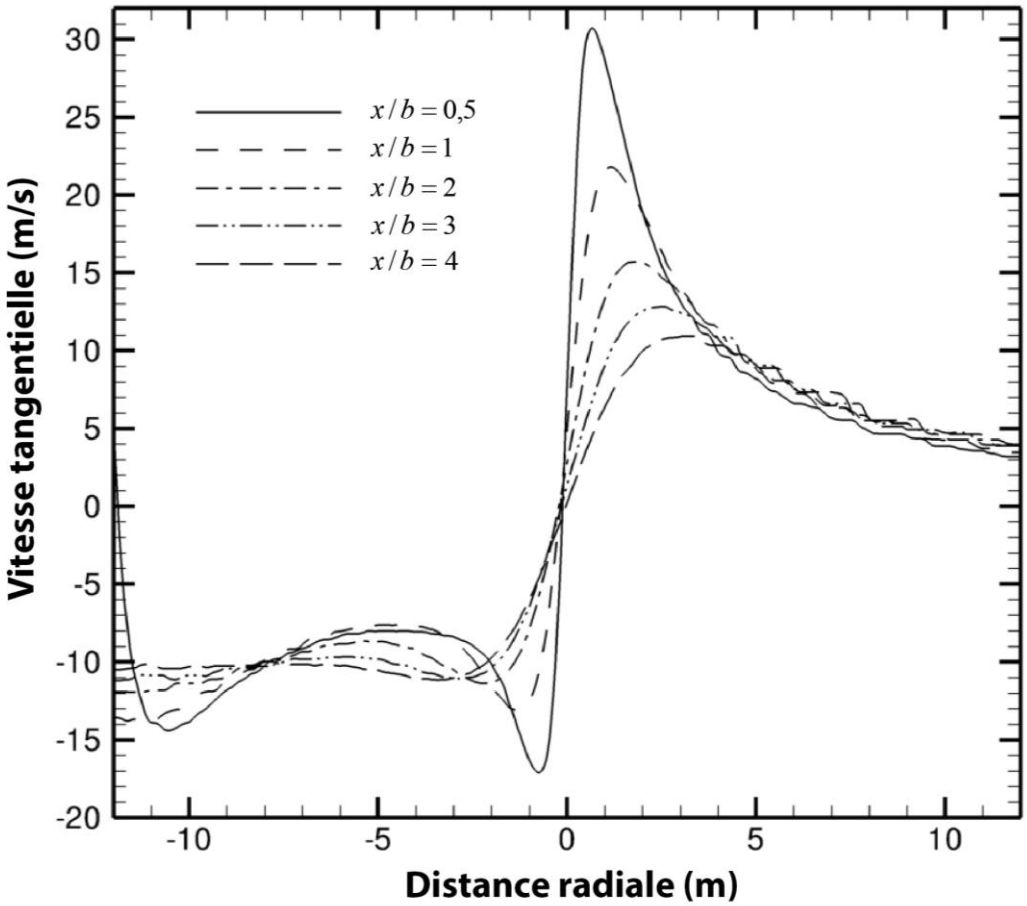

Figure 48 : Profils de vitesse tangentielle obtenus à plusieurs envergures dans le sillage de l'avion.

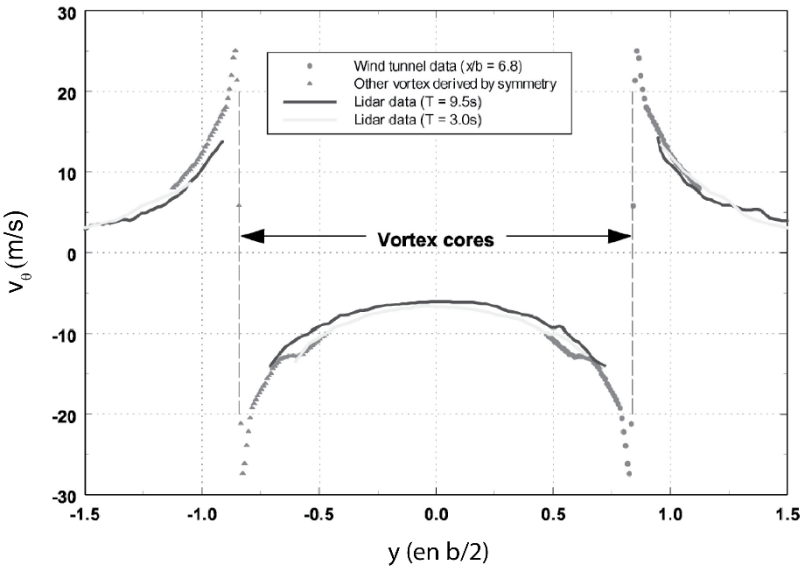

Figure 49 : Profils de vitesse tangentielle des tourbillons marginaux d'un Airbus A321 mesurés à l'aide de LIDAR à l'aéroport Toulouse Blagnac et en soufflerie sur un modèle à l'échelle 1/13,6. En abscisse, l'origine correspond à la position de l'axe central de l'avion.

Source : [*Harris et al.*, 2000]

De manière à évaluer la qualité de la simulation des tourbillons de sillage, nous comparons le taux de décroissance de la vitesse tangentielle dans les directions axiales et transversale avec les données disponibles de la littérature. Cette décroissance est un phénomène naturel, dû au caractère visqueux du fluide. Ainsi, dans la direction axiale, la Figure 48 montre que le pic de vitesse tangentielle chute à mesure que l'on s'éloigne de l'avion. Entre $x/b = 0{,}5$ et $x/b = 4$, il passe de $31\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$ à $10\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, soit une baisse de 67%. Cette diminution de la vitesse tangentielle est en accord avec les données de la littérature [*Köpp*, 1999]. Par exemple, la valeur de la vitesse tangentielle obtenue à 4 envergures derrière l'avion ($10\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$) est comparable à la valeur mesurée à cette même distance par *Köpp* [1999] ($\approx 14\ \mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$) dans le sillage d'un Boeing B707 qui a une envergure de 40 m, proche des 34 m du B737 à l'étude ici.

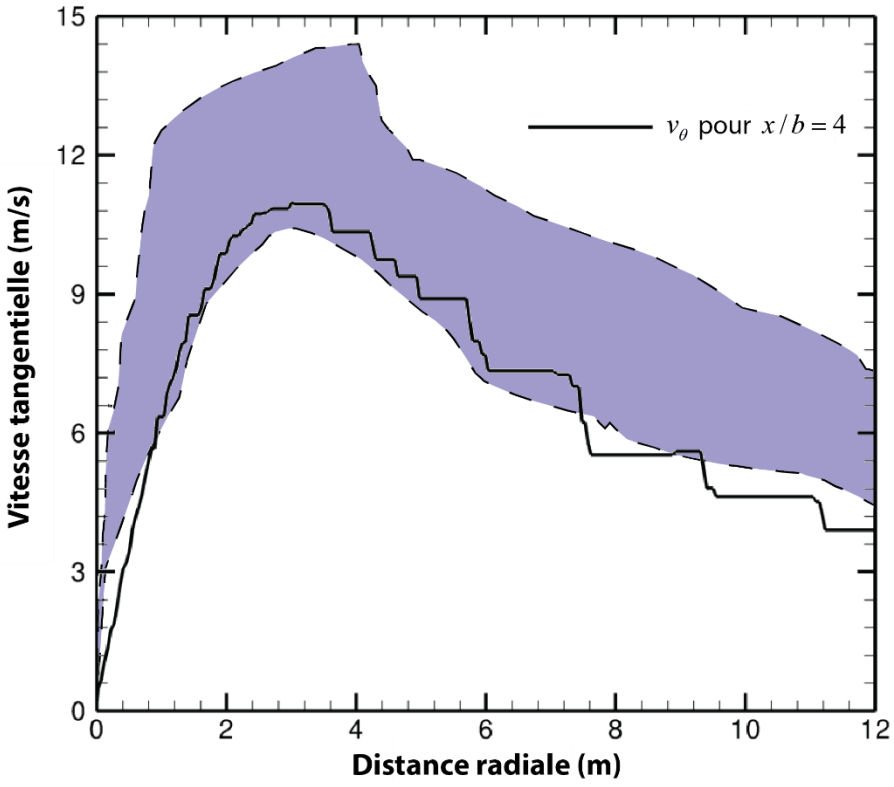

Figure 50 : Comparaison du profil de vitesse tangentielle obtenu à $x/b = 4$ avec les mesures effectuées par *Köpp* [1999]. La zone colorée correspond à la plage de valeur obtenue lors des mesures.

Nous analysons maintenant la décroissance dans la direction transversale. La Figure 50 superpose le profil de vitesse tangentielle obtenu à $x/b = 4$ dans notre simulation avec les mesures in situ de *Köpp* [1999] sur un échantillon de tourbillons de sillage situés de 3,5 à

10,5 envergures derrière un Boeing B707 et un Airborne Warning And Control System (AWACS). L'AWACS est un avion militaire correspondant à un Boeing B707 surmonté d'un radôme de grandes dimensions. Il convient de noter que l'envergure d'un B707 est de 44 mètres, soit 9 mètres de plus que le B737 utilisé dans cette étude. L'intensité des tourbillons de sillage générés étant croissant avec l'envergure, les vitesses tangentielles devraient être supérieures dans le cas du B707 à conditions égales. Les résultats montrent que les vitesses tangentielles simulées prennent des valeurs comparables aux mesures. De plus, les courbes suivent les mêmes tendances, ce qui signifie que les taux de décroissance obtenus sont également satisfaisants.

En conclusion de cette analyse, nous avons vu que la circulation totale du tourbillon dans un plan transversal est cohérente avec la circulation théorique calculée à partir de la portance générée jusqu'à la fin du domaine de calcul. Nous avons également comparé les profils de vitesse tangentielle à différentes distances derrière l'avion à des mesures effectuées sur des maquettes en soufflerie et derrière des avions réels dans un aéroport. Les résultats montrent que la structure des tourbillons calculés est cohérente. Enfin, nous avons comparé le profil de décroissance de la vitesse tangentielle avec la distance radiale en fin de domaine de calcul avec un échantillon de mesures in situ, montrant un taux de décroissance comparable. À la lumière de ces différentes comparaisons, la simulation des tourbillons de sillage dans notre étude nous paraît satisfaisante au premier ordre.

III.2.3 Propriétés de l'interaction jet/tourbillon

Dans cette sous-partie, nous cherchons à évaluer la précision de la simulation des interactions entre le jet du moteur et le tourbillon de sillage. Pour les besoins de la comparaison avec les résultats de la littérature, une configuration quadriréacteur a été utilisée pour obtenir les résultats de la Figure 52. Pour cela, une deuxième nacelle identique a été placée sous l'aile, à une distance de 6 m du bout d'aile (voir Figure 51). Concernant le maillage, il a été adapté en conséquence, avec les mêmes caractéristiques que celles données dans le paragraphe III.1.3 pour la résolution du jet supplémentaire.

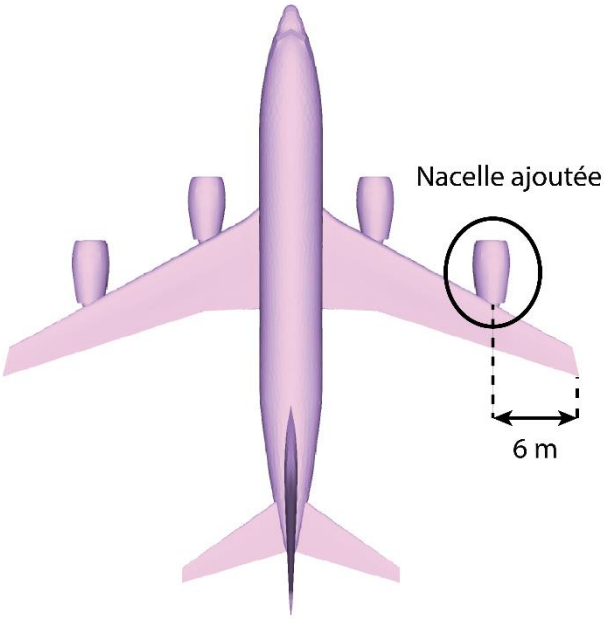

Figure 51 : Représentation de la géométrie du Boeing B737 modifiée par l'ajout d'une nacelle externe.

La Figure 52 de gauche montre le tracé des lignes de courant représentant la nappe de vorticité superposée aux lignes de courant émanant des sorties des deux moteurs, matérialisant ainsi les jets. Les directions x et y correspondent à celles de la Figure 39. Le début des lignes de courant de la nappe de vorticité correspond au bord de fuite de l'aile et l'abscisse $y = 0$ correspond au plan de symétrie de l'avion. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus par *Gerz et Ehret* [1997] montrés sur la Figure 52 de droite. Ces derniers ont réalisé une simulation numérique LES de la dynamique de sillage d'un Boeing B747 qui est un quadriréacteur de 60 m d'envergure. Les données d'entrée concernant le champ de vorticité du tourbillon de sillage étant fournies par une méthode *Vortex Filament Technique* (VFT) (voir l'article d'*Ehret and Oertel* [1998]). Les envergures des deux avions comparés étant assez différentes, les comparaisons sont effectuées, en première approximation, avec des distances adimensionnelles rapportées aux envergures respectives.

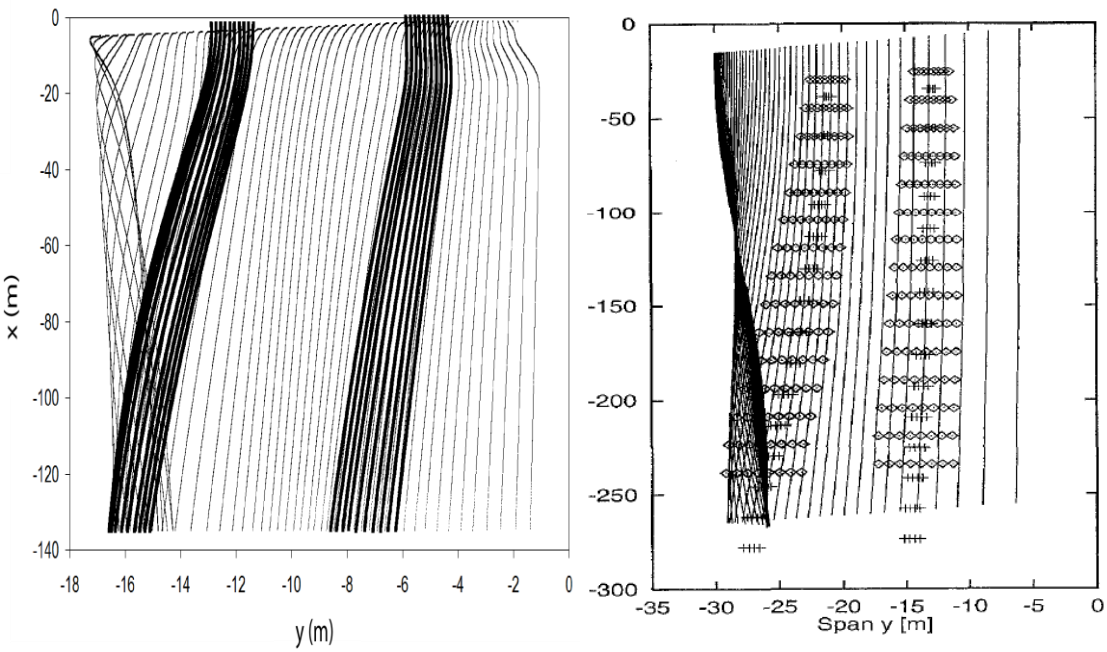

Figure 52 : (à gauche) Lignes de courant correspondant à la nappe de vorticité (traits fins) et aux jets des moteurs (traits épais) vues de dessus dans notre travail. (à droite) Les mêmes résultats pour l'étude de *Gerz et Ehret* [1997]. les symboles ◊ représentent les lignes de courant issues des sorties secondaires et les symboles + celles des sorties primaires.

La Figure 52 montre que l'évolution de la position du jet peut être décomposée en deux étapes distinctes. Jusqu'à une distance d'environ $x = 12$ m, équivalente à $1/3$ d'envergure, la position du jet est peu affectée par l'attraction du tourbillon de sillage. Ceci correspond à la phase dans le régime jet décrit dans le paragraphe I.1.2.1 dans laquelle la dilution du panache s'effectue sous le contrôle de la transition vers la turbulence du jet, qui sera analysé dans le paragraphe suivant. Puis, à partir de cette distance, les jets se trouvent progressivement déviés vers la zone du tourbillon de sillage. Le jet du moteur externe, plus proche du tourbillon, subissant comme attendu une attraction plus forte, est déplacé de manière plus importante. Ainsi, à $x = 136$ m correspondant à $x/b = 4$, le jet externe est déplacé de 3 m, soit de $y/b \approx 0{,}09$ dans la direction horizontale par rapport à sa position d'origine tandis que le jet interne n'est déplacé que de 1 m soit $y/b \approx 0{,}03$. Les mêmes phénomènes et ordres de grandeur sont observés par *Gerz et Ehret* [1997] pour le Boeing B747 (voir Figure 52 de gauche), à savoir la présence d'une première phase où les jets ne sont pas affectés par l'attraction du tourbillon de sillage et un déplacement horizontale vers les tourbillons plus en aval dans le sillage de l'avion.

En conclusion de cette analyse, notre simulation montre bien que les tourbillons de sillage générés exercent un pouvoir d'attraction sur les effluents provenant du moteur. La comparaison avec les simulations numériques de *Gerz et Ehret* [1997] montrent des résultats

similaires. Notre simulation de l'interaction entre le jet et le tourbillon de sillage nous paraît donc satisfaisante.

III.2.4 Énergie cinétique turbulente du jet

Ce paragraphe est consacré à l'analyse de l'évolution de l'énergie cinétique turbulente du jet de manière à donner une appréciation de l'initialisation des mécanismes de dispersion des effluents dans l'atmosphère. Dans ce cadre, aucune comparaison avec les données de la littérature ne sera faite ici, car une description très précise de la dispersion à des distances si faibles n'est pas le but recherché. En revanche, nous nous assurerons dans la suite que l'état de la dilution du panache entier est simulé avec suffisamment de précision jusqu'à une distance de quatre envergures derrière l'avion.

Dans le cadre d'un écoulement à haut nombre de Reynolds, les taux de mélange du jet avec l'air extérieur en sortie de moteur sont principalement pilotés par la transition vers une turbulence pleinement développée [*Dimotakis*, 2000]. Ainsi plus la turbulence du jet est développée, plus les taux de mélange seront élevés, notamment dans les couches de cisaillement à l'interface entre le jet et l'écoulement extérieur. Le niveau de turbulence peut être évalué à travers l'intensité turbulente normalisée I, définie par :

$$I = \frac{k}{V_{max}^2} \tag{III.2.1}$$

Avec V_{max}^2 la vitesse quadratique maximum correspondant à la vitesse moyenne de l'écoulement en sortie primaire. Le jet primaire a été initialisé en sortie de moteur avec une valeur $I = 4 \cdot 10^{-6}$, correspondant à une intensité turbulente faible. La Figure 53 permet de comprendre comment le niveau de turbulence évolue derrière la sortie primaire du moteur. Elle montre ainsi le tracé des profils d'intensité turbulente du jet en fonction de la coordonnée radiale à différentes distances en aval de la sortie primaire du moteur.

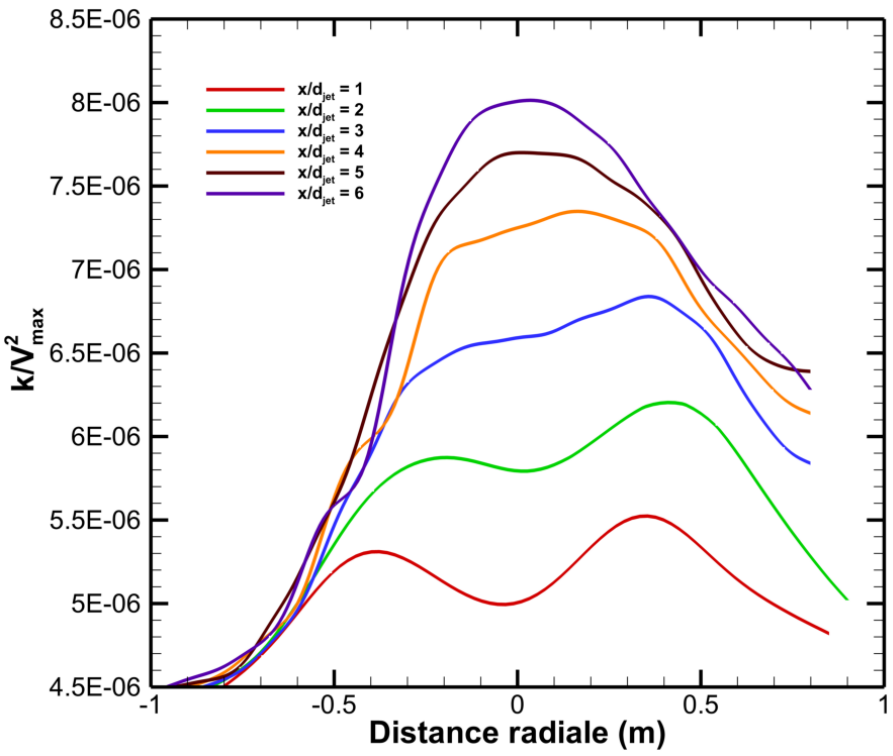

Figure 53 : Profils d'énergie cinétique turbulente normalisée (k/v_{max}^2) du jet à plusieurs distances en aval de la sortie primaire du moteur.

La distance radiale est ici la distance par rapport au centre initiale du jet dans la direction Oy. Les six courbes sont respectivement tracées dans des plans transversaux en aval du jet à des distances x/d_{jet} allant de 1 à 6 avec d_{jet} le diamètre du jet. Ainsi, en sortie de moteur, la dispersion du panache, matérialisée par une augmentation de l'énergie cinétique turbulente, est initiée aux abords du jet, c'est-à-dire dans les zones de cisaillement. L'énergie cinétique turbulente continue ensuite de se développer et atteint la valeur $k/v_{max}^2 = 8{,}5 \cdot 10^{-6}$ à $x/d_{jet} = 6$ et devient centré.

Il convient de noter l'absence de mât entre l'aile et la nacelle du moteur dans nos études. Ce mât, en constituant un obstacle à l'écoulement d'air au-dessus de la nacelle, pourrait avoir une influence sur le développement de la turbulence du jet. *Doty et al.* [2004] montrent ainsi que la présence d'un mât accroît le niveau de turbulence dans la partie haute du jet et le diminue dans la partie basse. Nous allons vérifier dans la suite de notre étude que l'absence de ce mât ne provoque pas de différence notable sur la dilution du panache, qui est le paramètre essentiel pour l'étude de la formation des traînées de condensation auquel contribuent les processus aérodynamiques. Il sera néanmoins intéressant, dans une future étude, d'inclure le mât afin

d'évaluer précisément son impact sur les profils d'énergie cinétique turbulente et sur les taux de mélange.

Dans le paragraphe suivant, nous estimons la fidélité avec laquelle cette simulation reproduit l'état de mélange global du panache aux quatre premières envergures, en comparant les dilutions obtenues avec celles disponibles dans la littérature.

III.2.5 Dilution du panache

La répartition des concentrations des espèces dans le panache et le champ de température constituent des données d'entrée essentielles pour la simulation de la formation des traînées de condensation. Ces paramètres relèvent entre autres de l'état de dilution du panache et sont le résultat de l'interaction complexe des différents phénomènes aérodynamiques dans le sillage de l'avion. Le calcul de la dilution du panache permet de caractériser de manière globale cet état de dispersion (voir paragraphe I.1.4). Ainsi, la comparaison des valeurs de dilution obtenues par le calcul avec celles disponibles dans la littérature et issues de mesures permet d'évaluer la fidélité de la représentation du panache du point de vue des paramètres précités.

La Figure 54 montre la comparaison entre d'une part les taux de dilution calculés à partir du diamètre d'une section du panache et à partir de la densité de particules au centre du jet (voir relation (I.1.7)) et d'autre part l'interpolation du taux de dilution basée sur des mesures (relation (I.1.14)) [*Schumann et al.*, 1998]. Le choix de ces grandeurs pour calculer le taux de dilution est justifié par le fait que leur évolution est exclusivement impactée par les phénomènes aérodynamiques impliqués dans l'évolution du panache. Par exemple, l'évolution du diamètre d'une section du panache est à priori sensible à un changement d'intensité du tourbillon de sillage alors qu'il ne devrait pas être affecté par les transformations chimiques dans le panache, ni par les processus microphysiques. La densité de particules N_s répond également à ces critères de par sa définition comme scalaire passif. Son équation de conservation (II.4.5) ne contient en effet aucun terme source, rendant son évolution dans le panache uniquement dépendante de l'écoulement.

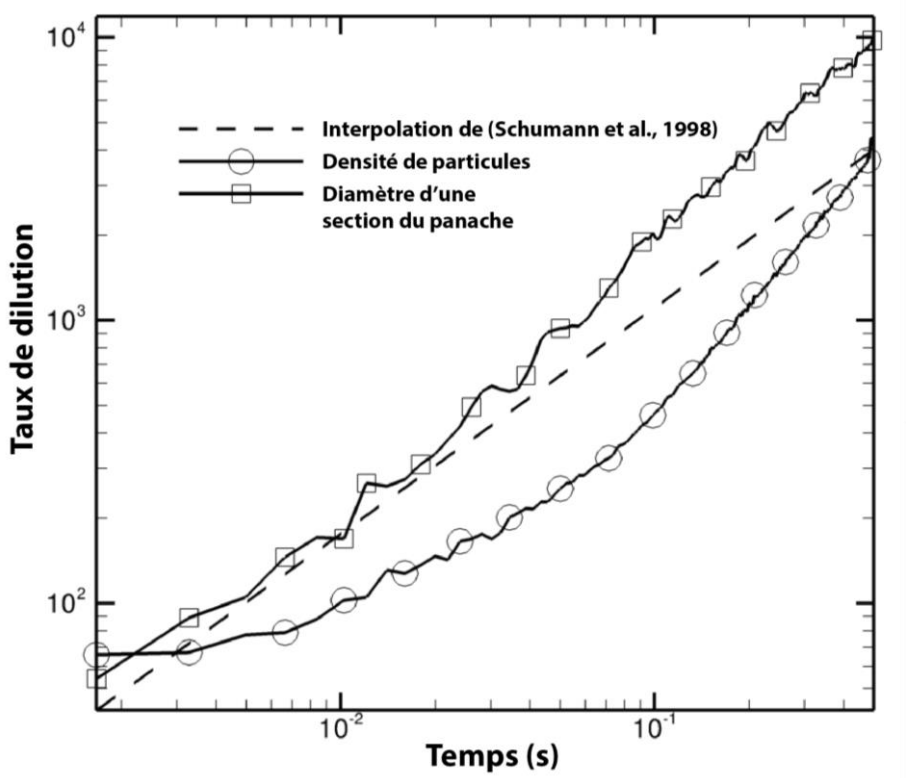

Figure 54 : Evolution du taux de dilution calculé à partir du diamètre du panache et de la densité de particules en fonction de l'âge du panache. Le courbe en traitillés représente la dilution analytique interpolée par *Schumann et al.* [1998].

La Figure 54 montre ainsi une bonne concordance globale entre le taux de dilution basé sur le diamètre du panache et l'interpolation de *Schumann et al.* [1998], notamment dans les premiers instants du panache. Toutes les valeurs relevées sont ainsi comprises dans l'écart admissible donné par *Schumann et al.* [1998] égal à un facteur 3 entre les valeurs calculées et celles données par l'interpolation. On remarque toutefois qu'à partir d'un temps de vie du panache d'environ $5 \cdot 10^{-2}$ s, la pente du ratio de dilution basé sur le diamètre change et que l'écart avec l'interpolation devient croissant avec l'âge du panache. Nous rappelons que plus le taux de dilution est élevé, plus le panache est dispersé dans l'air ambiant. Cela signifie donc que si l'expansion du panache avait été simulée sur un temps plus important, son état de dispersion aurait vraisemblablement été surestimé. Ceci pourrait être dû à une diffusion trop importante du tourbillon de sillage simulé, qui aurait tendance à diminuer son intensité et son aptitude à « piéger » le panache.

Quant à la dilution calculée à partir de la densité de particules, elle admet également des valeurs comprises dans l'erreur admissible donné par *Schumann et al.* [1998], mais ces valeurs sont inférieures cette fois-ci aux valeurs de l'interpolation. Ceci est en fait un résultat attendu

et confirme les mesures de *Schumann et al.* [1998]. En effet, les auteurs montrent que le taux de dilution de la densité de particule locale le long du centre du jet est bien inférieur au taux de dilution de la densité de particule moyenne de tout le panache. Autrement dit, les particules au centre du panache sont moins dispersées que celles se trouvant à la périphérie.

En conclusion, les différentes analyses effectuées dans cette partie montrent une précision de la simulation satisfaisante du point de vue de l'aérodynamique, à la lumière des besoins de cette étude, à savoir pour la position et la dispersion du panache derrière l'avion. Les caractéristiques du tourbillon de sillage simulé, relatif à son intensité et son expansion spatial et de l'interaction jet/tourbillon sont ainsi concordantes avec les résultats de la littérature. Nous avons montré, par la comparaison des valeurs de dilution du panache, que l'état de dilution était suffisamment bien prédit dans les quatre premières envergures derrière l'avion. Nous avons toutefois noté des écarts, certes encore admissibles, mais en augmentation à mesure que l'on s'éloigne de l'avion. En prévision d'un futur travail dans lequel le domaine de calcul serait agrandi, il sera nécessaire de s'assurer que l'écart constaté ici reste bien dans l'écart admissible d'un facteur 3 entre la dilution calculée et l'interpolation de *Schumann et al.* [1998].

III.3 Évaluation des transformations chimiques au sein du panache

Les concentrations des espèces chimiques dans le panache évoluent sous l'influence de l'écoulement, mais également des transformations chimiques qu'elles subissent. Ainsi, la simulation de ces transformations selon un schéma de cinétique chimique adéquat implanté dans le logiciel CEDRE doit, au même titre que la simulation des processus aérodynamiques, être validée. Les paragraphes qui suivent présentent des simulations numériques utilisant le schéma réactionnel présenté dans le paragraphe II.3.1. Les simulations sont, dans un premier temps, réalisées dans un domaine de calcul simplifié de manière à concentrer l'effort sur l'aspect cinétique. Les transformations chimiques sont ensuite évaluées dans le cadre d'un calcul avec un avion complet. Les résultats des simulations numériques sont comparés avec ceux obtenus par *Kärcher et al.* [1996a]. En effet, ces derniers, utilisant le même schéma réactionnel, ont réalisé des simulations numériques en utilisant un modèle 0D, c'est-à-dire sans simuler l'écoulement, pour décrire les transformations chimiques se produisant dans un panache paramétré d'un Boeing 747 en vol de croisière. Nous avons donc réalisé une simulation tridimensionnelle utilisant les mêmes paramètres d'entrées concernant les caractéristiques des effluents et les paramètres environnementaux, afin d'évaluer la fidélité avec laquelle le code CEDRE est capable d'assurer le suivi des espèces chimiques dans le panache.

Dans les sous-parties qui suivent, nous commençons par présenter la configuration simplifiée du calcul. Puis nous comparons les résultats obtenus avec la littérature en nous intéressant notamment aux concentrations d'espèces soufrées, jouant un rôle prépondérant dans l'activation des particules de suies et la formation d'aérosols. Enfin, nous nous assurons de la bonne intégration de la simulation des transformations chimiques dans la simulation de l'écoulement en champ proche de l'avion. Enfin, nous présenterons le même type de résultats dans le cas des simulations avec un avion complet.

III.3.1 Domaine de calcul simplifié

III.3.1.1 Géométrie

La géométrie de ce domaine de calcul a été conçue de manière à reproduire en 3D de manière simple les caractéristiques de la simulation 0D de *Kärcher et al.* [1996a]. Nous avons représenté les sorties primaire et secondaire du moteur CF6 équipant le Boeing B747, par deux carrés concentriques de surfaces équivalentes (voir Figure 55). Cela vise principalement à

reproduire des débits massiques identiques des effluents avec des vitesses de sortie identiques. Les sorties des moteurs sont placées à l'entrée d'un domaine de calcul de longueur égale à 2000 mètres, dans la direction longitudinale, sachant que *Kärcher et al.* [1996a] simulent l'évolution des champs de concentration des espèces jusqu'à une distance de 1000 mètres derrière les sorties du moteur. Quant aux parois latérales du domaine, elles ont été placées à une distance de 50 mètres du centre du jet afin d'éviter que les effets de bords n'affectent les concentrations d'espèces dans le panache en expansion.

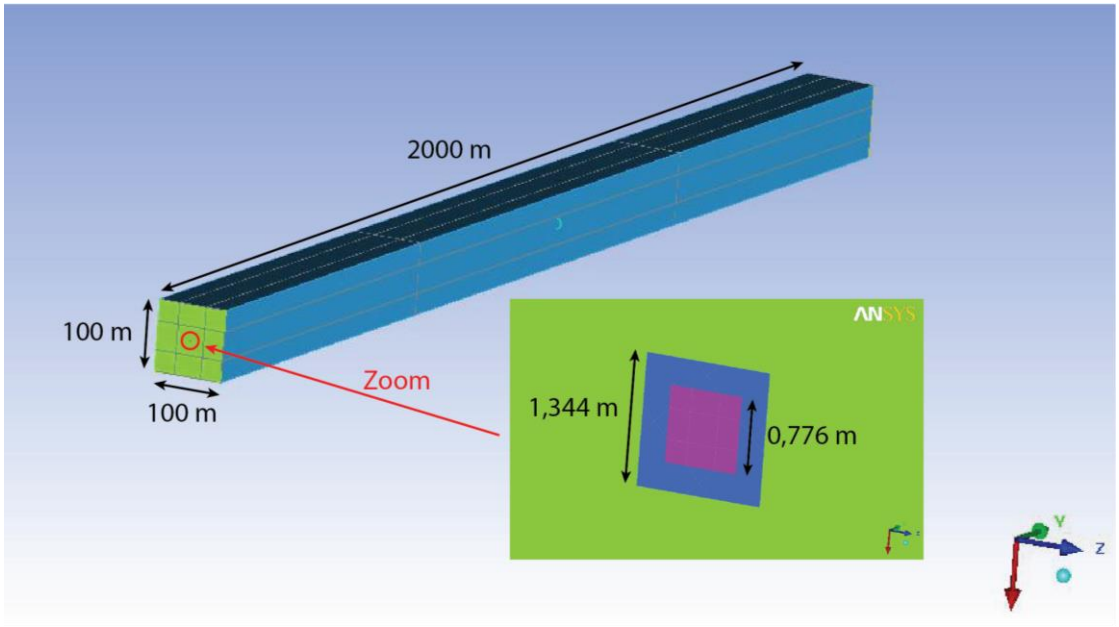

Figure 55 : Schéma descriptif de la géométrie utilisée pour l'étude des transformations chimiques des espèces au sein du panache.

III.3.1.2 Maillage

L'un des objectifs de cette étude consiste à déterminer les tailles caractéristiques de la discrétisation spatiale permettant de reproduire avec une précision suffisante les concentrations des espèces chimiques au sein du panache. En effet, des cellules de dimensions trop grandes entraîneraient par exemple une diffusion numérique qui altèrerait le champ de concentration des espèces. Les dimensions maximales des cellules du maillage que nous dégageons de cette étude, garantissant une précision suffisante des concentrations simulées, seront prises en compte pour l'élaboration du maillage final permettant d'étudier la formation d'une traînée de condensation.

Une étude de sensibilité sur la taille des mailles a donc été réalisée, mais nous ne présentons dans ce paragraphe que le maillage final retenu. Le lecteur désirant connaître

davantage de détails sur cette étude pourra consulter les rapports de *Ghedhaifi et Vancassel* [2011] et de *Khou et Ghedhaifi* [2013].

La Figure 56 montre une coupe longitudinale (dans le plan Oyz) du maillage passant par le centre du jet.

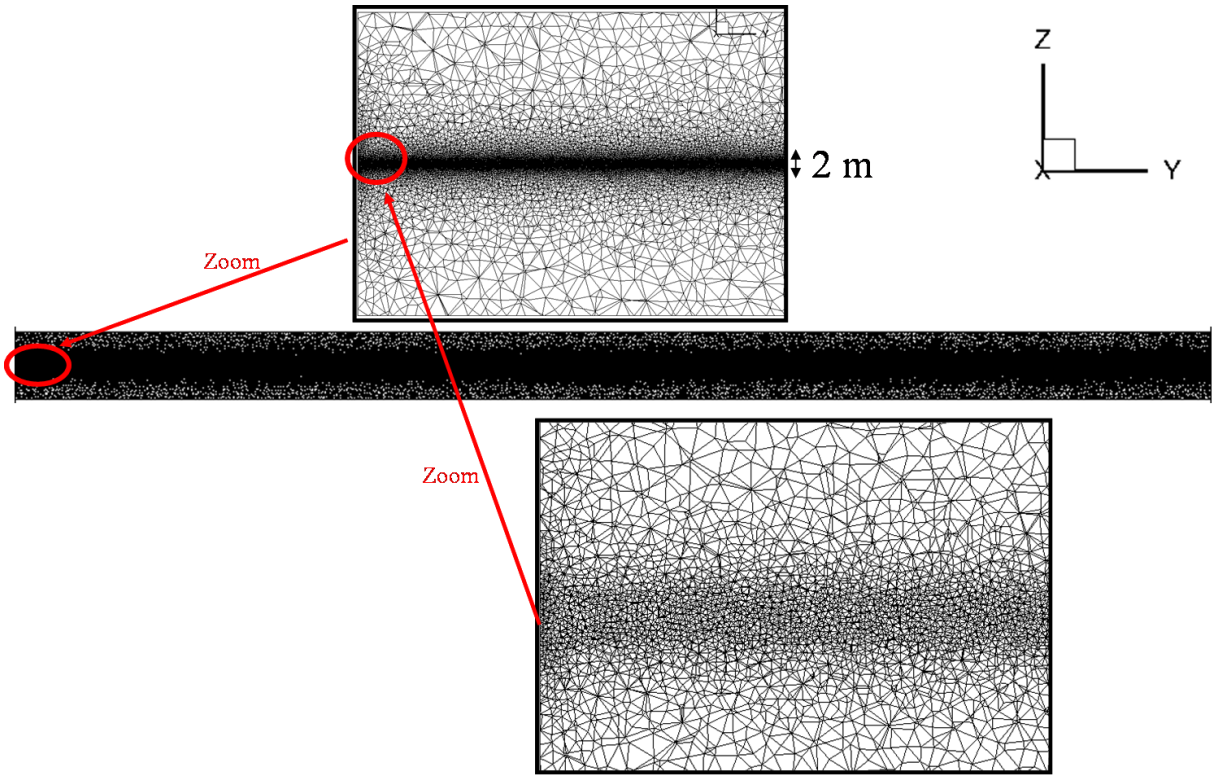

Figure 56 : Représentation d'une coupe longitudinale du maillage volumique.

Le maillage est composé de tétraèdres pour le maillage volumique et de triangles pour le maillage surfacique aux limites. Il est raffiné le long de l'axe central du parallélépipède correspondant au centre du jet, avec des cellules de taille caractéristique égale à 0,3 m. Le gradient de taille des mailles est alors orienté vers les bords latéraux du parallélépipède avec un ratio 1,2 (voir paragraphe III.1.3). Le nombre de cellules s'élève à environ 5,5 millions.

III.3.1.3 Conditions initiales et aux limites

Afin de pouvoir comparer les résultats de la simulation avec ceux de *Kärcher et al.* [1996a], les compositions des espèces chimiques de l'air ambiant et des effluents en sorties du moteur ont été fixées à l'identique. Les fractions molaires des espèces en sortie primaire du moteur et pour l'air ambiant sont ainsi décrites dans le Tableau 4. Nous portons une attention particulière à la fraction initiale de SO_2 en sortie primaire du moteur, responsable de la présence

de produits soufrés dans le panache. La fraction molaire égale $5{,}8 \cdot 10^{-6}$ correspond à une teneur en soufre de 350 ppm. Le gaz en sortie secondaire du moteur étant de l'air chaud, sa composition correspond à celle de l'air ambiant.

Tableau 4 : Composition des espèces chimiques en sortie primaire d'un moteur CF6 (équipant un B747) et de l'air ambiant. Les valeurs du tableau sont données en fraction molaire.

	Sortie primaire moteur	Air ambiant
O	0	$1{,}1.10^{-14}$
O_2	0,135	0,21
O_3	0	$3{,}0.10^{-7}$
H	0	0
H_2	0	$9{,}0.10^{-7}$
OH	$6{,}2.10^{-6}$	$2{,}8.10^{-13}$
HO_2	0	$3{,}6.10^{-12}$
H_2O	$3{,}6.10^{-2}$	$8{,}8.10^{-5}$
H_2O_2	0	$2{,}4.10^{-11}$
NO	$1{,}3.10^{-4}$	$8{,}1.10^{-11}$
NO_2	$6{,}9.10^{-6}$	$6{,}5.10^{-11}$
NO_3	0	$8{,}9.10^{-15}$
N_2O_5	0	$1{,}0.10^{-11}$
HNO_2	0	$3{,}4.10^{-13}$
HNO_3	0	$2{,}0.10^{-9}$
CO	$9{,}4.10^{-5}$	$4{,}0.10^{-8}$
CO_2	$3{,}8.10^{-2}$	$3{,}3.10^{-4}$
SO	0	0
SO_2	$5{,}8.10^{-6}$	$9{,}1.10^{-12}$
SO_3	0	0
HSO_3	0	0
H_2SO_4	0	0

Les produits de combustion sont éjectés de la sortie primaire à la vitesse de $475\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ à une température de 547,3 K. L'air en sortie secondaire possède une vitesse de $316{,}3\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ et une température de 253,4 K. L'air atmosphérique est injecté dans le domaine de calcul à une vitesse de $237\ \mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ et à une température de 219,2 K, simulant un vol de croisière. La pression régnant dans le domaine de calcul est fixée à 23920 Pa, correspondant à une altitude de 11 km.

III.3.2 Comparaison des concentrations des espèces

La Figure 57 montre l'évolution des fractions molaires obtenues le long de l'axe central du jet pour les SOx, les NOx et les HOx. Les résultats sont comparés avec ceux obtenus par la simulation 0D de *Kärcher et al.* [1996a].

La comparaison des fractions molaires montre des tendances très similaires pour la majorité des espèces. Nous nous intéressons plus particulièrement ici à l'évolution des fractions molaires des espèces soufrées. Le soufre contenu dans le carburant avec une teneur de 350 ppm est supposé entièrement transformé en SO_2 par la combustion. Ce dernier est libéré du moteur avec une fraction molaire de $5{,}8 \cdot 10^{-6}$ et est immédiatement oxydé par OH par la réaction (R59), produisant le radical HSO_3. Ce dernier subit alors une oxydation par O_2 à travers la réaction (R40), entraînant la formation de SO_3. La fraction molaire de SO_3 atteint son maximum égal à $8 \cdot 10^{-7}$ à $x \approx 1$ m lorsque les quantités de OH disponibles commencent à diminuer puis chute en raison du processus de dispersion du panache. H_2SO_4 étant formée par la réaction (R39) entre SO_3 et H_2O, l'évolution de sa fraction molaire suit la même tendance que celle de SO_3 mais avec un léger retard. Les réactions s'arrêtent lorsque l'équilibre est atteint, et les fractions molaires diminuent au sein du panache en raison de la dilution. La fraction molaire de SO_2 atteint $3 \cdot 10^{-8}$ à $x = 1000$ m. *Kärcher et al.* [1996a] obtiennent les mêmes tendances décrites ci-dessus et des valeurs similaires, validant ainsi notre simulation par rapport au leur.

Quelques différences notables entre les résultats calculés par CEDRE et ceux donnés par *Kärcher et al.* [1996a] sont néanmoins relevées, notamment dans les premiers instants du panache. Par exemple, à $x = 10^{-2}$ m, on note la différence maximale relevée entre la fraction molaire de SO_3 calculée par CEDRE égale à $2 \cdot 10^{-8}$ et celle donnée par *Kärcher et al.* [1996a] égale à $2 \cdot 10^{-10}$. L'importance de cette différence est à relativiser car d'une part les écarts entre les concentrations de SO_3 diminuent par la suite rapidement et d'autre part la valeur de la concentration de SO_3 à une distance aussi faible n'est pas pertinente dans le cadre de la modélisation de la formation d'une traînée de condensation comme nous le vérifierons par la suite dans l'étude consacrée à l'activation des suies.

On note de manière générale des fractions molaires plus élevées dans les premiers instants (jusqu'à $x = 1$ m) pour les espèces produites dans les simulations avec le code CEDRE. Ces différences en sortie de moteur pourraient être expliquées par des écarts entre les taux de dilution dépendant fortement de la turbulence. Cette dernière étant simulée par le code CEDRE alors qu'elle est paramétrée dans le modèle de *Kärcher et al.* [1996a].

Concernant les espèces azotées et hydroxylées, bien que n'intervenant pas directement dans les processus microphysiques, leurs prises en compte se sont révélées indispensables à la bonne prédiction des fractions molaires des espèces soufrées au sein du panache. Ces espèces

agissent notamment à travers les effets de compétition pour les espèces oxydantes disponibles (par exemple le radical OH). On note également quelques écarts entre les valeurs de fraction molaires calculées avec CEDRE et celles données par *Kärcher et al.* [1996a]. Nous vérifierons dans la suite que leur impact demeure négligeable sur les processus microphysiques.

Finalement, les résultats des simulations portant sur les transformations chimiques dans un panache en expansion montrent une bonne concordance avec les résultats de la littérature.

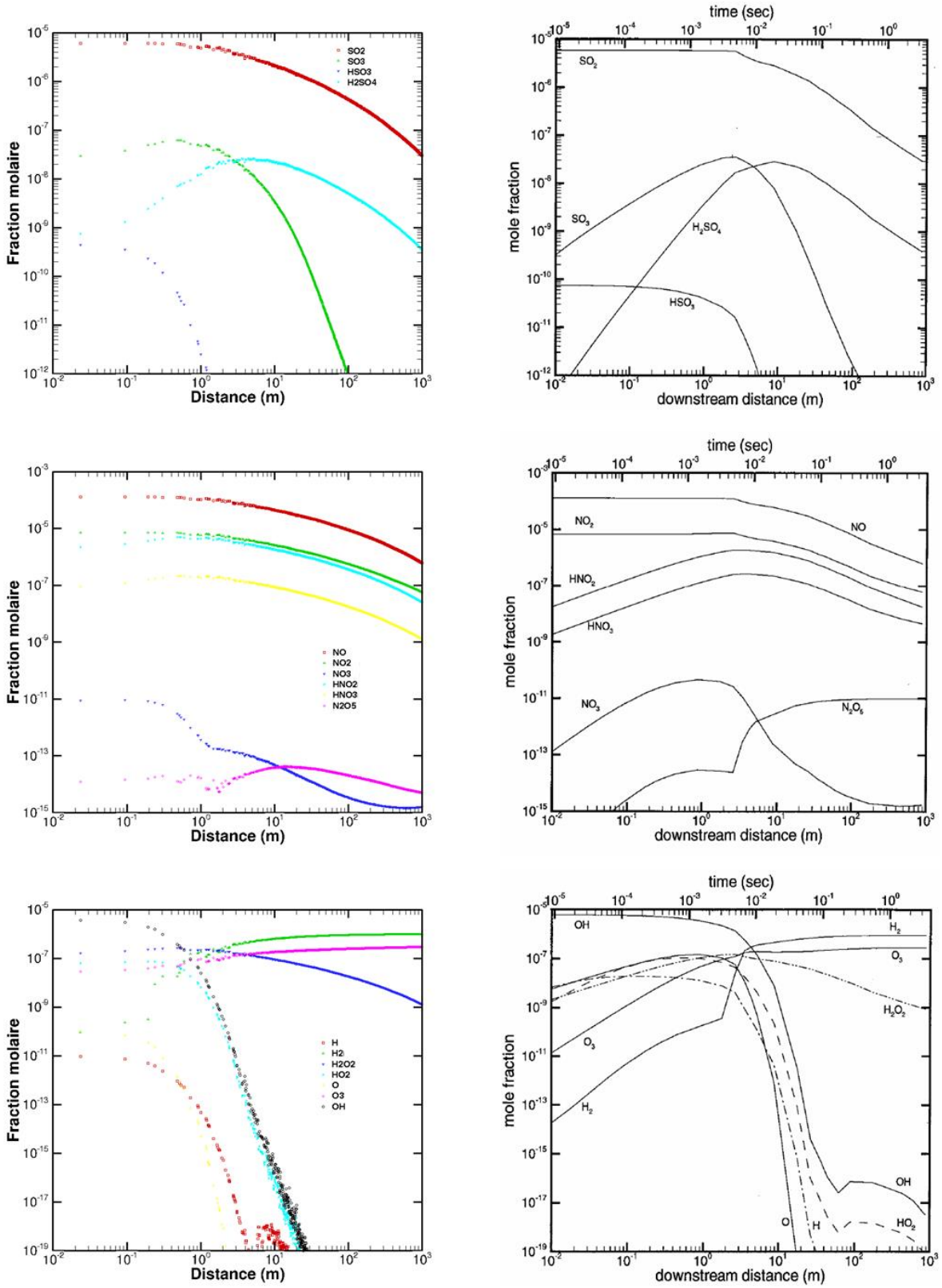

Figure 57 : (À gauche) Tracé des évolutions sur l'axe central du jet des fractions molaires des SOx, NOx et HOx en fonction de la distance en aval des sorties de moteur, obtenues par ce travail. (À droite) Résultats équivalents obtenus par *Kärcher et al.* [1996a].

L'étude de sensibilité ayant permis d'obtenir ces résultats a montré que des discrétisations spatiales et temporelles trop grossières conduisaient à des résultats erronés. En effet, des cellules trop larges font apparaître de la diffusion numérique, induisant des résultats peu précis. Quant à la discrétisation temporelle, un pas de temps trop important empêche la résolution des processus chimiques à faibles temps caractéristiques et aboutit à des vitesses de réactions inexactes. Ainsi, les résultats finaux présentés dans ce paragraphe ont été obtenus avec une discrétisation spatiale de $0{,}3\ \mathrm{m}$ et une discrétisation temporelle de $0{,}2\ \mathrm{s}$. Ces valeurs constituent des références qu'il sera nécessaire de prendre en compte lorsque ce schéma cinétique sera intégré aux modèles pour la simulation numérique de la formation des traînées de condensation.

III.3.3 Intégration d'une géométrie réaliste d'avion

Nous présentons dans ce paragraphe la simulation des transformations chimiques, intégrée à la simulation de l'écoulement dans le domaine de calcul présenté dans le paragraphe I.1. Lors de la conception du maillage, les contraintes de discrétisation spatio-temporelle mis en évidence par l'étude dans le domaine simplifié présenté dans le paragraphe précédent ont été prises en compte. Ainsi, dans la zone de développement du jet, la taille caractéristique des cellules est de $0{,}2\ \mathrm{m}$, afin de garantir une discrétisation spatiale suffisamment fine pour assurer une résolution précise des transformations chimiques. Concernant les conditions initiales et aux limites, elles ont été adaptés pour le moteur CFM-56 équipant le Boeing B737 que nous utilisons ici. Les températures, les vitesses et les pressions sont identiques à celles présentées dans le paragraphe III.2.1. Quant à la composition des espèces aux différentes entrées, elle est résumée dans le Tableau 5. Elle correspond aux valeurs retenues par *Garnier et al.* [1997a] pour un moteur CFM-56. Le but de cette simulation est de vérifier que l'on obtient des résultats similaires à ceux présentés dans le paragraphe précédent en termes de concentrations des espèces chimique au sein du panache.

Tableau 5 : Composition des espèces chimiques en sortie primaire du moteur CFM-56 et de l'air ambiant [*Garnier et al.*, 1997a]. Les valeurs du tableau sont données en fraction molaire.

	Sortie primaire moteur	Air ambiant
O	0	0
O_2	0,135	0,21
O_3	0	$3{,}0.10^{-7}$
H	0	0
H_2	0	$9{,}0.10^{-7}$
OH	$1{,}0 \cdot 10^{-5}$	$2{,}8.10^{-13}$

	Sortie primaire moteur	Air ambiant
HO_2	0	$3{,}6.10^{-12}$
H_2O	$3{,}5 \cdot 10^{-2}$	$8{,}8.10^{-5}$
H_2O_2	0	$2{,}4.10^{-11}$
NO	$6{,}6 \cdot 10^{-5}$	$8{,}1.10^{-11}$
NO_2	$6{,}6 \cdot 10^{-6}$	$6{,}5.10^{-11}$
NO_3	0	$8{,}9.10^{-15}$
N_2O_5	0	$1{,}0.10^{-11}$
HNO_2	0	$3{,}4.10^{-13}$
HNO_3	0	$2{,}0.10^{-9}$
CO	$2{,}96 \cdot 10^{-5}$	$4{,}0.10^{-8}$
CO_2	$3{,}14 \cdot 10^{-2}$	$3{,}3.10^{-4}$
SO	0	0
SO_2	$5{,}8 \cdot 10^{-6}$	$9{,}1.10^{-12}$
SO_3	0	0
HSO_3	0	0
H_2SO_4	0	0

La Figure 58 illustre le résultat de la simulation des transformations chimiques dans le panache en montrant une coupe longitudinale du jet à partir des sorties du moteur. Le panache entier, correspondant à l'isovolume $x_{\mathrm{H_2SO_4}} > 0$, est représenté en blanc dans la partie symétrique du domaine de calcul. La coupe longitudinale est coloriée par le champ de fraction molaire de H_2SO_4. Ce dernier est un produit secondaire formé par l'oxydation du SO_2 et joue un rôle important dans les processus microphysiques, et contribue notamment à l'activation des suies. En parallèle, la Figure 59 montre l'évolution, en fonction de la distance par rapport aux sorties du moteur, des valeurs des fractions molaires des espèces soufrées le long de que nous appellerons à partir d'ici le centre du jet. Ce dernier correspond à la ligne de courant issue du centre de la sortie primaire du jet.

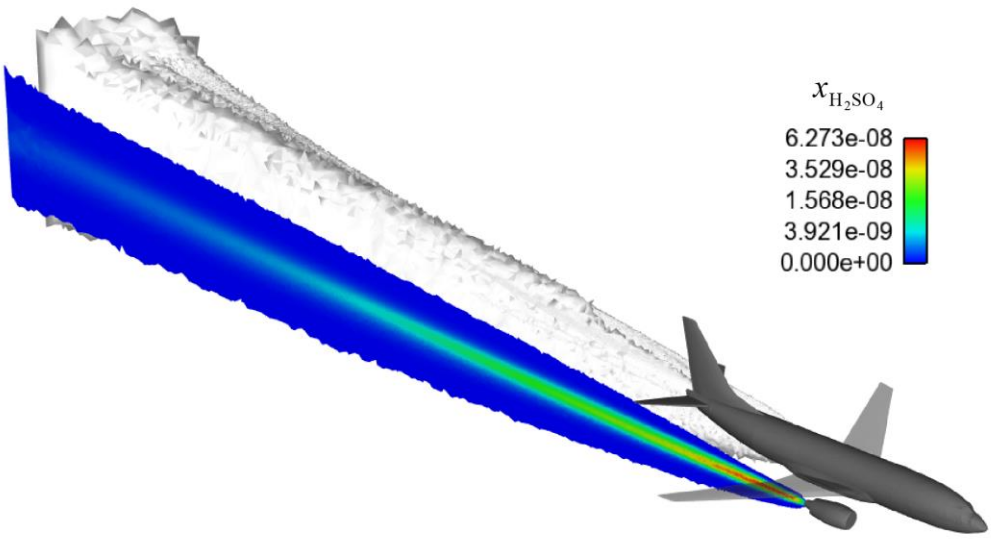

Figure 58 : Champ de fraction molaire de H_2SO_4 dans une coupe longitudinale passant par le centre du jet. Représentation du panache de H_2SO_4 en blanc par l'isovolume $x_{H_2SO_4} > 0$.

La fraction molaire de H_2SO_4 atteint sa valeur maximale $x_{H_2SO_4} = 6{,}3 \cdot 10^{-8}$ à environ 5 m en aval de la sortie primaire du moteur, puis chute en raison de la dilution du panache. Les molécules de H_2SO_4 ne sont pas consommées par transformations chimiques, les calculs ne montrant pas de vitesse de réaction négative pour l'acide sulfurique dans le panache. Le champ de concentration de H_2SO_4 montré sur la Figure 58 permet de mettre en évidence les zones du panache potentiellement impliquées dans les phénomènes d'activation des suies.

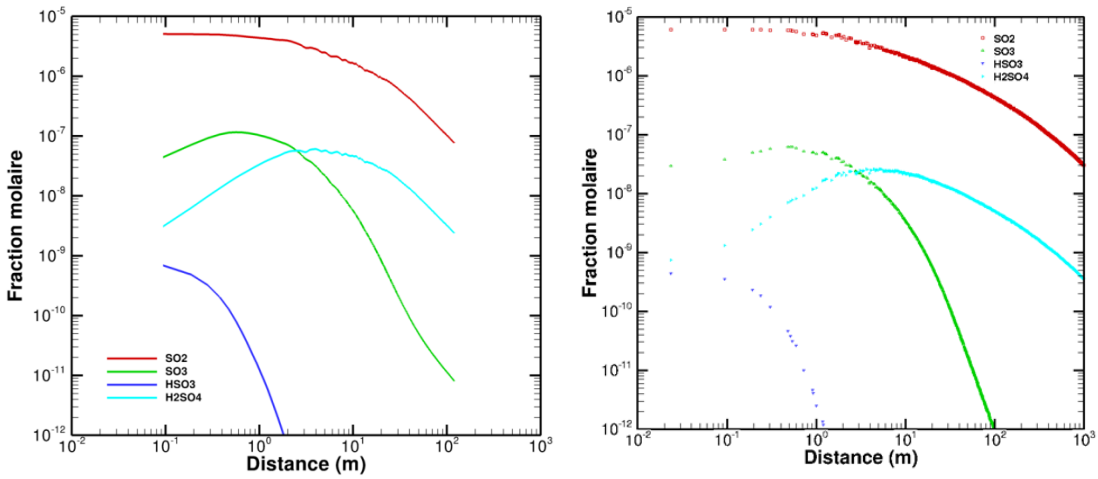

Figure 59 : (À gauche) Evolution des fractions molaires des espèces soufrées dans le sillage d'un Boeing B737 équipé d'un CFM-56. (À droite) Résultats équivalents dans le domaine de calcul simplifié avec un CF6.

La comparaison des courbes de la Figure 59, entre les résultats correspondant au B737 et ceux correspondant au B747 montre des tendances semblables, ce qui est attendu. Quelques différences en termes de valeurs sont cependant relevées. Par exemple, l'analyse des résultats obtenus dans la simulation du panache incluant la géométrie du B737 révèle généralement des fractions molaires plus basses pour les espèces consommées comme le SO_2 et plus élevées pour les espèces produites comme le H_2SO_4. En effet, les taux de réaction dans le cas incluant l'avion sont généralement plus élevés. Ceci pourrait être expliqué par la température plus élevée des effluents à la sortie primaire du moteur, de 580 K au lieu de 547 K, augmentant les coefficients de vitesses des réactions modélisées par une loi d'Arrhenius. Dans l'ensemble, l'étude montre des résultats cohérents avec ceux observés dans la littérature.

En résumé, la simulation des transformations chimiques dans un cas simplifié comme dans un cas plus complexe et la comparaison des résultats avec ceux de la littérature montre des tendances et des valeurs de concentration des espèces satisfaisantes. Par ailleurs, la vérification du code CEDRE pour la simulation d'un écoulement aérodynamique autour d'un avion d'une part et pour la simulation des transformations chimiques au sein d'un panache d'avion d'autre part, rend alors possible le passage à l'étape suivante. Cette dernière consistant en la mise en œuvre des modèles microphysiques précédemment implanté dans le code pour la simulation de la formation des traînées de condensation.

III.4 Évaluation des processus microphysiques

Dans les parties précédentes, nous avons présenté les études ayant permis de valider le code CEDRE pour nos applications, avant l'intégration des modèles microphysiques aux simulations. Ces validations étaient nécessaires car elles assurent que les données d'entrées utilisées par les modèles microphysiques, comme les concentrations de particules de suie ou de vapeur d'eau sont prédites de manières suffisamment précises.

Dans cette partie, nous nous proposons d'intégrer les modèles microphysiques dans la simulation. Il s'agit donc de réaliser une simulation couplant les processus microphysiques, les réactions chimiques, et l'écoulement aérodynamique tridimensionnel afin d'étudier la formation d'une traînée de condensation dans le champ proche d'un avion et d'évaluer la consistance des grandeurs clés la caractérisant.

III.4.1 Configuration de calcul

Pour cette étude, nous travaillons dans le domaine de calcul décrit dans la partie I.1. Nous avons déjà réalisé, en utilisant ce domaine de calcul, une simulation numérique faisant intervenir de manière couplée les processus aérodynamiques et les transformations chimiques. Afin d'y ajouter l'interaction avec les processus microphysiques, nous choisissons des conditions initiales et aux limites favorables à la formation de traînée de condensation. Les conditions aux limites pour les paramètres météorologiques de l'atmosphère ont été déterminées de manière à satisfaire le critère de Schmidt-Appleman révisé [*Schumann,* 1996] (voir Annexe 2). En plus des conditions ambiantes, ce dernier est dépendant de l'efficacité de propulsion et de l'indice d'émission de vapeur d'eau, qui est une caractéristique des effluents rejetés dans l'atmosphère.

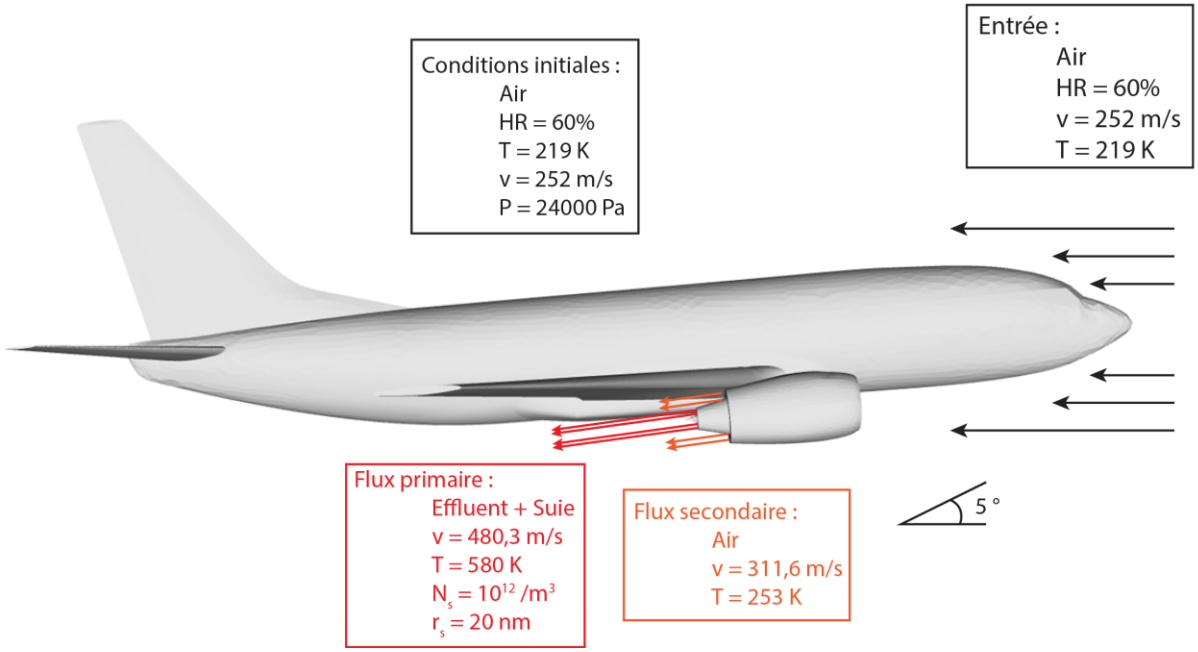

Figure 60 : Conditions initiales et aux limites pour la simulation de la partie III.4.

Tableau 6 : Composition des gaz en sortie primaire du moteur et pour l'air ambiant pour la simulation de la partie III.4, extraite de *Garnier et al.* [1997a]. Les valeurs du tableau correspondent à des fractions massiques.

	Sortie primaire moteur	Air ambiant
O	0	0
O_2	$1{,}49 \cdot 10^{-1}$	$2{,}32 \cdot 10^{-1}$
O_3	0	$4{,}97 \cdot 10^{-7}$
H	0	0
H_2	0	$6{,}26 \cdot 10^{-8}$
OH	$5{,}93 \cdot 10^{-6}$	0
HO_2	0	0
H_2O	$2{,}2 \cdot 10^{-2}$	$6{,}08 \cdot 10^{-5}$
H_2O_2	0	0
NO	$6{,}9 \cdot 10^{-5}$	0
NO_2	$1{,}06 \cdot 10^{-5}$	0
NO_3	0	0
N_2O_5	0	0
HNO_2	0	0
HNO_3	0	0
CO	$2{,}90 \cdot 10^{-5}$	$3{,}87 \cdot 10^{-8}$
CO_2	$4{,}82 \cdot 10^{-2}$	$5{,}01 \cdot 10^{-4}$
SO	0	0
SO_2	$1{,}15 \cdot 10^{-5}$	0
SO_3	0	0
HSO_3	0	0
H_2SO_4	0	0

Les conditions initiales et aux limites sont présentées sur la Figure 60 et le Tableau 6. La pression ambiante et la température ambiante sont fixées aux valeurs données par les propriétés standards de l'atmosphère à 11 km d'altitude, soit $P = 24000$ Pa et $T = 219$ K, respectivement. À partir des données du moteur et des caractéristiques initiales des effluents, nous calculons l'efficacité de propulsion et l'indice d'émission de vapeur d'eau, nécessaires au calcul du critère de Schmidt-Appleman révisé (voir Annexe 1). On calcule alors une poussée fournie par le moteur de $F_a = 13{,}7$ kN et une consommation de carburant de $\dot{m}_{car} = 0{,}33\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{s}^{-1}$. L'efficacité de propulsion du moteur peut alors être évaluée et donne $\eta = 0{,}24$. Concernant l'émission de vapeur d'eau, à partir de la composition des effluents tirée de l'article de *Garnier et al.* [1997a], nous calculons $IE_{\mathrm{H_2O}} = 1{,}34\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ pour les caractéristiques du moteur étudié.

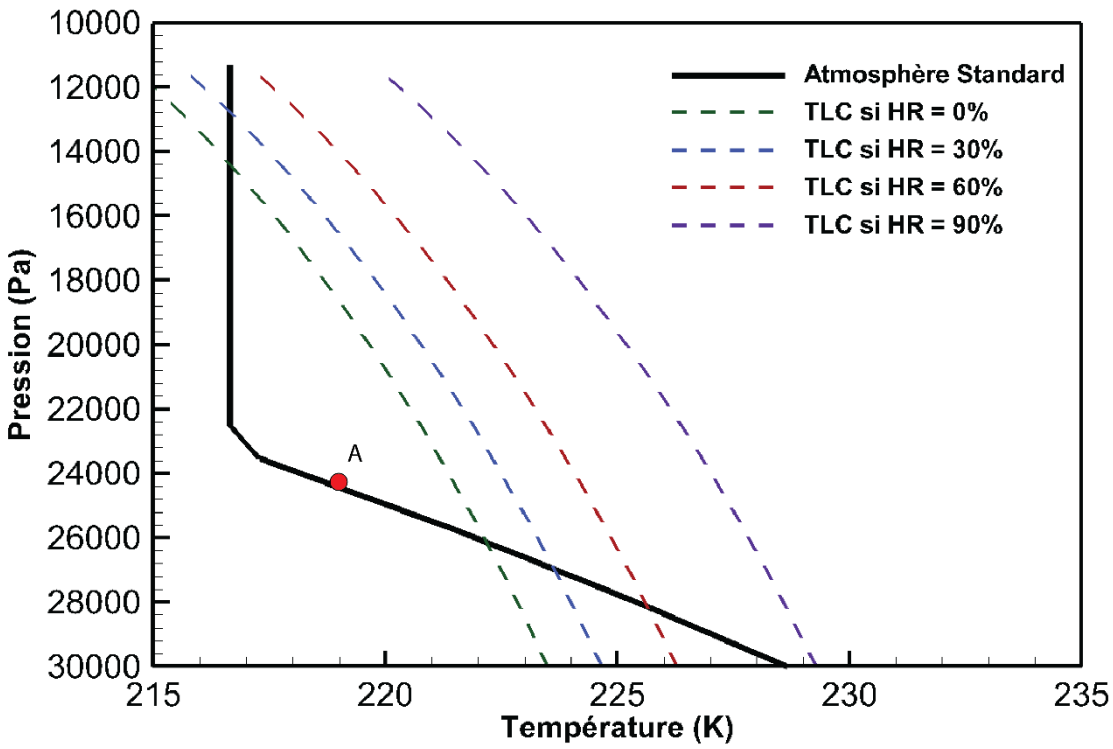

Figure 61 : Diagramme de Schmidt-Appleman révisé pour une efficacité de propulsion $\eta = 0{,}24$ et un indice d'émission de vapeur d'eau $IE_{\mathrm{H_2O}} = 1{,}34\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$. TLC représente la température seuil sous laquelle le critère de Schmidt-Appleman révisé prévoit la formation d'une traînée de condensation.

Le diagramme de Schmidt-Appleman révisé [*Schumann*, 1996] a été tracé sur la Figure 61 pour le moteur étudié et l'indice d'émission de vapeur d'eau en sortie primaire de cette étude. Le point A représente la température et la pression ambiante choisie pour cette étude. Les courbes en pointillés représentent, selon l'humidité relative ambiante, les températures seuils

de formation de traînée de condensation en fonction de la pression ambiante. Par conséquent, le critère de Schmidt-Appleman révisé [*Schumann*, 1996] indique que, dans le cadre de notre étude, la traînée de condensation se forme pour toutes les valeurs d'humidité relative ambiante. Nous avons choisi d'étudier une humidité relative ambiante par rapport à la phase liquide de 60% afin de se trouver dans un environnement thermodynamique favorable et réaliste pour la formation de traînée de condensation.

Pour information, l'obtention des résultats de cette simulation a nécessité environ 130000 heures de calculs réparties sur 960 cœurs issus de processeurs cadencés à 2,7 GHz.

III.4.2 Saturation en eau du panache

La saturation en eau par rapport à la phase liquide s_{liq} ou solide s_{sol} est définie par le rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante liquide ou solide, au-dessus d'une surface plane, soit respectivement :

$$s_{liq} = \frac{p_v}{p_{liq}^{sat}(T)}$$
$$s_{sol} = \frac{p_v}{p_{sol}^{sat}(T)} \qquad \text{(III.4.1)}$$

Il convient de noter que les termes de saturation en eau et d'humidité relative peuvent être utilisés indifféremment, sachant qu'en général, l'humidité relative s'exprime en pourcentage, soit la saturation multipliée par cent. Dans un souci de clarté de lecture, nous parlerons dans cette étude d'humidité relative pour désigner la propriété de l'air ambiant, autrement dit correspondant aux conditions météorologiques et de saturation pour désigner la propriété du panache, résultant de la dispersion des effluents dans l'air ambiant.

La Figure 62 montre les zones de sursaturation par rapport à la phase liquide calculées autour et dans le sillage de l'avion par l'isovolume $s_{liq} \geq 1$. L'étude des zones de sursaturation du panache est importante car celles-ci révèlent les positions de l'espace dans lesquelles les traînées de condensation peuvent potentiellement se former, d'un point de vue thermodynamique.

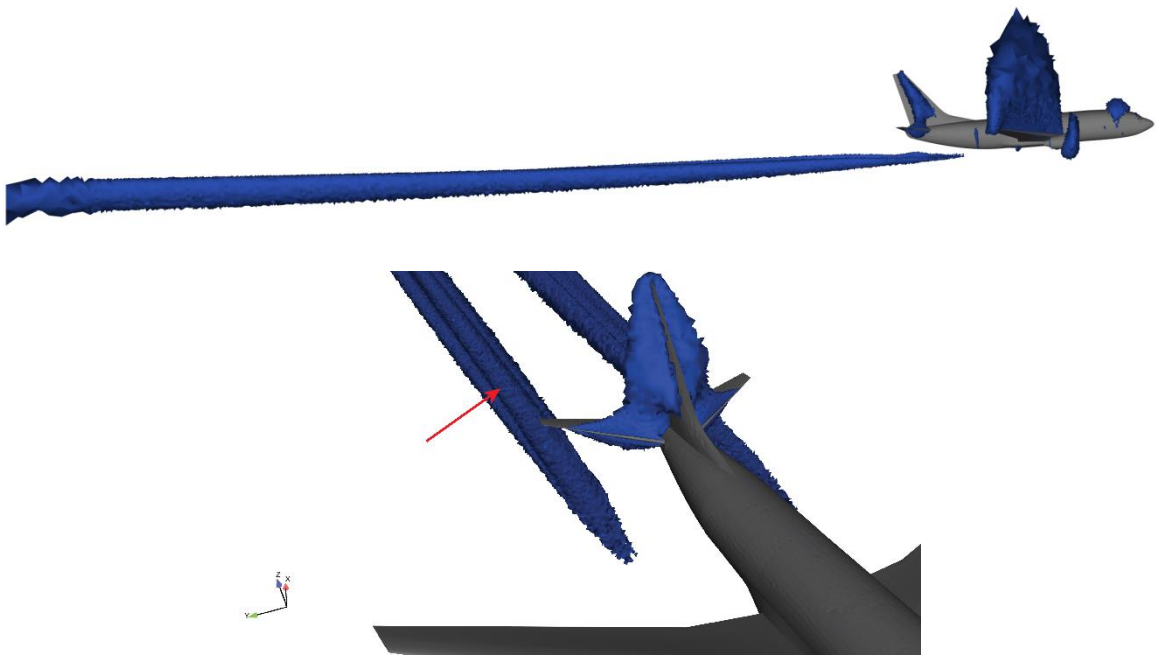

Figure 62 : Représentation des zones de saturation en eau (en bleu) par rapport à la phase liquide dans le domaine de calcul. (En haut) Vue de côté. (En bas) Zoom sur la zone de naissance de la saturation dans le panache. La flèche rouge met en évidence le creux formé par le jet.

Les zones de sursaturation sont donc situées, comme anticipé, en aval de la sortie primaire du moteur, en raison de l'apport d'eau contenue dans les effluents. Les conditions de saturation apparaissent à partir d'une distance équivalente à environ une demi-envergure derrière la sortie primaire du moteur. En effet, dans le voisinage de la sortie primaire du moteur, la température demeure élevée et l'eau se trouve alors exclusivement en phase vapeur. Durant la phase de refroidissement, la pression de vapeur saturante, fonction de la température, diminue, entraînant une augmentation du rapport de saturation, puis une sursaturation. La formation d'un « creux » dans la zone de sursaturation montré dans la Figure 62 en rouge est également due à cet effet. Au début de la formation de la zone de sursaturation, seule la périphérie du panache est sursaturée, son centre présentant encore une température trop importante à cause du jet.

La Figure 63 montre le tracé de l'évolution des saturations en eau par rapport aux phases liquide et solide au centre du jet. Nous pouvons ainsi remarquer que le seuil de saturation par rapport à la phase liquide est dépassé au centre du jet seulement à partir 82 m alors que les premières zones de sursaturation sont visibles dès 15 m, illustrant le fait que la saturation est plus importante au départ en périphérie du jet. Nous pouvons également observer qu'à partir d'une distance de 40 m, la saturation par rapport à la phase liquide est supérieure à celle par

rapport à la phase solide. Ceci est important car la sursaturation du panache en eau par rapport à la phase liquide est une condition préalable au déclenchement de la formation de la traînée de condensation. Nous verrons ce point plus en détail dans le paragraphe consacré à la formation des cristaux de glace.

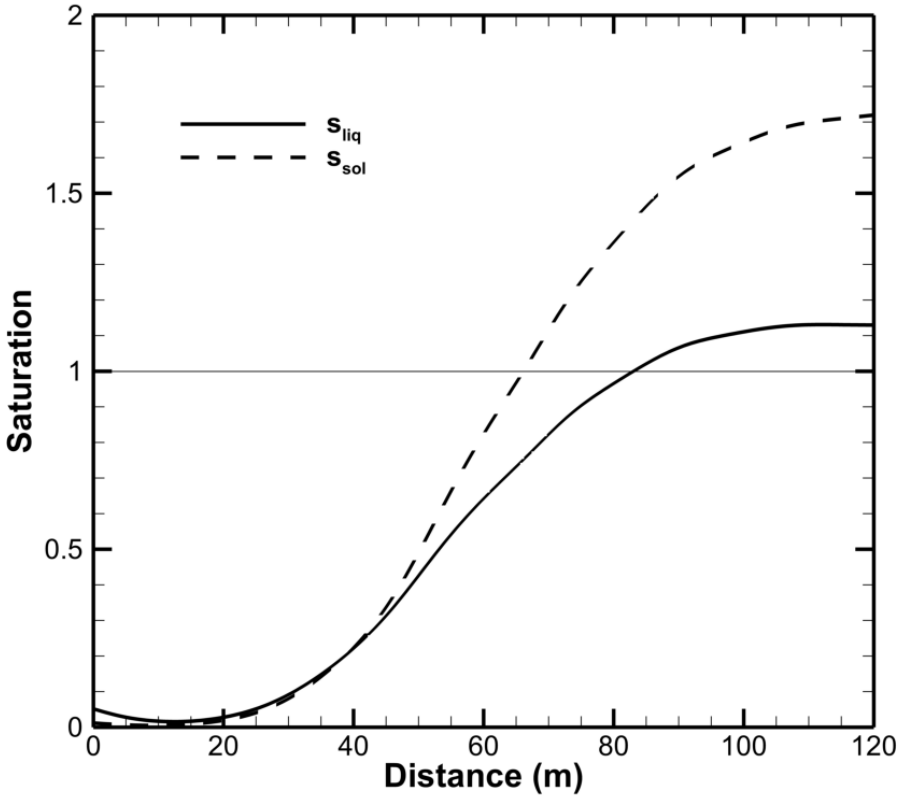

Figure 63 : Tracé de l'évolution des saturations en eau par rapport aux phases liquide et solide dans le centre du jet en fonction de la distance à partir de la sortie du moteur.

Le centre du jet reste sursaturé par rapport à la phase liquide jusqu'à la fin du domaine de calcul, situé à une distance de 4 envergures, ou à une durée de vie du panache de 0,5 seconde. Cela signifie que l'humidité relative ambiante de l'atmosphère est assez importante pour que les phénomènes de dilution du panache et de déposition de la glace sur les particules de suie n'abaissent pas suffisamment la pression de vapeur dans le panache pour la faire passer sous le seuil de saturation, dans le domaine d'étude. Nous pouvons voir sur la Figure 63 que les saturations atteignent des paliers respectifs de $s_{liq} = 1{,}12$ et $s_{sol} = 1{,}21$ en fin de domaine.

Il est intéressant de remarquer que la Figure 62 montre également des zones de sursaturation situées au-dessus des ailes (et des empennages). Contrairement à la zone située en aval de la sortie du moteur, l'apparition de ces zones de sursaturation sans apport supplémentaire d'eau est rendu possible par les chutes de température et de pression dues à

l'action des surfaces portantes sur l'écoulement (voir paragraphe I.1.3). La présence de zone de sursaturation en eau rend possible la formation de cristaux de glace par nucléation hétérogène. Cependant, en l'absence de particules de suie dans cette zone, le modèle ne simule pas de formation de cristaux de glace. En effet, seules les particules provenant de la tuyère du moteur sont prises en compte, il n'y a donc pas de particule au-dessus des ailes de l'avion. En réalité, la condensation peut se produire au-dessus de l'aile en présence de particules ambiantes en suspension dans l'atmosphère. On parle alors de traînées de condensation aérodynamiques [*Gierens et al.*, 2009; *Kärcher et al.*, 2009]. Leur simulation, bien que présentement non réalisée, peut être accomplie avec notre modélisation dans CEDRE en injectant par exemple des particules ambiantes dans le domaine de calcul et sera envisagée dans de futurs travaux.

III.4.3 Activation des suies

Dans cette sous-partie, nous nous intéressons à la couverture des particules de suies par les composés soufrées, supposés être partiellement responsables de leur activation, les rendant hydrophiles notamment pour des teneurs en soufre dans le carburant élevées. Il s'agit dans notre modélisation de la seconde condition permettant à la vapeur d'eau de condenser sur les particules. Nous rappelons que deux voies différentes d'activation sont modélisées dans le code CEDRE, à savoir l'adsorption de molécules SO_3 et H_2SO_4 et la collecte de particule H_2SO_4/H_2O. Dans un premier temps, nous montrons que la modélisation de la collecte de particules H_2SO_4/H_2O produit des résultats inexacts et tentons d'en comprendre les raisons. Par la suite, nous montrons les résultats de la modélisation de l'activation des particules de suies en prenant en compte uniquement l'adsorption des molécules SO_3 et H_2SO_4. Enfin, nous discutons des contextes de simulation dans lequel cette modélisation reste cohérente, en explicitant dans quel cadre la collecte de particule H_2SO_4/H_2O peut être négligée devant l'adsorption des molécules de SO_3 et de H_2SO_4.

III.4.3.1 Cas de la collecte de particule H_2SO_4/H_2O

Comme expliqué dans le paragraphe I.3.1, nous approximons la concentration et la taille moyenne des particules volatiles dans le panache en fixant comme condition limite en sortie primaire du moteur un indice d'émission et un diamètre constant. Ces paramètres correspondent respectivement à l'indice d'émission apparent et au diamètre moyen observé à $t = 0{,}5$ s pour une teneur en soufre choisie. Afin de mettre en évidence la collecte de particules volatiles, nous avons choisi de considérer pour cette étude un cas à haute teneur en soufre, dans le but

d'augmenter le nombre de particules volatiles H_2SO_4/H_2O formées. La distribution en taille des particules volatiles pour une teneur en soufre de 2700 ppm, montrée sur la Figure 64, révèle un diamètre moyen pour l'ensemble des particules volatiles de 5 nm. Le tracé des indices d'émission apparents en fonction de leur taille montre que la formation des particules volatiles se produit majoritairement dans les premiers instants du panache ($t < 0{,}5$ s), correspondant aux dimensions de notre domaine de calcul. En outre, les particules ayant un diamètre moyen supérieur à 5 nm atteignent un indice d'émission d'environ $1{,}5 \cdot 10^{17}$#/kg-fuel. Nous avons donc choisi comme condition limite à la sortie primaire du moteur un indice d'émission de particules volatiles H_2SO_4/H_2O de $1{,}5 \cdot 10^{17}$#/kg-fuel avec un diamètre fixe de 5 nm.

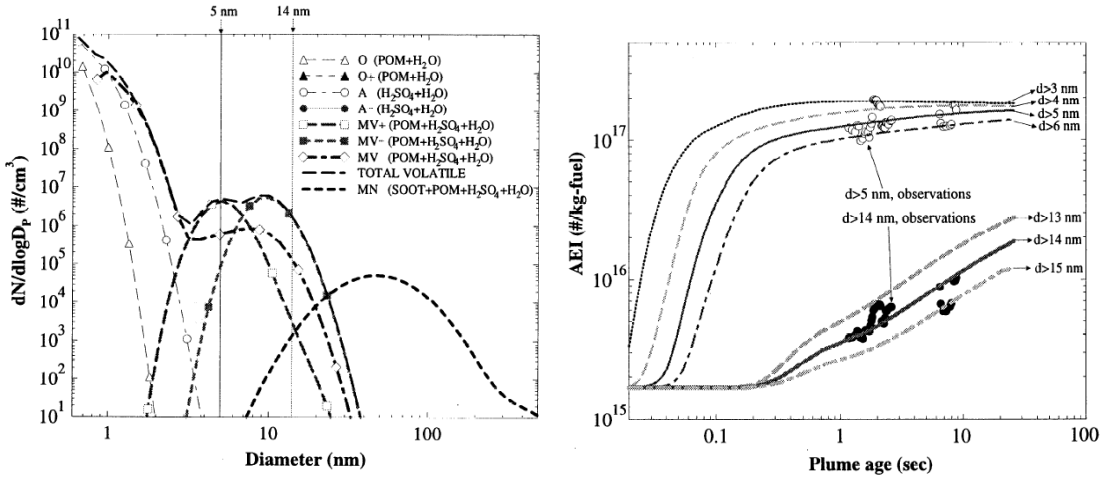

Figure 64 : (À gauche) Distribution en taille des particules volatiles. (À droite) Indice d'émission apparent des particules volatiles en fonction de leur taille. Ces résultats correspondent à une teneur en soufre de 2700 ppm.

Source : [*Yu et al.*, 1999]

La Figure 65 montre les résultats de simulation pour le tracé de la fraction de surface activée par collecte des particules volatiles H_2SO_4/H_2O des particules de suies le long du centre du jet. La comparaison des valeurs avec les résultats obtenus par *Kärcher* [1998] (Figure 66) montre que la collecte de particules volatiles H_2SO_4/H_2O est mal prédite par nos modèles microphysiques.

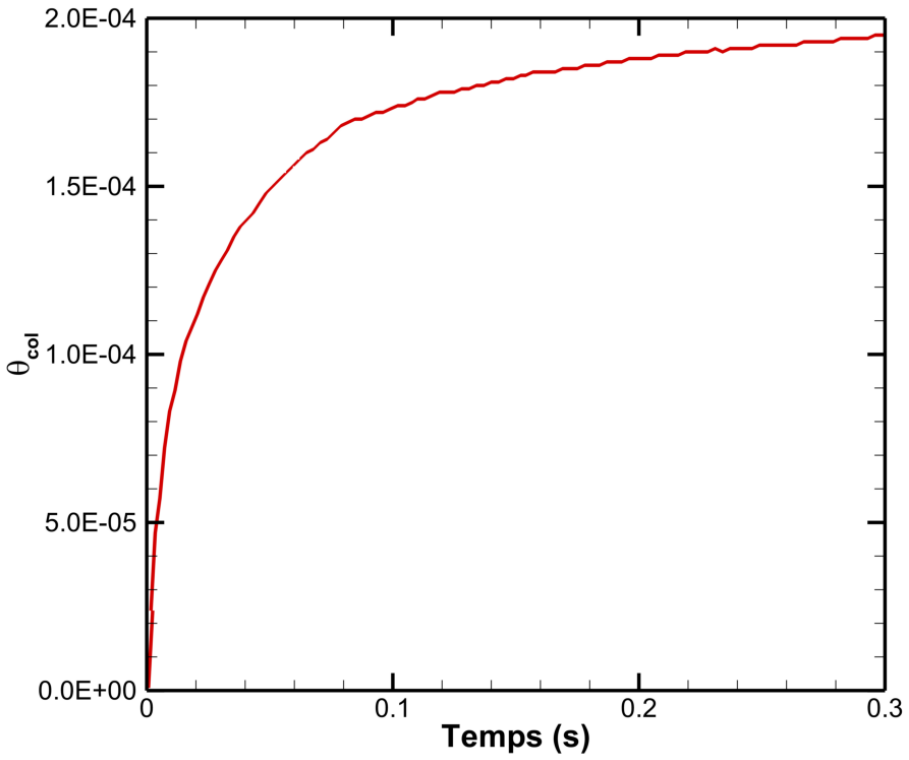

Figure 65 : Evolution temporelle de la fraction surfacique de particules de suie activée par le processus de collecte des particules volatiles pour une teneur en soufre de 2700 ppm.

En premier lieu, l'évolution de la fraction surfacique activée par collecte montre des tendances très différentes. Dans les résultats de *Kärcher* [1998], la collecte de particules volatiles ne devient notable qu'à partir de $t = 7 \cdot 10^{-1}$ s, tandis que dans notre simulation, la collecte débute dès la sortie du moteur. Cette différence provient de la modélisation de l'hypothèse adoptée sur les particules volatiles. En effet, contrairement à la réalité, nous ne formons pas les particules volatiles dans le panache par des processus de nucléation binaire et de coagulation, mais les injectons directement au niveau de la sortie primaire du moteur. Ceci conduit à la présence erronée de concentrations non négligeables de particules volatiles en début de panache.

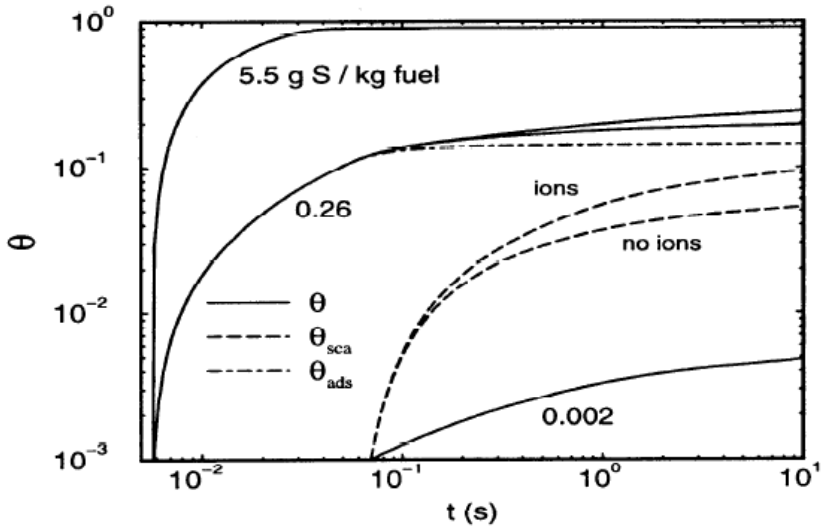

Figure 66 : Fraction surfacique activée des particules de suie obtenues par *Kärcher* [1998] pour différentes teneur en soufre. θ_{ads} correspond à la couverture due au processus d'adsorption et θ_{sca}, au processus de collecte.

Source : [*Kärcher*, 1998]

Deuxièmement, *Kärcher* [1998] obtient, pour une teneur en soufre de 260 ppm, une couverture par collecte à 0,5 s d'environ 2% de la surface totale des suies. Tandis qu'avec le code CEDRE, nous prédisons une couverture de seulement 0,2%, soit dix fois moins pour une teneur en soufre 10 fois supérieur. Ceci se produit en outre alors même que des particules volatiles sont présentes en début de panache alors qu'elles ne le devraient pas. L'origine de l'erreur se trouve probablement dans l'évaluation du taux de coagulation que nous rappelons ici :

$$s_{col} = K(D_s, D_{vol})\, N_{vol}\, N_s\, (1 - \theta_{act}) \qquad \text{(III.4.2)}$$

C'est en effet ce taux qui détermine la quantité de particules volatiles qui se trouve collectée par les particules de suie. Le calcul du coefficient de coagulation $K(D_s, D_{vol})$ n'est pas en cause. Ce dernier reste en effet relativement constant au vu des tailles des particules observées, et ne peut expliquer les écarts observées sur les fractions de surface activée. L'origine de l'erreur provient alors probablement de l'évaluation de la concentration de particules volatiles N_{vol}. La conversion de l'indice d'émission de $1{,}5 \cdot 10^{17}\ \# \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ en concentration de particules volatiles donne avec les paramètres du CFM-56 (voir Annexe 1) donne une concentration de $3{,}5 \cdot 10^{14}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$, que nous avons donc fixée en sortie primaire du moteur. La dilution simulée avec le code CEDRE donne alors une concentration à $t = 0{,}5$ s

d'environ $10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$ au centre du jet. En revanche, dans le cas du panache de l'ATTAS (*Advanced Technology Testing Aircraft System*) utilisé par *Yu et al.* [1999], l'indice d'émission de $1{,}5 \cdot 10^{17}\ \# \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ donne une valeur théorique de concentration de particules volatiles de $10^{13}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$ à $t = 0{,}5$ s, soit une valeur 10 fois supérieure à celle obtenue dans notre simulation. L'origine de cette différence se trouve sans doute dans le facteur de dilution, paramétré d'après des mesures dans le cas de *Yu et al.* [1999], et simulé dans notre cas. Bien que notre dilution prédite au centre du jet concorde avec l'interpolation donnée par *Schumann et al.* [1998] à $t = 0{,}5$ s (voir Figure 54), *Yu et al.* [1999] utilise une autre dilution correspondant à $d = (0{,}005/t)^{0{,}9}$, spécifique à l'ATTAS.

Finalement, la mise en évidence de ces différences de concentrations de particules volatiles dans le panache nous a conduit à négliger le processus de collecte de particules volatiles H_2SO_4/H_2O et de ne prendre en compte que l'adsorption des molécules H_2SO_4 et SO_3 pour la modélisation de l'activation des particules de suies. Cela impose bien sûr des restrictions sur les simulations numériques qui ne seront alors valables que dans les cas où la contribution du processus de collecte de particules volatiles est négligeable devant celle du processus d'adsorption de molécules soufrées. Heureusement, comme le montre la Figure 66, la contribution du processus de collecte de particules volatiles reste modérée pour un panache âgé de 0,5 seconde. En effet, dans le cas d'une teneur en soufre de 260 ppm, les résultats de *Kärcher* [1998] révèlent que les processus d'adsorption participent à plus de 80% de la couverture surfacique des particules de suies à $t = 0{,}5$ s. La contribution du processus de collecte de particules volatiles ne devient en réalité notable que pour des panaches plus âgés. L'intégration des interactions électrostatiques dans les transformations chimiques comme celles décrites par *Yu et Turco* [1997] ainsi que des processus de nucléation et de coagulation de particules volatiles pourrait s'avérer nécessaire si une étude dans un domaine de calcul plus grand est envisagée dans un futur travail.

III.4.3.2 Cas de l'adsorption des molécules SO_3 et H_2SO_4

Nous étudions à présent l'activation des particules de suie du panache par le processus d'adsorption des molécules SO_3 et H_2SO_4. Nous rappelons que ces molécules peuvent se fixer par adsorption sur des sites présents à la surface des particules de suies, leur conférant alors des propriétés d'hydratation accrues. Le processus d'adsorption est un processus complexe dépendant de multiples paramètres. La fraction surfacique de suie activée dépend du nombre

de sites disponibles qui est fonction de la taille des suies et de la densité de sites à la surface des suies, ainsi que de la concentration des adsorbats. Ces derniers correspondent aux molécules SO_3 et H_2SO_4 qui sont issues des transformations chimiques que subissent les molécules SO_2, éjectées en sortie primaire du moteur. Le taux d'adsorption est donc également fonction du taux de transformation, qui dépend de la disponibilité des oxydants comme OH dont la concentration est variable dans le panache et du taux de dilution du panache.

Dans le cas étudié ici, la fraction molaire imposée en condition limite de la sortie primaire du moteur est issue de l'article de *Garnier et al.* [1997a], soit $x_{SO_2} = 1{,}15 \cdot 10^{-5}$. Cela correspond à une teneur en soufre dans le carburant de 350 ppm, ou 0,35 g S / kg-fuel. Plus la teneur en soufre du carburant est importante, plus les concentrations des molécules SO_3 et H_2SO_4 dans le panache seront élevées et plus le taux d'adsorption sur les particules de suie sera également important. L'évolution des fractions molaires des espèces soufrées le long du centre du jet est montrée sur la Figure 59. Nous avons déjà validé ces résultats en les comparant à ceux obtenus par *Kärcher et al.* [1996a].

Nous comparons sur la Figure 67 la fraction molaire d'acide sulfurique dans le panache à celle adsorbée à la surface des particules de suies au centre du jet. La quantité de molécules adsorbées représente ainsi une part très faible ($< 1\%$) de la quantité totale d'acide sulfurique. Nous pouvons en déduire qu'il n'existe pas de phénomène de compétition entre les suies pour l'acide sulfurique disponible. Le processus semble se dérouler principalement dans les 30 premiers mètres en aval de la sortie primaire du moteur. Les fractions molaires diminuent ensuite sous l'effet de la dilution. Nous rappelons que le modèle ne comporte pas de processus de désorption, c'est-à-dire que la diminution de la concentration de H_2SO_4 adsorbée à la surface des suies ne peut être due qu'à la dilution du panache.

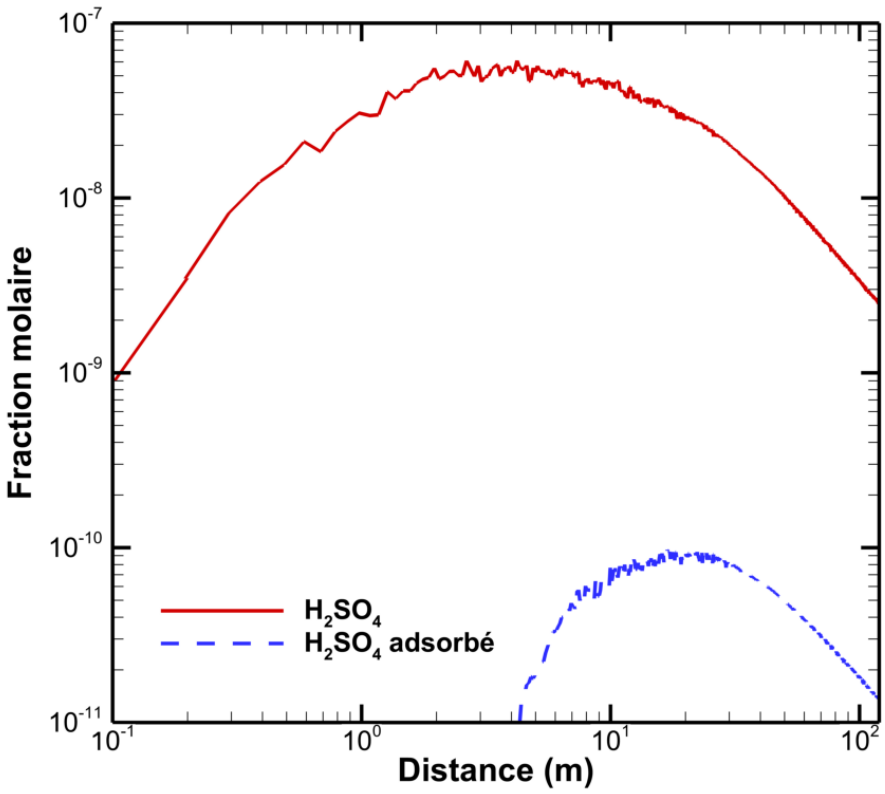

Figure 67 : Evolution des fractions molaires de l'acide sulfurique dans le panache et adsorbé à la surface des particules de suies au centre du jet en fonction de la distance.

Les fractions surfaciques activées des particules de suie le long du centre du jet sont présentées sur la Figure 68. Le processus d'adsorption se produit, comme attendu, rapidement en sortie de jet et la fraction surfacique activée converge à partir de quelques dizaines de mètres vers la valeur $\theta = 0{,}27$. Cela signifie qu'environ 27% de la surface des particules de suie sont activées, sur laquelle la vapeur d'eau est susceptible de se condenser. L'existence d'une valeur limite pourrait s'expliquer par la diminution rapide de la concentration d'adsorbats due à la dilution, entraînant l'arrêt du processus d'adsorption.

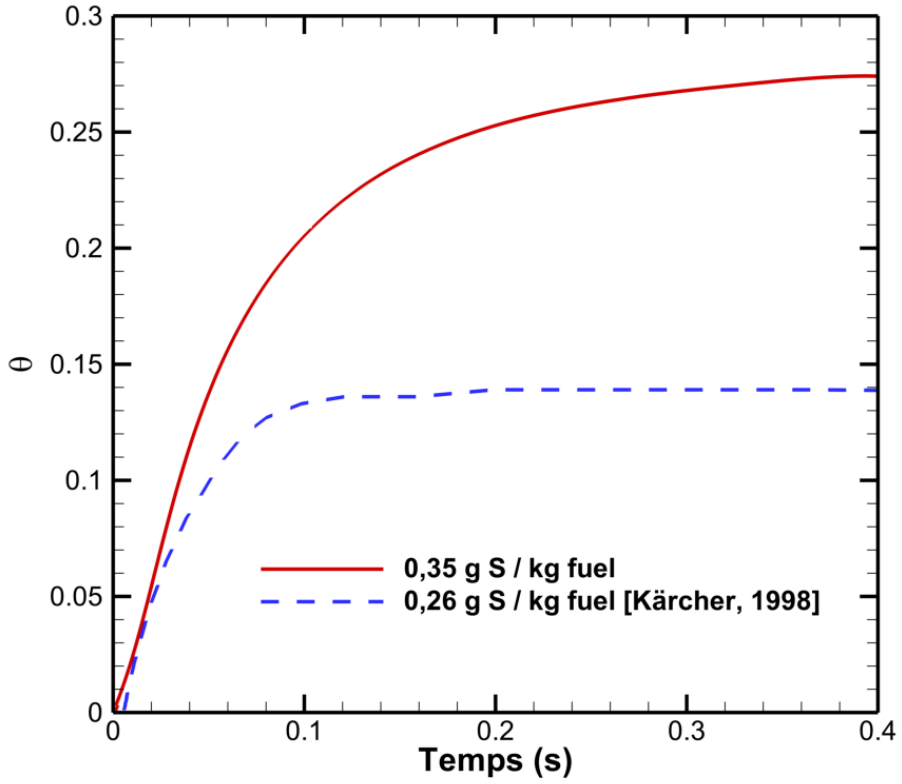

Figure 68 : Evolution temporelle de la fraction de surface activée des particules de suie au centre du jet.

Figure 69 : Photographie de l'ATTAS, correspondant à un avion de type VFW 614.

Source : [Photo : Björn]

La comparaison avec les résultats de *Kärcher* [1998] montre des tendances très similaires, à savoir une augmentation rapide puis l'atteinte d'un palier pour la fraction de

surface activée. À une teneur en soufre de 260 ppm, l'auteur calcule une fraction surfacique activée des particules de suie de 14% environ par le processus d'adsorption. Cela tend à montrer qu'une augmentation de la teneur en soufre dans le carburant induit une couverture surfacique plus importante des particules de suie, ce qui apparaît cohérent. Nous verrons par la suite, dans la partie consacrée à l'étude de l'influence de la teneur en soufre du carburant, que le pallier atteint dépend effectivement de cette teneur initiale.

Il convient de mentionner ici que les panaches simulés dans cette étude et par *Kärcher*, [1998] sont différents et par conséquent que les résultats ne sont pas rigoureusement comparables. En effet, *Kärcher* [1998] travaille sur le panache de l'ATTAS correspondant à un appareil de type VFW 614 (voir Figure 69) alors que nous travaillons sur le panache d'un Boeing B737. Toutefois, les résultats restent néanmoins cohérents. Une évaluation plus précise de la dépendance du processus d'adsorption aux concentrations de SO_3 et H_2SO_4 sera présentée lors de l'étude de sensibilité portant sur la teneur en soufre du carburant.

III.4.4 Formation des cristaux de glace

Dans le cadre de notre modélisation, la vapeur d'eau contenue dans le panache se condense sur la surface partiellement activée des particules de suies se trouvant dans des zones de sursaturation en eau liquide. Nous examinons dans cette sous-partie les paramètres décrivant les propriétés des cristaux de glace formés et en rapport avec les modèles microphysiques implantés dans le code CEDRE.

La Figure 70 donne un aperçu des résultats de la simulation des processus microphysiques dans le domaine de calcul en montrant le panache de cristaux de glace formé dans le sillage de l'avion, accompagné des profils de rayon des particules aux 4 premières envergures derrière la sortie primaire du moteur. L'isovolume, représentant le panache de cristaux de glace, montre toutes les cellules du domaine contenant des particules ayant un diamètre strictement supérieur à celui des particules de suie sèche ($D_s = 40$ nm). Il convient de noter que l'isovolume ne correspond pas à la traînée de condensation visible mais seulement de présence de cristaux glace. Comme anticipé, la vapeur d'eau ne se dépose pas sur les particules de suies dès la sortie primaire du moteur car le panache n'est pas encore sursaturé en eau liquide en raison de la température élevée. Pour ces mêmes raisons, les cristaux de glace se forment en premier lieu à la périphérie du jet, dans les zones froides. C'est pour cela qu'un creux est présent au centre du panache, révélant une zone sans cristaux de glace. Ce résultat est

en cohérence avec les observations visuelles de traînées de condensation à des distances très faibles (< 30 m) de *Schumann et al.* [1996]. La Figure 71 montre ainsi que la traînée de condensation est moins contrastée au centre du panache.

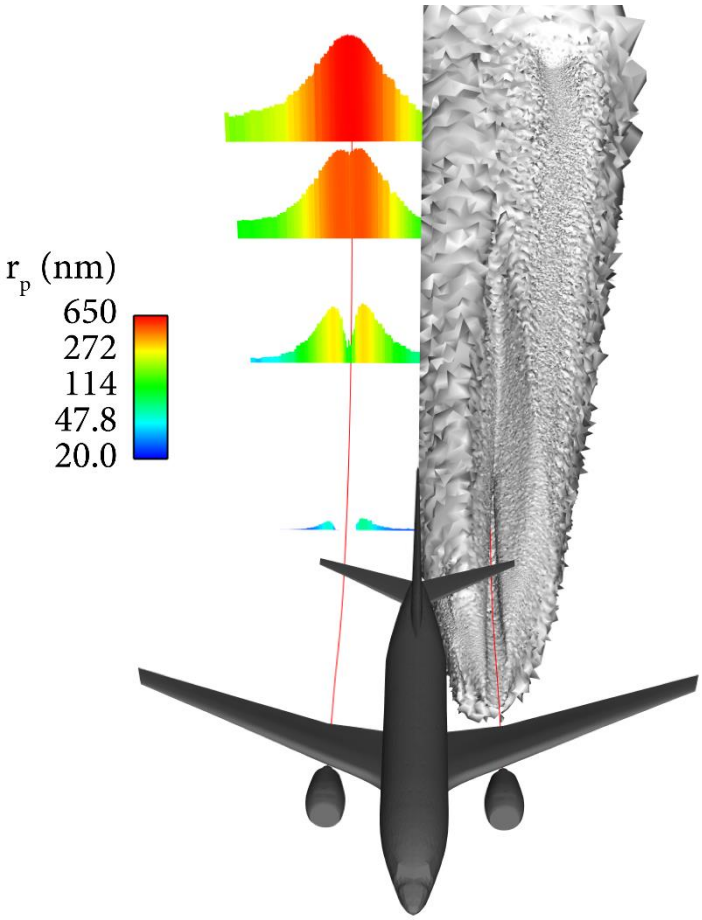

Figure 70 : Visualisation des profils de rayon de particules aux 4 premières envergures en aval de l'avion. L'isovolume gris à droite ($D_p > 40$ nm) représente le panache de cristaux de glace. La ligne rouge donne la position du centre du jet.

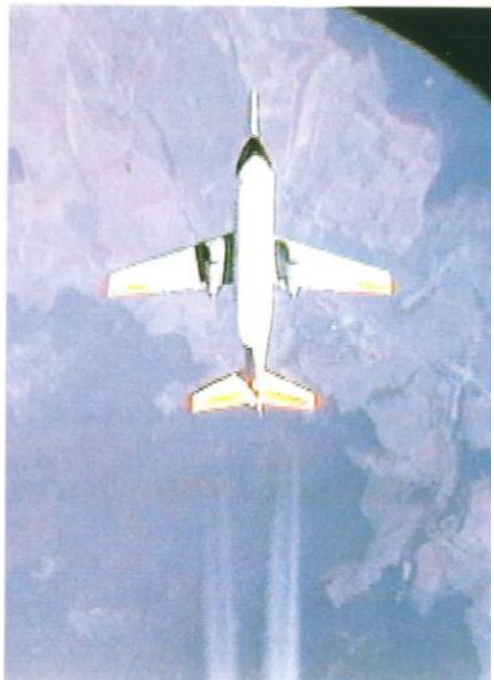

Figure 71 : Photographie des traînées de condensation issues de l'avion ATTAS à une distance de 50 m vues du dessus. Les moteurs consomment des carburants avec différentes teneurs en soufre (170 ppm à gauche, 5500 ppm à droite).

Source : [*Schumann et al.*, 1996]

Les profils de rayon de particule représentés à gauche sur la Figure 71 confirment que les particules croissent au départ (profils à $x/b = 1$ et à $x/b = 2$) en périphérie du jet. Par exemple à $x/b = 2$, le rayon des particules atteint une valeur d'environ $r_p = 280$ nm de part et d'autre du centre du jet tandis qu'il est d'environ 100 nm au centre. Le profil redevient centré à partir d'environ $x/b = 3$, principalement en raison du refroidissement du panache et de son homogénéisation. Le centre du panache présente en effet les fractions molaires maximales de vapeur d'eau, si bien que la sursaturation y est maximale lorsque la température chute, entraînant un taux de condensation plus important. Ce résultat est en cohérence avec les mesures expérimentales des rayons des particules à l'intérieur d'une traînée de condensation âgé de moins de 2 secondes produite par l'avion ATTAS [*Petzold et al.*, 1997]. Les auteurs montrent qu'à partir d'une certaine distance, les mesures au centre du panache donnent des rayons moyens supérieurs à ceux relevés au bord.

Il convient de noter que la forte croissance des particules au centre du panache à partir d'une distance de deux envergures derrière l'avion est tout de même atténuée par le fait que cette zone contient également les concentrations les plus élevées de particules. En effet, la forte densité des noyaux de condensation impliquent que la vapeur d'eau condensée est distribuée

sur un plus grand nombre de particules, conduisant à des rayons plus faibles que si la concentration des particules était uniforme à une distance x donnée. En somme, le rayon des particules résulte de l'interaction complexe de plusieurs facteurs qui sont principalement la température du panache, la densité et la taille des particules de suies activées et la fraction molaire de vapeur d'eau.

Concernant les valeurs des rayons de particules obtenus, nos résultats peuvent également être comparés à celles obtenues par la campagne de mesures précitée. Cette dernière a permis de mesurer le rayon moyen des particules dans les panaches âgés de moins de 2 secondes produites par deux avions différents, à savoir l'avion ATTAS et un airbus A310-300. Les conditions de vol ainsi que les principaux résultats obtenus sont montrés dans le Tableau 7. À 120 m derrière la sortie primaire du moteur, la simulation numérique donne un rayon moyen de 520 nm. Les mesures derrière l'A310-300 donne 310 nm et derrière l'ATTAS, 930 nm. Les valeurs obtenues par nos simulations se situent ainsi dans le même ordre de grandeur. Nous ne pouvons toutefois pas conclure davantage car les conditions météorologiques, le type d'avion et le type de moteur (GE CF6-80 C2A2 pour l'A310-300 et Rolls-Royce/SNECMA M45H Mk501 pour l'ATTAS) et les caractéristiques des effluents diffèrent entre les trois cas étudiés.

Tableau 7 : Conditions météorologiques de vol et rayon moyen des particules mesuré au sein des traînées de condensation d'un Airbus A310-300 et de l'ATTAS pour un panache âgé de moins de 2 secondes. La teneur en soufre du carburant utilisé est de 2700 ppm dans les deux cas. Les données de notre étude sont données à droite du tableau pour comparaison.

Paramètre	A310-300	ATTAS	Ce travail
Pression ambiante (hPa)	238,4	287,4	240,0
Température ambiante (K)	215,0	220,7	219,0
Humidité relative (%)	15	45	60
Distance de mesure (m)	< 400	< 300	120
Rayon moyen (nm)	310	930	520

Le tracé de la distribution en taille des particules dans le panache (voir Figure 72), représenté sous la forme d'une densité de probabilité (PDF), permet d'étudier la manière dont la vapeur d'eau se répartit sur les particules. Les particules sont distribuées dans 20 classes correspondant à des intervalles de rayons $[r_{p,i}; r_{p,i+1}]$ où $i \in [\![1; 20]\!]$. La valeur de la PDF à un rayon r_p donne la fraction de particules de la classe dans laquelle elles se trouvent. Ainsi, à la première envergure derrière la sortie primaire du moteur, la grande majorité des particules correspondent à des particules de suie sèches ($r_p = 20$ nm). Seules environ 4% des particules

étant des particules de glace. En mettant cette information en perspective avec le panache de cristaux de glace de la Figure 70, nous pouvons remarquer que les 96% de particules encore sèches à $x/b = 1$ sont concentrées dans un volume très faible au centre du panache.

Aux coupes suivantes, la vapeur d'eau se dépose sur les particules, diminuant les valeurs des PDF pour les rayons les plus petits, et les augmentant pour les rayons élevés. Nous remarquons que la valeur maximale atteinte pour chaque PDF correspond au rayon le plus élevé. Cela signifie que les particules sont encore en train de croître, car autrement les PDF suivraient plutôt une loi de répartition log-normale comme le montrent les résultats de *Paoli et al.* [2013] à $t > 10$ s.

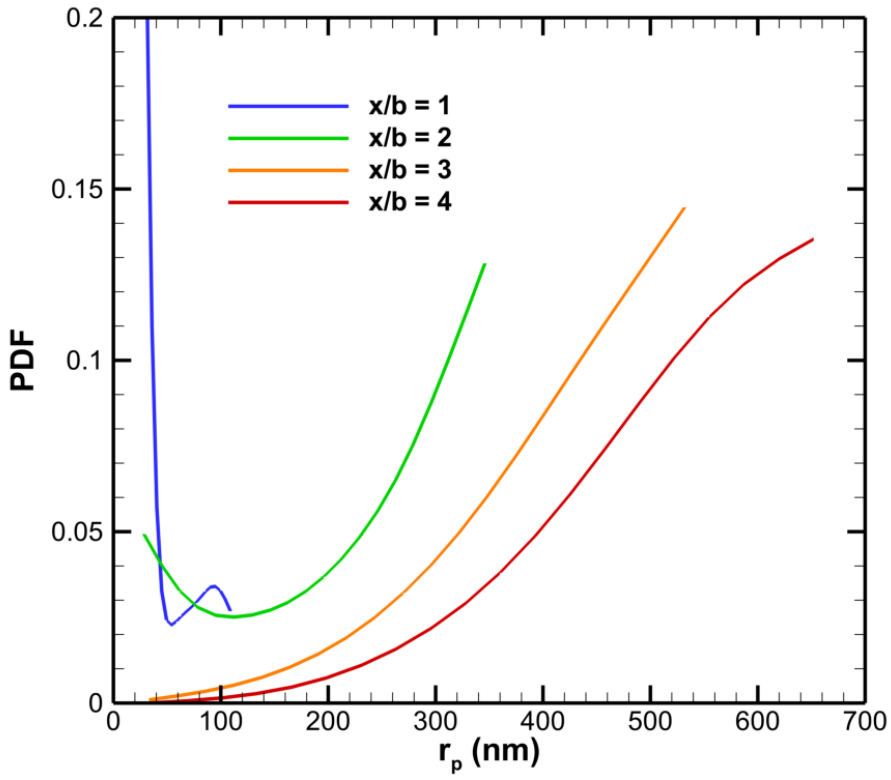

Figure 72 : Distribution en taille des cristaux de glace à différentes distances derrière l'avion.

La concentration et la taille des cristaux de glace sont des propriétés importantes car elles influent sur la visibilité de la traînée de condensation constituée par ces cristaux. Cette visibilité peut être évaluée par le calcul de l'épaisseur optique τ_v, qui mesure le degré de transparence d'un milieu. Autrement dit, plus l'épaisseur optique de la traînée de condensation est grande, plus cette dernière est opaque et donc visible. Pour un observateur au sol à la verticale d'une traînée de condensation, l'épaisseur optique est définie comme :

$$\tau_v = \int_{-\infty}^{+\infty} \pi r_p^2 N_s Q_{ext}(r_p) dz \qquad \text{(III.4.3)}$$

Avec :

- Q_{ext} le coefficient d'extinction de Mie, qui dépend de la longueur d'onde étudiée et du rayon des particules [*Van de Hulst*, 1957].

Q_{ext} peut être approximé avec la relation [*Van de Hulst*, 1957] :

$$Q_{ext} = 2 - \frac{4}{e}\left[\sin(e) - \frac{1-\cos(e)}{e}\right] \qquad \text{(III.4.4)}$$

Où

$$e = \frac{4\pi r_p(\mu_r - 1)}{\lambda_w} \qquad \text{(III.4.5)}$$

Avec :

- μ_r l'indice de réfraction du milieu. Pour la glace, $\mu_r = 1{,}31$;
- λ_w la longueur d'onde étudiée. Ici, $\lambda_w = 0{,}55$ µm correspondant à la lumière visible.

Une traînée de condensation est considérée comme visible lorsque $\tau_v > 0{,}01$. La Figure 73 montre le tracé de l'évolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion. Comme anticipé, l'épaisseur optique augmente à mesure que l'on s'éloigne de l'avion et que les particules de glace grossissent. Elle atteint la valeur $\tau_v = 0{,}7$ à une distance de 120 m, c'est-à-dire pour une traînée de condensation âgée de 0,5 s environ.

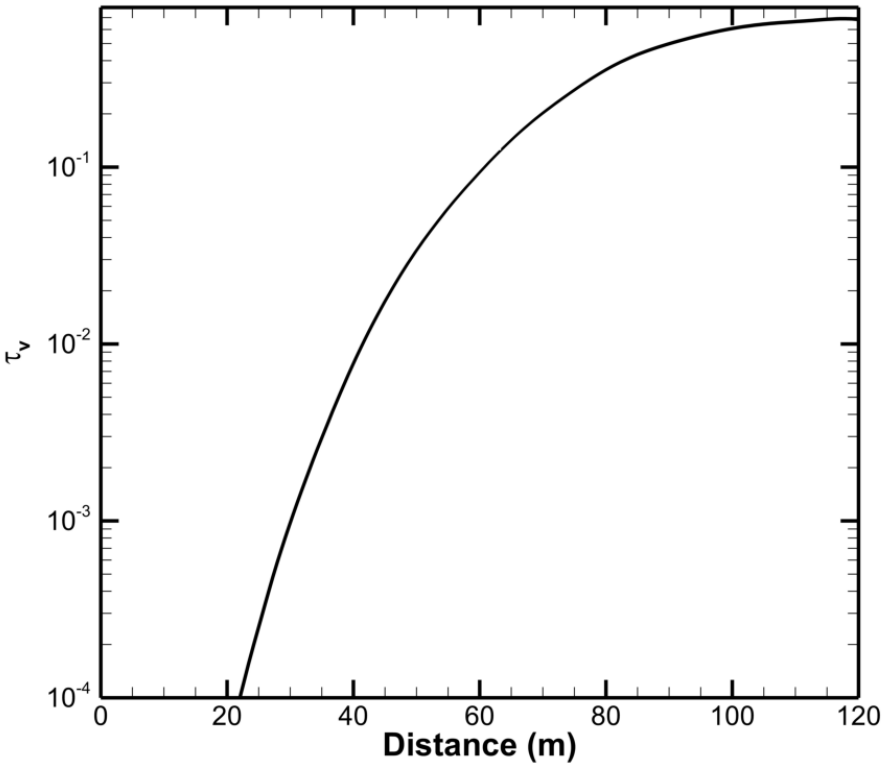

Figure 73 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière de l'avion.

Le seuil de visibilité $\tau_v > 0{,}01$ est atteint à environ 45 m derrière l'avion, ce qui correspond à des cas couramment observés dans le ciel (voir par exemple la Figure 74). Il convient de noter que la distance d'apparition des tourbillons de sillage dépend de nombreux paramètres. Elle peut par conséquent varier de quelques mètres derrière les sorties moteurs jusqu'à plusieurs dizaines de mètres, comme l'indique les nombreuses photographies disponibles dans la littérature. Une manière de reproduire cette visualisation dans la simulation numérique consiste à montrer l'isovolume $\Delta\tau_v > 0{,}01$, avec $\Delta\tau_v = \pi r_p^2 N_s Q_{ext}(r_p)\Delta z$ où Δz correspond à l'épaisseur du panache. Ainsi, une cellule du maillage devient « visible » si une tranche de panache qui serait constituée de cellules identiques à celle-ci satisferait le critère de visibilité. Cet isovolume est représenté sur la Figure 75 en blanc. Nous pouvons observer que la distance séparant le début de la traînée de condensation de la sortie du moteur est de 46 m. Par ailleurs, les résultats montrent que tout le panache de glace (celui représenté sur la Figure 70) n'est pas visible, seules les zones centrales du panache le sont. En effet, les particules de glace présentes sur les bords du panache ne sont pas assez grosses, et leur densité pas assez élevée pour que le critère de visibilité soit satisfait.

Figure 74 : Photographie de la formation d'une traînée de condensation dans le panache d'un Boeing B737.

Source : [Photo : Ander Aguirre]

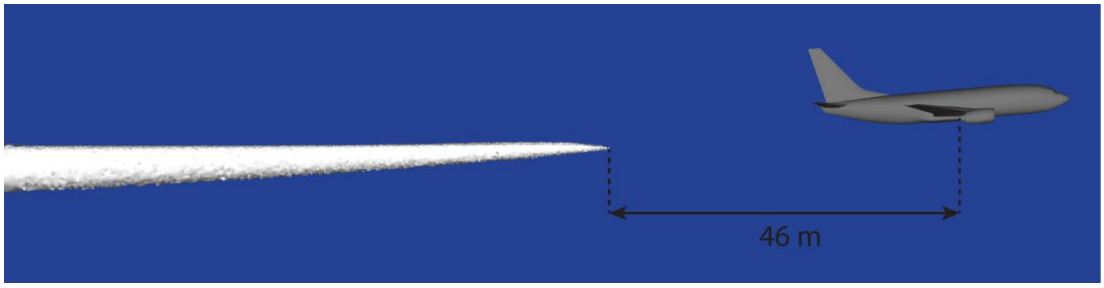

Figure 75 : Visualisation de la traînée de condensation dans le sillage de l'avion par l'isovolume $\Delta\tau_v > 0{,}01$.

Aucune mesure d'épaisseur optique de traînée de condensation n'a pu être trouvée dans la littérature pour des temps de vie du panache inférieurs à 60 s. Nous pouvons cependant comparer nos résultats avec ceux d'autres simulations numériques comme celles de *Kärcher et al.* [1996b] et de *Paoli et al.* [2013], résumés dans le Tableau 8.

Tableau 8 : Principaux paramètres et résultats des simulations des études de *Kärcher et al.* [1996b] et de *Paoli et al.* [2013]. Les données correspondantes issues de nos simulations sont montrées à droite du tableau pour comparaison.

Paramètre	[*Kärcher et al.*, 1996b]	[*Paoli et al.*, 2013]	Ce travail
Pression ambiante (hPa)	302	240	240
Température ambiante (K)	223	220	219
Humidité relative ambiante (%)	0	100	60
Vitesse initiale des effluents ($\mathrm{m \cdot s^{-1}}$)	-	480,0	480,3
Température initiale des effluents (K)	223	580,0	580,0
Indice d'émission de H_2O ($\mathrm{kg \cdot kg^{-1}}$)	1,21	1,25	1,34
Débit initial des effluents ($\mathrm{m^{-3} \cdot s^{-1}}$)	52,51	136	73
Concentration initiale de suie ($\# \cdot \mathrm{m^{-3}}$)	10^{11}	$1{,}62 \cdot 10^{12}$	10^{12}
Rayon initial des suies (nm)	20	20	20
Coefficient d'accommodation α_c	0,1	0,1	1
Fraction de suie activée	1	1	$< 0{,}27$

Paramètre	[*Kärcher et al.*, 1996b]	[*Paoli et al.*, 2013]	Ce travail
Age du panache simulé (s)	< 3	< 20	$< 0{,}5$
Rayon moyen (nm)	< 600	< 1500	< 520
Concentration de glace ($\# \cdot \mathrm{m}^{-3}$)	10^{11}	$< 10^{9}$	$< 4 \cdot 10^{10}$
Epaisseur optique	$< 0{,}6$	$< 0{,}27$	$< 0{,}7$

Il convient en premier lieu de noter que les résultats des simulations numériques que nous avons citées ne sont pas comparables dans l'absolu aux nôtres en raison des différences de paramètres environnementaux, de conditions initiales et de caractéristiques des effluents. Nous avons néanmoins sélectionné les simulations numériques qui s'en rapprochaient le plus. Cela permet de donner des ordres de grandeurs aux propriétés des traînées de condensation que l'on étudie.

Nous utilisons ici le rayon moyen des particules, qui correspond à la moyenne des rayons de l'ensemble des particules à une distance donnée derrière la sortie du moteur, ou à un temps donné après la formation du panache, selon l'étude considérée.

Nous commençons par comparer nos résultats avec ceux de la simulation 0D de *Kärcher et al.* [1996b]. Dans leur simulation, les cristaux de glace atteignent un rayon moyen seuil de 600 nm à partir de $t = 0{,}5$ s, proche du rayon moyen atteint à $t = 0{,}5$ s dans notre étude, égal à 520 nm. Remarquons toutefois que le coefficient d'accommodation α_c est fixé à $0{,}1$ dans leur étude tandis qu'il est fixé à 1 dans le nôtre. Nous rappelons que ce coefficient est directement proportionnel au taux de déposition de la glace sur la particule (voir relation (II.4.42)) et que les valeurs données par *Pruppacher et Klett* [1997] et les mesures de *Schumann et al.* [1996] suggèrent que ce coefficient serait plus proche de 1. Nous aurions alors pu nous attendre à observer des rayons plus importants dans notre étude. Le coefficient de déposition, qui est plus important dans notre étude semble être contrebalancé par le fait que nous prenons en compte les effets dus à l'activation des suies alors que la modélisation de *Kärcher et al.* [1996b] considèrent toutes les suies comme pré-activées. De fait, le taux de condensation dans notre cas d'étude est proportionnel à la fraction de surface activée, qui est au maximum égale à $\theta = 0{,}27$. Les concentrations de particules calculées étant par ailleurs proches dans les deux études, les épaisseurs optiques résultantes des traînées de condensation formées le sont également. *Kärcher et al.* [1996b] obtiennent une épaisseur optique seuil de $\tau_v = 0{,}6$ tandis que nous obtenons $\tau_v = 0{,}7$. Les résultats montrent donc une bonne cohérence.

Nous comparons à présent nos résultats avec ceux de l'étude tridimensionnelle LES de *Paoli et al.* [2013]. Bien que les paramètres de l'atmosphère ambiant et les propriétés des effluents soient très semblables excepté pour l'humidité relative ambiante, les rayons moyens maximaux obtenus dans les deux études diffèrent d'un facteur trois. Cela pourrait en premier lieu être dû à cette différence importante d'humidité relative ambiante. Une atmosphère sursaturée en glace implique que la vapeur d'eau ne cesse de se déposer sur les particules quel que soit l'état de dilution du panache, conduisant à une croissance continue des cristaux. Dans notre cas d'étude, l'humidité relative par rapport à l'eau liquide de 60% correspond à une humidité relative de 90% par rapport à la glace. Cela implique que le panache finira inévitablement par être sous-saturé par rapport à la glace sous l'effet de la dilution, mettant un terme au processus de croissance des cristaux. C'est ce qui est décrit dans l'étude de *Kärcher et al.* [1996b] à partir de $t = 0{,}5$ s lorsque la vapeur d'eau disponible s'épuise en raison de l'humidité relative ambiante nulle. Le rayons moyen atteint alors une valeur seuil qui reste constante jusqu'à la fin de la simulation à $t = 3$ s. Dans le cas étudié par *Paoli et al.* [2013], puisque le panache reste constamment sursaturé en glace du fait de la sursaturation de l'atmosphère, les cristaux poursuivent leur croissance pendant les 20 s de la simulation. Ce qui expliquerait que les auteurs aboutissent à un rayon moyen plus élevé.

L'épaisseur optique maximal obtenu est de $0{,}27$ dans l'étude de *Paoli et al.* [2013], soit plus de deux fois inférieure au notre. Ceci est anticipé car à $t = 20$ s, les concentrations de particules de glace sont beaucoup plus faibles à celles à $t = 0{,}5$ s. La comparaison des résultats à $t = 0{,}5$ s pour ces deux simulations ne peut en revanche être réalisée, en raison des différences de configuration géométrique initiales trop importantes. Dans l'étude de *Paoli et al.* [2013], à $t = 0{,}5$ s, aucune particule ne se trouve encore en état de sursaturation.

III.5 Études de sensibilité

Dans cette partie du document, nous menons des études de sensibilité en faisant varier successivement l'humidité relative ambiante, la teneur en soufre du carburant, le diamètre des particules et leur nombre. Ces études visent en premier lieu à s'assurer des performances de l'outil de simulation en étudiant les réponses des modèles aux variations de paramètres. L'objectif est également d'évaluer l'influence des paramètres précités sur les caractéristiques de la traînée de condensation formée.

III.5.1 Humidité relative

Dans ce paragraphe, nous étudions l'influence de l'humidité relative ambiante sur les propriétés des cristaux de glace formés. Nous rappelons que l'humidité relative ambiante caractérise la quantité de vapeur d'eau contenue dans l'air ambiant. Ainsi, plus elle est importante, plus l'air entraîné dans le panache contiendra de la vapeur d'eau qui s'ajoutera à la vapeur d'eau issue des effluents. Les propriétés des cristaux de glace formés, comme leur nombre, leur taille ou encore l'épaisseur optique de la traînée de condensation, devraient donc être impactées par une modification de l'humidité relative. Nous savons que l'humidité relative ambiante constitue un paramètre critique contrôlant la persistance des traînées de condensation. L'objectif de cette étude consiste à connaître ses mécanismes d'action et évaluer son impact sur la formation des traînées de condensation dans les premiers instants du panache.

III.5.1.1 Configurations des calculs

Nous choisissons pour cette étude de considérer des cas réalistes pour le choix des paramètres météorologiques de l'atmosphère ambiante simulée. Les campagnes de mesures en vol pour l'étude des traînées de condensation (par exemple [*Schumann et al.*, 2002]) montrent que dans la majorité des cas, l'apparition des traînées de condensation se déclenchent pour des humidités relatives ambiantes supérieures à 30% par rapport à la phase liquide. Par ailleurs, les mesures montrent que l'humidité relative peut s'élever jusqu'à 60% environ. Nous choisissons donc d'étudier deux cas avec des humidités relatives de 30% et de 60%, respectivement. Le premier cas $HR = 60\%$ correspond au calcul de référence présenté dans la partie III.4. Le deuxième cas $HR = 30\%$ est obtenu en imposant une fraction massique de H_2O en entrée du domaine de calcul à $x_{\mathrm{H_2O}} = 3{,}08 \cdot 10^{-5}$. Le domaine de calcul et le maillage utilisé correspondent à ceux présentés dans la partie I.1.

III.5.1.2 Saturation en eau

La Figure 76 montre les isovolumes de sursaturation de l'air par rapport à l'eau liquide ($s_{liq} > 1$), correspondant aux conditions thermodynamiques nécessaires pour déclencher la condensation de la vapeur d'eau sur les particules de suies activées. Outre celles situées au-dessus des ailes, les zones de sursaturation sont principalement situées en aval de la sortie primaire du moteur, en raison de l'apport d'eau dû aux effluents. Les conditions sursaturantes apparaissent ainsi à partir d'une distance d'une demi-envergure par rapport à la sortie primaire du moteur pour les deux cas étudiés et se prolongent jusqu'à la fin du domaine de calcul.

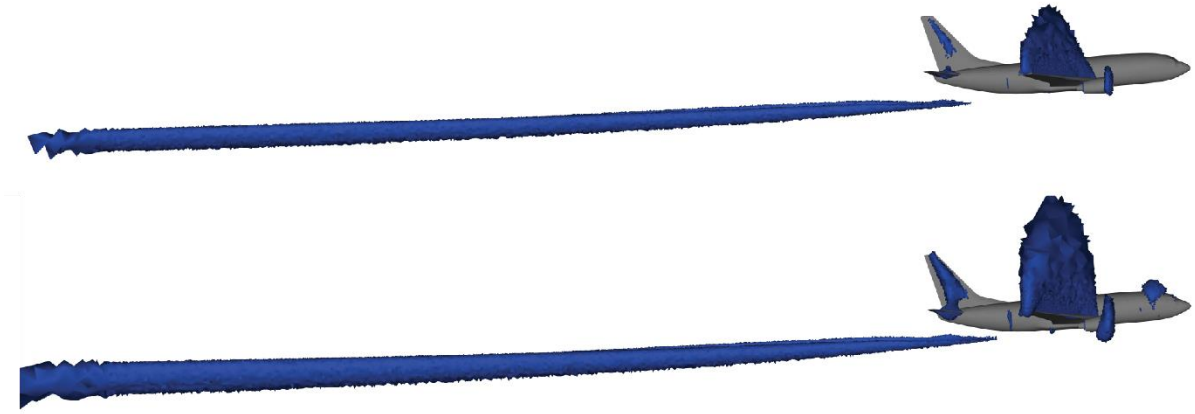

Figure 76 : Visualisation des isovolumes de sursaturation en vapeur d'eau ($s_{liq} > 1$) par rapport à l'eau liquide pour le cas $HR = 30\%$ (en haut) et le cas $HR = 60\%$ (en bas).

Afin de comparer quantitativement les isovolumes de sursaturation en eau, nous traçons sur la Figure 77 leur superficie, qui correspond à leur surface transverse, en fonction de la distance en aval de l'avion. Les valeurs mesurent l'étendue du domaine sursaturé à une distance x de la sortie du moteur.

Le pic observé à $x \approx 18$ m correspond à la saturation de provoquée par la dépression au-dessus de l'empennage horizontale, selon le même principe que celle au-dessus des ailes (voir III.4.2). Nous pouvons ainsi remarquer que l'augmentation de l'humidité relative accentue fortement les sursaturations dues aux dépressions au-dessus des surfaces portantes. Les traînées de condensation aérodynamiques devraient donc se déclencher beaucoup plus facilement par temps humide.

Bien que moins prononcé que pour les pics, l'écart de superficie des panaches sursaturés augmente progressivement à mesure que l'on s'éloigne de l'avion. La superficie atteint une

valeur de 16 m^2 à $x = 120$ m dans le cas $HR = 60\%$, soit deux fois plus comparé au cas $HR = 30\%$. Les différences de sursaturation du panache deviennent ainsi de plus en plus notables à mesure que le panache se dilue, et que l'air ambiant est entraîné dans le panache. Ces résultats montrent, comme anticipé, que l'influence de l'humidité relative ambiante est croissante avec l'âge du panache.

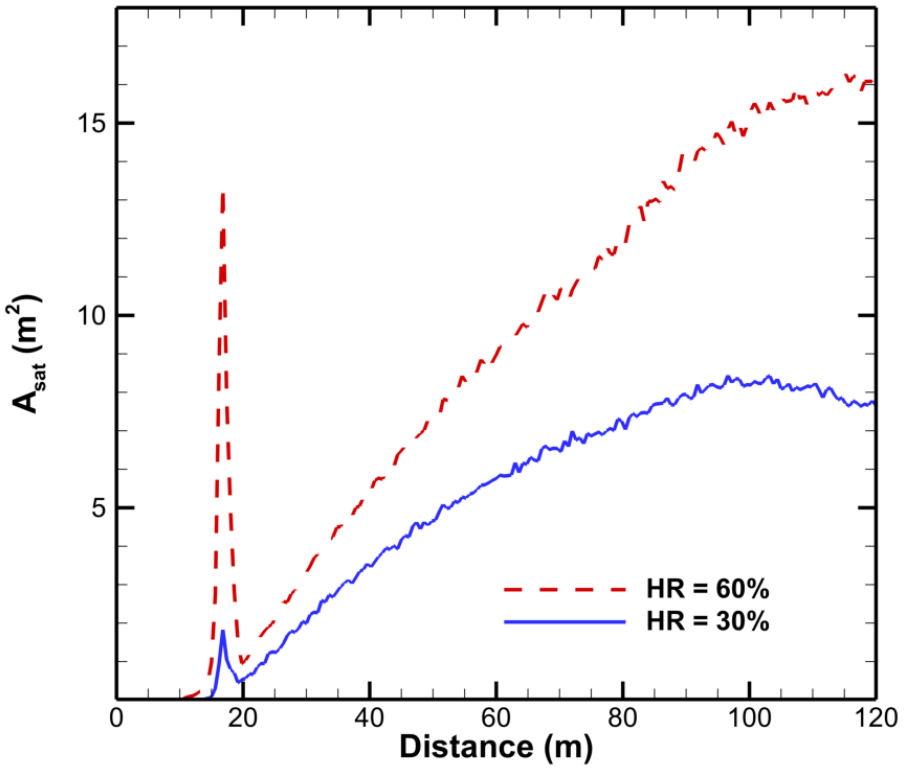

Figure 77 : Comparaison de la superficie des panaches de sursaturation en vapeur d'eau en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$.

L'étendue de la zone sursaturée influe principalement sur le nombre de particules de suie se trouvant en état de sursaturation, qui sont alors susceptibles de servir de noyau de condensation pour la formation de cristaux de glace. Nous reviendrons sur ce point par la suite, lorsque nous examinerons les caractéristiques des particules.

Nous analysons à présent les différences en termes de valeurs de saturation en eau. La Figure 78 montre l'évolution, au centre du jet, des valeurs de saturation par rapport aux phases liquides et solides en fonction de la distance axiale pour les deux humidités relatives étudiées. Nous remarquons ainsi que les valeurs de saturation locale sont, à l'opposé des superficies des isovolumes de sursaturation, proches entre les cas $\mathrm{HR} = 30\%$ et $\mathrm{HR} = 60\%$. En sortie de tuyère, les températures élevées ($T > 400$ K) augmentent la pression de vapeur saturante, ce

qui rend négligeables les différences de pression de vapeur dans le calcul de la saturation. C'est la raison pour laquelle les deux panaches de sursaturation se forment quasiment à la même distance derrière l'avion. Lorsque l'on s'éloigne de la tuyère, la température diminue rapidement avec la dilution du panache et rend alors visible les différences de saturation en eau, d'autant plus que plus d'air ambiant a été entraîné dans le panache. Toutefois, l'écart de saturation entre les deux cas étudiés reste modéré au centre du jet, la différence entre les saturations par rapport à la phase liquide atteignant par exemple seulement 9% à $x = 120$ m. Ceci est dû au fait qu'à cette distance, l'apport d'eau dans le panache issu de l'air ambiant reste limité par rapport l'eau initialement présente dans les effluents. En outre, le centre du jet est moins mélangé que l'air en périphérie du panache. La Figure 79 montre l'évolution des saturations pour une ligne située en bord de panache. Nous voyons que les saturations sur cette ligne montrent des écarts bien plus élevés, les saturations dans le cas HR = 60% valant environ le double des saturations dans le cas HR = 30%. Nous notons toutefois que les valeurs atteintes sont beaucoup plus faibles qu'au centre du jet, du fait qu'à cette distance, l'essentiel de la vapeur d'eau provient des effluents, et est concentré au centre du jet.

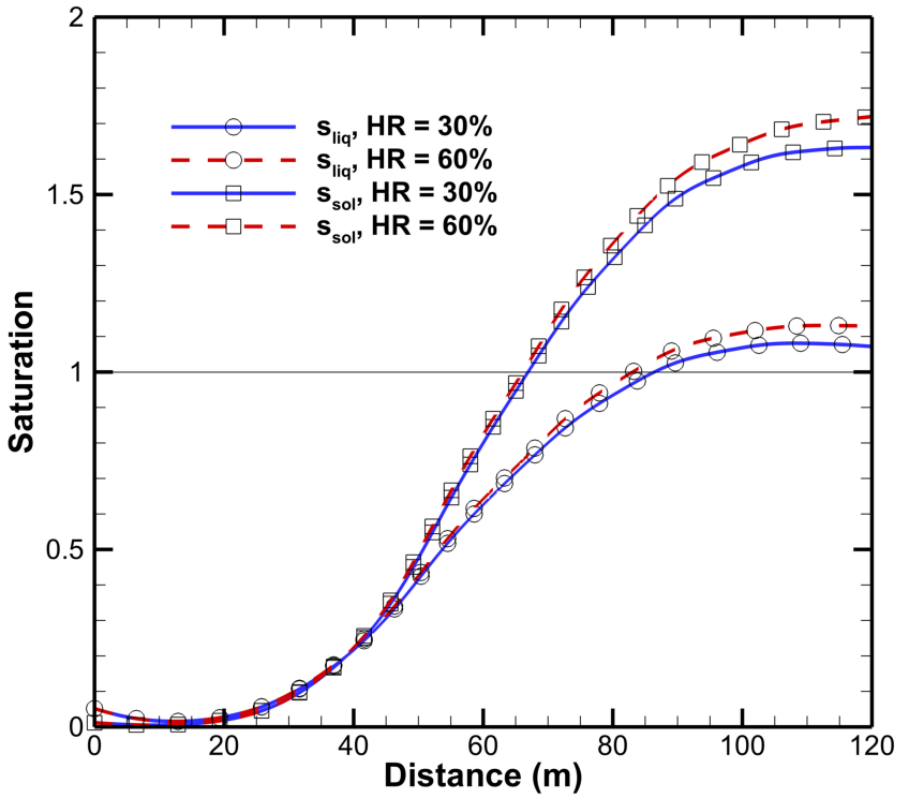

Figure 78 : Evolution des saturations en vapeur d'eau au centre du jet par rapport à l'eau liquide (symbole ○) et par rapport à la glace (symbole □) en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas HR = 30% et HR = 60%.

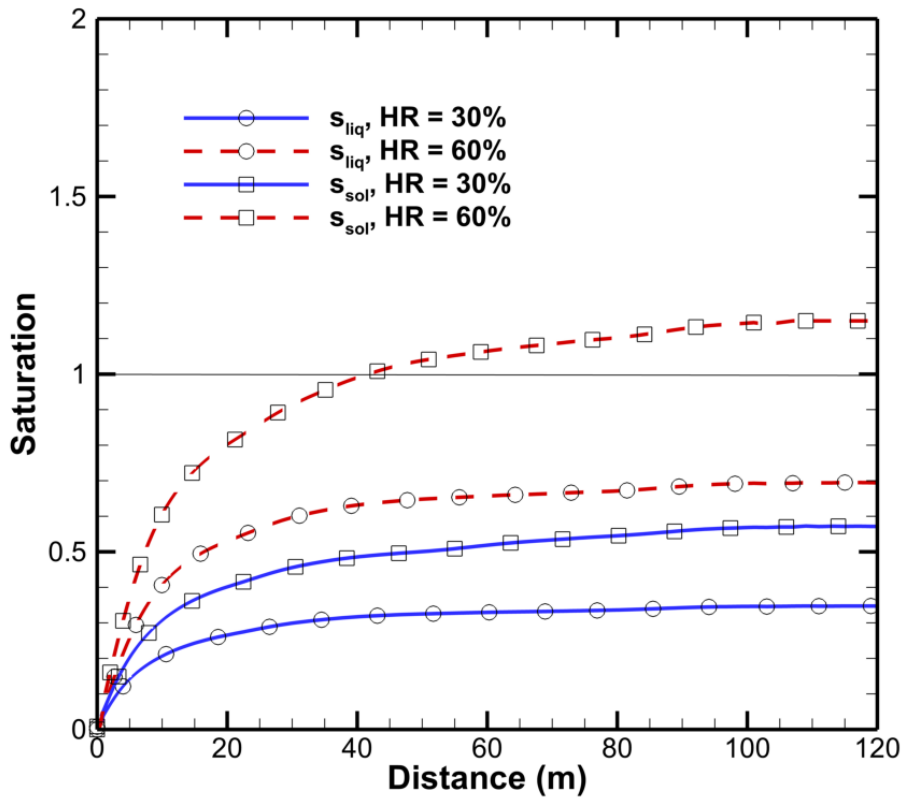

Figure 79 : Evolution des saturations en vapeur d'eau sur une ligne en périphérie du panache par rapport à l'eau liquide (symbole ○) et par rapport à la glace (symbole □) en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas HR = 30% et HR = 60%.

Rappelons que les valeurs de saturation par rapport à la glace déterminent les taux de condensation et d'évaporation de la vapeur d'eau se produisant à la surface des particules (voir relation (II.4.42)). Cela suggèrerait que les différences en termes de taux de croissance des particules de glace seraient faibles au centre du jet, et augmenteraient à mesure que l'on s'écarte du centre et que le panache se dilue dans l'atmosphère. Dans le paragraphe suivant, nous le vérifions en examinant les modifications engendrées sur le processus de condensation/évaporation de l'eau sur les particules.

III.5.1.3 Caractéristiques des particules

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que l'augmentation de l'humidité relative de l'air ambiant élargissait la zone de sursaturation dans le panache, ce qui par conséquent augmentait le nombre de particules se trouvant dans un environnement sursaturé. Afin de vérifier cette supposition, nous calculons la fraction de particules présentes dans une zone sursaturée F_{sat}, définie comme :

$$F_{sat}(x) = \frac{N_{sat}(x)}{N_{tot}(x)} \tag{III.5.1}$$

Avec :

- $N_{sat}(x)$, le nombre de particules de suie se trouvant dans une zone sursaturée par rapport à l'eau liquide, dans le plan transversal situé à la distance x ;
- $N_{tot}(x)$le nombre total de particules de suie contenues dans le plan transversal à la distance x.

$F_{sat}(x)$ représente ainsi, à une distance x donnée de l'avion, la proportion de particules de suie qui est recouverte de glace dans le panache si les suies sont activées. La Figure 80 montre l'évolution de $F_{sat}(x)$ en fonction de la distance en aval de l'avion pour $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. Cette grandeur caractérise donc les différences entre les deux cas étudiés de manière globale, en intégrant les écarts au centre et en périphérie du panache. La fraction de particules sursaturées est au départ nulle car la température élevée dans le jet induit une pression de vapeur saturante élevée, donc un rapport de saturation bas. Elle augmente ensuite fortement en raison du refroidissement rapide du panache et atteint un pic avant de diminuer à cause de la dilution du panache et de la consommation de vapeur d'eau par les particules. Nous pouvons ainsi confirmer que, comme attendu, la superficie du panache sursaturé influe directement sur la fraction de particules sursaturée. Les écarts entre les cas $HR = 60\%$ et $HR = 30\%$ augmentent progressivement à mesure que l'on s'éloigne de l'avion car le panache est davantage mélangé avec l'air ambiant. En effet, à une distance de $x = 90$ m, 58% des particules sont dans une zone sursaturée dans le cas $HR = 60\%$ alors que seulement 42% le sont dans le cas $HR = 30\%$. À $x = 120$ m, l'écart entre les deux cas d'humidité relative ambiante étudiés est maximale, avec 40% de particules dans une zone sursaturé en eau en plus dans le cas $HR = 60\%$ par rapport au cas $HR = 30\%$. Le passage d'une humidité relative de l'air ambiant de $HR = 30\%$ à $HR = 60\%$ entraîne donc bien une augmentation significative du nombre de cristaux de glace formés dans le panache.

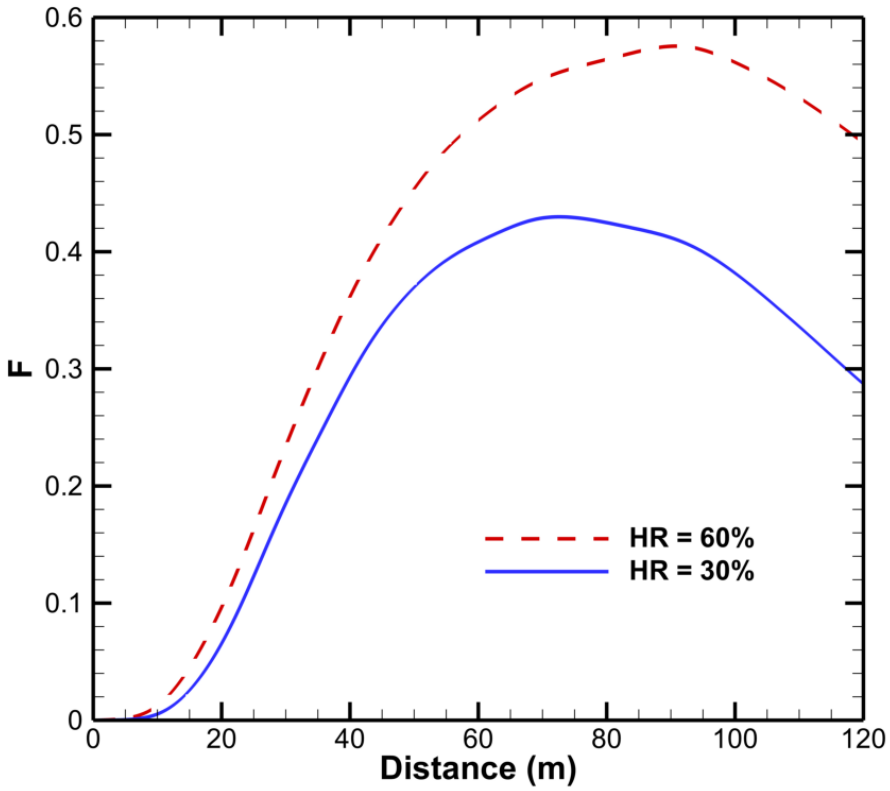

Figure 80 : Evolution de la fraction de particules situées dans une zone sursaturée en fonction de la distance derrière l'avion pour le cas $\mathrm{HR}_{liq} = 30\%$ et le cas $\mathrm{HR}_{liq} = 60\%$.

Afin d'étudier les conséquences de l'augmentation de l'humidité relative sur les taux de déposition de la vapeur d'eau sur les particules de glace, nous examinons l'évolution du rayon moyen des particules $\widetilde{r_p}(x)$ en fonction de la distance derrière l'avion. Nous rappelons que le rayon moyen de particule correspond à la moyenne des rayons de l'ensemble des particules sur une tranche à une distance x du panache. $\widetilde{r_p}(x)$ est calculé dans notre étude comme :

$$\widetilde{r_p}(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n_{cel}^{int}(x)} r_{p,i} N_{s,i} V_i}{\sum_{i}^{n_{cel}^{int}(x)} N_{s,i}\, V_i} \qquad \text{(III.5.2)}$$

Avec :

- $n_{cel}^{int}(x)$ le nombre de cellules internes du maillage dans le plan situé à la distance x ;
- $r_{p,i}$ le rayon des particules dans la cellule i ;
- $N_{s,i}$ la densité de particules dans la cellule i ;
- V_i le volume de la cellule i.

Chaque cellule du maillage contenant un nombre $N_{s,i}V_i$ de particules de rayon $r_{p,i}$, le rayon moyen correspond donc à une moyenne barycentrique des rayons des particules pondérée par leur nombre sur toute la section du panache se trouvant à la distance x. Le tracé de $\widetilde{r_p}(x)$, pour les deux cas d'humidité relative ambiante étudiés, est illustré sur la Figure 81 Les courbes montrent que le rayon moyen des particules augmente rapidement en sortie de tuyère en raison du refroidissement du panache. Puis un point d'inflexion apparaît à une distance d'environ $x = 80$ m, suggérant un début de stabilisation du rayon moyen des particules. L'écart des rayons moyens pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$ reste limité, avec un rayon moyen maximum égal à $\widetilde{r_p} = 520$ nm pour le cas à humidité élevée et $\widetilde{r_p} = 440$ nm pour le cas à humidité basse, soit un écart de 15% en prenant comme référence le cas $HR = 60\%$. Cela s'explique par le fait qu'il s'agit des particules situées au centre du panache qui contribuent majoritairement au calcul du rayon moyen des particules car les concentrations de particules et de vapeur d'eau disponible y sont les plus élevées. Or nous avons vu que le changement d'humidité relative n'apportait que peu de différence au centre du jet. Il convient cependant de noter que l'écart entre les deux cas étudiés se creuse à mesure que le panache se dilue, ce qui est cohérent car davantage d'air ambiant est entraîné dans le panache. Il est donc possible que l'écart de rayon moyen devienne significatif plus en aval dans le sillage de l'avion.

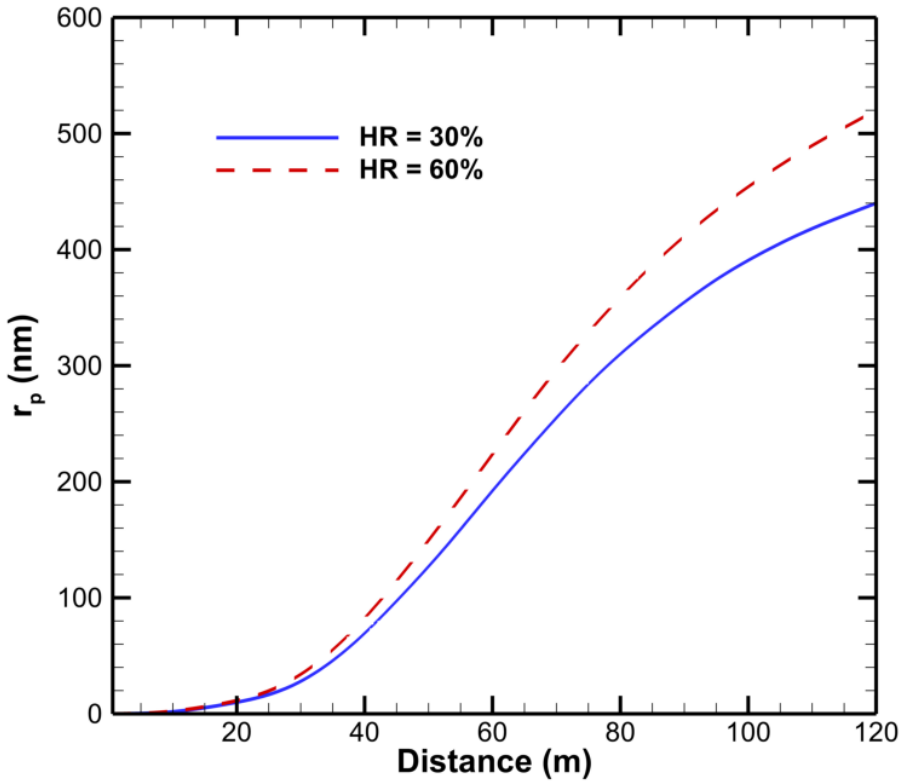

Figure 81 : Evolution du rayon moyen des particules en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$.

Les résultats montrent donc que dans les premiers instants du panache, l'humidité relative exerce davantage d'influence sur la concentration des cristaux de glace que sur leur diamètre moyen, en élargissant le panache de sursaturation en eau. Le tracé des distributions en taille des particules à $x = 120$ m (Figure 82) montre que les rayons maximaux atteints par la population de particules ne sont pas beaucoup plus élevées dans le cas $HR = 60\%$. Quant à l'écart type, il est légèrement plus faible, signifiant qu'il y a en proportion davantage de particules présentant un rayon élevé et au contraire moins de particules de petit rayon.

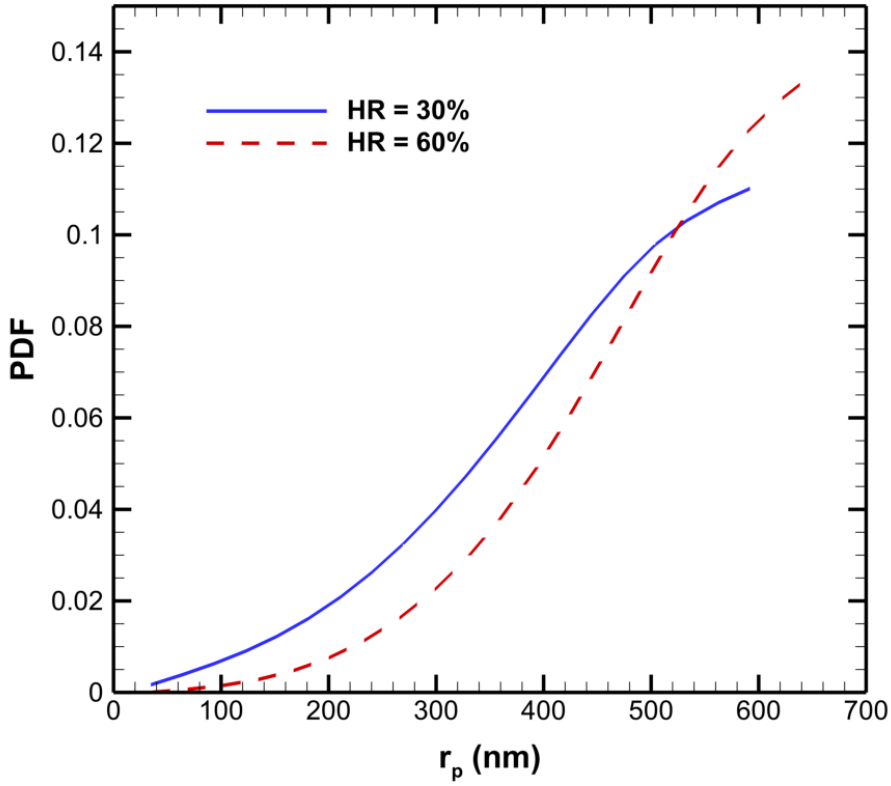

Figure 82 : Distribution en taille des cristaux de glace à $x/b = 4$ pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$.

Nous nous intéressons à présent aux épaisseurs optiques des traînées de condensation formées, montrées sur la Figure 83.

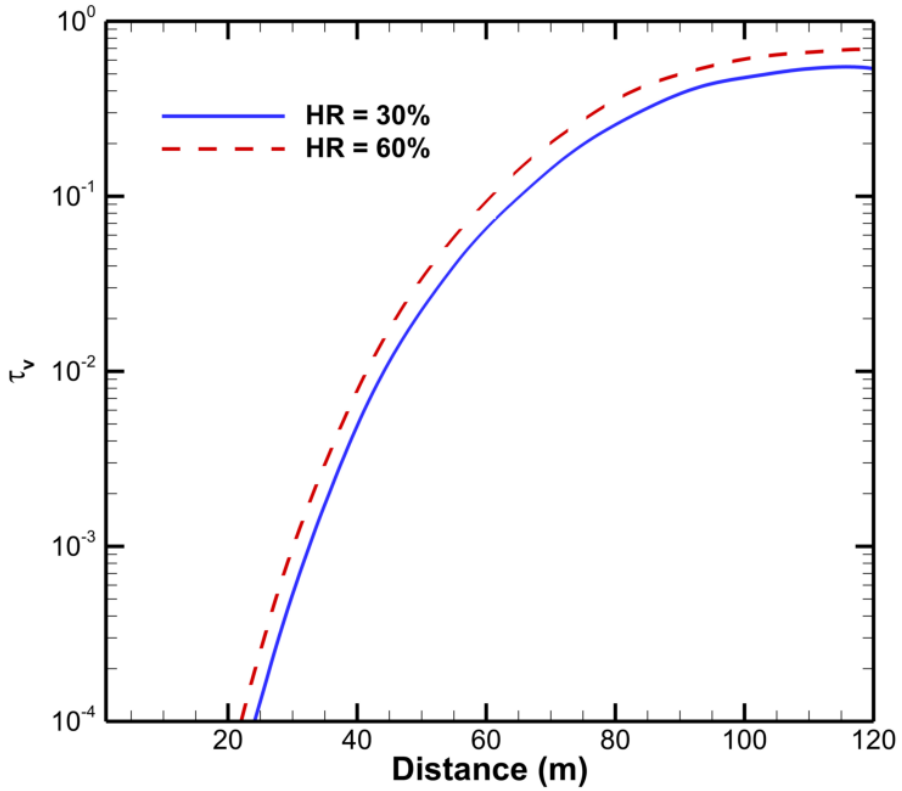

Figure 83 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$.

Le calcul des épaisseurs optiques révèlent des différences très faibles entre les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. Les tendances des deux courbes sont identiques et l'écart maximal est de seulement 20% pour une teneur en eau dans l'atmosphère doublée. Nous avons vu que l'augmentation de l'humidité relative agissait principalement sur le nombre de cristaux de glace formés et peu sur les rayons des particules (jusqu'à $t = 0{,}5$ s). Il semble donc que la différence de nombre de cristaux de glace induite par le passage d'une humidité relative de $HR = 30\%$ à $HR = 60\%$ ne soit pas assez élevée pour que l'épaisseur optique soit impactée significativement. En outre, à la lumière des tendances des courbes observées sur la Figure 83, il semblerait que l'écart d'épaisseur optique ne s'agrandisse pas plus en aval dans le sillage de l'avion. Même si l'influence de l'humidité relative devient plus importante à mesure que l'air ambiant est entraîné dans le panache, il semblerait que la diminution des concentrations des cristaux de glace dans les deux cas étudiés due à l'effet de la dilution est trop importante, pour que les différences dues au changement d'humidité relative ambiante se répercutent de manières significatives dans le calcul de l'épaisseur optique.

En conclusion, l'influence de l'humidité relative ambiante augmente avec la quantité d'air entraîné et donc avec l'âge du panache. Dans les premiers instants, elle agit davantage sur

la superficie des zones sursaturées et donc sur les concentrations de cristaux de glace que sur les rayons moyens des particules. Même si les différences de rayons des particules pourraient être significatives dans le champ lointain, il semblerait que la dilution du panache entraîne un impact limité de l'humidité relative ambiante sur l'épaisseur optique de la traînée de condensation formée. La superficie de cette dernière pourra en revanche varier significativement, à la lumière des différences observées dans le champ proche.

III.5.2 Teneur en soufre du carburant

Nous avons vu que les composés soufrés produits par la combustion du carburant jouent un rôle important, en particulier lorsque les teneurs en soufre sont élevées, dans le processus de formation des traînées de condensation. Les composés soufrés interviennent plus particulièrement dans le processus d'activation des suies. Toutefois, même si il est probable que d'autres processus participent également à cette activation, les connaissances dans ce domaine demeurent limitées. Par conséquent, nos simulations se concentrent sur le rôle du soufre. Sans ces composés, la surface des particules de suies restent hydrophobe, ce qui inhibe de manière importante le processus de condensation de la vapeur d'eau.

Nous nous proposons dans cette partie de comparer les résultats de simulations pour trois différentes teneurs en soufre du carburant.

III.5.2.1 Configurations des calculs

La simulation de référence correspond toujours à celle étudiée dans la partie III.4. Nous rappelons que la teneur en soufre du carburant était de 350 ppm par kilogramme de carburant. Nous choisissons de comparer les résultats obtenus avec ceux de deux autres simulations, correspondant à 700 ppm S/kg-fuel et à 5500 ppm S/kg-fuel respectivement. Ces valeurs ont été choisies sachant que les autorités civiles de régulation internationales limitent la teneur en soufre des kérosènes à 3000 ppm S/kg-fuel et que la teneur en soufre moyenne des carburants aéronautiques au niveau mondial est comprise entre 500 ppm S/kg-fuel et 800 ppm S/kg-fuel [*Taylor*, 2012]. Nous disposons donc d'un cas à basse teneur en soufre (350 ppm) correspondant aux objectifs de désulfuration pour la lutte antipollution, d'un cas de teneur en soufre se trouvant dans la moyenne mondiale (700 ppm) et d'un cas à très haute teneur en soufre (5500 ppm) dépassant les normes internationales.

III.5.2.2 Couverture surfacique des particules de suies

Les résultats des simulations numériques montrent que la modification de la teneur en soufre du carburant impliquant la modification de l'indice d'émission de SO_2 en sortie primaire du moteur n'altère pas le taux de conversion en SO_3 et en H_2SO_4 qui reste d'environ $\eta_c = 3{,}2\%$. Cela signifie que lorsque la teneur en soufre du carburant augmente, les concentrations des espèces SO_3 et H_2SO_4 dans le panache augmentent également. La Figure 84 montre cette

augmentation pour le cas de H_2SO_4. Le passage d'une teneur en soufre basse à une teneur en soufre plus élevé entraînera alors probablement une augmentation du taux d'adsorption et de la fraction surfacique de suie activée.

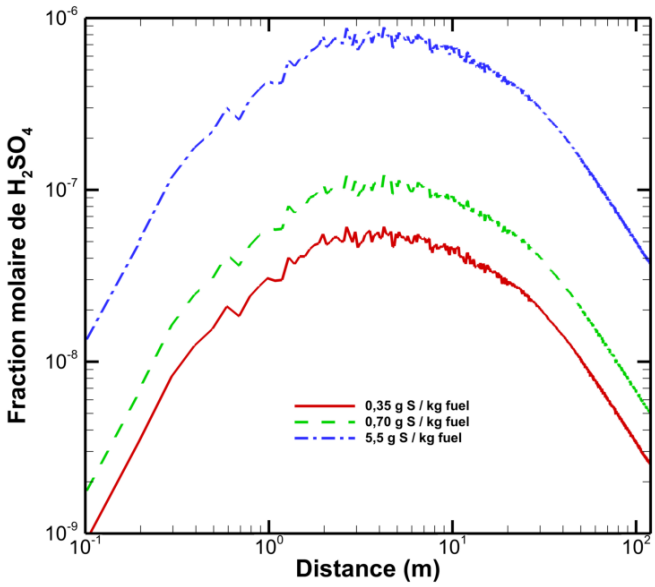

Figure 84 : Evolution de la fraction molaire de H_2SO_4 au centre du panache en fonction de la distance derrière l'avion pour trois différentes teneurs en soufre.

La Figure 85 montre l'évolution de la fraction surfacique activée des particules de suies au centre du panache en fonction de la distance en aval de l'avion pour les trois cas de teneur en soufre étudiés. Les trois courbes suivent les mêmes tendances, à savoir une augmentation rapide de la couverture des suies au début du panache et la convergence vers un palier ensuite. Le niveau de ce dernier étant propre à chaque cas de teneur en soufre. Par ailleurs, plus cette teneur est élevée et plus les particules de suies se trouvent activées étant donné que le taux d'adsorption dépend de la concentration des molécules soufrées. Ainsi, les fractions de surface activée obtenues par les calculs sont de 27%, 47% et 100% pour les cas à 350 ppm, 700 ppm et 5500 ppm respectivement. Les différences de couverture obtenues étant non négligeables, l'impact sur le taux de condensation de la vapeur d'eau sera significatif (voir la relation (II.4.42)).

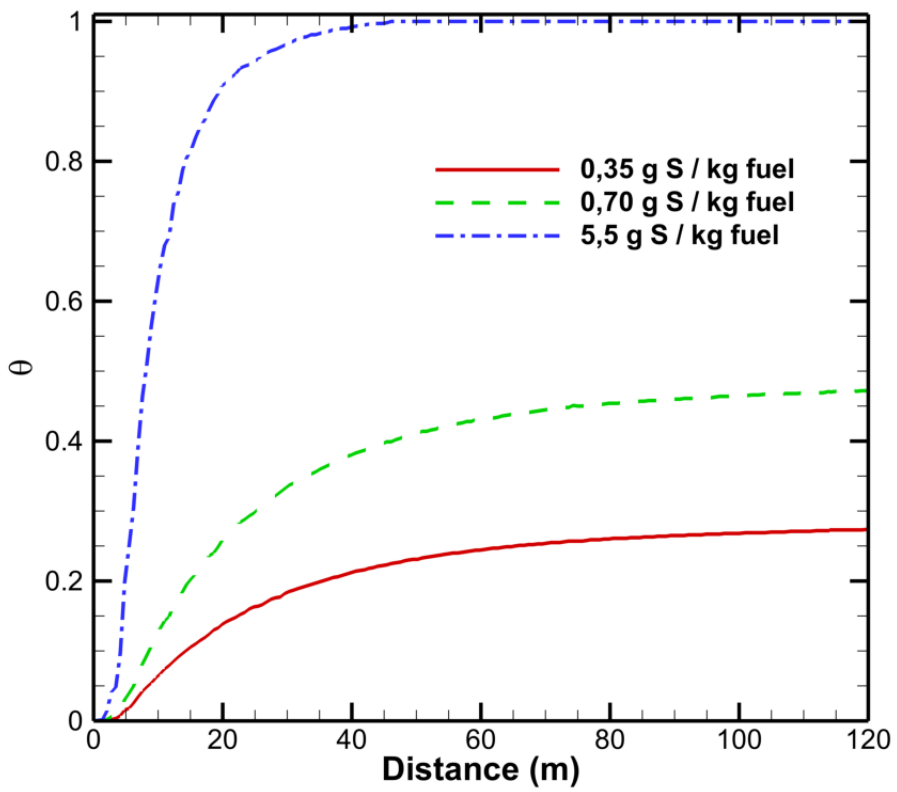

Figure 85 : Evolution de la fraction surfacique activée des particules de suies au centre du panache en fonction de la distance derrière l'avion pour trois différentes teneurs en soufre.

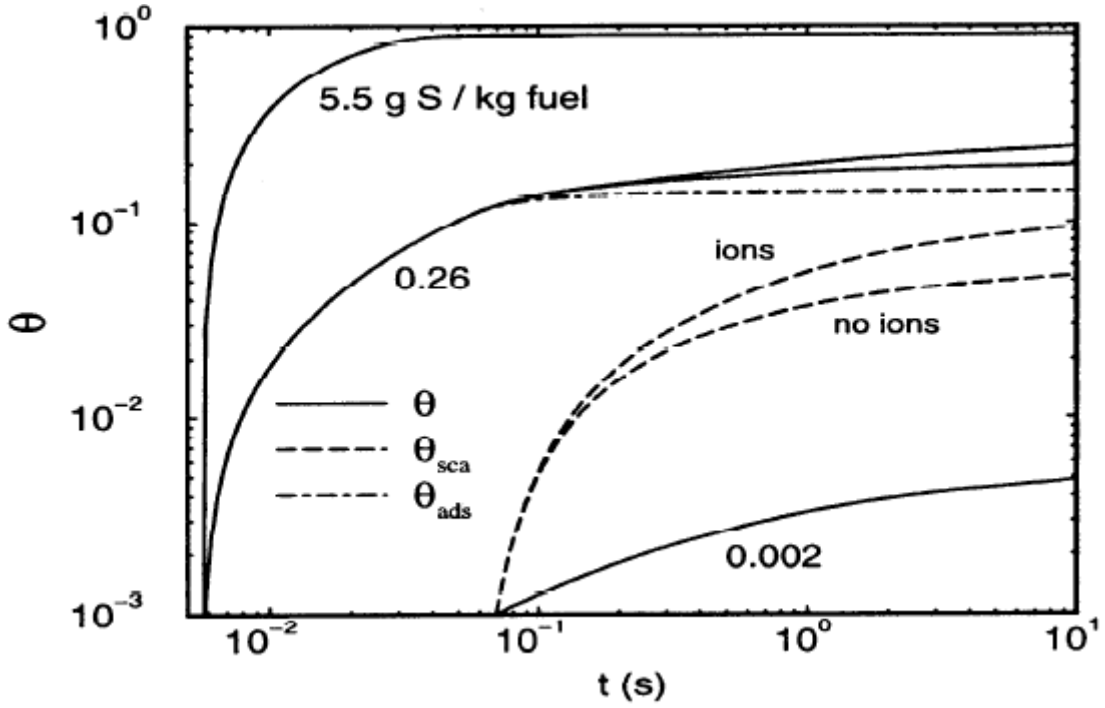

Figure 86 : Fraction surfacique activée des particules de suie obtenues par *Kärcher* [1998] pour différentes teneur en soufre. θ_{ads} correspond à la couverture due au processus d'adsorption et θ_{sca}, au processus de collecte.

Source : [*Kärcher*, 1998]

Les valeurs obtenues sont également en cohérence avec celles obtenues par des études 0D [*Kärcher*, 1998; *Wong et al.*, 2008] (voir Figure 86). Les tendances des courbes obtenues sont semblables, comme nous l'avons observé dans le paragraphe III.4.3.2. En outre, les auteurs observent les mêmes relations entre les différentes teneurs en soufre étudiées, à savoir une augmentation conséquente de la fraction activée avec l'augmentation de la teneur en soufre.

III.5.2.3 Caractéristiques des particules

Nous souhaitons à présent examiner dans quelle mesure l'augmentation de la surface activée des particules de suie affecte les différentes caractéristiques des cristaux de glace formés. Dans le modèle microphysique implanté dans le code CEDRE, la fraction de surface activée intervient dans le calcul du taux de condensation/évaporation de l'eau sur les particules de suies (voir relation (II.4.42)). De fait, le terme de condensation est proportionnel à la fraction de surface activée quelle que soit la taille de la particule en première approximation, ce qui constitue une hypothèse forte.

Cette hypothèse est illustrée sur le schéma de la Figure 87. Au départ du processus de croissance, la glace ne se dépose que sur la fraction de surface activée de la suie, qui est hydrophile, formant une calotte sur celle-ci. Dans notre modélisation, la glace est redistribuée sur l'ensemble de la particule, de manière à conserver sa sphéricité. Nous choisissons ensuite de conserver la fraction de surface hydrophile d'origine, en première approximation. Dans la réalité, une fois que la fraction de surface activée de la suie est recouverte de glace, cette dernière n'est pas redistribuée et la fraction de surface hydrophile a augmenté par rapport à la fraction de surface activée d'origine. Le rayon des particules de suie sèches étant négligeable devant le rayon final des cristaux de glace formés dans le panache, la fraction de surface hydrophile de la particule finit par être égale à 1 alors que cette fraction demeure constante dans notre modèle. Nous garderons par conséquent à l'esprit que cette hypothèse induit une minoration de la quantité de glace formée.

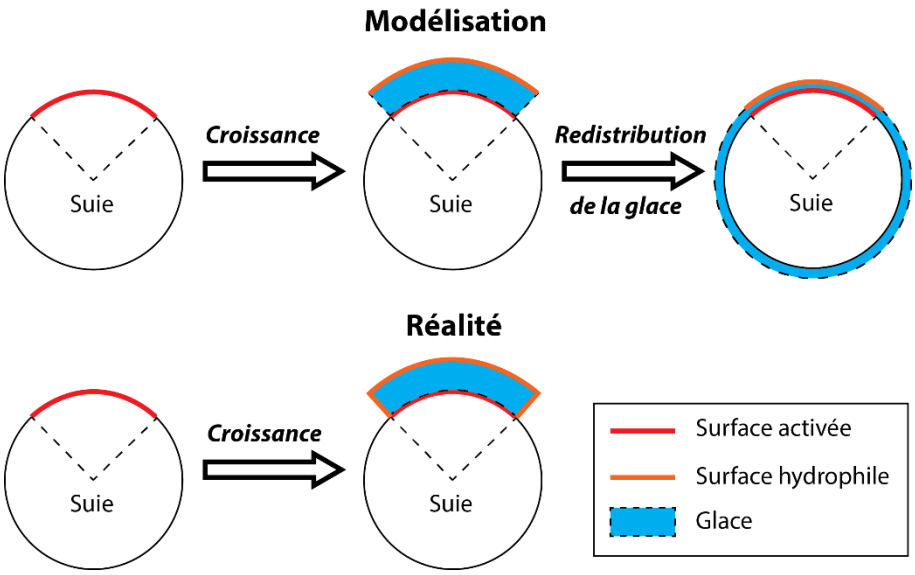

Figure 87 : Illustration schématique de l'approximation réalisée sur la surface hydrophile.

En l'absence de prise en compte de la formation de particules volatiles, qui constitue un terme puits pour la vapeur d'eau, la teneur en soufre du carburant influe peu sur la saturation en eau du panache avant la formation des cristaux de glace. La fraction de particules dans une zone sursaturée ne se trouve donc pas modifiée non plus. En outre, dans le cadre de notre modélisation, les molécules soufrées adsorbées étant réparties dans chaque cellule sur l'ensemble des suies de cette cellule, cela signifie que le nombre de cristaux de glace demeure inchangé entre les différents cas de teneur en soufre étudiés. Il convient de noter que les mesures expérimentales telles que celles de *Petzold et al.* [1997] montrent une légère augmentation du nombre de cristaux de glace lors de l'utilisation d'un carburant à plus haute teneur en soufre dans un panache âgé de moins de 2 secondes. Cela serait dû à la condensation de la vapeur d'eau sur les particules volatiles qui sont formées en plus grand nombre dans le cas à haute teneur en soufre. Ce mode de formation de cristaux de glace n'est pas pris en compte dans nos modélisations.

Dans nos études, seules les tailles des particules de glace peuvent être impactées par la teneur en soufre du carburant. La Figure 88 montre l'évolution des rayons moyens des particules dans le panache pour les trois teneurs en soufre en fonction de la distance derrière l'avion. Les tracés montrent des différences notables, avec une augmentation de 35% du rayon à 120 m pour une teneur en soufre de 700 ppm par rapport au cas de référence de 350 ppm et une augmentation de 83% pour une teneur en soufre de 5500 ppm. En outre, nous remarquons également que plus la teneur en soufre est élevée, plus les particules croissent tôt dans le panache. Cela s'explique par le fait que le passage à une teneur en soufre plus élevé augmente

la fraction de surface activée et donc le taux de croissance des particules, d'où une croissance plus rapide. Par ailleurs, le processus d'activation des particules se déroulant dans les premiers instants du panache, cela entraîne une différenciation très tôt entre les différents cas.

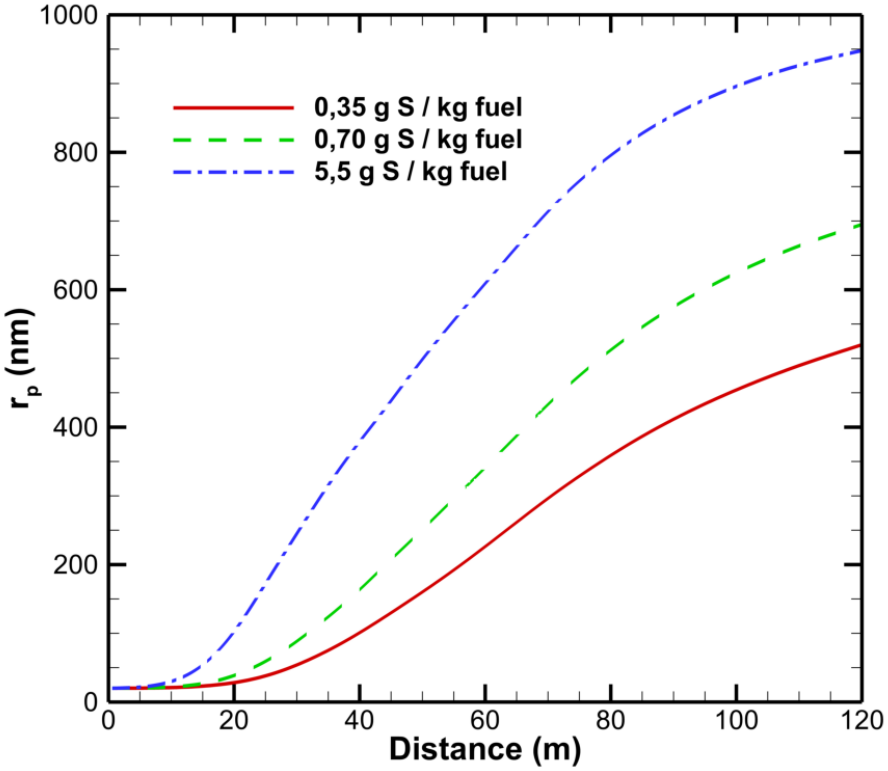

Figure 88 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre.

La distribution des tailles des particules à $x = 120$ m (Figure 89) montre que l'augmentation de la teneur en soufre conduit également à une proportion plus grande des particules les plus grosses. L'effet reste toutefois modéré lorsque la teneur en soufre passe de 350 ppm à 700 ppm, il devient notable à très haute teneur en soufre.

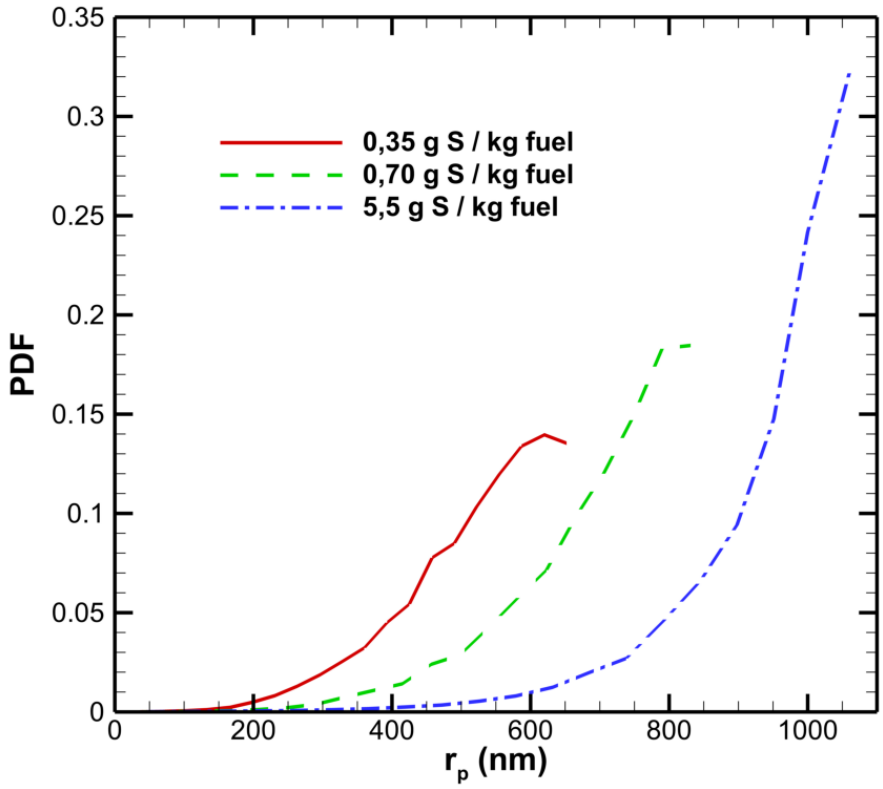

Figure 89 : Distribution en taille des particules dans le panache à $x = 120$ m pour différentes teneurs en soufre.

La Figure 90 permet d'examiner les conséquences des différentes teneurs en soufre du carburant sur l'épaisseur optique de la traînée de condensation formée. Elle montre notamment que la différence engendrée sur les premiers instants du panache entraîne de grands écarts sur les valeurs de l'épaisseur optique. Par exemple, à $x = 20$ m, l'épaisseur optique n'atteint pas encore $\tau_v = 10^{-4}$ dans le cas à 350 ppm alors qu'elle est de $\tau_v = 2 \cdot 10^{-4}$ dans le cas à 700 ppm. Dans le cas à 5500 ppm, la valeur de l'épaisseur optique est supérieure de plusieurs ordres de grandeur à celle obtenue pour les deux autres cas. En prenant comme référence le cas à 350 ppm, l'épaisseur optique à $x = 120$ m augmente de 28% à 700 ppm et de 42% à 5500 ppm. Ceci s'explique par l'effet de la dilution qui impacte de plus en plus la valeur de τ_v (voir relation (III.4.3)). En effet, bien que les écarts les plus importants concernant les rayons de particules soient atteints à $x = 120$ m, les conséquences sur l'épaisseur optique sont atténuées en raison de la baisse importante de la concentration des particules par rapport aux premiers instants de la vie du panache. De fait, dans le cadre de notre modélisation, l'épaisseur optique dans les cas à plus hautes teneurs en soufre sera toujours supérieure à celle dans les cas à basses teneur en soufre car les rayons des cristaux de glace y sont plus élevés et les concentrations identiques. Toutefois, la différence sera bien plus visible dans les premiers

instants du panache car la concentration des particules est élevée. La baisse sensible des concentrations des particules à des distances plus grandes a alors pour effet de diminuer l'importance relative des rayons de particules dans le calcul de l'épaisseur optique, conduisant à des écarts moindres.

Il convient de préciser que les observations expérimentales [*Schumann et al.*, 1996; *Petzold et al.*, 1997] tendent à montrer que l'épaisseur optique des traînées de condensation à haute teneur en soufre devient en réalité inférieure à celui des traînées de condensation à basse teneur en soufre à partir d'une certaine distance. Cela s'expliquerait par l'augmentation du nombre de particules volatiles produites par l'utilisation d'un carburant à haute teneur en soufre. La répartition de la même quantité de vapeur d'eau disponible sur l'ensemble des particules (suies et particules volatiles) aboutirait ainsi à des rayons de particules plus petits dans le cas à haute teneur en soufre. Lorsque l'air du panache n'est plus saturé en eau, les plus petites particules s'évaporent plus rapidement, conduisant à une baisse également plus rapide de l'épaisseur optique.

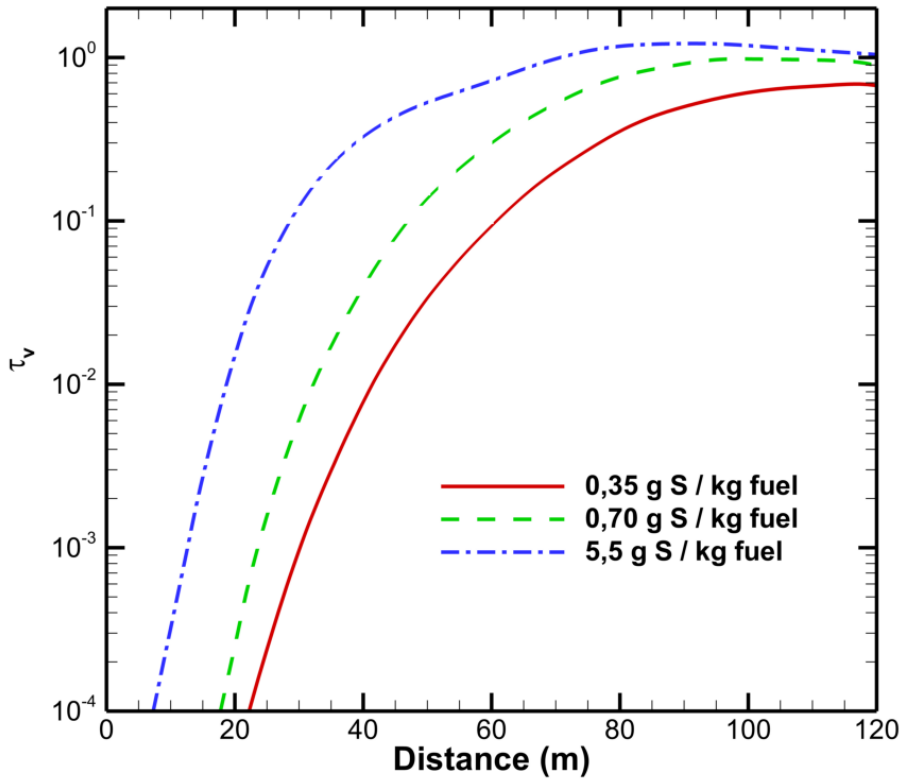

Figure 90 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre.

Nous nous intéressons à présent à la visibilité des traînées de condensation formées. Nous rappelons que le critère de visibilité retenu est tel que $\tau_v > 0{,}01$. Ainsi, la teneur en soufre du carburant ne semble pas être un facteur déterminant pour l'atteinte de ce critère car le seuil est largement dépassé dans les trois cas étudiés. Nous n'excluons toutefois pas l'existence de cas limites dans lesquelles la teneur en soufre pourrait être un facteur discriminant.

En revanche, la teneur en soufre impactant de manière importante l'épaisseur optique dès le début de la formation du panache, nous pouvons observer des écarts significatifs quant aux distances d'apparition des traînées de condensation (voir Figure 91). Ainsi, plus la teneur en soufre du carburant est élevée, plus la traînée de condensation devient visible tôt en sortie du moteur. En effet, la traînée de condensation apparaît presque deux fois plus loin du moteur dans le cas à 350 ppm, en comparaison avec le cas à 5500 ppm. Ce résultat est en cohérence avec les observations expérimentales de *Schumann et al.* [1996]. En utilisant des carburants à teneur en soufre différente pour chaque moteur de l'ATTAS, les auteurs montrent que la traînée de condensation correspondant au carburant à haute teneur en soufre apparaît plus tôt (voir Figure 92).

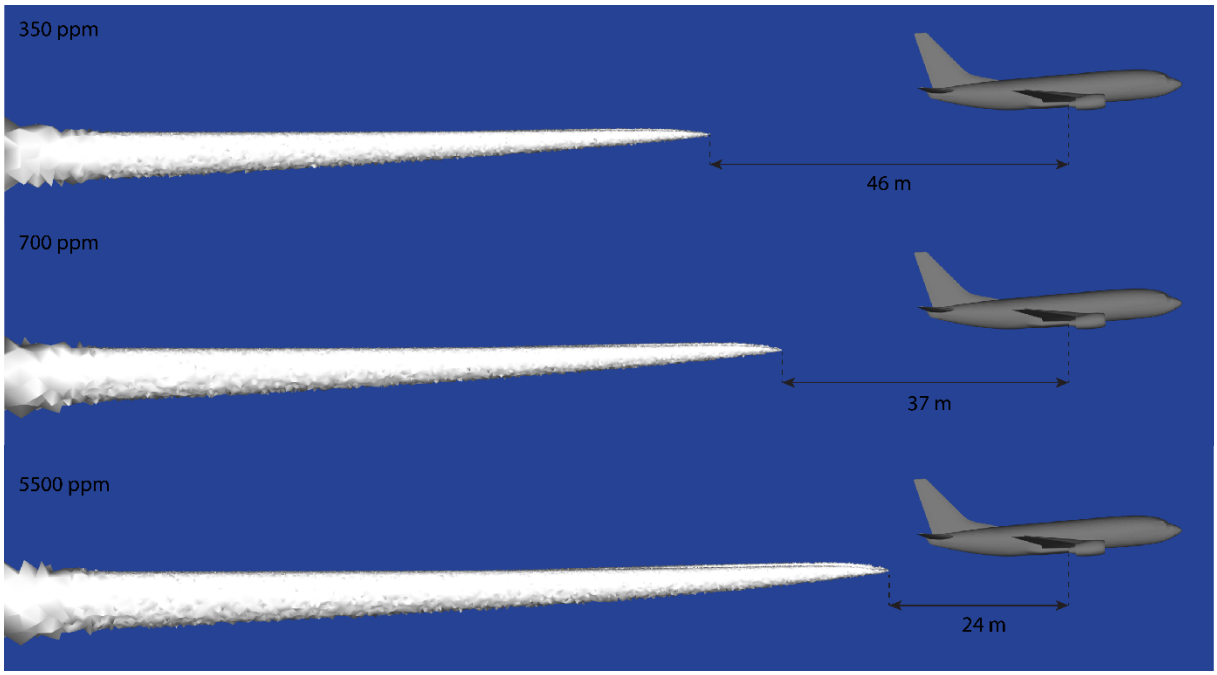

Figure 91 : Visualisation des traînées de condensation visibles ($\Delta\tau_v > 0{,}01$) pour différentes teneurs en soufre.

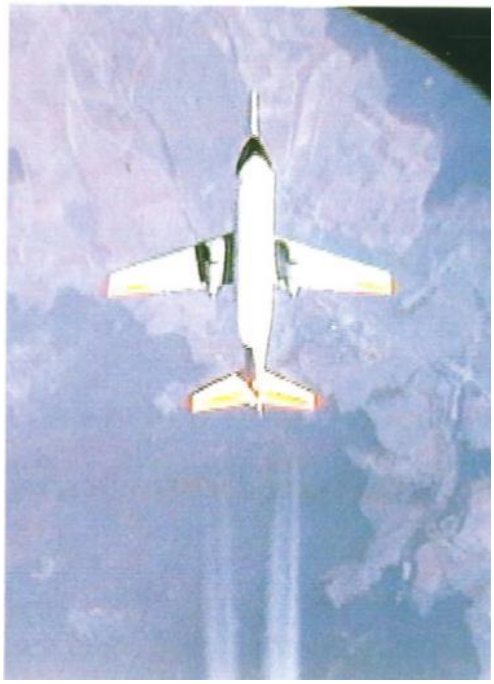

Figure 92 : Photographie des traînées de condensation issues de l'avion ATTAS à une distance de 50 m vues du dessus. Les moteurs consomment des carburants avec différentes teneurs en soufre (170 ppm à gauche, 5500 ppm à droite).

Source : [*Schumann et al.*, 1996]

Les traînées de condensation pour les cas à plus hautes teneurs en soufre deviennent également plus étendues. La Figure 93 montre que les différences de superficie des traînées de condensation entre les trois cas de teneur en soufre étudiés restent quasi-constantes, d'environ 10 m^2 entre les cas à 350 ppm et 700 ppm et d'environ 7 m^2 entre les cas à 700 ppm et 5500 ppm. Les observations de *Schumann et al.* [1996] vont également dans ce sens, en indiquant une superficie de la traînée de condensation supérieure de 10 à 20% pour le cas à haute teneur en soufre à une distance inférieure à 90 m derrière le moteur. Par ailleurs, les tendances observées sur les courbes d'évolution de la superficie de la traînée de condensation semblent indiquer que les écarts sont conservés en aval du champ étudié.

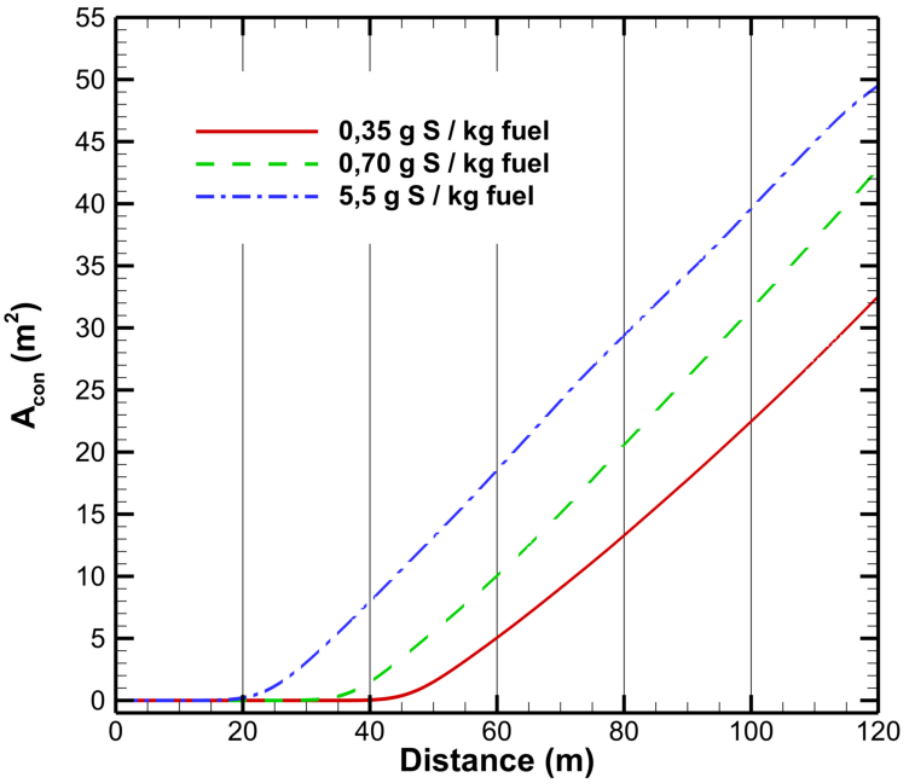

Figure 93 : Evolution de la superficie de la traînée de condensation visible en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre.

Enfin, au vu des valeurs d'épaisseur optique obtenues, les traînées de condensation formées à haute teneur en soufre devraient de plus être plus opaques pour les cas de plus hautes teneurs en soufre, même si l'opacité n'est pour le moment pas encore intégrée dans le traitement de nos visualisations 3D. Ce résultat est également confirmé par les observations de *Schumann et al.* [1996], qui notent que la traînée de condensation à haute teneur en soufre est plus sombre vue du dessus, indiquant une plus faible transmission de la lumière réfléchie par les nuages situés en-dessous de la traînée de condensation. L'introduction des propriétés de transparence et de contraste dans les isovolumes en fonction de l'épaisseur optique permettrait de rendre compte de cet effet.

III.5.3 Diamètre des particules de suie

Dans cette sous-partie, nous analysons l'influence de la taille des particules de suies sèches éjectées par les moteurs sur le processus de formation des traînées de condensation. La combustion du kérosène dans les moteurs aéronautiques produit des particules de suies présentant typiquement des rayons de quelques dizaines de nanomètres [*Petzold et Schröder*, 1998]. Nous cherchons dans cette étude à savoir si la variabilité révélée par la mesure de la taille des particules de suie a une influence significative sur les propriétés des traînées de condensation.

III.5.3.1 Configurations des calculs

Des mesures récentes de distributions en tailles des particules de suie en régime de croisière [*Lobo et al.*, 2015] montrent qu'elles présentent des rayons compris entre 15 nm et 30 nm. Dans la simulation de référence (voir partie III.4), nous avons fixé la valeur du rayon des particules de suies en sortie de moteur à $r_s = 20$ nm. Afin d'examiner l'éventuel impact de la taille des particules de suie sur les caractéristiques des trainées de condensation formées, nous comparons les résultats de la simulation de référence avec une simulation identique, exceptée pour la valeur du rayon des particules de suies éjectées par le moteur et qui vaut $r_s = 40$ nm. Cela signifie que le volume, et donc également l'indice d'émission en masse des particules de suies sont multipliés par huit par rapport au cas $r_s = 20$ nm.

III.5.3.2 La saturation et l'activation des particules de suies

Le tracé de l'évolution de la fraction de surface activée des particules de suie (Figure 94) montre qu'elle demeure quasi identique bien que le rayon des particules de suie sèche ait doublé. L'augmentation de la taille des particules, offrant une plus grande surface disponible pour l'adsorption des molécules soufrées, aurait pu engendrer une fraction de surface activée moins importante si le nombre de molécules soufrées était limité. Toutefois, le peu de différence observé entre les deux cas présentés ici signifie que les espèces soufrées sont en abondance de manière à ce que le processus d'activation des suies ne soit pas impacté par leur taille.

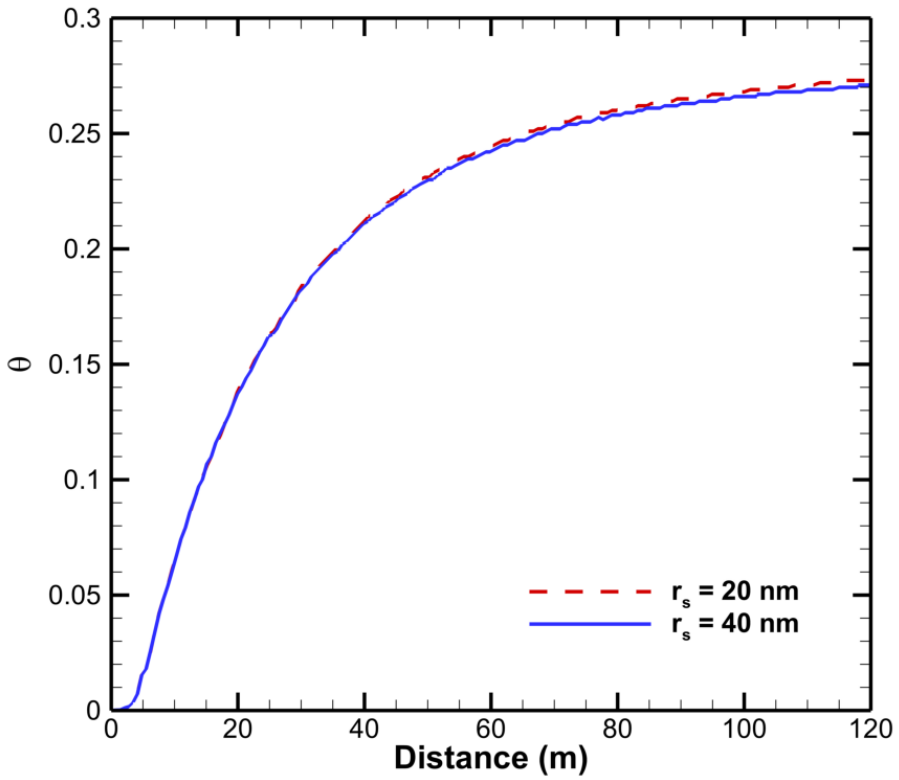

Figure 94 : Evolution de la fraction surfacique de suie activée au centre du jet en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents.

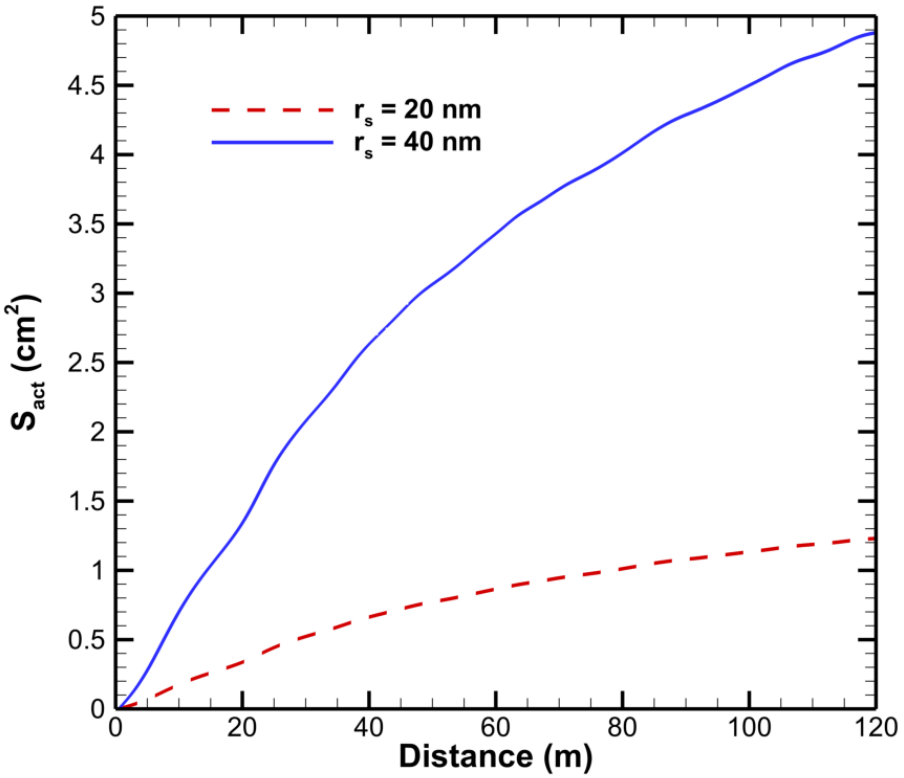

Figure 95 : Evolution de la surface totale activée des particules de suies dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents.

Néanmoins, la fraction de surface activée étant quasiment identique dans les deux cas de rayon de suie sèche, cela signifie que la surface disponible pour la condensation est multipliée par quatre lorsque le rayon des particules de suie sèche est doublé. Le tracé de la surface totale activée pour les deux rayons de particules de suie sèches (voir Figure 95) montre que ce facteur reste constant quel que soit la distance en aval de l'avion.

III.5.3.3 Caractéristiques des cristaux de glace

La Figure 96 montre l'évolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour les deux cas étudiés. Les différences sont observables seulement au début du panache, les tailles des particules devenant quasi identiques à partir de $x = 40$ m. L'écart entre les valeurs du rayon des particules en sortie de moteur correspond évidemment à la différence entre les tailles des particules de suie sèches. Lors de la croissance des particules, la condensation de la vapeur d'eau dans le cas $r_s = 40$ nm n'est pas suffisamment importante par rapport au cas $r_s = 20$ nm pour que l'écart de taille soit amplifié et tend même à se résorber. Ce résultat semble par ailleurs montrer que l'effet Kelvin n'a que peu d'influence sur le début de la croissance des particules. Nous rappelons que l'effet Kelvin correspond à la variation de la pression de vapeur saturante au voisinage d'une surface courbée. La pression de vapeur nécessaire pour que l'eau se condense sur une petite particule est alors plus élevée. Cependant, les différences de diamètre ne sont pas assez significatives pour que l'effet soit visible dans les cas étudiés ici.

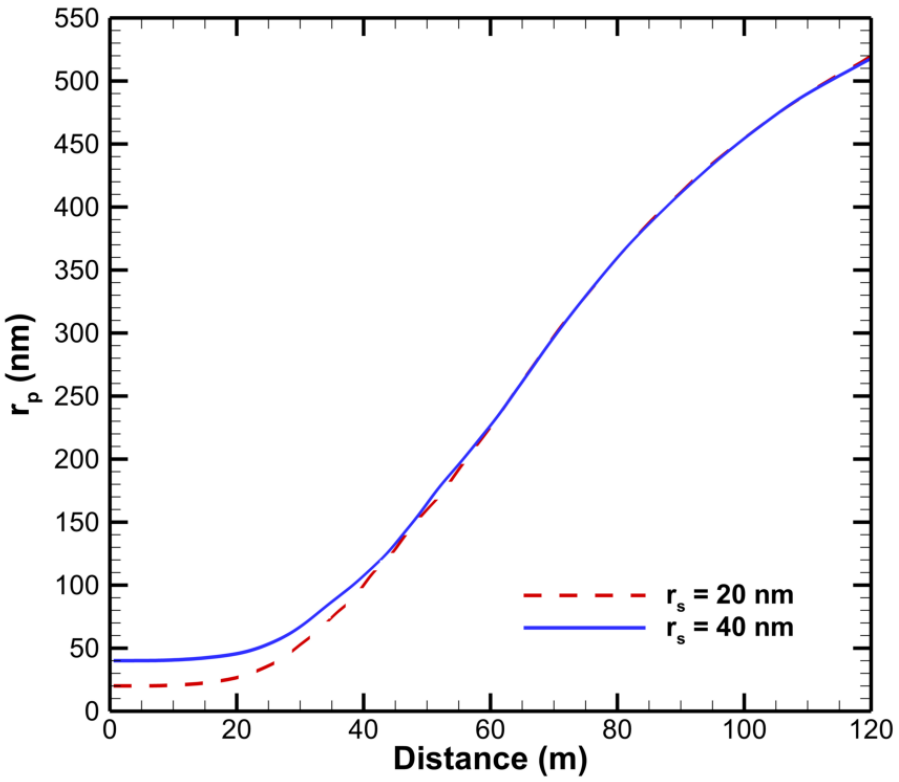

Figure 96 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents.

Enfin, la Figure 97 montre l'évolution de l'épaisseur optique du panache pour les cas $r_s = 20$ nm et $r_s = 40$ nm. Elle montre que la seule différence observable se trouve dans les premiers instants de la vie du panache, où les cristaux de glace formés à partir de suies sèches plus grosses induisent une épaisseur optique plus élevée.

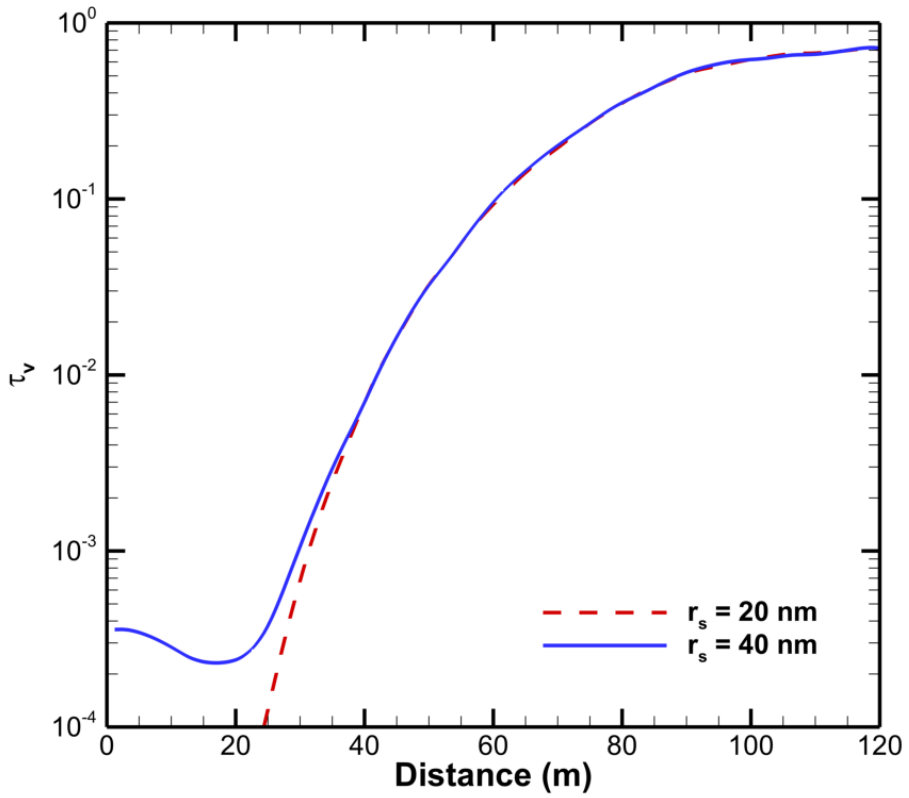

Figure 97 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance en aval de l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents.

En résumé, si la variation de la taille des particules de suies émises dans l'atmosphère a un impact sur la formation des traînées de condensation, celui-ci ne sera probablement observable que dans les premiers instants du panache, soit avant deux envergures dans le sillage de l'avion. En outre, cet impact restera vraisemblablement limité à la lumière des cas que nous avons étudiés. La taille des particules de suies émise ne semble donc pas être un facteur déterminant dans les propriétés de formation des traînées de condensation.

III.5.4 Densité de particules de suie

L'utilisation de carburants alternatifs pour des raisons telles que la sécurité de l'approvisionnement, la stabilité des prix ou encore le développement durable, devrait faire chuter considérablement les quantités de particules de suie émises dans l'atmosphère par les moteurs d'avions. *Beyersdorf et al* [2014], dans le cadre du projet AAFEX (*Alternative Aviation Fuel EXperiment*), mesurent ainsi des réductions d'indice d'émission en nombre de particules de suie de plus de 84% pour le carburant Fischer-Tropsch quel que soit le régime du moteur. Dans cette partie, nous souhaitons étudier les possibles conséquences d'une telle réduction d'émission en nombre de suie sur les caractéristiques des traînées de condensation formée, avec l'étude comparative entre deux simulations initialisées avec des indices d'émission de suies différents.

III.5.4.1 Configurations des calculs

Nous reprenons comme cas de référence la simulation présentée dans la partie III.4, correspondant à une concentration de particules de suie émises en sortie primaire du moteur de $N_s = 10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$. Il s'agit d'une valeur standard, s'inscrivant dans la moyenne de la flotte mondiale.

Afin d'étudier les possibles conséquences sur la formation et les propriétés des cristaux de glace par voie hétérogène et les traînées de condensation formées, nous comparons les résultats du calcul de référence à ceux d'une simulation identique, à l'exception de l'indice d'émission en nombre de suies, plus faible, correspondant à $N_s = 10^{11}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$. Un écart d'un ordre de grandeur sépare donc les deux cas, correspondant à une baisse de 90% du nombre de particules de suies émises. Cela correspond approximativement à la baisse d'indice d'émission de suie en nombre constatée par l'utilisation d'un carburant alternatif issu de la biomasse, par rapport à un carburant standard.

Kärcher et Yu [2009] montrent que lorsque les particules de suies sont émises en très faibles quantité dans le panache, la majorité des cristaux de glace est formée par voie homogène, i.e. sans contact avec des suies. Or, la nucléation homogène n'est pas prise en compte dans nos modèles microphysiques. Toutefois, les auteurs montrent que pour un indice d'émission de suies en nombre $EI_s > 10^{14}\ \# \cdot \text{kg-fuel}^{-1}$, correspondant à une concentration de suie en sortie de moteur de notre étude de $N_s = 2{,}3 \cdot 10^{11}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$, la majorité des cristaux de glace sont

formées par voie hétérogène. La nucléation hétérogène, qui est celle pris en compte dans nos modèles devrait donc être le processus dominant pour une concentration de suie en sortie de moteur de $N_s = 10^{11}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$.

III.5.4.2 La saturation et l'activation des particules de suie

Dans un premier temps, nous souhaitons savoir la fraction $F(x)$ de particules se trouvant dans une zone sursaturée est conservée lorsque l'indice d'émission de particules de suie est modifié. La Figure 98 de gauche montre que cette fraction est identique dans les deux cas jusqu'à $x = 70$ m environ. À partir de cette distance, nous pouvons observer les premiers écarts entre les deux cas, la fraction de particules de suie dans une zone sursaturée devient supérieure dans le cas pauvre en particule de suie. Cela s'explique par l'existence d'une compétition entre les particules de suie pour la vapeur d'eau disponible dans le panache. La Figure 99 montre en effet que la superficie du panache sursaturée est inférieure dans le cas riche en particules de suie à partir de $x = 70$ m, indiquant que davantage de vapeur d'eau s'est condensée à la surface des suies. L'effet reste toutefois relativement limité dans les cas étudiés ici. En prenant pour référence le cas $N_s = 10^{12} \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$, nous calculons une augmentation de F de 12% à $x = 120$ m. Il semblerait toutefois en examinant les tendances des courbes, que l'écart continuerait de se creuser plus en aval dans le sillage de l'avion.

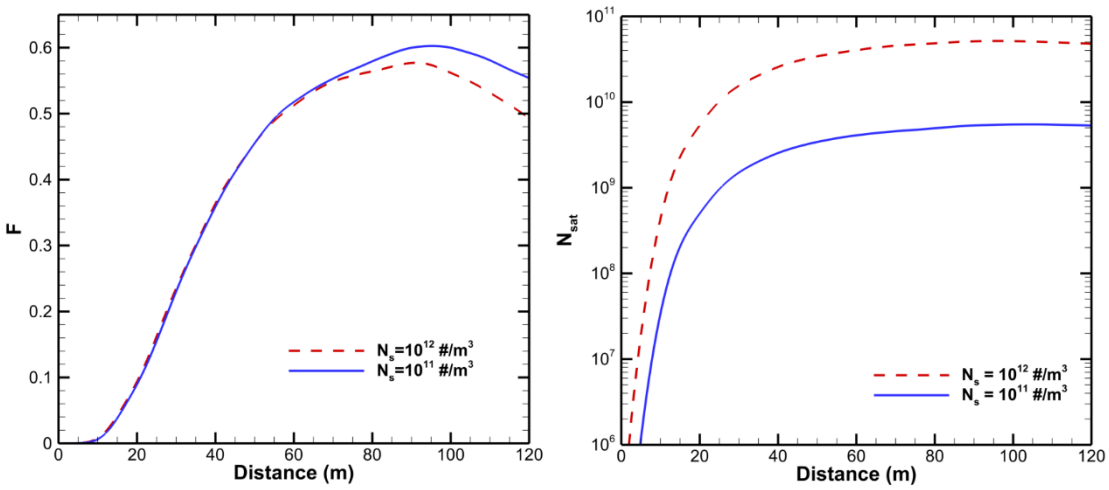

Figure 98 : Evolution des fractions de particules se trouvant dans une zone sursaturée (à gauche) et des nombres de particules se trouvant dans une zone sursaturée (à droite) en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émission de particules de suie différents.

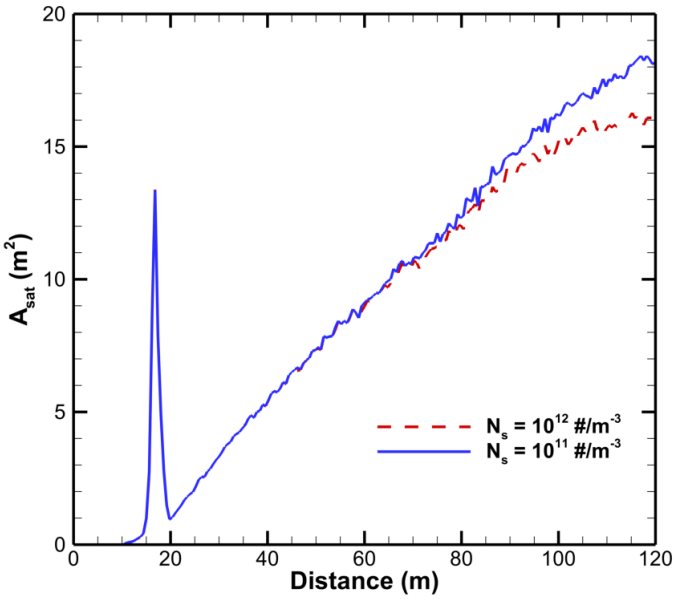

Figure 99 : Evolution de la superficie du panache sursaturé en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émission de particules de suie différents.

En somme, dans les 4 premières envergures derrière la sortie du moteur, le nombre de particules de suies se trouvant dans une zone sursaturée est quasi proportionnel à l'indice d'émission de particules de suie dans les deux cas étudiés ici. La Figure 98 de droite montre une diminution de 90% de particules se trouvant dans une zone sursaturée dans le cas avec $N_s = 10^{11}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$ à $x = 120$ m. Par conséquent, il devrait également se former moins de cristaux de glace dans le panache lorsque l'indice d'émission des particules de suies baissent.

En ce qui concerne les processus d'activation, les résultats montrent que la fraction surfacique de particules de suie activée est identique pour les deux cas étudiés. Cela signifie que pour une teneur en soufre de 350 ppm, les espèces soufrées sont en abondance suffisante pour que le processus d'adsorption soit indépendant de la concentration de particules de suie. Finalement, à l'instar du nombre de particules présentes en zone sursaturée, la surface totale disponible pour la condensation de la vapeur d'eau se trouve être proportionnelle à la concentration des particules de suie dans les cas étudiés. Ce résultat n'est valable que dans les limites des cas étudiés ici, à savoir pour des teneurs en soufre supérieures à 350 ppm et une concentration de particules de suies en sortie primaire inférieure à $10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$. Toutefois, au vu des quantités négligeables de molécules soufrées adsorbées à la surface des particules de suie dans tous les cas étudiés, il semblerait que les espèces soufrées soient dans la majorité des cas en abondance par rapport à la surface de suie adsorbable.

En conclusion de cette analyse de l'état des particules de suies, nous déduisons que la baisse du nombre de suies émises produit une baisse proportionnelle de la concentration de cristaux de glace dans la traînée de condensation. Ce résultat n'est valable que dans le cas où la vapeur d'eau est en quantité suffisante pour limiter le phénomène de compétition dans le cas riche en suie. Ce résultat est confirmé par les études expérimentales en laboratoire de *Wong et al.* [2013], en reproduisant dans une chambre appelée PAL (*Particle Aerosol Laboratory*) les conditions de formation d'une traînée de condensation. En faisant varier la densité initiale de suie injectée dans la chambre dans les conditions standards de l'atmosphère à 12 km d'altitude entre 10^6 et 10^{12} $\# \cdot \mathrm{m}^{-3}$, les auteurs montrent que les concentrations de cristaux de glace varient dans le même sens que la densité initiale de particules de suie injectée.

III.5.4.3 Caractéristiques des cristaux de glace

La Figure 100 montre que les évolutions des rayons moyens des particules dans le panache sont également quasi-identiques pour les deux indices d'émission de particules de suie étudiés. Nous obtenons donc des rayons moyens de 520 nm pour le cas $N_s = 10^{12}$ $\# \cdot \mathrm{m}^{-3}$et de 540 nm lorsque la concentration initiale de suie est divisée par un facteur 10. Dans ces deux cas étudiés, la fraction de particules se trouvant dans une zone sursaturée et la fraction de surface activée étant identique, le taux de condensation est donc finalement proportionnel à la concentration de particules.

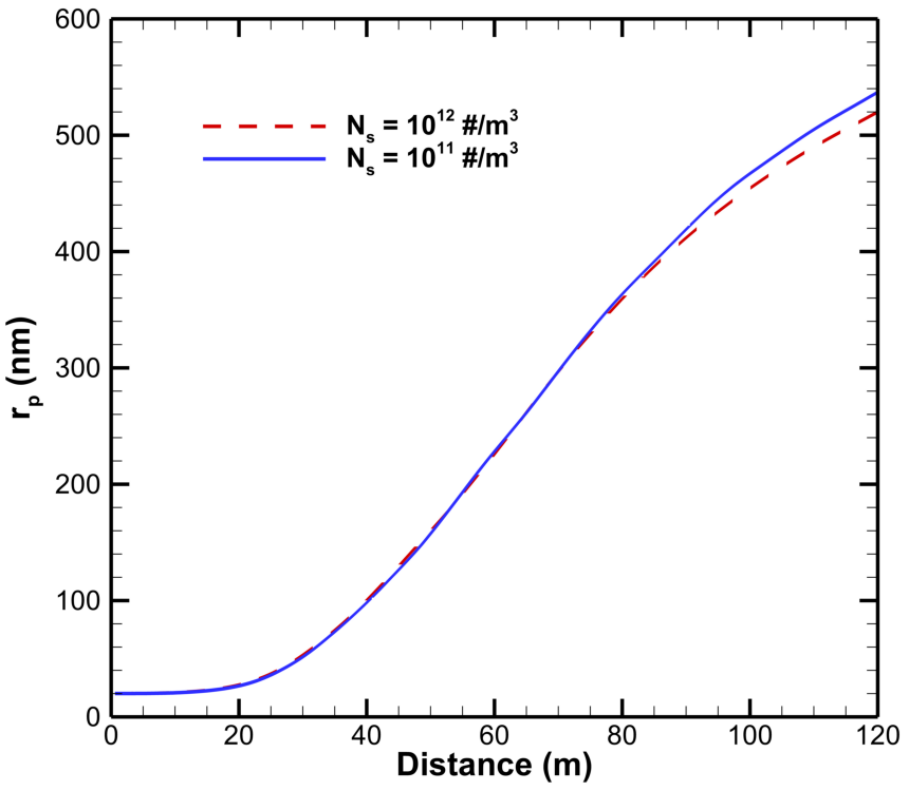

Figure 100 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents.

Il convient de préciser une nouvelle fois que ce résultat n'est valable que lorsque la vapeur d'eau se trouve en abondance et de ce fait, ne limite pas le processus de condensation lorsque la surface disponible est plus élevée. En effet, si la vapeur d'eau disponible se trouve en quantité limitée, la plus grande consommation de la vapeur d'eau dans le cas riche en suies pourrait entraîner une diminution significative de la pression de vapeur comparativement au cas pauvre en suies. L'écart entre les taux de condensation des deux cas étudiés augmenterait alors progressivement à mesure que la vapeur d'eau contenue dans l'air est consommée. C'est par ailleurs ce que nous pouvons observer dans la Figure 100 à partir de $x = 75$ m où la vapeur d'eau disponible commence à manquer dans le cas $N_s = 10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$. Un processus de compétition entre les particules de suie pour la vapeur d'eau s'installe, entraînant un rayon moyen de particule plus faible dû à un taux de condensation moins élevé. Cet écart, qui reste limité dans les cas étudiés ici, serait probablement accru dans des cas comportant moins de vapeur d'eau disponible dans le panache, sachant que celle-ci provient soit des effluents, soit de l'humidité ambiante. À titre d'information, la quantité de vapeur d'eau dans le champ proche étudié provient essentiellement des effluents, l'indice d'émission de vapeur d'eau étant de $1{,}34\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ dans les cas étudiés ici. Le phénomène de compétition pour la vapeur d'eau est mis en évidence dans les études expérimentales de *Wong et al.* [2013] dans le cas d'une densité

initiale de suie très élevée. Les auteurs mesurent une diminution notable des tailles des cristaux de glace dans le PAL lorsque la densité initiale de particules de suie injectées devient supérieure à $10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$.

Finalement, dans les deux cas étudiés ici, seules les concentrations de cristaux de glace sont significativement impactées par la modification de l'indice d'émission de particules de suie en nombre. Ce changement de concentration de cristaux a néanmoins un impact important sur l'épaisseur optique de la traînée de condensation formée, comme le montre la Figure 101. Dans la mesure où les différences de rayon de particules calculés sont négligeables, la chute de la quantité de cristaux de glace entraîne une baisse linéaire de l'épaisseur optique (voir la relation (II.4.3)), qui passe de $\tau_v = 0{,}7$ pour $N_s = 10^{12}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$ à $\tau_v = 0{,}08$ pour $N_s = 10^{11}\ \# \cdot \mathrm{m}^{-3}$ à $x = 120$ m. Cela représente une baisse notable de 89% de l'épaisseur optique. Dans le cas à indice d'émission pauvre en particules de suie, la traînée de condensation formée reste toujours visible car le critère de visibilité $\tau_v > 0{,}01$ est satisfait. Toutefois, la lumière est beaucoup moins diffusée par les cristaux de glace, rendant la traînée de condensation moins opaque.

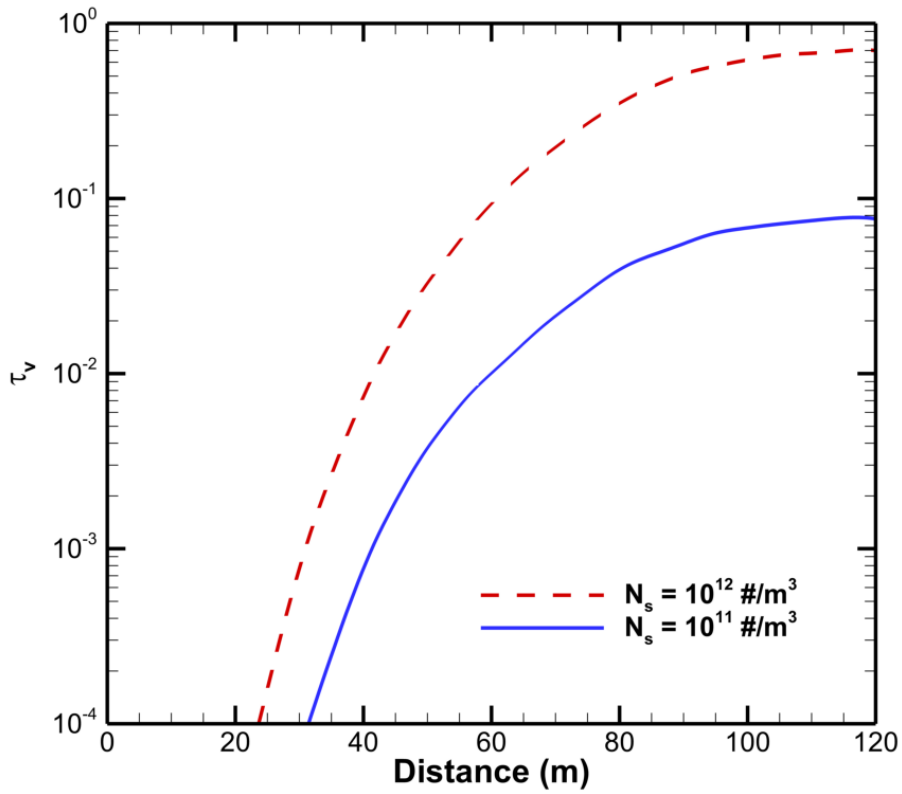

Figure 101 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents.

En outre, la Figure 102 montre que la traînée de condensation apparaît plus tardivement lorsque l'indice d'émission de particule de suie est divisé par un facteur 10. La superficie de la traînée de condensation se trouve aussi réduite. Son tracé sur la Figure 103 montre en effet que l'écart entre les superficies s'agrandit à mesure que la traînée de condensation se développe. Dans le cas pauvre en particules de suie, la superficie de la traînée de condensation est de $A_{con} = 9\ \mathrm{m}^2$ à $x = 120$ m, soit 71% de moins comparé au cas riche en particules de suie. De plus, les courbes semblent suggérer que l'écart continue de se creuser plus en aval derrière l'avion.

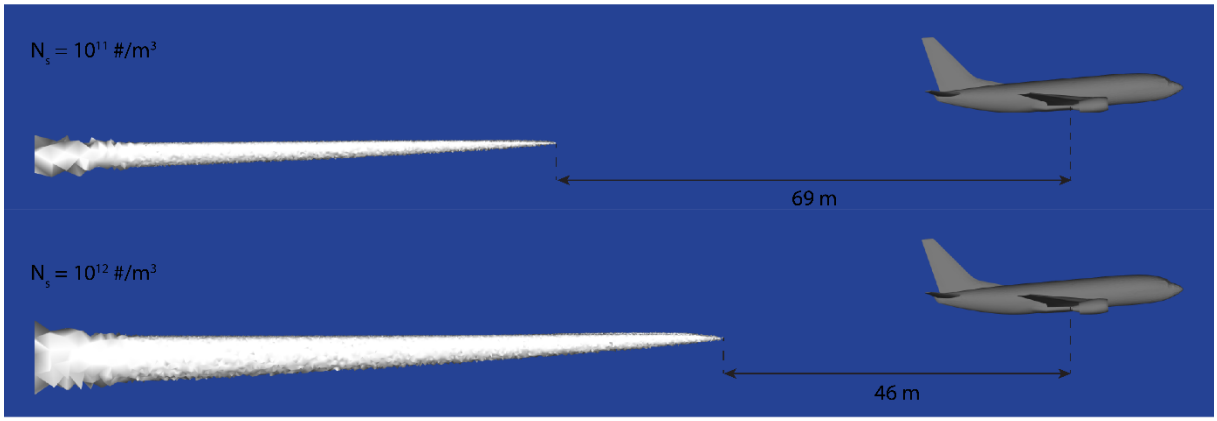

Figure 102 : Visualisation de la traînée de condensation formée par le tracé de l'isovolume $\Delta\tau_v > 0{,}01$ pour deux indices d'émissions de particules de suie différents.

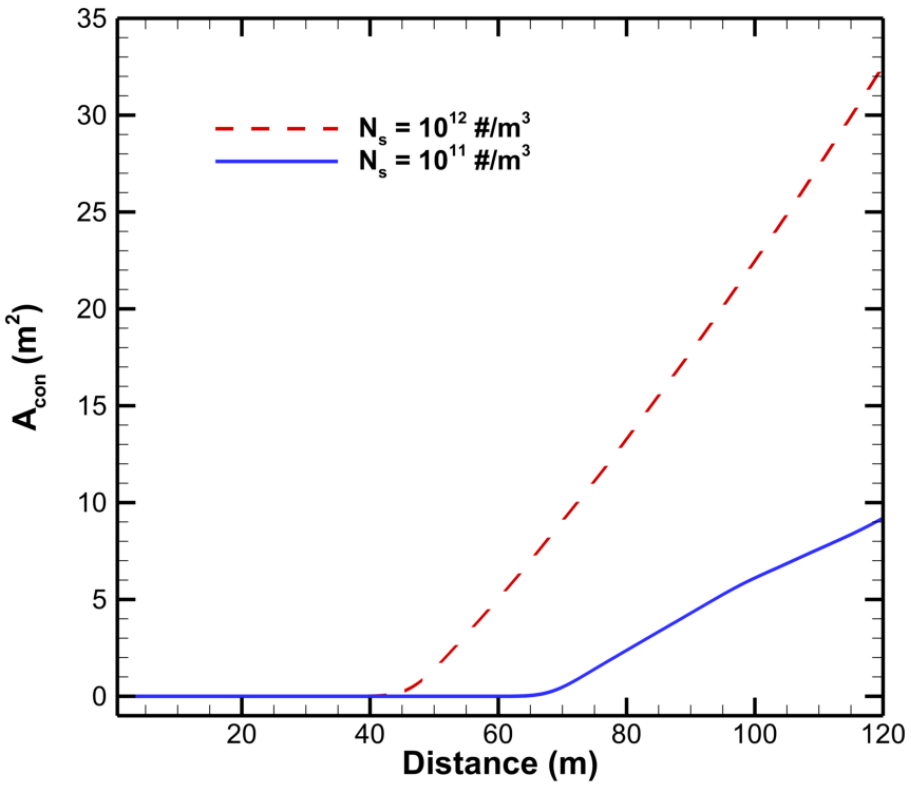

Figure 103 : Evolution de la superficie de la traînée de condensation visible en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents.

L'indice d'émission de particules de suie constitue donc un paramètre important influençant les propriétés des traînées de condensation. Une baisse sensible des quantités émises permettrait de réduire la concentration des cristaux de glace dans le panache, conduisant à la formation de traînées de condensation à la fois moins opaques et moins étendue.

Conclusions et perspectives

Les travaux effectués au cours de cette thèse ont permis la réalisation, à partir d'un code existant de mécanique des fluides, d'un outil de simulation numérique des processus de formation des traînées de condensation. Ils répondent au besoin de compléter les moyens d'étude et d'améliorer les connaissances des processus physico-chimiques intervenant dans le champ proche des avions.

Nous avons adopté une approche originale en choisissant de réaliser des simulations RANS spatiales intégrant dans le domaine de calcul une géométrie réaliste d'avion correspondant à un Boeing B737, en prenant en considération les sorties primaire et secondaire du moteur. Cette approche permet de prendre en compte l'écoulement aérodynamique autour de l'avion et les processus physiques et chimiques impliqués dans les premiers dixièmes de secondes après l'éjection des effluents du moteur. Le tourbillon de sillage, entre autres, n'est pas initialisé par des modèles analytiques tels que la grande majorité des études de la littérature, mais est issu de la simulation de l'écoulement autour de l'aile de l'avion pris en compte dans nos calculs et rend ainsi compte des spécificités géométriques de l'avion d'une manière directe.

La plateforme de simulation de mécanique des fluides CEDRE de l'ONERA a été utilisée pour réaliser les simulations numériques. Pour cela, les modèles permettant de décrire les principaux processus microphysiques se produisant dans le champ proche de l'avion ont été implantés. L'outil ainsi réalisé permet de simuler l'interaction complexe des trois processus physiques intervenant dans la formation des traînées de condensation que sont :

- L'écoulement autour et dans le sillage de l'avion, décrit par les équations de Navier-Stokes, et contribuant à la dilution du panache dans l'atmosphère ;
- Les transformations chimiques des espèces dans le panache, prises en compte par un schéma réactionnel comportant 22 espèces et 60 réactions, et responsables de la présence d'espèces secondaires au sein du panache, parmi lesquelles des espèces condensables ;
- Les processus microphysiques, composés dans le cadre de ce travail de l'activation des suies, soit par adsorption de molécules soufrées, soit par collecte de particules volatiles et de la condensation/évaporation de l'eau à la surface des cristaux de glace.

La validation de l'outil de simulation a été effectuée en simulant la formation d'une traînée de condensation dans un domaine de calcul intégrant le maillage réalisé pour un avion complet de type B737. Le domaine de calcul étudié s'étend d'une envergure en amont de l'avion jusqu'à quatre envergures dans son sillage, permettant ainsi d'étudier les phénomènes intervenant au début du régime jet. Les résultats obtenus ont été comparés à des mesures expérimentales et des résultats de simulations numériques de la littérature. Ces comparaisons concernent notamment les résultats suivants :

- L'évolution du taux de dilution du panache, garantissant l'état de dispersion et dépendant fortement de l'intensité des tourbillons de sillage générés ;
- L'évolution des concentrations des espèces chimiques dans le panache, qui dépendent de la dilution du panache, des transformations chimiques des espèces et de la déposition de la vapeur d'eau à la surface des cristaux de glace. L'obtention de valeurs précises pour les concentrations des espèces soufrées dans le panache est notamment importante pour la simulation des processus d'activation des particules de suie ;
- L'évolution des fractions surfaciques de suie activées, par le processus d'adsorption des molécules soufrées d'une part et de collecte des particules volatiles d'autre part. Nous avons mis en évidence le besoin d'une prédiction plus précise des concentrations de particules volatiles dans le panache afin que les valeurs de la fraction surfacique activée par collecte soit satisfaisantes. Les études de la littérature montrent toutefois que la contribution de ce processus à l'activation des suies demeure négligeable devant celle du processus d'adsorption dans les premiers instants de la vie du panache correspondant à notre configuration de calcul ;
- Les évolutions des densités et des tailles des particules de glace dans le panache, représentant des données importantes pour l'étude de l'impact radiatif des traînées de condensation. Elles permettent en effet le calcul de l'évolution de l'épaisseur optique des traînées de condensation.

Nous avons ensuite conduit des études de sensibilité pour évaluer l'influence des paramètres environnementaux et des caractéristiques des effluents sur les propriétés de la traînée de condensation formée. Les paramètres étudiés correspondent à l'humidité relative de l'atmosphère, la teneur en soufre du carburant, le diamètre et la densité des particules de suies

éjectées par les moteurs. Les études paramétriques menées ont permis d'aboutir aux principaux résultats suivants, valables dans la limite de notre domaine de calcul :

L'humidité relative de l'atmosphère impacte de manière importante le volume du panache sursaturé en eau dans le champ proche, se répercutant sur le nombre de cristaux de glace et sur l'évolution du volume de la traînée de condensation formée. En étudiant deux cas avec des humidités relatives de 30% et de 60% respectivement, nous avons noté une influence encore limitée de l'humidité relative sur les tailles des cristaux dans le champ proche. Le panache étudié étant âgé de moins de 0,5 seconde, la majeure partie de la vapeur d'eau disponible provient des effluents et se trouve donc concentrée au centre du panache qui est encore peu impacté par l'entraînement de la vapeur d'eau issue de l'atmosphère. L'influence de l'humidité relative sur l'épaisseur optique de la traînée de condensation est également faible dans le champ proche. Les effets de l'augmentation des diamètres et des concentrations des cristaux de glace restant négligeables devant l'effet de la dilution.

De la teneur en soufre du carburant vont dépendre les concentrations d'acide sulfurique présent dans le panache. Ces dernières influencent fortement le processus d'activation des particules de suies en déterminant les taux d'adsorption des molécules à la surface des suies. Le passage de la teneur en soufre d'un niveau moyen (700 ppm) à un niveau considéré comme bas (350 ppm) au regard des carburants actuellement utilisés, a pour conséquence une diminution significative de la saturation des sites d'adsorption à la surface des suies par les molécules soufrées (−43 %), en cohérence avec les données de la littérature. Dans le cadre de notre modélisation, qui ne prend pas en compte la formation de particules volatiles, la variation de la teneur en soufre du carburant n'induit pas de modification de la concentration de cristaux de glace mais impacte leur taille en modifiant le taux de déposition de glace. Le passage d'une teneur en soufre de 700 ppm à 350 ppm retarde la croissance des particules, aboutissant à des cristaux de rayons plus petits dans le champ proche (−35%). Cela se traduit par un retard dans l'apparition des traînées de condensation dans le sillage de l'avion. Par ailleurs, la diminution de la teneur en soufre s'accompagne d'une diminution conséquente de la superficie de la traînée de condensation formée (10-20 %) dans notre champ d'étude. Nous montrons également que les différences d'épaisseur optique s'estompent progressivement à mesure que le panache se dilue dans l'atmosphère.

Nous avons mis en évidence que le diamètre des particules de suies éjectées par les moteurs dans l'atmosphère, variant de 30 à $60\,\mathrm{nm}$, avait un impact négligeable sur les propriétés des traînées de condensation dans les cas étudiés. Les différences de pression de vapeur saturante calculées au voisinage des particules de suie, imputées à l'effet Kelvin, se sont révélées non déterminantes.

La diminution de l'indice d'émission des particules de suie en nombre devrait être une réalité dans un futur proche, en raison, d'une part des améliorations technologiques des moteurs et, d'autre part de l'incorporation progressive de carburants alternatifs, notamment issus de la biomasse. Nous avons montré que l'indice d'émission de vapeur d'eau utilisé ($1{,}34\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$) était suffisamment élevé pour n'entraîner qu'une faible compétition entre les suies pour la vapeur d'eau disponible dans un cas riche en suie ($10^{12}\# \cdot \mathrm{m}^{-3}$). Dans le cas où la vapeur d'eau disponible est en abondance, une baisse de 90% de l'indice d'émission des particules de suie en nombre se répercute proportionnellement sur la densité de cristaux de glace formées dans le panache. L'épaisseur optique de la traînée de condensation diminue alors également fortement, la rendant beaucoup moins opaque et moins étendue. L'écart de volume des traînées de condensation augmente en outre continuellement dans le champ proche et on peut supposer que la tendance devrait se poursuivre en aval du champ d'étude.

Plusieurs perspectives peuvent être dégagées à la lumière des travaux réalisés au cours de cette thèse.

Tout d'abord, les simulations numériques ont permis d'étudier les processus de formation de traînées de condensation dans les 4 premières envergures du sillage de l'avion. Il serait intéressant d'analyser l'évolution de ces processus plus en aval, par exemple en étendant le domaine de calcul initial. Plusieurs obstacles devront cependant être levés ; L'intensité tourbillonnaire des tourbillons devra être conservée au-delà de la limite des 4 envergures. L'utilisation de méthodes d'adaptation de maillage pourrait constituer une solution. Concernant l'activation des suies, le processus de collecte des particules volatiles ne devrait plus pouvoir être négligé devant le processus d'adsorption. Il sera par conséquent nécessaire de prendre en compte la formation des particules volatiles dans le panache de l'avion afin de connaître leur concentration précise.

De manière générale, la précision de la prédiction des propriétés des traînées de condensation pourrait potentiellement être améliorée en enrichissant les modèles

microphysiques implantés dans le code CEDRE. Il serait par exemple intéressant d'inclure la simulation du processus de nucléation homogène de glace afin de pouvoir étudier les cas d'indice d'émission de suies très faibles, voire nul. Par ailleurs, il serait également intéressant d'explorer les voies d'activation des suies autres que celles issues des éléments soufrées, ou encore de prendre en compte les caractéristiques morphologiques des particules de suie.

Enfin, la réalisation de cet outil de simulation spatiale de la formation de traînée de condensation ouvre la voie aux études des effets des paramètres d'installation de l'avion. Un prolongement intéressant de notre travail, et très peu étudié dans la littérature mais qui pourrait avoir une réelle influence, pourrait consister en l'étude des conséquences de modifications géométriques comme la position ou le nombre de moteurs, ou encore en changeant le type d'avion simulé. Il serait alors possible d'élaborer des stratégies originales de mitigation technologique et opérationnelle de l'impact des traînées de condensation sur l'environnement, basées sur la modification des caractéristiques de l'avion.

Bibliographie

Anderson, B. E., G. Chen, et D. R. Blake (2006), Hydrocarbon emissions from a modern commercial airliner, *Atmos. Environ.*, *40*(19), 3601-3612, doi:10.1016/j.atmosenv.2005.09.072.

Appleman, H. (1953), The formation of exhaust condensation trails by jet aircraft, *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, (34), 14-20.

Arnold, F., K.-H. Wohlfrom, M. W. Klemm, J. Schneider, K. Gollinger, U. Schumann, et R. Busen (1998), First gaseous ion composition measurements in the exhaust plume of a jet aircraft in flight: Implications for gaseous sulfuric acid, aerosols, and chemiions, *Geophys. Res. Lett.*, *25*(12), 2137-2140, doi:10.1029/98GL01579.

Bachman, J. (2014), Boeing's 737 Turns 8,000: The Best-Selling Plane Ever Isn't Slowing, *Bloom. Bus.* Available from: http://www.bloomberg.com/bw/articles/2014-04-16/boeing-s-737-turns-8-000-the-best-selling-plane-ever-isn-t-slowing (Consulté le 12 avril 2015)

Beyersdorf, A. J. et al. (2014), Reductions in aircraft particulate emissions due to the use of Fischer–Tropsch fuels, *Atmos Chem Phys*, *14*(1), 11-23, doi:10.5194/acp-14-11-2014.

Böckle, S., S. Einecke, F. Hildenbrand, C. Orlemann, C. Schulz, J. Wolfrum, et V. Sick (1999), Laser-spectroscopic investigation of OH-radical concentrations in the exhaust plane of jet engines, *Geophys. Res. Lett.*, *26*(13), 1849-1852, doi:10.1029/1999GL900364.

Brown, R. C., M. R. Anderson, R. C. Miake-Lye, C. E. Kolb, A. A. Sorokin, et Y. Y. Buriko (1996), Aircraft exhaust sulfur emissions, *Geophys. Res. Lett.*, *23*(24), 3603-3606, doi:10.1029/96GL03339.

Brunet, S., F. Garnier, et L. Jacquin (1999), Numerical/experimental simulation of exhaust jet mixing in wake vortex, Norfolk, Virginia, USA.

Chomiak, J., et A. K. Gupta (1989), Thermophoresis in boundary layer flows, *J. Aerosol Sci.*, *20*(1), 1-5, doi:10.1016/0021-8502(89)90024-4.

Chughtai, A. R., N. J. Miller, D. M. Smith, et J. R. Pitts (1999), Carbonaceous Particle Hydration III, *J. Atmospheric Chem.*, *34*(2), 259-279, doi:10.1023/A:1006221326060.

Crow, S. C. (1970), Stability theory for a pair of trailing vortices, *AIAA J.*, *8*(12), 2172-2179, doi:10.2514/3.6083.

Curtius, J., F. Arnold, et P. Schulte (2002), Sulfuric acid measurements in the exhaust plume of a jet aircraft in flight: Implications for the sulfuric acid formation efficiency, *Geophys. Res. Lett.*, *29*(7), 17-1, doi:10.1029/2001GL013813.

Delhaye, D., E. Ruiz, D. Ferry, B. Demirdjian, J. Suzanne, O. Penanhoat, et J. Gouge (2007), Physico-chemical characterization of soot emitted by a commercial aircraft engine:

morphology, size, structure, and elemental composition, édité par R. Sausen, A. Blum, D. S. Lee, et C. Brüning, *Proc. Int. Conf. Transp. Atmosphere Clim. TAC*, 22-26.

DeMore, W. B., S. P. Sander, D. M. Golden, R. F. Hampson, M. J. Kurylo, C. J. Howard, A. R. Ravishankara, C. E. Kolb, et M. J. Molina (1997), *Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling*.

Dimotakis, P. E. (2000), The mixing transition in turbulent flows, *J. Fluid Mech.*, *409*, 69–98, doi:10.1017/S0022112099007946.

Doty, M. J., B. S. Henerson, et K. W. Kinzie (2004), Turbulent Flow Field Measurements of Separate Flow Round and Chevron Nozzles with Pylon Interaction Using Particle Image Velocimetry, Manchester; United Kingdom.

DuBois, B., et G. Paynter (2006), *« Fuel Flow Method2 » for Estimating Aircraft Emissions*, SAE Technical Paper Series.

Dürbeck, T., et T. Gerz (1996), Dispersion of aircraft exhausts in the free atmosphere, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *101*(D20), 26007-26015, doi:10.1029/96JD02217.

Ehret, T., et H. J. Oertel (1998), Calculation of wake vortex structures in the near-field wake behind cruising aircraft, *Atmos. Environ.*, *32*(18), 3089-3095, doi:10.1016/S1352-2310(98)00112-5.

Ferreira Gago, C., S. Brunet, et F. Garnier (2002), Numerical Investigation of Turbulent Mixing in a Jet/Wake Vortex Interaction, *AIAA J.*, *40*, 276-284.

F. Slemr, H. G. (2001), In-Flight Measurement of Aircraft CO and Nonmethane Hydrocarbon Emission Indices, *J. Geophys. Res.*, *106*(2001), 7485-7494, doi:10.1029/2000JD900580.

Fuchs, N. A. (1964), *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press.

Garnier, F., C. Baudoin, P. Woods, et N. Louisnard (1997a), Engine emission alteration in the near field of an aircraft, *Atmos. Environ.*, *31*(12), 1767-1781, doi:10.1016/S1352-2310(96)00329-9.

Garnier, F., S. Brunet, et L. Jacquin (1997b), Modelling exhaust plume mixing in the near field of an aircraft, *Ann Geophys*, *15*(11), 1468-1477, doi:10.1007/s00585-997-1468-1.

Gerz, T., et T. Ehret (1997), Wingtip vortices and exhaust jets during the jet regime of aircraft wakes, *Aerosp. Sci. Technol.*, *1*(7), 463–474.

Gerz, T., T. Dürbeck, et P. Konopka (1998), Transport and effective diffusion of aircraft emissions, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *103*(D20), 25905–25913, doi:10.1029/98JD02282.

Gerz, T., F. Holzäpfel, et D. Darracq (2002), Commercial aircraft wake vortices, *Prog. Aerosp. Sci.*, *38*(3), 181-208, doi:10.1016/S0376-0421(02)00004-0.

Gettelman, A., E. J. Fetzer, A. Eldering, et F. W. Irion (2006), The Global Distribution of Supersaturation in the Upper Troposphere from the Atmospheric Infrared Sounder, *J. Clim.*, *19*(23), 6089-6103, doi:10.1175/JCLI3955.1.

Ghedhaifi, W., et X. Vancassel (2011), *Etude de la transformation chimique des effluents d'avions dans l'atmosphère en utilisant le code CEDRE - Activités 2011 sur Ressources Générales*, Onera.

Gierens, K., B. Kärcher, H. Mannstein, et B. Mayer (2009), Aerodynamic Contrails: Phenomenology and Flow Physics, *J. Atmospheric Sci.*, *66*(2), 217-226, doi:10.1175/2008JAS2767.1.

Gleitsmann, G., et R. Zellne (1998), The effects of ambient temperature and relative humidity on particle formation in the jet regime of commercial aircrafts: A modelling study, *Atmos. Environ.*, *32*(18), 3079-3087, doi:10.1016/S1352-2310(98)00062-4.

Guignery, F. (2010), Mécanismes microphysiques intervenant dans le sillage proche d'un avion en maillage non structuré, Rapport de thèse, Université de Toulouse.

Hall, W. D., et H. R. Pruppacher (1976), The Survival of Ice Particles Falling from Cirrus Clouds in Subsaturated Air, *J. Atmospheric Sci.*, *33*(10), 1995-2006, doi:10.1175/1520-0469(1976)033<1995:TSOIPF>2.0.CO;2.

Harris, M., J. M. Vaughan, K. Huenecke, et C. Huenecke (2000), Aircraft wake vortices: a comparison of wind-tunnel data with field trial measurements by laser radar, *Aerosp. Sci. Technol.*, *4*(5), 363-370, doi:10.1016/S1270-9638(00)00136-X.

Harten, A., P. D. Lax, et B. V. Leer (1983), On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, *SIAM Rev.*, *25*(1), 35-61.

Henri-Lheureux, T. (2015), *Étude Numérique de l'Impact de la Modélisation de la Turbulence sur la Simulation des Traînées de Condensation*, Rapport de stage, ONERA.

Heymsfield, A., D. Baumgardner, P. DeMott, P. Forster, K. Gierens, et B. Kärcher (2010), Contrail Microphysics, *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, *91*(4), 465-472, doi:10.1175/2009BAMS2839.1.

Hoshizaki, H. (1972), *Study of high-altitude aircraft wake dynamics*, Lockheed Aircraft Corporation, Lockheed Palo Alto Research Laboratory, Palo Alto, California, USA.

Hunton, D. E. et al. (2000), Chemical ionization mass spectrometric measurements of SO2 emissions from jet engines in flight and test chamber operations, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *105*(D22), 26841-26855, doi:10.1029/2000JD900383.

ICAO (2013), *ICAO Environmental Report*, International Civil Aviation Organization.

IPCC (1999), *Aviation and the global atmosphere*, E Penner, J., Lister, D.H., Griggs, D.J., Griggs, D.J., Dokken, D.J., McFarland, M. (Eds.), Intergovernmental Panel on Climat Change, Cambridge University Press, Cambridge, UK.

IPCC (2007), *Climate Change 2007. The physical science basis.*, Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Marquis, M., Averyt, K., Tignor, M.M.B., Miller, H.L., Chen, Z. (Eds.),

Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change., Cambridge University Press, UK.

IPCC (2013), *Climate Change 2013. The physical science basis.*, Stocker T. F., Qin D., Plattner G.-P., Tignor M. M.B., Allen S. K., Boschung J., Nauels A., Xia Y., Bex V., Midgley P. M. (Eds.), Working Group I Contribution to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change., Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.

Jacquin, L., et C. Pantano (2002), On the persistence of trailing vortices, *J. Fluid Mech.*, *471*, 159–168, doi:10.1017/S0022112002002161.

Kärcher, B. (1994), Transport of exhaust products in the near trail of a jet engine under atmospheric conditions, *J. Geophys. Res.*, *99*(D7), 14509-14517, doi:10.1029/94JD00940.

Kärcher, B. (1998), Physicochemistry of aircraft-generated liquid aerosols, soot, and ice particles: 1. Model description, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *103*(D14), 17111-17128, doi:10.1029/98JD01044.

Kärcher, B., et F. Yu (2009), Role of aircraft soot emissions in contrail formation, *Geophys. Res. Lett.*, *36*(1), doi:10.1029/2008GL036649.

Kärcher, B., M. M. Hirschberg, et P. Fabian (1996a), Small-scale chemical evolution of aircraft exhaust species at cruising altitudes., *J Geophys Res*, *101*(D10).

Kärcher, B., T. Peter, U. M. Biermann, et U. Schumann (1996b), The Initial Composition of Jet Condensation Trails, *J. Atmospheric Sci.*, *53*(21), 3066-3083, doi:10.1175/1520-0469(1996)053<3066:TICOJC>2.0.CO;2.

Kärcher, B., R. Busen, A. Petzold, F. P. Schröder, U. Schumann, et E. J. Jensen (1998a), Physicochemistry of aircraft-generated liquid aerosols, soot, and ice particles 2. Comparison with observations and sensitivity studies, *J. Geophys. Res.*, *103*(D14), 17129-17147, doi:10.1029/98JD01045.

Kärcher, B., F. Yu, F. P. Schröder, et R. P. Turco (1998b), Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes: Analysis of growth mechanisms, *Geophys. Res. Lett.*, *25*(15), 2793, doi:10.1029/98GL02114.

Kärcher, B., B. Mayer, K. Gierens, U. Burkhardt, H. Mannstein, et R. Chatterjee (2009), Aerodynamic Contrails: Microphysics and Optical Properties, *J. Atmospheric Sci.*, *66*(2), 227-243, doi:10.1175/2008JAS2768.1.

Kärcher, B., U. Burkhardt, A. Bier, L. Bock, et I. J. Ford (2015), The microphysical pathway to contrail formation, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *120*(15), 2015JD023491, doi:10.1002/2015JD023491.

Katragkou, E., S. Wilhelm, F. Arnold, et C. Wilson (2004), First gaseous Sulfur (VI) measurements in the simulated internal flow of an aircraft gas turbine engine during project PartEmis, *Geophys. Res. Lett.*, *31*(2), L02117, doi:10.1029/2003GL018231.

Khou, J.-C., et W. Ghedhaifi (2013), *Modélisation de l'évolution chimique des émissions d'avions dans l'atmosphère*, Rapport technique, ONERA.

Knighton, W. B., T. M. Rogers, B. E. Anderson, S. C. Herndon, P. E. Yelvington, et R. C. Miake-Lye (2007), Quantification of Aircraft Engine Hydrocarbon Emissions Using Proton Transfer Reaction Mass Spectrometry, *J. Propuls. Power*, *23*(5), 949-958, doi:10.2514/1.22965.

Köpp, F. (1999), Wake-vortex characteristics of military-type aircraft measured at airport oberpfaffenhofen using the DLR laser doppler anemometer, *Aerosp. Sci. Technol.*, *3*(4), 191-199, doi:10.1016/S1270-9638(99)80042-X.

Lamb, H. (1932), *Hydrodynamics. 6TH Edition*, Cambridge University Press, Cambridge.

Lee, D. S. et al. (2010), Transport impacts on atmosphere and climate: Aviation, *Atmos. Environ.*, *44*(37), 4678-4734, doi:10.1016/j.atmosenv.2009.06.005.

Leterrier, N. (2003), Discrétisation spatiale en maillage non-structuré de type général, Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris.

Lewellen, D. C., et W. S. Lewellen (1996), Large-eddy simulations of the vortex-pair breakup in aircraft wakes, *AIAA J.*, *34*(11), 2337-2345, doi:10.2514/3.13399.

Lewellen, D. C., et W. S. Lewellen (2001), The Effects of Aircraft Wake Dynamics on Contrail Development, *J. Atmospheric Sci.*, *58*, 390-406.

Lobo, P. et al. (2015), Measurement of Aircraft Engine Non-Volatile PM Emissions: Results of the Aviation-Particle Regulatory Instrumentation Demonstration Experiment (A-PRIDE) 4 Campaign, *Aerosol Sci. Technol.*, *49*(7), 472-484, doi:10.1080/02786826.2015.1047012.

Lottin, D. (2013), Dimensions fractales, morphologie et caractéristiques dimensionnelles 2D et 3D d'agrégats de nanoparticules de suie aéronautique : Etude par microscopie électronique en transmission et tomographie électronique, Thèse, Aix-Marseille, 6 mai.

Manion, J. A. et al. (2015), NIST Chemical Kinetics Database, Available from: http://kinetics.nist.gov/

Marquart, S., et B. Mayer (2002), Towards a reliable GCM estimation of contrail radiative forcing, *Geophys. Res. Lett.*, *29*(8), 20-1, doi:10.1029/2001GL014075.

Masel, R. I. (1996), *Principles of Adsorption and Reaction on Solid Surfaces*, John Wiley & Sons.

Miake-Lye, R. C., M. Martinez-Sanchez, R. C. Brown, et C. E. Kolb (1993), Plume and wake dynamics, mixing, and chemistry behind a high speed civil transport aircraft, *J. Aircr.*, *30*(4), 467-479, doi:10.2514/3.46368.

Miller, T. M., J. O. Ballenthin, D. E. Hunton, A. A. Viggiano, C. C. Wey, et B. E. Anderson (2003), Nitric acid emission from the F100 jet engine, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *108*(D1), 4032, doi:10.1029/2001JD001522.

Mirabel, P., et J. L. Katz (1974), Binary Homogeneous Nucleation as a Mechanism for the Formation of Aerosols, *J. Chem. Phys.*, *60*(3), 1138-1144, doi:10.1063/1.1681124.

Murphy, D. M., et T. Koop (2005), Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, *131*(608), 1539-1565, doi:10.1256/qj.04.94.

NIST (2013), NIST-JANAF Thermochemical Tables, Available from: http://kinetics.nist.gov/janaf/ (Consulté le 15 septembre 2015)

Paoli, R., et F. Garnier (2005), Interaction of exhaust jets and aircraft wake vortices: small-scale dynamics and potential microphysical-chemical transformations, *Comptes Rendus Phys.*, *6*(4–5), 525-547, doi:10.1016/j.crhy.2005.05.003.

Paoli, R., F. Laporte, B. Cuenot, et T. Poinsot (2003), Dynamics and mixing in jet/vortex interactions, *Phys. Fluids 1994-Present*, *15*(7), 1843-1860, doi:10.1063/1.1575232.

Paoli, R., J. Hélie, et T. Poinsot (2004), Contrail formation in aircraft wakes, *J. Fluid Mech.*, *502*, 361–373, doi:10.1017/S0022112003007808.

Paoli, R., L. Nybelen, J. Picot, et D. Cariolle (2013), Effects of jet/vortex interaction on contrail formation in supersaturated conditions, *Phys. Fluids 1994-Present*, *25*(5), 053305, doi:10.1063/1.4807063.

Paugam, R., R. Paoli, et D. Cariolle (2010), Influence of vortex dynamics and atmospheric turbulence on the early evolution of a contrail, *Atmos Chem Phys*, *10*(8), 3933-3952, doi:10.5194/acp-10-3933-2010.

Petzold, A., et F. P. Schröder (1998), Jet Engine Exhaust Aerosol Characterization, *Aerosol Sci. Technol.*, *28*(1998), 62-76, doi:10.1080/02786829808965512.

Petzold, A. et al. (1997), Near-field measurements on contrail properties from fuels with different sulfur content, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *102*(D25), 29867-29880, doi:10.1029/97JD02209.

Petzold, A., A. Döpelheuer, C. A. Brock, et F. Schröder (1999), In situ observations and model calculations of black carbon emission by aircraft at cruise altitude, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *104*(D18), 22171-22181, doi:10.1029/1999JD900460.

Ponater, M., S. Marquart, et R. Sausen (2002), Contrails in a comprehensive global climate model: Parameterization and radiative forcing results, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *107*(D13), ACL 2-1, doi:10.1029/2001JD000429.

Pruppacher, H. R., et J. D. Klett (1997), *Microphysics of Clouds and Precipitation*, Kluwer Academic Publishers, Amsterdam.

Refloch, A. et al. (2011), Cedre Software, *AerospaceLab J.*, 10.

Reiner, T., et F. Arnold (1993), Laboratory flow reactor measurements of the reaction SO3 + H2O + M → H2SO4 + M: Implications for gaseous H2SO4 and aerosol formation in the plumes of jet aircraft, *Geophys. Res. Lett.*, *20*(23), 2659-2662, doi:10.1029/93GL02996.

Ricou, F. P., et D. B. Spalding (1961), Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets, *J. Fluid Mech.*, *11*(01), 21–32, doi:10.1017/S0022112061000834.

Roth, B., R. Van Dingenen, et F. Raes (1994), 02.O.05 Nucleation studies of H2SO4-particles in a vertical laminar flow reactor: Experimental results and comparison with a numerical model, *J. Aerosol Sci.*, *25, Supplement 1*, 11-12, doi:10.1016/0021-8502(94)90236-4.

Saad, Y., et M. H. Schultz (1986), GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J Sci Stat Comput*, *7*(3), 856–869, doi:10.1137/0907058.

Saffman, P. G. (1993), *Vortex Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.

Schlager, H., P. Konopka, P. Schulte, U. Schumann, H. Ziereis, F. Arnold, M. Klemm, D. E. Hagen, P. D. Whitefield, et J. Ovarlez (1997), In situ observations of air traffic emission signatures in the North Atlantic flight corridor, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *102*(D9), 10739-10750, doi:10.1029/96JD03748.

Schmidt, E. (1941), Die Entstehung von Eisnebel aus den Auspuffgasen von Flugmotoren, *Schriften Dtsch. Akad. Für Luftfahrtforsch.*, (44), 1-15.

Schröder, F., B. Kärcher, C. Duroure, J. Ström, A. Petzold, J.-F. Gayet, B. Strauss, P. Wendling, et S. Borrmann (2000), On the Transition of Contrails into Cirrus Clouds, *J. Atmospheric Sci.*, *57*(4), 464-480, doi:10.1175/1520-0469(2000)057<0464:OTTOCI>2.0.CO;2.

Schröder, F. P., B. Kärcher, A. Petzold, R. Baumann, R. Busen, C. Hoell, et U. Schumann (1998), Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes: In situ observations, *Geophys. Res. Lett.*, *25*(15), 2789, doi:10.1029/98GL02078.

Schulte, P., H. Schlager, H. Ziereis, U. Schumann, S. L. Baughcum, et F. Deidewig (1997), NOx emission indices of subsonic long-range jet aircraft at cruise altitude: In situ measurements and predictions, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *102*(D17), 21431-21442, doi:10.1029/97JD01526.

Schumann, U. (1996), On conditions for contrail formation from aircraft exhausts, *Meteorol. Z.*, *5*, 4-23.

Schumann, U., J. Ström, R. Busen, R. Baumann, K. Gierens, M. Krautstrunk, F. P. Schröder, et J. Stingl (1996), In situ observations of particles in jet aircraft exhausts and contrails for different sulfur-containing fuels, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *101*(D3), 6853-6869, doi:10.1029/95JD03405.

Schumann, U., H. Schlager, F. Arnold, R. Baumann, P. Haschberger, et O. Klemm (1998), Dilution of aircraft exhaust plumes at cruise altitudes, *Atmos. Environ.*, *32*(18), 3097-3103, doi:10.1016/S1352-2310(97)00455-X.

Schumann, U., F. Arnold, R. Busen, J. Curtius, B. Kärcher, A. Kiendler, A. Petzold, H. Schlager, F. Schröder, et K.-H. Wohlfrom (2002), Influence of fuel sulfur on the composition of aircraft exhaust plumes: The experiments SULFUR 1–7, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *107*(D15), AAC 2-1, doi:10.1029/2001JD000813.

Sedunov, Y. S. (1974), Physics of drop formation in the atmosphere, *John Wiley*, 234.

Selva, G. (1998), Méthodes itératives pour l'intégration implicite des équations de l'aérothermochimie sur des maillages non-structurés, Thèse, Chatenay-Malabry, Ecole Centrale Paris, 1 janvier.

Shonija, N. K., O. B. Popovicheva, N. M. Persiantseva, A. M. Savel'ev, et A. M. Starik (2007), Hydration of aircraft engine soot particles under plume conditions: Effect of sulfuric and nitric acid processing, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *112*(D2), D02208, doi:10.1029/2006JD007217.

Spichtinger, P., K. Gierens, et W. Read (2003), The global distribution of ice-supersaturated regions as seen by the Microwave Limb Sounder, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, *129*(595), 3391-3410, doi:10.1256/qj.02.141.

Tabor, K., L. Gutzwiller, et M. J. Rossi (1993), The heterogeneous interaction of NO2 with amorphous carbon, *Geophys. Res. Lett.*, *20*(14), 1431-1434, doi:10.1029/93GL01434.

Taylor, W. F. (2012), *Update of the survey of sulfur levels in commercial jet fuel*, Coordinating Research Council.

Thompson, J. F., B. K. Soni, et N. P. Weatherill (1998), *Handbook of Grid Generation*, CRC Press.

Toro, E. F., M. Spruce, et W. Speares (1994), Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver, *Shock Waves*, *4*(1), 25–34.

Tremmel, H. G., et U. Schumann (1999), Model simulations of fuel sulfur conversion efficiencies in an aircraft engine: Dependence on reaction rate constants and initial species mixing ratios, *Aerosp. Sci. Technol.*, *3*(7), 417-430, doi:10.1016/S1270-9638(99)00101-7.

Tremmel, H. G., H. Schlager, P. Konopka, P. Schulte, F. Arnold, M. Klemm, et B. Droste-Franke (1998), Observations and model calculations of jet aircraft exhaust products at cruise altitude and inferred initial OH emissions, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *103*(D9), 10803-10816, doi:10.1029/97JD03451.

Vancassel, X., A. Sorokin, P. Mirabel, A. Petzold, et C. Wilson (2004), Volatile particles formation during PartEmis: a modelling study, *Atmos Chem Phys*, *4*(2), 439-447, doi:10.5194/acp-4-439-2004.

Van de Hulst, H. C. (1957), *Light Scattering by Small Particles*, John Wiley & Sons, New York.

Wang, F. Y., M. M. J. Proot, J.-M. Charbonnier, et P. M. Sforza (2000), Near-Field Interaction of a Jet with Leading-Edge Vortices, *J. Aircr.*, *37*(5), 779-785, doi:10.2514/2.2700.

Wang, Z. (1998), Numerical Modeling of Chemistry, Turbulent Mixing and Aerosol Dynamics in Near-Field Aircraft Plumes, PhD Thesis, University of California at Berkeley.

Wilson, C. W., A. Petzold, S. Nyeki, U. Schumann, et R. Zellner (2004), Measurement and prediction of emissions of aerosols and gaseous precursors from gas turbine engines

(PartEmis): An overview, *Aerosp. Sci. Technol.*, *8*(2), 131-143, doi:10.1016/j.ast.2003.10.006.

Wong, H.-W., P. E. Yelvington, M. T. Timko, T. B. Onasch, R. C. Miake-Lye, J. Zhang, et I. A. Waitz (2008), Microphysical Modeling of Ground-Level Aircraft-Emitted Aerosol Formation: Roles of Sulfur-Containing Species, *J. Propuls. Power*, *24*(3), 590-602, doi:10.2514/1.32293.

Wong, H.-W. et al. (2013), Laboratory and modeling studies on the effects of water and soot emissions and ambient conditions on the properties of contrail ice particles in the jet regime, *Atmos Chem Phys*, *13*(19), 10049-10060, doi:10.5194/acp-13-10049-2013.

Wormhoudt, J., S. C. Herndon, P. E. Yelvington, R. C. Miake-Lye, et C. Wey (2007), Nitrogen Oxide (NO/NO2/HONO) Emissions Measurements in Aircraft Exhausts, *J. Propuls. Power*, *23*(5), 906-911, doi:10.2514/1.23461.

Wyslouzil, B. E., K. L. Carleton, D. M. Sonnenfroh, W. T. Rawlins, et S. Arnold (1994), Observation of hydration of single, modified carbon aerosols, *Geophys. Res. Lett.*, *21*(19), 2107-2110, doi:10.1029/94GL01588.

Yu, F., et R. P. Turco (1997), The role of ions in the formation and evolution of particles in aircraft plumes, *Geophys. Res. Lett.*, *24*(15), 1927-1930, doi:10.1029/97GL01822.

Yu, F., R. P. Turco, et B. Kärcher (1999), The possible role of organics in the formation and evolution of ultrafine aircraft particles, *J. Geophys. Res. Atmospheres*, *104*(D4), 4079-4087, doi:10.1029/1998JD200062.

Annexes

Annexe 1. Calcul des caractéristiques du moteur CFM-56 et des effluents

Données de référence pour la thèse :

Pression ambiante P (Pa)	24000
Vitesse SP V_{sp}(m · s^{-1})	480,3
Vitesse SS V_{ss}(m · s^{-1})	311,6
Température SP T_{sp} (K)	580
Température SS T_{ss}(K)	242
Aire SP A_{sp} (m^2)	0,292
Aire SS A_{ss}(m^2)	1,07
Ratio Air/Carburant AFR	60
Vitesse avion V (m · s^{-1})	252
Densité en SP ρ_{sp} (kg · m^{-3})	0,142
Densité en SS ρ_{ss} (kg · m^{-3})	0,46
Pouvoir calorifique du kérosène Q (J · kg^{-1})	4,3 · 10^7

Calcul de la poussée F_a du moteur :

$$F_a = \left(V_{sp} - V\right)(\rho_{sp} A_{sp} V_{sp}) + (V_{ss} - V)(\rho_{ss} A_{ss} V_{ss})$$

Calcul de la consommation de carburant $\dot{m}_{car}$:

$$\dot{m}_{car} = \frac{A_{sp} V_{sp} \rho_{sp}}{AFR + 1}$$

Calcul de l'éfficacité de propulsion η :

$$\eta = \frac{V F_a}{Q \dot{m}_{car}}$$

Calcul de l'indice d'émission en sortie primaire $\mathrm{IE}_{i,sp}$ d'une espèce i en fonction de sa fraction molaire en sortie primaire $x_{i,sp}$:

$$\mathrm{IE}_{i,sp} = \frac{x_{i,sp} M_i P A_{sp} V_{sp}}{R T_{sp} \dot{m}_{car}}$$

Calcul de la densité de suie en sortie primaire $N_{s,sp}$ en fonction de l'indice d'émission de suie en nombre en sortie primaire $\mathrm{IE}_{s,sp}$:

$$N_{s,sp} = \frac{\mathrm{IE}_{s,sp}\dot{m}_{car}}{A_{sp}V_{sp}}$$

Annexe 2. Critère de Schmidt-Appleman

Le critère de Schmidt-Appleman est un critère de formation des traînées de condensation basé sur des études thermodynamiques proposées par *Schmidt* [1941] et *Appleman* [1953]. Le principe repose sur l'assertion selon laquelle la traînée de condensation se forme lorsque la pression de vapeur dans le panache dépasse la pression de vapeur saturante par rapport à la phase liquide. Autrement dit, le critère de Schmidt-Appleman consiste à évaluer la saturation en eau du panache à partir des caractéristiques thermodynamiques de l'atmosphère et des effluents du moteur. À la suite d'observations de certaines situations contredisant le critère original, *Schumann* [1996] propose une révision dudit critère en prenant en compte la partie de l'énergie de combustion qui est convertie en énergie cinétique propulsant l'avion. Cette révision a pour effet d'augmenter les températures seuils de formation des traînées de condensation.

Le critère révisé de Schmidt-Appleman prend en compte l'humidité relative ambiante de l'atmosphère, la température ambiante, l'indice d'émission de vapeur d'eau du moteur et son efficacité de propulsion pour produire des diagrammes de valeurs seuils déclenchant la formation de traînée de condensation. La Figure 104 montre les températures seuils calculées pour différentes humidités relatives (0%, 30%, 60% et 100%), une température ambiante de 214 K, un indice d'émission de vapeur d'eau $EI_{\mathrm{H_2O}} = 1{,}25\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg}^{-1}$ et une efficacité de propulsion de $\eta = 0{,}3$. Ces valeurs correspondent à des conditions usuellement rencontrées pour un vol de croisière d'un avion de transport commercial. Ainsi, le diagramme indique que si l'on se trouve à des températures inférieures aux températures seuils, alors le critère de Schmidt-Appleman prévoit la formation de traînée de condensation. Le trait plein dans le diagramme décrit le profil type de la température en fonction de l'altitude (ou la pression) pour une atmosphère normalisée. Ce profil est appelé l'*International Standard Atmosphere* (ISA) et est publié par l'Organisation International de Normalisation (ISO).

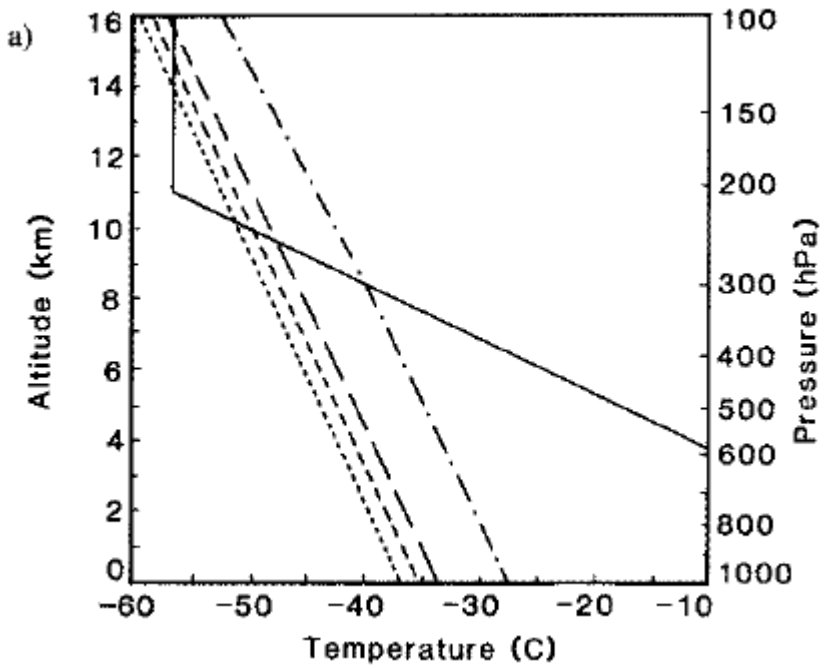

Figure 104 : Diagramme de Schmidt-Appleman révisé décrivant le seuil de température de formation de traînée de condensation en fonction de l'altitude pour une humidité relative par rapport à la phase liquide de 0% (pointillés), de 30% (petits traitillés), de 60% (longs traitillés) et de 100% (points-traitillés). Le trait plein correspond au profil de l'*International Standard Atmosphere* (ISA).

Source : [*Schumann*, 1996]

Table des illustrations

Figure 1 : Photographie d'une traînée de condensation laissée dans le sillage d'un avion de ligne à réaction. 1
Figure 2 : Photographie de traînées de condensation persistantes se transformant en cirrus artificiels. 2
Figure 3 : Estimations des forçages radiatifs des différents facteurs dus à l'aviation de la période préindustrielle à 2005. Les valeurs à droite correspondent aux valeurs de l'IPCC AR4 [*IPCC*, 2007] (entre parenthèses) et aux valeurs actualisées d'après *Lee et al.*, [2010]. L'échelle spatiale géographique de l'impact radiatif ainsi que l'état des connaissances scientifiques (LOSU : *Level Of Scientific Understanding*) sont indiqués à droite du tableau. 3
Figure 4 : Illustration de l'évolution de la température selon l'altitude et la pression dans une atmosphère standard. 9
Figure 5 : Régimes de dilution du panache dans le sillage d'un avion 10
Figure 6 : Visualisation du plan de symétrie d'une interaction jet circulaire-fluide à des niveaux de turbulence différents. (À gauche) Re $\approx 2{,}5 \cdot 103$. (À droite) Re ≈ 104. 12
Figure 7 : Isocontours de la source de vorticité axiale au centre des tourbillons et champ de vorticité axiale généré autour. De gauche à droite : $t = 20$ s, 80 s, 100 s, 120 s. 13
Figure 8 : Photographie d'une traînée de condensation dans le régime tourbillonnaire, mettant en évidence les panaches primaire et secondaire. 14
Figure 9 : Photographie de la destruction d'une traînée de condensation causée par une instabilité de Crow. 16
Figure 10 : Photographie d'une traînée de condensation dans le régime de dispersion illustrant la formation de « puffs ». 16
Figure 11 : Visualisation d'un tourbillon de sillage crée par le passage d'un avion léger à travers un panache de fumée rouge Source : NASA Langley Research Center – EL – 1996-00130 18
Figure 12 : Winglet au bout d'une aile d'un A350 19
Figure 13 : Schéma simplifié décrivant l'interaction du tourbillon de sillage avec le panache. 20
Figure 14 : Schéma simplifié de la formation d'un tourbillon marginal 20

Figure 15 : Schématisation du repère polaire local dans un plan transversal contenant le tourbillon de sillage. 22
Figure 16 : Profils de vitesse tangentielle des tourbillons de Rankine et de Lamb-Oseen avec $\Gamma 0 = 10$ m2s $- 1$ et $rc = 1$ m 24
Figure 17 : Taux de dilution d'un échantillon de panaches obtenus à partir de différents paramètres. La droite en traitillés correspond à l'interpolation des mesures donnée par *Schumann et al.* [1998]. 29
Figure 18 : (À gauche) Structure d'une particule primaire de suie et (à droite) structure d'un agrégat de suie, observées par Microscopie Electronique en Transmission (MET). ... 36
Figure 19 : Schéma décrivant les modes d'activation des suies par les composés soufrées 44
Figure 20 : Schéma illustrant l'évolution de la pression de vapeur saturante en fonction de l'âge et de la température du panache. 46
Figure 21 : Traînées de condensation formées dans le sillage d'un B747 en vol de croisière. 47
Figure 22 : Exemple de partitionnement d'un domaine de calcul en 256 sous-domaines avec le code CEDRE. 55
Figure 23 : Représentation classique du spectre d'énergie en turbulence isotrope 62
Figure 24 : Schéma énergétique de la réaction $\mathrm{SO3} + \mathrm{H2O} \rightarrow \mathrm{H2SO4}$ 75
Figure 25 : Schéma énergétique de la réaction $\mathrm{H} + \mathrm{OH}M\mathrm{H2O}$ 76
Figure 26 : Diagramme des erreurs relatives induites par l'approximation des coefficients de vitesses par une loi d'Arrhenius pour les réactions impliquant un troisième corps 78
Figure 27 : Evolution du coefficient de vitesse de la réaction H + H + M → H2, déterminé par la loi de Troe et approximé par une loi d'Arrhenius 78
Figure 28 : Schéma du processus d'adsorption des molécules de $\mathrm{SO3}$ et de $\mathrm{H2SO4}$ sur les sites d'adsorption à la surface des particules de suie 83
Figure 29 : Distribution en taille des particules volatiles à 4 âges différents du panache, pour une teneur en soufre du carburant de 20 ppm 87
Figure 30 : Schéma de l'évolution temporelle de la saturation en vapeur d'eau du panache dans le cas d'une atmosphère non saturée en eau. 92
Figure 31 : Description schématique d'un maillage bidimensionnelle non-structuré utilisé par le code CEDRE 98
Figure 32 : Exemples de types de cellules utilisés dans CEDRE 99
Figure 33 : Illustration de l'effet de distorsion des cellules avec l'augmentation du rapport d'aspect. 100
Figure 34 : Schéma descriptif pour le calcul du gradient aux interfaces 106

Figure 35 : Schéma descriptif de la formule des rectangles à droite..... 112
Figure 36 : Photographie d'un Boeing B737. 118
Figure 37 : Description de la géométrie de l'avion utilisée pour les simulations numériques. Vue de dessus (à gauche) et vue de face (à droite). 118
Figure 38 : Description de la géométrie du moteur double flux utilisé pour les simulations numériques. 119
Figure 39 : Description de la géométrie et des dimensions du domaine de calcul..... 119
Figure 40 : Représentation du maillage surfacique de l'avion et d'un plan de coupe du maillage volumique à une distance de $0{,}5\ b$ (haut) et de $1\ b$ (bas) dans le sillage de l'avion.. 121
Figure 41 : Visualisation du maillage surfacique de l'avion (vue du dessus). Un zoom montre la discrétisation fine au niveau de l'aile. 122
Figure 42 : Coupe longitudinale du maillage volumique au niveau du bord d'attaque de l'aile permettant de visualiser les couches de prismes du maillage. 123
Figure 43 : Description des conditions initiales et aux limites. 125
Figure 44 : Schéma explicatif de différents angles décrivant l'orientation d'un avion. 125
Figure 45 : Visualisation de l'isosurface de vorticité $\omega x = 20\ \mathrm{rad} \cdot \mathrm{s} - 1$..... 127
Figure 46 : Visualisation de l'évolution de la nappe de vorticité et du tourbillon de bout d'aile dans le sillage de l'avion. 128
Figure 47 : Evolution de la circulation radiale à plusieurs envergures derrière l'avion. 129
Figure 48 : Profils de vitesse tangentielle obtenus à plusieurs envergures dans le sillage de l'avion..... 131
Figure 49 : Profils de vitesse tangentielle des tourbillons marginaux d'un Airbus A321 mesurés à l'aide de LIDAR à l'aéroport Toulouse Blagnac et en soufflerie sur un modèle à l'échelle $1/13{,}6$. En abscisse, l'origine correspond à la position de l'axe central de l'avion..... 131
Figure 50 : Comparaison du profil de vitesse tangentielle obtenu à $x/b = 4$ avec les mesures effectuées par *Köpp* [1999]. La zone colorée correspond à la plage de valeur obtenue lors des mesures. 132
Figure 51 : Représentation de la géométrie du Boeing B737 modifiée par l'ajout d'une nacelle externe. 134
Figure 52 : (à gauche) Lignes de courant correspondant à la nappe de vorticité (traits fins) et aux jets des moteurs (traits épais) vues de dessus dans notre travail. (à droite) Les mêmes résultats pour l'étude de *Gerz et Ehret* [1997]. les symboles ⋄ représentent les lignes de

courant issues des sorties secondaires et les symboles + celles des sorties primaires. 135
Figure 53 : Profils d'énergie cinétique turbulente normalisée ($k/vmax2$) du jet à plusieurs distances en aval de la sortie primaire du moteur. 137
Figure 54 : Evolution du taux de dilution calculé à partir du diamètre du panache et de la densité de particules en fonction de l'âge du panache. Le courbe en traitillés représente la dilution analytique interpolée par *Schumann et al.* [1998]. 139
Figure 55 : Schéma descriptif de la géométrie utilisée pour l'étude des transformations chimiques des espèces au sein du panache..... 142
Figure 56 : Représentation d'une coupe longitudinale du maillage volumique..... 143
Figure 57 : (À gauche) Tracé des évolutions sur l'axe central du jet des fractions molaires des SOx, NOx et HOx en fonction de la distance en aval des sorties de moteur, obtenues par ce travail. (À droite) Résultats équivalents obtenus par *Kärcher et al.* [1996a]. 147
Figure 58 : Champ de fraction molaire de H_2SO_4 dans une coupe longitudinale passant par le centre du jet. Représentation du panache de H_2SO_4 en blanc par l'isovolume $x\mathrm{H2SO4} > 0$..... 150
Figure 59 : (À gauche) Evolution des fractions molaires des espèces soufrées dans le sillage d'un Boeing B737 équipé d'un CFM-56. (À droite) Résultats équivalents dans le domaine de calcul simplifié avec un CF6. 150
Figure 60 : Conditions initiales et aux limites pour la simulation de la partie III.4..... 153
Figure 61 : Diagramme de Schmidt-Appleman révisé pour une efficacité de propulsion $\eta = 0{,}24$ et un indice d'émission de vapeur d'eau $IE\mathrm{H2O} = 1{,}34\ \mathrm{kg} \cdot \mathrm{kg} - 1$. TLC représente la température seuil sous laquelle le critère de Schmidt-Appleman révisé prévoit la formation d'une traînée de condensation. 154
Figure 62 : Représentation des zones de saturation en eau (en bleu) par rapport à la phase liquide dans le domaine de calcul. (En haut) Vue de côté. (En bas) Zoom sur la zone de naissance de la saturation dans le panache. La flèche rouge met en évidence le creux formé par le jet. 156
Figure 63 : Tracé de l'évolution des saturations en eau par rapport aux phases liquide et solide dans le centre du jet en fonction de la distance à partir de la sortie du moteur..... 157
Figure 64 : (À gauche) Distribution en taille des particules volatiles. (À droite) Indice d'émission apparent des particules volatiles en fonction de leur taille. Ces résultats correspondent à une teneur en soufre de 2700 ppm..... 159

Figure 65 : Evolution temporelle de la fraction surfacique de particules de suie activée par le processus de collecte des particules volatiles pour une teneur en soufre de 2700 ppm. 160
Figure 66 : Fraction surfacique activée des particules de suie obtenues par *Kärcher* [1998] pour différentes teneur en soufre. θads correspond à la couverture due au processus d'adsorption et θsca, au processus de collecte. 161
Figure 67 : Evolution des fractions molaires de l'acide sulfurique dans le panache et adsorbé à la surface des particules de suies au centre du jet en fonction de la distance. 164
Figure 68 : Evolution temporelle de la fraction de surface activée des particules de suie au centre du jet. 165
Figure 69 : Photographie de l'ATTAS, correspondant à un avion de type VFW 614. 165
Figure 70 : Visualisation des profils de rayon de particules aux 4 premières envergures en aval de l'avion. L'isovolume gris à droite ($Dp > 40$ nm) représente le panache de cristaux de glace. La ligne rouge donne la position du centre du jet. 167
Figure 71 : Photographie des traînées de condensation issues de l'avion ATTAS à une distance de 50 m vues du dessus. Les moteurs consomment des carburants avec différentes teneurs en soufre (170 ppm à gauche, 5500 ppm à droite). 168
Figure 72 : Distribution en taille des cristaux de glace à différentes distances derrière l'avion. 170
Figure 73 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière de l'avion. 172
Figure 74 : Photographie de la formation d'une traînée de condensation dans le panache d'un Boeing B737. 173
Figure 75 : Visualisation de la traînée de condensation dans le sillage de l'avion par l'isovolume $\Delta\tau v > 0{,}01$. 173
Figure 76 : Visualisation des isovolumes de sursaturation en vapeur d'eau ($sliq > 1$) par rapport à l'eau liquide pour le cas $HR = 30\%$ (en haut) et le cas $HR = 60\%$ (en bas). 177
Figure 77 : Comparaison de la superficie des panaches de sursaturation en vapeur d'eau en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. 178
Figure 78 : Evolution des saturations en vapeur d'eau au centre du jet par rapport à l'eau liquide (symbole ○) et par rapport à la glace (symbole □) en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas HR = 30% et HR = 60%. 179

Figure 79 : Evolution des saturations en vapeur d'eau sur une ligne en périphérie du panache par rapport à l'eau liquide (symbole ○) et par rapport à la glace (symbole □) en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas HR $= 30\%$ et HR $= 60\%$. 180
Figure 80 : Evolution de la fraction de particules situées dans une zone sursaturée en fonction de la distance derrière l'avion pour le cas HR$liq = 30\%$ et le cas HR$liq = 60\%$.... 182
Figure 81 : Evolution du rayon moyen des particules en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. 184
Figure 82 : Distribution en taille des cristaux de glace à $x/b = 4$ pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. 185
Figure 83 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour les cas $HR = 30\%$ et $HR = 60\%$. 186
Figure 84 : Evolution de la fraction molaire de H2SO4 au centre du panache en fonction de la distance derrière l'avion pour trois différentes teneurs en soufre. 189
Figure 85 : Evolution de la fraction surfacique activée des particules de suies au centre du panache en fonction de la distance derrière l'avion pour trois différentes teneurs en soufre. 190
Figure 86 : Fraction surfacique activée des particules de suie obtenues par *Kärcher* [1998] pour différentes teneur en soufre. θads correspond à la couverture due au processus d'adsorption et θsca, au processus de collecte. 190
Figure 87 : Illustration schématique de l'approximation réalisée sur la surface hydrophile. 192
Figure 88 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre. 193
Figure 89 : Distribution en taille des particules dans le panache à $x = 120$ m pour différentes teneurs en soufre. 194
Figure 90 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre. 195
Figure 91 : Visualisation des traînées de condensation visibles ($\Delta\tau v > 0{,}01$) pour différentes teneurs en soufre. 196
Figure 92 : Photographie des traînées de condensation issues de l'avion ATTAS à une distance de 50 m vues du dessus. Les moteurs consomment des carburants avec différentes teneurs en soufre (170 ppm à gauche, 5500 ppm à droite). 197
Figure 93 : Evolution de la superficie de la traînée de condensation visible en fonction de la distance derrière l'avion pour différentes teneurs en soufre. 198

Figure 94 : Evolution de la fraction surfacique de suie activée au centre du jet en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents... 200
Figure 95 : Evolution de la surface totale activée des particules de suies dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents..... 200
Figure 96 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents. 202
Figure 97 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance en aval de l'avion pour deux rayons de particules de suie sèches différents. 203
Figure 98 : Evolution des fractions de particules se trouvant dans une zone sursaturée (à gauche) et des nombres de particules se trouvant dans une zone sursaturée (à droite) en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émission de particules de suie différents..... 205
Figure 99 : Evolution de la superficie du panache sursaturé en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émission de particules de suie différents..... 206
Figure 100 : Evolution du rayon moyen des particules dans le panache en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents..... 208
Figure 101 : Evolution de l'épaisseur optique de la traînée de condensation en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents. 209
Figure 102 : Visualisation de la traînée de condensation formée par le tracé de l'isovolume $\Delta\tau v > 0{,}01$ pour deux indices d'émissions de particules de suie différents. 210
Figure 103 : Evolution de la superficie de la traînée de condensation visible en fonction de la distance derrière l'avion pour deux indices d'émissions de particules de suie différents. 211
Figure 104 : Diagramme de Schmidt-Appleman révisé décrivant le seuil de température de formation de traînée de condensation en fonction de l'altitude pour une humidité relative par rapport à la phase liquide de 0% (pointillés), de 30% (petits traitillés), de 60% (longs traitillés) et de 100% (points-traitillés). Le trait plein correspond au profil de l'*International Standard Atmosphere* (ISA). 233

Table des tableaux

Tableau 1 : Bilan des émissions d'espèces primaires dans l'atmosphère par l'aviation [*Lee et al.*, 2010] 33

Tableau 2 : Liste des 60 réactions en phase gazeuse du mécanisme réactionnel utilisé pour modéliser les transformations chimiques au sein du panache 69

Tableau 3 : Schéma réactionnel réduit de formation des oxydes de soufre 72

Tableau 4 : Composition des espèces chimiques en sortie primaire d'un moteur CF6 (équipant un B747) et de l'air ambiant. Les valeurs du tableau sont données en fraction molaire. 144

Tableau 5 : Composition des espèces chimiques en sortie primaire du moteur CFM-56 et de l'air ambiant [*Garnier et al.*, 1997a]. Les valeurs du tableau sont données en fraction molaire. 148

Tableau 6 : Composition des gaz en sortie primaire du moteur et pour l'air ambiant pour la simulation de la partie III.4, extraite de *Garnier et al.* [1997a]. Les valeurs du tableau correspondent à des fractions massiques. 153

Tableau 7 : Conditions météorologiques de vol et rayon moyen des particules mesuré au sein des traînées de condensation d'un Airbus A310-300 et de l'ATTAS pour un panache âgé de moins de 2 secondes. La teneur en soufre du carburant utilisé est de 2700 ppm dans les deux cas. Les données de notre étude sont données à droite du tableau pour comparaison. 169

Tableau 8 : Principaux paramètres et résultats des simulations des études de *Kärcher et al.* [1996b] et de *Paoli et al.* [2013]. Les données correspondantes issues de nos simulations sont montrées à droite du tableau pour comparaison. 173

KHOU Jean-Charles – Thèse de doctorat - 2016

Résumé :
Dans le cadre des études portant sur l'impact de l'aviation sur le changement climatique, les traînées de condensation font partie des phénomènes présentant le plus d'incertitudes quant à leur rôle. Dans ce contexte, l'étude vise à mieux décrire les caractéristiques physico-chimiques du panache dans le champ proche d'un avion, celles-ci pouvant conditionner les propriétés des traînées de condensation formées.
Pour cela, des simulations spatiales tridimensionnelles de type RANS ont été réalisées à l'aide du code CEDRE de l'ONERA, prenant en compte les processus microphysiques, les réactions chimiques, et l'écoulement aérodynamique autour et dans le sillage d'une configuration réaliste d'un avion de transport civil. Les modèles microphysiques intégrés permettent de décrire les processus d'activation des particules de suie et les processus de condensation et d'évaporation d'eau à leur surface.
Une phase de validation du code a été menée pour chacun des processus pris en compte, montrant un bon accord avec les données de la littérature. Des études de sensibilité ont également été conduites afin d'évaluer l'impact des paramètres atmosphériques et des caractéristiques des effluents sur les propriétés des cristaux de glace formés. L'augmentation de la teneur en soufre du carburant entraîne un accroissement de l'activité des suies et aboutit à une distance d'apparition plus courte et une opacité plus élevée des traînées de condensation. Lorsque la quantité d'eau émise est suffisante, l'augmentation du nombre de suies éjectées entraîne un accroissement de la concentration de glace, résultant en un fort accroissement de l'opacité et de la superficie de la traînée de condensation.

Mots clés : Traînée de condensation, simulation numérique spatiale, teneur en soufre, panache, activation de suie, croissance de particules de glace.

Modelling of contrails by interaction between dynamical, chemical and microphysical processes

Abstract:
In the framework of the impact of aviation on climate change studies, the involvement of contrails is identified as one of the most uncertain components. In this context, this study aims to better describe the physico-chemical properties of the plume in the near-field of an aircraft, for they could be critical to contrails properties.
To this end, RANS spatial simulations have been performed using the code CEDRE of ONERA, taking into account the microphysical processes, chemical reactions, and the air flow around and in the wake of a realistic civil transport aircraft. Microphysical models have been implemented in order to describe the soot activation processes and the condensation and evaporation of water upon their surface.
A validation phase of the code has been carried out for each of the processes taken into account, showing good agreements with data from the literature. Sensitivity studies have also been performed in order to assess the impact of atmospheric parameters and exhaust characteristics on formed contrails properties. The increase of the fuel sulphur content leads to increased soot activation that results in a shorter contrail onset and increased contrail opacity. If the amount of emitted water is sufficient, the increase of the number of ejected soot particles causes an increase of ice concentration that results in an important increase of contrail opacity and surface area.

Keywords: Contrails, spatial numerical simulation, fuel sulphur content, plume, soot activation, ice particles growth.