



**HAL**  
open science

# Simulation aux grandes échelles implicite et explicite de la combustion supersonique

Anthony Techer

► **To cite this version:**

Anthony Techer. Simulation aux grandes échelles implicite et explicite de la combustion supersonique. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2017. Français. NNT : 2017ESMA0020 . tel-01685495

**HAL Id: tel-01685495**

**<https://theses.hal.science/tel-01685495>**

Submitted on 16 Jan 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE

Pour l'obtention du grade de  
DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE  
DE MÉCANIQUE ET D'AÉROTECHNIQUE  
(Diplôme national — Arrêté du 25 mai 2016)

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

Secteur de recherche :  
Énergétique, Thermique, Combustion

Présentée par :  
**Anthony TECHER**

\*\*\*\*\*

## **Simulation aux grandes échelles implicite et explicite de la combustion supersonique**

\*\*\*\*\*

Directeur de thèse : **Arnaud MURA**  
Co-encadrant : **Guillaume LEHNASCH**

\*\*\*\*\*

Soutenue le 20 novembre 2017  
devant la commission d'examen

\*\*\*\*\*

### **Jury**

Président :

M. Michel CHAMPION                      Directeur de recherche CNRS — Pprime, Poitiers

Rapporteurs :

M. Luis F. FIGUEIRA DA SILVA          Professeur — PUC de Rio de Janeiro

M. François-Xavier DEMOULIN          Professeur — université de Rouen

Membres du jury :

M. Forman A. WILLIAMS                  Professeur — université de Californie, San Diego

Mme. Nabihha CHAUMEIX                  Directrice de recherche CNRS — ICARE, Orléans

M. Pierre BOIVIN                          Chargé de recherche CNRS — M2P2, Marseille

M. Guillaume LEHNASCH                  Maître de conférences — ISAE-ENSMA, Pprime, Poitiers

M. Arnaud MURA                          Directeur de recherche CNRS — Pprime, Poitiers



*À la mémoire de ma mère ...  
Je te dédie cette thèse ...*



# Remerciements

Ces travaux ont été effectués à l'Institut P' (UPR 3346, CNRS) dans le département Fluides, Thermique et Combustion, axe Combustion Turbulente, où je remercie MM. Yves GERVAIS, Jacques BORÉE et Arnaud MURA pour leur accueil et la mise à disposition du matériel nécessaire à la réalisation de ces travaux. Je remercie bien évidemment mes financeurs, la chaire AIRBUS « Propulsion et environnement » avec ses principaux collaborateurs qui sont le CNRS (Institut P', ICARE, Prisme) et MBDA France, représentés par : MM. François FALEMPIN, Yann MOULE et Iskender GÖKALP.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à M. Michel CHAMPION, d'avoir présidé mon jury de thèse, à MM. Luis F. FIGUEIRA DA SILVA et François-Xavier DEMOULIN pour avoir accepté de rapporter et expertiser mes travaux. J'ai pu constater leurs lectures minutieuses de mon travail, explorant et soulevant tous les petits détails de mes recherches. Merci pour vos encouragements, vos commentaires et les discussions pertinentes lors la soutenance.

I would also like to express my gratitude to Prof. Forman A. WILLIAMS, who did me the honor of agreeing to be in my jury. As my colleague told me, do not miss the eclipse that is passing!

Je remercie également Mme. Nabihah CHAUMEIX d'avoir accepté de faire partie de ce jury, malgré que ces travaux soient très orientés simulations numériques, j'ai beaucoup apprécié les discussions physico-chimiques qui en résultaient. Je tiens à exprimer ma reconnaissance envers Pierre BOIVIN, autre membre de ce jury, mais surtout, pour toute l'aide fournie sur la compréhension et l'implémentation de ses mécanismes cinétiques réduits, j'ai beaucoup apprécié nos échanges, merci. Un grand merci à Yann MOULE, membre invité et représentant de MBDA, merci d'avoir suivi ma thèse et surtout, pour la relecture minutieuse de mon manuscrit.

Je remercie tout particulièrement mes responsables, MM. Arnaud MURA et Guillaume LEHNASCH pour leur disponibilité, leurs regards critiques, leurs grandes patiences mais surtout, pour la confiance qu'ils m'ont accordée pour réaliser ce travail. Merci de m'avoir permis de voir ce qu'était le monde merveilleux de la Recherche Scientifique.

Je voudrais également remercier Eric GONCALVES et toute l'équipe pédagogique aéro de l'ENSMA pour m'avoir offert l'opportunité d'enseigner dans la fonction d'ATER, j'ai beaucoup apprécié cette expérience.

Aujourd'hui s'achève pour moi un long parcours « scolaire ». Un doctorat est une expérience à la fois longue, courte et sinueuse ; une aventure unique en son genre, qui vous change, assurément, à jamais. . . Cet aboutissement n'aurait certainement pas été possible sans l'environnement et l'investissement humain qui la précèdent.

C'est pourquoi, je souhaiterais tout d'abord remercier « les anciens » : mes professeurs / enseignants qui m'ont encouragé, soutenu et donné envie de poursuivre dans cette voie, mais surtout, d'apprendre et de comprendre. Une pensée particulière à ceux qui m'ont clairement marqué : Mmes. HUMBERT, BAYART, CARRIÉ, AUBRUN, MM. PAYSANT, GENDREAU, LARCHEVEQUE, LE MÉTAYER, KOURTA, MAZELLIER, HALTER, DUDOK DE WIT, . . . Un grand merci à Ivan FEDIOUN qui m'a mis sur la voie de cette thèse, sa passion et sa rigueur dans son travail m'ont énormément inspiré et motivé.

Je remercie ensuite, « les actuelles » : Jocelyne, Marie-Cannelle, Audrey pour leur gentillesse et leur bienveillance, un grand merci pour tout ce que vous faites pour améliorer la vie des thésards. Merci

aux autres permanents de l'équipe combustion que j'ai pu côtoyer : Cécile, Zakaria et Vincent. Merci Vincent, sincèrement, pour tes capacités d'écoute, de soutien et ta sympathie.

Cependant, ces travaux n'auraient clairement pas été possibles sans la main d'œuvre de la recherche, mes compagnons d'infortune : les doctorants. Merci aux anciens : Pédro, la *hotline CREAMS*; Romain, pour ton cynisme et ta bonne humeur ; Nguyen. Merci aux actuels : Radouan, pour toutes ces discussions sur tout et rien, les relectures, les avis et surtout, de m'avoir supporté à chaque instant ; Aimad, pour tellement de chose que je ne peux être exhaustif... ta sympathie, ton hospitalité, tes compétences informatiques (*The I.T. guy*), sur *CANTERA*, sur la recherche, pour les soirées (bricolages, miams, ...), c'était avec honneur d'être ton témoin de mariage ; Xiaodong ; Fabio et surtout Song (Post-doc), merci pour ces discussions aussi enrichissantes qu'instructives, tu as assurément apporté un œil nouveau au sein de l'équipe. Merci de faire partie des rares à considérer ce qu'on fait comme étant difficile. Que ceux qui m'ont aidé, de près ou de loin, apporté ou fait mûrir mes réflexions, reçoivent ici toute ma gratitude. Aux actuels et aux nouveaux, je vous souhaite à tous une très bonne continuation, en espérant que vous trouverez votre voie.

Ces années durant, j'ai pu côtoyer un large panel de doctorants / docteurs provenant des diverses équipes de recherche, je voudrais ici les remercier pour les bons moments que j'ai passés avec eux, autour d'un verre, d'un repas, d'un ballon, ... Je ne peux être exhaustif, c'est pourquoi je m'excuse d'avance pour ceux que j'aurai oubliés : Bruno, Maxime, Geoffrey, Carlos, Romain, Pierre, David, Paul, Alessia (Institut Von Karman), Florance, Manu, Thomas, Armande, ... ; sans oublier les ex-stagiaires : Ilkay, Werner, Weegy, Benjamin, Wataru, ... Aux membres fondateurs et actuels de l'ADDICT (Association des Doctorants en Dynamique des fluides, Combustion et Thermique) et de la JDD (Journée Des Doctorants), je vous remercie de votre investissement humain et de votre temps afin de poursuivre ce qu'on avait initié.

À tous mes camarades d'école : Jean-jean, Mariame, Paul, Marina, Xavier, Xiu, Benjamin, Samuel, Xavier, Paul, Clément, ... Je vous remercie pour tous les moments qu'on a partagés et échangés ensemble. Clément, merci pour ta sympathie, ta bonté, ton hospitalité pour mes débuts à Poitiers, ton optimisme à l'épreuve de tout, tu es assurément l'une des personnes les plus humbles que j'ai rencontrées jusque là. Merci pour toutes ces discussions où l'on a essayé de refaire le monde.

À mes copains d'avant ; à mes frères d'arme ; à ma famille : mon père, mes tantes/oncles, mes cousin(e)s, ma sœur et mes frères, qui m'ont soutenu et encouragé durant ces longues années. À mes mentors, à mon *sensei*, qui m'ont permis d'être la personne que je suis aujourd'hui.

le 29 novembre 2017

Anthony TECHER

*La connaissance seule ne suffit pas.*

*La vraie compréhension vient de la mise en expérience.*

---

Seymour PAPERT — Professeur — MIT, USA





# Table des matières

<b>Nomenclature</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 Contexte industriel : propulsion aéronautique et spatiale . . . . .	1
1.2 Contexte de recherche : simulation de la combustion à grande vitesse . . . . .	4
1.2.1 La simulation, une expérience numérique . . . . .	4
1.2.2 Principaux formalismes de simulation : DNS / LES / RANS . . . . .	4
1.3 Objectifs et organisation du manuscrit . . . . .	5
<b>2 Équations générales du problème</b>	<b>9</b>
2.1 Thermo-chimie du mélange gazeux . . . . .	10
2.1.1 Description du mélange . . . . .	10
2.1.2 Équation d'état . . . . .	10
2.1.3 Énergies, enthalpie, entropie et chaleurs spécifiques . . . . .	11
2.2 Modélisation de la chimie . . . . .	13
2.2.1 Notion de réaction chimique . . . . .	13
2.2.2 Cinétique chimique . . . . .	15
2.2.3 Hypothèse de chimie infiniment rapide et de chimie finie . . . . .	17
2.2.4 Réduction de schéma cinétique . . . . .	17
2.2.5 Rapport d'équivalence, richesses et stœchiométrie . . . . .	18
2.3 Équations de Navier–Stokes pour un milieu compressible réactif . . . . .	19
2.4 Flux moléculaires détaillés . . . . .	20
2.4.1 Tenseur des contraintes visqueuses . . . . .	20
2.4.2 Flux de masse surfacique . . . . .	20
2.4.3 Flux de chaleur surfacique . . . . .	21
2.5 Flux moléculaires simplifiés . . . . .	22
2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses simplifié . . . . .	22
2.5.2 Flux de masse simplifié . . . . .	22
2.5.3 Flux de chaleur simplifié . . . . .	22
2.6 Coefficients de transport multi-espèces . . . . .	23
2.6.1 Pour les flux moléculaires détaillés . . . . .	23
2.6.2 Pour les flux moléculaires simplifiés . . . . .	23
2.6.3 Nombres adimensionnés associés aux coefficients de transports . . . . .	24
2.6.4 Effet de diffusion différentielle ou effet de Lewis . . . . .	24
2.6.5 Pour des flux moléculaires très simplifiées . . . . .	24
<b>3 Modélisation de la turbulence</b>	<b>27</b>
3.1 Opérateur de filtrage . . . . .	28
3.1.1 Hypothèses et définitions . . . . .	28
3.1.2 Propriétés fondamentales de l'opérateur de filtrage . . . . .	29
3.2 Équations de Navier–Stokes compressibles réactifs filtrées . . . . .	29

3.3	Flux moléculaires et coefficients de transport simplifiés résolus . . . . .	32
3.4	Traitement des termes de sous-maille . . . . .	33
3.5	Modélisation des termes de sous-maille pour l'écoulement . . . . .	33
3.5.1	Hypothèse de Boussinesq . . . . .	34
3.5.2	Modèles de viscosité de sous-maille . . . . .	34
3.5.3	Effets de la compressibilité sur les échelles de sous-maille . . . . .	36
3.5.4	Modèles de transport scalaire . . . . .	37
3.6	Écoulements pariétaux en LES . . . . .	39
3.7	Statistique en LES . . . . .	40
3.7.1	Moments statistiques . . . . .	40
3.7.2	Nombres de Reynolds et échelles caractéristiques de la turbulence . . . . .	43
3.8	Méthodes numériques : code <i>CREAMS</i> . . . . .	44
3.8.1	Prise en main du code de calcul . . . . .	45
3.8.2	Parallélisation du code . . . . .	51
<b>4</b>	<b>Structures de flammes et leur représentation</b>	<b>55</b>
4.1	Flamme laminaire prémélangée . . . . .	56
4.2	Flamme laminaire de diffusion . . . . .	57
4.2.1	Scalaire passif et fraction de mélange . . . . .	57
4.2.2	Structure d'une flamme de diffusion . . . . .	59
4.2.3	Modélisation d'une flamme de diffusion laminaire . . . . .	60
4.3	Introduction à la combustion turbulente et sa modélisation . . . . .	61
4.4	Modèle PSR / quasi-laminaire / Arrhenius / ILES / "No model" . . . . .	62
4.5	Développement en série de Taylor du terme source chimique . . . . .	63
4.6	Modèle Intermittent Lagrangien . . . . .	64
4.7	Régimes et diagrammes de combustion turbulente . . . . .	66
4.7.1	Cas des flammes turbulentes prémélangées . . . . .	66
4.7.2	Coordonnées basées sur les nombres de Damköhler et de Reynolds . . . . .	67
<b>5</b>	<b>JISCF : analyse générale de l'écoulement inerte</b>	<b>71</b>
5.1	Description générale de l'écoulement . . . . .	72
5.2	Domaines et maillages retenus . . . . .	74
5.2.1	Maillage « Mesh 1 » . . . . .	74
5.2.2	Maillage « Mesh 2 » . . . . .	74
5.3	Conditions aux limites de l'écoulement . . . . .	76
5.3.1	Jet combustible . . . . .	77
5.3.2	Paroi . . . . .	78
5.3.3	Écoulement transverse . . . . .	78
5.3.4	Sorties . . . . .	80
5.4	Simulations aux grandes échelles inerte du JISCF . . . . .	80
5.4.1	Paramètres des simulations . . . . .	80
5.4.2	Structure globale de l'écoulement . . . . .	81
5.4.3	Critères de qualité et niveau de résolution . . . . .	87
5.4.4	Caractéristiques de l'écoulement moyen et fluctuant . . . . .	90
5.4.5	Étude a priori du mélange et possible allumage . . . . .	99
5.5	Conclusions . . . . .	104

<b>6</b>	<b>Modélisation de la variance scalaire de sous-maille</b>	<b>107</b>
6.1	Équation pour la variance de sous-maille d'un scalaire passif . . . . .	108
6.2	Modélisation des termes de sous-maille pour le scalaire passif . . . . .	111
6.2.1	Flux de masse de sous-maille du scalaire . . . . .	111
6.2.2	Taux de dissipation scalaire . . . . .	111
6.3	Récapitulatif des équations de transport fermées . . . . .	111
6.3.1	Modèle I : équation de transport pour la variance de sous-maille $\tilde{V}_\xi$ . . . . .	112
6.3.2	Modèle II : variance SGS calculée à partir du scalaire au carré filtré $\tilde{\xi}^2$ . . . . .	112
6.3.3	Modèle III : variance SGS calculée à partir de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi$ . . . . .	113
6.4	Méthodes de reconstruction de la variance de sous-maille . . . . .	113
6.5	Étude préliminaire des différents modèles de variance de sous-maille . . . . .	113
6.6	Paramètres des simulations . . . . .	115
6.7	Résultats des simulations . . . . .	116
6.7.1	Erreurs associées à l'évaluation du scalaire filtré au carré $\tilde{\xi}^2$ . . . . .	116
6.7.2	Analyse des profils des variances scalaires : 1 <sup>re</sup> méthode de reconstruction . . . . .	119
6.7.3	Analyse des profils des variances scalaires : 2 <sup>e</sup> méthode de reconstruction . . . . .	126
6.8	Conclusions . . . . .	128
<b>7</b>	<b>LES réactive du JISCF basée sur le modèle PSR</b>	<b>131</b>
7.1	Introduction et éléments de bibliographie . . . . .	131
7.2	Paramètres de simulation . . . . .	136
7.3	Dynamique de l'écoulement réactif et structure de flamme . . . . .	137
7.3.1	Évolution temporelle de l'écoulement réactif . . . . .	137
7.3.2	Structure de flamme . . . . .	137
7.3.3	Champs aérodynamiques globaux à $t^* = 170$ . . . . .	142
7.3.4	Champs réactifs globaux à $t^* = 170$ . . . . .	144
7.4	Analyse globale des grandeurs moyennes . . . . .	148
7.4.1	Résolution du calcul . . . . .	148
7.4.2	Champs moyens réactifs . . . . .	149
7.5	Analyse des régimes de combustion rencontrés dans le JISCF . . . . .	152
7.5.1	Régimes d'écoulement . . . . .	152
7.5.2	Études préliminaires : auto-allumage <i>versus</i> propagation . . . . .	153
7.5.3	Régimes de combustion turbulente prémélangée . . . . .	155
7.5.4	Régimes de combustion turbulente sur le diagramme $(Da, Re_t)$ . . . . .	158
7.6	Conclusion . . . . .	165
<b>8</b>	<b>Perspectives et conclusions</b>	<b>167</b>
8.1	Modèle hybride de combustion turbulente . . . . .	167
8.1.1	Contribution du terme résolu pondéré $(1 - S_\xi)\dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y})$ . . . . .	168
8.1.2	Contribution du terme de sous-maille $S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{sgs}$ . . . . .	168
8.2	LES réactive du JISCF basée sur un modèle hybride de combustion turbulente . . . . .	169
8.2.1	Paramètres de simulation . . . . .	169
8.2.2	Résultats et éléments de comparaisons avec le modèle PSR . . . . .	170
8.3	Conclusions générales . . . . .	173
8.4	Perspectives générales . . . . .	175
	<b>Annexes</b>	<b>177</b>
<b>A</b>	<b>Tables thermodynamiques</b>	<b>177</b>
<b>B</b>	<b>Systèmes pour l'équation de l'énergie totale filtrée</b>	<b>179</b>

<b>C</b>	<b>Dérivation des équations de transport pour la variance scalaire de sous-maille</b>	<b>183</b>
C.1	Équation de la fraction de mélange $\xi$	183
C.2	Équation du scalaire au carré $\xi^2$	184
C.3	Équation du scalaire filtré au carré $\tilde{\xi}^2$	184
C.4	Équation de la variance scalaire de sous-maille $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}^2 - \xi^2$	185
C.5	Équation de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$	185
<b>D</b>	<b>Cinétique des réactions <math>\text{H}_2/\text{O}_2</math></b>	<b>187</b>
D.1	Auto-allumage des mélanges $\text{H}_2/\text{O}_2$	187
D.2	Schémas cinétiques réduits de BOIVIN <i>et al.</i>	189
D.2.1	Mécanisme 4 étapes + 6 espèces + 2 stationnaires	191
D.2.2	Mécanisme 3 étapes + 5 espèces + 3 stationnaires pour $T > T_c$	192
D.2.3	Mécanisme 3 étapes hybrides + 5 espèces + 3 à 4 stationnaires	193
D.2.4	Vérification de l'implémentation et discussions	193
<b>E</b>	<b>Équation de transport de l'énergie cinétique turbulente</b>	<b>195</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>197</b>

# Nomenclature

## Acronymes

AEQS	Approximation de l'État Quasi-Stationnaire
CFD	<i>(Computational Fluid Dynamics)</i> Dynamique des fluides numérique
CFL	Courant-Friedrichs-Levy
CPU	<i>(Central Processing Unit)</i> Unité centrale de traitement
<i>CREAMS</i>	<i>Compressible REActive Multi-Species</i>
CVP	<i>(Counter-Rotating Vortex Pair)</i> Paire de tourbillons contra-rotatifs
DMR	<i>(Double Mach Reflection)</i> Double réflexion de Mach
DNS	<i>(Direct Numerical Simulation)</i> Simulation numérique directe
EDC	<i>Eddy Dissipation Concept</i>
FDF	<i>Filtered Density Function</i> Fonction de densité filtrée
HPC	<i>High Performance Computing</i>
IEM	Interaction par Echange avec la Moyenne
JANAF	<i>Joint Army-Navy-Air Force</i>
JISCF	<i>(Jet In Supersonic Cross-Flow)</i> Jet dans un courant transverse supersonique
LAPCAT	<i>Long-term Advanced Propulsion Concepts And Technologies</i>
(I)LES	<i>(Implicit) Large Eddy Simulation</i> Simulation aux grandes échelles (implicite)
LMSE	<i>Linear Mean Square Estimation</i>
LRM	<i>(Linear Relaxation Model)</i> Modèle de relaxation linéaire
MIL	Modèle Intermittent Lagrangien
MPI	<i>Message Passing Interface</i>
NSCBC	<i>Navier–Stokes Characteristic Boundary Conditions</i>
PaSR	<i>Partially Stirred Reactor</i>
PDF	<i>(Probability Density Function)</i> Fonction densité de probabilité
PLIF	<i>Planar Laser Induced Fluorescence</i>
PSR	<i>(Perfectly Stirred Reactor)</i> Réacteur parfaitement mélangé / agité
RANS	<i>Reynolds Average Navier–Stokes Simulation</i>
SDR	<i>(Scalar Dissipation Rate)</i> Taux de dissipation scalaire
SGS	<i>(Sub-Grid Scale)</i> Échelle en sous-maille
TFM	<i>(Thickened Flame Model)</i> Modèle de flamme épaissie
THI	Turbulence Homogène et Isotrope
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>

WALE	<i>Wall Adaptive Local Eddy</i>
(W)ENO	<i>(Weighted) Essentially Non-Oscillatory</i>

### Nombres adimensionnels

Da	Nombre de Damköhler (temps turbulent / chimique)
Fo	Nombre de Fourier (chaleur transférée / chaleur stockée)
Ka	Nombre de Karlovitz (temps chimique / Kolmogorov)
Le	Nombre de Lewis (diffusion thermique / diffusion de masse)
Ma	Nombre de Mach (vitesse / célérité du son)
Pr	Nombre de Prandtl (viscosité moléculaire / diffusion thermique)
Re	Nombre de Reynolds (inertie / viscosité)
Sc	Nombre de Schmidt (viscosité moléculaire / diffusion de masse)

### Opérateurs

$\bar{f}$	Grandeur filtrée spatialement : Éq. (3.1)
$\tilde{f}$	Grandeur filtrée et pondérée par la masse volumique : Éq. (3.9)
$\langle f \rangle$	Moyenne temporelle / d'ensemble (moyenne de Reynolds) : Éqs. (3.58) et (3.59) <i>ou</i> moyenne conditionnée
$\{f\}$	Moyenne temporelle pondérée par la masse volumique (moyenne de Favre) : Éq. (3.61)
$\check{f}$	Opérateur désignant la grandeur calculable à partir des variables filtrées : Éq. (3.10)
$\mathcal{L}$	Opérateur continu des termes sources / puits : Éqs. (6.3) et (6.6)
$L$	Opérateur discret des termes sources / puits : Éq. (6.24)

### Indices

$\infty$	Valeur prise dans l'écoulement transverse principal oxydante
$\alpha$	Grandeur partielle associée à l'espèce $\alpha$
$F / O$	Combustible ( <i>fuel</i> ) / oxydant ( <i>oxydizer</i> )
jet	Valeur prise dans le jet d'injection du combustible
$i / f$	Grandeur initiale / finale
rms	Erreur quadratique moyenne / Écart-type ( <i>Root Mean Square</i> )
st	Stœchiométrie
mr	État le plus réactif ( <i>Most Reactive</i> )
res	Grandeur résolue
sgs	Grandeur en sous-maille ( <i>Sub Grid Scale</i> )
$s$	Grandeur thermodynamique sensible
$t$	Grandeur totale <i>ou</i> grandeur associée à la turbulence

$w$  Grandeur à la paroi (*Wall*)

### Exposants

\* Grandeur adimensionnée

0 Grandeur prise dans les conditions standard :  $T^0 = 298$  K et  $p^0 = 1$  atm = 101 325 Pa

eq Grandeur à l'équilibre chimique

fuel / ox Mélange du courant combustible (*fuel*) / oxydant pris à l'infini, *i.e.* à l'entrée de la chambre

u / b Caractéristique du mélange frais (*unburnt*) / des gaz brûlés (*burnt*)

$P / NP$  Prémélangé / non-prémélangé

On notera par la suite une variable thermodynamique  $F$  (énergies, capacités calorifiques, ...) en majuscule pour désigner sa grandeur globale, avec un chapeau  $\hat{F}$  pour désigner sa grandeur molaire et en minuscule  $f$  pour désigner sa grandeur spécifique, *i.e.* par unité de masse.

Symbole	Définition(s)	Unités SI
<b>Lettres romaines</b>		
$A_{fi}$	Facteur pré-exponentiel (ou de fréquence) de la $i^e$ réaction : Éq. (2.40)	(mol, s, cm <sup>3</sup> , J et K)
$b_i$	Exposant de température de la $i^e$ réaction : Éq. (2.40)	(-)
$C_\alpha$	Concentration molaire de l'espèce $\alpha$ : § 2.1.1	(mol/m <sup>3</sup> )
$C_f$	Coefficient de frottement : Éq. (5.11)	(-)
$c$	Variable de progrès de la réaction chimique : Éq. (4.2)	(-)
$c_p$ et $c_v$	Capacité calorifique massique à pression constante et à volume constant : § 2.1.3	(J/kg/K)
$D_{\alpha\beta}$	Coefficient de diffusion binaire des espèces $\alpha$ et $\beta$ : § 2.4 à 2.6	(m <sup>2</sup> /s)
$D_{\alpha m}$	Coefficient de diffusion de l'espèce $\alpha$ dans le mélange : § 2.4 à 2.6	(m <sup>2</sup> /s)
$D_{th}$	Diffusivité thermique : § 2.6	(m <sup>2</sup> /s)
$E_{ai}$	Énergie d'activation de la $i^e$ réaction : Éq. (2.40)	(J)
$e$	Énergie interne massique : § 2.1.3	(J/kg)
$e_t$	Énergie totale massique : Éq. (2.7)	(J/kg)
$h$	Enthalpie massique : § 2.1.3	(J/kg)
$IQ_\eta$	Indice de qualité basé sur l'échelle de Kolmogorov : Éq. (5.10)	(-)
$IQ_k$	<i>idem</i> , mais basé sur l'énergie cinétique turbulente : Éq. (5.9)	(-)
$J$	Rapport de flux de quantité de mouvement ( <i>Momentum flux ratio</i> ): Éqs. (5.2) et (5.3)	(-)
$J_{\alpha i}$	Flux de masse surfacique de l'espèce $\alpha$ dans la $i^e$ direction : § 2.4 et 2.5	(kg/s/m <sup>2</sup> )
$J_{\xi, i}$	Flux de masse surfacique du scalaire $\xi$ dans la $i^e$ direction : Éq. (4.12) et § 6	(kg/s/m <sup>2</sup> )
$K$	Nombre d'onde	(m <sup>-1</sup> )
$k$	Énergie cinétique turbulente : Éq. (E.1)	(m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
$k_{eq_i}$	Constante d'équilibre de la $i^e$ réaction : Éq. (2.42)	(-)
$k_{fi}$ et $k_{ri}$	Constante de vitesse de la $i^e$ réaction directe et inverse respectivement, avec $\sigma_i$ l'ordre global de la $i^e$ réaction : § 2.2	(mol <sup>1-<math>\sigma_i</math></sup> . m <sup><math>\sigma_i-3</math></sup> . s <sup>-1</sup> )
$L_\eta$	Échelle de Kolmogorov : Éq. (3.75)	(m)
$L_t$	Échelle intégrale : Éqs. (3.72) et (7.4)	(m)
$M_{\alpha i}$	Espèce chimique $\alpha$ de la $i^e$ réaction élémentaire : § 2.2	(-)
$N$	Nombre d'espèces dans le mélange	(-)
$N_a$	Nombre d'atomes différents constituant le mélange : Éq. (4.10)	(-)
$NPR$	( <i>Nozzle Pressure Ratio</i> ) Rapport entre la pression totale à l'injection et la pression statique de l'ambient : Éq. (5.1)	(-)
$N_r$	Nombre de réactions élémentaires	(-)
$n_{\alpha\beta}$	Nombre d'atomes $\beta$ dans l'espèce chimique $\alpha$ : Éq. (4.10)	(-)

$\dot{m}$	Débit massique	(kg/s)
$p$	Pression	(Pa)
$P$	Fonction densité de probabilité (PDF) : Éq. (3.55)	(-)
$Q$	Critère $Q$ , second invariant du gradient de vitesse : Éq. (5.8)	(s <sup>-2</sup> )
$Q_i$	Taux d'avancement de la $i^e$ réaction chimique : Éq. (2.39)	(mol/m <sup>3</sup> /s)
$q_i$	Flux de chaleur surfacique suivant la $i^e$ direction : § 2.4 et 2.5	(W/m <sup>2</sup> )
$R$	Constante des gaz parfaits (= 8.314510 J/mol/K)	(J/mol/K)
$r = R/W$	Constante massique des gaz parfaits	(J/kg/K)
$r_{st}$	Rapport stœchiométrique : Éq. (2.48)	(-)
$S$	Entropie : § 2.1.3	(J)
$S_{ij}$	Tenseur des taux de déformation, partie symétrique du tenseur des gradients de vitesse ( <i>Stress tensor</i> ) : Éq. (2.55)	(s <sup>-1</sup> )
$S_L^0$	Vitesse de flamme laminaire non étirée : Éq. (4.3)	(m.s <sup>-1</sup> )
$S_\xi$	Taux de ségrégation de la fraction de mélange $\xi$ : Éq. (6.2)	(-)
$T$	Température	(K)
$T_c$	Température de croisement	(K)
$t$	Temps	(s)
$u_i$	Composante de la vitesse suivant la $i^e$ direction	(m/s)
$u^+$	Vitesse longitudinale adimensionnée en unité de paroi : Éq. (3.54)	(-)
$u_\tau$	Vitesse de frottement : Éq. (3.54)	(-)
$V_{\alpha i}$	Vitesse de diffusion de l'espèce $\alpha$ dans la $i^e$ direction : § 2.4 et 2.5	(m/s)
$V_{ci}$	Vitesse de correction suivant la $i^e$ direction : § 2.5	(m/s)
$\tilde{V}_\xi$	Variance de sous-maille filtrée du scalaire $\xi$ : § 6 et Annexe C	(-)
$W$	Masse molaire du mélange ( <i>Molecular weight</i> ) : § 2.1.1	(kg/mol)
$X_\alpha$	Fraction molaire de l'espèce $\alpha$ : § 2.1.1	(-)
$x_i$	Coordonnée cartésienne suivant la $i^e$ direction	(m)
$Y_\alpha$	Fraction massique de l'espèce $\alpha$ : § 2.1.1	(-)
$y^+$	Distance à la paroi adimensionnée : Éq. (3.54)	(-)
$Z$	Scalaire passif (variable de Schwab–Zel'dovich) : Éq. (4.4)	(-)
$Z_\beta$	Scalaire passif / Fraction massique élémentaire de l'atome $\beta$ : Éq. (4.10)	(-)

### Lettres grecques

$\gamma = c_p/c_v$	Rapport des capacités calorifiques du mélange : § 2.1.3	(-)
$\Delta \hat{H}_i^0$	Variation d'enthalpie molaire associée à la $i^e$ réaction chimique : Éq. (2.43)	(J/mol)
$\Delta h_{f\alpha}^0$	Enthalpie massique standard de formation de l'espèce $\alpha$ : Éqs. (2.12) et (2.16)	(J/kg)
$\Delta \hat{S}_i^0$	Variation d'entropie molaire à la $i^e$ réaction chimique : Éq. (2.43)	(J/K/mol)
$\Delta t$	Pas de discrétisation temporelle	(s)
$\Delta x_i$	Pas de discrétisation spatiale dans la $i^e$ direction	(m)
$\Delta$	Taille caractéristique à l'échelle de la maille : § 3.1.1	(m)

$\delta_{ij}$	Symbole de Kronecker	(-)
$\delta_L^0$	Épaisseur (thermique) de flamme laminaire non étirée : Éq. (4.1)	(m)
$\varepsilon$	Taux de dissipation de la turbulence ( <i>Turbulent dissipation rate</i> ) : Éq. (E.1)	(m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> )
$\varepsilon_{ijk}$	Symbole de Levi-Civita : Éq. (3.45)	(-)
$\zeta_P$	Fraction ou indice de prémélange / Indice de flamme normalisé : Éq. (5.13)	(-)
$\eta_\alpha$	Efficacité de Chaperon (troisième corps) associée à l'espèce $\alpha$ : Éq. (2.27)	(-)
$\kappa$	Viscosité volumique ( <i>bulk viscosity</i> ) : § 2.4 à 2.6	(kg/m/s)
$\lambda$	Conductivité thermique : § 2.4 à 2.6 ou taux de réactivité : Éq. (D.8)	(W/m/K) (s <sup>-1</sup> )
$\mu$	Viscosité dynamique : § 2.4 à 2.6	(kg/m/s)
$\nu = \mu/\rho$	Viscosité cinématique	(m <sup>2</sup> /s)
$\nu'_{\alpha i}$ et $\nu''_{\alpha i}$	Coefficient stoechiométrique côté produit et réactif respectivement, de l'espèce $\alpha$ pour la $i^e$ réaction élémentaire : § 2.2	(-)
$\xi$	Scalaire passif normalisé / fraction de mélange : § 4.2.1	(-)
$\xi_\nu$	Variance totale statistique de la fraction de mélange $\xi$ : Éqs. (3.67) et (6.4)	(-)
$\rho$	Masse volumique	(kg/m <sup>3</sup> )
$\sigma$	Senseur de choc : Éqs. (3.42) et (3.43)	(-)
$\tau_{ij}$	Tenseur des contraintes visqueuses : § 2.4 et 2.5	(Pa)
$\tau_w$	Contrainte pariétale : Éq. (3.54)	(Pa)
$\tau_\eta$	Échelle temporelle de Kolmogorov : Éq. (3.76)	(s)
$\phi$ et $\Phi$	Rapport d'équivalence et richesse (locale / globale) : § 2.2.5 et Éq. (4.9)	(-)
$\chi_\xi$	Taux de dissipation du scalaire $\xi$ : Éq. (4.15) et § 6.2.2	(s <sup>-1</sup> )
$\psi$	Vecteur des corrélations triples de vitesse : § 3.2 et Annexe B	
$\Omega_{ij}$	Tenseur des taux de rotation, partie anti-symétrique du tenseur des gradients de vitesse : Éq. (3.39)	(s <sup>-1</sup> )
$\omega_i$	Vorticité du champs de vitesse dans la $i^e$ direction : Éq. (3.44)	(s <sup>-1</sup> )
$\dot{\omega}_\alpha$	Taux de réaction / production / destruction de l'espèce $\alpha$ : Éq. (2.45)	(s <sup>-1</sup> )
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur : Éq. (2.46)	(W/kg)

# Chapitre 1

## Introduction

### Sommaire

---

<b>1.1 Contexte industriel : propulsion aéronautique et spatiale</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>1.2 Contexte de recherche : simulation de la combustion à grande vitesse</b> . . . . .	<b>4</b>
1.2.1 La simulation, une expérience numérique . . . . .	4
1.2.2 Principaux formalismes de simulation : DNS / LES / RANS . . . . .	4
<b>1.3 Objectifs et organisation du manuscrit</b> . . . . .	<b>5</b>

---

### 1.1 Contexte industriel : propulsion aéronautique et spatiale

Les domaines du transport aéronautique et aérospatial sont aujourd’hui en plein essor mais aussi en pleine période de rupture technologique. En effet, dans le domaine du transport civil, avec les technologies opérationnelles actuelles, l’objectif est de diminuer la consommation de carburant et des émissions polluantes ce qui tend à entraîner une certaine diminution des vitesses de vol et donc l’augmentation des temps de vol. Au contraire du domaine aérospatial, où l’objectif est l’aller plus loin et plus vite, avec les projets ambitieux actuels de la conquête spatiale et notamment celle de Mars.

Suivant le domaine considéré, différentes technologies et moteurs spécifiques ont été développés pour répondre à ces besoins : les turboréacteurs, dans le domaine civil (avions de ligne) mais aussi militaire, et les moteurs fusées, pour le domaine aérospatial. Ces derniers se distinguent bien évidemment par leurs modes de fonctionnement respectifs, mais aussi par le type de mission associé, qui correspond en général à un compromis entre une vitesse (ou un nombre de Mach) et une durée de vol, comme le montre la Fig. 1.1. Cette figure présente les limites de ces systèmes propulsifs en mettant en évidence leur domaine de fonctionnement respectif à travers l’évolution de leurs impulsions spécifiques<sup>1</sup> en fonction du nombre de Mach de vol. Le turboréacteur permet de parcourir de longue distance, cependant, il devient inefficace à partir d’un nombre de Mach supérieur à 4 environ, à cause du phénomène de pompage. Le moteur fusée permet quant à lui des vols sur un large domaine de Mach de vol mais sur une faible durée. Ainsi, on distingue deux autres types de motorisation qui sont le statoréacteur et le statoréacteur à combustion supersonique. Ces derniers sont des moteurs aérobies (*airbreathing*), *i.e.* fonctionnant uniquement dans l’atmosphère et dont le fonctionnement se situe à la marge du turboréacteur et du moteur fusée (moteur anaérobie : pouvant aussi fonctionner hors atmosphère, *i.e.* dans l’espace ou même dans l’eau).

---

1. L’impulsion spécifique est définie par  $I_{sp} = F / (\dot{m}^{fuel} g)$ , avec  $F$  la poussée produite par le moteur,  $\dot{m}^{fuel}$  le débit massique de combustible et  $g$  l’accélération de pesanteur. Il permet notamment d’évaluer l’efficacité du système propulsif. Plus sa grandeur est élevée, plus le véhicule peut voler plus loin.

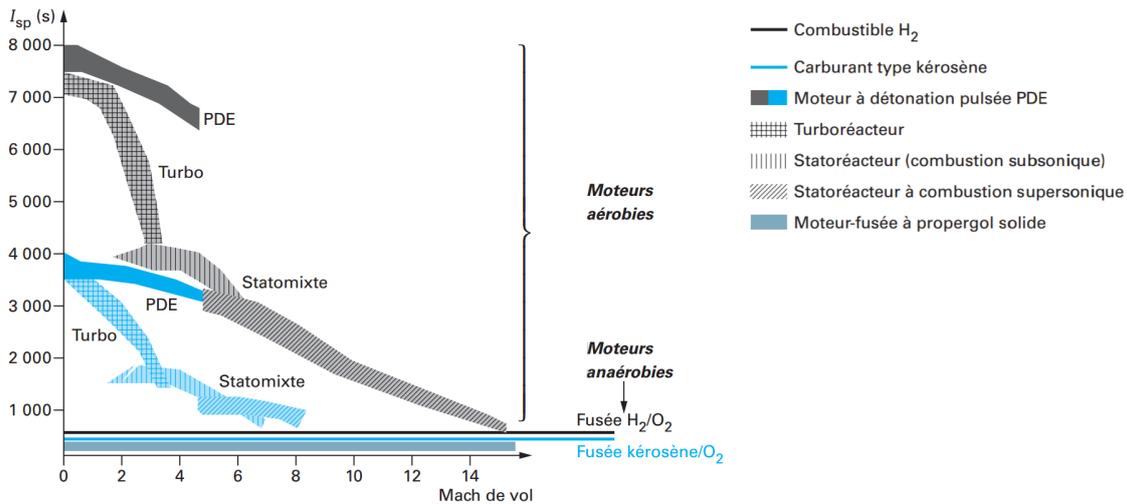


FIG. 1.1 – Impulsion spécifique  $I_{sp}$  de différents moteurs (moteur à détonation pulsée, turboréacteur, statoréacteur, super-statoréacteur et moteur fusée) et différents combustibles (hydrogène  $H_2$  et kérosène) en fonction du Mach de vol, d'après BOUCHEZ [26].

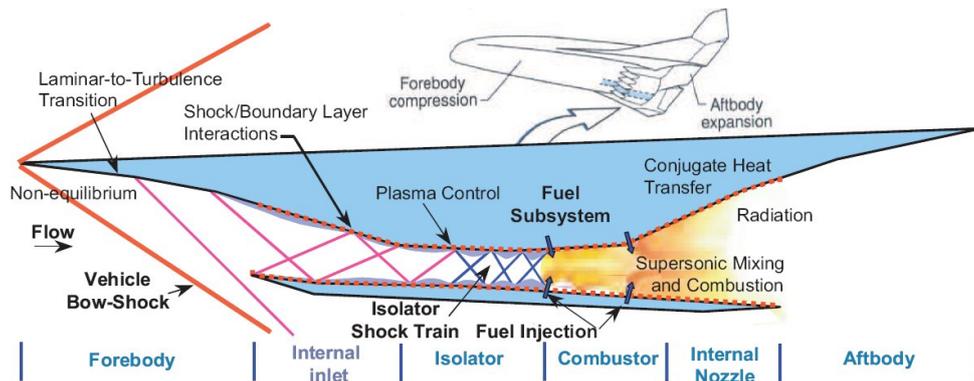


FIG. 1.2 – Schéma de principe d'un super-statoréacteur (source : <http://web.stanford.edu>).

Le statoréacteur (*ramjet*) a été inventé par l'ingénieur français René LORIN au début du 20<sup>e</sup> siècle, ce dernier eu l'idée de convertir l'énergie chimique de la combustion, en énergie cinétique par détente des produits de combustion à travers une tuyère supersonique, et non à travers une turbine comme un turboréacteur. Ce moteur à réaction possède la particularité de ne pas contenir de parties mobiles — d'où le terme *stato*, pour statique — pour réaliser la compression de l'air, contrairement aux turboréacteurs ou turbopropulseurs classiques qui sont équipés de compresseur ; de plus, la combustion a lieu dans des régimes d'écoulement subsonique (faible vitesse) et permet de propulser l'aéronef à des vitesses supersoniques, jusqu'à Mach 5 environ (cf. Fig. 1.1).

Les super-statoréacteurs (statoréacteur à combustion supersonique) ou *scramjets* sont actuellement développés pour devenir le système propulsif aérobie le plus performant qui soit à Mach élevé. La Fig. 1.2 montre le fonctionnement d'un tel moteur. La compression se fait par le biais (i) d'une rampe de compression externe (avant-corps ou *forebody*), idéalement isentropique afin d'éviter les pertes de pression génératrice et donc d'énergie, et (ii) d'une compression interne, éventuellement par des réflexions de choc, dans l'entrée d'air (*internal inlet*). Durant ce processus, l'écoulement d'air est ralenti mais est maintenu à une vitesse supersonique dans la chambre de combustion afin de réduire l'échauffement excessif et la dissociation de l'air. Le combustible est alors injecté dans la chambre, le mélange et la combustion ont lieu à des vitesses supersoniques. Enfin, les produits de

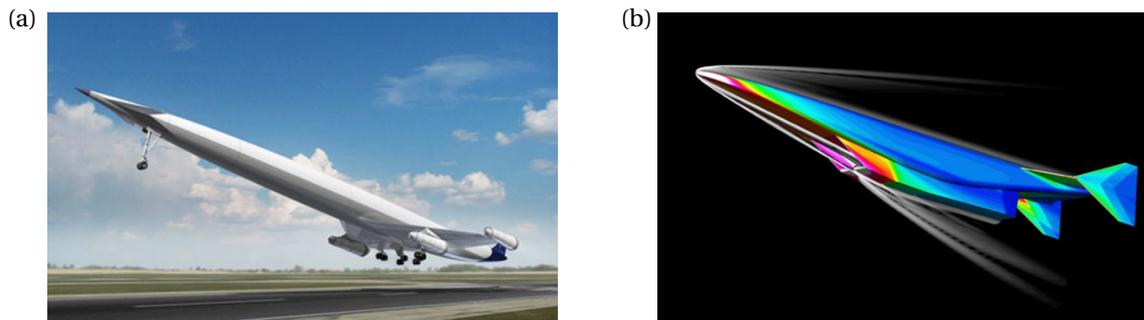


FIG. 1.3 – Véhicules hypersoniques (a) *LAPCAT II* (source : ESA), (b) *LEA* (source : MBDA, ONERA).

combustion sont éjectés à travers un divergent permettant de créer la poussée nécessaire à la propulsion du véhicule.

Cette technologie peut s'appliquer aux domaines suivants :

- Domaine spatial, afin de réduire les coûts de lancement des mises en orbite et améliorer les performances, elle pourrait être utilisée dans le 2<sup>e</sup> étage d'accélération des fusées. De plus, la tendance actuelle est le développement de lanceurs spatiaux réutilisables, comme les récents projets ambitieux d'Elon MUSK, fondateur de l'entreprise SpaceX.
- Domaine de la défense, pour augmenter la pénétration des missiles et diminuer le temps d'intervention des drones.
- Domaine civil, pour réduire considérablement les temps de vol. Par exemple, le programme européen *LAPCAT* (Fig. 1.3(a)) est un concept de véhicule hypersonique civil qui pourrait, à terme, permettre de rejoindre Sydney depuis Bruxelles en 4 h avec un Mach de vol compris entre 5 à 8.

De nombreux programmes nationaux et internationaux ont été mis en place depuis le début des années 1990 afin de permettre le développement d'aéronefs hypersoniques, comme par exemple, le véhicule *LEA* (Fig. 1.3(b)). Pour une revue relativement exhaustive sur ce sujet, le lecteur intéressé pourra consulter la thèse de MOULE [141].

Les avantages majeurs de cette technologie sont finalement : une facilité de fonctionnement et d'intégration sur un aéronef, cela à moindre coût ; le domaine de Mach de vol (vitesse) extrêmement important dans l'atmosphère ; une très bonne impulsion spécifique, intermédiaire par rapport à celle du turboréacteur et du moteur fusée, ce qui lui permet de parcourir de longues distances.

Cependant, les performances diminuent progressivement lorsque le nombre de Mach de vol devient important. Le développement d'un tel moteur et véhicule est difficile, les essais au sol sont contraignants et les moyens de mesure expérimentaux sont particulièrement difficiles à mettre en œuvre dans ces conditions d'écoulement. Les vols d'essai sont coûteux, complexes et sont généralement clos par la destruction du véhicule. D'autres problématiques subsistent cependant, comme les problèmes aérodynamiques, structuraux et thermiques dans ces conditions particulièrement extrêmes. Par exemple, la température génératrice est de l'ordre de 1000°C à Mach 5 et 2000°C à Mach 7 ce qui nécessite des efforts importants vis à vis de la tenue des matériaux et l'utilisation d'un système de refroidissement efficace.

Nombreux sont les projets consacrés à l'étude de la chambre de combustion car elle est un élément essentiel permettant d'atteindre les performances attendues pour des vols hypersoniques. Elle regroupe d'importantes difficultés qui vont imposer la manière dont sera développé le système propulsif. L'un des principaux challenges concerne notamment la flexibilité du super-statoréacteur, ce dernier doit produire suffisamment de poussée sur une large gamme de condition de vol. En effet, durant le vol, les conditions de l'écoulement entrant dans le moteur peuvent être très variées, ainsi, il est possible de rencontrer des points de fonctionnement non favorables tels que l'extinction en mélange pauvre (*lean blow-out*) et / ou le blocage thermique (*thermal choking*). Ces derniers sont

des phénomènes intrinsèquement instationnaires impliquant des effets de compressibilité, de mélange entre combustible et oxydant et de réaction chimique qu'il est nécessaire d'appréhender et de prédire. C'est pourquoi il est nécessaire d'essayer d'en comprendre les mécanismes. En effet, des erreurs commises dans l'évaluation des performances impactent de manière significative les poussées effectives obtenues. Selon FALEMPIN *et al.* [65], une erreur de 5 % sur les performances de la tuyère à Mach 8 (respectivement Mach 12) peut réduire la poussée effective de 35 % (respectivement 60 %).

C'est pourquoi l'expérimentation et la simulation numérique sont d'une grande aide. La première a permis de mieux comprendre la dynamique de l'injection du combustible, du mélange et de l'allumage par la mise en œuvre de techniques d'imagerie à haute fréquence qui ont récemment été utilisées, dans des conditions difficiles mais représentatives de celles rencontrées dans les *scramjets* [202]. La simulation numérique constitue quant à elle l'objet principal du travail présenté dans ce manuscrit. Le contexte correspondant est présenté ci-après.

## 1.2 Contexte de recherche : simulation de la combustion à grande vitesse

Ces travaux s'inscrivent dans le cadre des activités de la chaire AIRBUS (initiée par la Fondation des entreprises EADS) intitulée « Propulsion et environnement » dont les principaux collaborateurs sont : le CNRS (ICARE–UPR3021, Prisme–EA4229, l'Institut Pprime–UPR3346) et MBDA France. Cette étude consiste au développement de la simulation aux grandes échelles ou *Large-eddy simulation* (LES) de la combustion supersonique pour des moteurs aérospatiaux de type super-statoréacteurs.

### 1.2.1 La simulation, une expérience numérique

Une simulation numérique « résolue », et donc prédictive, nécessite la résolution de l'intégralité des processus physico-chimiques mises en jeu et ce, à toutes les échelles à la fois spatiales et temporelles ; ceci constitue en soi un vrai challenge à la fois technique et matériel. Les simulations permettent d'accéder à l'ensemble des grandeurs physico-chimiques (masse volumique, vitesse, température, pression, concentrations, ...) dans le domaine de calcul sans introduire des moyens de mesure qui pourraient *a priori* perturber l'écoulement. Néanmoins, les simulations ne font que représenter de façon approchée la physique « réelle » et les résultats obtenus dépendent des hypothèses utilisées pour les réaliser. Ces dernières sont en général le fruit d'un compromis entre le niveau de détail concernant la représentation physico-chimique recherchée, les puissances de calcul disponibles, les différentes modélisations mises à disposition et surtout, le temps de restitution des résultats et des analyses.

La résolution de la combustion constitue à elle seule, un sujet de discussion délicat, car encore une fois, la prédiction des résultats dépendra des approches abordées pour résoudre le système réactif à savoir : quelle type de flamme (diffusion / prémélangée / partiellement prémélangée) ? Quel mécanisme réactionnel choisir (de une à des milliers de réactions élémentaires) ? Quelles espèces chimiques impliquées dans le mécanisme retenu (d'une dizaine à une centaine d'espèces) ? Le fort couplage entre la dynamique des écoulements et la raideur des systèmes chimiques implique généralement de faire des hypothèses importantes et nombreuses afin de pouvoir simuler, en un temps raisonnable et avec les ressources actuelles, des écoulements en géométries complexes. Il est presque « amusant » de constater qu'une telle problématique pourrait se résumer au calcul et à l'estimation d'un seul terme dans les équations de transport : le terme source de réaction chimique.

### 1.2.2 Principaux formalismes de simulation : DNS / LES / RANS

**DNS — Simulation numérique directe** Elle nécessite que l'intégralité des échelles (grandes et petites) spatiales et temporelles générées par l'écoulement soient résolues ainsi que leurs dynamiques respectives soient calculées *explicitement*. Cela nécessite des discrétisations spatiale et temporelle très restrictives, c'est pourquoi cette méthode est réservée aux cas les plus simples car elle est très

coûteuse en terme de ressources de calcul (puissance, mémoire et temps de calcul). Par conséquent, la simulation d'écoulements plus complexes, (semi-)industriels, doit se réaliser par le biais de *modélisations partielles*, comme la LES, ou totale, comme le RANS.

**RANS — Reynolds Averaged Navier–Stokes** Cette méthode consiste à moyennner temporellement les équations de Navier–Stokes, elle simule donc uniquement l'état moyen de l'écoulement et donc, par nature, elle ne résout pas sa dynamique. En revanche, elle *modélise* intégralement les échelles spatiales et temporelles de l'écoulement turbulent. Cette méthode est la moins coûteuse en ressource de calcul et par conséquent très attractive pour des configurations industrielles. Son niveau de précision-prédiction est néanmoins très dépendent du niveau de modélisation retenu.

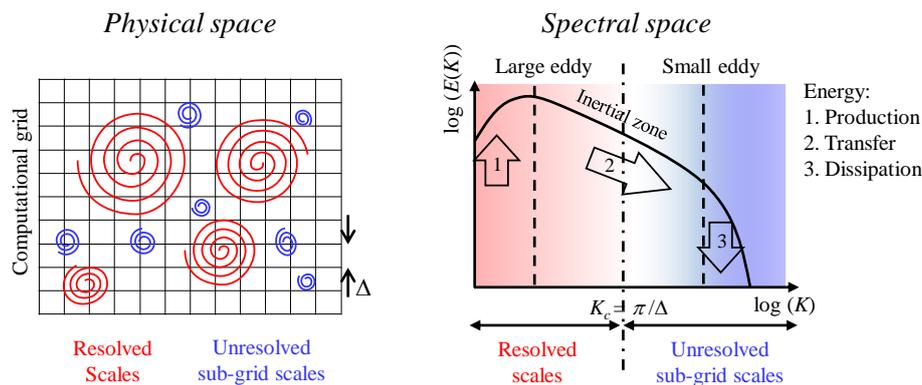


FIG. 1.4 – Schéma de principe de la simulation aux grandes échelles (LES).

**LES — Simulation aux grandes échelles** On peut considérer que cette méthode se situe à mi-chemin entre la DNS et le RANS, elle constitue le cœur de notre sujet. La Fig. 1.4 présente le schéma de principe de la simulation aux grandes échelles. L'idée générale, qui sera détaillée et formalisée § 3 « [Modélisation de la turbulence](#) », est la suivante. Les grandes structures turbulentes, *i.e.* les grandes échelles, sont *explicitement* calculées / simulées par le maillage qui ne permet pas de capturer l'intégralité des échelles spatiales de l'écoulement, aucun modèle n'est utilisé pour cela. Ce maillage introduit en réalité un filtrage implicite, de type passe-bas en nombre d'onde, de ce fait, les petites échelles de l'écoulement (grands nombres d'onde) ne peuvent être résolues, car elles sont en *sous-maille*. Deux possibilités s'offrent alors à nous :

- (i) on cherche à les *modéliser* par le biais de modèles de sous-maille *explicite*, on réalise alors une *simulation aux grandes échelles explicite*;
- (ii) on les dissipe de manière *implicite* en utilisant les propriétés intrinsèques des schémas numériques employés, on réalise alors une *simulation aux grandes échelles implicite*.

Enfin, notre attention se portera tout particulièrement sur la combustion qui est considérée être un mécanisme se déroulant à l'échelle moléculaire, et donc en sous-maille. Une problématique générale consisterait à déterminer l'effet d'une modélisation implicite par rapport à une modélisation explicite pour la simulation de la combustion supersonique.

### 1.3 Objectifs et organisation du manuscrit

Les objectifs de la thèse ont été la réalisation de simulations numériques aux grandes échelles inertes et réactifs, implicite et explicite, d'une configuration représentative des conditions d'écoulement rencontrées dans les moteurs aérobies de type super-statoréacteurs. Pour mener à bien ce pro-

jet, les principales tâches ont été : d'étendre les capacités de calcul du code *CREAMS* (*Compressible REActive Multi-Species*), développé au sein de l'Institut Pprime, en implémentant les termes de sous-maille nécessaires à la réalisation de simulations aux grandes échelles explicites de configurations canoniques semi-industrielles ; d'étudier et d'implémenter des schémas cinétiques réduits  $H_2/O_2$ , développés par BOIVIN *et al.* [17, 19, 20], afin de réduire les coûts de calcul comparés à une représentation détaillée du mécanisme réactionnel ; de modéliser et d'étudier différentes représentations des fluctuations scalaires, et donc de composition, à l'échelle non-résolue (*i.e.* en sous-maille), par le biais de la variance de sous-maille de la fraction de mélange, nécessaire à l'emploi des principaux modèles de combustion turbulente non-prémélangée ; de proposer une représentation de l'interaction chimie-turbulence de sous-maille, afin d'établir un modèle explicite de combustion turbulente et de le tester dans ces conditions représentatives des moteurs *scramjets*.

Ce manuscrit est composé de 8 chapitres et 5 annexes. Il est principalement organisé de la manière suivante :

**§ 2 « Équations générales du problème »** Ce chapitre est consacré aux rappels de nombreux éléments fondamentaux et théoriques avec la présentation des grandeurs décrivant la thermo-chimie d'un mélange ; des rappels sur les réactions chimiques, leurs modélisations avec les mécanismes réactionnels et leurs cinétiques. Ensuite, nous rappellerons les équations de Navier-Stokes régissant l'évolution des écoulements fluides et les différentes formulations possibles du transport moléculaire ainsi que les coefficients associés.

**§ 3 « Modélisation de la turbulence »** Ce chapitre présente de façon plus détaillée le formalisme général de la modélisation et de la simulation aux grandes échelles. Ceci a été une partie non négligeable de ces travaux de thèse étant donné qu'il a été nécessaire de faire des choix compte tenu des différentes possibilités de modélisation et donc de fermetures dans les différentes équations de transport. Nous présenterons les notions propres à ce type de modélisation, puis, nous terminerons par une brève description du code de calcul *CREAMS* utilisé.

**§ 4 « Structures de flammes et leur représentation »** Ce chapitre sera consacré à quelques rappels fondamentaux concernant les structures de flamme et leurs principales caractéristiques. Une introduction à la modélisation de leurs interactions avec les écoulements turbulents est ensuite présentée ainsi que quelques modèles de combustion. Puis, nous terminerons par une brève description des régimes d'interaction combustion-turbulence.

**§ 5 « JISCF : analyse générale de l'écoulement inerte »** Ce chapitre présente une des configurations les plus représentatives des conditions rencontrées dans les *scramjets*, en terme de géométrie et de conditions d'écoulement (à haute enthalpie totale). Elle concerne l'interaction et le mélange entre un jet pariétal d'hydrogène injecté dans un écoulement transverse supersonique d'air vicié, qu'on abrégera par JISCF pour *Jet In Supersonic Cross-Flow*.

**§ 6 « Modélisation de la variance scalaire de sous-maille »** Ce chapitre est consacré à l'étude du mélange scalaire avec une présentation de différentes modélisations des fluctuations de composition à l'échelle non-résolue. Une analyse de sensibilité au modèle de viscosité de sous-maille sur ces représentations est aussi réalisée. On s'intéressera notamment aux erreurs numériques de discrétisation associées à ces différentes formulations.

**§ 7 « LES réactive du JISCF basée sur le modèle PSR »** Ce chapitre présente la simulation aux grandes échelles implicite pour la combustion réalisée sur la configuration JISCF. Ce calcul apporte quelques éléments fondamentaux concernant la physique du mélange et de la combustion supersonique. Nous étudierons notamment la structure de flamme, discuterons des mécanismes de stabilisation ainsi que

les différents régimes de combustion qui peuvent être rencontrés sur cette configuration particulière. Ceci permet de mieux comprendre les mécanismes clés et d'orienter vers certaines stratégies de modélisation, de simulation ou de dimensionnement d'une telle configuration.

**§ 8 « Perspectives et conclusions »** Ce chapitre final apporte tout d'abord une nouvelle perspective de modélisation avec la présentation d'un modèle hybride de combustion turbulente explicite pouvant potentiellement se généraliser à la combustion partiellement prémélangé. Ce modèle est appliqué sur la configuration JISCF et comparé au calcul initial réactif basé sur le modèle PSR (LES implicite pour la combustion). Enfin, les conclusions et perspectives finales de ce travail sont fournies.



## Chapitre 2

# Équations générales du problème

### Sommaire

---

<b>2.1 Thermo-chimie du mélange gazeux</b>	<b>10</b>
2.1.1 Description du mélange	10
2.1.2 Équation d'état	10
2.1.3 Énergies, enthalpie, entropie et chaleurs spécifiques	11
2.1.3.1 Hypothèse du fluide calorifiquement parfait	11
2.1.3.2 Cas multi-espèces	12
<b>2.2 Modélisation de la chimie</b>	<b>13</b>
2.2.1 Notion de réaction chimique	13
2.2.1.1 Réactions globales	13
2.2.1.2 Réactions élémentaires et mécanismes cinétiques détaillés	13
2.2.1.3 Réactions avec troisième corps	14
2.2.1.4 Réactions dépendantes de la pression	14
2.2.2 Cinétique chimique	15
2.2.3 Hypothèse de chimie infiniment rapide et de chimie finie	17
2.2.4 Réduction de schéma cinétique	17
2.2.5 Rapport d'équivalence, richesses et stœchiométrie	18
<b>2.3 Équations de Navier–Stokes pour un milieu compressible réactif</b>	<b>19</b>
<b>2.4 Flux moléculaires détaillés</b>	<b>20</b>
2.4.1 Tenseur des contraintes visqueuses	20
2.4.2 Flux de masse surfacique	20
2.4.3 Flux de chaleur surfacique	21
<b>2.5 Flux moléculaires simplifiés</b>	<b>22</b>
2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses simplifié	22
2.5.2 Flux de masse simplifié	22
2.5.3 Flux de chaleur simplifié	22
<b>2.6 Coefficients de transport multi-espèces</b>	<b>23</b>
2.6.1 Pour les flux moléculaires détaillés	23
2.6.2 Pour les flux moléculaires simplifiés	23
2.6.3 Nombres adimensionnés associés aux coefficients de transports	24
2.6.4 Effet de diffusion différentielle ou effet de Lewis	24
2.6.5 Pour des flux moléculaires très simplifiées	24

---

Ce chapitre est consacré aux rappels des principaux éléments fondamentaux et théoriques. Ces rappels seront progressifs en terme de dimension étudiée. Ainsi, nous commencerons par la dimension nulle (0D), en présentant les grandeurs permettant de décrire la thermo-chimie d'un mélange ;

puis nous continuerons avec des rappels sur les réactions chimiques, leurs modélisations avec les mécanismes réactionnels et leurs cinétiques. La seconde partie rappellera les équations de Navier–Stokes régissant l'évolution des écoulements fluides (dimension supérieure). Enfin, nous terminerons par les différentes descriptions du transport moléculaire ainsi que leurs coefficients de transport associés, présents dans les équations de Navier–Stokes.

## 2.1 Thermo-chimie du mélange gazeux

### 2.1.1 Description du mélange

Le mélange d'un volume  $V$  de fluide de masse  $m$  composé de  $N$  espèces chimiques peut être décrit : **soit par des grandeurs globales ou moyennes** caractérisant le mélange tout entier, comme sa masse volumique  $\rho = m/V$  ou sa masse molaire  $W = m/n$ , avec  $n$  le nombre de moles; **soit par des grandeurs partielles** caractérisant l'espèce  $\alpha$  présente dans ce volume fluide, comme sa masse volumique  $\rho_\alpha$ , sa masse molaire  $W_\alpha$  ou sa concentration molaire  $C_\alpha = \rho_\alpha/W_\alpha$ . Cependant, il est beaucoup plus courant d'utiliser la fraction massique  $Y_\alpha = m_\alpha/m = \rho_\alpha/\rho$  ou la fraction molaire  $X_\alpha = n_\alpha/n = C_\alpha/C$  pour quantifier la contribution massique ou volumique de chacune des espèces dans le mélange.

Ceci induit les propriétés et relations suivantes

$$\sum_{\alpha=1,N} X_\alpha = 1; \quad \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha = 1; \quad (2.1)$$

$$\frac{X_\alpha}{Y_\alpha} = \frac{W}{W_\alpha} \quad (2.2)$$

Ainsi, la masse molaire moyenne du mélange s'obtient par

$$W = \left( \sum_{\alpha=1,N} \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} = \sum_{\alpha=1,N} X_\alpha W_\alpha \quad (2.3)$$

Les chimistes préfèrent cependant utiliser les concentrations molaires qui sont liées par les fractions massiques / molaires (1<sup>re</sup>/ 2<sup>e</sup> égalité respectivement) suivant la relation

$$C_\alpha = \rho \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} = \rho \frac{X_\alpha}{W} \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Équation d'état

Une loi d'état du mélange doit être introduite afin de relier la pression  $p$ , la température  $T$ , la masse volumique  $\rho$  ainsi que la masse molaire du mélange  $W$ . Dans le cas où le mélange gazeux est considéré comme parfait, alors

$$p = \rho \frac{R}{W} T \quad (2.5)$$

avec  $R = 8.31451$  J/K/mol la constante des gaz parfaits. De plus, si les constituants du mélange sont eux aussi parfaits, la loi de Dalton permet d'écrire

$$p = \sum_{\alpha=1,N} p_\alpha = \sum_{\alpha=1,N} \rho_\alpha \frac{R}{W_\alpha} T = \rho RT \sum_{\alpha=1,N} \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \quad (2.6)$$

avec  $p_\alpha$  la pression partielle de l'espèce  $\alpha$  dans le volume fluide.

### 2.1.3 Énergies, enthalpie, entropie et chaleurs spécifiques

L'énergie totale spécifique (par unité de masse) du mélange  $e_t$  est prise comme étant la somme de l'énergie interne  $e$  (sensible et chimique) et de l'énergie cinétique par unité de masse du fluide

$$e_t = e + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (2.7)$$

et par définition, l'énergie interne et l'enthalpie  $h$  sont reliées par

$$e = h - p/\rho \quad (2.8)$$

En supposant que les gaz constituant le mélange sont parfaits, l'énergie interne et l'enthalpie spécifique du mélange ne dépendent que de la température,  $e = e(T)$  et  $h = h(T)$ , on dit qu'ils sont *thermiquement parfaits*. Ainsi, elles peuvent être reliées par les capacités calorifiques (ou chaleurs) spécifiques à volume  $c_v$  et pression  $c_p$  constante par

$$c_v(T) = \frac{\partial e}{\partial T}; \quad c_p(T) = \frac{\partial h}{\partial T} \quad (2.9)$$

avec la relation de Mayer suivante

$$c_p - c_v = R/W \quad (2.10)$$

Enfin, en introduisant le rapport ou coefficient isentropique  $\gamma(T) = c_p/c_v$ , on obtient

$$c_p = \frac{\gamma R/W}{\gamma - 1}; \quad c_v = \frac{R/W}{\gamma - 1} \quad (2.11)$$

Afin d'exprimer l'énergie interne et l'enthalpie massique du mélange, il suffit d'intégrer (2.9)

$$e(T) = \int_{T_0}^T c_v(\theta) d\theta - RT_0/W + \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha \Delta h_{f,\alpha}^0; \quad h(T) = \int_{T_0}^T c_p(\theta) d\theta + \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha \Delta h_{f,\alpha}^0 \quad (2.12)$$

avec  $\Delta h_{f,\alpha}^0$ , l'enthalpie standard de formation<sup>1</sup>. Nous verrons que les constantes d'intégration sont déterminées à partir de l'intégration même des énergies et enthalpies sensibles de chaque espèce (2.19).

Par ailleurs, la relation de Gibbs qui est issue du premier et second principe de la thermodynamique, montre qu'en présence d'une transformation irréversible, la variation d'entropie (massique) peut se déterminer par

$$ds = c_p \frac{dT}{T} - \frac{R}{W} \frac{dp}{p} = c_v \frac{dT}{T} + \frac{R}{W} \frac{dV}{V} \quad (2.13)$$

#### 2.1.3.1 Hypothèse du fluide calorifiquement parfait

Un fluide est dit *calorifiquement parfait* si sa *chaleur spécifique est constante*. Pour un gaz réel, les chaleurs spécifiques à pression constante  $c_p$  et à volume constant  $c_v$  dépendent de la température  $T$  lorsque celle-ci est assez élevée. La plage de température où l'approche du gaz calorifiquement parfait est applicable dépend de la nature de ce gaz, en particulier :

- un gaz inerte (He, Ar, etc.) ne présente pratiquement pas de limite ;
- les principaux composants de l'air ( $O_2$ ,  $N_2$ ) sont calorifiquement parfaits si  $T < 500$  K ;
- certains gaz ( $CO_2$ ,  $CH_4$ , etc.) sont toujours calorifiquement imparfaits quelque soit la plage de température observée.

De ce fait, *l'hypothèse de gaz calorifiquement parfait est inappropriée dans le cas d'une combustion car ce sont les grandeurs thermo-chimiques qui vont déterminer la température adiabatique de flamme.*

1. Rappelons que l'enthalpie standard de formation est nulle pour les corps simples purs pris dans leur état standard de référence ; par exemple : les gaz nobles (He, Ne, Ar, etc.), les corps constitués d'atomes d'un même élément et dont la température d'ébullition  $T_{\text{ébullition}} < 25^\circ\text{C}$  à  $p^0 = 1$  atm sont les corps diatomiques gazeux à toute température ( $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $Cl_2$ , etc.).

### 2.1.3.2 Cas multi-espèces

Dans le cas où le fluide est composé de plusieurs espèces chimiques, les grandeurs thermodynamiques spécifiques associées au mélange que nous avons évoquées précédemment (capacités calorifiques, énergie interne et enthalpie), sont égales à la somme de leurs grandeurs partielles, associées à l'espèce  $\alpha$ , pondérées par la fraction massique  $Y_\alpha$  de l'espèce correspondante, ainsi

$$c_v(T) = \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha c_{v,\alpha}(T); \quad c_p(T) = \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha c_{p,\alpha}(T) \quad (2.14)$$

et

$$e(T) = \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha e_\alpha(T); \quad h(T) = \sum_{\alpha=1,N} Y_\alpha h_\alpha(T) \quad (2.15)$$

L'énergie interne et l'enthalpie partielle spécifique,  $e_\alpha$  et  $h_\alpha$  comportent chacune deux contributions. Le premier terme est une énergie (respectivement enthalpie) dite sensible, notée  $e_{s,\alpha}$  (respectivement  $h_{s,\alpha}$ ), qui provient de l'agitation moléculaire via la température. Le second terme correspond à l'enthalpie standard de formation (énergie ou contribution chimique associée aux énergies de liaisons entre les atomes)  $\Delta h_{f,\alpha}^0$  de l'espèce  $\alpha$  à la température standard de référence de  $T_0 = 298$  K.

$$e_\alpha(T) = e_{s,\alpha} + \Delta h_{f,\alpha}^0; \quad h_\alpha(T) = h_{s,\alpha} + \Delta h_{f,\alpha}^0 \quad (2.16)$$

Là encore, en considérant chacune des espèces constituant le mélange comme étant un gaz parfait, les relations liant ces énergies sensibles et les chaleurs spécifiques partielles sont

$$c_{v,\alpha}(T) = \frac{\partial e_{s,\alpha}}{\partial T}; \quad c_{p,\alpha}(T) = \frac{\partial h_{s,\alpha}}{\partial T} \quad (2.17)$$

avec la relation de Mayer suivante

$$c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha} = R/W_\alpha \quad (2.18)$$

L'intégration de (2.17) donne alors la formulation de ces énergies sensibles

$$e_{s,\alpha}(T) = \int_{T_0}^T c_{v,\alpha}(\theta) d\theta - RT_0/W_\alpha; \quad h_{s,\alpha}(T) = \int_{T_0}^T c_{p,\alpha}(\theta) d\theta + 0 \quad (2.19)$$

avec les constantes d'intégration qui sont déterminées en développant l'équation (2.15) via (2.16), d'une part et en utilisant les définitions de l'enthalpie (2.8), des chaleurs spécifiques (2.14). D'autre part, il est nécessaire que la constante d'intégration de l'énergie sensible soit égale à  $-RT_0/W_\alpha$  si l'on considère que celle de l'enthalpie sensible est nulle.

Enfin, l'entropie molaire de l'espèce  $\alpha$  à la pression standard  $p_0 = 1$  atm, se détermine par

$$\widehat{S}_\alpha(T, p_0) = \int_{T_0}^T \frac{\widehat{C}_{p,\alpha}(\theta)}{\theta} d\theta + \widehat{S}_\alpha^0(T_0, p_0) \quad (2.20)$$

tandis qu'à une pression quelconque  $p$ , l'entropie molaire de cette même espèce est

$$\widehat{S}_\alpha(T, p) = \widehat{S}_\alpha(T, p_0) - R \ln X_\alpha - R \ln(p/p_0) \quad (2.21)$$

Ceci permet finalement d'estimer l'entropie molaire du mélange qui est définie par

$$\widehat{S}(T, p) = \sum_{\alpha=1,N} \widehat{S}_\alpha(T, p) X_\alpha \quad (2.22)$$

sa grandeur massique est obtenue en divisant cette relation par la masse molaire du mélange  $W$ .

En pratique, les capacités calorifiques à pression constante  $c_{p,\alpha}(T)$ , les enthalpies  $h_\alpha(T)$  ainsi que les entropies  $\widehat{S}_\alpha(T, p)$  de chaque espèce sont déterminées à partir d'ajustements polynomiaux de données issues de l'expérience; ces expressions sont standardisées et fournies Annexe A « Tables thermodynamiques ».

## 2.2 Modélisation de la chimie

### 2.2.1 Notion de réaction chimique

#### 2.2.1.1 Réactions globales

La combustion est une réaction chimique exothermique mettant en jeu principalement un combustible (réducteur)  $F$  et un oxydant  $O$  et produisant des produits  $P$ , qui représentent les *espèces majoritaires*. Elle peut s'écrire par le biais d'une équation de réaction bilan telle que



avec  $v'_F$ ,  $v'_O$  et  $v''_P$  les coefficients stœchiométriques du combustible, de l'oxydant et des produits, respectivement. Cette écriture donne une vision extrêmement simpliste de la réaction entre un combustible et un oxydant, on parlera de *schéma (ou mécanisme) cinétique global*. Il existe des schémas globaux à une étape pouvant être réversibles (e.g. MARINOV *et al.* [128] pour un schéma  $H_2/O_2$ ). De plus, si la réaction ne s'effectue que dans un seul sens, *i.e.*, les réactifs  $F$  et  $O$  donnent les produits  $P$  (et non l'inverse), alors la réaction sera considérée comme *irréversible* et la double flèche  $\rightleftharpoons$  est remplacée par une simple flèche  $\rightarrow$  dans la réaction précédente.

#### 2.2.1.2 Réactions élémentaires et mécanismes cinétiques détaillés

En réalité, l'oxydation du combustible s'opère par le biais de nombreuses réactions élémentaires faisant intervenir de nombreux *intermédiaires réactionnels ou radicaux (espèces minoritaires)*. L'ensemble de ces  $N_r$  réactions constituent le *schéma (ou mécanisme) réactionnel (ou cinétique) complexe (ou détaillé)* qui peut se résumer par l'équation suivante

$$\sum_{\alpha=1, N} v'_{\alpha i} M_{\alpha i} \xrightleftharpoons[k_{ri}]{k_{fi}} \sum_{\alpha=1, N} v''_{\alpha i} M_{\alpha i}, \quad \forall i \in [1, N_r] \quad (2.24)$$

ou plus généralement par

$$\sum_{\alpha=1, N} v_{\alpha i} M_{\alpha i} = 0; \quad v_{\alpha i} = v''_{\alpha i} - v'_{\alpha i} \quad (2.25)$$

avec

- $M_{\alpha i}$ , l'espèce chimique  $\alpha$  de la  $i^e$  réaction ;
- $(v'_{\alpha i}, v''_{\alpha i})$ , respectivement, les coefficients stœchiométriques algébriques du réactif et du produit ;
- $(k_{fi}, k_{ri})$ , respectivement, les constantes de la  $i^e$  réaction directe (*forward*) et de la  $i^e$  réaction inverse / indirecte (*reversed / backward*). Si la *réaction est irréversible*, alors  $k_{ri} = 0$ .

Enfin, les mécanismes réactionnels sont composés de 4 différentes phases ou étapes<sup>2</sup> qui sont :

- i *l'amorçage (ou l'initiation)*, où les principaux réactifs se dissocient (e.g. :  $H_2 + M \rightleftharpoons 2 H + M$  et  $O_2 + M \rightleftharpoons 2 O + M$ ) ;
- ii *le branchement (ou la ramification)*, où il y a production des radicaux, (e.g. :  $H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$  est une étape clef dans les mécanismes  $H_2/O_2$  car c'est le radical hydroxyle OH qui va consommer le combustible  $H_2$ ) ;
- iii *la propagation*, où les radicaux consomment les réactifs pour former les produits et éventuellement d'autres radicaux (e.g. :  $HO_2$  et  $H_2O_2$ ) ;
- iv *la terminaison (ou la rupture)*, où les radicaux sont alors consommés et la réaction atteint un état d'équilibre.

2. Malheureusement, ces différentes phases ne sont pas nécessairement numérotées dans l'ordre dans les tableaux des schémas réactionnels.

### 2.2.1.3 Réactions avec troisième corps

Les réactions élémentaires font généralement intervenir deux espèces chimiques pour que la réaction ait lieu. Cependant, il arrive parfois qu'un *troisième corps*, noté M, entre en jeu. Ce dernier fait office de partenaire collisionnel et on le retrouve le plus souvent dans les réactions de dissociation ou de recombinaison mais il ne réagit pas. Ce type de réaction s'écrit alors sous la forme



et la concentration molaire du troisième corps se détermine par

$$C_M = \sum_{\alpha=1,N} \eta_\alpha C_\alpha \quad (2.27)$$

avec  $\eta_\alpha$ , l'efficacité de Chaperon (ou du troisième corps) de l'espèce  $\alpha$ . Ce dernier quantifie la contribution de l'espèce  $\alpha$  dans la réaction impliquant ce troisième corps. En particulier, si toutes les espèces contribuent équitablement dans le troisième corps, alors  $\eta_\alpha = 1, \forall \alpha \in \llbracket 1, N \rrbracket$ .

### 2.2.1.4 Réactions dépendantes de la pression

Certaines réactions dépendent de la pression, elles sont classées suivant 2 principaux types : (i) les réactions unimoléculaires ou de recombinaison dont les taux de réactions augmentent avec la pression et (ii) les réactions bimoléculaires chimiquement activées dont les taux de réactions diminuent avec la pression.

**Réactions unimoléculaires ou de recombinaison** Elles s'écrivent généralement



Le troisième corps est ici mis entre parenthèses car sa contribution va dépendre de la pression. Lorsqu'elle est faible, l'effet du troisième corps est à prendre en compte pour que la réaction ait lieu. Dans le cas contraire, si la pression est importante, son effet est négligeable et la réaction peut s'activer sans l'intervention du troisième corps. On peut alors écrire de façon équivalente

$$(2.28) \iff \begin{cases} A + M \rightleftharpoons B + M & \text{pour les basses pressions, de constante de vitesse } k_0, \\ A \rightleftharpoons B & \text{pour les hautes pressions, de constante de vitesse } k_\infty. \end{cases} \quad (2.29)$$

Ces constantes de vitesses<sup>3</sup> ( $k_0, k_\infty$ ) sont estimées via la loi d'Arrhenius (2.40). La zone de transition séparant les basses, des hautes pressions est appelée zone de *fall-off*. Cette dernière implique un facteur correctif empirique  $F$  dans l'estimation de la constante de vitesse directe qui s'écrit alors pour n'importe quelle valeur de la pression

$$k_f = k_\infty \left( \frac{p_r}{1 + p_r} \right) F \rightarrow \begin{cases} k_0 C_M & \text{si } p_r \ll 1 \text{ (basses pressions),} \\ k_\infty & \text{si } p_r \gg 1 \text{ (hautes pressions),} \end{cases} \quad (2.30)$$

avec  $p_r$ , la pression réduite proportionnelle à la concentration du troisième corps et définie par

$$p_r = \frac{k_0 C_M}{k_\infty} \quad (2.31)$$

Le facteur correctif empirique  $F$  tend asymptotiquement vers l'unité dans les limites basse et haute pressions. Dans la zone intermédiaire, il peut être estimé par

$$F = \begin{cases} 1 & \text{LINDEMANN } et al. [124] \\ 10^{\log F_c / (1 + X^2)} & \text{Troe [77]} \\ d(a \exp(-b/T) + \exp(-T/c))^Z T^e & \text{SRI STEWART } et al. [186] \end{cases} \quad (2.32)$$

3. L'indice "0" ne correspond pas ici à l'état standard.

Dans la formulations de Troe [77] :

$$F_c = (1 - a) \exp(-T/T^{***}) + a \exp(-T/T^*) + \exp(-T^{**}/T) \quad (2.33)$$

$$X = \frac{\log p_r + c}{0.75 - 1.27 \log F_c - 0.14(\log p_r + c)} \quad (2.34)$$

$$c = -(0.4 + 0.67 \log F_c) \quad (2.35)$$

avec  $(a, T^{***}, T^*, T^{**})$  les paramètres de Troe définis pour chaque réaction élémentaire.

Dans la formulation de SRI STEWART *et al.* [186] :

$$Z = \left(1 + (\log p_r)^2\right)^{-1} \quad (2.36)$$

$(a, b, c)$  sont les paramètres associés à chaque réaction élémentaire et  $(d, e)$  sont des paramètres optionnels ; par défaut,  $(d, e) = (1, 0)$ .

Ces différentes formulations dépendent de la réaction élémentaire considérée, elles sont dans ce cas indiquées dans le schéma cinétique.

**Réactions bimoléculaires chimiquement activées** Elles sont des réactions généralement endothermiques qui peuvent s'écrire



et la constante de vitesse de la réaction directe se détermine par

$$k_f = k_0 \left( \frac{1}{1 + p_r} \right)^F \quad (2.38)$$

Ce type de réaction sera moins considéré dans les mécanismes  $H_2/O_2$  que nous étudierons dans la suite car moins présents.

### 2.2.2 Cinétique chimique

La cinétique chimique permet d'étudier l'évolution temporelle d'un système chimique ; plus particulièrement, la vitesse à laquelle réagit ce dernier. Pour cela, il est nécessaire d'introduire quelques grandeurs comme le taux d'avancement de la  $i^e$  réaction chimique  $Q_i$  (relation de Guldberg et Waage, 1865) qui s'écrit

$$\forall i \in \llbracket 1, N_r \rrbracket, \quad Q_i = \underbrace{k_{fi} \prod_{\alpha=1, N} C_{\alpha}^{\nu'_{ai}}}_{Q_{fi} \text{ réaction directe}} - \underbrace{k_{ri} \prod_{\alpha=1, N} C_{\alpha}^{\nu''_{ai}}}_{Q_{ri} \text{ réaction inverse}} \quad [\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}] \quad (2.39)$$

avec  $C_{\alpha}$  la concentration molaire de l'espèce  $\alpha$ , troisième corps inclus pour les réactions avec troisième corps. Les réactions dépendantes de la pression tiennent déjà compte de sa concentration dans la pression réduite (2.31). Ce taux d'avancement se décompose en deux termes :

**L'avancement de la réaction directe**, dont la constante de vitesse  $k_{fi}$  est généralement modélisée par une loi d'Arrhenius modifiée<sup>4</sup>

$$k_{fi} = A_{fi} T^{b_i} \exp\left(\frac{-E_{ai}}{RT}\right) \quad [\text{mol}^{1-\sigma_i} \cdot \text{m}^{\sigma_i-3} \cdot \text{s}^{-1}] \quad (2.40)$$

avec

4. Il existe néanmoins d'autres modèles pour estimer cette constante de vitesse [110] mais ces derniers ne sont pas les plus couramment utilisés. En effet, pour des réactions où les processus de transfert vibrationnel sont importants ; il est préférable d'utiliser la formulation de Landau-Teller. De même, pour des réactions en présence de plasma, la loi d'Arrhenius est adaptée en introduisant des corrections comportant : soit des approximations polynomiales en logarithme de la température, soit des séries en puissance de la température dans la fonction exponentielle de (2.40).

- $A_{fi}$ , le facteur de fréquence (ou pré-exponentiel) qui modélise la fréquence des collisions entre molécules ;
- $E_{ai}$ , l'énergie d'activation nécessaire pour amorcer la réaction <sup>5</sup> ;
- $b_i$ , l'exposant de température.

Ces grandeurs sont déterminées expérimentalement, dépendent de la  $i^e$  réaction considérée et essentiellement de la température. Par ailleurs, ce sont ces dernières qui vont contrôler la vitesse de combustion. Enfin, l'unité de la constante de vitesse dépend de l'ordre global (direct) de la  $i^e$  réaction défini par  $\sigma_i = \sum_{\alpha=1}^N \nu'_{\alpha i}$ .

**L'avancement de la réaction inverse**, dont la constante de réaction  $k_{ri}$  s'exprime en supposant l'équilibre thermodynamique (loi d'action des masses)

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{k_{eq_i}} \quad (2.41)$$

avec  $k_{eq_i}$  la constante d'équilibre qui est dérivée de la minimisation de l'énergie libre de Gibbs  $G = H - TS$  en utilisant l'équation d'état des gaz parfaits [208]

$$k_{eq_i} = \left(\frac{p_0}{RT}\right)^{\sum_{\alpha=1}^N \nu_{\alpha i}} \exp\left(\frac{\Delta\hat{S}_i^0}{R} - \frac{\Delta\hat{H}_i^0}{RT}\right) \quad (2.42)$$

où  $p_0 = 1$  atm (pression standard),  $\Delta\hat{S}_i^0$  et  $\Delta\hat{H}_i^0$  sont respectivement, les variations d'entropie et d'enthalpie molaire de la  $i^e$  réaction chimique

$$\Delta\hat{S}_i^0 = \sum_{\alpha=1, N} \nu_{\alpha i} W_{\alpha} s_{\alpha}(T); \quad \Delta\hat{H}_i^0 = \sum_{\alpha=1, N} \nu_{\alpha i} W_{\alpha} h_{\alpha}(T) \quad (2.43)$$

Le taux d'avancement  $Q_i$  mesure donc l'état d'avancement de la réaction. Pour que cette dernière ait lieu, il est nécessaire que les molécules se rencontrent, collisionnent afin de rompre leurs liaisons atomiques pour former de nouveaux éléments (produits / intermédiaires de réaction) ; on parle alors de *choc efficace*. Si l'agitation moléculaire augmente via une élévation de la température, de la pression ou de la concentration, alors la probabilité (et donc la fréquence) de collision entre les espèces augmente elle aussi.

Finalement, l'ensemble des réactions chimiques élémentaires conduit à un taux de réaction molaire de l'espèce  $\alpha$ , égal à la somme de tous les taux d'avancement contenant cette espèce pondérés par leurs coefficients stœchiométriques, ainsi

$$\forall \alpha \in [1, N], \quad \hat{\omega}_{\alpha} = \frac{dC_{\alpha}}{dt} = \sum_{i=1, N_r} \nu_{\alpha i} Q_i \quad [\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}] \quad (2.44)$$

le taux de réaction (production / destruction) de l'espèce  $\alpha$  se déduit donc de (2.4)

$$\dot{\omega}_{\alpha}(\rho, \mathbf{Y}, T) = \frac{dY_{\alpha}}{dt} = \frac{W_{\alpha}}{\rho} \sum_{i=1, N_r} \nu_{\alpha i} Q_i \quad [\text{s}^{-1}] \quad (2.45)$$

Ce dernier va dépendre de la masse volumique, la température (ou de la pression via la loi d'état) ainsi que des fractions massiques des différentes espèces. Par ailleurs, la conservation des espèces implique que  $\sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_{\alpha} = 0$ .

Enfin, le taux de dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  s'obtient en réalisant la somme de tous ces taux de production pondérés par leurs enthalpies standards de formation

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{\alpha=1, N} \Delta h_{f\alpha}^0 \dot{\omega}_{\alpha} \quad [\text{W}/\text{kg} = \text{m}^2/\text{s}^3] \quad (2.46)$$

la quantité ainsi obtenue permet de mesurer la puissance par unité de masse que va apporter le mélange réactif.

5. Certains auteurs préfèrent utiliser la température d'activation  $T_{ai} = E_{ai}/R$ .

### 2.2.3 Hypothèse de chimie infiniment rapide et de chimie finie

La cinétique chimique introduit donc la notion de vitesse de la réaction (ou des réactions) et donc de temps caractéristiques chimiques  $\tau_c$  qui peuvent être multiples. En effet, la vitesse de réaction entre  $H_2/O_2$  n'est pas la même que  $CH_4/O_2$  ; les temps de formation des produits majoritaires (principalement  $H_2O$  et  $CO_2$ ) — n'est pas la même que les temps de formation ou de destruction des radicaux ( $OH$ ,  $HO_2$ ,  $CH_2O$ ,  $NO_x$ , etc.) ; de plus, certaines réactions, dont les réactions  $H_2/O_2$ , peuvent s'auto-allumer spontanément avec un temps caractéristique qui peut être très variable suivant les conditions de richesse, pression et température. Ainsi, suivant les phénomènes physico-chimiques qu'on souhaite observer, il est courant de trouver dans la littérature les terminologies suivantes :

- *Chimie infiniment rapide (Fast chemistry) / chimie à l'équilibre / chimie globale* qui suppose l'utilisation d'un schéma cinétique globale à une étape. Par conséquent, la réaction s'opère tellement rapidement qu'elle est considérée comme instantanée et l'état d'équilibre est atteint immédiatement, ainsi, seul le combustible  $F$ , l'oxydant  $O$  et le produit  $P$  sont mis en jeu. Par ailleurs, si la réaction est irréversible, le combustible et l'oxydant ne peuvent co-exister, dans le cas contraire, ils sont dans un état d'équilibre réactionnel et donc  $\dot{\omega}_\alpha = 0$  ou  $\tau_c = 0$ .
- *Chimie finie (Finite rate chemistry) / chimie hors équilibre* qui repose donc sur un schéma cinétique à plusieurs réactions, ainsi des radicaux peuvent se former créant des réactions intermédiaires non « infiniment rapide » et donc des temps caractéristiques chimiques  $\tau_c \neq 0$ . Par conséquent, les taux de réaction  $\dot{\omega}_\alpha \neq 0$  et les réactifs, produits et intermédiaires réactionnels peuvent co-exister.

Ces hypothèses sont fondamentales en combustion et elles sont utilisées dans différentes formulations des modèles de combustion, dont certains seront présentés § 4 « Structures de flammes et leur représentation ».

### 2.2.4 Réduction de schéma cinétique

Les schémas cinétiques globaux vont restituer des résultats physiques de façon peu fidèles car ils ne sont pas représentatifs d'une « vrai » réaction chimique. Ces derniers sont généralement établis et valides dans un domaine de pression, de température et de richesse limité.

En revanche, l'utilisation de schémas cinétiques détaillés pouvant contenir au moins une centaine de réactions élémentaires et une cinquantaine d'espèces chimiques est bien sûr le plus représentatif. En effet, ces derniers peuvent restituer fidèlement les vitesses de flamme, les délais d'auto-allumage, les limites d'allumage et d'extinction, les températures de flamme, la position de la flamme, etc. Cependant, l'utilisation de ces schémas peuvent s'avérer extrêmement coûteuse en terme de temps de calcul.

C'est pourquoi une méthode de réduction de schéma cinétique est parfois employée afin de réduire le nombre d'espèces et de réactions chimiques et ainsi limiter le coût de calcul. Pour cela, la méthode se base sur *l'approximation de l'état quasi-stationnaire (AEQS ou QSSA pour Quasi-Steady State Approximation)* de certaines espèces  $\alpha$  — en général, des intermédiaires réactionnels — qui suppose que

$$\frac{dC_\alpha}{dt} = \underbrace{\sum_{i=1, N_r} (v''_{\alpha i} Q_{fi} + v'_{\alpha i} Q_{ri})}_{\hat{\omega}_\alpha^{\text{prod}}} - \underbrace{\sum_{i=1, N_r} (v''_{\alpha i} Q_{ri} + v'_{\alpha i} Q_{fi})}_{\hat{\omega}_\alpha^{\text{conso}}} = 0, \quad \forall \alpha \in \text{QSSA} \quad (2.47)$$

c'est-à-dire qu'il y a un équilibre entre la vitesse de production de l'espèce et sa vitesse de consommation, et donc que l'espèce ne s'accumule pas. Ainsi, cette relation permet d'obtenir des *expressions analytiques* pour la concentration des espèces considérées.

Parmi les inconvénients de cette méthode, on peut citer :

- la nécessité d'une connaissance approfondie de la chimie étudiée afin d'identifier les étapes limitantes et les espèces stationnaires ;

- les singularités possibles des expressions analytiques des concentrations des espèces à l'état stationnaire (division par zéro, racine d'un terme négatif, ...), ce qui demande parfois un traitement préalable (pré-filtrage) des données d'entrée ;
- une restitution partielle des phénomènes physico-chimiques, du fait de la réduction du nombre d'espèce et de réaction, le domaine de validité du schéma est aussi réduit ;
- l'impact sur les propriétés thermo-chimiques du mélange. Ceci est d'autant plus vrai lorsque la température est élevée et la dissociation des espèces majoritaires (réactifs ou produits de combustion) en radicaux est importante.

Malgré cela, cette méthode offre un très bon compromis entre l'utilisation d'une chimie globale et une chimie détaillée, néanmoins, elle doit être utilisée avec précaution et testée au préalable.

### 2.2.5 Rapport d'équivalence, richesses et stœchiométrie

On définit tout d'abord le rapport d'équivalence (*equivalence ratio*)  $\phi$  quantifiant la composition du courant oxydant et combustible, par rapport à la *réaction globale stœchiométrique*

$$\text{Rapport d'équivalence} \quad \phi = \frac{Y_F^{\text{fuel}} / Y_O^{\text{ox}}}{(Y_F / Y_O)_{\text{st}}} = r_{\text{st}} \frac{Y_F^{\text{fuel}}}{Y_O^{\text{ox}}}; \quad r_{\text{st}} = \left( \frac{Y_O}{Y_F} \right)_{\text{st}} = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} \quad (2.48)$$

où  $r_{\text{st}}$  est le rapport stœchiométrique entre l'oxydant et le combustible. Cette grandeur va caractériser la structure locale de la flamme au contact des 2 courants (combustible et oxydant) ; néanmoins, elle ne tient pas compte de la quantité exacte de masse des réactifs mis en contact. On introduit pour cela la richesse globale (*global equivalence ratio*)  $\Phi$  qui tient compte des débits massiques de combustible et d'oxydant<sup>6</sup>

$$\text{Richesse globale} \quad \Phi = r_{\text{st}} \frac{\dot{m}_F^{\text{fuel}}}{\dot{m}_O^{\text{ox}}} = \phi \frac{\dot{m}^{\text{fuel}}}{\dot{m}^{\text{ox}}} \quad (2.49)$$

où  $\dot{m}_O^{\text{ox}} = Y_O^{\text{ox}} \dot{m}^{\text{ox}}$  (respectivement  $\dot{m}_F^{\text{fuel}} = Y_F^{\text{fuel}} \dot{m}^{\text{fuel}}$ ) est le débit massique partiel de l'oxydant (resp. du combustible) dans le courant entrant oxydant (resp. combustible). Ici,  $\dot{m}^{\text{fuel}}$  (resp.  $\dot{m}^{\text{ox}}$ ) désigne le débit massique total du courant oxydant (resp. combustible). Dans le cas d'une *combustion prémélangée* :  $\dot{m}^{\text{fuel}} = \dot{m}^{\text{ox}}$ , ainsi  $\Phi = \phi$ . Il est aussi possible de définir une richesse *locale* par

$$\text{Richesse locale} \quad \Phi = r_{\text{st}} \frac{Y_F}{Y_O} \quad (2.50)$$

Enfin, la combustion est considérée comme *stœchiométrique* si  $\Phi = 1$ .

Finalement, pour une réaction chimique mettant en jeu un oxydant et un combustible réducteur, il n'existe pas une, mais plusieurs manières de modéliser la chimie. Il existe ainsi dans la littérature différentes réactions globales et différents mécanismes cinétiques pour un même couple réactif (e.g. pour une réaction entre  $\text{H}_2/\text{O}_2$ , on peut trouver les mécanismes de SAXENA et WILLIAMS [181] (aussi dit de « San-diego »), MARINOV *et al.* [128], Ó CONAIRE *et al.* [221], BOIVIN *et al.* [17–20] et bien d'autres). Ces schémas diffèrent généralement par :

- leur domaine de validité en richesse, température et pression,
- les résultats physico-chimiques qu'ils prédisent et sur lesquels ils ont été testés et validés (températures adiabatique de flamme, vitesses de flamme laminaire, délais d'auto-allumage, évolution temporelle et spatiale des espèces majoritaires, minoritaires, polluants, radicaux, etc.).

6. La richesse  $\Phi$  ne doit pas être confondue avec le rapport d'équivalence  $\phi$ , malgré l'ambiguïté du terme en anglais *equivalence ratio*.

C'est pourquoi on peut parler de *modèles* cinétiques ou réactionnels. Si ces modèles restituent un grand nombre de résultats physico-chimiques sur une large gamme de validité, on parlera de *schéma cinétique détaillé*, bien qu'il existe des modèles simplifiés qui essayent de reproduire ces mêmes résultats. L'élaboration de ces mécanismes cinétiques constitue un travail à part entière qui constitue le cœur de métier des cinéticiens.

Il est important de noter que, jusqu'ici, il n'a pas vraiment été question de flamme, de leurs structures ou de régimes (prémélangé ou non). Ainsi, ces modèles de réaction chimique et de calcul de taux de réaction considèrent que la réaction a lieu dans un *milieu homogène*. Lorsque l'on s'intéressera à un système chimique plus réaliste, au moins 1D, il sera possible d'établir d'autres représentations afin d'estimer les taux de réaction  $\dot{\omega}_\alpha$  au sein des structures de flamme. Enfin, et cela constitue une difficulté notable lorsqu'on s'intéresse à des configurations industrielles, la modélisation de ces taux de réaction en écoulement turbulent reste encore aujourd'hui un sujet de controverse et fait l'objet de nombreuses études et de recherches qui se développent depuis le milieu du 20<sup>e</sup> siècle. Quelques-uns de ces modèles sont présentés § 4, ils sont généralement établis sur des considérations physiques.

Avant cela, il est nécessaire d'introduire les équations de Navier–Stokes qui mettent en évidence le couplage important des différents processus physiques qui sont principalement : d'une part, la convection et la diffusion pour l'écoulement fluide et d'autre part, les réactions chimiques qui peuvent avoir lieu lorsque le mélange est réactif.

## 2.3 Équations de Navier–Stokes pour un milieu compressible réactif

Le cadre de travail est celui de la *mécanique des milieux continus*, qui implique que le libre parcours moyen des molécules  $l_m$  est largement inférieur aux dimensions caractéristiques de l'objet avec lequel l'écoulement interagit  $L$ . Ceci se traduit par un nombre de Knudsen  $\text{Kn} = L/l_m$  inférieur à 0.01 ce qui assure que le milieu est non raréfié (cas des rentrées atmosphériques). Ainsi, les éléments fluides peuvent être caractérisés par des grandeurs macroscopiques telles que la pression  $p$ , la température  $T$  et la masse volumique  $\rho$ .

Nous rappelons ici les équations générales régissant l'évolution des écoulements fluides pour  $N$  espèces réactives. On suppose ici que, *l'écoulement est tridimensionnel, instationnaire, compressible ; le fluide est visqueux, n'est composé que d'une seule phase (gazeuse considérée comme parfait) ; enfin, les forces volumiques (pesanteur,...) ainsi que les flux de chaleur volumique (rayonnement,...) sont négligés*. On adoptera la notation indicelle d'Einstein pour alléger l'écriture des équations qui sont présentées ici sous une forme différentielle conservative

$$\text{Continuité / Masse} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.51)$$

$$\text{Quantité de mouvement} \quad \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.52)$$

$$\text{Énergie totale} \quad \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho e_t u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.53)$$

$$\text{Conservation des espèces} \quad \frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_{\alpha i}}{\partial x_i} + \rho \dot{\omega}_\alpha, \quad (2.54)$$

Les équations (2.51) à (2.54) représentent respectivement : l'équation de conservation de la masse du mélange, l'équation de quantité de mouvement qui se déduit du principe fondamental de la dynamique, l'équation d'énergie totale (cinétique et interne, avec l'énergie interne contenant la contribution sensible et chimique, cf. § 2.1.3)<sup>7</sup>. Cette dernière est obtenue par l'application du premier

7. L'utilisation de l'énergie totale  $e_t$  présente l'avantage de ne pas faire apparaître de terme source lié à la production d'énergie par réaction chimique dans cette équation bilan. En effet, dans le cas où seulement l'énergie sensible et cinétique seraient utilisées pour écrire cette équation, il faudrait rajouter le taux de dégagement de chaleur  $\rho \dot{\omega}_T$  (2.46).

principe de la thermodynamique. Enfin, le dernier bilan correspond à l'équation de conservation des espèces chimiques<sup>8</sup>. Ces équations sont valables  $\forall (i, j, \alpha) \in \llbracket 1, 3 \rrbracket^2 \times \llbracket 1, N \rrbracket$ . Pour fermer ce système, il est nécessaire d'introduire une loi d'état telle que celle des gaz parfaits (2.5)  $p = \rho RT/W$ .

**Artifice numérique** En sommant sur  $\alpha$  l'équation de conservation des espèces (2.54), l'équation de continuité (2.51) est retrouvée car  $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$  (2.1). Ainsi, résoudre les  $N$  équations d'espèces est redondant, il est recommandé de ne résoudre que  $N - 1$  équations d'espèces et de déduire la fraction massique de la dernière espèce (majoritaire ou diluante)  $N$  par  $Y_N = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N-1} Y_\alpha$ . Ceci permet de limiter l'influence des erreurs numériques pouvant conduire à  $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha \neq 1$ .

Il reste maintenant à définir le tenseur des contraintes visqueuses  $\tau_{ij}$ , le flux de masse (ou de particule) surfacique  $J_{\alpha i} = \rho Y_\alpha V_{\alpha i}$  ainsi que le flux de chaleur surfacique  $q_i$ . Les deux sections suivantes visent à formuler ces différents termes via (§ 2.4) une formulation la plus générale et détaillée possible, puis via (§ 2.5) différentes expressions approchées dont les niveaux de simplicité augmentent progressivement.

## 2.4 Flux moléculaires détaillés

### 2.4.1 Tenseur des contraintes visqueuses

Dans le cas d'un fluide newtonien, comme le sont les gaz, le tenseur des contraintes visqueuses s'exprime de la façon suivante

$$\tau_{ij} = \kappa S_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \left( S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right); \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.55)$$

avec

- $\kappa$ , la viscosité volumique (*bulk viscosity*) qui est associée aux changements de volume dans un élément fluide dus à un déséquilibre entre les différents modes de répartition de l'énergie interne. Si *le gaz est soumis à d'importantes compressions ou détentes*, les phénomènes visqueux ne sont pas négligeables et le flux  $\vec{\nabla}(\kappa \vec{\nabla} \cdot \mathbf{u})$  peut ne pas être négligeable. Cependant, pour *les gaz monoatomiques, les écoulements incompressibles et dans les couches limites* cette viscosité volumique est nulle [63, 64];
- $\mu$ , la viscosité dynamique qui dépend de la température et du mélange considéré;
- $S_{ij}$ , le tenseur des taux de déformation;
- $\delta_{ij}$ , le symbole de Kronecker.

### 2.4.2 Flux de masse surfacique

D'après la théorie cinétique des gaz, le flux de diffusion de l'espèce  $\alpha$  dans la direction  $x_i$  s'obtient en résolvant le système de Stefan–Maxwell–Boltzmann. Cette résolution est très coûteuse car elle doit se réaliser en chaque point et chaque direction du domaine, de plus ce système est de dimension  $N^2$ .

8. Dans la littérature, certains auteurs préfèrent écrire dans le dernier membre de cette équation un taux de réaction volumique de l'espèce  $\omega'_\alpha = \rho \dot{\omega}_\alpha$  qui est alors exprimé en  $\text{kg}/\text{m}^3/\text{s}$ . Dans ce cas, la formulation du taux de réaction donnée par (2.45) change, tout comme son unité.

En ayant supposé *les forces volumiques extérieures nulles*, le flux de masse surfacique s'écrit

$$J_{\alpha i} = \rho Y_{\alpha} V_{\alpha i} = - \sum_{\beta=1, N} (\rho \dot{D}_{\alpha\beta} d_{\beta i}) - \rho Y_{\alpha} \theta_{\alpha} \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \quad (2.56a)$$

$$= - \sum_{\beta=1, N} \rho \dot{D}_{\alpha\beta} \left( d_{\beta i} + X_{\beta} \dot{\chi}_{\beta} \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right) \quad (2.56b)$$

$$= - \sum_{\beta=1, N} \rho \dot{D}_{\alpha\beta} \left( \underbrace{\frac{\partial X_{\beta}}{\partial x_i}}_{(I)} + \underbrace{(X_{\beta} - Y_{\beta}) \frac{\partial \ln p}{\partial x_i}}_{(II)} \right) - \underbrace{\rho Y_{\alpha} \theta_{\alpha} \frac{\partial \ln T}{\partial x_i}}_{(III)} \quad (2.56c)$$

avec

- $V_{\alpha i}$ , la vitesse de diffusion de l'espèce  $\alpha$  dans la  $i^e$  direction, elle est telle que  $\sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} V_{\alpha i} = 0$ ;
- $d_{\beta i}$ , le vecteur de diffusion qui s'exprime par

$$d_{\beta i} = \frac{\partial X_{\beta}}{\partial x_i} + (X_{\beta} - Y_{\beta}) \frac{\partial \ln p}{\partial x_i}; \quad (2.57)$$

- $\dot{D}_{\alpha\beta} = Y_{\alpha} D_{\alpha\beta}$ , le coefficient du flux de diffusion;
- $D_{\alpha\beta} = \theta_{\alpha} / (X_{\beta} \dot{\chi}_{\beta})$ , le coefficient de diffusion binaire entre l'espèce  $\alpha$  et  $\beta$ , tel que  $D_{\alpha\beta} = D_{\beta\alpha}$ ;
- $\dot{\chi}_{\alpha} = \chi_{\alpha} / X_{\alpha}$ , le rapport de la diffusion thermique normalisée, tel que  $\sum_{\alpha=1}^N \chi_{\alpha} = 0$ ;
- $\theta_{\alpha}$ , le coefficient de diffusion thermique de l'espèce  $\alpha$ .

Les termes du second membre de (2.56c) représentent respectivement la diffusion de masse par :

- (I) gradients de concentration (*loi de Fick* dans le cas d'une diffusion dans un mélange binaire);
- (II) gradients de pression (ou *diffusion barotrope*);
- (III) gradients de température (*effet Soret ou thermodiffusion*). Ce dernier a pour effet de faire migrer les espèces légères vers les régions chaudes et les espèces lourdes vers les régions froides.

### 2.4.3 Flux de chaleur surfacique

Le flux de chaleur surfacique s'écrit dans la direction  $x_i$  comme

$$q_i = -\lambda' \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1, N} J_{\alpha i} h_{\alpha} - p \sum_{\alpha=1, N} \theta_{\alpha} d_{\alpha i} \quad (2.58a)$$

$$= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1, N} J_{\alpha i} h_{\alpha} - p \sum_{\alpha=1, N} \chi_{\alpha} V_{\alpha i} \quad (2.58b)$$

$$= -\lambda \underbrace{\frac{\partial T}{\partial x_i}}_{(I)} + \sum_{\alpha=1, N} J_{\alpha i} \left( \underbrace{h_{\alpha}}_{(II)} + \underbrace{\frac{RT \dot{\chi}_{\alpha}}{W_{\alpha}}}_{(III)} \right) \quad (2.58c)$$

avec  $\lambda'$  et  $\lambda$  la conductivité thermique partielle et la conductivité thermique du mélange, respectivement.

Les termes du second membre de (2.58c) représentent respectivement la diffusion de la chaleur par :

- (I) conduction, gradients de température (*loi de Fourier*);
- (II) flux d'enthalpies partielles des différentes espèces;
- (III) gradients de concentration (*effet Dufour*).

Cette description détaillée des propriétés de transport a été implémentée, testée et étudiée dans le solver *CREAMS* au cours des thèses de MARTÍNEZ FERRER [131] et BUTTAY [38]. Par ailleurs, ces flux sont écrits sous leurs formes les plus générales et leurs effets deviennent significatifs dans :

- les écoulements fortement compressibles [64];

- l'auto-allumage en combustion supersonique ;
- lorsque les effets visqueux et de diffusion de masse ne sont pas du même ordre de grandeur [24], *i.e.* nombre de Schmidt  $Sc_\alpha \neq 1$  (2.68) ;
- ou lorsque la flamme interagit avec la paroi [165].

Cependant, la résolution d'un tel système peut devenir conséquent en temps de calcul, c'est pourquoi de nombreux auteurs utilisent une des formes simplifiées des propriétés de transport présentées ci-après.

## 2.5 Flux moléculaires simplifiés

### 2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses simplifié

L'hypothèse de Stokes consiste à négliger la viscosité volumique  $\kappa$  dans le tenseur des contraintes visqueuses (2.55). Cette hypothèse est subtile car d'après ERN et GIOVANGIGLI [63], c'est le flux  $\vec{\nabla}(\kappa \vec{\nabla} \cdot \mathbf{u})$  qui peut être négligeable à faible nombre de Mach et non la viscosité volumique  $\kappa$  qui est de l'ordre de  $Ma^2$ .

### 2.5.2 Flux de masse simplifié

1. *Approximation Fickienne* : la diffusion barotrope (II) et l'effet Soret (III) sont négligés.

$$(2.56c) \implies J_{\alpha i} = \rho Y_\alpha V_{\alpha i} = - \sum_{\beta=1,N} \rho D_{\alpha\beta} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_i} \quad (\text{Niveau 0}) \quad (2.59)$$

2. *Approximation d'Hirschfelder et Curtiss* [94] est une estimation au premier ordre de la vitesse de diffusion. Elle ne considère plus une diffusion binaire  $D_{\alpha\beta} = D_{\beta\alpha}$  mais une diffusion où chaque espèce  $\alpha$  va diffuser, avec un coefficient  $D_{\alpha m}$ , dans un état moyen du mélange [109]. Cependant, afin d'assurer la conservation de la masse globale ( $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha V_{\alpha i} = 0$ ), il est nécessaire d'introduire une vitesse de correction  $V_{ci}$  dans le flux de masse

$$(2.59) \implies J_{\alpha i} = \rho Y_\alpha V_{\alpha i} = -\rho D_{\alpha m} \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} + \rho Y_\alpha \underbrace{\sum_{\beta=1,N} D_{\beta m} \frac{W_\beta}{W} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_i}}_{=V_{ci}} \quad (\text{Niveau 1}) \quad (2.60)$$

Cette approximation est considérée comme une des meilleures au premier ordre d'après les études d'ERN et GIOVANGIGLI [64].

3. *Hypothèse thermodiffusive* : suppose que toutes les espèces diffusent de la même manière, *i.e.*  $D_{\alpha m} = D$ , alors il n'y a plus besoin d'introduire de vitesse de correction  $V_{ci} = 0$ . Par ailleurs, si le mélange est homogène, alors  $W = \text{cst} \forall (x, y, z) \implies \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}$  et donc

$$(2.60) \implies J_{\alpha i} = -\rho D \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i} \quad (\text{Niveau 2}) \quad (2.61)$$

### 2.5.3 Flux de chaleur simplifié

1. *Approximation Fickienne* : l'effet Dufour (III) est négligé

$$(2.58c) \implies q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1,N} J_{\alpha i} h_\alpha \quad (\text{Niveau 0}) \quad (2.62)$$

2. À partir du « Niveau 2 » de simplification du flux de masse (2.61) ; en supposant un *nombre de Lewis* (2.69) unitaire et que le gaz est calorifiquement parfait, alors  $D_{\alpha m} = \lambda / (\rho c_p)$  et

$$(2.62) \implies q_i = \frac{-\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (\text{Niveau 2}) \quad (2.63)$$

En général, les auteurs choisissent couramment ces propriétés de transport simplifiées, en particulier les niveaux 1 et 2 du flux de masse et le niveau 0 du flux de chaleur. Cependant, notons qu'il existe encore d'autres formulations simplifiées de ces propriétés de transport ; pour plus de détails, le lecteur pourra se référer aux travaux de GIOVANGIGLI et DARABIHA [78] et KEE *et al.* [108]. Les différents flux présents dans les équations de Navier–Stokes ont été présentés, il reste cependant à estimer les coefficients de transport qui permettent de les calculer.

## 2.6 Coefficients de transport multi-espèces

### 2.6.1 Pour les flux moléculaires détaillés

Les coefficients de transport  $\mu$ ,  $\kappa$ ,  $D_{\alpha\beta}$ ,  $\chi_\alpha$ ,  $\theta_\alpha$  et  $\lambda$ , ne sont pas évalués par la théorie cinétique qui consiste à résoudre le système de Stefan–Maxwell–Boltzmann linéaire et de taille importante. Néanmoins ils peuvent être estimés via une méthode itérative pour obtenir une solution approchée du système. La description complète de la méthode optimale qui en résulte sort du cadre de ce manuscrit ; le lecteur pourra se référer aux travaux d'ERN et GIOVANGIGLI [64] ainsi que la librairie *EGLIB* qu'ils ont développée [63].

### 2.6.2 Pour les flux moléculaires simplifiés

Les expressions des coefficients de transport  $\mu$ ,  $D_{\alpha m}$  et  $\lambda$  varient par rapport à celles correspondantes à la description détaillée précédente.

La viscosité dynamique du mélange  $\mu$  est évaluée via la formule de Wilke–Wassiljewa [95, 211]

$$\mu(\mathbf{Y}, T) = \sum_{\alpha=1, N} \frac{X_\alpha \mu_\alpha(T)}{\sum_{\beta=1}^N X_\beta \phi_{\alpha\beta}}; \quad \phi_{\alpha\beta} = \frac{\left(1 + \sqrt{\mu_\alpha(T)/\mu_\beta(T)} (W_\beta/W_\alpha)^{1/4}\right)^2}{\sqrt{8(1 + W_\alpha/W_\beta)}} \quad (2.64)$$

avec  $\phi_{\alpha\beta}$  une corrélation empirique.

Le coefficient de diffusion  $D_{\alpha m}$  de l'espèce  $\alpha$  dans le mélange moyen est donné par l'approximation d'Hirschfelder et Curtiss [94]

$$D_{\alpha m}(\mathbf{Y}, T, p) = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\alpha \neq \beta} X_\beta / D_{\alpha\beta}(T, p)} \quad (2.65)$$

**Artifice numérique** Dans le cas où une seule espèce serait présente dans le mélange, alors  $Y_\alpha = Y_1 = 1$  et donc le coefficient de diffusion de cette espèce dans elle-même devrait être nul. Pour éviter cela, on suppose que si  $N = 1$ , alors  $D_{\alpha m} = D_{\alpha\alpha}$ .

Enfin, la conductivité thermique du mélange  $\lambda$  est évaluée par la formule de MATHUR *et al.* [136]

$$\lambda(\mathbf{Y}, T) = \frac{1}{2} \left( \sum_{\alpha=1, N} X_\alpha \lambda_\alpha(T) + \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N X_\alpha / \lambda_\alpha(T)} \right) \quad (2.66)$$

mais certains auteurs utilisent aussi de façon homologue la formule de Wilke (2.64) adaptée à la conductivité thermique. Les grandeurs partielles associées à chaque espèce sont déterminées à partir

d'ajustements polynomiaux en température pour  $\mu_\alpha(T)$  et  $\lambda_\alpha(T)$ , tandis qu'une loi puissance en température et corrigée par la pression est utilisée pour les coefficients de diffusion binaire sous la forme  $D_{\alpha\beta}(T, p) = a_{\alpha\beta}^0 / p \times T^{b_{\alpha\beta}}$ , avec  $(a_{\alpha\beta}^0, b_{\alpha\beta})$  des paramètres constants mesurés à pression standard  $p^0$ ; ces relations sont issues de la théorie cinétique des gaz<sup>9</sup>. Pour plus d'information, le lecteur pourra se référer à la documentation de la librairie *CHEMKIN* [109, 110] qui permet d'évaluer ces différents coefficients de transport.

### 2.6.3 Nombres adimensionnés associés aux coefficients de transports

À partir de ces différentes grandeurs, on peut caractériser le fluide, indépendamment des conditions de l'écoulement en introduisant les nombres adimensionnés de Prandtl (Pr), de Schmidt (Sc) et de Lewis (Le). Ces derniers servent notamment à quantifier différents effets (visqueux, thermique ou moléculaire) par rapport à d'autres et permettent ainsi de déterminer quel processus est prépondérant. Ces nombres sont définis par

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{D_{th}} = \frac{\mu c_p}{\lambda} = \frac{\text{Effet visqueux}}{\text{Effet de diffusion thermique}} \quad (2.67)$$

$$\text{Sc} = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D} = \frac{\text{Effet visqueux}}{\text{Effet de diffusion moléculaire}} \quad (2.68)$$

$$\text{Le} = \frac{\text{Sc}}{\text{Pr}} = \frac{D_{th}}{D} = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = \frac{\text{Effet de diffusion thermique}}{\text{Effet de diffusion moléculaire}} \quad (2.69)$$

avec  $D_{th} = \lambda / (\rho c_p)$  la diffusivité thermique et  $D$  le coefficient de diffusion moléculaire.

En général, ces nombres adimensionnés sont estimés pour chacune des espèces en introduisant plus particulièrement un nombre de Schmidt  $\text{Sc}_\alpha$  et de Lewis  $\text{Le}_\alpha$  associé à l'espèce  $\alpha$ . Ceci permet de simplifier encore l'évaluation des coefficients de transport si *le nombre de Lewis est unitaire* pour chaque espèce.

### 2.6.4 Effet de diffusion différentielle ou effet de Lewis

L'hypothèse d'un *nombre de Lewis unitaire* est couramment utilisée dans la littérature. En effet, pour des flammes turbulentes non-prémélangées, le mélange des réactifs se réalise sur des distances physiques importantes (loin de l'injection). De plus, ce processus est principalement dû au mélange à grande échelle par la turbulence plutôt que le mélange par diffusion moléculaire, ce qui justifie de considérer un coefficient de diffusion massique équivalent à la diffusivité thermique. Autrement, on parlera d'*effet de diffusion différentielle ou de Lewis* dans le cas où  $\text{Le}_\alpha \neq 1$  [213]; cet effet peut particulièrement modifier la structure et la stabilité des flammes laminaire ou turbulente [163] et son effet est non négligeable lorsque des espèces légères telles que l'hydrogène, sont présentes dans le mélange et plus spécifiquement, proche de l'injection.

### 2.6.5 Pour des flux moléculaires très simplifiés

Certains auteurs choisissent d'utiliser des modèles de transport encore plus simplifiés, ce qui permet un gain important sur le coût de calcul.

9. On peut remarquer que les coefficients de diffusion moléculaire binaires  $D_{\alpha\beta}$  ou dans le mélange moyen  $D_{\alpha m}$  sont dépendant de la pression. En réalité, cette dépendance est relativement faible pour des pressions de l'ordre du bar mais peut être non négligeable pour des pressions très faibles, dans ce cas, on se placerait plutôt dans un milieu rarifié; ce qui est hors du contexte de la mécanique des milieux continus.

Entre autre, la viscosité du mélange peut se modéliser par la formule empirique de Sutherland qui va dépendre uniquement de la température

$$\mu(T) = \mu_{\text{ref}} \sqrt{\frac{T}{T_{\text{ref}}} \frac{1 + c/T_{\text{ref}}}{1 + c/T}} \quad (2.70)$$

avec  $(c, \mu_{\text{ref}})$  les paramètres dépendant du mélange considéré et  $T_{\text{ref}} = 273.15 \text{ K}$ .

À partir de cette expression, une tabulation des nombres de Schmidt  $Sc_\alpha$  pour chaque espèce dans le mélange moyen est réalisée afin d'approximer le coefficient de diffusion de l'espèce  $\alpha$  par

$$D_{\alpha m}(T, p) = \frac{\mu(T)}{\rho Sc_\alpha} \quad (2.71)$$

Enfin, la conductivité thermique est alors estimée de la même façon par le biais d'un nombre de Prandtl (Pr) du mélange, ainsi

$$\lambda(T) = \frac{\mu(T) c_p(T)}{\text{Pr}} \quad (2.72)$$

Cette dernière approche peut sembler très attractive mais ne sera pas envisagée dans la suite de notre étude.

En revanche, lorsqu'on souhaite établir des équations de transport simples, notamment pour modéliser la combustion ; l'utilisation des hypothèses *de thermodiffusivité, de gaz calorifiquement parfait ainsi qu'un Lewis unitaire* permet d'estimer un coefficient de diffusion moléculaire très simplement par

$$D = D_{th} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (2.73)$$

En particulier, c'est ce dernier coefficient qui sera généralement utilisé pour établir l'équation de transport pour la fraction de mélange (4.12).

## Récapitulatif

Ce chapitre a permis de faire les rappels théoriques et fondamentaux sur la thermo-chimie d'un mélange et les réactions chimiques. Les équations de Navier–Stokes ont elles-aussi été rappelées, avec différents niveaux possibles de modélisation pour représenter les flux moléculaires et les coefficients associés. Cependant, comme annoncé § 1 « Introduction », la simulation numérique directe (DNS) de l'ensemble des équations présentées dans ce chapitre est prohibitif pour des configurations complexes d'écoulements turbulents. C'est pourquoi il est nécessaire de modéliser, tout ou partie, la turbulence. Cela fait l'objet du chapitre suivant.



## Chapitre 3

# Modélisation de la turbulence

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Opérateur de filtrage</b>	<b>28</b>
3.1.1	Hypothèses et définitions	28
3.1.2	Propriétés fondamentales de l'opérateur de filtrage	29
<b>3.2</b>	<b>Équations de Navier–Stokes compressibles réactifs filtrés</b>	<b>29</b>
<b>3.3</b>	<b>Flux moléculaires et coefficients de transport simplifiés résolus</b>	<b>32</b>
<b>3.4</b>	<b>Traitement des termes de sous-maille</b>	<b>33</b>
<b>3.5</b>	<b>Modélisation des termes de sous-maille pour l'écoulement</b>	<b>33</b>
3.5.1	Hypothèse de Boussinesq	34
3.5.2	Modèles de viscosité de sous-maille	34
3.5.2.1	Propriétés de la viscosité de sous-maille	34
3.5.2.2	Modèle de Smagorinsky	35
3.5.2.3	Modèle WALE ( <i>Wall-Adapting Local Eddy-viscosity</i> )	35
3.5.3	Effets de la compressibilité sur les échelles de sous-maille	36
3.5.3.1	Modèle de Yoshizawa	36
3.5.3.2	Présence de discontinuité	37
3.5.4	Modèles de transport scalaire	37
3.5.4.1	Flux de masse de sous-maille	37
3.5.4.2	Flux de chaleur de sous-maille	38
3.5.4.3	Flux des corrélations triples de vitesse	39
<b>3.6</b>	<b>Écoulements pariétaux en LES</b>	<b>39</b>
<b>3.7</b>	<b>Statistique en LES</b>	<b>40</b>
3.7.1	Moments statistiques	40
3.7.1.1	Moment statistique d'ordre 1 : espérance et moyenne	41
3.7.1.2	Moment statistique d'ordre 2 : variance et écart-type	41
3.7.2	Nombres de Reynolds et échelles caractéristiques de la turbulence	43
<b>3.8</b>	<b>Méthodes numériques : code <i>CREAMS</i></b>	<b>44</b>
3.8.1	Prise en main du code de calcul	45
3.8.1.1	Tube à choc multi-espèces inerte	45
3.8.1.2	Double réflexion de Mach	46
3.8.2	Parallélisation du code	51

---

Ce chapitre présente de manière plus détaillée le formalisme général de la modélisation et de la simulation aux grandes échelles qui permettent de réaliser le calcul de configurations plus complexes (semi-)industrielles. Nous présenterons les notions propres à ce type de modélisation, puis, nous terminerons par une brève description du code de calcul *CREAMS* utilisé.

### 3.1 Opérateur de filtrage

Un filtrage spatial de type passe-bas en nombre d'onde, permet de considérer a priori une séparation des échelles de la turbulence. Il conduit à chercher à simuler explicitement les grandes structures de la turbulence (échelles résolues) alors que l'effet des petites structures (échelles non résolues) doit être modélisé. Les petites structures tendent vers un état d'homogénéité plus universel et sont moins affectées par les conditions aux limites que les grandes structures. C'est pourquoi leur modélisation reste a priori plus simple que dans le cadre de la modélisation RANS. Par la suite, on rappellera quelques hypothèses, définitions et propriétés des opérateurs de filtrage, mais pour plus de détails sur leurs formalismes, le lecteur pourra se référer aux ouvrages de SAGAUT [178] et de GARNIER *et al.* [74].

#### 3.1.1 Hypothèses et définitions

**Hypothèses** Pour introduire le formalisme de la simulation aux grandes échelles (LES), il est supposé que *le filtre est homogène et isotrope*, on considèrera aussi que *la largeur du filtre  $\Delta$  est indépendante de l'espace-temps*, i.e.  $\Delta \neq \Delta(x, y, z, t)$ .

Pour les géométries industrielles, la largeur du filtre, qui sera assimilée ensuite à l'échelle de longueur résolue par le maillage, peut varier dans les 3 directions de l'espace et, pour certains cas, aussi dans le temps (cas des maillages mobiles par exemple, cf. MOUREAU *et al.* [143]). On pourra se référer aux travaux de GHOSAL et MOIN [76] qui proposent une définition de l'opérateur de filtrage non-homogène, basé sur un changement de variable. En principe, la difficulté pour définir un filtre non-homogène est de satisfaire la propriété de commutativité avec l'opérateur de dérivation (cf. § 3.1.2). En pratique, les erreurs de commutation avec ce nouvel opérateur sont faibles et sont implicitement intégrées dans les modèles de sous-maille (SGS, *Sub-grid scale*).

**Dans l'espace physique** L'opérateur de filtrage d'une variable spatio-temporelle  $\phi(\vec{x}, t)$  correspond, dans l'espace physique, à un produit de convolutionnoté (\*) entre une fonction filtre  $F$  et cette variable. Cette variable filtrée, notée  $\bar{\phi}(\vec{x}, t)$ , est alors définie par

$$\bar{\phi}(\vec{x}, t) = (F * \phi)(\vec{x}, t) = \frac{1}{\Delta^3} \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\vec{\xi}, t) F\left(\frac{\vec{x} - \vec{\xi}}{\Delta}, t\right) d^3 \vec{\xi} \quad (3.1)$$

La fonction filtre  $F$  (gaussien, boîte, ...) est associée à la largeur du filtre  $\Delta$  et à l'échelle de coupure en temps  $\tau_{\text{cut}}$ . La partie non résolue par le filtre est appelée *partie de sous-maille* qui peut être notée  $\phi'$ , c'est ce terme qu'il faudra fermer par un *modèle de sous-maille*<sup>1</sup>. Finalement, une variable instantanée peut se décomposer sous la forme suivante

$$\underbrace{\phi(\vec{x}, t)}_{\text{terme instantané}} = \underbrace{\bar{\phi}(\vec{x}, t)}_{\text{résolu / filtré}} + \underbrace{\phi'(\vec{x}, t)}_{\text{non résolu / de sous-maille}} \quad (3.2)$$

**Dans l'espace spectral** Le produit de convolution dans l'espace physique  $(\vec{x}, t)$  correspond à un produit simple dans l'espace spectral  $(K, \omega)$

$$\widehat{\bar{\phi}}(K, \omega) = \widehat{\phi}(K, \omega) \widehat{F}(K, \omega) \quad (3.3)$$

1. Historiquement, la modélisation LES est l'extension de la modélisation RANS. Ce dernier introduit la décomposition de Reynolds qui sépare la grandeur instantanée  $\phi = \bar{\phi} + \phi'$  en un terme *moyen* (temporellement qui est assimilé à la *moyenne d'ensemble*)  $\bar{\phi}$  et un terme *fluctuant* (turbulent)  $\phi'$ . Ainsi, les termes filtrés et de sous-maille (dans le cadre LES) sont respectivement les homologues des termes moyens et turbulents (dans le cadre RANS). C'est une des raisons pour laquelle, la littérature fait régulièrement l'abus de langage qui consiste à employer les termes « moyens et turbulents » pour désigner respectivement, ce que sont en réalité, les termes « filtrés et de sous-maille ».

avec  $K$  et  $\omega$ , le nombre d'onde et la pulsation, respectivement. À ces grandeurs, on associe le nombre d'onde de coupure  $K_{\text{cut}} = 2\pi/\Delta$  et la pulsation de coupure  $\omega = 2\pi/\tau_{\text{cut}}$  associés au *cut-off* numérique et à la fréquence de Nyquist.

### 3.1.2 Propriétés fondamentales de l'opérateur de filtrage

Soit  $a$  une constante réelle,  $\phi$  et  $\psi$  des fonctions quelconques, alors l'opérateur de filtrage devrait vérifier les propriétés suivantes (ceci pour rendre la manipulation des équations de Navier–Stokes filtrées plus simple) :

i. *Consistance / Normalisation*

$$\bar{a} = a \iff \int_{\mathbb{R}} F(\vec{\xi}, t') d^3\vec{\xi} = 1 \quad (3.4)$$

ii. *Linéarité*

$$\overline{a\phi + \psi} = a\bar{\phi} + \bar{\psi} \quad (3.5)$$

qui est automatiquement satisfaite de part les propriétés du produit de convolution.

iii. *Commutativité avec l'opérateur de dérivation* (spatiale ou temporelle)

$$\frac{\partial \phi}{\partial \alpha} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \alpha}, \quad \forall \alpha \in \{\vec{x}, t\} \quad (3.6)$$

Évidemment, l'opérateur de filtrage ne se comporte pas de façon similaire à l'opérateur de Reynolds, utilisé pour la modélisation RANS. En effet, on a

$$\overline{\bar{\phi}} = F * F * \phi = F^2 \phi \neq \bar{\phi} \quad (\text{non idempotence}) \quad (3.7)$$

$$\overline{\phi'} = F * (1 - F) * \phi \neq 0 \quad (3.8)$$

## 3.2 Équations de Navier–Stokes compressibles réactifs filtrées

En appliquant l'opérateur de filtrage aux équations de Navier–Stokes *compressibles* (2.51)–(2.54), il sera nécessaire d'introduire deux éléments importants.

1. Le *changement de variable*, introduit par FAVRE [66], afin de traiter les termes non linéaires impliquant la masse volumique, ce changement s'écrit

$$\overline{\rho\phi} = \bar{\rho}\tilde{\phi} \quad (3.9)$$

et permet de décomposer lesdits termes en une partie résolue (filtrée) et une autre non résolue dite de sous-maille. Ceci permet ainsi de garder une expression identique pour l'équation de continuité filtrée (3.11) et sa forme non-filtrée (2.51) ; on parlera aussi de *formes instantanées* pour les équations non-filtrées. L'opérateur  $\tilde{\cdot}$  est aussi communément appelé *opérateur / variable / filtrage de Favre* et vérifie la propriété de linéarité (3.5) mais non de commutativité (3.6), ainsi  $\partial_\alpha \phi \neq \partial_\alpha \tilde{\phi}$  avec  $\alpha \in \{\vec{x}, t\}$ .

2. Un nouvel opérateur  $\check{\cdot}$  défini pour une grandeur  $\phi = \phi(\rho, T, \mathbf{u}, \mathbf{Y}, \dots)$ , tel que

$$\check{\phi}(\rho, T, \mathbf{u}, \mathbf{Y}, \dots) = \phi(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{Y}}, \dots) \quad (3.10)$$

sera appliqué aux grandeurs non linéaires, fonctions d'autres grandeurs, de sorte que cet opérateur désignera la grandeur calculable ou résolue à partir des variables filtrées directement.

À partir de cela, les équations filtrées de masse, de quantité de mouvement et de conservation des espèces se déduisent facilement et s'écrivent

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \check{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{\text{sgs}}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij}) \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial \check{J}_{\alpha i}}{\partial x_i} - \frac{\partial J_{\alpha i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{J}_{\alpha i} - \check{J}_{\alpha i}) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_\alpha \quad (3.13)$$

avec

- $(\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij})$  et  $(\bar{J}_{\alpha i} - \check{J}_{\alpha i})$ , respectivement, la partie de sous-maille du transport moléculaire provenant du tenseur des contraintes visqueuses et du flux de masse ;
- $\tau_{ij}^{\text{sgs}} = \overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ , le tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille <sup>2</sup> ;
- $J_{\alpha i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho Y_\alpha u_i} - \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_i$ , le flux de masse de sous-maille.

Enfin, on considère l'approximation suivante de la loi d'état filtrée

$$\bar{p} \approx \frac{\bar{\rho} R \tilde{T}}{\bar{W}} \quad (3.14)$$

ainsi que celle décrivant le mélange

$$\tilde{X}_\alpha W_\alpha \approx \tilde{Y}_\alpha \tilde{W} \quad \text{et} \quad \tilde{W} = \sum_\alpha \tilde{X}_\alpha W_\alpha \approx \left( \sum_\alpha \frac{\tilde{Y}_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (3.15)$$

Dans les travaux présentés ici, deux formulations, ou systèmes, pour l'équation de l'énergie totale filtrée ont été retenus, implémentés et utilisés. La littérature fournit cependant d'autres systèmes qui sont présentés Annexe B « [Systèmes pour l'équation de l'énergie totale filtrée](#) ».

**La première formulation** retenue est celle de RAGAB *et al.* [171], PIOMELLI [158], KOSOVIC *et al.* [113] et DUBOIS *et al.* [55], elle correspond au « Système A » développé Annexe B. Dans cette formulation, on exprime

$$\text{l'énergie totale filtrée par} \quad \bar{\rho} \tilde{e}_t = \bar{\rho} \tilde{e} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i + \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} \quad (3.16)$$

avec  $\tau_{ii}^{\text{sgs}} = (\overline{\rho u_i u_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i)$ , le terme isotrope du tenseur de viscosité de sous-maille qui est proportionnel à l'énergie cinétique de sous-maille  $k_{\text{sgs}}$  via la relation  $\frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} = \bar{\rho} k_{\text{sgs}}$ . L'équation filtrée de l'énergie totale s'écrit alors

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \check{q}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathcal{Q}_j^A}{\partial x_j} + B_6 - B_7 \quad (3.17)$$

avec

$$\mathcal{Q}_j^A = \left[ \overline{(\rho e_t + p) u_j} - (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j \right] = q_j^{\text{sgs}} + \psi_j - \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} \tilde{u}_j \quad (3.18)$$

$$B_6 = \frac{\partial \mathcal{D}_j^{\text{sgs}}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u_j} - \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i) \quad (3.19)$$

$$B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j - \check{q}_j) \quad (3.20)$$

et

2. Dans la littérature, certains auteurs définissent l'opposé  $\tau_{ij}^{\text{sgs}} = -(\overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ , ainsi dans l'équation filtrée de quantité de mouvement (3.12), on trouvera  $+\partial \tau_{ij}^{\text{sgs}} / \partial x_j$ .

- $q_j^{\text{sgs}} = (\overline{\rho c_p T u_j} - \bar{\rho} \tilde{c}_p \tilde{T} \tilde{u}_j) = (\overline{\rho h u_j} - \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j) \approx \tilde{c}_p \theta_j^{\text{sgs}}$ , le flux de chaleur de sous-maille ;
- $\theta_j^{\text{sgs}} = \overline{\rho u_j T} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{T}$ , le flux de température de sous-maille ;
- $\psi_j = \frac{1}{2} (\overline{\rho u_i u_i u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ , le vecteur des corrélations triples de vitesse ;
- $B_6 = \partial_j \mathcal{D}_j^{\text{sgs}} = \partial_j (\overline{\tau_{ij} u_j} - \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i)$ , le flux diffusif visqueux de sous-maille ;
- $B_7 = \partial_j (\bar{q}_j - \check{q}_j)$ , le terme de sous-maille du flux de chaleur moléculaire.

Cette formulation est la première qui a été développée ; elle est aussi la plus simple formellement. Néanmoins, sa mise en oeuvre dans un code de calcul CFD est plus complexe. Notamment, pour passer d'un code de calcul DNS à LES car l'ajout du terme d'énergie cinétique de sous-maille dans l'expression de  $\tilde{\epsilon}_t$  rend le travail de codage plus laborieux que dans la formulation développée par Vreman (Système D = "I").

**La seconde formulation** retenue est celle développée par VREMAN *et al.* [204], VREMAN [205], elle correspond au « Système D = "I" » développé Annexe B. Elle s'établit à partir de l'équation pour l'énergie interne filtrée à laquelle on ajoute l'équation de l'énergie cinétique résolue  $\frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$ , qui est déduite de l'équation de quantité de mouvement filtrée (3.12) ; ainsi, l'énergie totale considérée est

$$\text{l'énergie totale calculable / résolue} \quad \bar{\rho} \check{\epsilon}_t = \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \quad (3.21)$$

L'équation filtrée de cette énergie totale résolue s'écrit alors

$$\frac{\partial \bar{\rho} \check{\epsilon}_t}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \check{\epsilon}_t \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \check{q}_j}{\partial x_j} - (B_1 + B_2 + B_3) + (B_4 + B_5 + B_6) - B_7 \quad (3.22)$$

avec

$$B_1 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_j) \approx \frac{\partial \tilde{c}_v \theta_j^{\text{sgs}}}{\partial x_j} \quad (3.23)$$

$$B_2 = \overline{p \frac{\partial u_j}{\partial x_j}} - \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \Pi_{\text{dil}}^{\text{sgs}} \quad (3.24)$$

$$B_3 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}^{\text{sgs}} \tilde{u}_i) \quad (3.25)$$

$$B_4 = \tau_{ij}^{\text{sgs}} \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{u}_i \quad (3.26)$$

$$B_5 = \overline{\tau_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i} - \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{u}_i = \epsilon_v^{\text{sgs}} \quad (3.27)$$

où

- $B_2 = \Pi_{\text{dil}}^{\text{sgs}}$ , la pression-dilatation de sous-maille ;
- $B_5 = \epsilon_v^{\text{sgs}}$ , le taux de dissipation visqueuse de sous-maille ;
- $(B_6, B_7)$  sont définis respectivement par (3.19) et (3.20).

Cette équation établie par VREMAN *et al.* [204], VREMAN [205] utilise une formulation initiale ne faisant intervenir aucun terme de sous-maille dans l'expression de l'énergie totale, la pression, la température et la loi d'état. C'est pourquoi sa mise en oeuvre dans un code de calcul est simplifiée, notamment pour passer d'un code DNS à un code LES car seul l'ajout des flux et des termes sources / puits dans le second membre est nécessaire.

**Remarques** Historiquement, l'équation de l'énergie en écoulement compressible et multi-espèces est inspirée des expressions établies pour les gaz diatomiques, comme l'air, et supposés calorifiquement parfait. C'est pourquoi, il est communément admis qu'*on néglige le terme de sous-maille*  $(\overline{\rho T / W} - \bar{\rho} \tilde{T} / \tilde{W})$  dans (3.14). De plus, *l'écriture usuelle pour  $\tilde{\epsilon}$  est supposée équivalente à :  $\tilde{\epsilon}(T) \approx \check{\epsilon}(T) = e(\tilde{T})$ , de même pour les autres fonctions d'état (enthalpie et entropie), les chaleurs spécifiques et les coefficients de transport.*

**Hypothèses** Les analyses a priori présentées par VREMAN *et al.* [204] et MARTÍN *et al.* [129] sur ces derniers systèmes montrent *qu'on peut négliger les flux de sous-maille provenant des flux moléculaires (visqueux et de chaleur), ainsi que le terme  $B_4$  du fait de leur faibles contributions dans leurs équations respectives (cf. Annexe B, Tab. B.2 et les Éqs. B.1 et B.4).* Par des considérations analogues, *la contribution de sous-maille du flux de masse sera aussi négligée dans cette étude*, bien qu'il semblerait qu'aucune étude a priori ou a posteriori n'ait été réalisée pour déterminer son importance. Le principal argument avancé est que ce dernier terme correspond finalement à la vitesse de diffusion moléculaire ayant lieu en sous-maille, qui est finalement négligée lorsque le niveau de turbulence est suffisamment grand. Finalement, on considèrera

$$\begin{aligned}
\text{d'après (B.1) :} & \quad \partial_j(\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij}) \approx \tilde{0} && \text{dans (3.12) ;} \\
\text{(B.2) :} & \quad B_4 = \tau_{ij}^{\text{sgs}} \partial_j \tilde{u}_i \approx 0 && \text{dans (3.22) ;} \\
\text{(B.3) :} & \quad B_6 = \partial_j(\bar{\tau}_{ij} \bar{u}_j - \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i) \approx 0 && \text{dans (3.17),(3.22) ;} \\
\text{(B.4) :} & \quad B_7 = \partial_j(\bar{q}_j - \check{q}_j) \approx 0 && \text{dans (3.17),(3.22) ;} \\
\text{et par analogie :} & \quad \partial_i(\bar{J}_{\alpha i} - \check{J}_{\alpha i}) \approx \tilde{0} && \text{dans (3.13).}
\end{aligned}$$

**Remarque** De la même façon que le développement des flux diffusifs moléculaires, le taux de réaction de l'espèce  $\alpha$  présent dans l'équation de conservation d'espèce filtrée (3.13) pourrait être techniquement écrit sous les deux formes suivantes

$$\overline{\rho \dot{\omega}_\alpha} = \begin{cases} \bar{\rho} \tilde{\dot{\omega}}_\alpha & (3.28a) \\ \bar{\rho} \check{\dot{\omega}}_\alpha + (\bar{\rho} \tilde{\dot{\omega}}_\alpha - \bar{\rho} \check{\dot{\omega}}_\alpha) & (3.28b) \end{cases}$$

La 1<sup>re</sup> forme (3.28a) correspondrait au taux de réaction filtrée  $\tilde{\dot{\omega}}_\alpha$ , tandis que la 2<sup>e</sup> forme (3.28b) se décompose en un terme calculé à partir des grandeurs résolues  $\check{\dot{\omega}}_\alpha = \dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{Y})$  et un terme non-résolu de sous-maille  $(\bar{\rho} \tilde{\dot{\omega}}_\alpha - \bar{\rho} \check{\dot{\omega}}_\alpha)$  qu'il faudrait alors modéliser. Il n'est cependant pas courant de retrouver cette dernière forme (3.28b) dans la littérature car les échelles caractéristiques de la flamme, comme l'épaisseur d'une flamme de prémélange, sont généralement plus petites que la taille de maille, donc en sous-maille. De plus, la non linéarité importante du taux de réaction (2.45), via la loi d'Arrhenius (2.40), fait qu'il est plus usuel de modéliser directement la 1<sup>re</sup> forme  $\tilde{\dot{\omega}}_\alpha$ . Ceci fera l'objet du § 4 « Structures de flammes et leur représentation » et 8.1 « Modèle hybride de combustion turbulente ».

### 3.3 Flux moléculaires et coefficients de transport simplifiés résolus

Les expressions des flux diffusifs moléculaires  $\check{\tau}_{ij}$ ,  $\check{J}_{\alpha i}$  et  $\check{q}_i$  sont développées ci-après avec les coefficients de transport auxquels ils sont associés. Seuls les flux moléculaires simplifiés et présentés § 2.5 sont ici considérés car ce sont ces derniers qui ont été employés dans le cadre de ce travail. Néanmoins, l'application aux flux et coefficients de transport détaillés (§ 2.4) se fait de manière similaire.

#### Tenseur des contraintes visqueuses résolu

$$\check{\tau}_{ij} = \tau_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{T}) = 2\tilde{\mu} \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (3.29)$$

avec

$$\tilde{S}_{ij} = \check{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.30)$$

On voit ici qu'il est nécessaire de supposer la propriété de commutativité de l'opérateur de Favre avec celui de dérivation afin de pouvoir calculer le taux de déformation filtré  $\tilde{S}_{ij}$ .

**Flux de masse résolu**

$$\check{J}_{\alpha i} = J_{\alpha i}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}) = -\bar{\rho} \tilde{D}_{\alpha m} \frac{W_{\alpha}}{\tilde{W}} \frac{\partial \tilde{X}_{\alpha}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha} \underbrace{\sum_{\beta=1,N} \tilde{D}_{\beta m} \frac{W_{\beta}}{\tilde{W}} \frac{\partial \tilde{X}_{\beta}}{\partial x_i}}_{\check{V}_{ci}} \quad (3.31)$$

**Flux de chaleur résolu**

$$\check{q}_i = q_i(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}) = -\tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1,N} \check{J}_{\alpha i} \tilde{h}_{\alpha} \quad (3.32)$$

Finalement, les coefficients de transport sont eux-aussi estimés à partir des grandeurs résolues, *i.e.*

$$\tilde{\mu} \equiv \check{\mu} = \mu(\tilde{Y}, \tilde{T}), \quad \tilde{D}_{\alpha m} \equiv \check{D}_{\alpha m} = D_{\alpha m}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}), \quad \tilde{\lambda} \equiv \check{\lambda} = \lambda(\tilde{Y}, \tilde{T}) \quad (3.33)$$

Les équations de Navier–Stokes filtrées ont été présentées. Ces derniers font intervenir des termes non-résolus de sous-maille qui peuvent être traités de manière *implicite* ou *explicite*.

**3.4 Traitement des termes de sous-maille**

Le traitement des termes de sous-maille dépend maintenant du type de simulation que l'on souhaite réaliser. Rappelons que deux stratégies sont possibles (cf. POPE [169]).

**La LES implicite (ILES) ou numérique** n'utilise pas de modèle explicite de sous-maille, c'est pourquoi certains auteurs la désigne aussi par “*No model*”. En revanche, elle compte sur des schémas numériques devant être : judicieusement choisis, dissipatifs et ayant des propriétés voisines de celles des modèles de sous-maille [86, 91, 169, 178].

**La LES explicite ou physique** modélise explicitement les termes de sous-maille avec des modèles explicites ; elle doit reposer aussi des schémas numériques relativement précis et des maillages fins.

Ces stratégies mènent donc à 4 types de calcul LES envisagés pour les écoulements réactifs :

1. la LES explicite pour l'écoulement et explicite pour la combustion,
2. la LES explicite pour l'écoulement et implicite pour la combustion,
3. la LES implicite pour l'écoulement et explicite pour la combustion,
4. la LES implicite pour l'écoulement et implicite pour la combustion.

Le 1<sup>er</sup> type de catégorie est le plus communément rencontré dans la littérature ; le 2<sup>e</sup> est moins répandue mais a tout de même fait ses preuves en permettant l'obtention de résultats acceptables en combustion prémélangée [58, 59, 69, 79] et non-prémélangée [57, 85, 103, 220] dans des écoulements subsoniques [58, 59, 219] comme supersoniques [38, 103, 131, 220] ; enfin la 3<sup>e</sup> et 4<sup>e</sup> sont beaucoup moins courantes [103, 219].

Le travail présenté ici, consistera à étudier les deux premiers types de calcul LES. Pour cela, il nous faut introduire les fermetures de sous-maille retenues pour l'écoulement, celle associé à la combustion fera l'objet du § 4 et § 8.1.

**3.5 Modélisation des termes de sous-maille pour l'écoulement**

Il existe deux approches pour fermer les termes de sous-maille (SAGAUT [178]).

**La modélisation fonctionnelle** suppose que les échanges entre les grandes et petites échelles ont un caractère universel. Ainsi, l'approche repose sur la connaissance et la nature des interactions entre les structures et ce à différentes échelles ; elle ne cherche donc pas à modéliser directement les termes de sous-maille mais plutôt à modéliser leurs effets sur les termes résolus (*e.g.* effets dissipatifs ou diffusifs).

**La modélisation structurelle** suppose soit (i) que les petites échelles de l'écoulement ont une forme et un caractère relativement universels et sont donc décorréllées des grandes structures résolues ; soit (ii) qu'il existe une corrélation entre ces différentes échelles afin qu'on puisse considérer que le comportement des petites structures en sous-maille se déduit de celle des échelles résolues.

Nous choisirons l'approche la plus classique et la plus simple à mettre en oeuvre qui est celle de *la modélisation fonctionnelle*. Parmi les modélisations structurelles, il est possible de retrouver la décomposition de Leonard ou le modèle de similarité d'échelles pour les plus classiques. Pour plus d'information, le lecteur pourra se référer aux ouvrages [74, 178].

### 3.5.1 Hypothèse de Boussinesq

Le tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille, ou tenseur des corrélations double de vitesse, ou tenseur de Reynolds  $\tau_{ij}^{\text{sgs}} = \overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$  est modélisé en utilisant l'*approximation de Boussinesq* [28]. Celle-ci est une fermeture de type newtonnienne qui exprime la partie déviatrice (ou *traceless*, c'est-à-dire à trace nulle)  $\tau_{ij}^{\text{sgs},d}$  de ce tenseur, de la même façon que le tenseur des contraintes visqueuses du champ résolu mais avec une viscosité de sous-maille  $\mu_{\text{sgs}}$  telle que

$$\tau_{ij}^{\text{sgs},d} = \tau_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} = -2\mu_{\text{sgs}} \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (3.34)$$

où  $\tau_{kk}^{\text{sgs}}$  est la partie isotrope de ce tenseur (scalaire) et peut être considérée comme l'homologue de la contrainte surfacique due aux champs de pression ; c'est d'ailleurs pour cela que LESIEUR *et al.* [118] introduisent la notion de *macro-pressure* (cf. Annexe B, Tab. B.1, Système C). Ce terme est par ailleurs proportionnel à l'énergie cinétique de sous-maille et son effet doit être considéré si les effets de compressibilité sur les petites échelles sont importants. Cette approximation suppose finalement que *les termes de sous-maille ont des effets purement diffusifs vis-à-vis de l'écoulement*.

### 3.5.2 Modèles de viscosité de sous-maille

#### 3.5.2.1 Propriétés de la viscosité de sous-maille

Les principales propriétés recherchées sont :

- i. être positive pour représenter le transfert d'énergie des grandes vers les petites échelles ; sinon le phénomène de *backscatter* apparaît [41] et peut conduire à des instabilités numériques<sup>3</sup> ;
- ii. tendre asymptotiquement vers 0 à la paroi à l'ordre 3, *i.e.*  $\mu_{\text{sgs}} = \mathcal{O}(y^{+3})$  ;
- iii. doit être nulle pour des écoulements 2D (rotation ou cisaillement pur) ;
- iv. doit être nulle si les échelles résolues présentent une compression / dilatation purement axisymétrique ou isotropique.

La Prop. i. est en général vérifiée afin de garantir la stabilité. La viscosité SGS doit représenter les effets de cisaillement et de rotation du fluide en sous-maille, doit être utilisable dans des géométries complexes et sans direction d'homogénéité. D'un point de vue numérique, son coût de calcul doit être raisonnable, c'est pourquoi une formulation locale en espace-temps est préférable.

Nous présentons maintenant quelques expressions possibles pour cette viscosité de sous-maille  $\mu_{\text{sgs}}$  ainsi que pour le terme isotrope  $\tau_{kk}^{\text{sgs}}$  et, en particulier, celles employées dans ces travaux.

3. Notons tout de même que ces phénomènes de *backscatter* existent et qu'il serait souhaitable de pouvoir les traiter numériquement.

### 3.5.2.2 Modèle de Smagorinsky

Ce modèle classique et standard, exprime la viscosité de sous-maille (SGS) par le biais de l'expression suivante [182]

$$\mu_{\text{sgs}} = \bar{\rho}(C_s \Delta)^2 \|\tilde{S}\| \quad (3.35)$$

avec

- $C_s$ , la constante de Smagorinsky qui peut être : soit, fixée à une valeur comprise entre 0.1 (pour les couches cisailées) à 0.18 (valeur théorique obtenue par hypothèse *d'équilibre local d'une turbulence homogène et isotrope*) ; soit, déterminée avec une procédure dynamique pour l'évaluer en espace-temps, tel que le modèle de GERMANO *et al.* [75] et modifié par LILLY [123] ;
- $\Delta$ , la taille caractéristique du maillage qui peut être définie comme  $\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3}$  dans le cas d'un maillage cartésien ;
- $\|\tilde{S}\| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$ , le taux de déformation local.

Ce modèle est très dissipatif, surtout en paroi et si sa constante  $C_s$  est fixée à sa valeur théorique 0.18, il ne permet pas non plus de capter la transition laminaire-turbulent. Il ne modélise que le taux de déformation local sans tenir compte de la rotation c'est pourquoi, par définition, il est non nul en proche paroi, *i.e.*  $\mu_{\text{sgs}} = \mathcal{O}(y^{+0})$ , ceci va conduire à une forte dissipation des fluctuations de sous-maille et par conséquent, l'évaluation du frottement pariétal peut être faussée. Diverses solutions sont possibles pour palier ce problème.

1. Utiliser un modèle dynamique comme celui de Germano-Lilly qui permet de tenir compte de la présence de paroi. Cependant les modèles dynamiques peuvent générer des valeurs négatives, ce qui peut conduire à des instabilités numériques. Ces résultats sont confirmés par BAYA TODA [8] qui ont finalement montré que toutes les procédures dynamiques ne sont pas nécessairement appropriées.
2. Pondérer la viscosité SGS par une fonction d'amortissement (*damping*) comme celle introduite par VAN DRIEST [196] et définie par

$$f_{c,w} = \left(1 - e^{(-y^+/A^+)^n}\right)^m \quad (3.36)$$

où  $(A^+, m, n)$  sont des paramètres dont les valeurs diffèrent entre les auteurs.

### 3.5.2.3 Modèle WALE (*Wall-Adapting Local Eddy-viscosity*)

Ce modèle est introduit par NICLOUD et DUCROS [149] et exprime la viscosité de sous-maille par le biais de l'expression suivante

$$\mu_{\text{sgs}} = \bar{\rho}(C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (3.37)$$

avec

- $C_w \approx C_s \sqrt{10.6}$ , la constante du modèle WALE ;
- $(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}$  estime l'importance des effets de rotation et de cisaillement ;
- $(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2}$  évalue le taux de déformation et ramène le terme à la dimension d'une fréquence ;
- $(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}$  permet de garder la stabilité numérique du modèle.

Le terme  $S_{ij}^d$  est primordial, il correspond à la partie symétrique déviatrice (ou *traceless*) du carré du tenseur des déformations résolus, il s'écrit

$$S_{ij}^d = \tilde{S}_{ik} \tilde{S}_{kj} + \tilde{\Omega}_{ik} \tilde{\Omega}_{kj} - \frac{1}{3} (\tilde{S}_{ml} \tilde{S}_{ml} - \tilde{\Omega}_{ml} \tilde{\Omega}_{ml}) \delta_{ij} \quad (3.38a)$$

$$= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_l} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} \delta_{ij} \quad (3.38b)$$

avec

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.39)$$

le tenseur de rotation (partie antisymétrique du tenseur du gradient de vitesse). Ainsi, par construction, la trace de  $S_{ij}^d$  doit donc être nulle<sup>4</sup>.

Cette formulation de la viscosité SGS, lui permet d'avoir un comportement asymptotiquement correct en proche paroi, *i.e.*  $\mu_{\text{sgs}} = \mathcal{O}(y^{+3})$  (Prop. ii.) et sans fonction d'amortissement ou de procédure dynamique. Elle est nulle pour le cas d'un écoulement 2D (Prop. iii.; GARNIER *et al.* [74]) et elle est capable d'estimer plus précisément l'influence des échelles de sous-maille car, elle évalue à la fois les niveaux de déformation et de rotation. Elle peut aussi être utilisée pour simuler les écoulements en transition laminaire-turbulent. Enfin, bien qu'elle ne mesure pas les niveaux de compression / dilatation (Prop. iv.), cette fermeture est néanmoins un candidat de premier choix dans le cas des écoulements pariétaux.

De nombreux autres modèles de viscosité de sous-maille sont bien sûr disponibles dans la littérature. On pourra trouver parmi les développements relativement récents, celui de VREMAN [203] ou le  $\sigma$ -*model* de BAYA TODA *et al.* [7], NICOUUD *et al.* [150], qui semble disposer des propriétés évoquées § 3.5.2.1 et donne des résultats prometteurs.

### 3.5.3 Effets de la compressibilité sur les échelles de sous-maille

La phénoménologie de l'interaction entre les effets de compressibilité et la turbulence, notamment les petites échelles, est loin d'être parfaitement comprise et fait encore à ce jour l'objet de recherche intensive. C'est pourquoi, la modélisation des termes de sous-maille dans le cadre des écoulements compressibles n'est généralement qu'une extension des modèles de sous-maille développés pour les écoulements incompressibles. Ceci peut se justifier tant que le nombre de Mach de sous-maille

$$\text{Ma}_{\text{sgs}} = \left( \frac{k_{\text{sgs}}}{\gamma R \bar{T} / \bar{W}} \right)^{1/2} \quad (3.40)$$

qui mesure les effets de compressibilité sur les petites échelles, demeure suffisamment faible ( $\text{Ma}_{\text{sgs}} \ll 1$ , ERLEBACHER *et al.* [62]) de sorte que ces effets sont finalement aussi faibles. Dans le cas contraire, l'emploi d'un modèle devient nécessaire.

#### 3.5.3.1 Modèle de Yoshizawa

Le modèle de Yoshizawa [218] est l'un des modèles les plus classiques utilisé pour fermer la partie isotrope du tenseur de viscosité de sous-maille. Il a une formulation cohérente et similaire avec le modèle de Smagorinsky; il repose sur l'hypothèse *d'équilibre local au niveau des termes de sous-maille* et exprime le terme isotrope par

$$\tau_{kk}^{\text{sgs}} = 2C_I \bar{\rho} \Delta^2 \|\tilde{S}\|^2 \quad (3.41)$$

avec  $C_I$ , la constante du modèle de Yoshizawa, elle est prise généralement à 0.066 d'après l'étude DNS compressible d'une turbulence homogène à différent Mach d'ERLEBACHER *et al.* [62]. Cette valeur semble faiblement dépendante du nombre de Mach de l'écoulement.

Notons cependant qu'il existe dans la littérature d'autres possibilités pour fermer ce terme. Une solution courante et d'utiliser une des formes de l'équation de transport pour l'énergie cinétique de sous-maille qui est reliée à  $\tau_{ii}^{\text{sgs}}$  par  $k_{\text{sgs}} = \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} / \bar{\rho}$  (cf. *e.g.* GÉNIN et MENON [89], INGENITO *et al.* [98]).

4. Notons ici que les indices  $(k, l, m)$  sont muets. Ceci est très important car dans l'article original de NICOUUD et DUCROS [149], ainsi que d'autres; le second terme de (3.38b) est régulièrement écrit sous la forme  $\tilde{g}_{kk}^2$ , avec  $\tilde{g}_{kj}^2 = \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{kj}$  et  $\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$  le tenseur du gradient de vitesse. Ceci peut prêter à confusion et inciter à écrire  $\tilde{g}_{kk}^2 = \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}$ , ce qui n'attribue pas la propriété de trace nulle recherchée et engendre ainsi des valeurs de viscosité SGS très importantes et non physiques, pouvant ainsi dissiper toutes les fluctuations turbulentes.

### 3.5.3.2 Présence de discontinuité

Comme nous l'avons vu, ces modèles SGS ne sont pas adaptés dans le cas où l'écoulement présenterait des discontinuités, telles que des parois ou des chocs. Ces discontinuités engendrent des gradients de vitesse indépendants de la nature même des échelles non résolues provoquant ainsi une augmentation artificielle de la viscosité SGS ainsi que de l'énergie cinétique SGS. Pour éviter cela, il est nécessaire de pondérer ces derniers par  $f_{c,sk} = (1 - \sigma)$ , avec  $\sigma$  un senseur de choc (*shock*).

**Senseur modifié d'Adams et Shariff [1]** C'est un des senseurs les plus simples à mettre en œuvre et il donne des résultats tout à fait satisfaisants. Il est basé sur une estimation simultanée de la variation spatiale, locale et normalisée de la masse volumique ainsi que de la pression, on le notera

$$\sigma = \begin{cases} 1 & \text{si } |\rho_{i+1} - \rho_i| / \rho_i \ \& \ |p_{i+1} - p_i| / p_i \text{ sont } > \sigma_{\text{seuil}}, \forall i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket; \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.42)$$

où  $\sigma_{\text{seuil}}$  est une valeur seuil à fixer.

**Senseur de Ducros [56]** Il est l'un des plus couramment utilisés pour les problèmes d'interactions choc / turbulence. Il va comparer la contribution du champ de dilatation, via la divergence de la vitesse, par rapport à celle de la vorticit  ; ainsi, ce senseur s'écrit

$$\sigma = \frac{(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})^2}{(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})^2 + \|\vec{\nabla} \wedge \vec{u}\|^2 + \epsilon}, \quad \sigma \in [0, 1] \quad (3.43)$$

avec  $\epsilon = 10^{-30} \text{ s}^{-2}$  pour   viter de diviser par z  ro. Avec cette d  finition, le senseur est nul dans les zones pleinement turbulentes / faiblement compressibles ( $\|\text{rot } \vec{u}\|^2 \gg (\text{div } \vec{u})^2$  ou  $(\text{div } \vec{u})^2 \approx 0$ ) et unitaire dans les zones fortement compressible ( $(\text{div } \vec{u})^2 \gg \|\text{rot } \vec{u}\|^2$ ), en particulier les chocs mais aussi les couches limites<sup>5</sup>.

De nombreux autres senseurs de choc peuvent aussi   tre trouv  s dans la litt  rature, on peut citer par exemple celui de PIROZZOLI *et al.* [161] bas   sur le Mach local; de LARSSON et LELE [116], qui est une version modifi  e de celui de Ducros et adapt  e en couche limite ou celui d'HILL et PULLIN [92] bas   sur les d  riv  es de l'interpolant du sch  ma WENO.

## 3.5.4 Mod  les de transport scalaire

### 3.5.4.1 Flux de masse de sous-maille

La fermeture traditionnelle utilis  e dans la litt  rature et retenue dans le cadre de ce travail est une *hypoth  se du type premier / loi gradient* pour le flux de masse de sous-maille qui s'écrit sous la forme g  n  rale suivante<sup>6</sup>

$$J_{\varphi,i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho \varphi u_i} - \overline{\rho} \tilde{\varphi} \tilde{u}_i = \overline{\rho} (\overline{\varphi u_i} - \tilde{\varphi} \tilde{u}_i) = -\overline{\rho} D_{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x_i} \quad (3.46)$$

avec

5. On rappelle que le vecteur rotationnelle (ou vorticit  ) est d  fini par

$$\vec{\omega} = \vec{\nabla} \wedge \vec{u} \quad \text{ou} \quad \omega_i = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \quad (3.44)$$

$$\varepsilon_{ijk} = (i - j)(j - k)(k - i) / 2 \quad (3.45)$$

avec  $\varepsilon_{ijk}$ , le symbole de Levi-Civita.

6. Cette expression ne tient pas compte des ph  nom  nes de *diffusion non-gradient* ou bien *contre-gradient* engendr  s par les gradients de pression sur les gaz frais lourds et les gaz chauds l  gers, induisant ainsi un effet de flottabilit   qui est prononc   lorsque l'intensit   de turbulence est faible. De plus, cette loi est    l'origine issue d'une fermeture pour les   coulements non r  actifs et incompressibles. Cependant, contrairement aux calculs RANS, la LES permet de restituer en partie ces effets    l'  chelle r  solue.

- $\varphi$ , un scalaire quelconque dérivant de l'équation de conservation des espèces ;
- $D_{\text{sgs}} = \mu_{\text{sgs}} / \bar{\rho} \text{Sc}_{\text{sgs}}$ , le coefficient de diffusion, ou diffusivité, massique de sous-maille ;
- $\text{Sc}_{\text{sgs}}$ , le nombre de Schmidt de sous-maille, qui peut être soit fixé (généralement entre 0.5 et 1, selon les auteurs et les configurations), soit déterminé de façon dynamique.

Ainsi, le flux de masse SGS de l'espèce  $\alpha$  sera modélisé par

$$J_{\alpha i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho Y_{\alpha} u_i} - \bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha} \tilde{u}_i = -\bar{\rho} D_{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_i} \quad (3.47)$$

**Artifice numérique** Afin de réduire l'allocation mémoire, la taille des tableaux à communiquer pour un calcul parallèle et donc le coût de calcul ; on développe le gradient  $\partial \tilde{Y}_{\alpha} / \partial x_j$ , via  $\tilde{Y}_{\alpha} = W_{\alpha} \tilde{X}_{\alpha} / \tilde{W}$  (3.15) ; ce qui donne :

$$\check{J}_{\alpha i} + J_{\alpha i}^{\text{sgs}} = -\bar{\rho} (\tilde{D}_{\alpha m} + D_{\text{sgs}}) \frac{W_{\alpha}}{\tilde{W}} \frac{\partial \tilde{X}_{\alpha}}{\partial x_i} - \bar{\rho} D_{\text{sgs}} \tilde{X}_{\alpha} W_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{\tilde{W}} \right) + \bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha} \check{V}_{ci} \quad (3.48)$$

Ainsi, il sera alloué et communiqué  $N + 1$  dérivées ( $N$  fractions molaires d'espèce + l'inverse de la masse molaire du mélange  $\tilde{W}$ ), au lieu de  $2N$  dérivées ( $N$  fractions molaires +  $N$  fractions massiques).

**Autre fermeture** Certains auteurs ferment ce flux en reprenant exactement l'expression du flux moléculaire qu'ils ont considéré — *e.g.* ici, celui du flux simplifié (2.60) — et substituent les coefficients de diffusion moléculaire par les coefficients de diffusion de sous-maille, ce qui donne

$$J_{\alpha i}^{\text{sgs}} \equiv -\bar{\rho} D_{\text{sgs}} \frac{W_{\alpha}}{\tilde{W}} \frac{\partial \tilde{X}_{\alpha}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha} \underbrace{\sum_{\beta=1, N} D_{\text{sgs}} \frac{W_{\beta}}{\tilde{W}} \frac{\partial \tilde{X}_{\beta}}{\partial x_i}}_{=V_{ci}^{\text{sgs}}} \quad (3.49)$$

### 3.5.4.2 Flux de chaleur de sous-maille

La littérature fourni beaucoup moins de fermetures pour modéliser le flux de chaleur de sous-maille. En général, il est commun d'utiliser l'*hypothèse d'Eidson* [61] qui considère que le transfert d'énergie des échelles résolues jusqu'en sous-maille est proportionnel au gradient de température résolu via la relation

$$q_i^{\text{sgs}} = -\lambda_{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (3.50)$$

avec

- $\lambda_{\text{sgs}} = \mu_{\text{sgs}} \tilde{c}_p / \text{Pr}_{\text{sgs}}$ , la conductivité thermique de sous-maille ;
- $\text{Pr}_{\text{sgs}}$ , le nombre de Prandtl de sous-maille qui, comme le Schmidt de sous-maille, peut être fixé (entre 0.5 et 1, pour des couches de mélange et jets, selon les auteurs et les configurations), soit déterminé de façon dynamique.

Dans le « Système A » de Ragab et Sreedhar (3.17), ce terme est directement fermé. Alors que pour le « Système D » de Vreman (3.22) ; l'auteur néglige la quantité  $(\tilde{u}_j \partial_j \bar{p} - \overline{u_j \partial_j p})$  pour modéliser directement

$$B_1 + B_2 = -\frac{\partial \tilde{c}_v \theta_j^{\text{sgs}}}{\partial x_j} + \underbrace{\left( \overline{p \frac{\partial u_j}{\partial x_j}} - \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \right)}_{\Pi_{\text{dil}}^{\text{sgs}}} = -\frac{\partial q_j^{\text{sgs}}}{\partial x_j} \quad (3.51)$$

**Autre fermeture** De la même manière que pour le flux de masse de sous-maille, certains auteurs ferment ce flux en reprenant aussi l'expression du flux moléculaire qu'ils ont considéré — *e.g.* ici, celui du flux simplifié (2.62) — et substituent les coefficients de diffusion de sous-maille aux coefficients de diffusion moléculaire, ce qui donne

$$q_i^{\text{sgs}} = -\lambda_{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1,N} J_{\alpha i}^{\text{sgs}} \tilde{h}_\alpha \quad (3.52)$$

### 3.5.4.3 Flux des corrélations triples de vitesse

La modélisation du flux des corrélations triples de vitesse (vecteur) est plutôt basée sur une analyse dimensionnelle plutôt que sur des hypothèses reposant sur la nature des transferts d'énergie [192]. Par extension de la modélisation RANS [50], on modélise ce terme par une loi de type gradient associée à la partie isotrope (trace) du tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille

$$\psi_j = C_{c3} \frac{\mu_{\text{sgs}}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tau_{kk}^{\text{sgs}}}{\partial x_j} \quad (3.53)$$

avec  $C_{c3}$ , la constante du modèle, prise à 0.08.

## 3.6 Écoulements pariétaux en LES

Les écoulements pariétaux sont des configurations pouvant se révéler très contraignantes en terme de résolution. En effet, afin de pouvoir capturer correctement la couche limite, les tailles de mailles doivent être suffisamment petites. Dans ce cas, plusieurs traitements sont possibles : soit le niveau de résolution est équivalent à une DNS, soit on réalise une *LES résolue en paroi* (*Wall-resolved LES*). D'autres types de traitement sont cependant possibles comme utiliser des modèles de paroi en LES ou encore réaliser des calculs DES (*Detached Eddy Simulations*), qui sont beaucoup plus adaptés pour ce type de problème.

Nous réaliserons, a priori, des LES résolue en paroi (*Wall-resolved LES*) où les tailles de mailles sont plus grandes que celles d'une résolution DNS. Pour les écoulements cisailés libres et les écoulements présentant des décollements, la production de la turbulence est associée à l'échelle de l'épaisseur de la couche limite  $\delta$  ; par conséquent, la taille de maille longitudinale  $\Delta x$  doit être comprise entre  $\delta/100$  à  $\delta/10$ .

	DNS	LES résolue en paroi
$\Delta x^+$ (longitudinale)	10–15	50–150
$\Delta y^+$ (normal à la paroi)	1	< 2
$\Delta z^+$ (transversale)	5	10–40

**TAB. 3.1** – Ordres de grandeurs recommandés des tailles de maille en paroi et exprimées en unité de paroi, pour les écoulements pariétaux. D'après [159, 160, 175].

Le Tab. 3.1 fournit des ordres de grandeurs recommandés pour les tailles de mailles, adimensionnées en unités de paroi, dans le cadre d'une LES résolue en paroi. Nous rappelons que la distance et la vitesse adimensionnées à la paroi (en unité de paroi) sont respectivement définies par

$$y^+ = \frac{y \rho u_\tau}{\mu} \quad \text{et} \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (3.54)$$

avec

- $u_\tau = \sqrt{|\tau_w|/\rho_w}$ , la vitesse de frottement ;

◦  $\tau_w = \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right)_w$ , la contrainte pariétale.

L'indice  $w$  est associé aux grandeurs prises à la paroi et la vitesse de frottement est calculée à partir de la valeur absolue de la contrainte pariétale afin d'éviter toute singularité numérique (racine d'un terme négatif), notamment dans les zones de recirculation.

### 3.7 Statistique en LES

Il n'est pas aisé de comparer quantitativement des résultats de simulation LES et des résultats expérimentaux. En effet, la LES fournit des résultats instationnaires pour des variables filtrées spatialement mais seules les quantités statistiques peuvent être réellement comparées du fait du caractère fluctuant et aléatoire de la turbulence. Afin d'obtenir des quantités filtrées spatialement, les mesures doivent être 3D instationnaires. En général, ceci reste difficilement accessible malgré les efforts déployés dans les méthodes de mesures 3D actuelles. Par ailleurs, même si ces mesures étaient accessibles, il faudrait utiliser le même opérateur de filtrage que celui employé en LES; ce qui est tout aussi difficile car le filtrage est réalisé de façon implicite dans les calculs pratiques et est par conséquent, non connu. Enfin, pour les simulations d'*écoulement compressible*, une difficulté supplémentaire s'ajoute au fait que les quantités fournies sont les variables filtrées au sens de Favre (3.9) et sont donc pondérées par la masse volumique; alors que l'expérience fournit généralement des quantités non pondérées.

Par la suite, des rappels sont fournis quant aux définitions des moments statistiques, moyenne et variance notamment, avec la nécessité d'introduire la notion de variance de sous-maille dans le cadre de la LES.

#### 3.7.1 Moments statistiques

Le *moment statistique* d'ordre  $q$  de  $n$  variables aléatoires  $(f_1, f_2, \dots, f_n)$  s'exprime par

$$\left\langle f_1^{k_1} f_2^{k_2} \dots f_n^{k_n} \right\rangle(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \dots \int_{\mathbb{R}} F_1^{k_1} F_2^{k_2} \dots F_n^{k_n} p_{12\dots n}(F_1, F_2, \dots, F_n, \vec{x}, t) dF_1 dF_2 \dots dF_n \quad (3.55)$$

avec  $\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket : k_i \in \mathbb{N} \mid \sum_{i=1}^n k_i = q$ .

La *fonction densité de probabilité jointe*<sup>7</sup> (ou PDF jointe) de ces  $n$  variables aléatoires est représentée par  $p_{12\dots n}$ , c'est une grandeur *spatio-temporelle* qui vérifie la *propriété de normalisation*, similaire à (3.5), suivante

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \dots \int_{\mathbb{R}} p_{12\dots n}(F_1, F_2, \dots, F_n) dF_1 dF_2 \dots dF_n = 1 \quad (3.56)$$

Ainsi la probabilité que  $F_i < f_i \leq F_i + dF_i, \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket$  (condition incluse) est

$$\text{Prob}(F_i < f_i \leq F_i + dF_i, \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket) = p_{12\dots n}(F_1, F_2, \dots, F_n) dF_1 dF_2 \dots dF_n \quad (3.57)$$

**Propriété d'indépendance des variables aléatoires** *Si deux variables aléatoires  $(f_1, f_2)$  sont indépendantes et donc décorrélées*, alors leur fonction de densité de probabilité jointe est telle que  $p_{12}(F_1, F_2) = p_1(F_1)p_2(F_2)$ . Cette propriété fondamentale est largement utilisée dans les problèmes de modélisation via l'utilisation de PDE.

La connaissance seule de cette fonction de densité de probabilité, permet donc de déterminer n'importe quel moment statistique et plus particulièrement l'*espérance mathématique*, équivalent à la *moyenne d'ensemble* ( $q = 1$ ) et la *variance* ( $q = 2$ , carrée de l'*écart-type*) qui sont largement utilisées dans l'étude des écoulements turbulents. Afin d'estimer cette PDF, deux solutions sont généralement possibles.

7. Le terme « joint » désigne l'utilisation d'au moins  $n = 2$  variables aléatoires.

- (i) **Transporter la PDF** avec l'utilisation d'une équation de transport mais dont la résolution est numériquement coûteuse, même avec des méthodes numériques avancées de type Monte Carlo (POPE [167]). Par ailleurs, POPE [168] préconise de ne pas utiliser cette solution pour des PDF jointes avec une discrétisation de type différences finies. Toutefois, les résultats apportés sont très précis.
- (ii) **Présumer la PDF** à partir d'une loi de probabilité (uniforme, binomiale, gaussienne,  $\beta$ -fonction, etc.) et dont l'évolution va dépendre de un ou plusieurs *paramètres de forme* qui sont en général estimés à partir des 2 premiers moments : moyenne et variance (WILLIAMS [212]).

Malheureusement, cette PDF est difficilement accessible. C'est pourquoi, pour des raisons pratiques, les différents moments sont assimilés à partir d'intégration temporelle et éventuellement spatiale s'il existe des symétries ou des directions d'homogénéité.

### 3.7.1.1 Moment statistique d'ordre 1 : espérance et moyenne

La *moyenne d'ensemble*, l'*espérance mathématique* ou la *moyenne de Reynolds* d'une grandeur  $f$  est assimilée à la *moyenne temporelle* de cette même grandeur ; elle est définie par

$$\langle f \rangle(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}} F p(F)(\vec{x}, t) dF \quad (3.58)$$

$$\Leftrightarrow \langle f \rangle(\vec{x}) = \lim_{t_f \rightarrow \infty} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{t_i}^{t_f} f(\vec{x}, t) dt \quad (3.59)$$

avec  $(t_i, t_f)$ , l'instant initial et final de mesure respectivement ; bien évidemment, en pratique, le temps final est une grandeur finie.

Par ailleurs, si une fonction  $\phi$  dépend de  $n$  variables  $(f_1, f_2, \dots, f_n) = \vec{f}$ , il est alors possible d'estimer sa moyenne par

$$\langle \phi(\vec{f}) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \phi(\vec{F}) p(\vec{F}) d^n \vec{F} \quad (3.60)$$

Pour des *écoulements compressibles*, on pondère cette moyenne par la masse volumique et en supposant que la taille du filtre  $\Delta$  est suffisamment petite, on introduit la *moyenne temporelle au sens de Favre*

$$\{f\} = \frac{\langle \rho f \rangle}{\langle \rho \rangle} \approx \frac{\langle \bar{\rho} \tilde{f} \rangle}{\langle \bar{\rho} \rangle} \quad (3.61)$$

Des premières études ont montré que (3.59) et (3.61) donnent des résultats similaires [165].

Enfin, l'analyse statistique des grandeurs moyennes a amené au cours du développement de la LES à introduire la notion de *fonction de densité filtrée* ou FDF pour l'opérateur de filtrage  $\bar{\cdot}$  qui peut être défini exactement de la même manière que (3.58) en écrivant

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}} F \bar{p}(F)(\vec{x}, t) dF \quad (3.62)$$

Cette même définition s'applique de façon analogue à l'opérateur de filtrage au sens de Favre  $\tilde{\cdot}$ .

Le Tab. 3.2 résume finalement les principaux opérateurs de filtrage et de moyenne qui seront utilisés dans le cadre des simulations aux grandes échelles.

### 3.7.1.2 Moment statistique d'ordre 2 : variance et écart-type

La *variance* d'une grandeur  $f$  correspond au moment statistique d'ordre 2 de cette grandeur centrée par rapport à son espérance  $f' = f - \langle f \rangle$ , elle est donc définie par

$$f_v = \langle f'^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} (F - \langle f \rangle)^2 p(F) dF = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \quad (3.63)$$

Opérateurs	Définitions
$\bar{f}$	Filtrage spatial
$\tilde{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$	Filtrage spatial pondéré par la masse volumique
$\langle f \rangle$	Moyenne temporelle (moyenne d'ensemble ou de Reynolds)
$\{f\} = \langle \overline{\rho f} \rangle / \langle \bar{\rho} \rangle$	Moyenne temporelle pondérée par la masse volumique (moyenne de Favre)

**TAB. 3.2** – Récapitulatif des opérateurs de filtrage spatial et de moyenne temporelle en LES.

L'*écart-type* permet de quantifier la dispersion ou le niveau de fluctuation de  $f$  par rapport à sa valeur moyenne, elle correspond donc à l'écart ou erreur quadratique moyenne (*Root-Mean-Square, RMS*) qui est définie par

$$f_{\text{rms}} = \sqrt{f_v} \quad (3.64)$$

Cependant, dans le cadre de la *LES d'écoulement compressible*, la variance statistique peut se décomposer comme suit [111, 165, 169, 199, 200]

$$f_v = \{f^2\} - \{f\}^2 = \frac{\langle \rho f^2 \rangle}{\langle \rho \rangle} - \frac{\langle \rho f \rangle^2}{\langle \rho \rangle^2} \quad (3.65)$$

$$= \frac{1}{\langle \rho \rangle} \left[ \left( \langle \overline{\rho \tilde{f}^2} \rangle - \frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}} \rangle^2}{\langle \bar{\rho} \rangle} \right) + \left( \langle \rho f^2 \rangle - \langle \overline{\rho \tilde{f}^2} \rangle \right) + \left( \frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}} \rangle^2}{\langle \bar{\rho} \rangle} - \frac{\langle \rho f \rangle^2}{\langle \rho \rangle} \right) \right] \quad (3.66)$$

$$= \underbrace{\frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}^2} \rangle}{\langle \bar{\rho} \rangle} - \frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}} \rangle^2}{\langle \bar{\rho} \rangle^2}}_{\text{(I) : } f_v^{\text{res}}} + \underbrace{\frac{\langle \overline{\rho (\tilde{f}^2 - \tilde{f}^2)} \rangle}{\langle \bar{\rho} \rangle}}_{\text{(II) : } f_v^{\text{SGS}}} + \underbrace{R_v}_{\text{(III)}} \quad (3.67)$$

avec

(I) :  $f_v^{\text{res}}$ , la variance résolue et déterminée par le champ résolu de la variable filtrée.

(II) :  $f_v^{\text{SGS}} = \{ \tilde{V}_f \}$ , la moyenne de la variance de sous-maille (SGS)  $\tilde{V}_f \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{f}^2 - \tilde{f}^2$  qui doit être modélisée et dépendra donc généralement : du modèle de viscosité de sous-maille, du niveau de résolution du maillage et du modèle pour le taux de dissipation scalaire, si  $f$  est un scalaire. En effet, dans le cas où  $f = u_i$  est une composante de la vitesse, alors cette variance SGS est directement obtenue par  $\tilde{V}_{u_i} = \overline{u_i u_i} - \tilde{u}_i \tilde{u}_i = \tau_{ii}^{\text{SGS}} / \bar{\rho}$  pour la  $i^e$  composante de la vitesse. Cette grandeur est particulièrement importante, notamment dans certains modèles de combustion non-prémélangée basés sur des approches utilisant des PDF présumées. En effet, comme évoqué précédemment, c'est en général le terme moyen / filtré ainsi que la variance qui sont utilisés pour définir la forme de cette PDF.

(III) :  $R_v = R_{\langle \rho f^2 \rangle} - R_{\langle \rho f \rangle^2}$ , un terme résiduel tel que

$$R_{\langle \rho f^2 \rangle} = \frac{\langle \rho f^2 \rangle}{\langle \rho \rangle} - \frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}^2} \rangle}{\langle \bar{\rho} \rangle}; \quad R_{\langle \rho f \rangle^2} = \frac{\langle \rho f \rangle^2}{\langle \rho \rangle^2} - \frac{\langle \overline{\rho \tilde{f}} \rangle^2}{\langle \bar{\rho} \rangle^2} \quad (3.68)$$

VEYNANTE et KNIKKER [200] ont montré que ce terme peut être négligé pour des LES suffisamment résolues. VERVISCH *et al.* [199] précisent que, dans le cas réactif, ceci est vrai seulement si  $\Delta / \delta_T \ll 1$ , avec  $\delta_T$  une échelle spatiale représentatif du temps d'intégration temporelle. Cela revient à approximer

$$\langle \rho \rangle \approx \langle \bar{\rho} \rangle; \quad \langle \rho f \rangle \approx \langle \overline{\rho \tilde{f}} \rangle; \quad \langle \rho f^2 \rangle \approx \langle \overline{\rho \tilde{f}^2} \rangle \quad (3.69)$$

Finalement, cette décomposition repose sur le fait que l'énergie contenue dans ces fluctuations s'additionnent de sorte que la moyenne statistique (temporelle) de ces fluctuations est égale à la moyenne temporelle de la partie résolue et de la partie de sous-maille, représentée par la variance de sous-maille de la grandeur considérée. Une partie du travail présentée ici consistera en l'analyse du mélange d'un scalaire passif  $\xi$  avec la modélisation de sa variance de sous-maille  $\tilde{V}_\xi$  (cf. § 6 « [Modélisation de la variance scalaire de sous-maille](#) »).

### 3.7.2 Nombres de Reynolds et échelles caractéristiques de la turbulence

#### Nombres de Reynolds

On rappelle que les nombres de Reynolds permettent de caractériser la nature laminaire / turbulente de l'écoulement à l'échelle observée et considérée (vitesse, longueur). De manière générale, un nombre de Reynolds est défini par

$$\text{Re} = \frac{uL}{\nu} = \frac{\text{Force d'inertie}}{\text{Force visqueuse}} \quad (3.70)$$

Ainsi, la quantité basée sur (i) la vitesse fluctuante  $u_{\text{rms}}$  ainsi que (ii) l'échelle intégrale  $L_t$  des grandes structures tourbillonnaires fortement énergétiques, anisotropes, à grandes longueurs d'onde et faible fréquence (cf. cascade énergétique de Kolmogorov), définit le nombre de Reynolds turbulent

$$\text{Re}_t = \frac{u_{\text{rms}}L_t}{\nu} \quad (3.71)$$

qui est une quantité essentielle pour mesurer l'activité turbulente d'un écoulement. De cette façon, les structures turbulentes peuvent être considérées comme pleinement développées si  $\text{Re}_t > 10^4$  [3].

#### Échelles intégrales

Les échelles intégrales longueur  $L_t$ , temps  $\tau_t$ , vitesse  $u_{\text{rms}}$  peuvent s'estimer à partir des grandeurs statistiques (calculées ou modélisées) par

$$L_t = k^{3/2} / \varepsilon \quad (3.72)$$

$$\tau_t = k / \varepsilon \quad (3.73)$$

$$u_{\text{rms}} = \sqrt{k} \quad (3.74)$$

avec

- $k = \frac{1}{2} \{u''_i u''_i\}$ , l'énergie cinétique turbulente ;
- $\varepsilon$ , son taux de dissipation par effet visqueux (E.1).

#### Échelles de Kolmogorov

Elles correspondent aux échelles (de longueur, de temps et de vitesse) de dissipation des plus petites structures tourbillonnaires, de faible énergie, isotropes, à faibles longueurs d'onde et grande fréquence. Ces échelles peuvent être estimées via les approximations suivantes

$$L_\eta = L_t \text{Re}_t^{-3/4} = \left( \frac{\langle \nu \rangle^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.75)$$

$$\tau_\eta = \tau_t \text{Re}_t^{-1/2} = \left( \frac{\langle \nu \rangle}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3.76)$$

$$u_\eta = u_{\text{rms}} \text{Re}_t^{-1/4} = \left( \frac{\langle \nu \rangle}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.77)$$

À cette échelle, le nombre de Reynolds (de Kolmogorov) est de l'ordre de

$$\text{Re}_\eta = \frac{u_\eta L_\eta}{\nu} \approx 1 \quad (3.78)$$

Ces grandeurs sont essentielles, pour l'étude et la caractérisation de l'écoulement turbulent, car elles permettent de quantifier finalement le caractère laminaire / turbulent et dans le cas échéant, les échelles des structures tourbillonnaires et dissipatives de la turbulence. Elles sont d'autant plus fondamentales dans l'étude de la combustion turbulente (cf. § 4 « Structures de flammes et leur représentation ») que ces dernières sont comparées avec ceux de la chimie / flamme, avec l'introduction des nombres de Damköhler et de Karlovitz.

### 3.8 Méthodes numériques : code *CREAMS*

Le code *CREAMS* (*Compressible REActive Multi-Species*) est un solveur Navier–Stokes compressible (§ 2.3), instationnaire, (non-)visqueux, multi-espèces, 3D et parallélisé.

Il est couplé aux solveurs *VODE* [34] (*Variable-coefficient Ordinary Differential Equation*) ainsi que, plus récemment, à *CVODE* [93] pour l'intégration temporelles des termes sources chimiques. Il est par ailleurs couplé à la librairie *EGLIB* (ERN et GIOVANGIGLI [63]) afin de calculer les flux et coefficients de transport multi-espèces dans le cas d'une description détaillée des propriétés de transport (§ 2.4). Le couplage à la librairie *CHEMKIN* [109] permet d'évaluer les coefficients de transports pour une description simplifiée (§ 2.5) avec notamment l'utilisation des tables de JANAF [188] (Annexe A).

La discrétisation spatiale des flux convectifs (non-visqueux) s'appuie sur une procédure de pondération non-linéaire WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) d'ordre 7 [6]. En pratique, le solveur utilise un schéma aux différences finies d'ordre élevé et l'application de la procédure de pondération non-linéaire du schéma WENO7 est conditionnée par la présence de discontinuité (choc principalement), estimée à partir du senseur de choc modifié d'ADAMS et SHARIF [1] (§ 3.5.3.2) ; quant à la discrétisation spatiale des flux diffusifs (visqueux) moléculaires, un schéma centré d'ordre 8 est adopté.

L'intégration temporelle est basée sur une combinaison d'un schéma TVD (*Total Variation Diminishing*) Runge-Kutta d'ordre 3 [83] (contribution non réactive, *i.e.* inerte) et de l'intégrateur (*C*)*VODE* (contribution réactive) via l'emploi d'un découpage (*splitting*) de Strang [187].

Enfin, étant donné la dépendance non linéaire de la température vis-à-vis des grandeurs thermo-chimiques (cf. § 2.1), la température du mélange est déterminée à l'aide de la méthode de Newton–Raphson [2] à partir de la définition de l'énergie totale. La température du mélange est alors la racine de la fonction  $f(T) = e_t + RT/W - h(t) - u_i u_i / 2$  qui est strictement monotone.

Le maillage utilisé est structuré et cartésien afin de faciliter la mise en œuvre de schémas numériques de haute précision. Enfin, le domaine de calcul peut être découpé par le module MPI afin de réaliser des calculs massivement parallèles.

Ce code a été récemment développé au sein de l'Institut Pprime. Ce solveur a été largement vérifié sur divers cas tests représentatifs (tubes à choc, diffusion multi-espèce, propagation d'onde acoustique, réacteur parfaitement mélangé, flamme de prémélange 1D, couche de mélange et jet) permettant sa validation [130]. Par la suite, il a été utilisé pour réaliser des simulations d'écoulement super-sonique de couche de mélange [132, 133] et de jet sous-détendu réactif [37, 39].

Actuellement, le développement de nouvelles fonctionnalités est toujours en cours. Suite aux travaux de MARTÍNEZ FERRER [131] et de BUTTAY [38], notre travail a consisté à étendre les capacités de ce code de calcul DNS en y implémentant les termes de sous-maille nécessaires pour la réalisation de simulations aux grandes échelles explicites (LES). Enfin, deux autres thèses sont actuellement en cours pour développer des méthodes de frontières immergées (IBM, *Immersed Boundary Methods*) ainsi que d'autres modèles de sous-maille pour modéliser le taux de réaction chimique.

### 3.8.1 Prise en main du code de calcul

Cette section a pour but de présenter quelques cas tests académiques qui nous ont permis de prendre en main le code CREAMS (version 1.2).

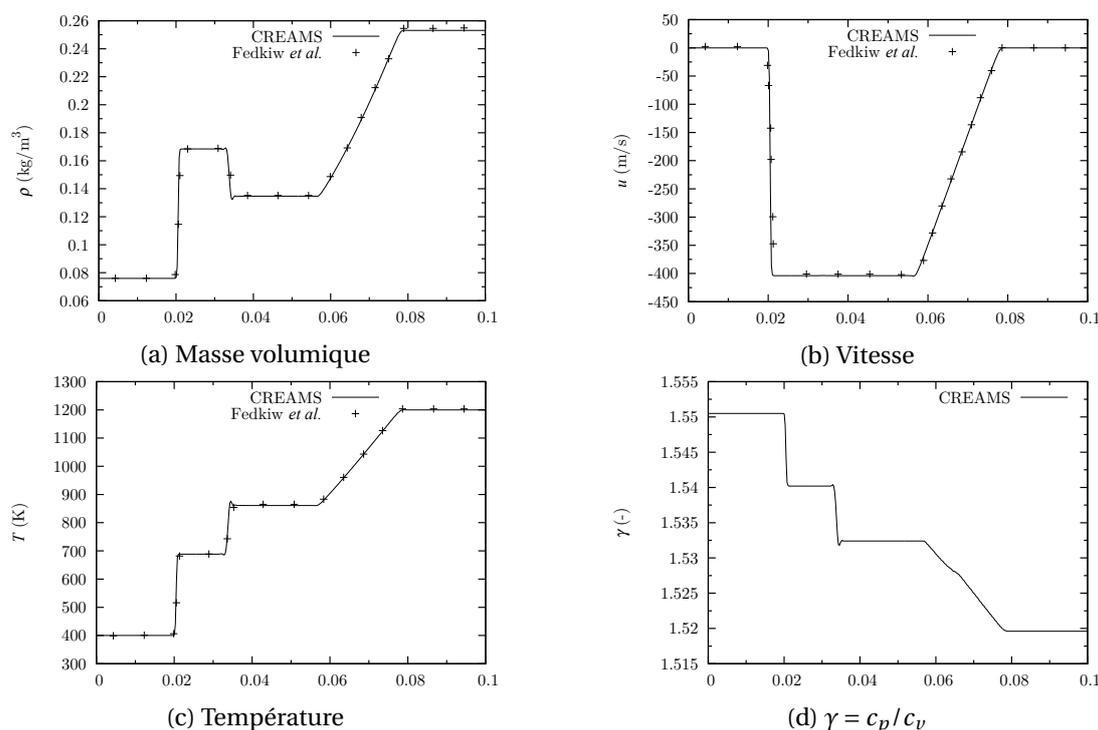
#### 3.8.1.1 Tube à choc multi-espèces inerte

Ce cas test, proposé par FEDKIW *et al.* [67], est une version modifiée du tube à choc 1D de SOD [184] en utilisant un mélange multi-espèces non réactif. Il permet de vérifier d'une part le couplage entre les termes convectifs des équations de Navier–Stokes et la librairie thermodynamique des mélanges multi-espèces, et d'autre part, la robustesse du schéma WENO7, en présence d'importantes discontinuités dans le milieu.

On considère ici un tube de 10 cm de longueur, discrétisé avec  $N_x = 400$  points. Le mélange gazeux est composé des fractions molaires suivantes  $(X_{H_2}, X_{O_2}, X_{Ar}) = (0.2, 0.1, 0.7)$ . Ce mélange est initialement au repos (vitesse nulle) et est réparti de manière uniforme dans le tube. Les conditions initiales correspondent au problème de Riemann suivant

$$\text{à } t = 0 \begin{cases} (T_L, p_L) = (400 \text{ K}, 8000 \text{ Pa}), & \text{si } x < 5 \text{ cm} \\ (T_R, p_R) = (1200 \text{ K}, 80\,000 \text{ Pa}), & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.79)$$

Des conditions aux limites d'extrapolation sont imposées aux extrémités du tube. La simulation se fera jusqu'à un temps physique de 40  $\mu\text{s}$  avec un CFL = 0.5. Le calcul s'est effectué en parallèle sur 10 processeurs MPI et la durée du calcul est de 3 min.



**FIG. 3.1** – Profils de (a) masse volumique, (b) vitesse, (c) température et (d) rapport des capacités calorifiques pour le tube à choc multi-espèces inerte à  $t = 40 \mu\text{s}$ . Abscisse =  $x$  (m).

Les résultats obtenus sont présentés à la Fig. 3.1 et montrent que la position respective du choc ( $x = 2$  cm), de la discontinuité de contact ( $x = 3.5$  cm) ainsi que de la détente (entre environ  $x = 6$  à 8 cm) coïncide avec celle obtenue par les travaux numériques de FEDKIW *et al.* [67]. Cependant les faibles oscillations présentes au niveau de la discontinuité de contact s'explique par le fait que la pondération non-linéaire du schéma WENO7 ne s'est pas activée en raison d'une variation de pression

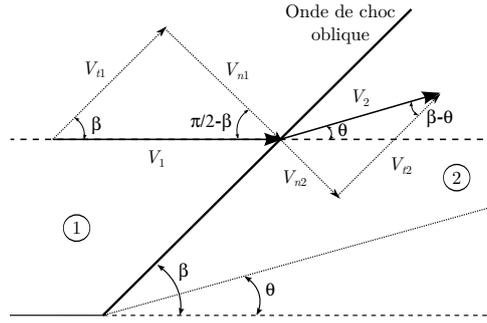


FIG. 3.2 – Schéma d'une onde de choc oblique stationnaire

et de masse volumique trop faible ; par conséquent le schéma centré est conservé, ce qui entraîne les instabilités numériques observées. Par ailleurs, étant donné que le code *CREAMS* tient compte des variations des grandeurs physico-chimiques avec la température, le profil de  $\gamma = c_p/c_v$  met en évidence que l'hypothèse de  $\gamma$  constant (gaz caloriquement parfait) est infirmée.

### 3.8.1.2 Double réflexion de Mach

**Relations de Rankine–Hugoniot pour un gaz caloriquement imparfait** Soit une onde de choc oblique stationnaire, que l'on peut rencontrer dans un écoulement où une rampe de compression est présente et faisant un angle  $\theta$  par rapport à la direction principale de l'écoulement. On suppose ici que l'écoulement est permanent, les forces volumiques sont négligées et le fluide est parfait et suit la loi d'état des gaz parfaits. L'écoulement est aussi supposé *inerte*, de sorte que la composition du mélange de part et d'autre du choc reste identique. La Fig. 3.2 montre par exemple un écoulement qui se propage de la gauche, avec une vitesse  $V_1$ , vers la droite, avec une vitesse  $V_2$  et est défléchi d'un angle  $\theta$  en aval du choc ;  $V_{ni}$  et  $V_{ti}$  sont les vitesses normales et tangentes en amont ( $i = 1$ ) et en aval ( $i = 2$ ) du choc, respectivement. Les relations de Rankine–Hugoniot (3.80)–(3.84) [45]

$$p_1/\rho_1 T_1 = p_2/\rho_2 T_2 \quad (3.80)$$

$$V_{t1} = V_{t2} \quad (3.81)$$

$$\rho_1 V_{n1} = \rho_2 V_{n2} \quad (3.82)$$

$$p_1 + \rho_1 V_{n1}^2 = p_2 + \rho_2 V_{n2}^2 \quad (3.83)$$

$$h_1 + V_{n1}^2/2 = h_2 + V_{n2}^2/2 \quad (3.84)$$

permettent de calculer l'état en aval du choc. Ces relations proviennent de l'équation d'état (3.80) supposant le mélange homogène en amont et aval du choc ; de continuité (3.81) et (3.82) ; de quantité de mouvement (3.83) et d'énergie (3.84) ; avec les relations suivantes :  $V_{n1} = V_1 \sin \beta$ ,  $V_{n2} = V_2 \sin(\beta - \theta)$  et  $\theta = \beta - \arctan(V_{n2} \tan \beta / V_{n1})$  où  $\beta$  est l'angle du choc par rapport à la direction initiale de l'écoulement.

Étant donné que seule la composante normale au choc apparaît dans ce système, nous simplifions la notation en prenant :  $V_{n1} = u_1$  et  $V_{n2} = u_2$ . Enfin pour résoudre ce système, la méthode consiste à se ramener à une équation non linéaire [139] en ré-écrivant (3.84) et ainsi trouver le zéro de la fonction suivante

$$f(\phi) = h_1(T_1) - h_2(T_2) + \frac{u_1^2}{2} \left( 1 - \frac{\phi^2}{\psi(\phi)^2} \right) \quad (3.85)$$

avec  $\phi = T_2/T_1$  et  $\psi = p_2/p_1$ , qui sont obtenues en considérant  $u_2/u_1 = \rho_1/\rho_2 = (T_2/T_1)/(p_2/p_1)$ , via (3.81) et (3.80). Le rapport  $\psi(\phi) = p_2/p_1$  s'obtient en divisant (3.82) par  $p_1$ , ce qui nous donne l'équation du second degré suivante

$$\psi^2 - \left( 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right) \psi + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \phi = 0 \quad (3.86)$$

dont la solution n'existe que si le discriminant est positif ou nul. De plus, la seule solution physiquement correcte à (3.86) est la suivante

$$\psi(\phi) = \frac{p_2}{p_1} = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right)^2 - 4\phi \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1}} \right] \quad (3.87)$$

autrement  $T_2/T_1$  serait inférieur à l'unité. Par ailleurs, la positivité du discriminant implique que

$$\phi \leq \left( 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right)^2 \frac{p_1}{4\rho_1 u_1^2} \quad (3.88)$$

Finalement, pour trouver le zéro de la fonction  $f$ , la méthode de Newton–Raphson [2] est utilisée avec une estimation numérique de la dérivée. Si cette dernière échoue, notamment lorsque la condition (3.88) n'est pas vérifiée, la méthode par dichotomie est utilisée. Ces méthodes sont stables et convergentes car la fonction  $f$  est strictement monotone et contient un unique zéro sur l'intervalle  $[1, \phi_{\max}]$ . avec  $\phi_{\max} = (1 + \rho_1 u_1^2 / p_1)^2 p_1 / (4\rho_1 u_1^2)$ .

**Simulation d'un choc instationnaire** Soit un choc se déplaçant à une vitesse  $u_s = Ma_s a_1$  connue, dans un milieu au repos (état 1) lui aussi connu (cf. Fig. 3.3(a)), alors ce choc génère une vitesse et des états thermodynamiques induits qu'il reste à déterminer. Pour cela, la méthode [139] consiste à changer de repère en se plaçant dans le cas d'un choc stationnaire (cf. Fig. 3.3(b)) afin que les relations de Rankine–Hugoniot (3.80)–(3.84) puissent être utilisées. Les états thermodynamiques entre (2) et (2') étant identiques, la vitesse induite en aval du choc est alors déterminée par

$$u_2 = u_s - u_2' \quad (3.89)$$

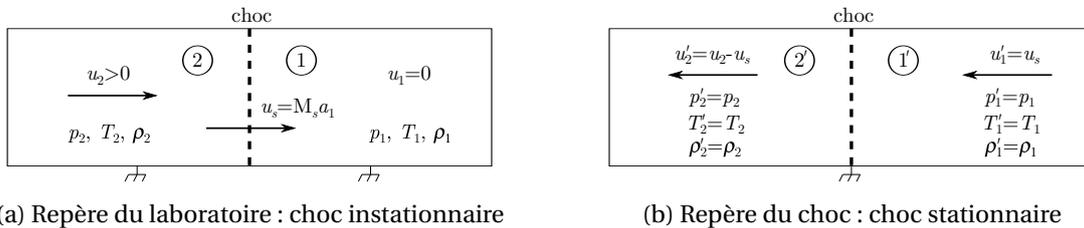


FIG. 3.3 – Méthode de calcul pour déterminer les conditions post-choc (état 2) d'une onde de choc instationnaire

**Simulation de la double réflexion de Mach** Les ondes de choc sont des discontinuités résultant des propriétés hyperboliques des équations d'Euler. Leurs interactions avec des solides ou d'autres chocs permettent de comprendre les écoulements compressibles supersoniques. En particulier, les réflexions de chocs apparaissent lorsqu'un choc incident rencontre une surface. Ce sont des problèmes typiquement 3D instationnaires qui ont été abondamment étudiés dans la littérature et dont BEN-DOR [9] en a fait un recueil.

Les réflexions de choc peuvent présenter des structures différentes suivant le nombre de Mach du choc incident et l'angle avec lequel le choc impacte la paroi. Le cas de la réflexion d'un choc droit instationnaire sur une rampe ou dièdre constitue un cas académique de référence dans la littérature. On peut citer par exemple les travaux de WOODWARD et COLELLA [215] et LI et BEN-DOR [121]. Ces derniers présentent les différents types de réflexion de Mach, à savoir (cf. Fig. 3.4) régulière, de von Neumann, simple, transitionnelle et double. Ces auteurs présentent d'autre part, les différents critères de transitions et limites du nombre de Mach et d'angle de rampe permettant de passer d'un type de réflexion à un autre.

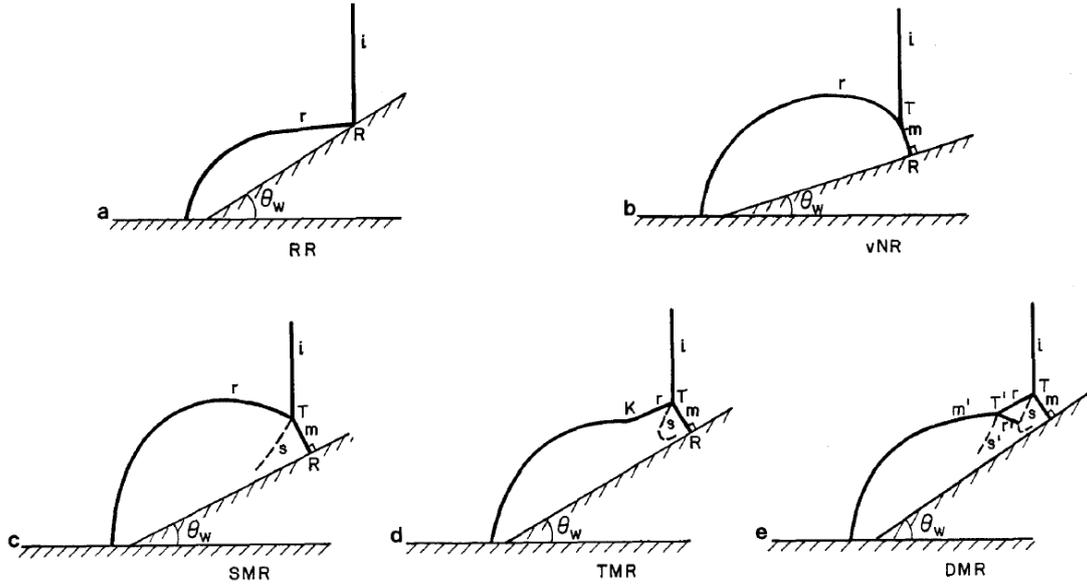


FIG. 3.4 – Différents schémas de réflexions pseudo-stationnaires d'une onde de choc droite sur une rampe (a) réflexion régulière (RR) ; (b) réflexion de Von-Neumann (vNR) ; (c) simple réflexion de Mach (SMR) ; (d) réflexion de Mach transitoire (TMR) ; (e) double réflexion de Mach (DMR). D'après LI et BEN-DOR [121].

Pour tester et prendre en main le code *CREAMS*, nous nous sommes intéressés au cas de la double réflexion de Mach (DMR) qui est caractérisée par la présence de 2 points triples (T) qui sont des singularités au niveau desquelles se joignent le choc incident (i), le front de Mach (m), la ligne de glissement (s) et le choc réfléchi (r). Pour un gaz réel, les données d'entrées de ce problème sont le nombre de Mach, l'angle de la rampe, la pression, la température et les espèces présentes dans le milieu. Par ailleurs, il est montré expérimentalement que l'évolution de l'angle du point triple est fonction du nombre de Mach incident et de l'angle de la rampe, excepté pour un angle de rampe faible et pour un nombre de Mach trop élevé [9]. Enfin, BEN-DOR explique qu'il est physiquement impossible d'obtenir une triple réflexion de Mach.

Le problème général qui peut être considéré, schématisé Fig. 3.5, est donc la propagation d'un choc droit instationnaire qui rencontre une rampe de compression. Pour pouvoir simuler un tel cas avec notre code de calcul cartésien-structuré, il est nécessaire de simplifier le problème en ne considérant qu'un domaine restreint (Fig. 3.5, schéma de droite). Le choc est positionné à l'instant initial à l'intérieur du domaine et présente un angle  $\pi/2 - \theta_w$  par rapport à la rampe d'angle  $\theta_w = 36^\circ$ . Ce choc se propage à un nombre de Mach incident  $Ma_s = 4.5$ , dans de l'azote pur  $N_2$  et à une température et à une pression, respectivement égale à  $T_1 = 300$  K et  $p_1 = 1$  atm. Initialement, les conditions pré- et post-choc sont calculées à partir des relations de Rankine-Hugoniot présentées précédemment et le calcul réalisé est non visqueux (calcul Euler).

Le domaine de calcul est représenté Fig. 3.6, il est constitué d'un domaine principal d'étude et d'une zone tampon relativement grande pour éviter toute réflexion d'ondes parasites lorsque le choc impacte la partie supérieure du domaine. Les conditions aux limites retenues sont des conditions d'extrapolation suivant la direction  $\pm x$  ainsi qu'à la limite supérieure du domaine. Sur la limite inférieure, une paroi adiabatique glissante est imposée dans la section où se propage la DMR, sinon les conditions post-choc sont imposées (conditions de Dirichlet) afin de prévenir toute distorsion de la structure de choc [215]. Par ailleurs, une étude de sensibilité au maillage a été effectuée en considérant 4 maillages différents, présentés Tab. 3.3. Les calculs ont été réalisés avec un CFL = 0.5, sur 12 processus MPI. À titre indicatif, la durée de calcul sur le 4<sup>e</sup> maillage ( $4000 \times 905$ ) est de 13.5 h pour atteindre un temps physique de 7  $\mu$ s.

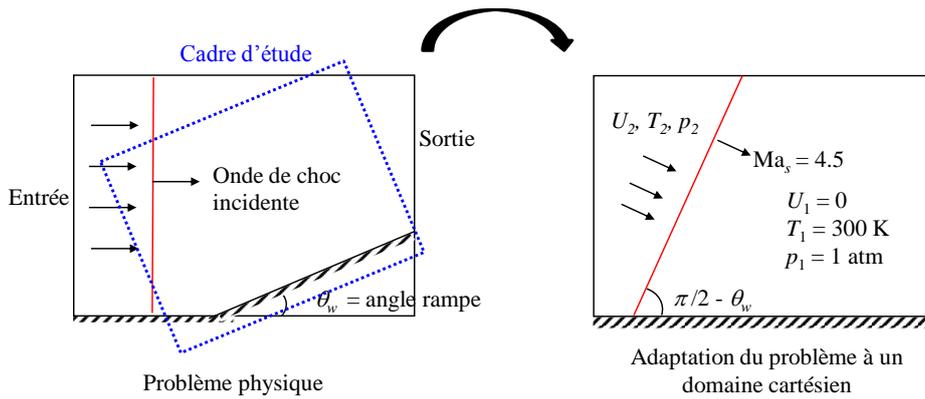
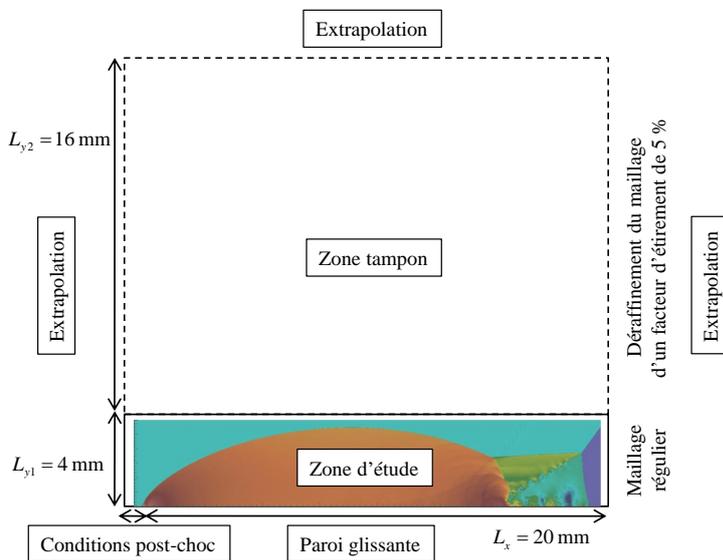


FIG. 3.5 – Schéma d'adaptation du problème de la DMR à un domaine cartésien.

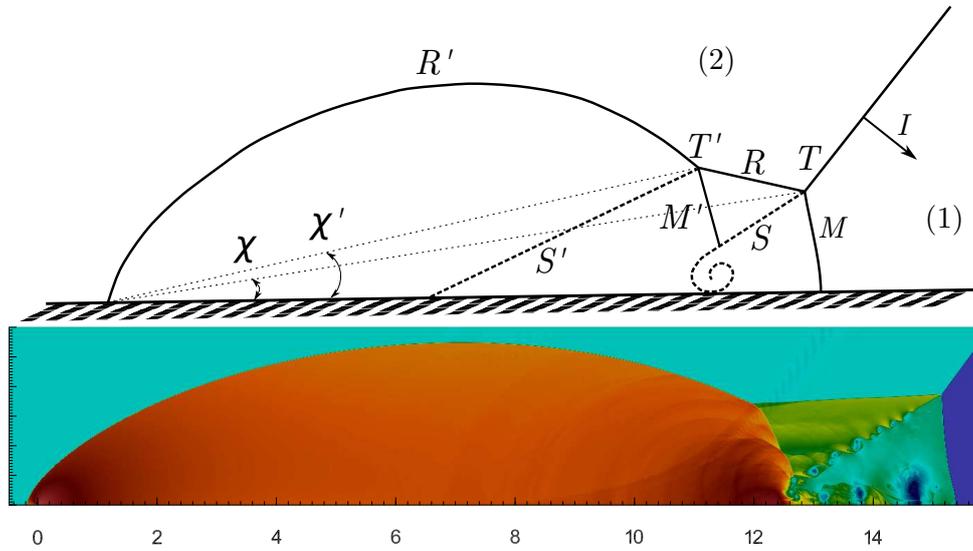


Mesh #	$N_x$	$N_y$	$N_t = N_x N_y$
1	500	156	78 000
2	1000	265	265 000
3	2000	468	936 000
4	4000	905	3 620 000

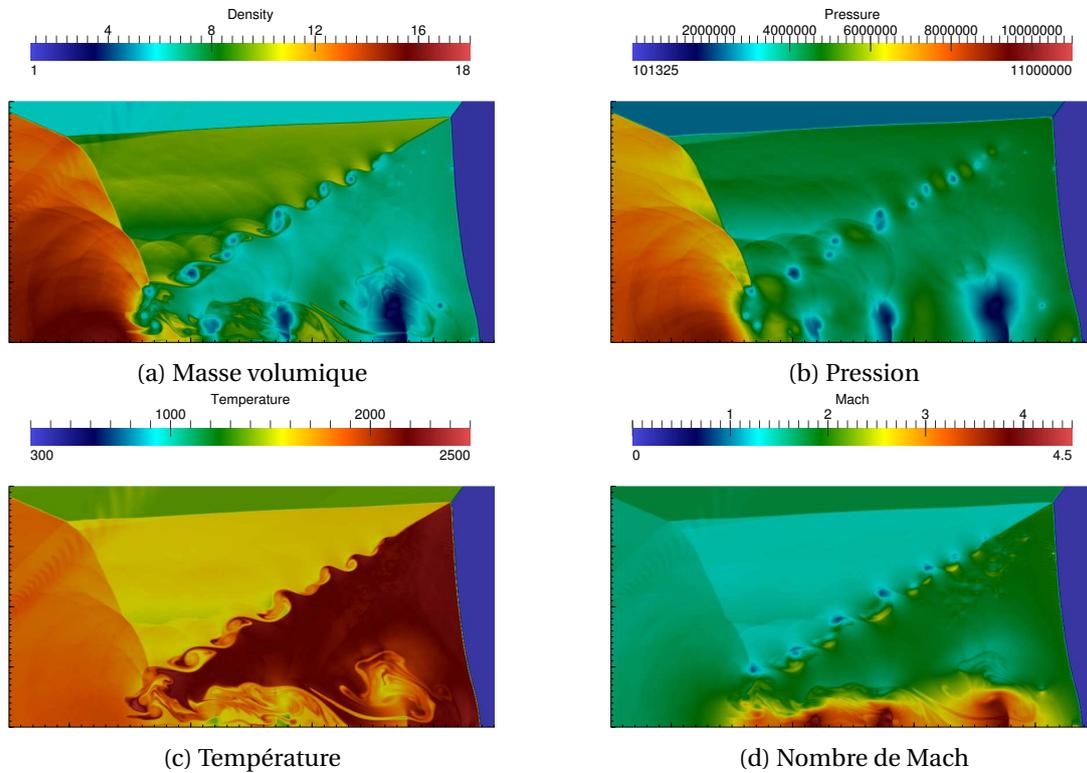
TAB. 3.3 – Maillages retenus pour simuler la DMR.

FIG. 3.6 – Domaine et conditions aux limites du calcul de la double réflexion de Mach.

La Fig. 3.7 montre la topologie globale de la double réflexion de Mach sur le dernier maillage (Mesh 4). On peut distinguer clairement le choc incident (I), les 2 chocs réfléchis (R et R'), les 2 points triples (T et T'), les 2 lignes de glissement (S et S') ainsi que les 2 fronts de Mach (M et M'). La Fig. 3.8 montre que de part et autre de la ligne de glissement (S), la pression statique est identique mais la différence de vitesse engendre une différence de pression totale qui peut générer des zones de recirculation observées en aval du front de Mach. Ces dernières peuvent potentiellement servir à amorcer et stabiliser des zones de combustion dans le foyers des propulseurs supersoniques du fait de la température très élevée créée en aval du front de Mach (jusqu'à 2200 K). Par ailleurs, un jet dense le long de la ligne de glissement, à Mach 4 environ est observé et va déformer légèrement le front de Mach (M) [215]. De plus, au niveau de cette ligne de glissement, des instabilités de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz sont observées, créant ainsi des structures tourbillonnaires 2D qui vont interagir avec le jet dense au niveau de la paroi glissante. Enfin, il est possible de remarquer la présence d'une onde parasite non physique au-dessus du second point triple (T') comme l'ont précédemment constaté WOODWARD et COLELLA [215]. La Fig. 3.9 montre l'évolution temporelle de la structure de la DMR en différents instants, espacés d'environ 2  $\mu$ s. Le développement régulier dans l'espace-temps de la



**FIG. 3.7** – Structure de la double réflexion de Mach à  $t = 7 \mu\text{s}$  (vue globale — Mesh 4) : (I) choc incident ; (R) choc réfléchi ; (S) ligne de glissement ; (T) points triples ; (M) front de Mach ; ( $\chi$ ) angles des points triples. Champ de masse volumique.



**FIG. 3.8** – Champs de (a) masse volumique, (b) pression, (c) température et (d) Mach à  $t = 7 \mu\text{s}$  (Mesh #4, cadre :  $[11.5, 15.5] \times [0, 2] \text{ mm}^2$ ).

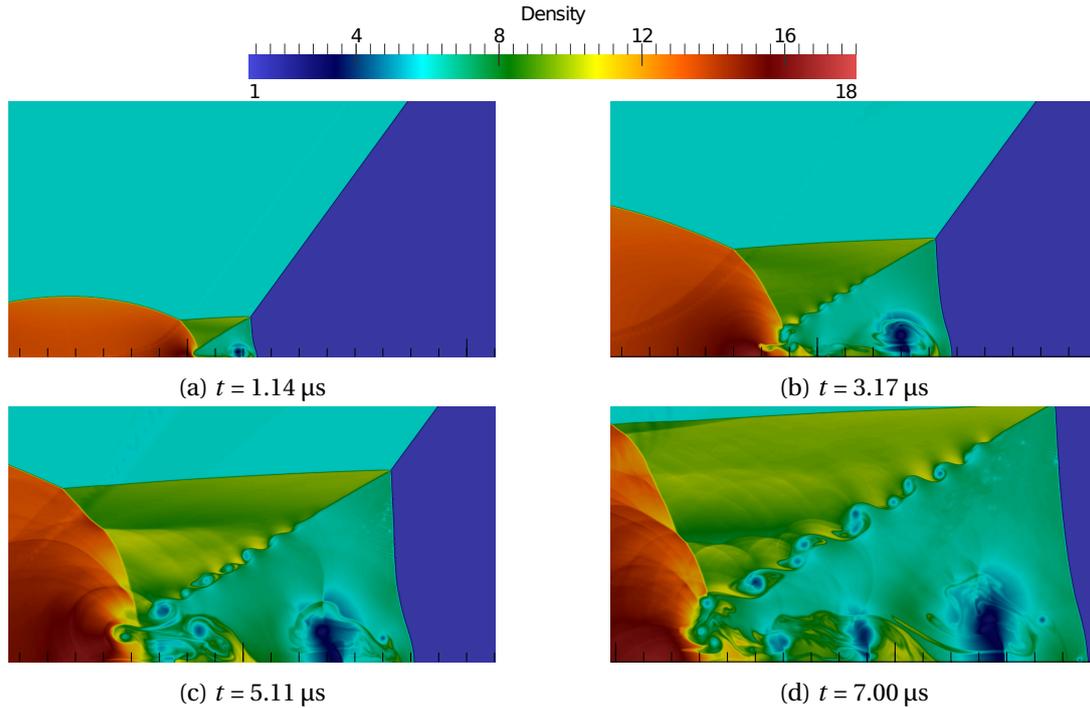


FIG. 3.9 – Évolution temporelle de la structure de la DMR (zoom sur un cadre de  $3.5 \times 1.85 \text{ mm}^2$ ).

structure montre une évolution auto-semblable de la DMR, elle évolue donc de façon homothétique, en gardant la même structure dans le temps.

Enfin, les Figs. 3.10 et 3.11 mettent en évidence les effets dissipatifs introduits par (i) un maillage grossier et (ii) le schéma numérique WENO7. En effet, plus le maillage est fin plus il sera possible de capturer les structures tourbillonnaires qui se développent, notamment, au niveau de la ligne de glissement et de la paroi. Il en est de même pour la valeur seuil  $\sigma_{\text{seuil}}$ , imposée pour déclencher la pondération non-linéaire du schéma WENO7. Celle-ci est conditionnée par le senseur de choc modifié d'ADAMS et SHARIFF [1] (cf. § 3.5.3.2). On voit que plus le critère est lâche ( $\sigma_{\text{seuil}} = 0\%$ ), plus le schéma numérique va introduire de la dissipation artificielle, numérique, et donc, dissiper les structures tourbillonnaires. Contrairement à la valeur seuil optimisée à  $\sigma_{\text{seuil}} = 8.2\%$ , déterminée de manière itérative, et qui ne tolère qu'un déclenchement restreint de la procédure de pondération non-linéaire du schéma WENO7, presque exclusivement dans les zones de chocs.

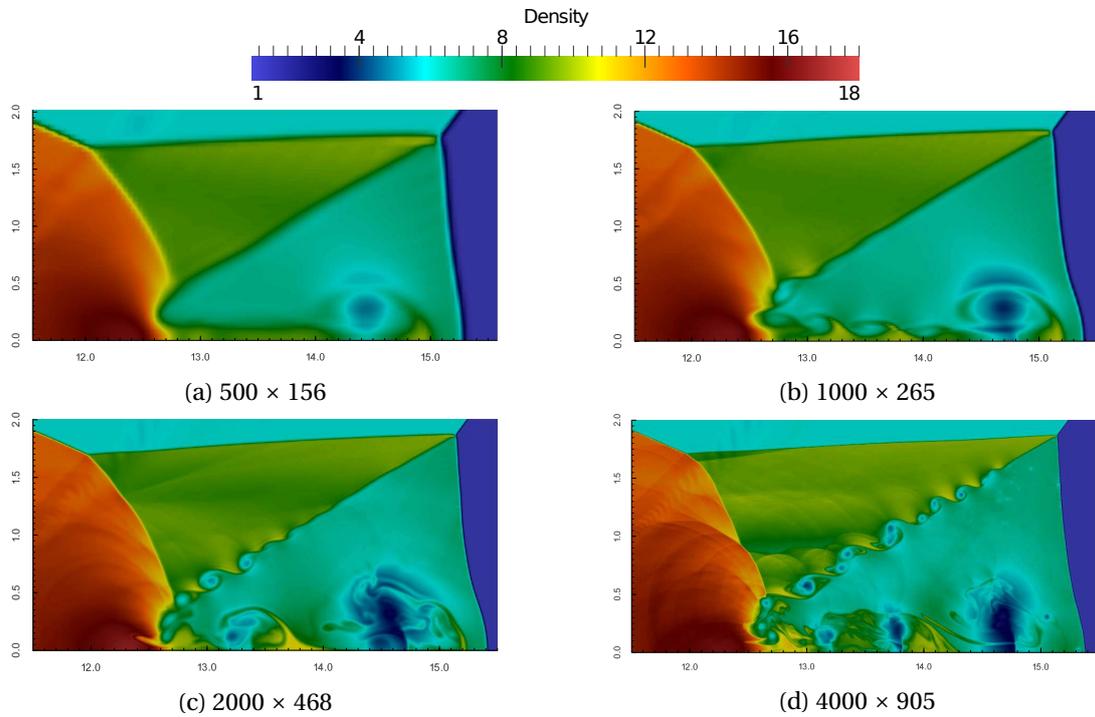
### 3.8.2 Parallélisation du code

La parallélisation d'un code de calcul permet, *sous une certaine limite*, de résoudre le problème plus rapidement par le biais d'une exécution simultanée du code sur plusieurs processus. Dans le cadre d'une décomposition par sous-domaine, chacun des processus devra *communiquer* avec les processus adjacents afin de transmettre les conditions aux limites de chaque sous-domaine. Dans le code CREAMS, le découpage et les processus de communication sont réalisés via la librairie MPI.

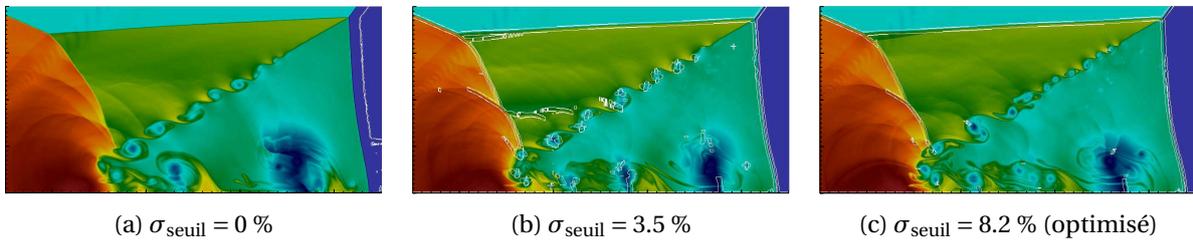
Une étude de scalabilité sur le code de calcul en LES, cas inertes et réactifs a été nécessaire afin de quantifier les performances du code CFD avec la nouvelle implémentation LES.

Afin de mesurer les performances du code, il est courant d'introduire le *speedup* (ou accélération) (3.90) qui correspond au rapport entre le temps de calcul (*walltime*) avec 1 processus par rapport à  $n$  processus

$$\text{Speedup}(n) = \text{Accélération}(n) = \frac{t_{\text{calcul}}(n=1)}{t_{\text{calcul}}(n)} \quad (3.90)$$



**FIG. 3.10** – Champs de masse volumique pour différents maillages à  $t = 7 \mu\text{s}$  (cadre :  $[11.5, 15.5] \times [0, 2] \text{ mm}^2$ ).



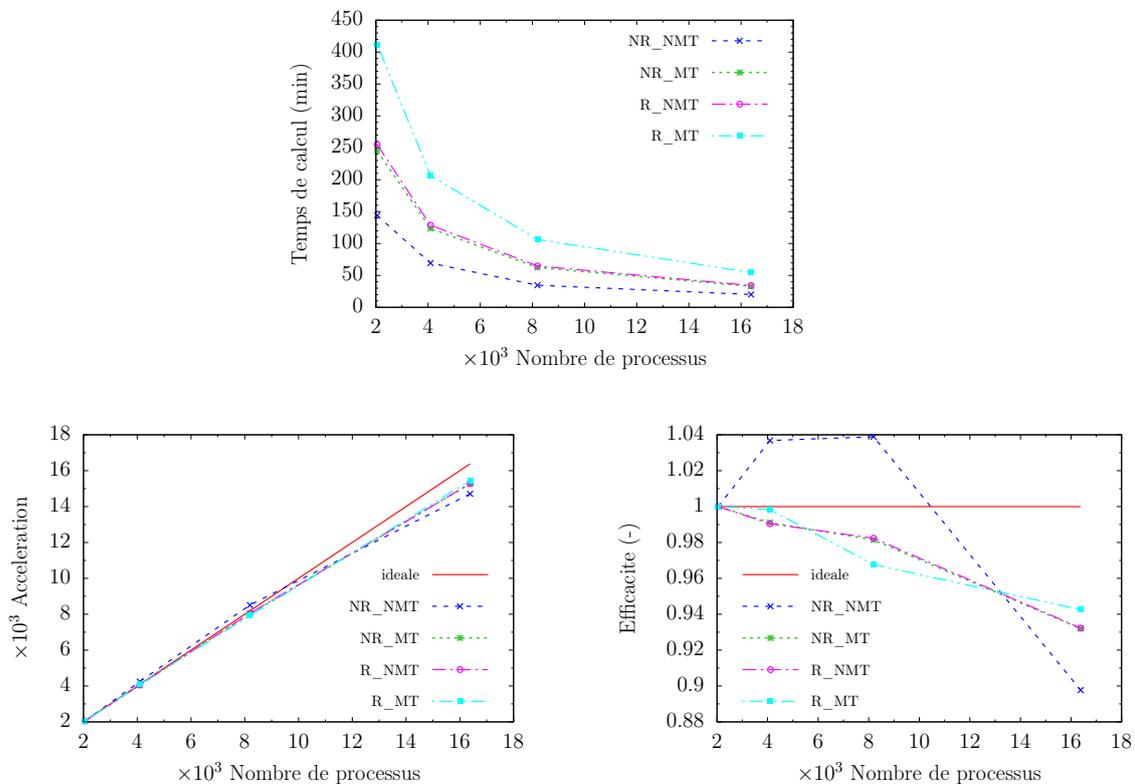
**FIG. 3.11** – Zones de déclenchement de la procédure de pondération non-linéaire du schéma WENO7 (lignes blanches), pour différentes valeurs seuils  $\sigma_{\text{seuil}}$  du senseur de choc (Mesh #4, cadre :  $[11.5, 15.5] \times [0, 2] \text{ mm}^2$ ).

et dans un cas idéal, cette dernière vaut  $n$ . On introduit ensuite l'efficacité (3.91) qui correspond au rapport entre l'accélération et le nombre de processus (ou accélération maximale) et peut être assimilée à un rendement de la parallélisation.

$$\text{Efficacité}(n) = \frac{\text{Speedup}(n)}{n} \quad (3.91)$$

Il est en pratique difficile de réaliser un calcul sur une configuration complexe avec 1 seul processus car la durée du calcul serait trop importante, c'est pourquoi, on prendra un nombre de processus de référence  $n^0$  et on supposera que  $t_{\text{calcul}}(n = 1) \equiv t_{\text{calcul}}(n^0) \times n^0$ .

L'étude a été effectuée sur la configuration 3D du JISCF (*Jet In Supersonic Cross-Flow*) déjà établie aérodynamiquement (cf. § 5.4) et où la combustion s'est très largement propagée dans le milieu (cf. § 7.2). Les différents calculs sont réalisés pour effectuer 200 itérations supplémentaires à CFL = 1.2, afin d'obtenir un calcul d'une durée physique de 0.6  $\mu$ s. Par ailleurs, pour l'étude, aucune écriture de fichier résultat n'est réalisée afin de le rendre indépendant de la vitesse d'écriture sur les disques durs. Ces tests ont été réalisés sur le supercalculateur Turing de l'IDRIS [97] qui est une machine de type IBM Blue Gene/Q possédant 6 144 nœuds, soit 98 304 cœurs de calcul (avec 16 cœurs/nœud et jusqu'à 4 *threads*/cœur, où 1 *thread hardware* peut être 1 processus MPI, soit 393 216 *threads*). La machine peut atteindre une puissance crête cumulée de 1.258 PFlops/s et possède une mémoire totale de 96 To. Une des particularités de la machine est de pouvoir réaliser des calculs en *multi-threading*, c'est à dire en mettant plusieurs processus MPI (4 max) par cœur de calcul, ainsi il est possible d'utiliser plus de ressources par cœur de calcul. Pour les tests réalisés, par défaut, 1 *thread*/cœur est utilisé, on dira qu'on est en mode NMT (*Non Multi-Threading*); sinon 4 *threads*/cœur sont utilisés, soit 64 *threads*/nœud, on dira alors qu'on est en mode MT (*Multi-Threading*).



**FIG. 3.12** – Étude de scalabilité : temps de calcul, accélération et efficacité en fonction du nombre de processus {2048, 4096, 8192, 16384} et comparaison avec les droites idéales. Légende : (N)R = (Non) Réactif; (N)MT = (Non) *Multi-Threading*.

La Fig. 3.12 résume les résultats de cette étude en traçant le temps global de calcul, l'accélération et l'efficacité en fonction du nombre de processus MPI, avec un nombre de processus de référence  $n^0 = 2048$ . L'accélération montre un comportement quasi idéal (évolution linéaire) pour les calculs inertes/réactif et avec/sans *multi-threading*. Cependant, l'efficacité décroît pour les cas R\_NMT, R\_MT ainsi que le cas NR\_MT. Il est par ailleurs étonnant que le calcul NR\_NMT présente une efficacité supérieure à 100 % par rapport au calcul de référence à 2048 processus, mais cette dernière chute de façon importante à partir de 8192 processus. Néanmoins, l'efficacité reste proche ou supérieure à 90 %. Enfin, les courbes de temps de calcul permettent aussi d'estimer un rapport moyen de  $1.67 \pm 0.08$  entre les temps de calcul faisant du *multi-threading* par rapport à ceux qui n'en font pas et un rapport moyen de  $1.74 \pm 0.08$  entre les temps de calcul réactif par rapport aux calculs inertes. Une efficacité (resp. accélération) supérieure à l'unité (resp. à la courbe idéale), est possible lorsqu'à partir d'un certain nombre de processus, le calcul parallèle traite des données qui tiennent dans les caches des CPUs, d'où une sur-accélération car le temps d'écriture dans la mémoire cache est plus rapide.

## Récapitulatif

Ce chapitre a présenté le formalisme général de la simulation aux grandes échelles ainsi que différentes formulations explicites des termes de sous-maille, pour l'écoulement, qui ont été implémentées dans le code de calcul *CREAMS*. Ce dernier a aussi été brièvement décrit avec ses méthodes numériques permettant de calculer les équations de Navier–Stokes filtrées. Il reste maintenant à expliciter, *i.e.* fermer, le terme source chimique filtré  $\tilde{\omega}_\alpha$ , ceci fera l'objet du chapitre suivant avec consacré à la modélisation de la combustion turbulente.

## Chapitre 4

# Structures de flammes et leur représentation

### Sommaire

---

<b>4.1 Flamme laminaire prémélangée</b>	<b>56</b>
<b>4.2 Flamme laminaire de diffusion</b>	<b>57</b>
4.2.1 Scalaire passif et fraction de mélange	57
4.2.1.1 Expression algébrique	58
4.2.1.2 Équation de transport des scalaires passifs	59
4.2.2 Structure d'une flamme de diffusion	59
4.2.3 Modélisation d'une flamme de diffusion laminaire	60
4.2.3.1 Modèle de mélange pur des gaz frais	60
4.2.3.2 Modèle asymptotique de Burke–Schumann	61
<b>4.3 Introduction à la combustion turbulente et sa modélisation</b>	<b>61</b>
<b>4.4 Modèle PSR / quasi-laminaire / Arrhenius / ILES / "No model"</b>	<b>62</b>
<b>4.5 Développement en série de Taylor du terme source chimique</b>	<b>63</b>
<b>4.6 Modèle Intermittent Lagrangien</b>	<b>64</b>
<b>4.7 Régimes et diagrammes de combustion turbulente</b>	<b>66</b>
4.7.1 Cas des flammes turbulentes prémélangées	66
4.7.2 Coordonnées basées sur les nombres de Damköhler et de Reynolds	67

---

Ce chapitre sera consacré à quelques rappels fondamentaux concernant les structures de flamme et leurs principales caractéristiques. Une introduction à la modélisation de leurs interactions avec les écoulements turbulents est ensuite présentée ainsi que quelques modèles de combustion. Puis nous terminerons par la description des régimes d'interaction combustion–turbulence. Pour une présentation plus exhaustive, le lecteur est invité à se référer aux ouvrages spécialisés de référence, tels que ceux de BORGHİ et CHAMPION [24], PETERS [155], POINSOT et VEYNANTE [165] et WILLIAMS [213].

Les flammes sont la manifestation visible des réactions chimiques d'oxydo-réduction, généralement exothermiques. Elles sont relativement complexes à étudier car, comme nous l'avons vu § 2, elles présentent un fort couplage entre les mécanismes de (i) transport de masse et d'énergie ainsi que des (ii) réactions chimiques. C'est pourquoi, il est usuel de les classer et d'étudier des flammes modèles telles que la flamme de prémélange et celle de diffusion schématisées Fig. 4.1. Comprendre la structure des flammes et leurs régimes de combustion dans un écoulement donné, permet d'aider et d'orienter les stratégies de modélisation parmi la multitude de modèles de combustion turbulente disponibles dans la littérature.

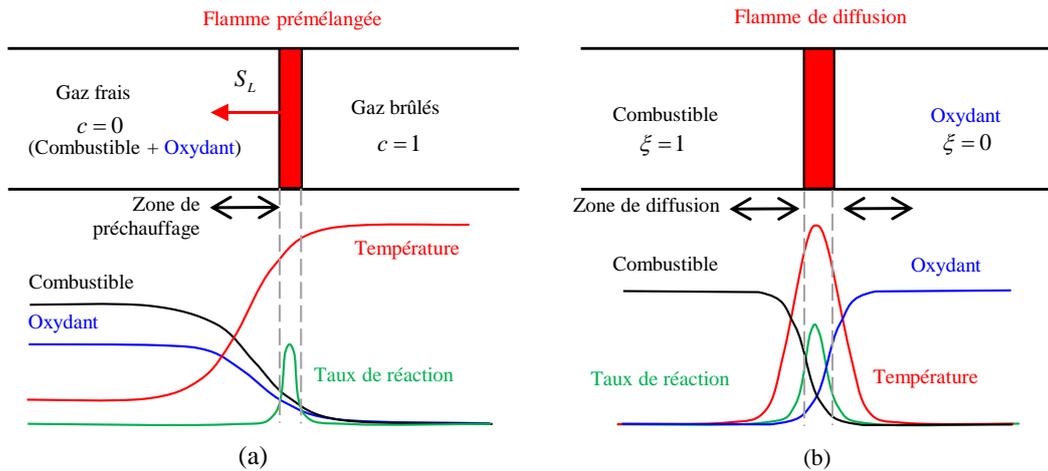


FIG. 4.1 – Schéma d'une structure de flamme plane monodimensionnelle laminaire (a) de prémélange et (b) de diffusion.

Nous nous intéresserons plus particulièrement aux cas des flammes de diffusion ainsi qu'aux modèles de type réacteur chimique, qui nous concerneront un peu plus dans la suite de notre étude consacrée à la combustion supersonique dans des conditions représentatives des moteurs aérobies de type *scramjets*. Cependant, comme nous le verrons par la suite, la configuration étudiée est relativement complexe et présente en réalité des modes de combustion variés (combustion partiellement prémélangée) qui seront étudiés en détail. C'est la raison pour laquelle les régimes de combustion prémélangée et non-prémélangée seront présentés via l'emploi de diagramme de combustion turbulente.

#### 4.1 Flamme laminaire prémélangée

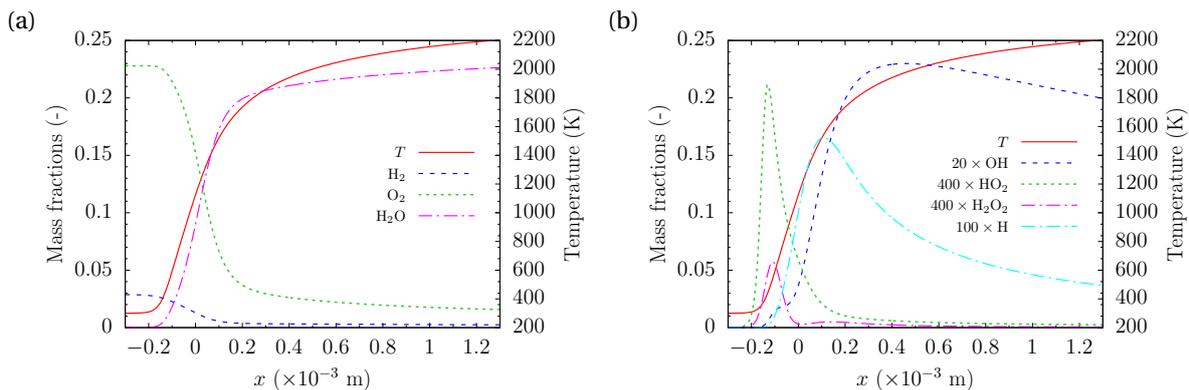


FIG. 4.2 – Flamme laminaire prémélangée 1D non-étirée d'un mélange  $\text{H}_2/\text{O}_2$  à  $\Phi = 1$ ,  $P = 1$  atm,  $T^u = 300$  K avec le mécanisme cinétique détaillée de Ô CONAIRE *et al.* [221] :  $S_L^0 = 2.36$  m/s et  $\delta_L^0 = 0.38$  mm.

La *flamme de prémélange* est caractérisée par des gaz frais, combustible  $F$  et oxydant  $O$ , initialement mélangés, et le front de flamme *se propage* vers les gaz frais. Elle comprend plusieurs zones qui peuvent être identifiées sur la Fig. 4.2 : (i) une zone de préchauffage, où l'on retrouve les radicaux, comme  $\text{HO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$ , formés par dissociation-recombinaison de  $\text{H}_2$  et  $\text{O}_2$  ; (ii) une zone de réaction, où l'on trouve une quantité importante du radical  $\text{OH}$  puis (iii) une zone où s'accumule les gaz brûlés, composés essentiellement des produits majoritaires de combustion,  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{CO}_2$  généra-

lement. Ces zones permettent de définir des échelles spatiales caractéristiques telles que l'*épaisseur de flamme* pour laquelle il existe différentes définitions. Parmi elles, il est usuel d'utiliser, dans le cas des flammes 1D non-étirées, l'épaisseur thermique  $\delta_L^0$ , défini par

$$\delta_L^0 = \frac{T^b - T^u}{\max \left| \frac{\partial T}{\partial x} \right|} \quad (4.1)$$

avec

- l'exposant « 0 » indique l'état non-étiré de la flamme ;
- les exposants (u, b) indiquent l'état des gaz frais et l'état des gaz brûlés.

À partir de ces différents états, il est aussi usuel d'introduire une grandeur permettant de suivre l'évolution de la réaction, son avancement. On définit ainsi sa variable de progrès (ou d'avancement)  $c$  qui peut se calculer par

$$c = \frac{T - T^u}{T^b - T^u} = \begin{cases} 0 & \text{gaz frais,} \\ 1 & \text{gaz brûlés} \end{cases} \quad (4.2)$$

pour laquelle il existe encore une multitude de définition, comme celle basée sur les fractions massiques des espèces entre l'état des gaz frais, gaz brûlés ou l'état d'équilibre chimique. Enfin, la vitesse de la flamme laminaire  $S_L^0$  est défini par

$$S_L^0 = \frac{-1}{\rho^u Y_F^u} \int_{\mathbb{R}} \rho_F \dot{\omega}_F dx \quad (4.3)$$

Les flammes laminaires sont retenues comme éléments constitutifs de référence, comme « brique élémentaire », dans un certain nombre de modèles de combustion turbulente prémélangée où l'on va représenter la flamme turbulente par un ensemble de flammelettes laminaires plissées et étirées sous les effets de la turbulence. Le problème d'interaction chimie/turbulence est alors découplé et l'on parlera de *régime de flammelette*.

## 4.2 Flamme laminaire de diffusion

La *flamme de diffusion* (ou *non-prémélangée*) est caractérisée par des gaz réactifs frais qui sont initialement séparés, puis se mélangent par convection–diffusion pour enfin brûler. Ce type de flamme *n'est pas propagative*, elle est essentiellement pilotée par le phénomène de diffusion à l'échelle moléculaire, entre l'oxydant ( $\xi = 0$ ) et le combustible ( $\xi = 1$ ), mais aussi, par l'intensité du mélange qui sera essentiellement fixée par l'aérodynamique de l'écoulement ce qui induit une certaine dépendance à la géométrie de la chambre de combustion. Enfin, la flamme de diffusion *ne possède pas une épaisseur caractéristique propre*.

### 4.2.1 Scalaire passif et fraction de mélange

Un *scalaire passif*, noté  $Z$ , contrairement à un scalaire réactif — tel que la variable d'avancement  $c$  pour les flammes prémélangées — est une grandeur qui est uniquement convectée et diffusée par l'écoulement ; on parle de *variable de composition / mélange*. Entre autre, elle ne modifie pas l'écoulement, contrairement à la fraction massique des espèces  $Y_\alpha$ , qui via leurs masses molaires, coefficients de diffusion moléculaire, vont modifier les propriétés du fluide et donc de l'écoulement. Enfin, ce scalaire est conservé lors de la réaction chimique. Ce type de grandeur est communément utilisé pour étudier le phénomène de mélange (*e.g.* combustible / oxydant) de façon générale et plus particulièrement pour des applications de combustion non-prémélangée et leurs modélisations. Les molécules composant les gaz réactifs doivent effectivement se rencontrer avant de pouvoir réagir, d'où l'importance de ce qu'on désignera par le *mélange scalaire*.

Il existe différentes manières de définir un scalaire passif. Elles reposent soit sur une expression algébrique (en supposant un schéma cinétique global ou un schéma détaillé), soit sur une équation de transport. Dans les deux cas, ces dernières peuvent se normaliser pour former la *fraction de mélange*  $\xi$ , qui reste un scalaire passif, dont la particularité est d'être bornée entre 0 dans le courant oxydant et 1 dans le courant combustible.

#### 4.2.1.1 Expression algébrique

**Description simplifiée – Hypothèses** La description théorique et simplifiée de l'archétype de la flamme de diffusion suppose :

- *une réaction globale irréversible* (2.23) ;
- *une pression thermodynamique constante et un nombre de Mach faible* ;
- *que tous les coefficients de diffusion sont identiques pour toutes les espèces, i.e.  $D_{\alpha m} = D(\rho, T), \forall \alpha$* , et suppose donc une vitesse de correction nulle  $V_{ci} = 0$  dans le flux de masse  $J_{\alpha, i}$  (2.61) ;
- *que les gaz sont calorifiquement parfaits*.

Certaines de ces hypothèses reviennent aussi à supposer *un nombre de Lewis unitaire*. Il est possible de définir le scalaire passif suivant <sup>1</sup>

$$Z = r_{st} Y_F - Y_O \quad (4.4)$$

aussi appelé variable de Schwab–Zel'dovich, qui peut être normalisé pour obtenir la fraction de mélange locale  $\xi$  suivante

$$\xi = \frac{Z - Z_O^{ox}}{Z_F^{fuel} - Z_O^{ox}} = \frac{r_{st} Y_F - Y_O + Y_O^{ox}}{r_{st} Y_F^{fuel} + Y_O^{ox}} \quad (4.5)$$

$$= \frac{1}{1 + \phi} \left( \phi \frac{Y_F}{Y_F^{fuel}} - \frac{Y_O}{Y_O^{ox}} + 1 \right) \quad (4.6)$$

avec  $\phi$ , le rapport d'équivalence (2.48). Ainsi, à la stœchiométrie ( $Y_\alpha = Y_{\alpha|st}$ ), la fraction de mélange (4.6) stœchiométrique est

$$\xi_{st} = \frac{1}{1 + \phi} \quad (4.7)$$

De plus, si *la chimie est infiniment rapide*, alors la flamme se situera précisément sur l'iso-valeur  $\xi_{st}$  [15, 153].

Dans le cas où *le courant combustible et l'oxydant sont séparés* et ont un débit massique respectif  $\dot{m}^{fuel}$  et  $\dot{m}^{ox}$ , alors la fraction de mélange peut aussi se définir par

$$\xi = \frac{\dot{m}^{fuel}}{\dot{m}^{fuel} + \dot{m}^{ox}} \quad (4.8)$$

Ce qui permet de relier la fraction de mélange, sa valeur à la stœchiométrie (4.7) et la richesse locale du mélange  $\Phi$  (2.49) par

$$\Phi = \phi \frac{\xi}{1 - \xi} = \frac{1 - \xi_{st}}{\xi_{st}} \frac{\xi}{1 - \xi} \quad (4.9)$$

**Description détaillée** Pour un *mécanisme réactionnel détaillé*, les relations (4.4)–(4.6) doivent être généralisées. Il est possible, selon PIERCE et MOIN [157], SUTHERLAND *et al.* [189], de reconstruire un scalaire passif en utilisant la conservation des masses atomiques via les fractions massiques. Ainsi pour un mélange gazeux contenant  $N_a$  atomes différents (en général :  $N_a = 4$  pour les atomes C, H, O et N) et  $N$  molécules, la fraction massique élémentaire de l'atome  $\beta$  est

$$Z_\beta = W_\beta \sum_{\alpha=1, N} \frac{n_{\alpha\beta} Y_\alpha}{W_\alpha}, \quad \forall \beta \in \llbracket 1, N_a \rrbracket \quad (4.10)$$

1. On retrouve parfois aussi la forme suivante :  $Z = Y_F - Y_O / r_{st}$

avec  $n_{\alpha\beta}$ , le nombre d'atome  $\beta$  dans la molécule  $\alpha$  tel que  $\sum_{\alpha=1}^N n_{\alpha\beta} \nu_{\alpha i} = 0, \forall i \in \llbracket 1, N_r \rrbracket$ . En le normalisant par (4.5) pour un ou plusieurs atomes, on obtient des fractions de mélange par atome identique, *i.e.*  $\xi_\alpha = \xi_\beta$  avec  $\alpha \neq \beta$ . Enfin, en normalisant (4.10) avec les  $N_a$  atomes, on obtient une 3<sup>e</sup> formulation de la fraction de mélange qui s'écrit

$$\xi = \frac{\sum_{\beta=1}^{N_a} |Z_\beta - Z_\beta^{\text{ox}}|}{\sum_{\beta=1}^{N_a} |Z_\beta^{\text{fuel}} - Z_\beta^{\text{ox}}|} \quad (4.11)$$

Tout comme le scalaire passif  $Z_\beta$  (4.10), les fractions de mélange  $\xi_\alpha$  et  $\xi$  (4.11) tiennent compte des effets de diffusion différentielle (ou de Lewis), contrairement à la description simplifiée précédente.

#### 4.2.1.2 Équation de transport des scalaires passifs

Enfin, l'équation de transport d'un scalaire passif  $Z$  et donc celle d'une fraction de mélange  $\xi$ , a la particularité de ne comporter aucun terme source et cela quelle que soit la description adoptée (simplifiée ou détaillée). Ces scalaires suivent une équation de la forme suivante

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \xi u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_{\xi,i}}{\partial x_i}, \quad \forall i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket \quad (4.12)$$

avec  $J_{\xi,i}$ , le flux de masse surfacique du scalaire  $\xi$  dans la  $i^e$  direction. Son expression est plus ou moins complexe selon que l'on retient (i) l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire ou non, dans le cadre d'une description simplifiée du transport moléculaire (§ 2.5), [163], ou bien (ii) une description détaillée de ce dernier (§ 2.4).

### 4.2.2 Structure d'une flamme de diffusion

L'introduction d'un tel scalaire passif permet de faire *l'hypothèse de flammelette* qui consiste à considérer que la structure de la flamme de diffusion est fonction de la fraction de mélange ainsi que du temps. Ce qui revient à voir la structure de la flamme, comme étant localement 1D (ou faiblement courbée), de normale  $\vec{n} = \vec{\nabla} \xi / \|\vec{\nabla} \xi\|$  et dépendante du temps, ce qui permet d'écrire la dépendance suivante des variables thermo-chimique  $\varphi$

$$\varphi = \varphi(\xi(\vec{x}, t), t), \quad \text{avec } \varphi \in \{\rho, T, Y\} \quad (4.13)$$

En utilisant cette relation dans l'équation d'espèce (2.54) et en utilisant l'hypothèse de *stationnarité*, on peut en déduire le taux de réaction des espèces par [15]

$$\dot{\omega}_\alpha = -\chi_\xi \frac{d^2 Y_\alpha(\xi)}{d\xi^2} \quad (4.14)$$

avec  $\chi_\xi$  le taux de dissipation scalaire défini par<sup>2</sup>

$$\chi_\xi = D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \quad (4.15)$$

On découple ainsi le problème en (i) un problème de mélange, où il est nécessaire de résoudre le champ scalaire via l'équation du scalaire passif (4.12) et (ii) un problème de flamme, où l'on doit définir et résoudre sa structure dans l'espace de la fraction de mélange  $\xi$ , *i.e.* sa courbure  $d^2 Y_\alpha(\xi) / d\xi^2$ .

2. Dans la littérature, il arrive parfois qu'un facteur 2 soit présent dans la définition du taux de dissipation scalaire.

### 4.2.3 Modélisation d'une flamme de diffusion laminaire

En supposant *un modèle de flammelette stationnaire*, il est possible de fournir directement des solutions analytiques à la structure de flamme, en particulier dans le cas où les relations (4.14) sont nulles

$$\dot{\omega}_\alpha = 0 \iff \begin{cases} \frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} = 0 & (4.16a) \\ \text{ou} \\ \chi_\xi = 0 & (4.16b) \end{cases}$$

Il en découle différents résultats qui dépendent des hypothèses considérées de chimie infiniment rapide / chimie finie, réaction irréversible / réversible, ces résultats sont synthétisés de façon succincte Tab. 4.1.

	Chimie infiniment rapide (équilibre) $\implies \dot{\omega}_\alpha = 0$	Chimie finie (non équilibre) $\implies \dot{\omega}_\alpha \neq 0$
Réaction irréversible	$F$ et $O$ ne peuvent pas co-exister (indépendant de $\chi_\xi$ , mais $\frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} = 0$ ) § 4.2.3.2	$F$ et $O$ peuvent co-exister (dépendant de $\chi_\xi$ )
Réaction réversible	$F$ , $O$ et $P$ sont à l'équilibre ( $\chi_\xi = 0$ )	Pas de modèle simple
Mélange pur (inerte)	$F$ et $O$ se mélangent sans réagir ( $\frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} = 0$ ) § 4.2.3.1	(Non applicable)

**TAB. 4.1** – Principales implications des hypothèses de chimie à l'équilibre (ou infiniment rapide) / chimie finie et de réversibilité de la réaction, d'après [165].

#### 4.2.3.1 Modèle de mélange pur des gaz frais

Lorsque la réaction n'a pas encore lieu, il est possible de considérer que la chimie est infiniment lente par rapport aux processus d'écoulement ( $Da \rightarrow 0$ ) qui vont mélanger les réactifs. La loi d'évolution est donnée par (4.16a) et conduit, après intégration, aux équations suivantes qui permettent de décrire le mélange pur [155, 165]

$$Y_F^u(\xi) = \xi Y_F^{\text{fuel}} \quad \text{et} \quad Y_O^u(\xi) = (1 - \xi) Y_O^{\text{ox}} \quad (4.17)$$

Il est primordial de rappeler que ces solutions ne sont valides que sous les hypothèses énoncées au § 4.2.1. En particulier, on peut montrer que des écarts importants peuvent être observés à la loi de mélange des espèces (4.17), si les effets de Lewis sont importants (nombre de Lewis non unitaire). Outre les effets de capacités calorifiques, on notera que l'utilisation d'une loi de mélange linéaire en température, telle que

$$T^u(\xi) = \xi T_F^{\text{fuel}} + (1 - \xi) T_O^{\text{ox}} \quad (4.18)$$

devient inappropriée lorsque les effets de compressibilité deviennent importants, notamment lorsque l'écoulement présente des chocs / détente / parois et si la différence de température entre les 2 courants est importante. Elle peut éventuellement être étendue à la considération de l'enthalpie totale, sous certaines hypothèse décrites par exemple par IZARD [100], à partir des travaux de BRAY *et al.* [31], LUO et BRAY [125].

### 4.2.3.2 Modèle asymptotique de Burke–Schumann

Le modèle de BURKE et SCHUMANN [35] représente la limite asymptotique pour laquelle la chimie est infiniment plus rapide que la mise en présence des réactifs ( $Da \rightarrow \infty$ ) et par conséquent, l'oxydant et le combustible ne peuvent coexister. La flamme (zone de réaction) est alors infiniment mince, accrochée à l'injecteur et est localisée de ce fait, sur l'iso-surface de fraction de mélange stœchiométrique  $\xi = \xi_{st}$ . Du fait de la relation (4.16a), de part et autre de la fraction de mélange stœchiométrique  $\xi_{st}$ , les évolutions de la température et des fractions massiques des espèces sont linéaires en fonction de la fraction de mélange. Ce modèle, limité, ne tient évidemment pas compte des effets de chimie finie tels que la dissociation pouvant se produire à haute température.

Enfin, dans tous les autres cas, il faut résoudre la structure de flamme, le comportement dans l'espace des compositions est compris entre les droites de mélange pur et l'approximation de BURKE et SCHUMANN. Cette structure dépendra fortement du taux de dissipation scalaire  $\chi_\xi$  [153].

## 4.3 Introduction à la combustion turbulente et sa modélisation

D'un point de vue physique, la combustion turbulente introduit la notion d'interaction chimie / turbulence (TCI, *Turbulent Chemistry Interaction*). Cette dernière est relativement complexe à analyser car elle fait intervenir une multiplicité d'échelles ainsi que de nombreux concepts et mécanismes qui sont d'une part, ceux de l'écoulement (turbulent) et d'autre part, ceux de la chimie. Afin de mieux comprendre ces interactions, les nombres adimensionnés de Damköhler ( $Da$ ) et de Karlovitz ( $Ka$ ) sont utilisés. Ces derniers sont définis par

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{\text{un temps caractéristique de la turbulence}}{\text{un temps caractéristique chimique}} \quad (4.19)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\text{un temps caractéristique chimique}}{\text{l'échelle temporelle de Kolmogorov}} \quad (4.20)$$

et permettent ainsi de quantifier les interactions entre la chimie et l'écoulement turbulent par le biais des échelles caractéristiques, notamment de temps caractéristiques. La comparaison des échelles de longueur est en revanche plus délicate car la notion de longueur caractéristique de la chimie ou épaisseur de flamme n'est valable que pour les flammes de prémélange.

Par ailleurs, tout comme le nombre de Reynolds (3.70), les nombres de Damköhler et de Karlovitz ne sont pas uniques, ils peuvent être définis sur une multitude d'échelle et mécanismes physico-chimiques. En effet, (i) les temps caractéristiques retenus pour la turbulence peuvent être associés au temps de retournement des grandes ou des petites structures turbulentes et (ii) le temps caractéristique chimique peut être lié au phénomène de production / destruction d'une espèce, de propagation d'une flamme de prémélange, d'auto-allumage, etc.

Du point de vue numérique, la problématique générale de la combustion turbulente est d'estimer le taux de production / destruction  $\dot{\omega}_\alpha$  de l'espèce  $\alpha$  (2.45) (cf. § 2.2 « Modélisation de la chimie ») lorsque la résolution spatio-temporelle du calcul n'est pas suffisante, *i.e.* lorsque le calcul réalisé n'est pas une DNS permettant de résoudre l'intégralité des mécanismes spatio-temporels de la turbulence et de la chimie. C'est pourquoi, du point de vue numérique, le problème principal est la modélisation du taux de réaction de chacune des espèces  $\tilde{\omega}_\alpha$  dans le cadre des simulations RANS ou LES. En effet, du fait de la dépendance non linéaire en température, en pression et en composition, l'utilisation de la simplification suivante

$$\tilde{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) \approx \check{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) = \dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{\mathbf{Y}}) \quad (4.21)$$

n'est possible que lorsque les fluctuations de sous-maille du taux de production chimique sont négligeables. Physiquement, considérer l'égalité (4.21) revient à considérer qu'au sein de la maille : la

composition, la température et la richesse sont homogènes, et qu'il n'y a pas de fluctuations de ces grandeurs à l'échelle de sous-maille qui pourraient soit augmenter soit diminuer le taux de réaction. Dans le cas contraire, il est nécessaire d'utiliser un modèle de combustion turbulente<sup>3</sup> qui modélise :

- soit directement le taux de réaction filtré  $\tilde{\omega}_\alpha$  (3.28a),
- soit la partie non-résolue (sous-maille) du taux de réaction ( $\tilde{\omega}_\alpha - \check{\omega}_\alpha$ ) (3.28b).

Ces modèles de combustion sont généralement basés sur une approche phénoménologique et diffèrent souvent par les régimes de combustion qu'ils sont capables de traiter. Aucun d'eux n'est véritablement universel dans ses principes et son domaine d'application. La littérature existante en matière de modèles de combustion est exhaustive. Ces modèles peuvent tout d'abord se classer suivant 4 catégories principales :

- le type de combustion : prémélangée ou non,
- chimie rapide ou non.

De plus, il existe 3 principales approches physiques :

- *une approche géométrique* qui modélise la densité de surface de flamme, l'équation pour  $G$  ou modélise la flamme en l'épaississant, ces approches concernent plutôt les modèles de combustion prémélangée ;
- *une approche basée sur le mélange turbulent* qui contrôle les taux de réaction via le taux de dissipation scalaire, d'une variable de progrès ou de mélange, qui doit alors être modélisé. Cette approche ne peut être utilisée que si le nombre de Damköhler est suffisamment grand (modèle de flammelette) ;
- *une approche statistique* reposant sur l'utilisation de PDF / FDF transportée ou présumée, le plus souvent localement, en tout point de l'espace.

### Spécificité des écoulements supersoniques : modèle de réacteur

Peu de modèles de combustion turbulente sont développés spécifiquement pour des conditions d'écoulements à haute vitesse. Généralement, les modèles « classiques » développés en régime subsonique sont transposés et étendus aux cas supersoniques, on peut citer par exemple le modèle de flammelettes de diffusion de SABEL'NIKOV *et al.* [176]. En réalité, les modèles de combustion utilisés pour ce type de configuration sont généralement basés sur des approches de type réacteur 0D car les effets de chimie finie sont essentiels à prendre en compte dans ces conditions d'écoulements extrêmes, notamment s'ils présentent des extinctions partielles et/ou de l'auto-allumage. C'est la raison pour laquelle il est usuel d'utiliser des schémas cinétiques réduits ou plus détaillés avec des modèles du type PSR (§ 4.4), TFM, LEM, EDC [126], (U)PaSR [142, 177], MIL (§ 4.6) [21, 82, 140, 145] ou FDF [167, 168].

## 4.4 Modèle PSR / quasi-laminaire / Arrhenius / ILES / "No model"

Le modèle implicite du réacteur parfaitement mélangé (PSR, *Perfectly Stirred Reactor*) considère que lorsque la réaction a lieu dans la maille de calcul, les réactifs se sont parfaitement mélangés avant de réagir. Ainsi, en sous-maille, la composition, la pression et la température sont supposés homogènes et donc les fluctuations de sous-maille ( $\tilde{\omega}_\alpha - \check{\omega}_\alpha$ ) (3.28b) sont nulles. Dans ce cas particulier, il y a alors égalité de la relation (4.21), *i.e.*

$$\tilde{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) = \check{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) = \dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{\mathbf{Y}}) \quad (4.22)$$

L'utilisation d'un tel modèle suppose que le temps caractéristique de la turbulence est négligeable devant celui de la chimie ( $\tau_t \ll \tau_c$ , *i.e.*  $Da \ll 1$ ) et par conséquent, en résolvant les échelles turbulentes (facteur limitant), les échelles de la chimie sont elles aussi résolues. On considère que la chimie est

3. On devrait d'ailleurs parler, dans le cadre LES, de modèle de combustion de sous-maille.

laminaire ou lente — par rapport aux mécanismes de l'écoulement — et la flamme / zone réactive est épaisse, on fait de la ILES (LES implicite) ou MILES (*Monotonically Implicit Large Eddy Simulation*) pour la combustion (cf. § 3.4). Autrement dit, les taux de réaction sont obtenus directement par la loi d'Arrhenius (2.45), c'est pourquoi certains auteurs qualifient aussi cette approche de "No model" car aucun modèle de combustion turbulente<sup>4</sup> explicite n'est effectivement utilisé.

DUWIG *et al.* [59] discutent de la justification de l'utilisation d'un tel modèle. Ils expliquent que si le niveau de fluctuation filtré est faible, alors la relation (4.22) peut être utilisé en LES, ainsi qu'en RANS, et l'utilisation du formalisme ILES pour la combustion est permise. Cependant, ceci n'est pas nécessaire pour la modélisation RANS, en effet, ce dernier modélise l'intégralité de la turbulence, alors que le formalisme LES peut être vu comme un compromis entre la DNS et le RANS. Ainsi, le niveau de modélisation pour réaliser une LES est moins important car une grande partie de la turbulence est déjà résolue. La validité de la relation (4.22) dépend de nombreux critères, dont : le niveau de résolution du maillage, des pas de discrétisation temporelle et de la physique en sous-maille. Néanmoins, si le maillage est proche d'une grille DNS et que la flamme est suffisamment résolue, alors l'approximation (4.22) est considérée comme valide. C'est la raison pour laquelle de nombreux auteurs [57, 59, 69, 79, 85, 103] l'ont utilisé comme fermeture de façon équivalente à un modèle de combustion turbulente « classique ». Enfin, en introduisant un nombre de Damköhler de sous-maille basé sur (i) une échelle caractéristique de sous-maille  $\tau_{\text{sgs}} = \rho C_s^2 \Delta^2 / \mu_{\text{sgs}}$  et (ii) un temps caractéristique chimique  $\tau_c = \delta_L^0 / S_L^0$ , DUWIG *et al.* considèrent que l'utilisation d'un modèle PSR est valide si<sup>5</sup>  $\text{Da}_{\text{sgs}} = \tau_{\text{sgs}} / \tau_c \ll 1$ .

## 4.5 Développement en série de Taylor du terme source chimique

On se propose de considérer la loi d'Arrhenius (2.45) dans le cas d'une *réaction globale irréversible*. Ainsi, le taux de réaction du combustible se simplifie de la manière suivante

$$\dot{\omega}_F = -AT^b Y_F Y_O \exp(-T_a/T)$$

Étant donné que cette loi est non linéaire, évaluer sa grandeur filtrée en fonction des autres grandeurs filtrées, notamment  $\bar{\rho}$ ,  $\tilde{T}$ ,  $\tilde{Y}$ , n'est pas chose aisée. BORGHI [23] a proposé une première approche qui consiste à développer le terme filtré en série de Taylor par

$$\tilde{\omega}_F = -A\tilde{T}^b \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp\left(\frac{-T_a}{\tilde{T}}\right) (1 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \dots) \quad (4.23)$$

$$\alpha_1 = \frac{\widetilde{Y_F'' Y_O''}}{\tilde{Y}_F \tilde{Y}_O} = \frac{\widetilde{Y_F Y_O} - \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_F \tilde{Y}_O} \quad (4.24)$$

$$\alpha_2 = (P_1 + Q_1) \left( \frac{\widetilde{Y_F'' T''}}{\tilde{Y}_F \tilde{T}} + \frac{\widetilde{Y_O'' T''}}{\tilde{Y}_O \tilde{T}} \right) \quad (4.25)$$

$$\alpha_3 = (P_2 + Q_2 + P_1 Q_1) \left( \frac{\widetilde{T''^2}}{\tilde{T}^2} + \frac{\widetilde{Y_F'' T''^2}}{\tilde{Y}_F \tilde{T}^2} + \frac{\widetilde{Y_O'' T''^2}}{\tilde{Y}_O \tilde{T}^2} \right) \quad (4.26)$$

avec

$$P_n = \sum_{k=1, n} (-1)^{n-k} \frac{(n-1)!}{(n-k)! [(k-1)!]^2 k} \left(\frac{T_a}{\tilde{T}}\right)^k ; \quad Q_n = \frac{\prod_{k=1, n} (b-k)}{n!} \quad (4.27)$$

et les grandeurs  $Y_\beta''$  et  $T''$  désigneraient respectivement les fluctuations de sous-maille. Cette formulation a l'inconvénient de faire apparaître des termes de corrélations doubles, du type  $\widetilde{Y_F'' Y_O''}$  et  $\widetilde{Y_\beta'' T''^2}$ ,

4. ou plutôt de sous-maille

5. On notera toutefois qu'en retenant l'épaisseur thermique pour estimer l'épaisseur de flamme  $\delta_L^0$ , le temps caractéristique de la chimie  $\tau_c$  est certainement sur-estimé. Par conséquent, le Damköhler de sous-maille  $\text{Da}_{\text{sgs}}$  est sûrement sous-estimé, ainsi le choix de l'épaisseur thermique n'est peut-être pas le plus pertinent car il est moins restrictif.

qu'il faut fermer soit par des expressions algébriques, soit par des équations de transport. Cette formulation ne tient cependant pas compte des effets de chimie complexe (finie) c'est pourquoi d'autres modèles plus pratiques, généralement basés sur des considérations physiques, ont été développés au cours des 40 dernières années.

En revanche, le modèle reste relativement simple et peut être appliqué à des écoulements où les *temps caractéristiques chimiques ne sont pas négligeables devant celui de la turbulence (Da faible)*, c'est particulièrement le cas dans les *écoulements supersoniques* où l'expression peut se simplifier par

$$\tilde{\omega}_F = -A\tilde{T}^b \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp(-T_a/\tilde{T}) (1 + \alpha_1) \quad (4.28)$$

avec  $\alpha_1$ , le *taux de ségrégation*, qui mesure l'état du mélange entre l'oxydant et le combustible :  $\alpha_1 = 0$ , si les réactifs sont parfaitement mélangés et  $\alpha_1 = -1$ , sinon. Ainsi dans le cas où le taux de ségrégation devient faible, le modèle tend vers le modèle PSR (4.22). Cette expression est finalement assez similaire à celle formulée § 3.2,

$$(3.28b) : \quad \tilde{\omega}_\alpha = \check{\omega}_\alpha + (\tilde{\omega}_\alpha - \check{\omega}_\alpha)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \check{\omega}_\alpha = \dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}) = A\tilde{T}^b \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp(-T_a/\tilde{T}) \\ (\tilde{\omega}_\alpha - \check{\omega}_\alpha) = \alpha_1 \times \check{\omega}_\alpha \end{array} \right.$$

Ce dernier membre ( $\tilde{\omega}_\alpha - \check{\omega}_\alpha$ ) correspond donc à la contribution de sous-maille du taux de réaction et est égal au taux de réaction résolu  $\check{\omega}_\alpha$  pondéré par le taux de ségrégation  $\alpha_1$  du mélange. C'est dans cet esprit que sera développé le modèle hybride de combustion turbulente (§ 8.1 « **Modèle hybride de combustion turbulente** ») qui sera présenté à la toute fin de ce document.

## 4.6 Modèle Intermittent Lagrangien

### Dépendance des variables d'avancement et de mélange

Ce modèle a été initialement développé par BORGHINI et GONZALEZ [21]. Il suppose que la variable d'avancement de la réaction, mesurée par le biais de la fraction massique d'une espèce majoritaire telle que  $O_2$ , n'est statistiquement dépendante que de la variable de mélange. Ainsi, on peut écrire  $Y_\alpha = Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)$  qui correspond à la trajectoire Lagrangienne dans l'espace des compositions  $(Y_\alpha, \xi)$ , aussi appelée trajectoire MIL, représentée Fig. 4.3. La PDF jointe de ces deux variables  $\tilde{p}(Y_\alpha, \xi) \neq \tilde{p}(Y_\alpha)\tilde{p}(\xi)$  peut s'estimer par

$$\tilde{p}(Y_\alpha, \xi) = \tilde{p}(\xi)\tilde{p}(Y_\alpha|\xi) = \tilde{p}(\xi)\delta(Y_\alpha - Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)) \quad (4.29)$$

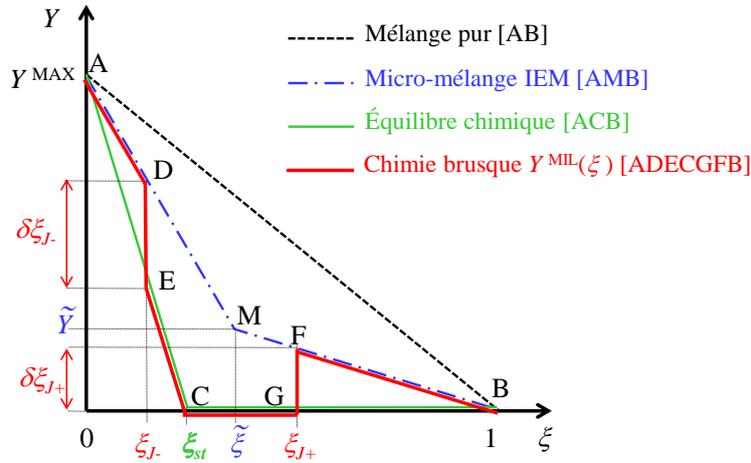
avec

- $\tilde{p}(\xi)$ , la PDF de la variable de mélange, fermée par une fonction de type  $\beta$  à partir de ses deux premiers moments ( $\tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi$ ), *i.e.* moyenne et variance de la fraction de mélange ;
- $\tilde{p}(Y_\alpha|\xi) = \delta(Y_\alpha - Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi))$ , la PDF conditionnelle de la variable d'avancement, fermée par la fonction Dirac  $\delta$  en considérant la trajectoire MIL  $Y_\alpha^{\text{MIL}}$ .

Ce modèle reporte le problème de modélisation sur la détermination de la trajectoire Lagrangienne dans l'espace des compositions  $Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)$ .

### Trajectoire lagrangienne et hypothèse de chimie brusque

La trajectoire MIL, représentée par la trajectoire de chimie brusque, Fig. 4.3, repose sur un comportement du même type que le modèle de réacteur partiellement mélangé, PaSR (*Partially Stirred Reactor*). Elle est basée sur la compétition entre les mécanismes de (i) l'écoulement : convection à



**FIG. 4.3** – Représentation d'une trajectoire MIL  $Y^{\text{MIL}}$  dans l'espace des compositions  $(Y, \xi)$  utilisant l'hypothèse de chimie brusque. Comparaison avec les trajectoires de mélange pur inerte, d'équilibre chimique (modèle de Burke–Schumann) et de micro-mélange par le modèle IEM.

grandes échelles (temps de résidence), mélange en sous-maille (micro-mélange) et (ii) celles de la chimie : flamme de diffusion avec / sans étirement, auto-allumage. De sorte que le mélange entre les 2 courants oxydant et combustible s'opère suivant les trajectoires d'interaction par échange avec la moyenne (IEM-LMSE) [53]

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau_\xi} \quad \text{et} \quad \frac{dY_\alpha}{dt} = \frac{\tilde{Y}_\alpha - Y_\alpha}{\tau_{Y_\alpha}} + \dot{\omega}_\alpha \quad (4.30)$$

puis lorsque les échelles caractéristiques entre (i) l'écoulement et (ii) la chimie sont du même ordre de grandeur, l'hypothèse de chimie brusque fait réagir brutalement le mélange entre les positions  $\xi_{J\pm}$ , appelées aussi positions de saut, pour atteindre directement les droites d'équilibre chimique (modèle de Burke–Schumann, § 4.2.3.2).

### Taux de réaction filtré MIL

En faisant l'hypothèse que les temps de mélange scalaire sont identiques, *i.e.*  $\tau_\xi = \tau_{Y_\alpha}$ , le taux de réaction instantané de l'espèce  $\alpha$  s'écrit à partir du modèle IEM (4.30) et de la dépendance de la variable d'avancement à celle de mélange  $Y_\alpha = Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)$

$$\dot{\omega}_\alpha^{\text{MIL}}(\tau_\xi, \xi) = \frac{1}{\tau_\xi} \left[ \frac{dY_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)}{d\xi} (\tilde{\xi} - \xi) - (\tilde{Y}_\alpha - Y_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)) \right] \quad (4.31)$$

On vérifie bien que, sur les trajectoires de mélange avec la valeur moyenne, le taux de réaction chimique s'annule.

Enfin, le taux de réaction chimique filtrée est estimé à partir de la FDF de la fraction de mélange et de la définition du moment d'ordre 1 (3.62)

$$\tilde{\omega}_\alpha^{\text{MIL}} = \int_0^1 \dot{\omega}_\alpha^{\text{MIL}}(\tau_\xi, \xi) \tilde{P}(\xi) d\xi \quad (4.32)$$

Ce modèle a été utilisé avec succès par IZARD *et al.* [101], MURA et IZARD [146] dans des régimes d'écoulement supersonique sur les configurations de CHENG *et al.* [46] (flamme à co-courant supersonique) et de WAIDMANN *et al.* [206] (combustion dans le sillage d'un dièdre d'injection) en modélisation RANS. Par la suite, GOMET *et al.* [82] généralisent le modèle en introduisant des équations de transport pour le taux de dissipation scalaire et pour le temps de résidence des particules fluides.

## 4.7 Régimes et diagrammes de combustion turbulente

### 4.7.1 Cas des flammes turbulentes prémélangées

Il est courant de définir 3 principales structures de flammes turbulentes prémélangées : les flammelettes plissées (*wrinkled flamelets*), les flammes plissées-épaissies (*thickened wrinkled flames*) et les flammes épaissies (*thickened flames*). Les différents régimes de combustion correspondants peuvent être représentés dans un diagramme de combustion turbulente, dont les représentations peuvent être très variées dans la littérature. Un des plus utilisés est celui introduit par BORGHI [22], BORGHI et CHAMPION [24], présenté à la Fig. 4.4. Il représente le rapport  $u_{\text{rms}}/S_L^0$  en fonction de  $L_t/\delta_L^0$  et permet ainsi de comparer les échelles caractéristiques (vitesse, longueur, temps) :

- des grandes structures turbulentes (vitesse fluctuante  $u_{\text{rms}}$ , échelle intégrale  $L_t$ ) ;
- des petites échelles dissipatives de Kolmogorov ( $L_\eta$ ,  $u_\eta$ ,  $\tau_\eta$ ) ;
- de la flamme prémélangée (vitesse laminaire  $S_L$ , épaisseur de flamme  $\delta_L$ , temps chimique  $\tau_c = \delta_L/S_L$ , ...).

Ceci permet de définir différents modes d'interaction chimie-turbulence à travers l'utilisation des nombres adimensionnés ( $Re_t$ ,  $Da$ ,  $Ka$ ). Ce diagramme est construit suivant un certain nombre d'hypothèses. L'énergie cinétique turbulente y est caractérisée par une vitesse fluctuante  $u_{\text{rms}}$  et une échelle intégrale  $L_t$ . Quant à la combustion, un seul temps caractéristique est généralement utilisé, alors que pour une réaction complexe, une multitude d'échelles de temps caractéristiques pourrait être considérée. En effet, même dans une situation prémélangée, le milieu considéré peut présenter des inhomogénéités de richesse et par conséquent des inhomogénéités de vitesse de flamme.

Les différents régimes de flamme sont ainsi délimités dans le diagramme par des iso-lignes : du nombre de Damköhler (4.19), du nombre de Karlovitz (4.20) et du nombre de Reynolds turbulent (3.71) qui, adaptés au contexte des flammes de prémélange turbulentes, s'expriment par

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{L_t/u_{\text{rms}}}{\delta_L^0/S_L^0} \quad (4.33)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \left(\frac{\delta_L^0}{L_\eta}\right)^2 = \left(\frac{\delta_L}{L_t}\right)^{1/2} \left(\frac{u_{\text{rms}}}{S_L^0}\right)^{3/2} \quad (4.34)$$

$$Re_t = Da^2 Ka^2 = \frac{u_{\text{rms}} L_t}{S_L^0 \delta_L^0} \quad (4.35)$$

où il est pré-supposé que le nombre de Reynolds de flamme est unitaire, *i.e.*

$$Re_F = \frac{S_L^0 \delta_L^0}{\nu} \approx 1 \quad (4.36)$$

Ces nombres sans dimension permettent de caractériser le couplage chimie/turbulence, en apportant une analyse via des ordres de grandeurs. Par conséquent, les graduations de ce type de diagramme ne sont données qu'à titre indicatif et les limites des différents régimes ne doivent pas être considérées comme strictes.

Les différents régimes de flamme turbulente prémélangée sont ( $Re_t > 1 \iff$  régime turbulent) :

1.  $Da > 1 \iff \tau_c < \tau_t$  : la chimie est relativement rapide.
  - (a)  $Ka < 1 \iff \tau_c < \tau_\eta < \tau_t$  : la flamme est mince et plissée par la turbulence, c'est le régime de flammelette. Les épaisseurs des zones de réaction et de préchauffage sont plus petites que l'échelle de Kolmogorov. Le transport de masse et de chaleur entre la zone réactive et la zone de préchauffage se fait par le mélange moléculaire. Les caractéristiques (vitesse de propagation et épaisseur) de la flamme sont proches de celles d'une flamme laminaire.

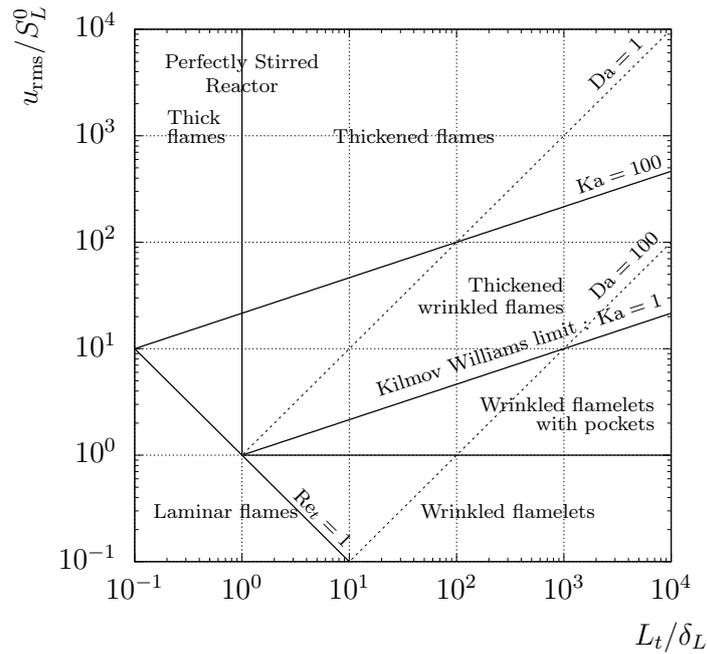


FIG. 4.4 – Diagramme de combustion turbulente prémélangée basé sur les coordonnées de BARRÈRE et BORGHİ [22, 24, 25].

- i.  $u_{rms} < S_L^0$  : les fluctuations turbulentes sont trop faibles pour interagir avec le front de flamme, elles ne font que courber le front de flamme, le régime est celui des flammes plissées. La vitesse de flamme turbulente est la même que la vitesse laminaire de combustion.
  - ii.  $u_{rms} > S_L^0$  : les fluctuations turbulentes sont plus importantes et vont plisser le front de flamme jusqu'à détacher des poches de gaz frais et de gaz brûlés, nous nous situons dans le régime de flammes plissées avec des poches.
- (b)  $Ka > 1 \iff \tau_\eta < \tau_c < \tau_t$  : les échelles de Kolmogorov sont suffisamment petites pour modifier la structure interne de la flamme, le régime devient alors un régime de flammes plissées et épaissies. La vitesse de flamme laminaire est susceptible d'être modifiée par l'étiement de la flamme ( $Ka \geq 1$ ) qui devient de plus en plus important. La flamme est épaisse ( $Ka > 100$ ) lorsque, les poches de gaz frais peuvent traverser la zone réactive sans complètement être consommées. La chimie commence à devenir lente comparée aux échelles caractéristiques de la turbulence.
2.  $Da < 1 \iff \tau_c > \tau_t (> \tau_\eta)$  et ( $Ka > 1$ ) : les temps caractéristiques de la turbulence sont tellement courts devant ceux de la chimie qu'on se retrouve dans le cas d'un régime de PSR, la flamme est épaisse et la chimie est considérée comme laminaire, lente, l'égalité (4.22) est susceptible d'être vérifiée.

#### 4.7.2 Coordonnées basées sur les nombres de Damköhler et de Reynolds

Le diagramme de combustion turbulente, basé sur les coordonnées ( $Da, Re_t$ ) tel que présenté par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3] et WILLIAMS [213], est une représentation qui pourrait se déduire du diagramme précédent (Fig. 4.4). Selon BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3], le choix de ces coordonnées semble être le plus pertinent, malgré le fait qu'en écoulement compressible, les effets du nombre de Mach devraient aussi être pris en compte, ce qui nécessiterait l'ajout d'une dimension supplémentaire dans le diagramme.

Dans ces nouvelles coordonnées (Fig. 4.5), l'utilisation des échelles de Kolmogorov (3.75) à (3.77), conduit à définir les nombres de Damköhler et de Karlovitz suivant

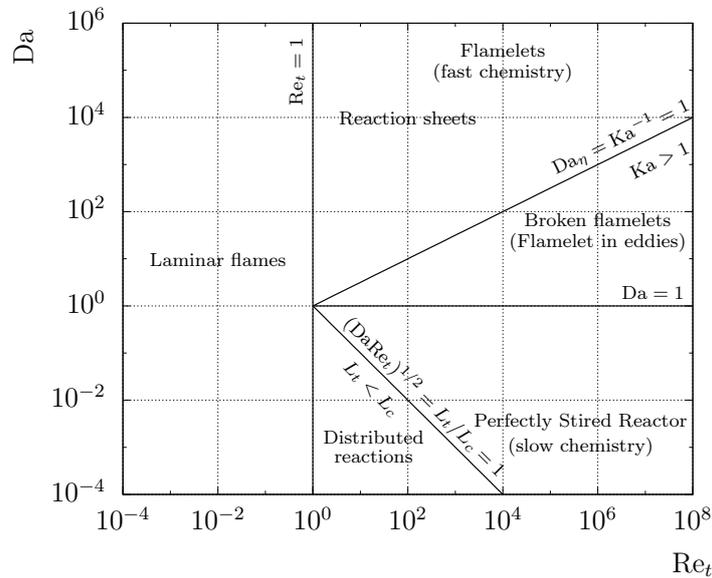
$$\text{Da}_\eta = \text{Ka}^{-1} = \text{DaRe}_t^{-1/2} \iff \text{Da} = \text{Da}_\eta \text{Re}_t^{1/2} \quad (4.37)$$

$$\text{Da}_\eta = \text{Ka}^{-1} = \frac{\tau_\eta}{\tau_c} = \left(\frac{L_\eta}{L_c}\right)^2 \quad (4.38)$$

permettant ainsi de construire l'iso-ligne  $\text{Da}_\eta = \text{Ka}^{-1} = 1$  et de relier les échelles de dissipation (longueur  $L_\eta$  et temps  $\tau_\eta$ ) de la turbulence par rapport à celles de la chimie. Enfin, en assimilant l'échelle de longueur caractéristique chimique à <sup>6</sup>  $L_c = (\nu\tau_c)^{1/2}$ , il est possible de faire apparaître le rapport entre les échelles des grandes structures (temps  $\tau_t$  et longueur  $L_t$ ) de la turbulence et celle de la chimie par

$$(\text{DaRe}_t)^{1/2} = \frac{L_t}{L_c} \iff \text{Da} = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \left(\frac{L_t}{L_c}\right)^2 \text{Re}_t^{-1} \quad (4.39)$$

permettant de construire l'iso-ligne  $(\text{DaRe}_t)^{1/2} = 1$ .



**FIG. 4.5** – Diagramme de combustion turbulente ( $\text{Da}, \text{Re}_t$ ) basé sur les coordonnées de WILLIAMS [3, 213].

Deux principales limites séparent ce diagramme de combustion turbulente, de haut en bas, on trouve :

1.  $\text{Da} > 1 \iff \tau_c < \tau_t$  : les régimes de flammelette où la chimie est infiniment rapide par rapport au mélange. Dans cette limite, un mécanisme cinétique global ou un modèle de flammelette pourraient être retenues.
  - (a)  $\text{Da} > \text{Da}_\eta \iff \text{Ka} < 1 \iff \tau_c < \tau_\eta < \tau_t$  : toutes les échelles de la turbulence sont plus grandes que celles de la chimie, le régime est dénommé *reaction sheets* qui est équivalent à celui des flammelettes plissées (*wrinkled flamelets*), pour les régimes de combustion turbulente prémélangée. Les structures turbulentes ne peuvent pas traverser la flamme et ne font que la plisser.
  - (b)  $1 \leq \text{Da} \leq \text{Da}_\eta \iff \text{Ka} > 1 \iff \tau_t > \tau_c > \tau_\eta$  : le régime est qualifié de *broken flamelets* [3] ou de flammelettes dans les tourbillons (*flamelet in eddies*) [99] et où il peut y avoir des

6. Cette formulation est similaire à l'hypothèse fournie par la relation (4.36), qui suppose un nombre de Reynolds de flamme unitaire  $\text{Re}_F = L_c u_c / \langle \nu \rangle \approx 1$ .

extinctions locales dans les structures les plus petites. Ces dernières peuvent commencer à rentrer et perturber la flamme de façon importante. Ce régime peut être équivalent à celui des flammes plissées et épaissies (*thickened wrinkled flames*) pour la combustion turbulente prémélangée.

2.  $Da < 1 \iff \tau_c > \tau_t$  (et  $Ka > 1$ ) : La chimie est lente par rapport au mélange, les effets de chimie finie deviennent importants, le modèle PSR pourrait être utilisé.
  - (a)  $Re_t^{-1} \leq Da \leq 1 \iff L_c < L_t$  (4.39) (entre les iso-lignes  $(DaRe_t)^{1/2} = 1$  et  $Da = 1$ ) : le temps caractéristique de la chimie est plus grand que celle du mélange, pourtant, son échelle de longueur est plus petite. L'interaction entre les petites structures tourbillonnaires et la flamme augmente jusqu'à la limite  $(DaRe_t)^{1/2} = 1$ , où  $L_t = L_c$ .
  - (b)  $Da \leq Re_t^{-1} \iff L_c > L_t (> L_\eta)$  (4.39) et  $\tau_c > \tau_t (> \tau_\eta)$  (en-dessous de l'iso-ligne  $(DaRe_t)^{1/2} = 1$ ) : toutes les échelles de la turbulence sont plus petites que celles de la chimie, par conséquent, si au moins les grandes échelles de la turbulence sont résolues (en espace-temps), alors toutes les échelles de la chimie le sont aussi. Le régime est dénommé *distributed reactions*, ce qui équivaut à un régime de PSR ou de flammes épaissies ou épaisses pour la combustion prémélangée.

**Remarque importante** L'emploi du diagramme reposant sur l'usage des coordonnées de BARRÈRE et BORCHI est généralement limité aux régimes de combustion prémélangée. En revanche, l'utilisation des diagrammes basée sur les coordonnées  $(Da, Re_t)$  est souvent généralisée à d'autres situations. Pour des conditions d'injection séparée du combustible et de l'oxydant, un certain nombre de propositions ont aussi été introduites dans la littérature pour élaborer des diagrammes de combustion turbulente non-prémélangée [48, 201]. Néanmoins, la principale difficulté dans l'élaboration de ces diagrammes réside dans le fait qu'il n'existe pas a priori d'échelle caractéristique de longueur permettant de décrire la structure de flamme de référence puisque celle-ci est fixée dans une large mesure par les conditions d'écoulement et par la valeur du taux de dissipation scalaire.

## Récapitulatif

Les structures de flamme et leurs principales caractéristiques ont été ici rappelées. Une brève introduction à la modélisation de leurs interactions avec les écoulements turbulents a aussi été présentée avec quelques modèles de combustion. Enfin, une description des régimes d'interaction de la combustion avec un écoulement turbulent a été fournie. Ceci afin de pouvoir caractériser en détail les régimes de combustion présents sur la configuration canonique du jet pariétal dans un écoulement supersonique. Cette dernière est présentée, dans le cas d'un écoulement inerte, dans le chapitre suivant.



## Chapitre 5

# Jet pariétal à travers un écoulement transverse supersonique : analyse générale de l'écoulement inerte

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Description générale de l'écoulement</b>	<b>72</b>
<b>5.2</b>	<b>Domaines et maillages retenus</b>	<b>74</b>
5.2.1	Maillage « Mesh 1 »	74
5.2.2	Maillage « Mesh 2 »	74
<b>5.3</b>	<b>Conditions aux limites de l'écoulement</b>	<b>76</b>
5.3.1	Jet combustible	77
5.3.2	Paroi	78
5.3.3	Écoulement transverse	78
5.3.4	Sorties	80
<b>5.4</b>	<b>Simulations aux grandes échelles inerte du JISCF</b>	<b>80</b>
5.4.1	Paramètres des simulations	80
5.4.2	Structure globale de l'écoulement	81
5.4.3	Critères de qualité et niveau de résolution	87
5.4.4	Caractéristiques de l'écoulement moyen et fluctuant	90
5.4.4.1	Champ de vitesse	90
5.4.4.2	Viscosités de sous-maille	93
5.4.4.3	Scalaire passif	95
5.4.4.4	Pression et frottement pariétal	98
5.4.5	Étude a priori du mélange et possible allumage	99
5.4.5.1	Température du mélange « frais »	99
5.4.5.2	Réactivité du mélange	102
5.4.5.3	Indice de prémélange	103
<b>5.5</b>	<b>Conclusions</b>	<b>104</b>

---

L'objectif est d'étudier ici une configuration représentative des conditions rencontrées dans les *scramjets*. Dans la présente étude, on s'intéressera au cas du jet pariétal d'hydrogène injecté dans un écoulement transverse supersonique d'air vicié, qu'on abrégera par JISCF pour *Jet In Supersonic Cross-Flow*. En terme de géométrie et de conditions d'écoulement (écoulement transverse à haute enthalpie totale), cette configuration canonique est assurément une des plus représentatives qu'il est possible de rencontrer dans les chambres de combustion des *scramjets*, contrairement à d'autres configurations plus académiques classiques telles que :

- les jets soniques d'hydrogène avec co-courant d'air vicié supersonique tels que celui étudié par CHENG *et al.* [46] (1994). Cette configuration est largement documentée dans la littérature en terme de données expérimentales ; elle est par conséquent une configuration extrêmement classique et largement reprise pour des cas de validation de modèle de combustion (*e.g.* BOIVIN *et al.* [20], MOULE *et al.* [142]) ;
- la configuration de WAIDMANN *et al.* [206] (1996) où l'hydrogène pur est injecté dans des conditions soniques à travers 15 injecteurs placés en aval d'un dièdre, lui même placé dans un écoulement d'air vicié supersonique. On notera que dans ce dispositif, les niveaux de température totale à l'injection sont plus faibles et que l'allumage spontané du mélange réactif n'est pas observé. Les données expérimentales sont moins nombreuses que dans le cas de la configuration de CHENG *et al.* [46] mais elle constitue tout même un cas de référence pour la validation de modèles (*e.g.* BERGLUND et FUREBY [12], MURA et IZARD [146]).

D'autres configurations existent néanmoins, elles sont plus ou moins récentes, et restent aussi représentatives des *scramjets*. Parmi elles, on peut mentionner :

- la configuration de BURROWS et KURKOV [36] (1971) ;
- le banc de combustion supersonique de l'Université de Virginie (GOYNE *et al.* [84], 2001) ;
- le banc SCHOLAR (CUTLER *et al.* [49], 2003) ;
- la série de projet *HyShot I-IV* (GARDNER *et al.* [73], 2005 ; SMART *et al.* [183], 2006) ;
- le banc de combustion supersonique de Georgia Tech (RETAUREAU et MENON [173], 2010).

## 5.1 Description générale de l'écoulement

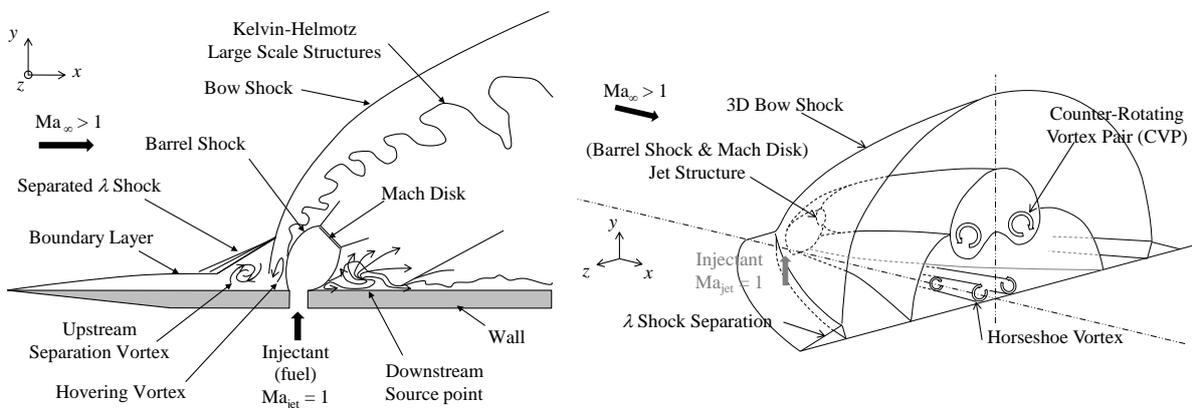


FIG. 5.1 – Vue schématique 2D et 3D de la topologie de l'écoulement d'un jet pariétal sonique sous-détendu injecté transversalement dans un écoulement supersonique, adaptée de [10, 88].

La Fig. 5.1 présente une vue schématique 2D et 3D de la topologie de l'écoulement *non-réactif* créé par un jet sonique sous-détendu débouchant transversalement dans un écoulement supersonique. Cette topologie a été largement décrite dans la littérature ; le lecteur pourra se référer, par exemple, aux travaux de [44, 89, 105–107] pour le cas inerte. En revanche, la description de l'écoulement réactif est beaucoup moins courante. Ceci peut s'expliquer en partie par le nombre de paramètres important dont va dépendre cette description (richesse, conditions de température et de pression, espèces réactives mises en jeu, etc.), ceci rend donc cette dernière difficile à réaliser de façon universelle ; on pourra néanmoins consulter les travaux détaillés dans les références [71, 98, 179].

Dans cette situation, le jet sonique se détend à travers une détente de Prandtl–Meyer aux niveaux des lèvres de l'injecteur. Puis, il est recompressé par un choc en tonneau (*barrel shock*) et un disque de Mach (*Mach disk*) dont la dynamique est fortement instationnaire. Ce jet va bloquer l'écoulement transverse principal supersonique, par conséquent, un choc courbé (*bow shock*) est créée en amont du

jet qui s'accompagne bien sûr d'une augmentation de pression qui se fait sentir à la paroi en amont de l'injection. Si l'augmentation est environ trois fois supérieure à  $p_\infty$ , ce choc tend à provoquer le décollement de la couche limite amont [54] avec une structure de choc en forme de «  $\lambda$  ». Le décollement de l'écoulement engendre la création de structures tourbillonnaires en forme de fer à cheval (*horseshoe vortex*) en aval de l'injection, tandis que des zones de recirculation sont formées en amont du jet (*upstream separation vortex, hovering vortex*). Les caractéristiques de ces dernières vont dépendre d'une part, de la nature de la couche limite (*i.e.* laminaire ou turbulente) de l'écoulement principal et d'autre part, du diamètre de l'injecteur. À titre d'exemple, l'augmentation de pression, dans la zone de décollement pour une couche limite laminaire, est plus faible, alors que la longueur de la zone de recirculation amont est environ trois fois plus grande que pour une couche limite turbulente [54]. L'écoulement principal étant bloqué par le jet, ce dernier doit le contourner dans la direction transversale (axe  $z$ , Fig. 5.1), les lignes de courants se séparent donc pour finalement se rejoindre en aval du jet ; l'impact crée alors un point source (*downstream source point*) et est à l'origine de la formation d'une paire de tourbillons contra-rotatifs (*counter-rotating vortex pair, CVP*) de faible extension se créant au niveau de la paroi. L'interaction entre le jet et l'écoulement principal va aussi créer, dans le sillage du jet, une autre paire de tourbillons contra-rotatifs, à plus grande échelle, dont les axes de rotation sont alignés avec la direction principale (axe  $x$ , Fig. 5.1) de l'écoulement. Cette dernière va interagir avec la CVP au niveau de la paroi. Sur les grands tourbillons principaux se développent des instabilités de type Kelvin-Helmholtz. Ces structures cohérentes vont fortement favoriser le mélange à grande échelle entre le jet (combustible) et l'écoulement transverse principal (oxydant) [197], elles jouent donc un rôle crucial dans les mécanismes de transport scalaire.

Nous noterons par la suite, la direction principale de l'écoulement  $x = x_1$ , tandis que la direction normale à la paroi sera  $y = x_2$  et la direction transverse (largeur) correspondra à  $z = x_3$ . De même, les composantes du vecteur vitesse ( $u_1, u_2, u_3$ ) seront notées ( $u, v, w$ ).

Introduisons dès à présent deux paramètres importants :

**Le rapport de pression (ou NPR, Nozzle Pressure Ratio)** entre la pression génératrice à l'injection  $p_{t,\text{jet}}$  et la pression statique de l'écoulement ambiant, correspondant ici à l'écoulement transverse supersonique  $p_\infty$

$$NPR = \frac{p_{t,\text{jet}}}{p_\infty} \quad (5.1)$$

ce paramètre est souvent utilisé pour caractériser les jets libres.

**Le rapport de flux de quantité de mouvement  $J$  (Momentum flux ratio)** entre le jet et l'écoulement transverse principal

$$J = \frac{(\rho \mathbf{u}^2)_{\text{jet}}}{(\rho \mathbf{u}^2)_\infty} = \frac{(\gamma p \text{Ma}^2)_{\text{jet}}}{(\gamma p \text{Ma}^2)_\infty} \quad (5.2)$$

ce deuxième paramètre est tout aussi caractéristique de l'écoulement. Il est largement utilisé dans la littérature sur la configuration de JISCF et va conditionner de nombreux comportements de l'écoulement (inerte et réactif) : par exemple, la trajectoire ou hauteur de pénétration du jet [11, 44], la structure globale de la flamme, la zone de stabilisation et les zones réactives [71]. En faisant apparaître les débits massiques des courants oxydant et combustible dans  $J$ , il est possible de le relier à la richesse globale  $\Phi$  par la relation approximative suivante

$$J = \frac{\Phi \mathbf{u}_{\text{jet}} / S_{\text{jet}}}{\phi \mathbf{u}_\infty / S_\infty} \quad (5.3)$$

où  $\phi$ , le rapport d'équivalence (2.48) ; ( $S_{\text{jet}}, S_\infty$ ), respectivement, les surfaces d'injection du combustible et de l'écoulement supersonique amont.

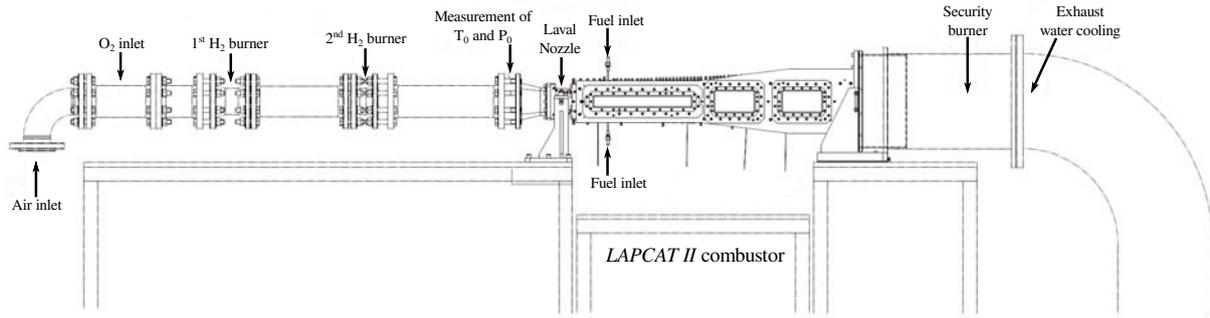


FIG. 5.2 – Schéma général du banc expérimental *LAPCAT-II*, ONERA, d'après [202].

## 5.2 Domaines et maillages retenus

Nous présentons ici les 2 domaines retenus pour les calculs réalisés dans le cadre de nos études. Ces derniers seront nommés par la suite « Mesh 1 » et « Mesh 2 ». Ce sont des géométries parallélépipédiques 3D<sup>1</sup> ; ainsi, les maillages générés seront cartésiens structurés afin de faciliter la mise en œuvre de schémas numériques de haute précision. Les dimensions retenues — par ailleurs très grandes par rapport à celles considérées dans la littérature pour des configurations similaires — sont inspirées de la géométrie de la chambre de combustion du *Dual Mode Ramjet* du *LAPCAT-II* (cf. Fig. 5.2) étudiée par VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202] à l'ONERA. Certes, peu de données expérimentales sont disponibles sur cette configuration (mesures de pression pariétale, visualisations par caméra ICCD et Schlieren) et, de manière générale, hormis les techniques de mesures plus difficiles à mettre en œuvre, les données sont parfois classifiées ce qui restreint la possibilité de comparaison plus quantitatives. Par ailleurs, (i) nous considérerons la largeur complète et une demi-hauteur de la chambre de combustion et (ii) nous ne tiendrons pas compte de l'effet de confinement, ce qui exclut la possibilité d'une confrontation rigoureuse aux données expérimentales. Cependant, (iii) nous conservons tout de même les conditions d'écoulement rencontrées dans l'expérience aussi bien en terme de composition, qu'en terme de vitesse, de température ou de pression.

### 5.2.1 Maillage « Mesh 1 »

Le 1<sup>er</sup> domaine de calcul retenu est représenté sur la Fig. 5.3, qui montre les 3 plans (YZ, XY, XZ) ainsi que le maillage « Mesh 1 » qui compte au total environ 42.5 millions de points, avec 50 points dans le diamètre d'injection  $D = 2$  mm, dont 10 dans la zone de gradient de vitesse. Ce domaine s'étend légèrement avec une zone tampon au delà de  $x/D = 50$ . Le Tab. 5.1 récapitule les caractéristiques de ce domaine ainsi que celles du maillage correspondant, avec  $\Delta x_i^+$ , les tailles de mailles adimensionnées en unités de paroi calculées a posteriori. Le facteur d'étirement (*stretching*), noté ici  $\alpha$ , est fourni afin d'indiquer le niveau de raffinement ( $\alpha < 1$ ) ou de déraffinement ( $\alpha > 1$ ) ou si le maillage est à pas constant ( $\alpha = 1$ ), la loi d'étirement est donnée, pour une direction  $x$ , par

$$x_i = x_1 + (x_{N_x} - x_1) \frac{1 - \alpha^{i-1}}{1 - \alpha^{N_x-1}}, \quad \forall \{i \in [1, N_x], \alpha \neq 1\} \quad (5.4)$$

### 5.2.2 Maillage « Mesh 2 »

Le 2<sup>e</sup> domaine de calcul retenu est représenté sur la Fig. 5.4, qui montre les 3 plans (YZ, XY, XZ) ainsi que le maillage « Mesh 2 » qui compte au total environ 85.2 millions de points, avec 30

1. Sur des configurations 2D, le blocage de la veine apparaît, l'écoulement supersonique passe alors en régime subsonique, dû à un rétrécissement du tube de courant car l'écoulement ne peut contourner le jet. Par conséquent, la veine se désamorçe et l'écoulement remonte jusqu'à l'entrée.

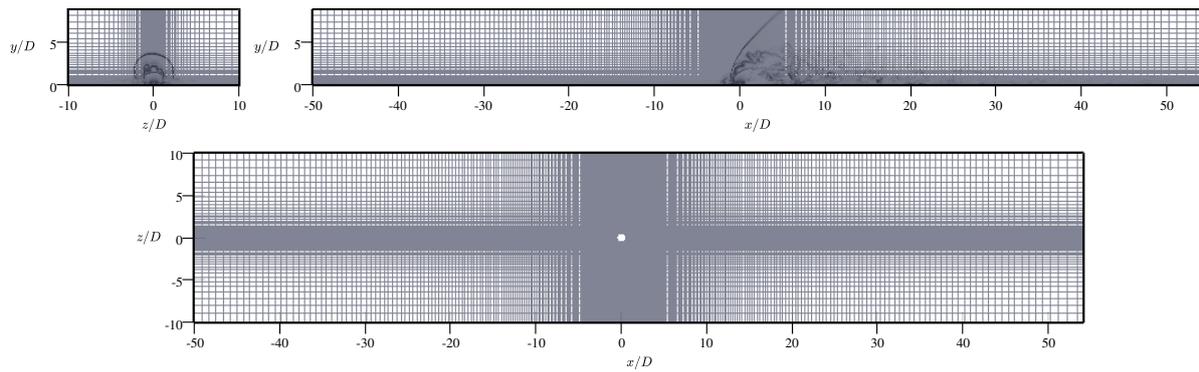


FIG. 5.3 – Représentation du domaine de calcul et du maillage « Mesh 1 ». Visualisation d'un point sur quatre.

Direction	$x_1 = x$	$x_2 = y$	$x_3 = z$
Longueur $L_{x_i}/D$	100	8.85	20
Nombre de points $N_{x_i}$	1300	124	264
Facteur de d'étirement (%)	0.2 à 0.4	1.5 à 3	2 à 3
Taille de maille $\Delta x_i/D$	0.02 à 0.2	0.02 à 0.235	0.02 à 0.28
$\Delta x_i^+$	10 à 25	2.5 à 5	2 à 5

TAB. 5.1 – Dimensions caractéristiques du domaine de calcul et du maillage « Mesh 1 ».

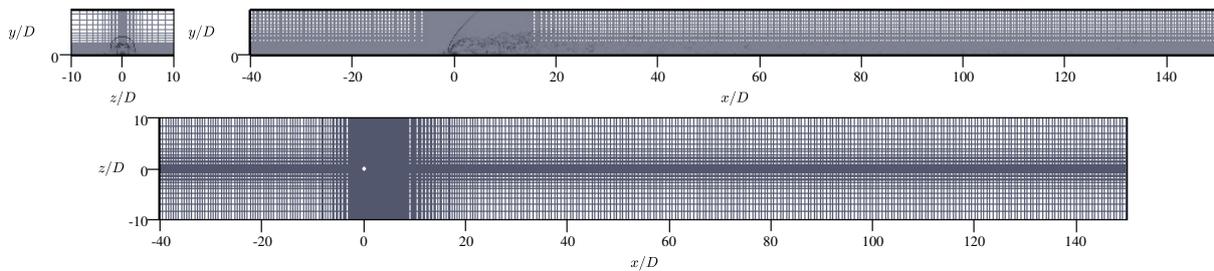


FIG. 5.4 – Représentation du domaine de calcul et du maillage « Mesh 2 ». Visualisation d'un point sur six.

Direction	$x_1 = x$	$x_2 = y$	$x_3 = z$
Longueur $L_{x_i}/D$	190	8.85	20
Nombre de points $N_{x_i}$	2253	196	193
Facteur de d'étirement (%)	0.35 à 0.55	2 à 3	1.7 à 3.15
Taille de maille $\Delta x_i/D$	0.03 à 0.1	0.003 à 0.25	0.03 à 0.3
$\Delta x_i^+$	13 à 30	0.4 à 1.2	10 à 40

TAB. 5.2 – Dimensions caractéristiques du domaine de calcul et du maillage « Mesh 2 ».

points dans le diamètre d'injection  $D$ . Le Tab. 5.2 récapitule les caractéristiques de ce domaine et du maillage.

Les dimensions du domaine ont été choisies à partir des calculs préliminaires effectués avec le « Mesh 1 », afin de tenir compte de la zone de recirculation en amont du jet ainsi que de l'augmentation de pression due au choc courbé (cf. Fig. 5.30). Parmi ces calculs préliminaires (non présentés ici), des calculs réactifs avec les mécanismes cinétiques réduits de BOIVIN *et al.* [17, 20] (3 réactions + 6 espèces) et basés sur le modèle PSR, ont montré que la réaction s'initiait relativement loin de l'injection (environ  $x/D = 30$ ) et en proche paroi, d'où la nécessité d'étendre le domaine de calcul en aval de l'injecteur et d'augmenter la résolution à la paroi. De plus, VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202] ont observé expérimentalement que le front de flamme se déplaçait entre  $x/D = 70$  et 135 pour une richesse globale de 0.138. Or, le point de fonctionnement retenu pour nos simulations est plus riche, on peut donc s'attendre, d'après la Fig. 7.20(b) qui trace le délai d'auto-allumage en fonction de la richesse globale  $\Phi$ , à ce que ce temps soit plus important et par conséquent, que le point d'allumage  $x_{\text{igni}}$  soit situé plus en aval. C'est pourquoi nous étendrons notre domaine jusqu'à  $x/D = 150$ .

Une des difficultés d'une telle configuration est la présence de paroi qui requiert soit une résolution adéquate de l'écoulement jusqu'à la paroi  $y^+ \approx 1$ , soit l'utilisation de modèle de paroi comme dans les références [14, 115] consacrées au calcul réactif des configurations *HIFiRE II* et *HyShot II*, respectivement. Cependant, d'après LESIEUR [119], les principales structures commencent à apparaître en proche paroi pour des valeurs de  $y^+$  comprises entre 5 et 40–50; ce type de maillage a été adopté sur le maillage « Mesh 1 » et par INGENITO *et al.* [98], avec un  $y^+ = 4$ , pour leur calcul réactif sur la configuration *HyShot II*. Malgré cela, nous choisirons d'adopter un maillage résolu à la paroi (*Wall-resolved LES*), en répondant ainsi aux critères de résolution préconisés dans la littérature (cf. Tab. 3.1), ainsi aucun modèle ou loi de paroi n'est utilisé pour ce maillage.

La Fig. 5.5 montre l'évolution des tailles de maille dans les 3 directions de l'espace ( $x, y, z$ ). Les axes primaires correspondent aux grandeurs dimensionnées où les coordonnées du repère  $x$  (m) coïncident avec celles du banc expérimental LAERTE [202]. Les axes secondaires correspondent aux grandeurs adimensionnées où le repère  $x/D$  est centré sur l'injection. Par la suite, les différents résultats seront présentés sur ce repère secondaire centré et adimensionné.

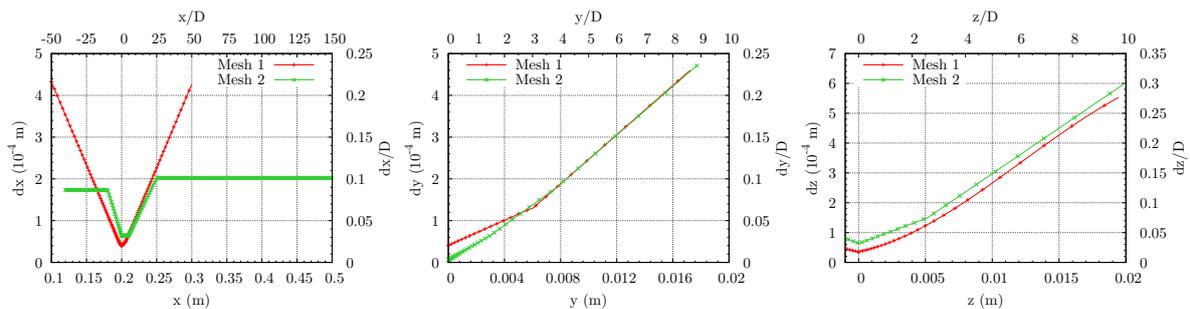


FIG. 5.5 – Évolution des tailles de maille en fonction de la position pour les maillages « Mesh 1 » et « Mesh 2 ».

### 5.3 Conditions aux limites de l'écoulement

Les principales caractéristiques des 2 courants — jet d'hydrogène (indiqué par « jet ») et écoulement transverse d'air vicié (indiqué par «  $\infty$  ») — sont rassemblées dans le Tab. 5.3. Dans ces conditions d'écoulement, le rapport de flux de quantité de mouvement est  $J = (\rho u^2)_{\text{jet}} / (\rho u^2)_{\infty} \approx 2.56$ , le rapport de pression est  $NPR = p_{t,\text{jet}} / p_{\infty} \approx 17$ , tandis que la richesse globale est  $\Phi = 2 \times 0.198 = 0.396$ . On notera que cette dernière est doublée du fait que le débit entrant  $\dot{m}_{\infty}$  a été réduit de moitié, par rapport à l'expérience de VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202], en raison de la hauteur du domaine de

calcul retenu (demi-hauteur de chambre). Par ailleurs, le  $NPR$  étant supérieur à 10, on peut s'attendre à avoir en sortie de buse un jet de combustible fortement sous-détendu.

	$p/p_t$ (Pa)	$T/T_t$ (K)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	Ma	$\gamma$	$u$ (m/s)	$\dot{m}$ (g/s)
Jet pariétal	502 918 / 958 055	248 / 300	0.490	1.0	1.42	1204	1.85
Éclt. transverse	56 000 / 409 000	1108 / 1695	0.161	2.0	1.27	1313	293.1/2

	$Y_{H_2}$	$Y_{O_2}$	$Y_{H_2O}$	$Y_{N_2}$	$\xi$
Jet pariétal	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0
Éclt. transverse	0.0	0.2527	0.1631	0.5842	0.0

**TAB. 5.3** – Conditions aux limites du jet d'hydrogène et de l'écoulement principal d'air vicié [202].

Nous détaillons par la suite les différentes conditions aux limites retenues et non nécessairement incluses dans le Tab. 5.3. Dans chacun des paragraphes présentant une condition au limite, un sous-paragraphes incluant des remarques supplémentaires et / ou justifiant du choix retenu est aussi fourni.

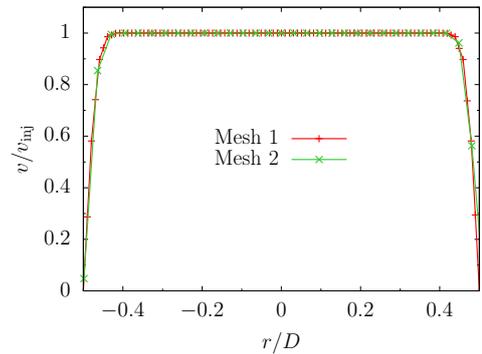
### 5.3.1 Jet combustible

L'hydrogène pur est injecté dans des conditions soniques à travers un orifice de diamètre  $D = 2$  mm, localisé en  $(x/D, z/D) = (0, 0)$ , sur la paroi inférieure ( $y/D = 0$ ). La pression d'injection est de  $p_{jet} = 502\,918$  Pa, soit une pression totale estimée à  $p_{t,jet} = 958\,055$  Pa, tandis que la température totale est de  $T_{t,jet} = 300$  K, ce qui correspond à une température statique de  $T_{jet} = 248.4$  K. La masse volumique de l'hydrogène dans ces conditions est de  $0.490$  kg/m<sup>3</sup>. Un profil de vitesse basé sur la fonction erreur (5.5) est imposé afin de modéliser la présence de la couche limite dans l'injecteur (cf. Fig. 5.6).

$$v(r, t) = \left[ v_w - (v_{jet} - v_w) \operatorname{erf} \left( \frac{r - R}{2\alpha R} \right) \right] f(t) \quad (5.5)$$

$$f(t) = 1 - \exp \left( \frac{-5t}{t_{jet}} \right) \quad (5.6)$$

avec  $(v_w, v_{jet}) = (0, 1204)$  m/s. L'indice  $w$  correspond à la valeur à la paroi.  $R$  est le rayon de l'injecteur.  $\alpha$  est un paramètre de forme suivant le gradient de vitesse, pris ici égal à 0.035. La fonction  $f$  définit l'évolution temporelle des grandeurs  $(p, T, \rho, v)$ , avec  $t_{jet} = 0.2$   $\mu$ s la durée approximative d'établissement de l'injection. Cette dernière permet d'injecter progressivement le combustible afin d'éviter l'apparition d'éventuelles instabilités numériques qu'il serait possible de rencontrer si les valeurs de consigne étaient directement appliquées. Avec ces paramètres, le débit massique du combustible injecté est de l'ordre 1.71 g/s, par rapport aux 1.85 g/s (7 % d'erreur) considéré par VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202] sur le banc LAERTE. Enfin, un scalaire passif, pouvant représenter la fraction de mélange  $\xi$ , est uniformément injecté ( $\xi = 1$ ) afin de suivre la présence du combustible dans l'écoulement. Finalement, des profils uniformes sont imposés pour tous les scalaires à l'injection et le nombre de Reynolds basé sur le diamètre d'injection est  $Re_{D,jet} \sim 150\,000$ .



**FIG. 5.6** – Profils de vitesse stationnaires et normalisés à l'injection pour les maillages « Mesh 1 » et « Mesh 2 ». Les symboles coïncident avec les points du maillage.

**Remarque** On notera que ce paramétrage ne permet pas de conserver à la fois le débit massique et le nombre de Mach à l'injection. Il aurait idéalement fallu aussi imposer un profil pour la température et éventuellement pour la pression. Cependant, ceci aurait nécessité de réaliser des calculs préliminaires coûteux<sup>2</sup>.

### 5.3.2 Paroi

La paroi, localisée en  $y/D = 0$ , à travers laquelle est injecté le combustible sera considérée comme adhérente (non glissante  $\vec{u} = \vec{0}$ ) et adiabatique ( $\partial T / \partial \vec{n} = 0$ ).

**Remarque** Notons que certains auteurs (cf. e.g. LARSSON *et al.* [115], SAGHAFIAN *et al.* [179], VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202]) considèrent, pour ce type d'écoulement, une paroi isotherme (valeurs rencontrées comprises entre  $T_w = 300, 400$  à  $900$  K) en justifiant que la durée de l'expérience ou de la simulation est très courte et donc inférieure aux échelles de temps caractéristiques des transferts thermiques. Néanmoins, il serait pertinent de remettre en question cette hypothèse dans le cadre des modélisations RANS [179, 193, 202], qui par nature considère un état stationnaire de l'écoulement et par conséquent avec un temps  $t \rightarrow \infty$ . En réalité, il n'est pas aisé d'imposer une condition de paroi représentative des conditions d'écoulement rencontrées en pratique car indépendamment de la durée de l'expérience ou de la simulation, les parois sont recouvertes de barrières thermiques en céramique ayant une rugosité non négligeable. L'effet de cette dernière devrait normalement être pris en compte. Cependant, cela demanderait l'implémentation d'un modèle de rugosité qui n'est actuellement pas disponible dans notre code de calcul.

### 5.3.3 Écoulement transverse

L'écoulement principal supersonique d'air vicié entre à  $Ma_\infty = 2$ , soit avec une vitesse d'environ  $u_\infty = 1313$  m/s. La pression totale et la température totale sont respectivement de l'ordre de  $p_{t,\infty} = 409\,000$  Pa et  $T_{t,\infty} = 1695$  K, ce qui représente des conditions statiques telles que  $p_\infty = 56\,000$  Pa et  $T_\infty = 1108$  K. L'air vicié a une masse volumique d'environ  $0.161$  kg/m<sup>3</sup> et celui-ci est constitué d'oxygène, de vapeur d'eau et d'azote avec les fractions massiques suivantes  $(Y_{O_2}, Y_{H_2O}, Y_{N_2}) = (0.2527, 0.1631, 0.5842)$  où  $N_2$  sera considéré comme un diluant non-réactif, par conséquent, aucune réaction chimique ne fera intervenir cette espèce. Plus particulièrement, des profils stationnaires à la fois de vitesse longitudinale  $\tilde{u}$  et de température  $\tilde{T}$  sont imposés à l'entrée du domaine (cf. Fig. 5.7). Ces profils sont extraits, en  $x/D = -50$  et  $-40$ , d'un calcul préliminaire RANS  $k-\omega$  (réalisé par Y. MOULE, communication personnelle) établi sur la géométrie complète du banc *LAPCAT-II*, comprenant la tuyère amont, le diffuseur, la chambre de combustion et le divergent. Il est à noter que, pour ce calcul préliminaire, l'injection n'a pas été prise en compte et que la simulation a été effectuée en supposant une paroi isotherme à  $T_w = 1100$  K. De manière à ce que ces profils d'entrée se rapprochent de la condition de paroi adiabatique retenue, une extrapolation linéaire à partir du changement de courbure du profil de température est réalisée. La hauteur de la couche limite est estimée à  $\delta_{99}/D = 1$  et  $1.1$  pour les positions respectives  $x/D = -50$  et  $-40$ . Le nombre de Reynolds par unité de longueur de l'écoulement principal est donc  $Re_\infty/L = u_\infty/\nu_\infty \approx 4.69 \times 10^6$  m<sup>-1</sup>, avec  $L$  une échelle de longueur.

**Remarque** Aucune turbulence (fluctuations instationnaires) obtenue par une quelconque méthode (*recycling-rescaling* [178, 195], perturbation pariétale [44] ou génération par un calcul de THI [219])

2. Une autre possibilité aurait pu consister à modéliser un profil de température du jet en s'inspirant de (5.5) et en prenant une température de paroi  $T_w$  correspondant à la température de recouvrement adiabatique

$$T_w = T_{\text{jet}} \left( 1 + r(\text{Pr}) \frac{\gamma - 1}{2} \text{Ma}_{\text{jet}}^2 \right)$$

avec  $r(\text{Pr})$ , le facteur de récupération fonction du nombre de Prandtl; en régime d'écoulement turbulent  $r(\text{Pr}) = \text{Pr}^{1/3}$ .

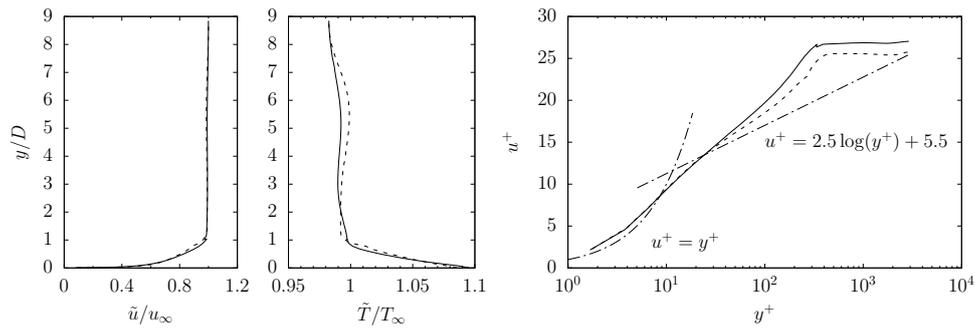


FIG. 5.7 – Profils imposés à l'entrée du domaine pour la vitesse et la température normalisées par  $(D, u_\infty, T_\infty)$  et la vitesse adimensionnée en unité de paroi  $(u^+, y^+)$ . Trait plein pour  $x/D = -50$  et trait en pointillé pour  $x/D = -40$ .

ou aucune turbulence synthétique [198] n'a été utilisée à l'entrée du domaine de calcul afin de produire une couche limite turbulente supersonique en amont du jet. Différents compromis et questionnements ont eu lieu à ce sujet car, en réalité, peu d'études sur l'influence de la nature de l'écoulement amont ont été effectuées dans la littérature sur cette configuration de JISCF en inerte et en réactif, en particulier sur un domaine de calcul aussi important. Discutons les quelques points suivants, qui concernent la pertinence de l'introduction de fluctuations dans l'écoulement amont.

- Il est possible de rencontrer, sous certaines conditions, des couches limites laminaires [210] en amont du jet, comme sur la configuration étudiée par GAMBA et MUNGAL [71], GAMBA *et al.* [72], SAGHAFIAN *et al.* [179] où les conditions d'écoulement sont très similaires aux nôtres en terme de nombre de Reynolds, à savoir  $Re_{D,\text{jet}} \approx 320\,000$  et  $Re_\infty/L \approx 3 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ . Ceci corrobore quelques calculs préliminaires, non présentés ici, où l'introduction de différentes méthodes de turbulence synthétique ont été testées (bruit blanc, filtre digital [112]) comme dans les références [115]. Les résultats ont montré une re-laminarisation rapide de l'écoulement entrant et la couche limite ne transitait pas vers un état instationnaire fluctuant. Plusieurs raisons peuvent être évoquées : (i) le profil moyen de couche limite turbulente issu du calcul RANS est intrinsèquement stable face aux différentes méthodes de perturbation utilisées ou (ii) le domaine de calcul en amont du jet n'est pas suffisamment long pour permettre la transition vers un état fluctuant.
- Une analyse de l'écoulement inerte effectuée par CHAI *et al.* [44], KAWAI et LELE [106], avec une méthode de *recycling-rescaling* pour l'un et une méthode de perturbation à la paroi pour l'autre, montre quelques différences en champ proche — études sur les champs vectoriels et scalaire, moyens et fluctuants. Ces différences sont peu notables et ces dernières semblent quasi-inexistantes en champ lointain — il convient de noter ici que ces études s'étendent seulement jusqu'à  $x/D = 4$  pour  $J = 1.7$ . Dans notre cas, VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202] ont montré dans leur expérience que la combustion a lieu en champ lointain, à partir d'une abscisse estimée à environ  $x/D = 50$ . Ceci suggère que les processus de mélange et d'auto-allumage ont lieu en champ lointain et qu'ils dépendent peu du niveau de détail du processus de transition se produisant au niveau de l'injection. Ainsi, la question de l'utilisation d'un générateur de turbulence en entrée n'était probablement pas pertinente à ce niveau.
- Une analyse de cet écoulement en situation réactive, réalisée par GAMBA *et al.* [72] avec une *couche limite amont laminaire* en LES et en RANS, montre qu'en LES ; la nature laminaire de l'écoulement amont permet de reproduire tout de même fidèlement de nombreuses caractéristiques de l'écoulement. Par une analyse de champs du radical OH et des comparaisons avec des signaux de PLIF (*Planar Laser Induced Fluorescence*) : la zone de recirculation amont, le pied du choc amont, l'induction instantanée après ce dernier et la structure de flamme en amont côté courant et en aval côté sillage du jet sont correctement prédites. En revanche, les caractéristiques

téristiques transversales (suivant la largeur  $z/D$ ) sont mal reproduites. Ces résultats suggèrent la moindre importance des fluctuations en entrée. En revanche, la suite de leur étude montre l'importance de la prise en compte de ces fluctuations dans le cadre d'une modélisation RANS. En effet, pour une couche limite laminaire, les résultats sont peu probants, alors qu'en considérant une couche limite turbulente, les résultats s'améliorent notablement en RANS.

- D'autres part, VEDOVOTO *et al.* [198] ont analysé différentes techniques de génération de turbulence synthétique et montrent que même avec un jeu correcte de vitesse moyenne et d'énergie cinétique turbulente, les champs résultants de l'écoulement s'avèrent très sensibles au choix du modèle de turbulence synthétique retenu. L'objectif n'est pas ici de reproduire une étude similaire à celle déjà conduite par VEDOVOTO *et al.* [198] pour nos propres conditions d'écoulement. Comme de nombreux autres auteurs [42, 68, 72, 98, 179], notre choix s'est porté sur l'utilisation en condition aux limites d'une couche limite stationnaire ne présentant aucune fluctuation.

### 5.3.4 Sorties

Les effets du confinement n'ont pas été pris en compte par rapport à la géométrie originale [202]. Par conséquent, des conditions d'extrapolation sont imposées, avec l'utilisation de zones tampons où le maillage est plus grossier, en haut ( $y/D = 8.85$ ) et sur les côtés ( $z/D = \pm 10$ ) du domaine. L'emploi simultané de la condition d'extrapolation et de zones tampons a pour but d'éviter toute réflexion d'ondes numériques parasites aux bords du domaine de calcul.

**Remarque** Il s'avère que l'écoulement de sortie est complètement supersonique, par conséquent, l'utilisation de condition de type NSCBC [166, 194] ne s'est pas avéré nécessaire. Cette condition d'extrapolation est aussi reprise par d'autres auteurs [68, 89, 193, 209, 214]. Par ailleurs, comme noté précédemment, la largeur du domaine (suivant  $z$ ), son niveau de résolution et les conditions aux limites associées semblent être des points plus délicats pour la réalisation de calculs réactifs. En effet, GAMBIA et MUNGAL [71] ont montré par expérience, que pour une gamme relativement large du rapport de flux de quantité de mouvement  $J$  comprise entre 0.3 à 5, la réaction est significative en proche paroi, dans la couche limite. En effet, l'interaction entre l'écoulement amont et le jet, par le biais de la zone de séparation en  $\lambda$  du choc courbé (*bow shock*) avec la couche limite, va définir l'intensité du mélange dans ces zones en proche paroi et peut ainsi modifier significativement la structure de la flamme [72, 179].

## 5.4 Simulations aux grandes échelles inerte du JISCF

### 5.4.1 Paramètres des simulations

Initialement, deux simulations aux grandes échelles non-réactives ont été effectuées sur la configuration JISCF dont le domaine et le maillage (plus grossier) retenus correspondant au « Mesh 1 » (§ 5.2.1). Ces simulations ont eu pour but d'étudier le mélange scalaire avec la modélisation de la variance de sous-maille de la fraction de mélange, présenté § 6 « Modélisation de la variance scalaire de sous-maille ». Les paramètres de ces simulations sont donnés § 6.6. Le 1<sup>er</sup> calcul utilise le modèle de Smagorinsky (3.35), tandis que le 2<sup>e</sup> calcul modélise la viscosité de sous-maille à l'aide du modèle WALE (3.37). Par la suite, ces deux calculs seront dénommés, respectivement par « NR-Mesh1-Smago » et « NR-Mesh1-WALE ».

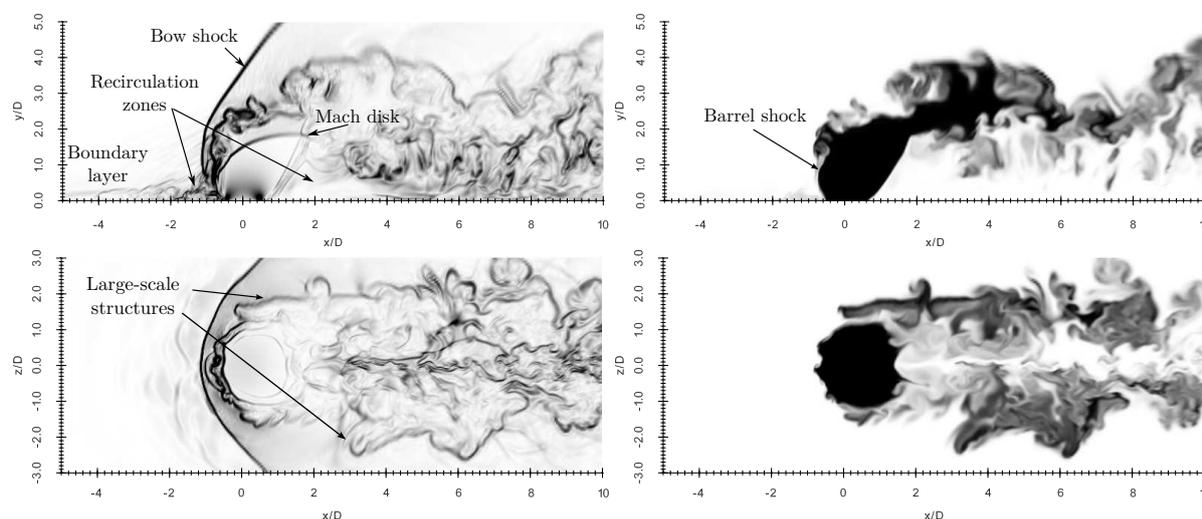
Suite à ces simulations, une 3<sup>e</sup> simulation aux grandes échelles non-réactive a été réalisée, mais cette fois-ci, sur le maillage plus raffiné et plus étendu « Mesh 2 » (§ 5.2.2). Cette simulation est basée sur une résolution simultanée, d'une part des équations filtrées de masse (3.11), de quantité de mouvement (3.12), d'espèce (3.13), d'énergie totale (3.22) (seconde formulation – VREMAN [205]), et d'autre part, de l'équation de la fraction de mélange filtrée (6.6). Une description simplifiée des flux

moléculaires (§ 2.5, approximation d’Hirschfelder et Curtiss : niveau 1) ainsi que des coefficients de transport (§ 2.6) est retenue. Le modèle de viscosité SGS WALE (3.37) a été utilisé et la partie isotrope du tenseur de viscosité SGS  $\tau_{kk}^{\text{sgs}}$  est modélisée par le modèle de Yoshizawa (3.41). Les paramètres de modélisation sont fixés à  $(C_s, C_I, Sc_{\text{sgs}}, Pr_{\text{sgs}}) = (0.18, 0.066, 0.7, 0.7)$  et correspondent respectivement à la constante pour le modèle WALE, celle du modèle de Yoshizawa, les nombres de Schmidt SGS et de Prandtl SGS. Le senseur de choc modifié d’ADAMS et SHARIFF [1] (§ 3.5.3.2) est utilisé pour le déclenchement de la pondération non linéaire du schéma WENO7 à partir d’une valeur seuil  $\sigma_{\text{seuil}}$  réglée entre 10 et 15 %, les coefficients optimaux étant utilisés par défaut. Le senseur de DUCROS *et al.* [56] (§ 3.5.3.2) est par ailleurs utilisé pour annuler la viscosité SGS dans les zones de choc. Le paramètre de stabilité CFL est ajusté durant la simulation entre 0.5–0.65 ; tandis que, le nombre de Fourier Fo a été fixé à 0.9 (pas de temps diffusif).

Les conditions aux limites sont celles présentées plus haut § 5.3. L’intégralité du domaine a été initialisé avec la condition au limite d’entrée de l’écoulement transverse via les profils de vitesse et de température tracés Fig. 5.7.

Le temps physique total simulé est d’environ  $t = 150D/u_\infty = 230 \mu\text{s}$ . À partir de  $t = 110D/u_\infty = 168 \mu\text{s}$ , des champs sont enregistrés avec une fréquence d’acquisition de 8.70 MHz, soit toutes les  $0.115 \mu\text{s}$ , permettant ainsi de collecter plus de 530 champs pour conduire l’analyse statistique. Le pas de temps moyen du calcul (CFL limitant) est de l’ordre de 1.5 ns. Enfin, ce calcul a consommé environ 1 670 000 h scalaire avec 16 384 processus MPI, sur le super-calculateur Turing de l’IDRIS [97]. Par la suite, nous adimensionnerons le temps par  $t^* = u_\infty(t - t_i)/D$ , avec  $t_i = 0$ , l’instant initial. Par la suite, ce dernier calcul sera dénommé par « NR-Mesh2-WALE ».

#### 5.4.2 Structure globale de l’écoulement

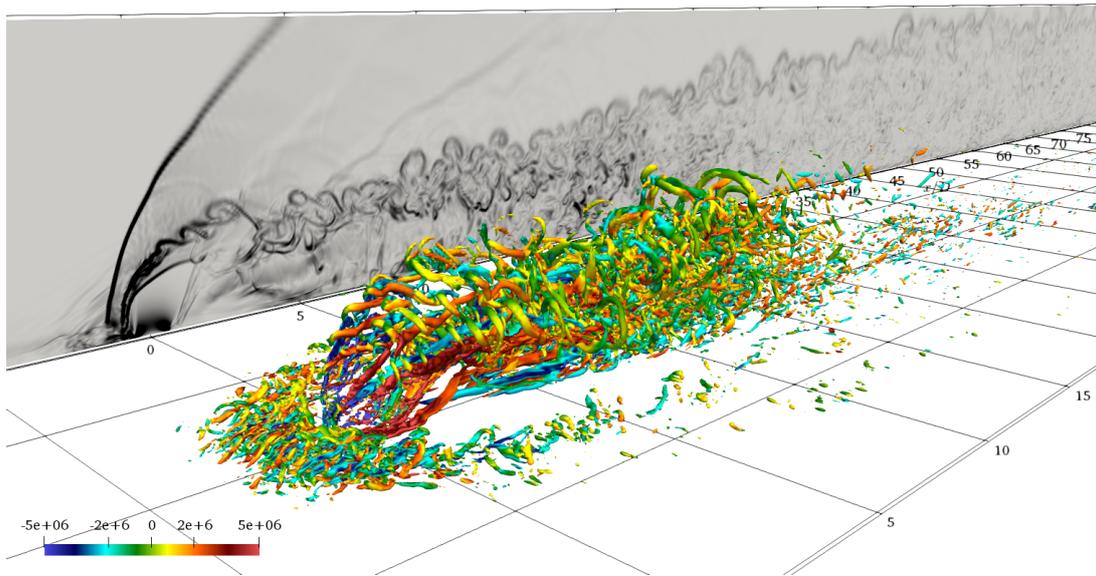


**FIG. 5.8** – Champs instantanés d’un Schlieren numérique basé sur la masse volumique filtrée  $S_{\bar{\rho}}$  (gauche) et de la fraction de mélange  $\tilde{\zeta}$  (droite) dans le plan XY médian  $z/D = 0$  (haut) et le plan XZ parallèle à la paroi, situé à  $y/D = 1$  (bas). Calcul NR-Mesh1-Smago.

La Fig. 5.8 montre une visualisation instantanée de champs du scalaire passif  $\tilde{\zeta}$ , permettant de tracer le combustible, ainsi que d’un Schlieren numérique  $S_{\bar{\rho}}$ , basé sur la masse volumique. Ce dernier est défini par [90]

$$S_{\bar{\rho}} = \exp\left(-\alpha \frac{\|\vec{\nabla}\bar{\rho}\|}{\max\|\vec{\nabla}\bar{\rho}\|}\right) \quad (5.7)$$

avec  $\alpha = 5$  afin de mieux distinguer les faibles variations de la norme du gradient de masse volumique et permet donc de mettre en évidence la présence du choc courbé se créant en amont du jet. Ce choc interagit avec la couche limite amont qui va se détacher pour former la structure de choc en  $\lambda$ . La limite du choc tonneau formé par le jet d'hydrogène sous-détendu et défléchi par l'écoulement principal est clairement visible. Cependant, le disque de Mach est moins identifiable étant donné qu'il est d'une part, très instationnaire du fait de son interaction avec l'écoulement principal, comme l'ont montré BEN-YAKAR *et al.* [11], KAWAI et LELE [105]; d'autre part, le niveau de résolution n'est probablement pas suffisant pour le capturer avec le maillage Mesh1. En revanche, il est plus visible sur le maillage Mesh2, comme le montre la Fig. 5.13. Il est aussi possible d'identifier la couche de mélange se développant au-dessus du jet, via les instabilités de type Kelvin-Helmholtz, permettant ainsi de voir l'évolution de la hauteur de pénétration du jet dans l'écoulement, cette dernière caractéristique dépend fortement du paramètre  $J$ . En effet, plus la valeur de  $J$  est importante, plus la hauteur de pénétration est grande, tout comme l'interaction entre le jet, l'écoulement principal, la couche limite ainsi que l'intensité du choc courbé; en revanche, la déflexion et déformation du choc en tonneau est plus importante pour de faibles valeurs de  $J$  [71]. Par ailleurs, l'interaction génère une paire de tourbillons contra-rotatifs (CVP) qui sont clairement visibles sur la Fig. 5.9. Ces structures à grandes échelles entraînent le combustible en aval de l'injection et vont permettre de favoriser le mélange avec l'écoulement oxydant d'air vicié.



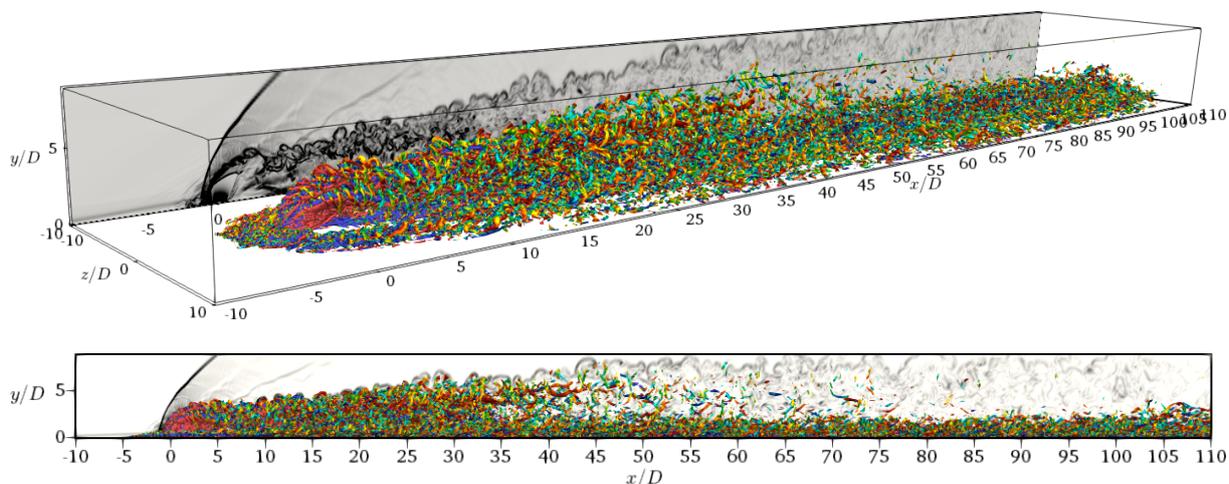
**FIG. 5.9** – Visualisation des grandes structures tourbillonnaires : iso-surface du critère- $Q$  à  $Q = J(u_\infty/D)^2$  colorée par la vorticité longitudinale  $\tilde{\omega}_x$  (en  $s^{-1}$ ). En arrière plan : un champ de Schlieren numérique (NR-Mesh2-WALE).

La Fig. 5.9 permet d'identifier les structures cohérentes à grandes échelles à l'aide d'une iso-surface du critère- $Q$  qui correspond au second invariant du gradient de vitesse. Il est introduit par HUNT *et al.* [96] et il est défini (à un facteur 1/2 près) par

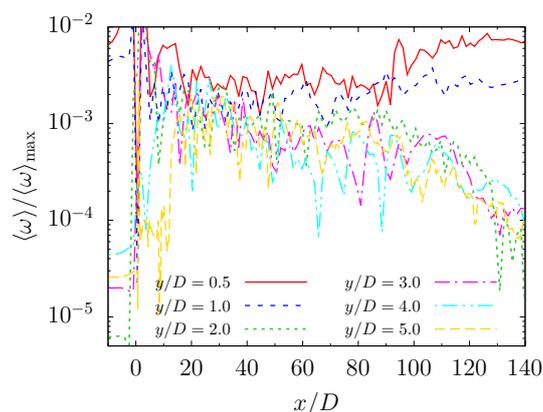
$$Q = \frac{1}{2} (\|\Omega\|^2 - \|S\|^2) = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \quad (5.8)$$

Cette iso-surface est colorée par la vorticité longitudinale  $\tilde{\omega}_x$  qui permet de mettre en évidence les tourbillons tournant dans le sens horaire et trigonométrique, respectivement par des valeurs positives et négatives de  $\tilde{\omega}_x$ . De plus, des structures plus fines sont présentes dans la zone de recirculation en amont du jet, sous le choc courbé. Ces petites structures sont associées aux tourbillons en fer à cheval visible dans l'écoulement moyen. Finalement, ces observations permettent de confirmer que

les simulations effectuées sont capables de restituer l'organisation complexe des structures à grandes échelles, comme cela a été évoqué § 5.1 et dans la littérature [106, 107].

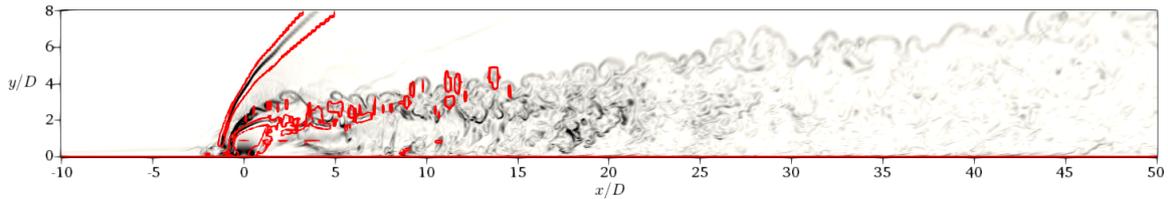


**FIG. 5.10** – Visualisation des structures tourbillonnaires plus fines : iso-surface du critère- $Q$  à  $Q = (a_\infty/D)^2$  colorée par la vorticité longitudinale  $\tilde{\omega}_x$  (en  $s^{-1}$ ). En arrière plan : un champ de Schlieren numérique (NR-Mesh2-WALE).



**FIG. 5.11** – Profils moyens de la norme de la vorticité adimensionnée en fonction de la position  $x/D$ , en différentes hauteurs  $y/D$  et à  $z/D = 0$  (NR-Mesh2-WALE).

Dans ces calculs inertes, les effets du choc se font très peu sentir en champ lointain, étant donné que le sillage du jet ne présente aucune interaction avec d'autres chocs. Par ailleurs, la détente du jet est extrêmement rapide et ceci a pour conséquence de restaurer rapidement la valeur de la pression de l'écoulement en aval du jet au niveau de celle de l'écoulement principal ( $p_\infty$ ) [87]. En revanche, en présence d'un confinement, on peut s'attendre à voir l'apparition de réflexions de chocs dans la chambre créant un train de choc, potentiellement accompagné d'une augmentation de la pression. Cependant, dans notre cas, on peut voir sur la Fig. 5.10, qu'avec une iso-surface de valeur plus faible du critère- $Q$ , il est possible de visualiser des structures plus fines qui se développent dans le domaine. Ainsi, nous pouvons distinguer d'une part, le développement de la couche limite en aval du jet et d'autre part, nous voyons que les structures à grandes échelles (CVP principalement) se dissipent relativement rapidement en aval de l'injection (entre  $x/D = 40-50$ ). Ceci est confirmé par les profils de vorticité moyenne, Fig. 5.11, où on peut voir un maintien d'un niveau élevé de la vorticité dans la couche limite (pour  $y/D = 0.5$  et  $1.0$ ), alors qu'en dehors de cette dernière, la vorticité moyenne diminue au fur et à mesure qu'on s'éloigne de l'injection. En revanche, lorsque le confinement est



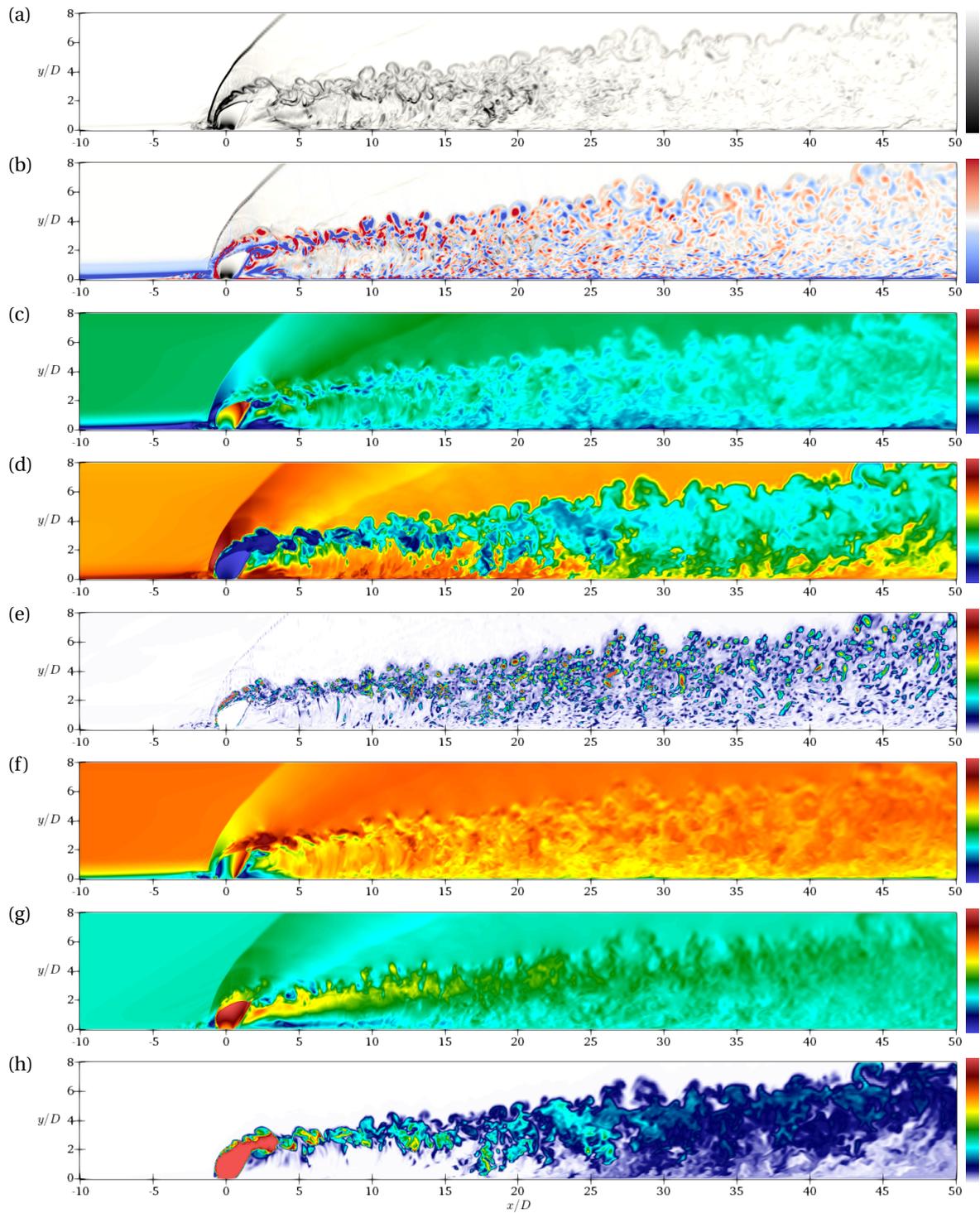
**FIG. 5.12** – Visualisation des zones de détection de discontinuités (chocs, parois), *i.e.* d'activation de la pondération non linéaire du schéma WENO7 (rouge). En arrière plan : un champ de Schlieren numérique  $S_{\bar{p}}$  (NR-Mesh2-WALE).

présent, il semble que ce phénomène n'est pas observé, même lorsque l'écoulement est réactif. En effet, FUREBY *et al.* [68] montrent dans ce cas un maintien des structures cohérentes tout au long de la chambre et en présence de réaction chimique.

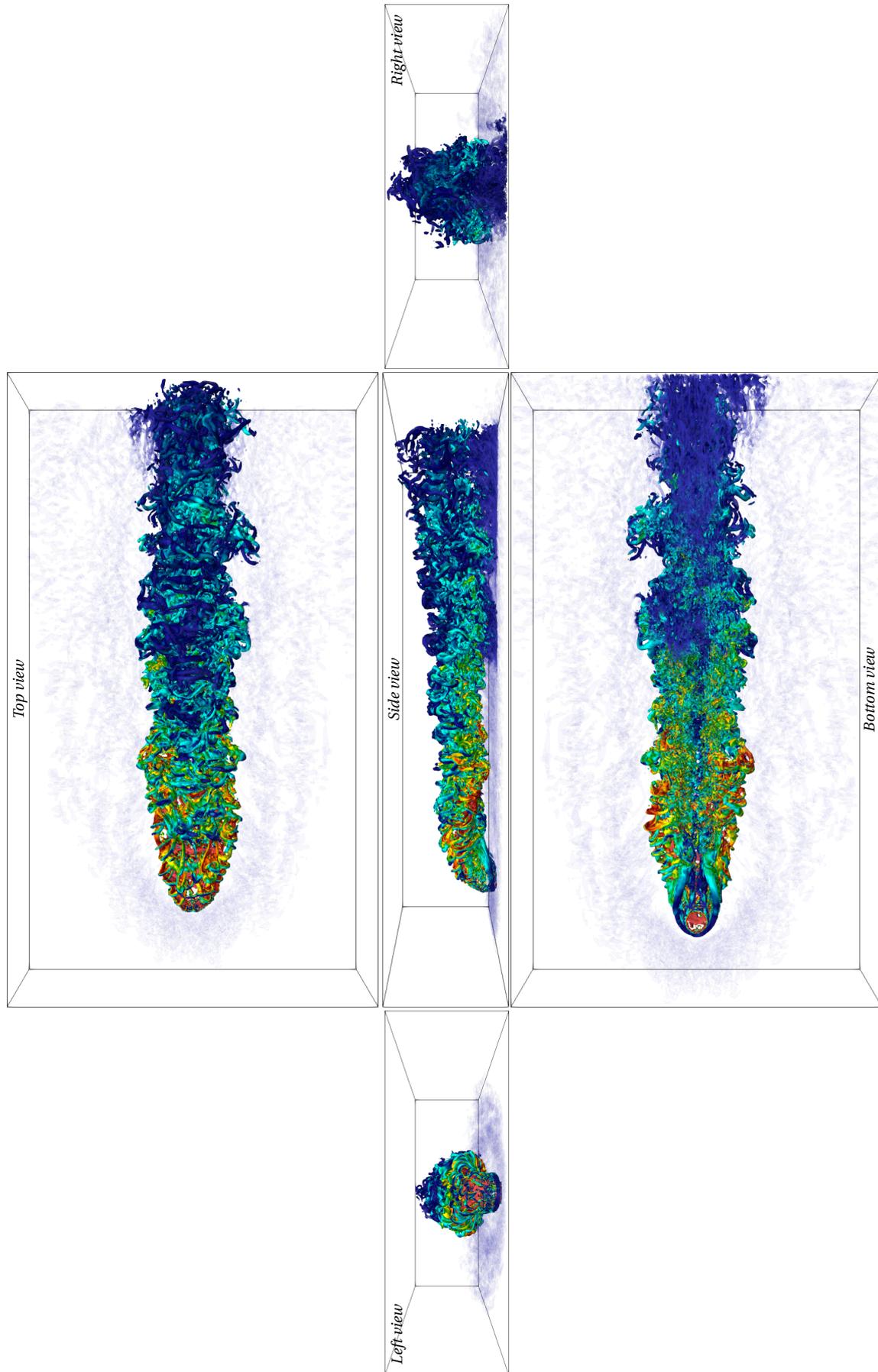
La Fig. 5.13 montre cette fois-ci des champs instantanés, plus étendus, de différentes grandeurs aérodynamiques caractéristiques. On peut ainsi voir que les structures tourbillonnaires se développant dans la couche de mélange au-dessus du jet, via les instabilités de Kelvin-Helmholtz, tournent dans le sens trigonométrique (dans le plan XY), où  $\tilde{\omega}_z > 0$  (Fig. 5.13(b)). Alors qu'en aval du choc en tonneau, les tourbillons tournent initialement dans le sens horaire. Le nombre de Mach ainsi que le champ de température (Fig. 5.13(c) et Fig. 5.13(d)) permettent d'identifier la détente de Prandtl-Meyer où le jet accélère et la température chute brutalement. Aux bords de l'injecteur, on distingue la recompression du jet via le choc en tonneau et le disque de Mach. Le sillage du choc en tonneau forme une poche subsonique, de faible pression (dépression) et de vitesse faible. En l'absence de confinement, le jet de combustible (froid) se développe rapidement en hauteur (Fig. 5.13(h)), où il est entraîné à la fois jusqu'à la paroi ( $x/D \approx 20-25$ ) et à la fois dans la limite supérieure du domaine où il sort. Par ailleurs, on voit que la diffusion du combustible est plus importante côté paroi, que du côté de l'écoulement principal (couche de mélange supérieure). Le mécanisme de transport du combustible et le rôle des structures tourbillonnaires est mis en évidence sur la Fig. 5.14 où l'on voit clairement que les tourbillons contra-rotatifs entraînent majoritairement du combustible de part et d'autre du plan médian et du côté de la paroi.

La viscosité de sous-maille WALE est très importante (Fig. 5.13(e)), par rapport à la viscosité moléculaire, dans les zones où les structures turbulentes fortement énergétiques sont présentes ; notamment dans le sillage du jet et la couche de mélange supérieure (côté écoulement principal). Elle est quasi-nulle dans le sillage du choc en tonneau et diminue en s'approchant de la paroi ainsi qu'en s'éloignant de l'injection. Nous voyons que l'utilisation du senseur de choc de DUCROS *et al.* [56] (§ 3.5.3.2) a bien permis d'annuler cette viscosité de sous-maille au niveau du choc courbé, dans le choc en tonneau ainsi qu'au niveau du disque de Mach, cela afin d'éviter tout ajout de dissipation artificielle supplémentaire à celle déjà apportée par la pondération non linéaire du schéma WENO7 en présence de choc. La Fig. 5.12 illustre les zones d'activation de cette pondération, avec un seuil de déclenchement optimal à  $\sigma_{\text{seuil}} = 15\%$ . Cette valeur a été choisie afin de limiter au maximum les régions d'activation de ce schéma et donc de minimiser la dissipation numérique introduite, tout en conservant la plus grande robustesse possible. On voit que ce critère permet de bien détecter le choc courbé, le choc en tonneau ainsi que le disque de Mach. Cependant, il s'active tout de même à la paroi et, de façon intermittente, dans le sillage en champ proche du jet, jusqu'à ne plus opérer à partir de  $x/D = 15$ .

Enfin, les composantes du vecteur vitesse ( $\tilde{u}, \tilde{v}$ ) mettent en évidence les zones d'interactions entre les 2 paires de tourbillons contra-rotatifs se développant pour l'un, dans le sillage du jet ( $\tilde{v} > 0$ ), et pour l'autre, en proche paroi en aval du choc en tonneau ( $\tilde{v} < 0$ ) formant ainsi le point source, situé en  $\mathbf{u} = 0$ , dans le plan médian passant par l'injection dans l'écoulement moyen.



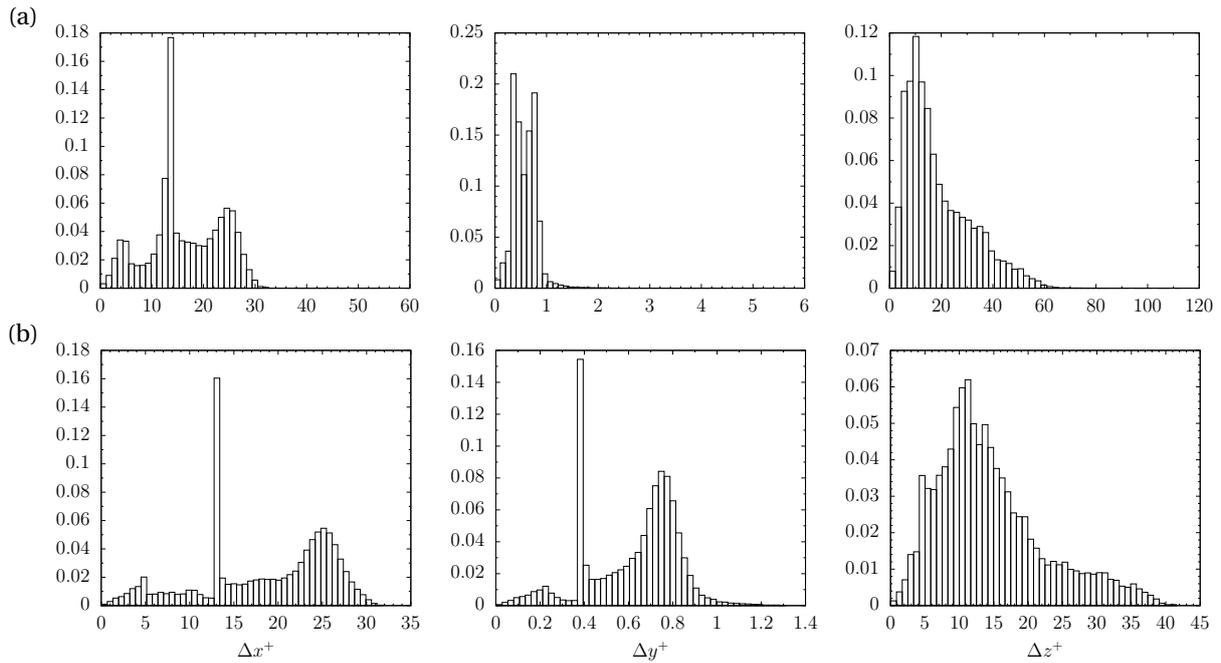
**FIG. 5.13** – Champs instantanés à  $t^* = 150$ , dans le plan médian  $XY$  ( $z/D = 0$ ). (a) Schlieren numérique  $S_{\bar{\rho}}$  [0.95, 1]; (b) Vorticité transversale  $\tilde{\omega}_z$  [ $-10^6, 10^6$ ]  $s^{-1}$ ; (c) Nombre de Mach  $Ma$  [0, 5]; (d) Rapport de température  $\tilde{T}/T_{\infty}$  [0.04, 1.5]; (e) Rapport de viscosité SGS et moléculaire  $\mu_{sgs}/\tilde{\mu}$  [0, 20]; (f) Vitesse longitudinale normalisée  $\tilde{u}/u_{\infty}$  [ $-0.8, 1.7$ ]; (g) Vitesse normale à la paroi normalisée  $\tilde{v}/u_{\infty}$  [ $-0.9, 1.9$ ]; (h) Fraction de mélange  $\tilde{\xi}$  [0, 1]. Calcul NR-Mesh2-WALE.



**FIG. 5.14** – Visualisation du mécanisme d'entraînement du combustible par les structures cohérentes à grandes échelles. Iso-surface du critère- $Q$  à  $Q = (a_\infty/D)^2$  et colorée par la fraction de mélange  $\tilde{\xi}$  suivant différents points de vue.

### 5.4.3 Critères de qualité et niveau de résolution

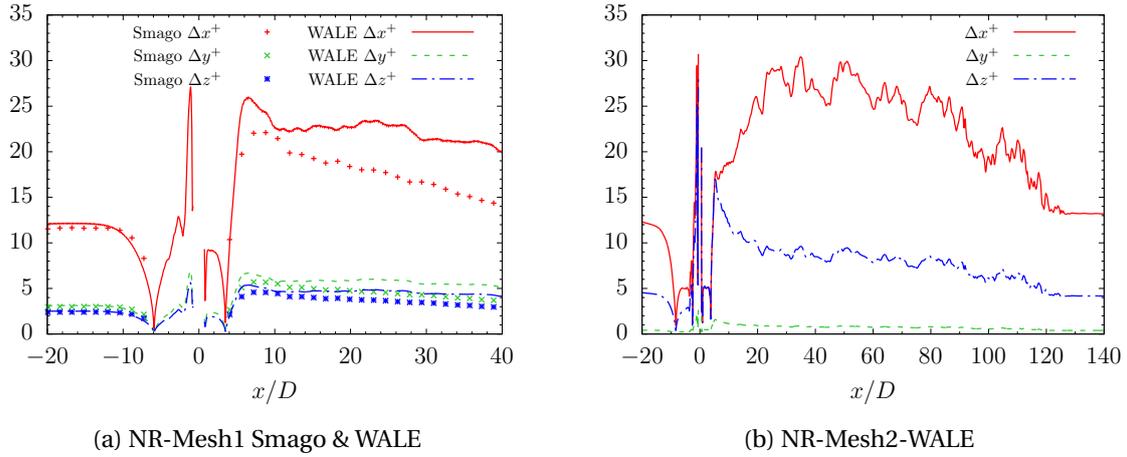
La Fig. 5.15(a) affiche la distribution des tailles de mailles (en unité de paroi) sur l'intégralité de la paroi. Cette figure indique que les valeurs maximales de  $(\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+)_{\max} \sim (60, 6, 120)$  sont localisées au niveau des lèvres de l'injecteur ou en dehors du sillage du jet ( $|z/D| > 5$ ), où la résolution n'est pas nécessairement adaptée. Cependant, en conditionnant la distribution dans la zone d'intérêt où se développe principalement le mélange, qu'on peut délimiter par  $\tilde{\xi} \in [0.01, 0.99]$ , on obtient la Fig. 5.15(b) qui exclut les valeurs trop importantes de  $(\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+)$  et montre que le niveau de résolution à la paroi pour le maillage Mesh2 répond aux critères de résolution recommandés dans la littérature pour effectuer une LES dite résolue en paroi (*Wall resolved LES*, cf. Tab. 3.1, [159, 160, 175]).



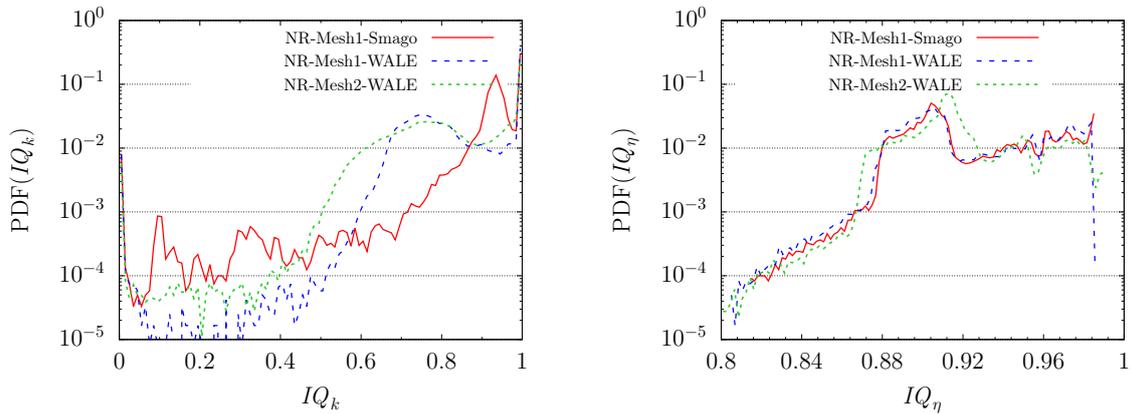
**FIG. 5.15** – Histogrammes de distribution de tailles de mailles adimensionnées en unité de paroi  $(\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+)$  (a) sur toute la paroi inférieure du domaine (injecteur de diamètre  $D$  exclus) et (b) dans la zone conditionnée par la présence du scalaire passif  $\tilde{\xi} \in [0.01, 0.99]$ . Calcul NR-Mesh2-WALE.

La Fig. 5.16 représente l'évolution de ces tailles de maille à la paroi au niveau de la ligne médiane passant par l'injection pour les 3 calculs LES inertes réalisés. Nous voyons que les deux premiers calculs (NR-Mesh1-Smago et NR-Mesh2-WALE) conduisent à des valeurs de  $\Delta y^+$  ( $\sim 5$ ) plus importantes à celles associées au maillage Mesh2 (où  $\Delta y^+ \lesssim 1$ ). Cependant, d'après LESIEUR [119], les principales structures commencent à apparaître en proche paroi pour des valeurs de  $\Delta y^+$  comprises entre 5 et 40–50; ce type de maillage a été adopté par INGENITO *et al.* [98], avec un  $\Delta y^+ = 4$ , pour leur calcul réactif, ainsi, nous pouvons considérer que la résolution du maillage Mesh1 est moyenne à la paroi (suivant la direction  $y$ ). Cependant, les niveaux de résolution évalués suivant les directions  $(x, z)$ , pour  $(\Delta x^+, \Delta z^+)$ , sont plus importants sur le Mesh1, ce qui est attendu étant donné les profils des tailles de mailles (dimensionnées) vus Fig. 5.5. Enfin, la résolution associée au maillage Mesh2 reste néanmoins correcte avec des valeurs moyennes de  $(\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+) \sim (25\text{--}30, 1, 10)$  en aval du jet.

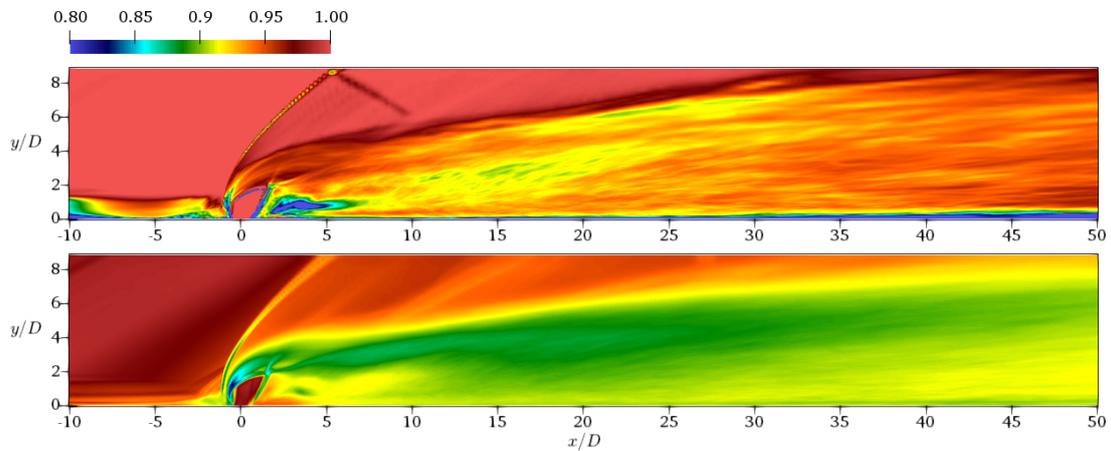
La Fig. 5.17 montre la fonction densité de probabilité de 2 indices de qualité, qui permettent de juger du niveau de résolution au sein de l'écoulement. Ces derniers sont définis entre 0 (mauvaise résolution) et 1 (bonne résolution). L'indice de qualité  $IQ_k$  de POPE [169] (modifié) est basé sur la comparaison entre le niveau d'énergie cinétique turbulente résolue  $k$  et de sous-maille  $k_{\text{sgs}}$ , il est



**FIG. 5.16** – Profils des tailles de mailles adimensionnées en unité de paroi, le long de la ligne centrale à l'injection  $(y/D, z/D) = (0, 0)$ .



**FIG. 5.17** – Densité de probabilité sur le plan médian XY de l'indice de qualité  $IQ_k$  [169] et  $IQ_\eta$  [43] pour les calculs NR-Mesh1-Smago, NR-Mesh1-WALE et NR-Mesh2-WALE.



**FIG. 5.18** – Visualisation des zones plus plus résolues, sur le plan médian XY, selon les indices de qualité  $IQ_k$  (haut) et  $IQ_\eta$  (bas). Calcul NR-Mesh1-Smago.

défini par

$$IQ_k = \frac{k}{k + \{k_{\text{sgs}}\}} \quad (5.9)$$

où l'énergie cinétique de sous-maille  $k_{\text{sgs}}$  est modélisée par  $k_{\text{sgs}} = v_{\text{sgs}}^2 / (C_M \Delta)^2$  [218] et  $C_M = 0.069$ . Il est considéré que si  $IQ_k \geq 0.8$ , alors la résolution est correcte et permet de capturer au moins 80 % du spectre énergétique de la turbulence [169]. L'indice de qualité de CELIK *et al.* [43] est basé sur le niveau de résolution du maillage en comparant la taille de maille  $\Delta$  et l'échelle de Kolmogorov  $L_\eta$

$$IQ_\eta = (1 + \alpha_\eta (\Delta/L_\eta)^m)^{-1} \quad (5.10)$$

avec  $(\alpha_\eta, m) = (0.05, 0.5)$ . Ces auteurs considèrent que si  $IQ_\eta \geq 0.97$ , alors le niveau de résolution est proche de celui d'une DNS.

Les résultats obtenus avec chacun de ces deux critères sont assez différents. L'indice de qualité de POPE [169]  $IQ_k$  semble indiquer que le modèle WALE produit une énergie cinétique de sous-maille, et donc une viscosité SGS, plus importante que le modèle de Smagorinsky. Ce qui semble montrer que le calcul conduit avec ce dernier modèle est plus résolu, ce qui n'est pas nécessairement le cas. En effet, les visualisations 3D instantanées des structures tourbillonnaires qui se développent, particulièrement dans la zone de sillage du jet (cf. Fig. 5.9), montrent que ces dernières possèdent un taux de rotation beaucoup plus important que le taux de cisaillement. En fait, le modèle de Smagorinsky n'évalue que les taux de cisaillement ou d'étirement, alors que le modèle WALE évalue à la fois les taux de cisaillement mais aussi les taux de rotation (cf. § 3.5.2.3), ce qui peut expliquer ces différences. Une seconde explication possible peut provenir de la valeur de la constante choisie pour ces modèles de viscosité de sous-maille. En effet, la valeur  $C_s = 0.18$  (valeur théorique) a été utilisée pour les 3 simulations et cette dernière est probablement trop élevée pour représenter les niveaux de dissipation de sous-maille. On voit ainsi que l'indice introduit par POPE [169] dépend fortement du modèle de viscosité de sous-maille retenu, et accessoirement de la constante de modélisation associée, c'est pourquoi il n'est pas nécessairement représentatif.

L'indice de qualité de CELIK *et al.* [43]  $IQ_\eta$  semble être moins sensible au modèle de viscosité de sous-maille choisi pour la simulation. En comparant cette fois-ci la taille de maille locale avec l'échelle de Kolmogorov, cet indice montre un très bon niveau de résolution de l'aérodynamique globale de l'écoulement avec  $IQ_\eta > 0.8$ . Pour ces deux indices de qualité, la dernière simulation « NR-Mesh2-WALE » montre une variation plus large, ceci est certainement due à (i) des statistiques non suffisamment convergées (+530 champs) par rapport aux calculs avec le domaine « Mesh1 » (+1000 champs) ou bien (ii) une phase d'enregistrement différente des statistiques. Pour le calcul avec le Mesh1, ces dernières sont en effet sauvegardées relativement tôt, à partir d'une phase transitoire de seulement  $t = 20D/u_\infty$ , alors que pour le Mesh2, la phase transitoire a duré  $t = 110D/u_\infty$ .

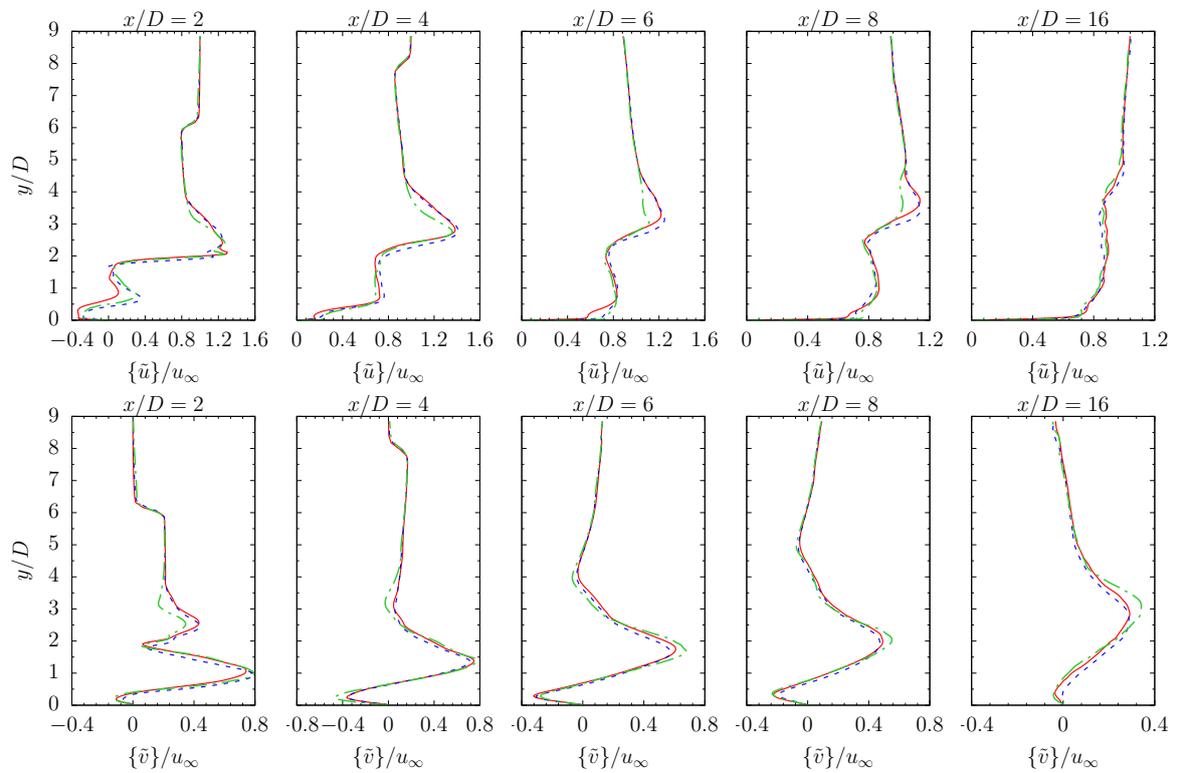
Enfin, la Fig. 5.18 illustre, sur une coupe longitudinale XY médiane, avec le calcul NR-Mesh1-Smago, les zones les plus résolues d'après ces indices de qualité. On voit ainsi que les zones situées en amont du choc courbé sont pleinement résolues, hormis dans la sous-couche visqueuse, où le modèle de Smagorinsky produit une viscosité SGS très importante. De même, en aval du choc courbé, la zone située au-dessus du sillage du jet, où l'écoulement principal n'interagit pas avec ce dernier, est aussi correctement résolue. Finalement, dans le sillage même du jet ainsi qu'en-dessous de ce dernier (côté paroi), la résolution reste tout de même relativement bonne, avec  $IQ_k \in [0.90, 0.95]$  et  $IQ_\eta \in [0.87, 0.92]$ .

## 5.4.4 Caractéristiques de l'écoulement moyen et fluctuant

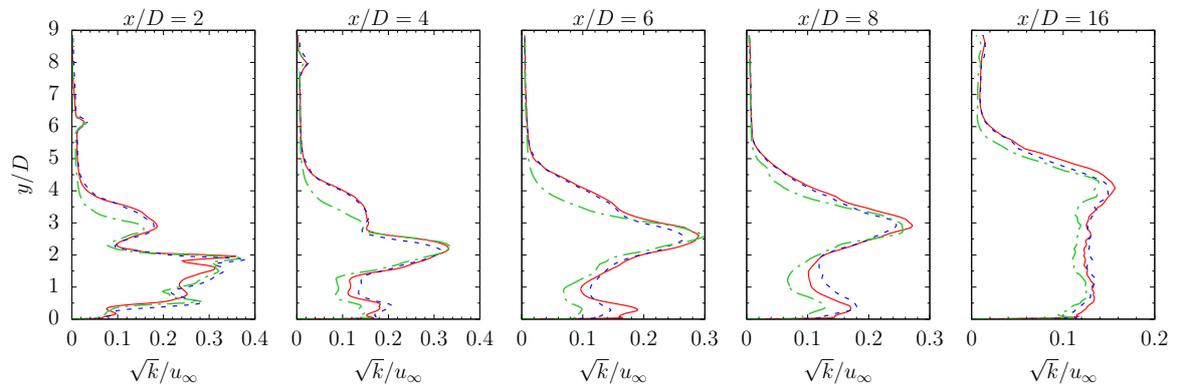
### 5.4.4.1 Champ de vitesse

**En champ proche** Les Figs. 5.19 à 5.21 comparent des champs et des profils de l'écoulement moyen, pour les 3 calculs inertes. Il s'agit des champs du nombre de Mach, de vitesse longitudinale et normale à la paroi, ainsi que celui de l'énergie cinétique turbulente résolue. Qualitativement, les structures de l'écoulement moyen sont les mêmes pour les valeurs moyennes du nombre de Mach et des 2 premières composantes du vecteur vitesse. En effet, on retrouve, dans les 3 calculs, la zone de recirculation en amont du jet, la structure du choc courbé, la recompression en aval de ce dernier ainsi que la poche subsonique dans le sillage du choc en tonneau. Il est remarquable de noter qu'une accélération longitudinale assez importante se produit dans la couche de mélange supérieure où il est possible d'atteindre 1.2 à 1.4 fois la vitesse de l'écoulement amont  $u_\infty$ , sur une distance  $x/D = 2-6$ . Les champs de la vitesse normale à la paroi  $\{\tilde{v}\}$  mettent en évidence la frontière ( $\{\tilde{v}\} = 0$ ) où interagissent les 2 paires de tourbillons contra-rotatifs qui se développent pour l'un, dans le sillage du jet ( $\{\tilde{v}\} > 0$ ), et pour l'autre, en proche paroi ( $\{\tilde{v}\} < 0$ ). Par ailleurs, en champ lointain, nous voyons que le sillage du jet qui est défléchi par l'écoulement principal n'est pas totalement horizontal. Ainsi, la faible valeur de la composante normale de la vitesse va induire une expansion du jet dans la direction ascendante jusqu'à même sortir du domaine de calcul, comme vu précédemment sur le champ instantané Fig. 5.13(h). Quantitativement, les profils de vitesse, Fig. 5.19, mettent en évidence de très faibles écarts, pour les 2 maillages, ainsi que pour les 2 modèles de viscosité de sous-maille utilisés.

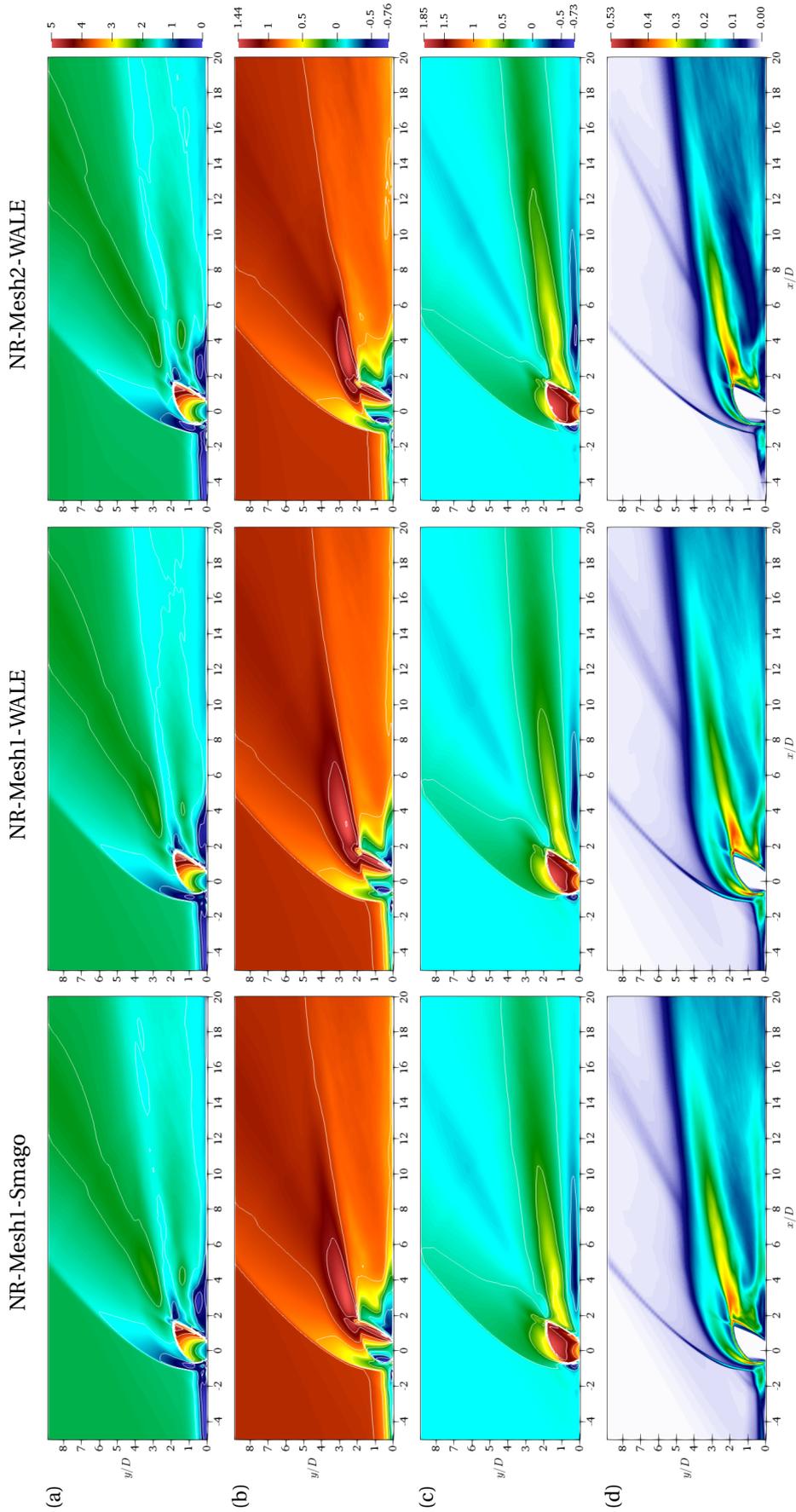
Cependant, des différences plus importantes semblent apparaître pour l'énergie cinétique turbulente. En effet, les champs, Fig. 5.21(d), indiquent des fluctuations de l'énergie cinétique plus grandes pour les calculs NR-Mesh1 (Smagorinsky et WALE) notamment au niveau (i) de la couche de mélange supérieure au jet, (ii) dans le sillage du choc en tonneau et (iii) dans la zone de recirculation amont. Nous avons vu d'après les indices de qualité précédents que le modèle de WALE conduisait, avec les paramètres de simulation retenus, à une viscosité SGS plus importante que celle issue du modèle de Smagorinsky. Cependant, il s'avère que l'énergie cinétique turbulente est plus grande dans le sillage du choc en tonneau, mais est plus faible au niveau de la couche de mélange supérieure, comme le montre les profils Fig. 5.20. Il est ainsi possible de remarquer que l'intensité maximale de la turbulence est localisée dans une petite poche subsonique située à l'extrémité du choc en tonneau, formant une pointe, cette zone correspond à la couche de mélange inférieure au jet où se développe initialement la paire de tourbillons contra-rotatives. En s'éloignant de l'injection, les fluctuations diminuent relativement rapidement, passant d'environ 30-40 à 15 %, respectivement en  $x/D = 2, 4-8$  et 16. Enfin, l'énergie cinétique turbulente résolue est généralement plus faible avec le maillage le plus raffiné (Mesh2-WALE), cela peut s'expliquer par une procédure différente d'évaluation des statistiques mais aussi par l'utilisation du modèle de Yoshizawa retenu pour modéliser le terme isotrope du tenseur de viscosité SGS dans ce dernier calcul, et par conséquent, pour modéliser l'énergie cinétique de sous-maille.



**FIG. 5.19** – Profils moyens de la vitesse longitudinale  $\{\tilde{u}\}/u_\infty$  à  $z/D = 0$  et de la vitesse normale à la paroi  $\{\tilde{v}\}/u_\infty$  à  $z/D = 0$ , à différentes positions  $x/D$  et pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago (rouge, ligne continue), NR-Mesh1-WALE (bleu, ligne tiretée) et NR-Mesh2-WALE (vert, ligne point-tiretée).

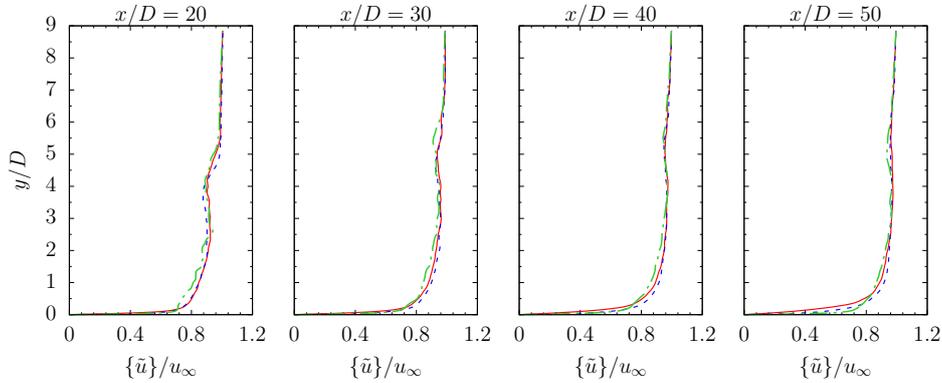


**FIG. 5.20** – Profils de l'énergie cinétique turbulente (résolue)  $\sqrt{k}/u_\infty$  à  $z/D = 0$  et en différentes positions  $x/D$ , pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago (rouge, ligne continue), NR-Mesh1-WALE (bleu, ligne tiretée) et NR-Mesh2-WALE (vert, ligne point-tiretée).



**FIG. 5.21** – Champs moyens sur le plan médian XY (a) du nombre de Mach  $Ma$  (avec 11 iso-lignes uniformément réparties) ; (b) de la vitesse longitudinale  $\{\tilde{u}\} / u_\infty$  (avec 10 iso-lignes) ; (c) de la vitesse normale à la paroi  $\{\tilde{v}\} / u_\infty$  (avec 10 iso-lignes) et (d) de l'énergie cinétique turbulente  $\sqrt{k} / u_\infty$ , pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago, NR-Mesh1-WALE et NR-Mesh2-WALE.

**En champ lointain** Comme nous l'avons vu, les structures cohérentes à grandes échelles se dissipent relativement rapidement en s'éloignant de l'injection. Des profils de vitesse dimensionnée et adimensionnée (en unité de paroi) sont alors tracés, respectivement Figs. 5.22 et 5.23. Ceci afin de voir si l'écoulement se développant en champ lointain tend vers un écoulement de couche limite turbulente supersonique.



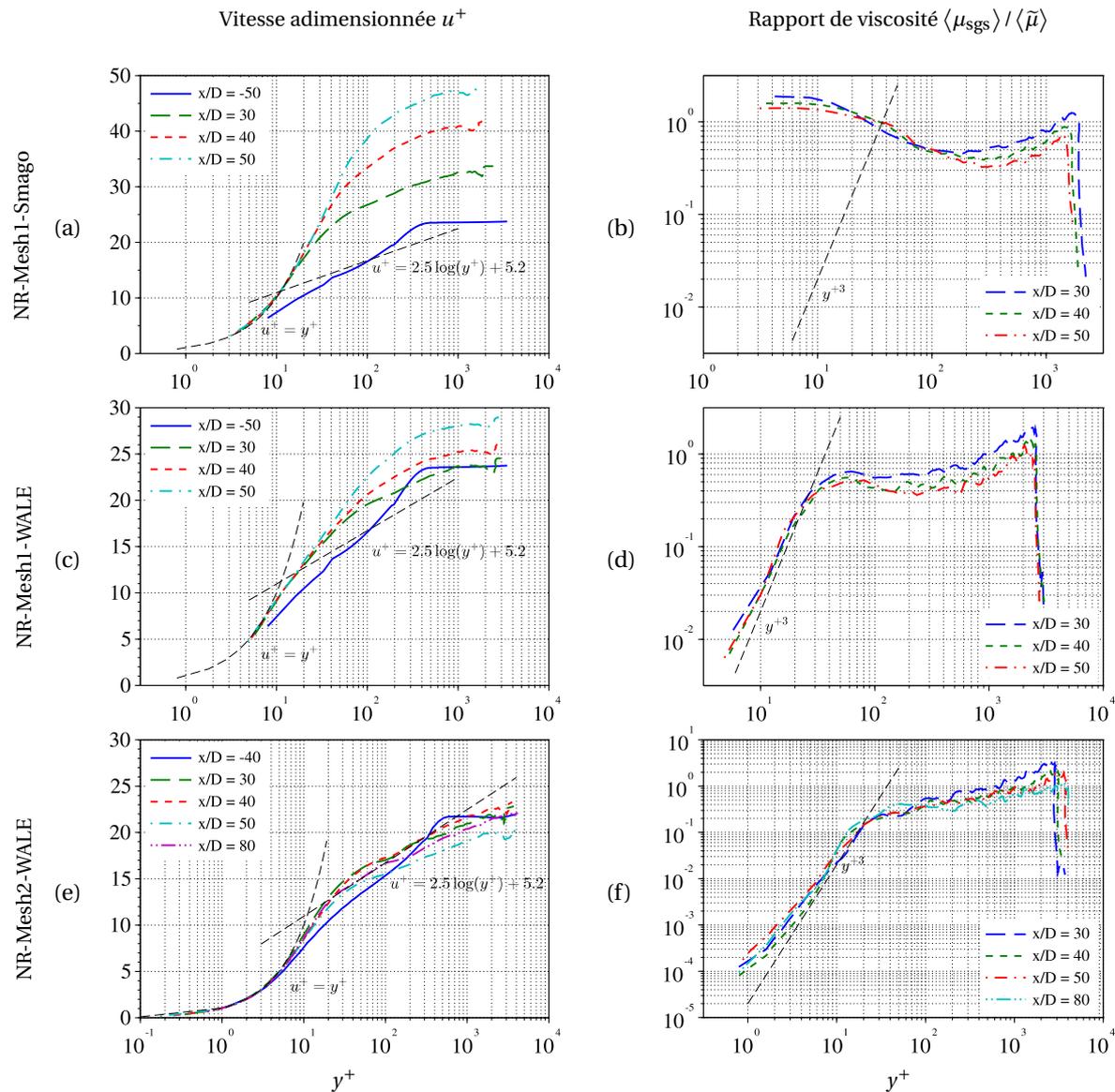
**FIG. 5.22** – Profils moyens de la vitesse longitudinale  $\langle \tilde{u} \rangle / u_\infty$  à  $z/D = 0$  et en différentes positions  $x/D$  (en champ lointain), pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago (rouge, ligne continue), NR-Mesh1-WALE (bleu, ligne tiretée) et NR-Mesh2-WALE (vert, ligne point-tiretée).

La Fig. 5.22 montre que les profils de vitesse sont, pour les 3 calculs, relativement identiques pour les 4 positions tracées ( $x/D = 20, 30, 40$  et  $50$ ). Cependant, d'après la Fig. 5.23, il apparaît que la structure interne de la couche limite est relativement différente pour les 3 calculs. Cet effet est imputable à (i) la sous-résolution de la couche limite sur le maillage Mesh1 ( $\Delta y^+|_{y=0} \approx 4$ ) et (ii) l'incapacité du modèle de Smagorinsky classique à faire tendre la viscosité SGS vers 0 à la paroi suivant la loi  $\mathcal{O}(y^{+3})$ . La Fig. 5.23(b) suivante confirme ce point. Ceci peut engendrer une mauvaise estimation de la contrainte pariétale et donc de la vitesse de frottement. En revanche, la Fig. 5.23(c) montre qu'en utilisant un modèle de viscosité SGS mieux adapté à la paroi, tel que le modèle WALE, bien que le maillage soit relativement grossier à la paroi dans la direction  $y$ , avec  $\Delta y^+|_{y=0} \approx 6$ , les différents profils de vitesse tendent relativement bien vers un profil de couche limite turbulente. Cet excès de vitesse dans la zone logarithmique est aussi observé par KAWAI et LELE [107] sur leur maillage le moins raffiné, alors que LARSSON *et al.* [115] observent le même phénomène mais supposent qu'il a pour origine la propriété adiabatique de la paroi. Cette hypothèse semble a priori exclue car en raffinant d'avantage le maillage afin de résoudre complètement la couche limite, la Fig. 5.23(e) montre qu'avec un maillage et un modèle de viscosité SGS adaptés, les profils de vitesses suivent fidèlement la loi-logarithmique des profils de couche limite turbulente. Dans ce dernier calcul, la sous-couche visqueuse est capturée avec une taille de maille  $\Delta y^+|_{y=0} = 0.2$  à  $0.5$ .

#### 5.4.4.2 Viscosités de sous-maille

La Fig. 5.23 permet aussi de voir la contribution de la diffusion de sous-maille par rapport à la viscosité moléculaire en champ lointain. Comme il a été indiqué précédemment, la Fig. 5.23(b) montre clairement que le modèle classique de Smagorinsky n'est pas adapté en proche paroi, étant donné qu'il ne tend pas vers 0 en  $\mathcal{O}(y^{+3})$ . Il est même constant et produit de la viscosité SGS (relativement importante,  $\langle \mu_{\text{sgs}} \rangle / \langle \tilde{\mu} \rangle > 1$ ) en présence du moindre gradient de vitesse. Dans la zone logarithmique ( $y^+ \approx 20-500$ ), sa contribution est moins grande ; puis dans le sillage de l'écoulement ( $y^+ > 500$ ) son effet devient légèrement plus important.

En revanche, le modèle de viscosité SGS WALE reproduit le bon comportement asymptotique en proche paroi, avec une rupture de pente dans la sous-couche visqueuse ( $y^+ < 20-30$ ), pour les 2 calculs NR-Mesh1 et NR-Mesh2 (Figs. 5.23(d) et 5.23(f)). Ceci permet d'ailleurs de vérifier de la bonne



**FIG. 5.23** – Profils adimensionnés en unité de paroi (a, c, e) de la vitesse moyenne  $u^+$  et (b, d, f) du rapport entre la viscosité de sous-maille moyenne et la viscosité moléculaire moyenne  $\langle \mu_{sgs} \rangle / \langle \tilde{\mu} \rangle$ , en fonction de la distance adimensionnée à la paroi  $y^+$ , à  $z/D = 0$  et différentes abscisses  $x/D$ .

implémentation du modèle de viscosité SGS WALE. Dans la zone logarithmique, le rapport de viscosité diminue puis ré-augmente sur le Mesh1 pour être de l'ordre de l'unité dans la zone de sillage, alors que sur le Mesh2, le rapport augmente de façon quasi-linéaire jusqu'à être de l'ordre de 2–3 dans le sillage de l'écoulement. Sur ce dernier calcul, Fig. 5.23(f), on voit clairement l'effet du raffinement du maillage puisque le rapport minimum chute d'environ 2 décades passant de  $\langle \mu_{\text{sgs}} \rangle / \langle \tilde{\mu} \rangle \sim 10^{-2}$  à  $10^{-4}$ .

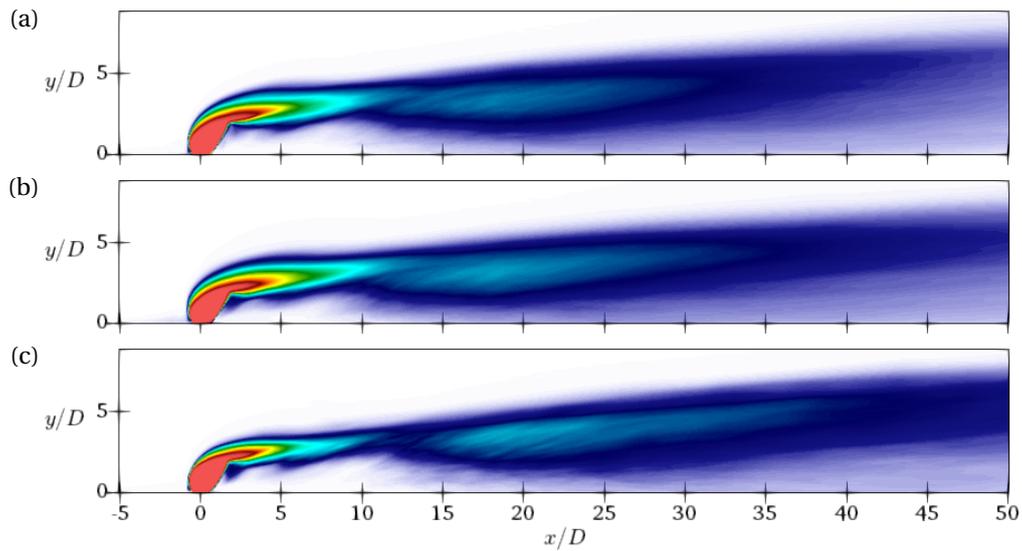
Ces profils de viscosité SGS sont consistants avec les profils types issus de la littérature [7, 149]. Enfin, on peut noter que la viscosité SGS tend vers 0 au-delà de la zone de sillage de l'écoulement car cette dernière est annulée par le senseur de choc de Ducros qui détecte une zone fortement compressible où aucune turbulence n'est développée au-dessus de la couche de mélange (cf. Fig. 5.13(e)).

#### 5.4.4.3 Scalaire passif

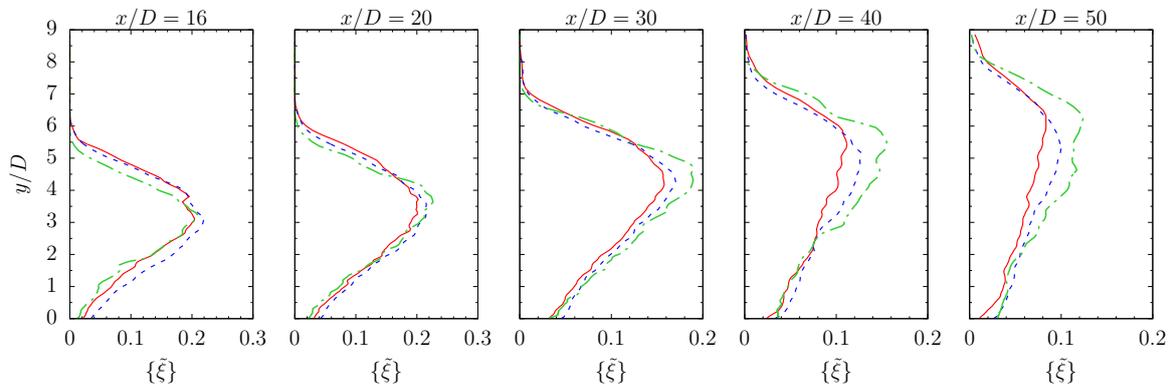
Une étude détaillée sur le mélange scalaire sera fournie § 6 « Modélisation de la variance scalaire de sous-maille », notamment en champ proche. C'est pourquoi nous ne décrivons ici que très brièvement la topologie du champ scalaire en champ proche et nous nous intéresserons plutôt, à son développement en champ lointain.

Ainsi, les Figs. 5.24 et 5.25 présentent les champs et les profils de la fraction de mélange moyenne dans le plan médian XY. On peut voir que les 2 premiers calculs conduits avec le maillage Mesh1, épaississent la couche de mélange supérieure qui se développe initialement dès l'interaction entre le jet et l'écoulement principal. Le cœur potentiel du jet semble plus long dans cette phase initiale, comme cela peut être confirmé par les profils de vitesse longitudinale, Fig. 5.19. Sur ce plan, le jet semble subir une contraction–expansion avec la présence d'un « col », comme le décrivent GAMBA et MUNGAL [71], cette caractéristique ne peut être observée que si le domaine de calcul est suffisamment long. Ainsi, il n'est pas visible dans les études de KAWAI et LELE [105] ou celle de CHAI *et al.* [44]. Ce col est situé en  $x/D \lesssim 10$  pour les 2 premiers calculs et en  $x/D \gtrsim 10$  pour le dernier calcul. Cette pseudo-contraction résulte en réalité du transport turbulent du scalaire de part et d'autre du jet, dans la direction transversale  $z$  par les tourbillons contra-rotatifs. Puis, au fur et à mesure que ces structures se dissipent, elles ramènent du combustible dans le plan médian créant le sillage principal du jet qui se diffuse de façon plus importante vers la paroi (à partir de  $x/D = 15$ –20) que du côté de l'écoulement principal, comme le montrent les profils moyens du scalaire (Fig. 5.25). Dans cette seconde phase du mélange, en champ lointain, le dernier calcul montre une pénétration longitudinale du jet plus importante par rapport au modèle de Smagorinsky. D'ailleurs, les 2 calculs réalisés avec le modèle WALE montrent une pénétration longitudinale plus importante du jet.

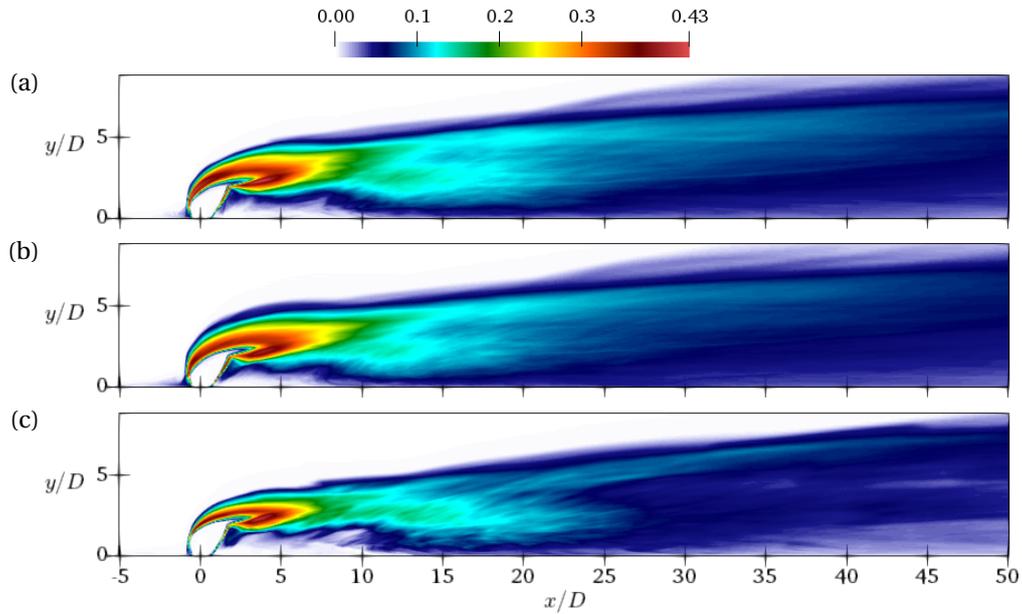
Les Figs. 5.26 et 5.27 montrent des champs et des profils de fluctuations résolues de la fraction de mélange, pour les 3 calculs inertes. Au vue des résultats précédents sur le champ moyen du scalaire, il n'est pas surprenant de retrouver, en champ proche, un épaississement de la zone de fluctuation scalaire dans la zone de développement initiale de la couche de mélange au-dessus du jet pour les 2 premiers calculs (NR-Mesh1-\*). De même, la région de fortes fluctuations scalaires, en aval direct du jet, est plus longue. Entre  $x/D = 10$ –20, l'écoulement présente 2 zones de fluctuations plus intenses, la première se développe au niveau de la couche de mélange supérieure au jet ; la seconde, se situe plutôt en proche paroi, en-dessous du sillage du jet, là où l'écoulement va transporter du combustible jusqu'à la paroi. Ces 2 pics de fluctuations sont visibles sur le profil en  $x/D = 16$ , situés en  $y/D \approx 2.5$  et en  $y/D \approx 5$ . De manière générale, ces 2 premiers calculs présentent des niveaux de fluctuations scalaires plus importants, même en champ lointain, où l'on voit que le modèle de Smagorinsky semble être le moins dissipatif et produit donc des niveaux de fluctuations scalaires les plus importants. Il s'en suit le second calcul NR-Mesh1-WALE puis le dernier calcul NR-Mesh2-WALE ; finalement, il semblerait que le dernier calcul NR-Mesh2-WALE conduise à une homogénéisation plus rapide de l'écoulement. Il est peu probable que cela soit dû au maillage, en revanche, il est possible que l'utilisation du modèle de Yoshizawa puisse expliquer ce phénomène.



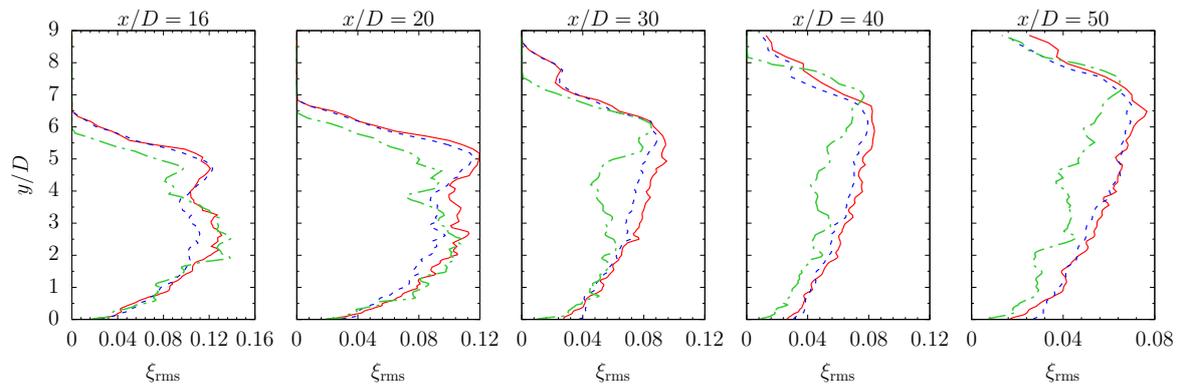
**FIG. 5.24** – Champs moyens du scalaire passif  $\{\tilde{\xi}\}$  sur le plan médian XY, pour les 3 calculs (a) NR-Mesh1-Smago, (b) NR-Mesh1-WALE et (c) NR-Mesh2-WALE.



**FIG. 5.25** – Profils moyens du scalaire passif  $\{\tilde{\xi}\}$  à  $z/D = 0$  et en différentes positions  $x/D$ , pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago (rouge, ligne continue), NR-Mesh1-WALE (bleu, ligne tiretée) et NR-Mesh2-WALE (vert, ligne point-tiretée).



**FIG. 5.26** – Champs des RMS des fluctuations résolues du scalaire passif  $\xi_{\text{rms}}$  sur le plan médian XY, pour les 3 calculs (a) NR-Mesh1-Smago, (b) NR-Mesh1-WALE et (c) NR-Mesh2-WALE.



**FIG. 5.27** – Profils des RMS des fluctuations résolues du scalaire passif  $\xi_{\text{rms}}$  à  $z/D = 0$  et en différentes positions  $x/D$ , pour les 3 calculs NR-Mesh1-Smago (rouge, ligne continue), NR-Mesh1-WALE (bleu, ligne tiretée) et NR-Mesh2-WALE (vert, ligne point-tiretée).

## 5.4.4.4 Pression et frottement pariétal

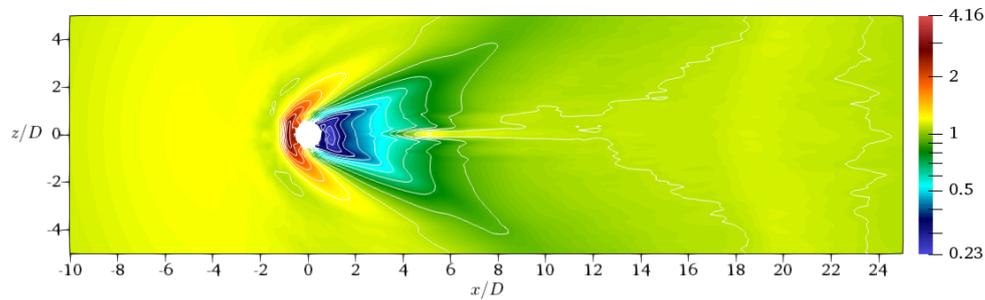


FIG. 5.28 – Champ pariétal de la pression moyenne adimensionnée  $\langle \bar{p} \rangle / p_\infty$  avec 20 iso-lignes uniformément réparties (NR-Mesh2-WALE).

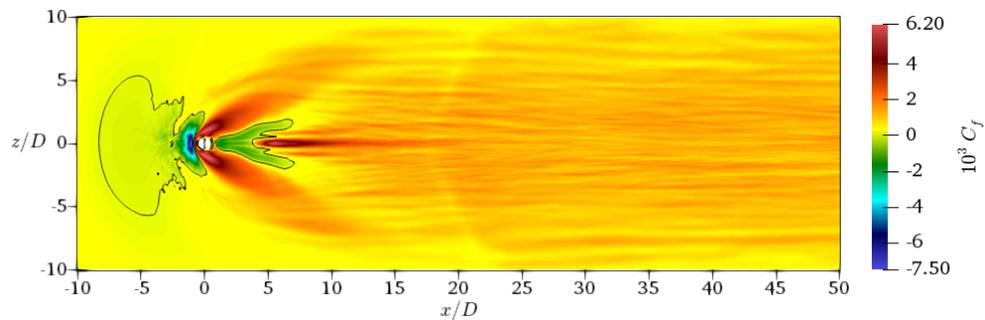
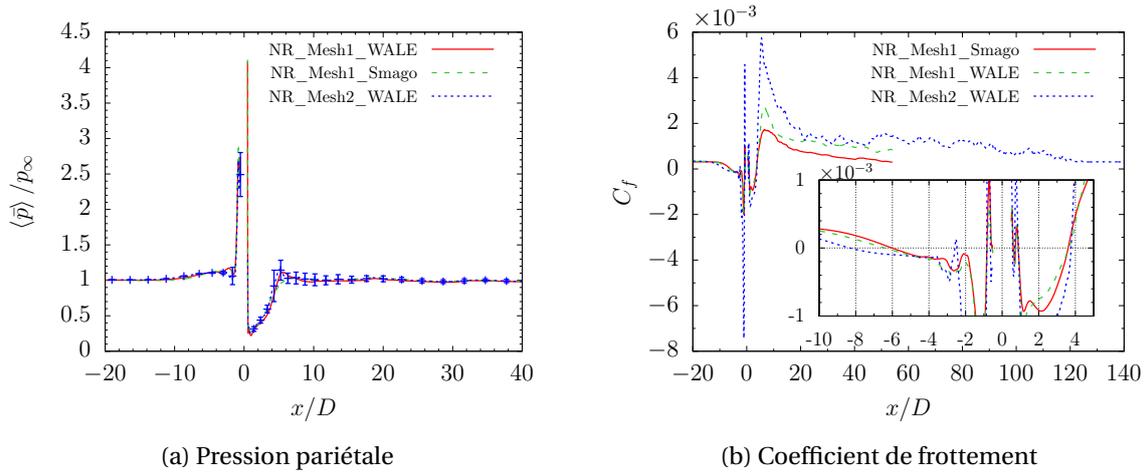


FIG. 5.29 – Champ du coefficient de frottement  $10^3 \times C_f$  avec son iso-ligne (noire) à  $C_f = 0$  (NR-Mesh2-WALE).

Les Figs. 5.28 et 5.30(a) montrent respectivement le champ et les profils de pression pariétale moyenne. La première permet d'identifier la région de forte compression par le choc courbé se créant en amont du jet à  $x/D \approx -1$ . Elle est par ailleurs relativement étroite son extension se réduit à environ  $z = 6D$  de largeur. La dépression qui se crée en aval du jet est en revanche très étendue et se fait sentir jusqu'à  $x/D = 4-6$  (cf. Fig. 5.30(a)). C'est dans cette zone que se crée un gradient adverse de pression qui va former le point source. La largeur de cette zone de dépression est plus importante ( $z = +6D$ ) que celle de la zone de compression du choc courbé. Comme discuté précédemment, la pression est très rapidement rétablie à partir de  $x/D \approx 10$ , pour atteindre la pression de l'écoulement principal  $p_\infty$  [87]. Ceci est mis en évidence sur la Fig. 5.30(a) qui montre par ailleurs, des fluctuations rms de pression pariétale quasi-nulle à partir de  $x/D \approx 15$ . On voit ainsi que la présence du choc ne se fait sentir qu'en champ proche et c'est pourquoi nous considérerons que, pour le cas réactif, la combustion se fera à pression constante car aucun confinement n'est présent pour augmenter la pression soit par (i) un train de choc, soit par (ii) l'expansion des gaz dûe au dégagement de chaleur. Enfin, les profils de pression moyenne pariétale diffèrent très peu entre les 3 calculs inertes réalisés.

	NR-Mesh1-Smago	NR-Mesh1-WALE	NR-Mesh2-Smago
$x_d/D$	-6	-6.5	-8.3
$x_r/D$	3.6	3.6	3.8

TAB. 5.4 – Positions des points de décollement  $x_d/D$  et de recollement  $x_r/D$ , en amont et aval du jet, pour les 3 calculs inertes.



**FIG. 5.30** – Profils (a) de la pression pariétale moyenne, avec barres d’erreurs, adimensionnée  $\langle \bar{p} \rangle / p_\infty$  et (b) du coefficient de frottement  $C_f$  passant par la ligne centrale à l’injection  $(y/D, z/D) = (0, 0)$ .

Les Figs. 5.29 et 5.30(b) présentent cette fois-ci le champ et les profils du coefficient de frottement  $C_f$  défini par

$$C_f = \frac{\tau_w}{\rho_\infty u_\infty^2} \quad (5.11)$$

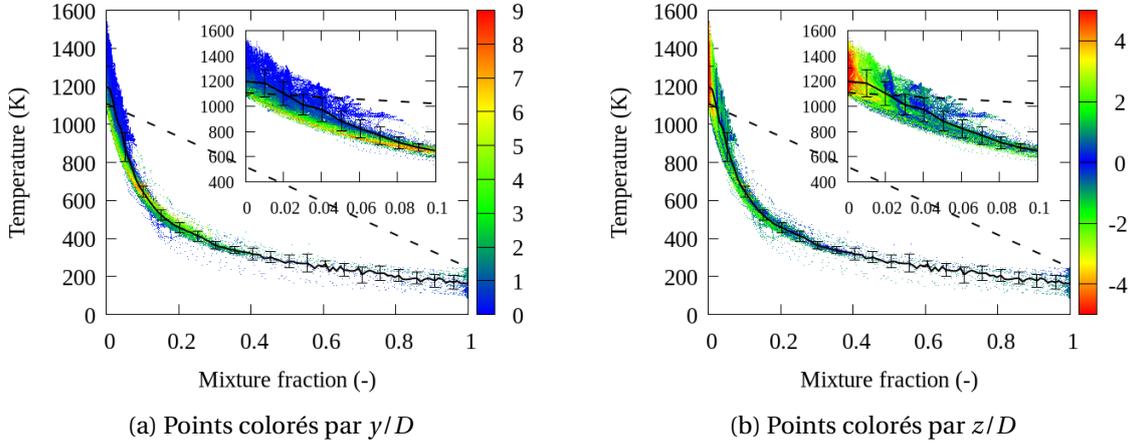
La Fig. 5.29 indique que le frottement pariétal est le plus important de part et d’autre du jet où la vitesse de l’écoulement devient même supersonique en proche paroi et résulte de l’accélération de l’écoulement principal qui doit contourner le jet, comme observé par CHAI *et al.* [44]. L’iso-ligne à  $C_f = 0$  permet à ce niveau d’identifier la limite des zones de recirculation qui provient du gradient adverse de pression. Nous voyons ainsi qu’une augmentation de pression d’un facteur 3, à travers le choc courbé, provoque le décollement de la couche limite [54] et crée une zone de recirculation en amont du jet située en  $x_d/D$ , alors qu’en aval du jet, le point source recolle en  $x_r/D$ . Ces positions de décollement et de recollement sont récapitulées Tab. 5.4 qui met en évidence une longueur de la zone de recirculation amont plus grande pour le dernier calcul NR-Mesh2-WALE. Cependant, pour les 3 calculs, les longueurs de recollement sont sensiblement identiques. Les écarts les plus importants apparaissent sur les amplitudes du frottement pariétal. En effet, le dernier calcul conduit à des frottements plus importants (en valeur absolue), en aval de l’injection, ce qui coïncide avec les profils de vitesse adimensionnés en unité de paroi, Fig. 5.23. Ces derniers semblaient montrer une sous-estimation importante de la vitesse de frottement  $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_w}$ , et donc une sur-estimation de la vitesse adimensionnée  $u^+ = u / u_\tau$ , pour le calcul NR-Mesh1-Smago et une sous-estimation modérée avec le calcul NR-Mesh1-WALE. C’est donc bien le dernier calcul qui permet de restituer convenablement un profil de couche limite turbulente avec un niveau de frottement pariétal plus important en aval de l’injection. Par ailleurs, les 2 premiers calculs confirment l’impact du modèle de viscosité SGS WALE adapté à la paroi pour le même maillage Mesh1.

## 5.4.5 Étude a priori du mélange et possible allumage

### 5.4.5.1 Température du mélange « frais »

De nombreuses études portent, pour le cas non réactif, sur la caractérisation aérodynamique globale du JISCF, avec l’étude de la structure de l’écoulement, des profils de vitesse (ou d’un scalaire passif), de la dynamique du jet, etc. En revanche, il semblerait qu’aucune analyse du champ de température ne soit fournie dans la littérature. C’est pourquoi, cette partie sera consacrée à la caractérisation de la température du mélange « frais » (imbrûlé ou *unburnt*) qui est essentielle pour l’étude de l’écoulement réactif, comme nous le verrons § 7 « LES réactive du JISCF basée sur le modèle PSR » où

l'auto-allumage du mélange est possible. Ce dernier est extrêmement dépendant de la température du mélange et, suivant différentes valeurs de  $J$ , GAMBA et MUNGAL [71] ont montré que la stabilisation de la zone réactive pouvait se faire dans différentes régions de l'écoulement : en amont ou en aval de l'injection, dans la couche de mélange, mais surtout en proche paroi où la réaction est la plus intense. C'est pourquoi nous nous intéresserons plutôt à la cartographie de température mais aussi à celle de composition au niveau de la paroi.



**FIG. 5.31** – Scatterplots à  $t^* = 150$  de la température  $\tilde{T}$  du mélange en fonction de la fraction de mélange  $\tilde{\xi}$  dans les plans  $x/D \in \{0, 25, 50, 100\}$  (non distingués sur les graphiques), ainsi que sa moyenne conditionnée  $\langle \tilde{T} | \tilde{\xi}^* \rangle$  (ligne noire) et ses écarts-type (barres d'erreurs). Comparaison avec le modèle de mélange pur (4.18) :  $T_{\text{mix}}^u(\xi) = \xi T_F^{\text{fuel}} + (1 - \xi) T_O^{\text{ox}}$  (ligne en pointillée). Calcul NR-Mesh2-WALE.

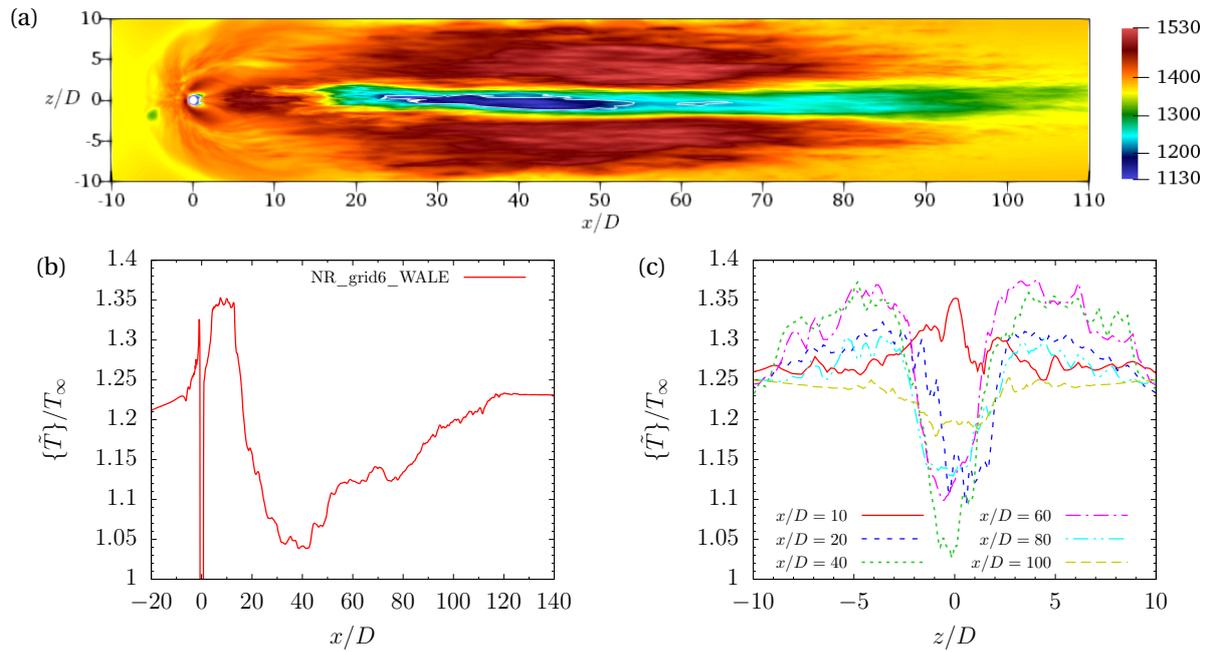
Ainsi, la Fig. 5.31 montre que le modèle linéaire de mélange pur pour la température, obtenu par (4.18) :

$$T_{\text{mix}}^u(\xi) = \xi T_F^{\text{fuel}} + (1 - \xi) T_O^{\text{ox}}$$

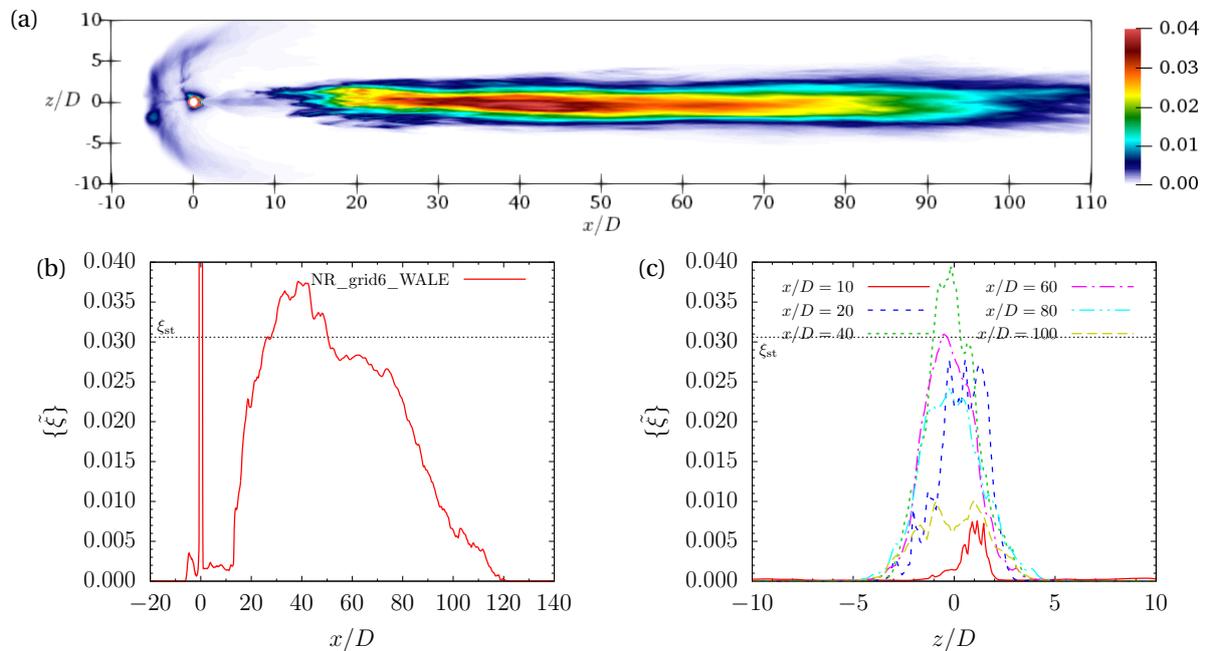
avec  $(T_F^{\text{fuel}}, T_O^{\text{ox}}) = (T_{\text{jet}}, T_{\infty}) = (248, 1108)$  K, n'est clairement pas valide dans nos conditions d'écoulement. En effet, en  $\tilde{\xi} = 1$ , le jet subit une détente très importante, par conséquent sa température diminue, il s'en suit la recompression par le disque de Mach où la température augmente. Dans le courant oxydant ( $\tilde{\xi} = 0$ ) celui-ci est d'une part, comprimé via le choc courbé et d'autre part, échauffé par le frottement visqueux à la paroi ( $y/D = 0$ ). Cependant, les écarts au modèle de mélange (4.18) les plus significatifs ont lieu pour des valeurs de la fraction de mélange comprises entre 0.06–1 environ. Les phénomènes de compression, de détente et de frottement visqueux n'expliquent pas nécessairement ces écarts. En revanche, les hypothèses vues § 4.2.1, notamment celles de stationnarité, d'un nombre de Mach suffisamment faible et d'un mélange gazeux calorifiquement parfait, ne sont clairement pas valides dans nos conditions. Effectivement, les chaleurs spécifiques des courants oxydant et combustible sont très différentes, et respectivement égaux à  $c_{p,\infty} \approx 1360$  J/kg/K et  $c_{p,\text{jet}} \approx 14\,050$  J/kg/K ce qui suffit à expliquer ces écarts.

Par ailleurs, on voit qu'à la paroi en champ lointain, le coefficient de frottement est quasi-uniforme dans la direction transverse  $z$ . Cependant, de part et d'autre du jet ( $|z/D| > \pm 5$ ), la température moyenne est plus importante car le combustible froid n'est pas transporté jusque dans ces régions. On remarque ainsi, Figs. 5.32(c) et 5.32 que la température augmente jusqu'à atteindre un maximum entre  $x/D = 40$ –160, puis diminue en s'éloignant encore de l'injection. Au contraire, dans le plan médian, cf. Fig. 5.33, le combustible froid est ramené jusqu'à la paroi par les structures cohérentes à grande échelle qui se développent en aval du jet, créant ainsi un sillage de jet froid à même la paroi. Dans ce sillage, Fig. 5.32(b), la température moyenne diminue jusqu'à atteindre un minimum en  $x/D \approx 40$ , puis augmente par frottement visqueux et réduction de la teneur en combustible froid.

Ces cartographies de la composition (suivie par le biais de la fraction de mélange) et de la température à la paroi vont être décisives pour décrire la topologie de l'écoulement réactif. C'est pourquoi,



**FIG. 5.32** – (a) Champ pariétal de température moyenne  $\{\tilde{T}\}$  (en K) : champ ré-échelonné de 180 K à 1130 K pour la température minimale (localisée à l’injection uniquement). Profils pariétaux (b) longitudinal (en  $z/D = 0$ ) et (c) transversaux de la température moyenne adimensionnées (NR-Mesh2-WALE).



**FIG. 5.33** – (a) Champ pariétal de la fraction de mélange moyenne  $\{\tilde{\xi}\}$  : champ ré-échelonné de 1 à 0.04 pour la valeur maximale (localisée à l’injection uniquement). Profils pariétaux (b) longitudinal (en  $z/D = 0$ ) et (c) transversaux de la fraction de mélange moyenne (NR-Mesh2-WALE).

il pourrait être utile d'établir un modèle de mélange pour la température des gaz frais. Pour cela la moyenne et l'écart-type de la température conditionnée par la fraction de mélange sont calculés et présentés sur la Fig. 5.31. L'écart-type montre des variations relativement faibles, par rapport à la valeur moyenne et l'écart de température des 2 courants, par conséquent, nous supposons que la seule connaissance de la fraction de mélange  $\xi$  peut permettre de décrire l'évolution de la température du mélange frais. Ainsi, une interpolation polynomiale de degré 6 est effectuée et conduit à l'expression suivante

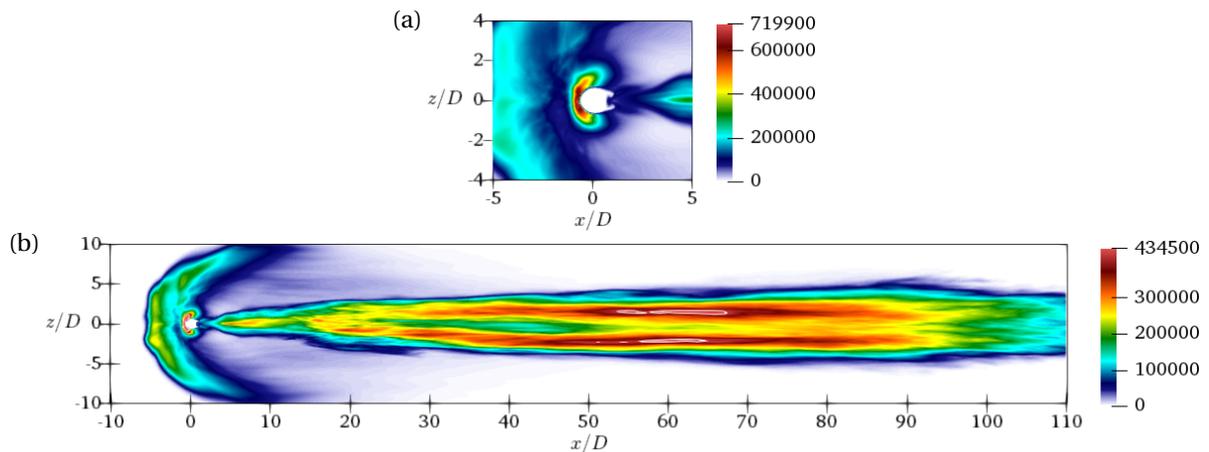
$$T_{\text{mix}}^u(\xi) = a_{T0} + a_{T1}\xi + a_{T2}\xi^2 + a_{T3}\xi^3 + a_{T4}\xi^4 + a_{T5}\xi^5 + a_{T6}\xi^6 \quad (5.12)$$

$a_{T0}$	$a_{T1}$	$a_{T2}$	$a_{T3}$	$a_{T4}$	$a_{T5}$	$a_{T6}$
1244.3	-9075.3	41 500.9	-104 798	144 760	-102 522	29 064

avec  $a_{Tk}$ , les coefficients du polynôme (en K)  $\forall k \in \llbracket 0, 6 \rrbracket$ . Cette expression nous permettra ainsi d'initier des calculs préliminaires réactifs pour différentes valeurs de la composition décrite par la fraction de mélange (§ 7.5.2 « Études préliminaires : auto-allumage versus propagation »). Il est cependant important de rappeler que la cartographie de la température pariétale, ou en proche paroi, pourrait être très différente si une condition de paroi isotherme était retenue. C'est pourquoi, des études plus approfondies de l'influence de la physique de paroi retenue (adiabatique, isotherme, rugosité, ...) sur la topologie de l'écoulement (inerte et réactif) mériteraient d'être réalisées.

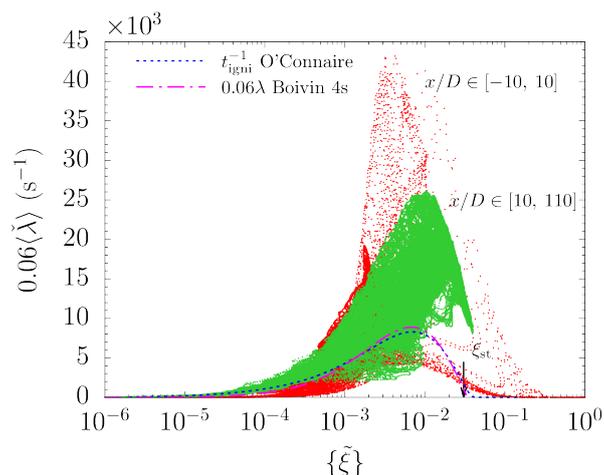
#### 5.4.5.2 Réactivité du mélange

BOIVIN *et al.* [17, 20] ont introduit la réactivité (ou taux de réactivité)  $\lambda$  (D.8) qui est la valeur propre réelle et positive de la Jacobienne du système différentiel basé sur les évolutions des concentrations de H, O et OH. Cette grandeur caractérise notamment l'étape de branchement de la réaction entre  $\text{H}_2$  et  $\text{O}_2$ , pour lequel la 2<sup>e</sup> limite d'explosion est atteinte. Il est ainsi démontré, Fig. 5.35, qu'elle est inversement proportionnelle au délai d'auto-allumage, de l'ordre de  $t_{\text{igni}} \approx (0.06\lambda)^{-1}$ , et peut être très facilement estimée à partir, seulement, des concentrations locales de  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$  ainsi que des champs de température et de pression.



**FIG. 5.34** – Champ pariétal de la réactivité moyenne  $\langle \lambda \rangle$  (en  $\text{s}^{-1}$ ). (a) Zoom sur l'injection à la paroi et son échelle de variation. (b) Vue globale sur la paroi, avec l'échelle de variation correspondant au champ en aval de l'injection. L'iso-contour (ligne blanche) correspond à la valeur à  $0.95 \langle \lambda \rangle_{\text{max}}$ .

La Fig. 5.34(b) montre le champ pariétal de la réactivité moyenne  $\langle \lambda \rangle$  qui permet ainsi de voir les zones de réactivité potentielle et, plus particulièrement, les zones susceptibles de conduire à l'auto-allumage du mélange. Ainsi, on voit qu'en aval de l'injection, les régions les plus réactives sont situées de part et d'autre du sillage du jet, signalées par l'iso-contour à  $0.95 \langle \lambda \rangle_{\text{max}}$ , localisées autour



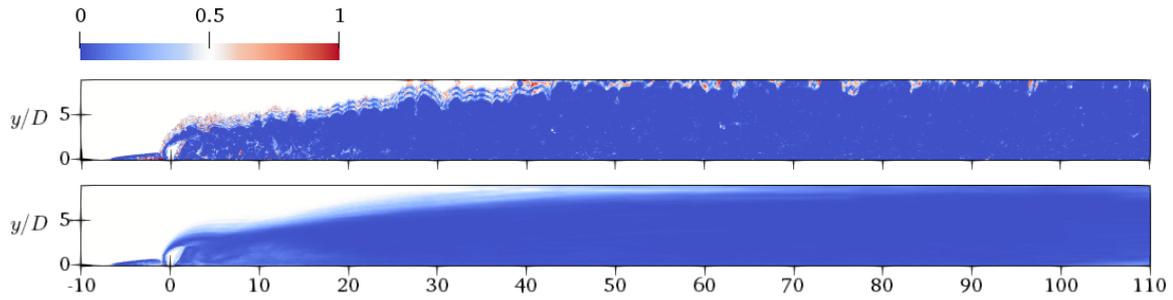
**FIG. 5.35** – Scatterplots de la réactivité en fonction de la fraction de mélange, issus du champ pariétal moyen, au niveau de l’injection, pour  $x/D \in [-10, 10]$ , et en aval de l’injection  $x/D > 10$ . Comparaison avec un calcul 0D de PSR (lignes) utilisant le schéma de Ó CONAIRE *et al.* [221] (21 étapes + 9 espèces) et la réactivité  $\lambda$  (D.8) BOIVIN *et al.* [19].

de la position  $x/D = 60$ . La valeur maximale de la réactivité est atteinte en  $\lambda_{\max} = 434\,500\text{ s}^{-1}$ . On pourrait s’attendre à ce que l’allumage du mélange s’opère à  $t_{\text{igni}} = 38.3\ \mu\text{s} \approx 25D/u_{\infty}$ . Cependant, il s’avère, qu’en amont direct de l’injection, la réactivité est plus importante, comme le confirme les Figs. 5.34(a) et 5.35, avec une estimation du délai d’auto-allumage à  $t_{\text{igni}} = 25.1\ \mu\text{s} \approx 16.5D/u_{\infty}$ . Néanmoins, d’après les travaux de GAMBA et MUNGAL [71] — conduits pour des valeurs de  $J$  comprises entre 1 et 3 — et les observations de VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202], il semble que cette zone ne permette pas l’allumage et la stabilisation de la flamme. Bien que cette zone corresponde à une zone de recirculation, la ségrégation y est extrêmement forte et ne permet probablement pas l’auto-allumage du mélange à ce niveau. En réalité, il serait nécessaire et intéressant de comparer le nombre de Damköhler  $Da = \tau_{\text{res}}/\tau_{\text{igni}}$ , basé sur les temps de résidence  $\tau_{\text{res}}$  (estimé par son équation de transport, non résolue ici) et le temps d’auto-allumage  $\tau_{\text{igni}}$  comme proposé par GOMET *et al.* [81].

La Fig. 5.35 montre par ailleurs que la fraction de mélange la plus réactive  $\xi_{\text{mr}}$  (*Most Reactive*) n’est a priori pas localisée à la fraction de mélange stœchiométrique  $\xi_{\text{st}}$  mais à une valeur plus faible  $\xi_{\text{mr}} \approx 0.01$  en champ lointain et  $\xi_{\text{mr}} \approx 0.003$  en amont de l’injection. Ce décalage s’explique par la différence de température importante qui existe entre les deux courants (oxydant et combustible) qui déplace l’état le plus réactif vers le courant le plus chaud, ici le courant oxydant (vers  $\xi \rightarrow 0$ ). De plus, cette figure présente le résultat d’un calcul préliminaire de réacteur parfaitement mélangé (PSR) qui permet de déterminer le délai d’auto-allumage pour différentes valeurs de la richesse globale  $\Phi = ((1 - \xi_{\text{st}})/\xi_{\text{st}})(\xi/(1 - \xi))$  (4.9). Ce calcul est effectué pour un mélange isobare à  $p_{\infty}$ , à la température du mélange  $T_{\text{mix}}^{\text{u}}(\xi)$  vérifiant (5.12) et utilisant le mécanisme cinétique détaillé de Ó CONAIRE *et al.* [221]. Le délai d’auto-allumage est comparé avec la réactivité  $\lambda$ , estimée à partir de l’état initial (richesse, température, pression) du mélange, et démontre bien qu’elle est inversement proportionnelle au temps d’auto-allumage. Nous voyons d’autre part que l’évolution de ce délai, estimé via ces calculs préliminaires, est qualitativement similaire à celle obtenue via le champ moyen, notamment en champ lointain.

### 5.4.5.3 Indice de prémélange

Dans le cadre des écoulements turbulents réactifs, le combustible et l’oxydant peuvent localement, et à certains instants, avoir le temps de se mélanger pour ainsi former des poches de gaz frais prémélangés, partiellement prémélangés et non-prémélangés. Lorsque la réaction a lieu, ces poches



**FIG. 5.36** – Champs instantanés (haut) et moyens (bas) de l'indice de prémélange  $\zeta_P$  dans le cas *non réactif*, sur le plan XY médian en  $z/D = 0$  Calcul NR-Mesh2-WALE.

vont former des flammes de prémélange ou de diffusion susceptibles de se développer suivant des régimes de combustion variés. Afin de mieux caractériser les zones réactives, YAMASHITA *et al.* [216] introduisent l'indice de flamme (*flame index*), aussi appelé *indice de Takeno*, qui peut se normaliser par

$$\zeta_P = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\vec{\nabla} Y_F \cdot \vec{\nabla} Y_O}{\|\vec{\nabla} Y_F\| \|\vec{\nabla} Y_O\| + \epsilon} \right) \quad (5.13)$$

Cet indice évalue donc l'alignement des gradients de concentration du combustible ( $F$ ) et d'oxydant ( $O$ ) et peut être assimilé à une *fraction ou indice de prémélange* permettant de distinguer les zones non-prémélangées ( $\zeta_P = 0$ , gradients orientés dans des sens opposés), des zones prémélangées ( $\zeta_P = 1$ , gradients orientés dans le même sens).

Cependant, il faut reconnaître que la seule considération de l'indice de Takeno n'est pas suffisante pour décrire et analyser le mécanisme d'allumage dans son ensemble. Il doit être analysé simultanément au champ de température, du taux de dégagement de chaleur, du taux de dissipation scalaire, du nombre de Damköhler, etc., comme cela se fera au § 7 « LES réactive du JISCF basée sur le modèle PSR ». Par ailleurs, cet indice de prémélange n'apporte pas la moindre information quant à la réelle activité chimique du milieu considéré — aucun terme chimique n'est présent — c'est pourquoi certains l'associent avec un conditionnement ou une pondération avec un taux de dégagement de chaleur comme QUINLAN *et al.* [170]. De plus, même avec des conditions d'écoulements réactifs relativement simple, il est possible de montrer qu'il n'existe pas à ce jour de définition satisfaisante pour un tel indice de prémélange dans la littérature. Il existe effectivement des situations d'écoulement assez simples pour lesquels la définition (5.13) ne se comporte pas de manière satisfaisante, c'est le cas par exemple des flammes se propageant dans un milieu prémélangé dans lequel des gradients de richesse sont présents. Néanmoins, malgré ces imperfections, cet indice a été et reste largement utilisé. De plus, la Fig. 5.36 met en évidence que dans le cas inerte, l'alignement des gradients de concentration n'est jamais réalisée en instantanée ou en moyenne. Cependant, nous verrons que dans le cas réactif, la réaction chimique peut induire l'alignement des gradients, permettant de démontrer la présence de « flamme ». DOMINGO *et al.* [51] ont montré que son comportement était satisfaisant pour décrire des flammes partiellement prémélangées décrochées dans des conditions d'injection séparés du combustible et de l'oxydant et éventuellement dans des conditions diphasiques.

## 5.5 Conclusions

Trois simulations aux grandes échelles 3D inertes ont été réalisées sur la configuration d'un jet pariétal se développant dans un écoulement supersonique (JISCF, *Jet In Supersonic Cross-Flow*) à  $Ma_\infty = 2$ . Les 2 premières ont été exécutées avec le maillage Mesh1, sous-résolu en paroi, et utilisant les modèles de viscosité de sous-maille de Smagorinsky (classique) et WALE ; la dernière simulation

a été quant à elle réalisée avec le maillage Mesh2, résolu en paroi, avec le modèle de viscosité WALE couplé au modèle de Yoshizawa pour le terme isotrope du tenseur de viscosité SGS.

Ces simulations ont tout d'abord permis de retrouver *qualitativement* les structures de l'écoulement instantané, de l'écoulement moyen et fluctuant pour les champs de vitesse, du scalaire, de pression et du coefficient de frottement comme décrit précédemment dans la littérature, notamment par CHAI *et al.* [44], KAWAI et LELE [105]. Le rôle primordial des structures cohérentes 3D se développant à grandes et à petites échelles a été mis en évidence dans le mécanisme de mélange entre le courant combustible et oxydant. Par ailleurs, il semble que l'absence de confinement joue un rôle non négligeable sur la dissipation relativement rapide de ces structures. L'effet du modèle de viscosité de sous-maille a été ensuite étudié et il a été montré qu'il avait peu d'impact sur le champ de vitesse et du scalaire, particulièrement en champ proche. En revanche, en champ lointain, lorsque l'écoulement tend vers un écoulement de couche limite turbulente, les effets sont plus importants et se traduisent en partie par une sous-estimation significative du frottement pariétal. C'est en champ lointain qu'a été mise en évidence l'importance de retenir (i) un modèle de viscosité de sous-maille adapté aux écoulements pariétaux et (ii) un maillage suffisamment résolu à la paroi si aucun modèle de paroi n'est utilisé.

Finalement, la dernière simulation a permis d'établir une nouvelle fois le rôle essentiel des structures tourbillonnaires dans l'entraînement du combustible vers la paroi, loin en aval de l'injection, créant une traînée de combustible au niveau de la paroi et délimité par la largeur du sillage du jet. De plus, une représentation polynomiale de la température du mélange frais a été introduite afin d'étudier ultérieurement l'écoulement réactif à l'aide de la seule variable de mélange. Enfin, une estimation de la zone ainsi que du délai potentiel d'auto-allumage du mélange en proche paroi a été déterminée à l'aide de la réactivité  $\lambda$  introduite par BOIVIN *et al.* [20].



## Chapitre 6

# Modélisation de la variance scalaire de sous-maille

Ce chapitre est consacré à l'étude du mélange scalaire avec la modélisation des fluctuations de composition à l'échelle non-résolue. Les travaux présentés ici ont fait l'objet des communications suivantes :

- TECHER, A., LEHNASCH, G., MURA, A. et MOULE, Y. « Large Eddy Simulations of Combustion in a Supersonic Mach 2 Transverse Flow ». *20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference* (2015).
- TECHER, A., MOULE, Y., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Mixing of a fuel jet in a supersonic cross-flow : estimation of subgrid-scale scalar fluctuations ». *AIAA Journal* (2017).

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Équation pour la variance de sous-maille d'un scalaire passif</b>	<b>108</b>
<b>6.2</b>	<b>Modélisation des termes de sous-maille pour le scalaire passif</b>	<b>111</b>
6.2.1	Flux de masse de sous-maille du scalaire	111
6.2.2	Taux de dissipation scalaire	111
<b>6.3</b>	<b>Récapitulatif des équations de transport fermées</b>	<b>111</b>
6.3.1	Modèle I : équation de transport pour la variance de sous-maille $\tilde{V}_\xi$	112
6.3.2	Modèle II : variance SGS calculée à partir du scalaire au carré filtré $\tilde{\xi}^2$	112
6.3.3	Modèle III : variance SGS calculée à partir de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi$	113
<b>6.4</b>	<b>Méthodes de reconstruction de la variance de sous-maille</b>	<b>113</b>
<b>6.5</b>	<b>Étude préliminaire des différents modèles de variance de sous-maille</b>	<b>113</b>
<b>6.6</b>	<b>Paramètres des simulations</b>	<b>115</b>
<b>6.7</b>	<b>Résultats des simulations</b>	<b>116</b>
6.7.1	Erreurs associées à l'évaluation du scalaire filtré au carré $\tilde{\xi}^2$	116
6.7.2	Analyse des profils des variances scalaires : 1 <sup>re</sup> méthode de reconstruction	119
6.7.3	Analyse des profils des variances scalaires : 2 <sup>e</sup> méthode de reconstruction	126
<b>6.8</b>	<b>Conclusions</b>	<b>128</b>

---

Afin de caractériser le mélange entre un combustible et un oxydant (par exemple, dans le cas d'une flamme de diffusion), il est primordial d'introduire la fraction de mélange  $\xi$  qui est un scalaire passif normalisé, conservé et donc, non modifié par la réaction chimique. Cette quantité permet d'évaluer le degré de mélange entre le courant combustible (où  $\xi = 1$ ) et oxydant (où  $\xi = 0$ ). Ce scalaire permet ainsi, *sous certaines hypothèses*, de décrire la composition à l'aide de cette seule variable (§ 4.2.1 « [Scalaire passif et fraction de mélange](#) »).

Cette partie va s'intéresser au cas où le système est constitué de 2 entrées : une pour le combustible, l'autre pour l'oxydant ; l'extension à plusieurs entrées a été récemment étudiée par GOMET *et al.*

[80]. Plus particulièrement, du point de vue aérodynamique, on étudiera le mélange scalaire avec la variance de sous-maille (SGS) de la fraction de mélange  $\xi$

$$\tilde{V}_\xi = \overline{\xi^2} - \tilde{\xi}^2 \in [0, \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})] \quad (6.1)$$

nécessaire afin d'estimer les fluctuations de composition à l'échelle non-résolue et ainsi pouvoir restituer le plus fidèlement possible la variance statistique totale (§ 3.7.1.2, Éq. 3.67 ou Éq. 6.4).

Du point de vue de la combustion (non-prémélangée), ces fluctuations de composition en sous-maille engendrent des inhomogénéités de richesse à l'échelle non-résolue qu'il est essentiel de décrire compte tenu de la non-linéarité du taux de réaction chimique à la composition; et donc, par extension à la fraction de mélange. En général, pour les écoulements réactifs, il est préférable d'utiliser une expression normalisée de la variance en introduisant le taux (ou facteur) de ségrégation

$$S_\xi = \frac{\tilde{V}_\xi}{\tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})} \in [0, 1] \mid \tilde{\xi} \in ]0, 1[ \quad (6.2)$$

qui quantifie la bimodalité de la fonction de densité de probabilité (PDF) de la fraction de mélange à l'échelle de la sous-maille. Dans de nombreuses situations, telles que par exemple, les flammes détachées ou liftées (*lifted*) turbulentes non-prémélangées, les niveaux de variance SGS de la fraction de mélange peuvent affecter de manière importante l'emplacement de la zone de stabilisation de la flamme et donc la hauteur du détachement (*lift-off*) associées. L'estimation et la modélisation de cette dernière apparaît donc comme une étape clef, que ce soit pour des modèles de flammelette [16, 154] ou de réacteurs agités [21, 145]. L'objectif de ce chapitre est d'examiner en détails cet aspect critique de la modélisation.

Par la suite, 3 modélisations différentes de la variance scalaire de sous-maille  $\tilde{V}_\xi$  seront présentées; pour 2 modèles de viscosité de sous-maille  $\mu_{\text{sgs}}$ : le modèle de Smagorinsky (Éq. 3.35, [182]) et le modèle WALE (Éq. 3.37, [149]); ainsi que 2 méthodes de reconstruction de la variance de sous-maille. L'utilisation de 2 modèles de viscosité de sous-maille a pour but d'essayer d'éviter toute analyse et conclusion biaisée qui pourrait être établie par l'utilisation d'une seule fermeture pour la viscosité de sous-maille. Le choix du Smagorinsky et du WALE est tout à fait arbitraire, il est seulement guidé par le fait que ce sont des fermetures classiques largement utilisées dans la communauté. Cette étude sera basée sur des analyses a posteriori de données de simulation LES non-réactives pour la configuration canonique de jet pariétal transverse à un écoulement supersonique (JISCF) présentée § 5 « JISCF : analyse générale de l'écoulement inerte »; cette dernière est particulièrement représentative des conditions rencontrées dans les *scramjets*. Étant donné que (i) la topologie de cet écoulement est complexe et diffère énormément des cas de simulation académique (THI [4, 102], flamme jets [111, 199]) déjà effectués pour des études similaires et que (ii) les contraintes liées à une restitution fidèle des structures à grandes échelles imposent un maillage très fin; il convient de reconnaître que ceci n'est pas compatible avec une analyse systématique de sensibilité aux maillages. En effet, cette dernière est couramment effectuée dans la littérature afin d'étudier la dépendance des résultats statistiques en fonction du niveau de résolution, voir par exemple KEMENOV *et al.* [111]. Un seul maillage sera utilisé pour conduire l'analyse. Une étude détaillée de l'estimation de la variance scalaire SGS sera ensuite conduite avec un résumé des principaux résultats obtenus; enfin, quelques conseils et recommandations pour des travaux futurs seront fournis.

## 6.1 Équation pour la variance de sous-maille d'un scalaire passif

Les modèles de combustion turbulente non-prémélangée sont souvent basés sur *des hypothèses de flammelette* (§ 4.2.2) qui permettent de lier les variables thermo-chimiques (masse volumique, température, fractions massiques) à la fraction de mélange  $\xi$  et dont l'équation de transport instantané

peut s'écrire

$$(4.12) : \quad \mathcal{L}_i(\xi) = \frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi}{\partial x_i} + \frac{\partial J_{\xi,i}}{\partial x_i} = 0 \quad (6.3)$$

avec

- $\mathcal{L}_i$ , l'opérateur *des termes sources / puits* pour la forme conservative instantanée, représentée par l'indice  $i$  ;
- $J_{\xi,i} = -\rho D \partial_i \xi$ , le flux de masse surfacique du scalaire  $\xi$  dans la  $i^e$  direction ;
- $D$ , le coefficient de diffusion du scalaire, pris égal à la diffusivité thermique  $D = \lambda / (\rho c_p)$  en supposant un nombre de *Lewis unitaire* (§ 4.2.1).

Par la suite, dans l'opérateur  $\mathcal{L}$  des termes sources / puits, on indiquera pour plus de clarté, **les termes sources en rouge** et **les termes puits en bleu**.

D'un point de vue statistique, la fraction de mélange instantanée  $\xi$ , peut être associée à sa valeur spatialement filtrée  $\tilde{\xi}$ , qui elle même peut être moyennée temporellement  $\{\tilde{\xi}\}$ , ses fluctuations instantanées  $\xi - \{\tilde{\xi}\}$ , et son erreur quadratique moyenne  $\xi_{\text{rms}} = \sqrt{\xi_\nu}$ , avec  $\xi_\nu$  la variance totale de la fraction de mélange. Rappelons que dans le cadre de la LES, la variance statistique d'un scalaire peut être évaluée par la décomposition suivante (§ 3.7.1.2, Éq. 3.67)

$$\xi_\nu = \{\xi^2\} - \{\xi\}^2 = \underbrace{\frac{\langle \tilde{\rho} \tilde{\xi}^2 \rangle}{\langle \tilde{\rho} \rangle} - \frac{\langle \tilde{\rho} \tilde{\xi} \rangle^2}{\langle \tilde{\rho} \rangle^2}}_{\text{(I) : } \xi_\nu^{\text{res}}} + \underbrace{\frac{\langle \tilde{\rho} (\tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2) \rangle}{\langle \tilde{\rho} \rangle}}_{\text{(II) : } \xi_\nu^{\text{sgs}}} + \underbrace{\quad}_{\text{(III)}} \quad (6.4)$$

avec

- (I) :  $\xi_\nu^{\text{res}}$ , la variance résolue et déterminée par le champ résolu de la variable filtrée.
- (II) :  $\xi_\nu^{\text{sgs}} = \{\tilde{V}_\xi\}$ , la moyenne temporelle de la variance de sous-maille qui doit être modélisée et dépendra donc généralement : du modèle de viscosité de sous-maille, du niveau de résolution du maillage et du modèle pour le taux de dissipation scalaire  $\chi_\xi$ .
- (III) :  $R_\nu = R_{\langle \rho \xi^2 \rangle} - R_{\langle \rho \xi \rangle^2}$ , un terme résiduel défini par

$$R_{\langle \rho \xi^2 \rangle} = \frac{\langle \rho \xi^2 \rangle}{\langle \rho \rangle} - \frac{\langle \tilde{\rho} \tilde{\xi}^2 \rangle}{\langle \tilde{\rho} \rangle}; \quad R_{\langle \rho \xi \rangle^2} = \frac{\langle \rho \xi \rangle^2}{\langle \rho \rangle^2} - \frac{\langle \tilde{\rho} \tilde{\xi} \rangle^2}{\langle \tilde{\rho} \rangle^2} \quad (6.5)$$

Ce terme sera négligé dans notre évaluation de la variance statistique totale.

L'analyse présentée ici se concentrera donc sur l'estimation de la variance de sous-maille instantanée  $\tilde{V}_\xi$  (terme II) mais avant cela, il est nécessaire d'introduire les équations suivantes (cf. Annexe C « *Dérivation des équations de transport pour la variance scalaire de sous-maille* » — pour le développement de ces équations) :

### Équation de transport du scalaire filtré $\tilde{\xi}$

$$(C.2) : \quad \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}) = \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\xi}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{J}_{\xi,i}}{\partial x_i} + \frac{\partial J_{\xi,i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{J}_{\xi,i} - \tilde{J}_{\xi,i}) = 0 \quad (6.6)$$

avec

- $\mathcal{L}_f$ , l'opérateur *des termes sources / puits* pour la forme conservative filtrée, représentée par l'indice  $f$  ;
- $\tilde{J}_{\xi,i} = -\tilde{\rho} \tilde{D} \partial_i \tilde{\xi}$ , le flux de masse moléculaire résolu du scalaire ;
- $J_{\xi,i}^{\text{sgs}} = \tilde{\rho} \tilde{\xi} u_i - \tilde{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_i$ , le flux de masse de sous-maille du scalaire ;
- $(\tilde{J}_{\xi,i} - \tilde{J}_{\xi,i})$ , la partie de sous-maille du transport moléculaire du flux de masse du scalaire. D'après les hypothèses vues au § 3.2, p. 32, concernant les termes de sous-maille :  $\partial_i (\tilde{J}_{\xi,i} - \tilde{J}_{\xi,i}) \approx \tilde{0}$ , *quelque soit le scalaire considéré*, ce terme sera donc négligé par la suite.

**Équation de transport du scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$** 

$$(C.8) : \quad \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\check{\chi}_\xi + 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \quad (6.7)$$

avec

- $\check{\chi}_\xi = \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$ , le taux de dissipation scalaire résolu ;
- $2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$ , un terme lié à la dissipation en sous-maille.

**Équation de transport du scalaire au carré filtré  $\tilde{\xi}^2$** 

$$(C.5) : \quad \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_\xi \quad (6.8)$$

avec  $\widetilde{\chi}_\xi = D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$ , le taux de dissipation scalaire filtré.

**Équation de transport de la variance de sous-maille  $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}^2 - \xi^2$** 

$$(C.11) : \quad \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi) = -2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2\bar{\rho}\chi_\xi^{\text{sgs}} \quad (6.9)$$

avec  $\widetilde{\chi}_\xi - \check{\chi}_\xi = \chi_\xi^{\text{sgs}}$ , le taux de dissipation scalaire de sous-maille.

**Équation de transport de l'écart à la variance maximale  $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$** 

$$(C.14) : \quad \mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi) = 2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_\xi \quad (6.10)$$

Cette grandeur permet aussi de caractériser les fluctuations de sous-maille du scalaire.

**Équation de transport de la variance maximale  $\tilde{V}_\xi^{\text{max}} = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2$** 

$$(6.11) \quad \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi^{\text{max}}) = 2\bar{\rho}\check{\chi}_\xi - 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$$

Il est utile d'introduire cette dernière équation pour les analyses qui vont suivre.

Finalement, les équations présentées ci-dessus permettent d'estimer de plusieurs manières la variance de sous-maille. Ces différentes méthodes ou modèles seront désignés par le :

**Modèle I** qui est le plus simple, le plus classique et qui consiste à transporter simplement l'équation pour la variance de sous-maille (6.9), cette méthode est utilisée dans les références [102, 104, 111] ;

**Modèle II** qui transporte plutôt l'équation pour le scalaire au carré filtré  $\tilde{\xi}^2$  (6.8), la variance de sous-maille est obtenue en soustrayant  $\tilde{\xi}^2$  par  $\xi^2$ , cette méthode est utilisée dans les références [104, 111, 172] ;

**Modèle III** qui transporte l'équation pour l'écart à la variance maximale  $\tilde{\Delta}_\xi$  (6.10), la variance SGS est alors reconstruite en utilisant la définition de  $\tilde{\Delta}_\xi$  :  $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi$ . Cette dernière méthode est considérée comme une nouvelle manière d'estimer de la variance SGS.

Il reste cependant à fermer les termes de sous-maille pour le scalaire passif.

## 6.2 Modélisation des termes de sous-maille pour le scalaire passif

### 6.2.1 Flux de masse de sous-maille du scalaire

Comme vu au § 3.5.4.1, ce terme est généralement fermé en utilisant classiquement *l'hypothèse de type gradient* qui, rappelons-le, s'exprime par

$$(3.46) : \quad J_{\varphi,i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho\varphi u_i} - \overline{\rho}\tilde{\varphi}\tilde{u}_i = \overline{\rho}(\overline{\varphi}\tilde{u}_i - \tilde{\varphi}\tilde{u}_i) = -\overline{\rho}D_{\text{sgs}}\frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial x_i}$$

avec ici  $\varphi \in \{\xi, \xi^2, V_\xi, \Delta_\xi\}$  afin de fermer les équations respectives (6.6, 6.8, 6.9 et 6.10). L'opérateur des termes sources / puits pour la forme filtrée des équations de transport devient équivalent à

$$\mathcal{L}_f(\bullet) = \frac{\partial\overline{\rho}\bullet}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\tilde{u}_i\bullet}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\partial\bullet}{\partial x_i} \right) \quad (6.12)$$

### 6.2.2 Taux de dissipation scalaire

Le taux de dissipation scalaire  $\chi_\xi$  (SDR, *Scalar Dissipation Rate*) est une grandeur importante pour les flammes non-prémélangées, car pour que la réaction ait lieu, il faut d'abord que le mélange se produise à l'échelle moléculaire. Or, le SDR est une grandeur qui permet de mesurer la vitesse à laquelle va s'homogénéiser le mélange à l'échelle moléculaire. Il a été implicitement considéré que le taux de dissipation scalaire filtré  $\widetilde{\chi}_\xi$  se décomposait en un terme résolu  $\check{\chi}_\xi$  et un terme de sous-maille  $\chi_\xi^{\text{sgs}}$  comme suit

$$\widetilde{\chi}_\xi = \check{\chi}_\xi + \chi_\xi^{\text{sgs}} \quad (6.13)$$

La partie de sous-maille qui est donc associée aux mélanges à petite échelle, peut être fermée en utilisant *l'hypothèse ou modèle de relaxation linéaire* (LRM, *Linear Relaxation Model*) [30, 147]. Elle permet donc d'écrire

$$\chi_\xi^{\text{sgs}} = \widetilde{\chi}_\xi - \check{\chi}_\xi = D \frac{\partial\check{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial\check{\xi}}{\partial x_i} - \tilde{D} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} = c_\xi \frac{\tilde{V}_\xi}{\tau_{\text{sgs}}} \quad (6.14)$$

avec

- $c_\xi$ , la constante du modèle de relaxation linéaire, généralement de l'ordre de l'unité<sup>1</sup> ;
- $\tau_{\text{sgs}}$ , une échelle de temps de mélange caractéristique de sous-maille. Elle peut être évaluée par  $\tau_{\text{sgs}} = \Delta^2 / D_{\text{sgs}}$ , dans ce cas, elle correspond à un temps de diffusion à l'échelle de la sous-maille.

**Autres fermetures** Encore une fois, d'autres modèles existent pour fermer : soit, le SDR filtré (6.13), *e.g.* en utilisant une équation de transport similaire à celle développée en RANS (cf. MANTEL et BORGHI [127], MURA et BORGHI [144]) ; soit, le SDR de sous-maille (6.14) (cf. *e.g.* BALARAC *et al.* [5], PIERCE et MOIN [156]) avec classiquement un modèle basé sur la diffusivité de sous-maille qui reprend le SDR résolu et substitue la diffusivité moléculaire par celui de sous-maille. Ce dernier revient en réalité à supposer *l'équilibre local* entre le terme de production et de dissipation pour l'équation de la variance SGS, ce qui permet d'écrire

$$\widetilde{\chi}_\xi = \widetilde{\chi}_\xi^{\text{eq}} = (\tilde{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} \quad (6.15)$$

Ce dernier sera nommé par la suite, le *taux de dissipation scalaire à l'équilibre*.

## 6.3 Récapitulatif des équations de transport fermées

Avec la modélisation des termes non résolus — Éqs. (3.46) et (6.12) à (6.14) — les équations de transport vues au § 6.1 s'écrivent maintenant :

1. Sur la configuration de jet d'air fortement sous-détendu dans de l'air, BUTTAY *et al.* [39] montrent que  $c_\xi \approx 0.7$ .

**Équation de transport du scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$** 

$$(6.7) \implies \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} = -2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi^{\text{eq}} \quad (6.16)$$

**Équation de transport de la variance maximale  $\tilde{V}_\xi^{\text{max}} = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2$** 

$$(6.11) \implies \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi^{\text{max}}) = 2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} = 2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi^{\text{eq}} \quad (6.17)$$

Concernant les autres équations, elles forment les modèles I, II et III précédemment évoqués que nous allons détailler.

**6.3.1 Modèle I : équation de transport pour la variance de sous-maille  $\tilde{V}_\xi$** 

Comme décrit plus haut, la manière la plus simple et standard d'évaluer la variance de sous-maille consiste à résoudre directement son équation de transport [102, 104, 111]

$$(6.9) \implies \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi) = 2\bar{\rho}D_{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2\bar{\rho}c_\xi \frac{\tilde{V}_\xi}{\tau_{\text{sgs}}} \quad (6.18)$$

où rappelons-le,  $\tilde{V}_\xi \in [0, \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})]$ . Cet intervalle de variation peut être utilisé comme critère de réaliabilité du modèle. Les équations présentées ici incluent des termes de production ou de destruction du scalaire considéré, or les scalaires passifs introduits ici sont tous bornés. Ainsi, les limites de variation peuvent permettre de caractériser la justesse d'un modèle. Nous désignerons par « modèle I » et  $\tilde{V}_\xi^I$  l'évaluation de la variance SGS déduite de (6.18).

**Remarque** En utilisant *l'hypothèse d'équilibre local (ou loi d'échelle basée sur le gradient scalaire)* qui suppose l'égalité entre le terme de production et de dissipation, dans l'équation précédente, il est possible d'introduire le modèle algébrique suivant pour la variance SGS

$$\tilde{V}_\xi = c_\xi^{-1} \Delta^2 \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$$

Certains auteurs utilisent alors une approche dynamique pour évaluer la constante de relaxation  $c_\xi$  [4, 156].

**6.3.2 Modèle II : variance SGS calculée à partir du scalaire au carré filtré  $\tilde{\xi}^2$** 

Au lieu de résoudre directement une équation de transport pour la variance SGS  $\tilde{V}_\xi$ , le modèle II est basé sur la résolution de l'équation de transport pour le carré du scalaire filtré  $\tilde{\xi}^2$  [104, 111, 172]

$$(6.8) \implies \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi = -2\bar{\rho}\tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2\bar{\rho}c_\xi \frac{\tilde{V}_\xi}{\tau_{\text{sgs}}} \quad (6.19)$$

avec  $\tilde{\xi}^2 \in [\tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}\tilde{\xi}_{\text{max}}]$  et  $\tilde{\xi}_{\text{max}} = 1$ . Ensuite, la variance SGS est déduite de sa définition (6.1), *i.e.* à partir de la différence  $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$ . Nous désignerons par « modèle II » et  $\tilde{V}_\xi^{\text{II}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$ , cette seconde manière d'évaluer la variance SGS.

### 6.3.3 Modèle III : variance SGS calculée à partir de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi$

Finalement, un nouveau modèle est introduit ici afin d'évaluer la variance SGS de la fraction de mélange. Il est basé sur la résolution de l'équation de transport pour l'écart à la variance maximale  $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{V}_\xi^{\max} - \tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2$

$$(6.10) \implies \mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi) = 2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi = 2\bar{\rho}\tilde{D}\frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i}\frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_i} + 2\bar{\rho}c_\xi\frac{\tilde{V}_\xi}{\tau_{\text{sgs}}} \quad (6.20)$$

avec  $\tilde{\Delta}_\xi \in [0, \tilde{V}_\xi^{\max}]$ . Notons par « modèle III » et  $\tilde{V}_\xi^{\text{III}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi$ , cette troisième nouvelle manière d'évaluer la variance SGS.

## 6.4 Méthodes de reconstruction de la variance de sous-maille

Il convient de souligner ici que la variance SGS calculée à partir des deux derniers modèles II et III, respectivement par  $\tilde{V}_\xi^{\text{II}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$  et  $\tilde{V}_\xi^{\text{III}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi$ , peut être reconstruite suivant 2 procédures bien distinctes suivantes.

**Méth. 1** La fraction de mélange filtrée, obtenue à partir de l'équation de transport (6.6), peut être utilisée après l'avoir élevée au carré afin d'obtenir  $\tilde{\xi}\tilde{\xi} = \tilde{\xi}^2$ . Ceci est la procédure courante et standard utilisée dans la littérature [104, 111] puisque l'équation de transport pour le scalaire filtré est généralement déjà résolue.

**Méth. 2** Une autre possibilité consiste à utiliser la fraction de mélange filtrée élevée au carré  $\tilde{\xi}^2$  issue directement de son équation de transport (6.16). Cette méthode peut être considérée comme plus compliquée car elle nécessite la résolution d'une équation de transport supplémentaire. Nous verrons cependant que l'utilisation de cette équation est particulièrement pertinente dans l'analyse présentée par la suite.

Quelle que soit la procédure retenue, il est important de noter que la variable choisie pour reconstruire la variance SGS à partir de  $\tilde{\xi}^2$  ou  $\tilde{\Delta}_\xi$  — *i.e.* soit (6.6) ou (6.16) — doit être cohérente avec la formulation de la variance SGS présente dans la fermeture du taux de dissipation scalaire (SDR) de sous-maille, modélisée par le modèle de relaxation linéaire (6.14). La manière dont la variance SGS est reconstruite (plus spécifiquement, le choix de la variable utilisée pour la calculer) sera étudiée par la suite au :

§ 6.7.2 pour la première méthode de reconstruction en utilisant (6.6) ; puis au

§ 6.7.3 pour la seconde méthode qui est basée sur la considération de (6.16).

## 6.5 Étude préliminaire des différents modèles de variance de sous-maille

Il est essentiel de remarquer que *ces différentes procédures d'évaluation de la variance SGS sont théoriquement formellement équivalentes d'un point de vue mathématique, i.e. au niveau continu.* Cependant, des différences peuvent apparaître entre ces modèles lors de la discrétisation de ces équations, *i.e.* au niveau discret, comme l'ont précédemment mis en évidence KAUL *et al.* [104] ainsi que KEMENOV *et al.* [111] pour les modèles I et II. Les modèles de variance SGS sont en effet sujets aux erreurs numériques associées en particulier aux erreurs de discrétisation et la sous-résolution des gradients du scalaires, impliqués dans les termes de production / dissipation présents dans (6.16), (6.18), (6.19) et (6.20).

KAUL *et al.* [104] analysent l'influence des erreurs numériques à partir d'analyses a priori d'une DNS de THI et concluent que :

- (i) la taille du filtre ( $\Delta \in \{8, 32, 128\} L_\eta$ , avec  $L_\eta$  l'échelle de Kolmogorov) ;

- (ii) la précision des schémas numériques (schémas centrés d'ordre 2 et 4, ainsi qu'un schéma Padé d'ordre 6 ont été utilisés) et
- (iii) l'utilisation ou non d'un modèle dynamique pour la diffusivité de sous-maille  $D_{\text{sgs}}$ , n'affectent pas de façon significative l'évaluation des flux totaux — termes résolus + sous-mailles — convectifs et diffusifs. Ils déclarent que le modèle II introduit plus d'erreurs numériques que le modèle I. Par ailleurs, remarquons que les variances SGS évaluées doivent être capable de tendre asymptotiquement vers l'expression de la variance maximale  $\tilde{V}_\xi^{\text{max}}$  lorsque le taux de dissipation scalaire (SDR) filtré tend vers zéro. C'est effectivement le cas pour le modèle II, puisque les équations de transport de  $\tilde{\xi}^2$  et  $\tilde{\xi}$  sont équivalentes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Équation de transport} \\ \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2)(\text{Éq. 6.8}) \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} \mathcal{L}_f(\tilde{\xi})(\text{Éq. 6.6}) = 0 \\ \text{Conditions aux limites} \\ \tilde{\xi}^2 = \tilde{\xi} = 0 \text{ dans le courant oxydant} \\ \tilde{\xi}^2 = \tilde{\xi} = 1 \text{ dans le courant combustible} \end{array} \right. \implies \tilde{V}_\xi^{\text{II}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2 \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{V}_\xi^{\text{max}} \quad (6.21)$$

Une analyse similaire peut être effectuée avec le modèle III, avec  $\tilde{\Delta}_\xi = 0$  dans les conditions aux limites pour les deux courants oxydant et combustible,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Équation de transport} \\ \mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi)(\text{Éq. 6.10}) \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} 0 \\ \text{Conditions aux limites} \\ \tilde{\Delta}_\xi \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{V}_\xi = 0 \end{array} \right. \implies \tilde{V}_\xi^{\text{III}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{V}_\xi^{\text{max}} \quad (6.22)$$

Nous voyons ainsi que les modèles II et III semblent avoir a priori le même comportement. KAUL *et al.* [104] suggèrent cependant que le modèle I n'est pas capable d'avoir ce même comportement asymptotique, mais cette affirmation peut être mise en doute. En effet, dans le cas où le SDR est négligeable, le 2<sup>nd</sup> membre de l'équation pour  $\tilde{V}_\xi$  (6.18) devient strictement équivalent à celle de l'équation pour  $\tilde{V}_\xi^{\text{max}}$  (6.17), *i.e.*  $\mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi) = \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi^{\text{max}}) = 2\bar{\rho}D_{\text{sgs}}\nabla\tilde{\xi} \cdot \nabla\tilde{\xi}$ . Par conséquent, on a

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Équation de transport} \\ \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi)(\text{Éq. 6.18}) \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi^{\text{max}})(\text{Éq. 6.17}) \\ \text{Conditions aux limites} \\ \tilde{V}_\xi = 0 \\ \tilde{V}_\xi^{\text{max}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) = 0 \end{array} \right. \implies \tilde{V}_\xi^{\text{I}} \underset{\tilde{\chi}_\xi \rightarrow 0}{=} \tilde{V}_\xi^{\text{max}} \quad (6.23)$$

Ainsi, il semble que lorsque le SDR tend à être faible, les 3 modèles de variance SGS deviennent bien formellement équivalents. Cette conclusion sera remise en question dans la partie suivante, lorsqu'on discrétise les équations.

KAUL *et al.* [104] concluent aussi, avec leurs analyses LES a priori, que le modèle I sous-prédit la variance SGS par rapport au modèle II du fait des erreurs numériques induites par une série d'approximations. KEMENOV *et al.* [111] parviennent aux mêmes conclusions dans leurs études a posteriori LES d'une flamme jet de diffusion pilotée. À cet égard, il est essentiel de rappeler que les analyses a priori LES, issues de résultats DNS filtrés, peuvent fournir des résultats et modèles intéressants en théorie ; mais en pratique, les performances de ces derniers peuvent différer, puisque les champs LES sont solutions des équations pour les valeurs filtrées et ces derniers ne coïncident pas avec les champs DNS filtrés [169].

KEMENOV *et al.* [111] suggèrent aussi que le modèle II paraît être considéré comme une meilleure alternative, notamment pour des maillages grossiers, car la sous-résolution du carré du gradient scalaire discret  $\vec{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \vec{\nabla}\tilde{\xi}$  — qui est présent dans (6.18) (modèle I), (6.19) (modèle II) et (6.20) (modèle III) — est la seule source d’erreur pour le modèle II en calculant le terme de dissipation (SDR résolu)  $-2\bar{\rho}\tilde{D}\vec{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \vec{\nabla}\tilde{\xi}$ . En revanche, pour le modèle I, il existe deux sources d’erreurs possibles :

- (i) la sous-résolution du carré du gradient scalaire ;
- (ii) le modèle de diffusivité SGS  $D_{\text{sgs}}$  retenu pour évaluer le terme source  $2\bar{\rho}D_{\text{sgs}}\vec{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \vec{\nabla}\tilde{\xi}$  présent dans l’équation de la variance SGS.

De cette manière, la sous-résolution de  $\vec{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \vec{\nabla}\tilde{\xi}$  mène à la sous-évaluation du terme de production dans l’équation de la variance SGS, et par conséquent, conduit à sous-estimer  $\tilde{V}_\xi^I$ . En revanche, pour les modèles II et III, cela mène à la sous-évaluation du terme de dissipation dans l’équation de  $\tilde{\xi}^2$ , et donc, cela conduit à sur-estimer les variances SGS  $\tilde{V}_\xi^{II}$  et  $\tilde{V}_\xi^{III}$ . Il est important de souligner que cette analyse ne tient pas compte de la méthode de reconstruction (§ 6.4) qui a été retenue pour reconstituer la variance SGS avec les modèles II et III. En pratique, la méthode classique pour reconstituer la variance SGS II et III consiste à utiliser le champ du scalaire filtré  $\tilde{\xi}$  résolu avec (6.6) (§ 6.4, Méth. 1). En revanche, ceci ne serait pas le cas si l’équation de  $\tilde{\xi}^2$  était directement utilisée à la place (§ 6.4, Méth. 2). Cette problématique sera étudiée plus loin au § 6.7.3. Finalement, KEMENOV *et al.* [111] concluent que le modèle I offre le meilleur estimateur de la variance SGS puisqu’il est réalisable partout et converge plus rapidement en maillage que le modèle II ; tandis qu’en champ lointain par rapport à l’injection et pour les maillages les mieux résolus, le modèle II n’est pas systématiquement réalisable et peut conduire à des niveaux de variance SGS négatifs, et donc non-physiques (§ 6.7.3).

## 6.6 Paramètres des simulations

Afin d’approfondir ces études préliminaires, des simulations aux grandes échelles non-réactives ont été effectuées sur la configuration JISCF dont le domaine et le maillage retenus correspondent au « Mesh 1 » présenté § 5.2.1.

Ces simulations sont basées sur une résolution simultanée, d’une part des équations filtrées : de masse (3.11), de quantité de mouvement (3.12), d’espèce (3.13) et d’énergie totale (3.17) (première formulation – RAGAB *et al.* [171]) ; et d’autre part, des Éqs. (6.6), (6.16) et (6.18) à (6.20). Une description simplifiée des flux moléculaires (§ 2.5, approximation d’Hirschfelder et Curtiss : niveau 1) ainsi que des coefficients de transport (§ 2.6) est retenue. Les dernières équations de transport scalaire fournissent donc 3 estimateurs de la variance SGS (modèle I, II et III) en une seule simulation. Une analyse de sensibilité au modèle de viscosité SGS est aussi réalisée avec l’utilisation de 2 modèles de viscosité SGS : Smagorinsky et WALE. Néanmoins, la partie isotropique du tenseur de viscosité de sous-maille  $\tau_{kk}^{\text{sgs}}$  a été négligée. Enfin, la façon de reconstruire la variance SGS sera aussi étudiée avec la Méth. 1 en utilisant le Smagorinsky et le WALE (§ 6.7.2) et la Méth. 2 avec le Smagorinsky seulement (§ 6.7.3). Les paramètres de modélisation sont fixés à  $(C_s, C_w, c_\xi, Sc_{\text{sgs}}, Pr_{\text{sgs}}) = (0.18, C_s\sqrt{10.6}, 1.0, 1.0, 0.7)$  et correspondent respectivement à la constante des modèles de Smagorinsky, WALE et à celle du modèle de relaxation linéaire du SDR de sous-maille ; enfin, les deux dernières valeurs sont celles des nombres de Schmidt SGS et de Prandtl SGS. Le senseur de choc modifié d’ADAMS et SHARIFF [1] (§ 3.5.3.2) est utilisé pour le déclenchement de la pondération non-linéaire du schéma WENO7 à partir d’une valeur seuil  $\sigma_{\text{seuil}} = 5\%$  alors que le senseur de DUCROS *et al.* [56] (§ 3.5.3.2) est par ailleurs utilisé pour annuler la viscosité SGS dans les zones fortement compressibles. Les paramètres de stabilité CFL et Fo sont ajustés durant la simulation, entre 0.5–1 et 0.1–1, respectivement. Par ailleurs, pour tous les scalaires bornés, *i.e.*  $(\tilde{Y}_\alpha, \tilde{\xi}, \tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}^2, \tilde{V}_\xi, \tilde{\Delta}_\xi)$ , un forçage explicite à leurs bornes de variation minimales et maximales est appliqué à chaque itération afin de préserver une solution physique.

Les conditions aux limites sont celles présentées § 5.3 auxquelles s’ajoutent les autres scalaires transportés dans le jet combustible, à savoir  $(\tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}^2, \tilde{V}_\xi, \tilde{\Delta}_\xi)_{\text{jet}} = (1, 1, 0, 0)$  pour les équations de trans-

port respectives (6.19), (6.16), (6.18) et (6.20). Ces scalaires passifs sont uniformément injectés dans le jet<sup>2</sup>. Enfin, l'écoulement est initialisé dans tout le domaine avec la condition d'entrée supersonique d'air vicié.

Après un état transitoire d'environ  $t \approx 20D/u_\infty \approx 15$  ns, le calcul est poursuivi sur une durée additionnelle d'au moins  $t \approx 100D/u_\infty \approx 0.30$   $\mu$ s. Durant ce temps, au moins 1000 champs sont enregistrés à une fréquence d'acquisition de 6.67 MHz, soit tous les 0.15  $\mu$ s. Le pas de temps moyen du calcul (CFL limitant) est de l'ordre de 7 ns pour le calcul avec le Smagorinsky et 10 ns avec le WALE (CFL plus important). Enfin, la durée du calcul (phase transitoire exclus) est d'environ 182 000 h scalaire avec le Smagorinsky et 154 000 h scalaire avec le WALE (phase transitoire non incluse). Ces calculs ont été réalisés avec 16 384 processus MPI, sur le supercalculateur Turing de l'IDRIS [97].

## 6.7 Résultats des simulations

### 6.7.1 Erreurs associées à l'évaluation du scalaire filtré au carré $\tilde{\xi}^2$

Dans cette partie, la Méth. 1 est utilisée pour reconstruire la variance SGS via le modèle II et III. Rappelons que cette méthode consiste à transporter  $\tilde{\xi}$  par l'équation  $\mathcal{L}_f(\tilde{\xi}) = 0$  (6.6) et à élever au carré la solution pour obtenir  $\tilde{\xi}^2$  — notée par la suite  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$  — qui est ré-injectée dans (6.19) et (6.20). Dans ces simulations, l'équation pour le scalaire filtré au carré  $\mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}})\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$  (6.16) est aussi transportée mais la solution de cette dernière — notée directement  $\tilde{\xi}^2$  par la suite — n'est pas utilisée ici pour reconstituer la variance SGS du modèle II et III. Ceci peut paraître superficiel car elles sont mathématiquement équivalentes, étant donné qu'au niveau continu  $2\tilde{\xi}\mathcal{L}(\tilde{\xi}) = \mathcal{L}(\tilde{\xi}^2)$  (cf. Annexe C.3). Néanmoins, nous verrons que des écarts non négligeables peuvent apparaître au niveau discret entre  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$  et  $\tilde{\xi}^2$ , ce qui permet donc de mettre en évidence les erreurs numériques relativement importantes associées à l'estimation de  $\tilde{\xi}^2$ . D'après KAUL *et al.* [104], ces erreurs sont dues à une suite d'approximations / simplifications dans l'évaluation de  $\tilde{\xi}^2$  et plus particulièrement au fait qu'au niveau discret  $2\tilde{\xi}L(\tilde{\xi}) \neq L(\tilde{\xi}^2)$  avec  $L$  un opérateur. Dans la suite,  $L_f$  désignera l'opérateur des termes sources / puits, homologue à (6.12), pour la forme conservative filtrée discretisée

$$L_f(\tilde{\varphi}) = \frac{\delta \bar{\rho} \tilde{\varphi}}{\delta t} + \frac{\delta \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\varphi}}{\delta x_i} - \frac{\delta}{\delta x_i} \left( \bar{\rho} (\tilde{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\delta \tilde{\varphi}}{\delta x_i} \right) \quad (6.24)$$

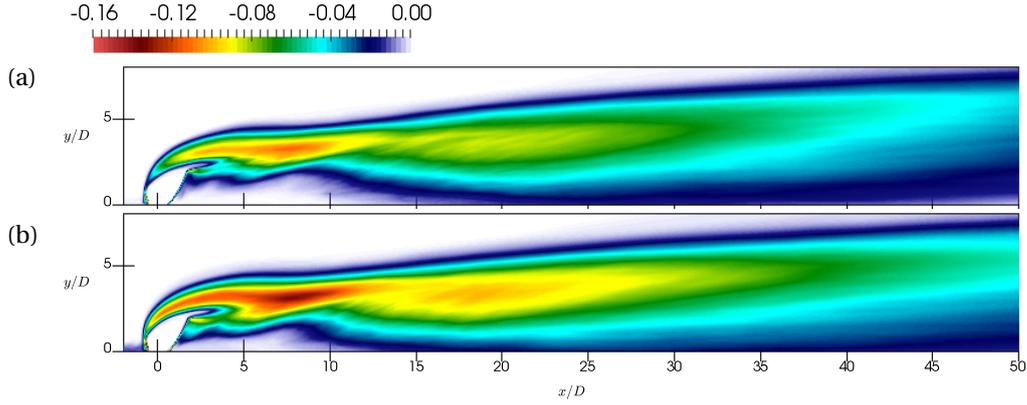
avec  $\delta$ , l'opérateur différentiel de discrétisation.

La Fig. 6.1 met en évidence les erreurs correspondantes. Elle présente des champs de l'écart moyen  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}^2\}$  sur les calculs effectués avec le modèle de viscosité SGS Smagorinsky et WALE. On remarque d'une part que cette erreur numérique globale semble être presque partout négative, conduisant donc à considérer que

$$\epsilon_{\tilde{\xi}^2} = 2\tilde{\xi}L_f(\tilde{\xi}) - L_f(\tilde{\xi}^2) \leq 0 \quad (6.25)$$

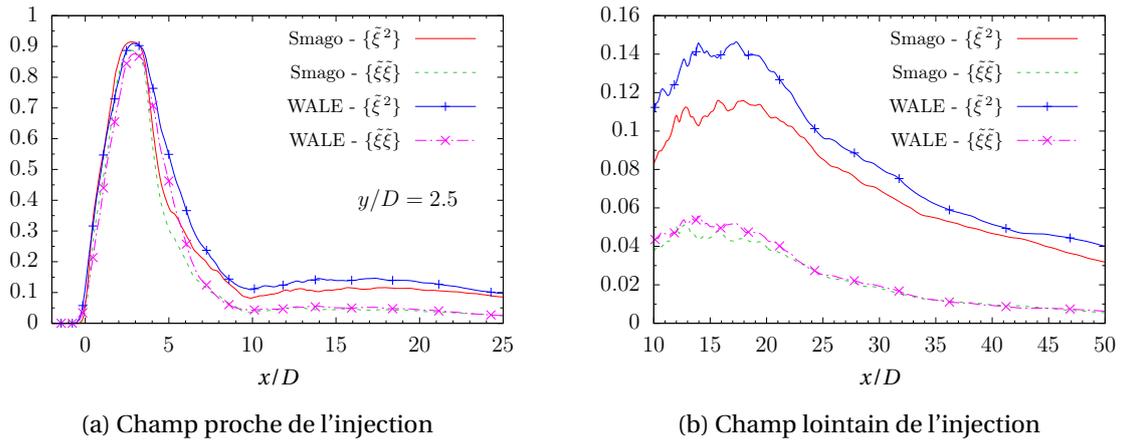
en effet, l'élévation au carré du scalaire filtré  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$ , issu de (6.6)  $L_f(\tilde{\xi})$ , est toujours inférieure à  $\tilde{\xi}^2$ , issu de (6.16)  $L_f(\tilde{\xi}^2)$ . D'autre part, ces écarts semblent plus importants (en valeur absolue) dans la zone centrale du jet dès lors qu'il interagit avec l'écoulement principal, *i.e.* après le disque de Mach. En revanche, dans le choc en tonneau, cet écart est nul et en s'éloignant de l'injection, cette différence diminue. Par ailleurs, l'influence du modèle de viscosité SGS semble non négligeable étant donné que l'erreur est plus importante avec le WALE par rapport au Smagorinsky. Ceci provient assurément du

2. Dans le cas contraire, les 2 premiers ( $\tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}^2$ ) seraient simplement déduits du profil de  $\tilde{\xi}$  et les 2 derniers ( $\tilde{V}_\xi, \tilde{\Delta}_\xi$ ) sont soit : (i) nuls; (ii) égaux à la variance SGS maximale  $\tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})$  pour le premier et nul pour  $\tilde{\Delta}_\xi$ , (iii) déterminés à partir d'un niveau de ségrégation  $S_\xi$  (6.2) fixé à l'injection.



**FIG. 6.1** – Champs de l'erreur moyenne  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}^2\}$  avec le modèle de viscosité de sous-maille (a) Smagorinsky et (b) WALE.

terme de dissipation dans (6.16) :  $\mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\bar{D} + D_{\text{sgs}})\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$  qu'on analysera plus en détail dans la Fig. 6.2 suivante. Enfin, on notera que ce n'est pas dans les couches de cisaillement, entre le jet et l'écoulement principal, que l'erreur est la plus importante.



**FIG. 6.2** – Profils moyens longitudinaux à  $(y/D, z/D) = (2.5, 0)$  du scalaire filtré au carré issu de (6.16) :  $L_f(\tilde{\xi}^2)$ , noté par  $\{\tilde{\xi}^2\}$  ou issu de (6.6) :  $L_f(\tilde{\xi})$ , noté par  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$ .

La Fig. 6.2 permet de mieux quantifier les écarts via des profils moyens longitudinaux de  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  et  $\{\tilde{\xi}^2\}$ , pour les 2 modèles de viscosité SGS utilisés. On retrouve naturellement le résultat précédent, c'est-à-dire que l'élevation au carré les valeurs de  $\tilde{\xi}$  produit une valeur qui semble toujours inférieure à celle issue de son équation de transport (6.16). Ces résultats sont tout à fait cohérents avec les précédentes études a priori de KAUL *et al.* [104] qui ont évalué et comparé chaque terme présent dans l'équation de transport et plus particulièrement l'erreur de discrétisation entre  $Q_1$  et  $Q_2$ , qu'ils définissent par

$$Q_1 = 2\bar{\xi} \frac{\delta}{\delta x_i} \left( (\bar{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\delta \bar{\xi}}{\delta x_i} \right) \quad \text{et} \quad Q_2 = \frac{\delta}{\delta x_i} \left( (\bar{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\delta \bar{\xi}^2}{\delta x_i} \right) - 2(\bar{D} + D_{\text{sgs}}) \frac{\delta \bar{\xi}}{\delta x_i} \frac{\delta \bar{\xi}}{\delta x_i} \quad (6.26)$$

Ces derniers ont montré pour différentes tailles de filtre  $\Delta$  et schémas numériques, que  $Q_2 > Q_1$  presque partout. Par conséquent, ce résultat devrait a priori mener à  $\bar{\xi}^2 > \bar{\xi}\bar{\xi}$ , ce qui est vérifié via notre étude a posteriori compressible où  $\tilde{\xi}^2 > \tilde{\xi}\tilde{\xi}$ . Une analyse purement théorique, qualitative et semblable est faite par KEMENOV *et al.* [111] et conduit à une conclusion similaire.

Suivant ces profils, la différence entre  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  et  $\{\tilde{\xi}^2\}$  semble peu notable en champ proche jusqu'à environ  $x/D = 5$  avec les 2 modèles de viscosité SGS ; alors qu'en champ lointain, le modèle de Smagorinsky prédit généralement des valeurs plus faibles de  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  par rapport au WALE. Ce comportement spécifique est cohérent avec les profils de  $\{\tilde{\xi}\}$  de la Fig. 6.3(a) présentés plus loin.

Comme mentionné précédemment, les profils de  $\{\tilde{\xi}^2\}$  dépendent fortement de la fermeture retenue pour la viscosité SGS. En effet, son équation de transport (6.16) :  $\mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}})\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi} = -2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi^{\text{eq}}$  contient le taux de dissipation scalaire à l'équilibre, qui est fonction d'une part, du carré du gradient scalaire et d'autre part, des diffusivités moléculaires et SGS du scalaire. Au-delà de la position  $x/D = 3$  (champ lointain), le modèle WALE prédit des valeurs supérieures de  $\{\tilde{\xi}^2\}$  par rapport au modèle de Smagorinsky, ce qui suggère un faible taux de dissipation scalaire à l'équilibre  $\tilde{\chi}_\xi^{\text{eq}}$ . Comme le montre la Fig. 6.3(e), la viscosité SGS prévue par le modèle WALE est partout plus importante (sur ce profil) que celle obtenue via le modèle de Smagorinsky ; donc il semble que, le faible niveau du SDR à l'équilibre provient en réalité d'un faible niveau de  $\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$  obtenu avec le modèle WALE. En champ proche, le comportement opposé est en revanche observé. Pour résumer, la valeur de  $\tilde{\xi}^2$ , obtenue directement par son équation de transport, semble être très sensible au modèle de viscosité SGS en champ proche ; alors qu'en champ lointain, il est plutôt contrôlé par le carré du gradient scalaire.

Suite à ces discussions consacrées à l'évaluation du scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$ , il est probable que les erreurs les plus importantes proviennent des identités clés suivantes

$$2\tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}^2}{\partial x_i} \right) - 2\bar{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad 2\tilde{\xi} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{\xi}^2}{\partial x_i} \quad (6.27)$$

qui ne sont plus qu'imparfaitement vérifiées au niveau discret ( $\delta/\delta x_i$ ). Ces identités se retrouvent dans (C.7) (cf. Annexe C « [Dérivation des équations de transport pour la variance scalaire de sous-maille](#) ») et permettent notamment le développement de l'équation de transport pour  $\tilde{\xi}^2$  ; sans elles, les équations (6.7) ou (6.16), ne peuvent être établies. Une solution permettant de minimiser ce problème pourrait être de trouver un développement mathématiquement équivalent, tel que celui proposé par LELE [117], NAGARAJAN *et al.* [148], SANDHAM *et al.* [180] pour développer les flux diffusifs en *écoulement compressible à coefficient de transport non constant* qui implique souvent l'utilisation consécutive — deux fois de suite<sup>3</sup> — de l'opérateur de discretisation pour la dérivée première. Ainsi, d'après ces auteurs, l'utilisation de la forme développée suivante

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + \frac{\partial \mu}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_i} \quad (6.28)$$

semble fournir une meilleure précision et robustesse, car elle met en œuvre directement une discrétisation directe de la dérivée seconde au 1<sup>er</sup> terme du 2<sup>nd</sup> membre, bien qu'elle perde sa forme conservative.

De plus, l'hypothèse de modélisation retenue pour le flux de masse de sous-maille du scalaire passif  $J_{\xi,i}^{\text{sgs}}$ , et donc pour la diffusivité SGS  $D_{\text{sgs}}$ , semble avoir un impact beaucoup moins important sur les écarts entre  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  et  $\{\tilde{\xi}^2\}$  (cf. Fig. 6.2(b) : écart entre  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  Smagorinsky et WALE) que celle introduite par les erreurs numériques. En effet, ces modèles sont ré-injectés de façon équivalente dans les équations de transport des 2 estimateurs du scalaire filtré au carré (6.6) et (6.7). Par conséquent, l'erreur potentielle de modélisation introduite dans les 2 cas devrait être du même ordre de grandeur, pour un modèle de viscosité SGS fixé.

Enfin, de nombreuses questions restent ouvertes : laquelle de ces méthodes d'évaluation du scalaire filtré au carré est la plus adaptée et laquelle fournit des valeurs les plus représentatives ? On peut

3. Ceci est le cas dans le code de calcul *CREAMS*.

démontrer que la méthode basée sur l'élévation au carré de  $\tilde{\xi}$  introduit une erreur de troncature plus importante que celle consistant à transporter directement  $\tilde{\xi}^2$ . Ce constat soulève une problématique importante : quelle variable (ou méthode) doit être utilisée pour reconstruire la variance SGS dans le modèle II et III? En fonction de cela, quelles sont les différences obtenues entre les résultats du modèle I comparés aux modèles II et III? Ces questions seront étudiées dans les 2 prochaines parties : § 6.7.2 pour la première méthode standard de reconstruction en élevant au carré le champ du scalaire filtré  $\tilde{\xi}$  (6.6) ; puis § 6.7.3 pour la seconde méthode où les variances SGS sont calculées à partir de l'équation de transport de  $\tilde{\xi}^2$  (6.16).

## 6.7.2 Analyse des profils des variances scalaires : 1<sup>re</sup> méthode de reconstruction

### Profils de $\tilde{\xi}$ et $\xi_v^{\text{res}}$

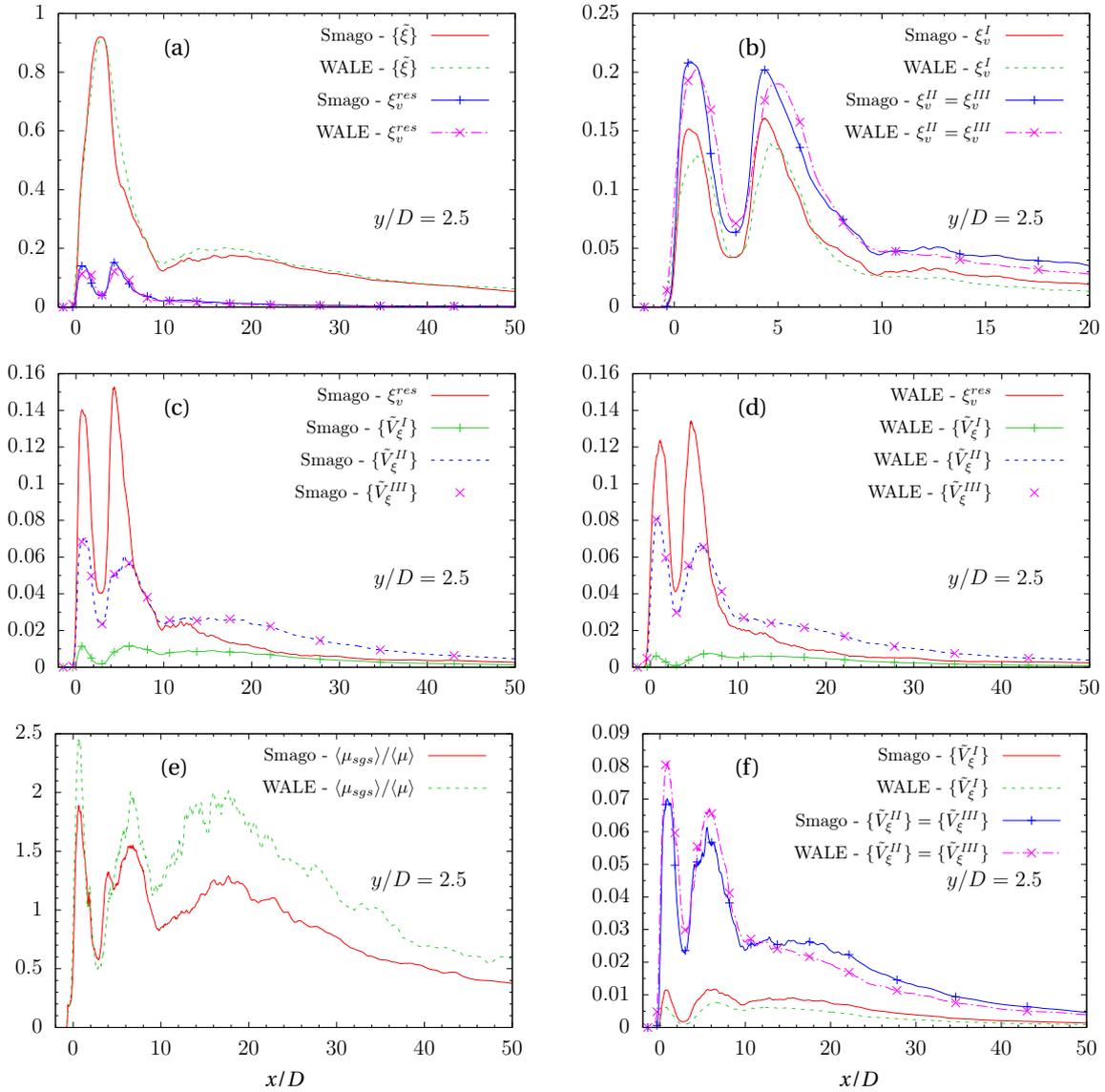
La Fig. 6.3(a) montre l'évolution des profils moyens du scalaire passif  $\{\tilde{\xi}\} = \langle \bar{\rho} \tilde{\xi} \rangle / \langle \bar{\rho} \rangle$ , ainsi que les profils associés à la variance résolue  $\xi_v^{\text{res}}$  obtenus avec les modèles de Smagorinsky et WALE. Comme vu précédemment à partir des champs moyens du scalaire (cf. Fig. 5.24), les profils longitudinaux du scalaire moyen sont très similaires pour les 2 modèles de viscosité SGS utilisés. Néanmoins, avec le WALE, les valeurs obtenues sont légèrement supérieures en aval du jet. En revanche, les extrema locaux de la variance résolue, obtenus avec le WALE, sont plus petits que ceux obtenus avec le Smagorinsky. Ceci est probablement le résultat d'un excès de diffusion SGS avec le modèle WALE (cf. Fig. 6.3(e)), qui tend à diminuer les fluctuations résolues du scalaire. Rappelons que cet effet dissipatif plus important observé avec le WALE peut provenir soit de la nature même de l'écoulement et de la formulation du modèle, soit de la constante de modélisation  $C_s$  qui a été choisie avec la valeur théorique (0.18) pour les 2 modèles de viscosité SGS (cf. § 5.4.3). Ce résultat est mieux mis en évidence dans les Figs. 6.3(c) et 6.3(d) qui comparent les profils de variance résolue et de sous-maille obtenues pour les 2 simulations. Ici, les pics de variance résolue sont localisés approximativement aux mêmes abscisses :  $x/D = 1$  et 4.5.

### Profils de $\tilde{V}_\xi^I$

Comme le montre la Fig. 6.3(f), le modèle de viscosité WALE produit toujours des niveaux de variance SGS  $\{\tilde{V}_\xi^I\} = \langle \bar{\rho} \tilde{V}_\xi^I \rangle / \langle \bar{\rho} \rangle$  plus faibles que ceux produits avec le Smagorinsky. Ceci provient encore de la dissipation SGS plus importante obtenue avec le WALE. Ainsi, par rapport au modèle de Smagorinsky, ceci ne fait pas qu'augmenter le flux diffusif de sous-maille, mais augmente aussi les termes de production et de dissipation dans l'équation de la variance scalaire SGS (6.18). Cependant, au vu de ces résultats, il semble que les termes de diffusion et de dissipation soient prédominants par rapport aux effets de production.

### Profils de $\tilde{V}_\xi^{II} \equiv \tilde{V}_\xi^{III} > \tilde{V}_\xi^I$

De plus, les Figs. 6.3(c) et 6.3(d) révèlent que, quel que soit le modèle de viscosité SGS, il n'y a pas de différence notable entre la variance SGS produite par le modèle II (lignes) et le modèle III (symbole  $\times$ ). Ceci peut s'expliquer en réalisant une analyse des termes sources des équations de transport  $\mathcal{L}_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi$  (6.19) et  $\mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi) = 2\bar{\rho}\tilde{\chi}_\xi$  (6.20), respectivement utilisées pour les modèles II et III. Ces 2 équations impliquent le taux de dissipation scalaire filtré, modélisé par une contribution résolue et de sous-maille. Ce dernier apparaît soit comme un **terme de dissipation (signe -)** pour le premier cas ou comme un **terme de production (signe +)** pour le second. De plus, rappelons aussi que la variance SGS est reconstruite ici à partir de  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$  ou de  $\tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{\Delta}_\xi$ . Par conséquent, le terme puits dans le modèle II va contribuer à diminuer  $\tilde{\xi}^2$  et par conséquent, à diminuer aussi  $\tilde{V}_\xi^{II}$  ; alors que le terme source dans le modèle III va contribuer à augmenter  $\tilde{\Delta}_\xi$  et donc à diminuer  $\tilde{V}_\xi^{III}$ . Ceci peut être formellement retrouvé en considérant l'opérateur des termes sources / puits sous sa forme



**FIG. 6.3** – Profils longitudinaux à  $(y/D, z/D) = (2.5, 0)$  de (a) la fraction de mélange moyenne  $\{\tilde{\xi}\}$  et de la variance résolue  $\xi_v^{res}$ ; (b) la variance totale pour les 3 modèles de variance SGS  $\xi_v^I$ ,  $\xi_v^{II}$  (lignes), et  $\xi_v^{III}$  (symboles) (terme résiduel  $R_\nu$  négligé); (c) et (d) la variance résolue et la moyenne temporelle de la variance SGS pour les 3 modèles  $\{\tilde{V}_\xi^I\}$ ,  $\{\tilde{V}_\xi^{II}\}$ ,  $\{\tilde{V}_\xi^{III}\}$  obtenus avec le modèle (c) Smagorinsky et (d) WALE; (e) le rapport entre la moyenne de la viscosité SGS et la moyenne de la viscosité moléculaire, et (f) la variance SGS issues des 3 modèles  $\{\tilde{V}_\xi^I\}$ ,  $\{\tilde{V}_\xi^{II}\}$  (lignes) et  $\{\tilde{V}_\xi^{III}\}$  (symboles).

discrète  $L_f$  (6.24) et en rappelant que la Méth. 1 est utilisée pour évaluer la variance SGS. Ainsi, pour le modèle II, la variance SGS est calculée par  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$ . Cela signifie que lorsqu'on élève au carré le champs scalaire filtré  $\tilde{\xi}$  (solution de  $L_f(\tilde{\xi}) = 0$ ) dans le 2<sup>nd</sup> terme du 2<sup>nd</sup> membre, la variance SGS est alors en réalité reconstruite par l'équation équivalente  $L_f^{\text{equiv}}(\tilde{\xi}\tilde{\xi}) = 2\tilde{\xi}L_f(\tilde{\xi}) = L_f(\tilde{\xi}^2) + \epsilon_{\tilde{\xi}^2}$  (6.25), avec  $\epsilon_{\tilde{\xi}^2} \leq 0$ . Comme nous le verrons dans le § 6.7.3 suivant, ceci ne sera pas le cas si l'équation  $L_f(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}})\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$  est directement utilisée. Ainsi, la considération de l'opérateur discret appliqué à chaque modèle de variance SGS mène au jeu d'équations de transport équivalentes suivantes pour la variance SGS

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^I \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{V}_\xi \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^I) \equiv L_f(\tilde{V}_\xi) = L_f(\tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2) = L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) \end{array} \right. \quad (6.29a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2 \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^{II}) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f^{\text{equiv}}(\tilde{\xi}^2) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - (L_f(\tilde{\xi}^2) + \epsilon_{\tilde{\xi}^2}) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) - \epsilon_{\tilde{\xi}^2} \end{array} \right. \quad (6.29b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^{III}) \equiv L_f(\tilde{\xi}) - L_f^{\text{equiv}}(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\Delta}_\xi) \equiv 0 - (L_f(\tilde{\xi}^2) + \epsilon_{\tilde{\xi}^2}) + L_f(\tilde{\xi}^2) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) - \epsilon_{\tilde{\xi}^2} \end{array} \right. \quad (6.29c)$$

où les termes en **gras** correspondent aux quantités transportées et utilisées dans les différentes modélisations de la variance SGS. Par ailleurs, notons que (i) la propriété de linéarité de l'opérateur  $L_f$  a été employée afin d'obtenir les égalités de chacune des secondes lignes et que (ii) l'identité  $L_f(\tilde{\Delta}_\xi) = -L_f(\tilde{\xi}^2)$  a été utilisée pour obtenir (6.29c) (2<sup>e</sup> ligne). Ainsi, à partir de (6.29), on voit clairement que

$$L_f(\tilde{V}_\xi^{II}) = L_f(\tilde{V}_\xi^{III}) = L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) - \underbrace{\epsilon_{\tilde{\xi}^2}}_{\geq 0} \geq L_f(\tilde{V}_\xi^I) = L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) \quad (6.30)$$

où les termes de production et de destruction sont modélisés par

$$L_f(\tilde{V}_\xi^I) = L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) = 2\bar{\rho}D_{\text{sgs}}\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi} - 2\bar{\rho}c_\xi \frac{\tilde{V}_\xi}{\tau_{\text{sgs}}} \quad (6.31)$$

Par conséquent, ces analyses démontrent que, pour un modèle de viscosité SGS fixé, les modèles II et III ont une équation de transport reconstruite équivalente; ils sont numériquement équivalents et évaluent la même variance scalaire de sous-maille. C'est la raison pour laquelle, les variances SGS issues du modèle II et III sont superposées dans les Figs. 6.3(b) et 6.3(f). De plus, l'analyse des termes sources, dans (6.29), montre finalement que l'équation de transport équivalente du modèle II (identique au modèle III) diffère d'un terme  $-\epsilon_{\tilde{\xi}^2}$  de l'équation du modèle I. L'analyse a priori LES de KAUL *et al.* [104] ainsi que celle présentée ici, confronte l'hypothèse que que l'écart  $-\epsilon_{\tilde{\xi}^2}$  est presque partout positif. Ceci explique pourquoi le modèle II (équivalent à III) produit des variances SGS plus importantes que le modèle I (cf. Figs. 6.3(c), 6.3(d) et 6.3(f)). Ce dernier résultat est aussi en accord avec les études menées par KEMENOV *et al.* [111]. Nous pouvons conclure donc que ces écarts sont dus à des erreurs numériques venant principalement de l'évaluation du scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$ .

Ce résultat a donc une importance non négligeable pour la modélisation de la combustion turbulente où la variance SGS de la fraction de mélange est utilisée pour déterminer le taux de ségrégation résiduel de l'échelle de sous-maille entre le combustible et l'oxydant et présumer la PDF de la fraction de mélange. Étant donné que le mélange moléculaire est une condition nécessaire pour que

l'allumage et la combustion puissent avoir lieu ; on peut s'attendre, d'après la Fig. 6.3(f) à ce que les modèles II et III conduisent à des longueurs d'induction plus importantes. En effet, ces 2 modèles prédisent des niveaux plus élevés d'hétérogénéité de composition à l'échelle de sous-maille : le mélange reste très inhomogène entre le combustible et l'oxydant à l'échelle non-résolue.

### Dépendance à la viscosité SGS sur $\tilde{V}_\xi^{II} \equiv \tilde{V}_\xi^{III}$

Comme le montre la Fig. 6.3(f), les profils de variance SGS associés au modèle II (ou modèle III) dépendent du modèle de viscosité SGS choisi. À proximité de l'injection, jusqu'à  $x/D = 10$ , les variances SGS  $\tilde{V}_\xi^{II}$  obtenues avec le modèle de Smagorinsky sont plus petites que celles obtenues avec le modèle WALE. Essayons maintenant d'expliquer ce comportement spécifique en champ proche.

- Ce comportement ne semble pas être corrélé avec l'évolution de la viscosité SGS, cf. profils de  $\langle \mu_{\text{sgs}} \rangle / \langle \tilde{\mu} \rangle$ , Fig. 6.3(e). En effet, la viscosité SGS obtenue en utilisant le modèle de Smagorinsky semble être toujours plus petite que celle estimée par le modèle WALE. Par conséquent, cela devrait conduire à de faibles niveaux du SDR SGS (taux de dissipation scalaire de sous-maille)  $c_\xi D_{\text{sgs}} \tilde{V}_\xi / \Delta^2$  avec le Smagorinsky, donc augmenter les valeurs du scalaire au carré filtré, étant donné que  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\tilde{\chi}\tilde{\xi} = -2\bar{\rho}\tilde{D}\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi} - 2\bar{\rho}c_\xi D_{\text{sgs}} \tilde{V}_\xi / \Delta^2$ , et ainsi la variance SGS obtenue avec le Smagorinsky devrait être plus grande par rapport au WALE, suite à l'étape de reconstruction  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$ .
- D'autre part, au voisinage de l'injection, le champ du scalaire résolu  $\tilde{\xi}$  ne semble pas affecter l'estimation de la variance SGS du modèle II, car les valeurs de  $\tilde{\xi}$  obtenues avec le Smagorinsky sont généralement inférieures à celles obtenues avec le modèle WALE, cf. Fig. 6.3(a). Ainsi, lors de l'étape de reconstruction de la variance SGS — soustraction de  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$  — cela devrait mener aussi à une variance SGS plus grande avec le modèle Smagorinsky en comparaison de celle obtenue avec le modèle WALE, ce qui n'est pas le cas ici.
- Ainsi, ce comportement spécifique en champ proche semble résulter de la sous-résolution de la norme du gradient scalaire. La Fig. 6.3(a) semble afficher, en effet, un gradient scalaire plus important avec le Smagorinsky comparé au WALE. Celui-ci, une fois élevé au carré, est pondéré par la diffusion moléculaire (globalement plus grande que la diffusivité SGS) afin d'évaluer le SDR résolu  $\tilde{D}\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$ . Le terme  $\tilde{\xi}^2$  semble être moins significatif dans le calcul de  $\tilde{V}_\xi^{II}$  et ceci implique des niveaux de fluctuations scalaires SGS plus faibles avec le Smagorinsky comparés au WALE. Pour les conditions actuelles, les variances SGS II et III semblent en effet très sensibles à l'estimation du taux de dissipation scalaire résolu, surtout au niveau de la résolution du carré du gradient scalaire (ordre du schéma de discrétisation et maillage). Cette sensibilité est particulièrement importante près de l'injection, où la résolution du gradient scalaire contrôle les niveaux de variance scalaire SGS II et III.

Cependant, en champ lointain, les gradients scalaires sont moins importants. De ce fait, il semble que les variances SGS II et III soient contrôlées par le SDR SGS, qui est ici proportionnel à la diffusivité SGS ainsi que la variance SGS elle-même. Or la variance SGS est faible en champ lointain, donc il semble que la diffusivité SGS pilote principalement les niveaux de variance SGS II et III en champ lointain. Ce qui semble se démontrer sur la Fig. 6.3(f), où le modèle WALE prédit des variances SGS  $\tilde{V}_\xi^{II}$  plus faibles que le Smagorinsky, étant donné que sa viscosité SGS est plus élevée.

### La variance SGS moyenne $\xi_v^{\text{sgs},II} \equiv \xi_v^{\text{sgs},III}$ peut être supérieure à la variance résolue $\xi_v^{\text{res}}$

Dans les Figs. 6.3(c) et 6.3(d), il est aussi intéressant de constater qu'en champ lointain, pour  $x/D \geq 7$ , les variances de sous-maille moyennes prédites  $\xi_v^{\text{sgs},II} = \{\tilde{V}_\xi^{II}\}$  et  $\xi_v^{\text{sgs},III} = \{\tilde{V}_\xi^{III}\}$  sont plus importantes que les variances du champ résolu  $\xi_v^{\text{res}}$  et ceci, pour les 2 modèles de viscosité SGS. D'après les précédentes discussions, en champ lointain, la variance SGS du modèle II est contrôlée par le SDR SGS, modélisé par le modèle de relaxation linéaire, qui est donc proportionnel à  $D_{\text{sgs}}$ . Ainsi, il semble

que la diffusivité SGS n'est pas assez importante pour diminuer le niveau de la variance SGS des modèles II et III en deçà de la variance résolue. De plus, augmenter artificiellement cette diffusivité SGS est possible mais ne semble pas être une solution viable, puisqu'elle diminuerait les fluctuations résolues et de sous-maille, ce qui n'est pas nécessairement recherché. Une autre explication à ce niveau très important de variance SGS, en champ lointain, peut être associée à la méthode de reconstruction (cf. § 6.4) qui sera étudiée plus en détail dans le § 6.7.3 suivant.

### Profils des variances totales $\xi_v$

Les variances totales sont évaluées par  $\xi_v = \xi_v^{\text{res}} + \xi_v^{\text{SGS}}$  (le terme résiduel  $R_v$  étant négligé) dont les profils sont reportés dans la Fig. 6.3(b), pour les 2 modèles de viscosité SGS. En ce qui concerne le modèle I, les profils de variance totale  $\xi_v^I$  semblent dépendre principalement de la contribution résolue ; en effet, cette dernière est nettement plus grande que la contribution SGS comme le montrent les Figs. 6.3(c) et 6.3(d). Comme précédemment souligné, la contribution de la variance résolue ainsi que celle de sous-maille du modèle I, obtenues avec le Smagorinsky, sont plus importantes que celles obtenues avec le modèle WALE. Ceci est due à une diffusion moins importante du modèle de Smagorinsky qui va introduire moins de dissipation en sous-maille et donc augmenter les niveaux de variance totale. D'autre part, les niveaux de variance totale II et III sont plus importants que ceux observés avec le modèle I ; mais à nouveau, la contribution du terme résolu est plus importante que celle de sous-maille dans l'estimation de la variance totale. Ceci est particulièrement vrai à proximité de l'injection. En effet, contrairement aux profils de variance SGS II, où le modèle de Smagorinsky produit des variances SGS plus faibles que le modèle WALE, ici le modèle de Smagorinsky prédit des pics de variance totale plus importants comparés au modèle WALE. En champ lointain, le modèle de Smagorinsky prédit toujours des variances totales II plus élevées, mais cela résulte d'une contribution du terme de sous-maille plus importante par rapport au terme résolu, étant donné que les variances SGS II et III semblent être contrôlées par la diffusivité SGS en champ lointain, comme cela a déjà été souligné.

### Comparaison des observations sur les profils transversaux

La Fig. 6.4 présente les profils transversaux du scalaire moyen tandis que la Fig. 6.5 présente ceux de la variance résolue, SGS et totale pour les 2 modèles de viscosité SGS et à différentes positions en aval du jet. Cet ensemble de figures additionnelles confirme les conclusions tirées de la considération des profils longitudinaux. Dans la Fig. 6.4, le modèle de viscosité WALE conduit à une augmentation de la longueur de pénétration du scalaire, en aval du jet, dans l'écoulement d'air vicié. Dans la Fig. 6.5, les variances scalaires résolues et SGS I sont plus grandes obtenues avec le modèle de Smagorinsky par rapport au modèle WALE. À proximité de l'injection, jusqu'à  $x/D = 8$ , les niveaux de variance SGS II, avec le Smagorinsky, restent plus faibles, ce qui est le résultat d'un niveau élevé du SDR résolu, qui diminue la variance SGS II. En champ lointain, des valeurs plus faibles de la diffusivité SGS du Smagorinsky diminuent le SDR SGS, et augmentent ainsi la variance SGS II obtenue avec le Smagorinsky. De plus, ces figures illustrent également le fait qu'avec la Méth. 1 de reconstruction de la variance SGS, la variance SGS II peut produire des valeurs supérieures à celles de la variance résolue, ceci quel que soit le modèle de viscosité SGS. C'est particulièrement le cas : (i) en bas de la couche de cisaillement du jet (*i.e.*, entre le jet et la paroi), dans la zone de recirculation en aval du jet, voir Fig. 6.5 en  $x/D \in \{2, 4\}$  et  $y/D \in [0, 1.5]$  ; (ii) en champ lointain, comme le montrent clairement les profils en  $x/D \in \{8, 16\}$  dans le cœur central du jet.

### Influence du forçage aux bornes de variation

Comme il a été précédemment souligné, les scalaires étudiés ( $\tilde{\xi}, \tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}^2, \tilde{V}_\xi, \tilde{\Delta}_\xi$ ) sont tous des quantités bornées. Il est par conséquent nécessaire qu'ils ne dépassent pas leurs domaines de définition

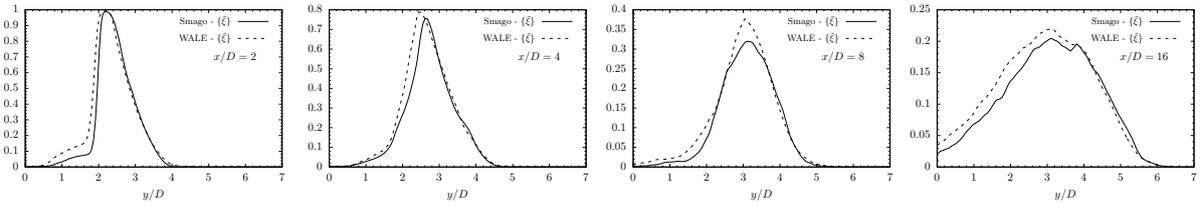


FIG. 6.4 – Profils transversaux ( $x/D \in \{2, 4, 8, 16\}$ ,  $z/D = 0$ ) de la fraction de mélange moyenne  $\{\tilde{\xi}\}$  obtenue pour le modèle de Smagorinsky (lignes continues) et avec le modèle WALE (lignes pointillées).

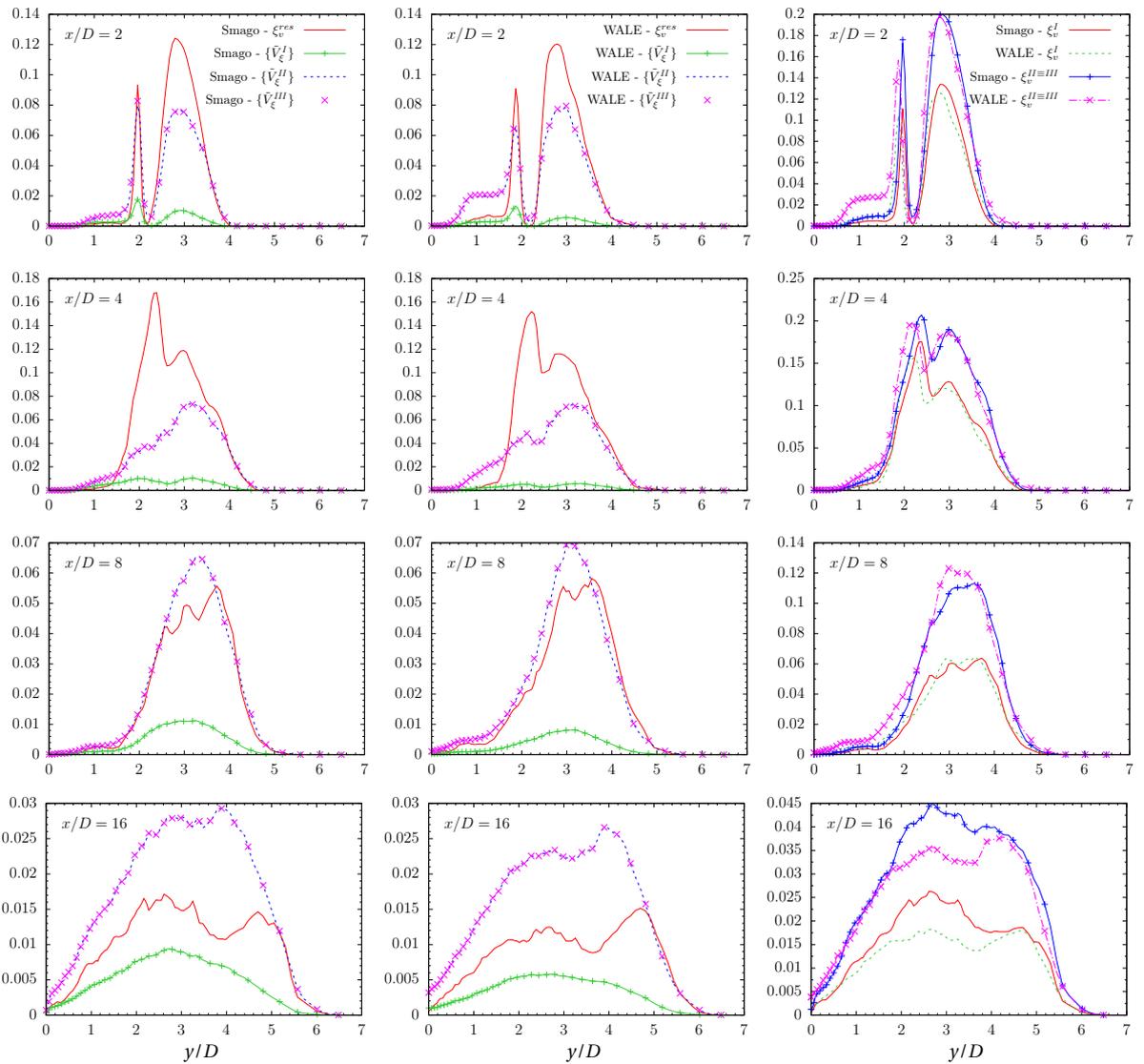


FIG. 6.5 – Profils transversaux ( $x/D \in \{2, 4, 8, 16\}$ ,  $z/D = 0$ ) de la variance résolue  $\xi_v^{res}$  et de sous-maille moyenne  $\{\tilde{V}_\xi^2\}$  (1<sup>re</sup> colonne = Smagorinsky, 2<sup>e</sup> colonne = WALE), et de la variance totale  $\xi_v$  (3<sup>e</sup> colonne) : pour les 3 modèles de variance SGS.

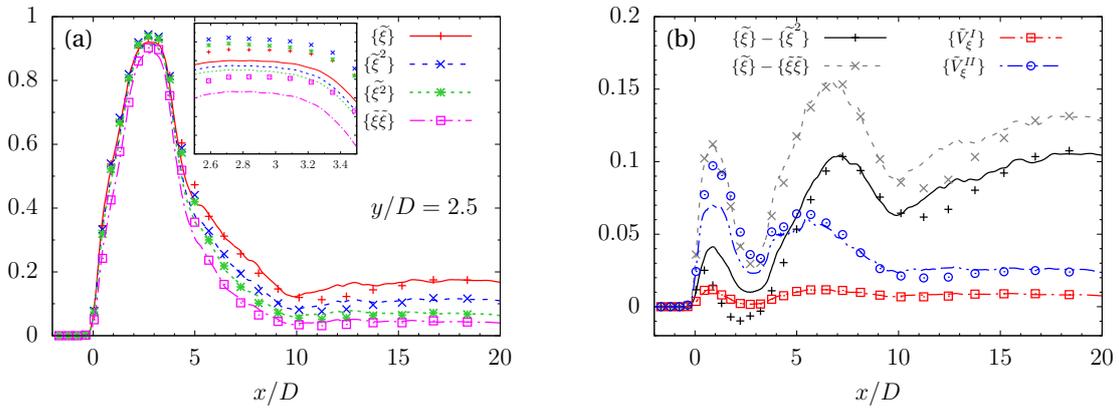
afin qu'ils restent *réalisables* et conservent donc une valeur physique. Cette courte partie a pour but de démontrer l'importance et l'influence du forçage aux bornes de variation — minimale et maximale — de ces scalaires qui sont forcés explicitement entre leur domaine de variation à chaque itération. Rappelons que les principales grandeurs scalaires étudiées sont telles que

$$0 \leq \tilde{\xi}^2 \leq \tilde{\xi}^2 \leq \tilde{\xi} \leq 1 \quad (6.32a)$$

$$0 \leq \tilde{V}_\xi \leq \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) \quad (6.32b)$$

On voit que ces expressions font apparaître le scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$ , qui encore une fois, peut être évalué selon la Méth. 1 ou Méth. 2. De façon arbitraire, étant donné qu'il est plus usuel de transporter  $\tilde{\xi}$  plutôt que directement  $\tilde{\xi}^2$ , l'évaluation de  $\tilde{\xi}^2$  se fera par l'élevation au carré de  $\tilde{\xi}$ , c'est-à-dire par la Méth. 1. Ainsi, la borne minimale de  $\tilde{\xi}^2$  sera forcée à  $\tilde{\xi}^2$  (6.32a) tandis que la borne maximale de  $\tilde{V}_\xi$  sera  $\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2$  (6.32b).

Des simulations annexes ont été réalisées : les paramètres de calcul sont ceux présentés § 6.6 ; la Méth. 1 est utilisée pour reconstruire la variance SGS du modèle II ; le modèle de Smagorinsky est utilisé pour estimer la viscosité SGS ; enfin, deux simulations ont été effectuées : l'une avec un forçage explicite aux bornes, l'autre sans aucun forçage explicite aux bornes.



**FIG. 6.6** – Profils moyens longitudinaux en  $(y/D, z/D) = (2.5, 0)$  de (a) la fraction de mélange  $\{\tilde{\xi}\}$ , du scalaire filtré au carré  $\{\tilde{\xi}^2\}$  transporté suivant (6.16) :  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2)$ , du scalaire au carré filtré  $\{\tilde{\xi}^2\}$  et du scalaire filtré au carré  $\{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  estimé suivant la solution issue de (6.6) :  $\mathcal{L}(\tilde{\xi})$ ; et (b) de la variance SGS maximale  $\{\tilde{V}_\xi^{\max}\}$  estimée par  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}^2\}$  ou  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  et des variances SGS  $\{\tilde{V}_\xi^I\}$  et  $\{\tilde{V}_\xi^{II}\}$ , en présence de forçage (lignes) et sans forçage (symboles) aux bornes de leur domaine de définition.

La Fig. 6.6 montre l'évolution moyenne des principaux scalaires étudiés, à savoir  $(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}^2, \tilde{\xi}\tilde{\xi})$  sur la Fig. 6.6(a) et  $(\tilde{V}_\xi^I, \tilde{V}_\xi^{II})$  sur la Fig. 6.6(b). Dans la première figure, *i.e.* Fig. 6.6(a), on peut noter qu'avec (lignes) ou sans forçage (symboles) aux bornes de variation de ces scalaires, en champ lointain (au delà de  $x/D = 5$ ), nous vérifions presque partout

$$\tilde{\xi}\tilde{\xi} \text{ (Éq. 6.6)} \leq \tilde{\xi}^2 \text{ (Éq. 6.19)} \leq \tilde{\xi}^2 \text{ (Éq. 6.16)} \leq \tilde{\xi} \text{ (Éq. 6.6)} \quad (6.33)$$

Ce qui reste compatible avec (6.32a). En revanche, à proximité de l'injecteur, cf. zoom entre  $x/D \in [2.5, 3.5]$  dans la Fig. 6.6(a), si aucun forçage n'est appliqué aux différents scalaires, nous obtenons l'inéquation suivante (non compatible avec (6.32a))

$$\tilde{\xi}\tilde{\xi} \text{ (Éq. 6.6)} \leq \tilde{\xi} \text{ (Éq. 6.6)} \leq \tilde{\xi}^2 \text{ (Éq. 6.19)} \leq \tilde{\xi}^2 \text{ (Éq. 6.16)} \quad (6.34)$$

Cela démontre l'importance d'appliquer un forçage, qu'il soit explicite ou implicite, aux scalaires bornés, tels que ceux dérivés de la fraction de mélange.

Un second comportement non physique est très clairement mis en évidence sur le profil de la variance SGS maximale théorique estimée par  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}^2\}$  — voir Fig. 6.6(b) — qui conduit à une variance SGS maximale négative lorsque celui-ci n'est pas explicitement borné (symbole +). En revanche, la variance SGS maximale  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$ , calculée par le scalaire filtré transporté, semble peu sensible aux effets de forçage aux bornes de définition. Bien qu'il y ait quelques écarts elle reste positive. Il est remarquable néanmoins de constater que le profil de variance SGS du modèle I  $\tilde{V}_\xi^I$  n'est pas influencé par l'effet du forçage (ligne et symbole superposés), ce qui le rend particulièrement intéressant du point de vue numérique. En effet, cela signifie qu'aucune méthode de forçage, explicite ou implicite, n'est nécessaire pour que le modèle I soit réalisable et reste donc défini dans son domaine de définition. La variance SGS du modèle II  $\tilde{V}_\xi^{II}$  reste correctement bornée entre 0 et  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}\tilde{\xi}\}$  lorsque le forçage est appliqué (ligne  $-\cdots-$ ) mais elle est dépassée la variance SGS maximale théorique calculée par  $\{\tilde{\xi}\} - \{\tilde{\xi}^2\}$  (ligne  $---$ ); son homologue ne subissant aucun forçage (symbole  $\circ$ ) n'est pas réalisable puisqu'il dépasse la variance SGS maximale théorique, qu'elle soit estimée à partir de  $\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2$  (symbole +), sur  $x/D \in [0, 5]$ , ou à partir de  $\tilde{\xi} - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$  (symbole  $\times$ ), aux environs de  $x/D \approx 2.5$ : ceci correspond bien à l'inéquation (6.34) précédente.

### Récapitulatif de l'étude

La Méth. 1 de reconstruction de la variance de sous-maille a été utilisée pour les modèles II et III. Elle consiste à élever au carré la valeur de  $\tilde{\xi}$  obtenue via son équation de transport (6.6) :  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}) = 0$ , afin d'obtenir  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$  qui permet ensuite de calculer la variance SGS du modèle II et III, respectivement par :  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$  et  $\tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}\tilde{\xi} - \tilde{\Delta}_\xi$ . Ces variances SGS reconstruites sont comparées avec la solution de l'équation de transport pour la variance SGS (6.18) :  $\mathcal{L}(\tilde{V}_\xi^I) = 2\bar{\rho}D_{\text{sgs}}\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi} - 2\bar{\rho}c_\xi\tilde{V}_\xi^I/\tau_{\text{sgs}}$ . La dépendance des résultats au modèle de viscosité de sous-maille retenu est aussi étudiée.

Dans la partie suivante, on se propose de reconstruire la variance SGS II et III avec la Méth. 2, *i.e.* en utilisant directement l'équation de transport additionnelle pour le scalaire filtré au carré (6.16) :  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}(\tilde{D} + D_{\text{sgs}})\tilde{\nabla}\tilde{\xi} \cdot \tilde{\nabla}\tilde{\xi}$ .

### 6.7.3 Analyse des profils des variances scalaires : 2<sup>e</sup> méthode de reconstruction

Comme le soulignait KAUL *et al.* [104] dans les analyses a priori de leurs données DNS et comme le confirme notre étude LES (§ 6.7.1) : le scalaire filtré au carré est toujours plus petit lorsqu'il est calculé à partir du champs scalaire résolu  $\tilde{\xi}$ , vérifiant (6.6) (en l'élevant au carré pour obtenir  $\tilde{\xi}\tilde{\xi} = \tilde{\xi}^2$ ) en comparaison de celui directement transporté (6.16). Ainsi, en utilisant directement ce dernier dans l'évaluation de la variance SGS du modèle II et III, on peut s'attendre à ce que le résultat produise des variances SGS plus faibles. On conjecture qu'il doit être possible de retrouver des évolutions similaires et éventuellement compatibles avec celles fournies par le bilan de variance SGS transportés (6.18).

### Équivalence des modèles I, II et III

Comme dans la partie précédente, une analyse a priori peut être formellement effectuée par le biais de l'opérateur des termes sources / puits sous forme discrète. De la même manière, en appliquant cet opérateur à la définition de la variance SGS des modèles II et III, cela conduit à l'ensemble

d'équations de transport équivalentes suivantes pour les modèles de variance SGS

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^I \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{V}_\xi \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^I) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2) = L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) \end{array} \right. \quad (6.35a)$$

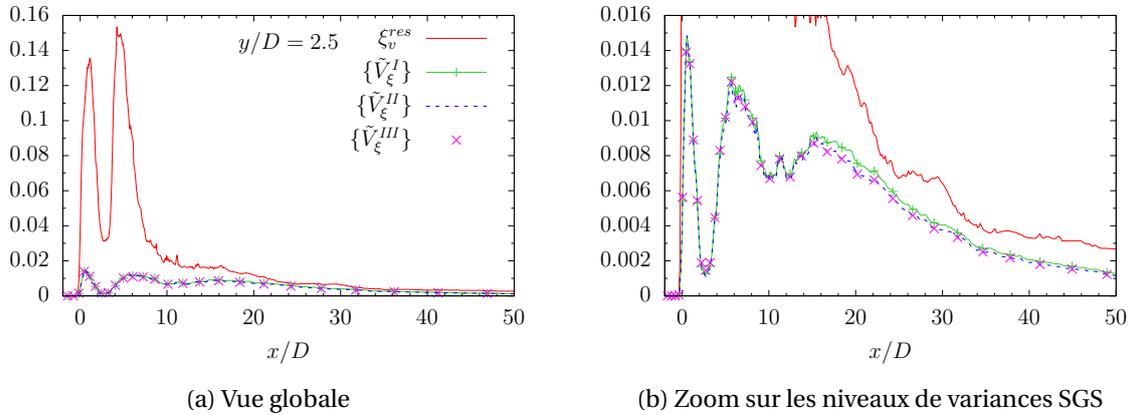
$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2 \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^{II}) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) \end{array} \right. \quad (6.35b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi \\ L_f^{\text{equiv}}(\tilde{V}_\xi^{III}) \equiv L_f(\tilde{\xi}) - L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\Delta}_\xi) \equiv 0 - L_f(\tilde{\xi}^2) + L_f(\tilde{\xi}^2) \equiv L_f(\tilde{\xi}^2) - L_f(\tilde{\xi}^2) \end{array} \right. \quad (6.35c)$$

où les termes en **gras** correspondent aux quantités transportées et utilisées dans les différentes modélisations de la variance SGS. Par rapport à (6.29), l'introduction de l'équation de transport équivalente  $L_f^{\text{equiv}}(\tilde{\xi} \tilde{\xi}) = L_f(\tilde{\xi}^2) + \epsilon_{\tilde{\xi}^2}$  n'est plus nécessaire et cette analyse montre finalement que

$$L_f(\tilde{V}_\xi^I) = L_f(\tilde{V}_\xi^{II}) = L_f(\tilde{V}_\xi^{III}) \quad (6.36)$$

Ceci démontre que, pour un modèle de viscosité SGS donné, la Méth. 2 mène à une formulation identique des 3 modèles de variance SGS (I, II et III), qui sont alors numériquement équivalents comme le confirme la Fig. 6.7.



**FIG. 6.7** – Profils longitudinaux en  $(y/D, z/D) = (2.5, 0)$  de la variance résolue  $\xi_v^{\text{res}}$  et de sous-maille moyenne  $\{\tilde{V}_\xi\}$  obtenue pour les 3 modèles de variance SGS utilisant la Méth. 2 de reconstruction et le modèle de Smagorinsky.

### Complément d'analyse : cas réactifs, variance SGS II négative

Pour des analyses et des discussions plus approfondies concernant la précision de ces méthodes de reconstruction : KEMENOV *et al.* [111] ont utilisé la Méth. 1 qui semble pouvoir produire des variances SGS négatives via le modèle II, pour leur maillage le plus raffiné et en champ lointain de leur LES réactive de flamme jet de diffusion pilotée de Sandia D. Il peut être intéressant de discuter de ce comportement particulier que nous ne retrouvons pas et bien qu'il soit déjà discuté par ces mêmes auteurs. En effet, d'après eux, cette particularité peut être liée à une convergence plus rapide de  $\tilde{\xi}^2 \equiv \tilde{\xi} \tilde{\xi}$  comparé à  $\tilde{\xi}^2$ . Analysons ce comportement autrement, une variance SGS négative signifie

que

$$\begin{aligned} \widetilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \widetilde{\xi}^2 - \widetilde{\xi}\widetilde{\xi} \leq 0 &\iff \widetilde{\xi}^2 \leq \widetilde{\xi}\widetilde{\xi} \\ &\iff \begin{cases} \text{(i)} & \widetilde{\xi}^2 \text{ est trop petit} \\ \text{(ii)} & \widetilde{\xi}\widetilde{\xi} \text{ est trop grand.} \end{cases} \end{aligned} \quad (6.37)$$

Toutefois, concernant (ii), nous avons montré que  $\widetilde{\xi}\widetilde{\xi} \leq \widetilde{\xi}^2$  presque partout (6.25). De plus, si la solution de l'équation de transport pour  $\widetilde{\xi}^2$  était utilisée, cela mènerait exactement à la variance SGS du modèle I qui est toujours réalisable d'après KEMENOV *et al.* [111]. Par ailleurs, l'utilisation des faibles valeurs de  $\widetilde{\xi}\widetilde{\xi}$ , pour reconstruire la variance SGS II, devrait augmenter cette dernière et non la diminuer jusqu'à atteindre éventuellement des valeurs négatives.

Si l'on considère maintenant (i) de faibles valeurs de  $\widetilde{\xi}^2$ , ce cas peut se produire uniquement si le taux de dissipation scalaire filtré est sur-estimé car suivant (6.16) :  $\mathcal{L}(\widetilde{\xi}^2) = -2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_\xi$ . Or, en champ lointain, le SDR SGS  $c_\xi D_{\text{sgs}} \widetilde{V}_\xi / \Delta^2$  ne peut pas être a priori élevé étant donné que la diffusivité SGS ainsi que la variance SGS sont normalement faibles en champ lointain. Néanmoins, ce dernier point peut aussi être discuté, dans la mesure où nous avons vu qu'avec la Méth. 1, la variance SGS II peut être supérieure à la variance résolue, voir Figs. 6.3(c) et 6.3(d). En revanche, bien que le carré du gradient scalaire  $\widetilde{\nabla}\widetilde{\xi} \cdot \widetilde{\nabla}\widetilde{\xi}$  soit aussi normalement faible en champ lointain, ce dernier est pondéré par la diffusivité moléculaire  $\widetilde{D}$  qui peut être significativement grande du fait de la température élevée dans la zone de flamme. Ce niveau de température semble être capturé avec leur maillage le plus fin et peut donc conduire à des variances SGS II négatives.

### Comportement asymptotique : limite DNS

Finalement, un autre argument en faveur de la Méth. 2 est d'analyser le comportement asymptotique lorsque la taille du filtre / de maille  $\Delta$  diminue, *i.e.* la limite DNS. Dans cette limite,  $\widetilde{\xi}^2$  devrait tendre vers  $\xi^2$  et la variance scalaire SGS devrait tendre vers 0 car les termes de production et destruction tendent aussi vers 0. Ceci est a priori le cas pour le modèle I, puisque  $D_{\text{sgs}} \xrightarrow{\Delta \rightarrow \varepsilon} 0$ , avec  $\varepsilon$  un nombre arbitrairement faible, de telle sorte que  $L_f(\widetilde{V}_\xi^I) = 2\bar{\rho}D_{\text{sgs}}\widetilde{\nabla}\widetilde{\xi} \cdot \widetilde{\nabla}\widetilde{\xi} - 2\bar{\rho}c_\xi \widetilde{V}_\xi^I / \tau_{\text{sgs}}$  soit équivalent à  $L_f(0) = 0$ . Ceci contraste avec les modèles II et III qui devraient être altérés par l'erreur numérique  $\varepsilon_{\xi^2}$  (6.25), alors que la Méth. 2 semble a priori assurer une évolution vers la limite DNS pour les 3 modèles de variance SGS (6.35).

## 6.8 Conclusions

Des simulations aux grandes échelles 3D inertes d'une configuration représentative des *scramjets* en terme de conditions opérationnelles ont été réalisées dans le but d'étudier et d'estimer la variance scalaire de sous-maille (SGS). La modélisation de ce terme non résolu par la grille de calcul est essentielle dans l'étude du mélange scalaire car elle représente les fluctuations de cette dernière à l'échelle non-résolue et permet ainsi d'estimer la variance ou écart-type totale statistique du scalaire. Par ailleurs, elle est aussi essentielle dans la modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée étant donné qu'elle rend compte des hétérogénéités / fluctuations de composition à l'échelle de la sous-maille et elle peut ainsi affecter des grandeurs plus macroscopiques telles que celles associées à la stabilisation de la flamme, *e.g.* hauteur de décrochage (*lift-off height*) de la flamme ou le champ global du taux de dégagement de chaleur.

Les principaux objectifs de cette partie étaient d'évaluer :

- (i) Deux méthodes de reconstruction de la variance SGS :

- Méth. 1 consiste à estimer le scalaire filtré au carré à partir du champ scalaire résolu et transporté par  $\mathcal{L}(\tilde{\xi})$  afin d'obtenir  $\tilde{\xi}\tilde{\xi}$  ;
- Méth. 2 évalue directement la solution de l'équation de transport pour le scalaire filtré au carré  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2)$ .
- (ii) Trois modélisations différentes de la variance SGS :
- Modèle I calcule et transporte directement la variance SGS  $\tilde{V}_\xi^I$  ;
- Modèle II transporte le scalaire au carré filtré  $\tilde{\xi}^2$  et reconstitue alors la variance SGS soit par l'opération  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}\tilde{\xi}$  (Méth. 1), soit par  $\tilde{V}_\xi^{II} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$  (Méth. 2) ;
- Modèle III transporte l'écart à la variance maximale  $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi}(1-\tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$  et reconstruit la variance SGS, via sa définition, soit par  $\tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}\tilde{\xi} - \tilde{\Delta}_\xi$  (Méth. 1), soit par  $\tilde{V}_\xi^{III} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 - \tilde{\Delta}_\xi$  (Méth. 2).
- (iii) La dépendance de la variance SGS au modèle de viscosité SGS, ici le modèle de Smagorinsky par rapport au modèle WALE.

Concernant le point (ii), les formulations mathématiques de ces 3 différents modèles (I, II et III) sont parfaitement équivalentes au niveau continu. Cependant, elles peuvent montrer des différences significatives au niveau discret dues aux erreurs numériques associées majoritairement à la discrétisation et aussi potentiellement aux modèles retenus (viscosité SGS et taux de dissipation scalaire filtré).

Les principaux résultats montrent que, pour un maillage donné, avec la méthode de reconstruction Méth. 1 :

- Les variances résolues et non-résolues (SGS), issues du modèle I, sont très dépendantes du modèle de viscosité SGS retenu. En effet, plus cette dernière est importante, plus elle introduit de diffusion et donc de dissipation, par conséquent, plus elle réduira les niveaux de ces variances.
- Les variances SGS II et III, sont équivalentes et semblent être contrôlées, en champ proche, par les niveaux de gradient scalaire importants qui, via le terme puis représenté par le taux de dissipation scalaire (SDR) résolu dans  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2)$ , va diminuer la variance SGS II et III. En revanche, en champ lointain, elles sont plus affectées par la diffusivité SGS, via le SDR de sous-maille modélisé par le modèle de relaxation linéaire et, puisque la contribution du SDR résolu est moins significative du fait des faibles valeurs du carré du gradient scalaire, plus la diffusivité SGS est grande, plus les variances SGS II et III sont petites en champ lointain.
- Pour les 2 modèles de viscosité SGS, les modèles II et III peuvent estimer des variances supérieures à la variance résolue, notamment en périphérie et loin de l'injection.
- Le forçage aux bornes de variation de ces scalaires est nécessaire afin de conserver une solution physique, plus particulièrement pour le scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$  transporté. Bien qu'avec / sans forçage le modèle II n'est pas systématiquement réalisable, étant donné qu'il peut dépasser son domaine de définition, alors que le modèle I l'est toujours.

En revanche, avec la Méth. 2 de reconstruction :

- Il a été montré par l'étude a priori de KAUL *et al.* [104] et cela semble être confirmé par nos analyses et calculs LES, que le transport du scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$  via  $\mathcal{L}(\tilde{\xi}^2)$  n'est pas superflu. En effet, la solution de ce dernier semble produire un estimateur du scalaire filtré au carré supérieur à la solution issue de  $\mathcal{L}(\tilde{\xi})$ , i.e.  $\tilde{\xi}^2 \geq \tilde{\xi}\tilde{\xi}$  presque partout. Cette différence est principalement due à des erreurs numériques et assurément, aussi aux fermetures des termes de sous-maille.
- Cette dernière méthode démontre finalement que ces 3 modèles de variance SGS sont bien équivalents, cohérents et évaluent la même variance SGS.

Le dernier ensemble d'analyses et de discussions suggère que la Méth. 1 d'évaluation de la variance SGS II et III n'est pas cohérente avec le comportement asymptotique attendu. Lorsqu'on tend

vers la limite DNS, on devrait retrouver une variance tendant vers zéro lorsque la taille de maille diminue. Par ailleurs, cette méthode de reconstruction peut mener, d'après KEMENOV *et al.* [111], à des variances II négatives dans les zones de flamme et pour des maillages fins. Ceci désavantage encore une fois le modèle II associé à la Méth. 1 de reconstruction. Ainsi, cette méthode devrait être évitée puisqu'elle introduit aussi des erreurs de troncature plus importantes que la Méth. 2. De plus, l'emploi du modèle II devrait aussi être évité puisqu'il n'est pas systématiquement réalisable comme la montré KEMENOV *et al.* [111] et nos analyses.

Finalement, l'ensemble de ces analyses suggère que la Méth. 2 de reconstruction de la variance SGS est inutile puisqu'elle nécessite le transport d'une équation supplémentaire pour le scalaire filtré au carré  $\tilde{\xi}^2$ . D'autre part, elle mène à une solution identique à celle obtenue en transportant directement la variance SGS, via le modèle I. C'est pourquoi, en pratique, l'évaluation directe de la variance SGS par son équation de transport semble être la solution la plus viable.

## Chapitre 7

# Simulation aux grandes échelles réactive du JISCF basée sur le modèle PSR

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Introduction et éléments de bibliographie</b>	<b>131</b>
<b>7.2</b>	<b>Paramètres de simulation</b>	<b>136</b>
<b>7.3</b>	<b>Dynamique de l'écoulement réactif et structure de flamme</b>	<b>137</b>
7.3.1	Évolution temporelle de l'écoulement réactif	137
7.3.2	Structure de flamme	137
7.3.3	Champs aérodynamiques globaux à $t^* = 170$	142
7.3.4	Champs réactifs globaux à $t^* = 170$	144
<b>7.4</b>	<b>Analyse globale des grandeurs moyennes</b>	<b>148</b>
7.4.1	Résolution du calcul	148
7.4.2	Champs moyens réactifs	149
<b>7.5</b>	<b>Analyse des régimes de combustion rencontrés dans le JISCF</b>	<b>152</b>
7.5.1	Régimes d'écoulement	152
7.5.2	Études préliminaires : auto-allumage <i>versus</i> propagation	153
7.5.2.1	Paramètres de calcul	154
7.5.2.2	Caractérisation de l'auto-allumage	154
7.5.2.3	Caractérisation des phénomènes de propagation de flamme	155
7.5.3	Régimes de combustion turbulente prémélangée	155
7.5.4	Régimes de combustion turbulente sur le diagramme $(Da, Re_t)$	158
7.5.4.1	Nombre de Damköhler basé sur la production de vapeur d'eau	159
7.5.4.2	Nombre de Damköhler basé sur la propagation de la flamme	161
7.5.4.3	Nombre de Damköhler basé sur l'auto-allumage	163
<b>7.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>165</b>

---

### 7.1 Introduction et éléments de bibliographie

L'objectif de cette section est d'apporter quelques éléments fondamentaux concernant la physique du mélange et de la combustion en écoulement supersonique. Nous étudierons notamment la structure de flamme, discuterons des mécanismes de stabilisation ainsi que les différents régimes de combustion qui peuvent être rencontrés sur la configuration particulière du jet pariétal dans un écoulement supersonique (JISCF), ceci afin de mieux comprendre les mécanismes clés permettant d'orienter vers d'éventuelles stratégies de modélisation, de simulation ou de dimensionnement d'une

telle configuration. Comme évoqué au § 5 « JISCF : analyse générale de l'écoulement inerte », les études expérimentales réactives, sur des géométries représentative des *scramjets*, sont encore assez peu nombreuses. Les mesures sont difficiles à mettre en œuvre ou sont parfois classifiées, les domaines d'études se cantonnent généralement à la zone proche de l'injection et ne s'étendent que très peu en aval de cette dernière. C'est pourquoi les simulations numériques sont elles aussi employées pour étudier finement ce type de configuration, mais elles ne se limitent souvent qu'à des études qualitatives. Nous présenterons ci-après un aperçu de quelques études numériques et expérimentales conduites sur cette configuration dans des conditions d'écoulement se rapprochant de celles que nous étudierons ( $J \approx 2.56$  et  $\Phi \approx 0.4$ ).

LARSSON *et al.* [115] simulent en LES la configuration *HyShot II* et utilisent une couche limite turbulente en entrée avec un modèle de paroi. Le modèle de combustion retenu pour leur cas se base sur le mécanisme  $H_2/O_2$  de Stanford (9 espèces + 20 réactions) avec un modèle de flammelette stationnaire ( $\tilde{\xi}, \tilde{\xi}''^2$ ) utilisant une PDF présumée de type  $\beta$ . Ce modèle est aussi associé à une variable de progrès  $\tilde{c}$ . Ces auteurs montrent que l'emploi de cette modélisation peut permettre de restituer une flamme décrochée. Cependant, il est surprenant de constater que la concentration du radical OH obtenue, semble indiquer que la région directement en aval de l'injection brûle de façon importante avec une forte concentration du radical  $OH^*$  alors que leur paroi est isotherme et froide ( $T_w = 300$  K) tandis que les visualisations expérimentales montrent plutôt une répartition des zones réactives similaires à celle obtenues par GAMBA et MUNGAL [71] pour  $J = 5$  (cf. Fig. 7.3). Ce constat amène les auteurs à conclure que ce modèle de flammelette est à utiliser avec beaucoup de précaution pour ce type de configuration.

FUREBY *et al.* [68] simulent aussi cette même configuration *HyShot II*, pour  $J = 1.1$ , avec une paroi isotherme, en utilisant un modèle PaSR et le mécanisme de Davidenko (7 espèces + 8 réactions). Ces auteurs montrent que l'allumage a lieu assez loin de l'injection, aux alentours de  $30$  à  $60D$ . D'après eux, il est provoqué par des points chauds issus de la convergence des structures de choc dans la chambre de combustion et est soutenu par la recirculation des produits de combustion chauds.

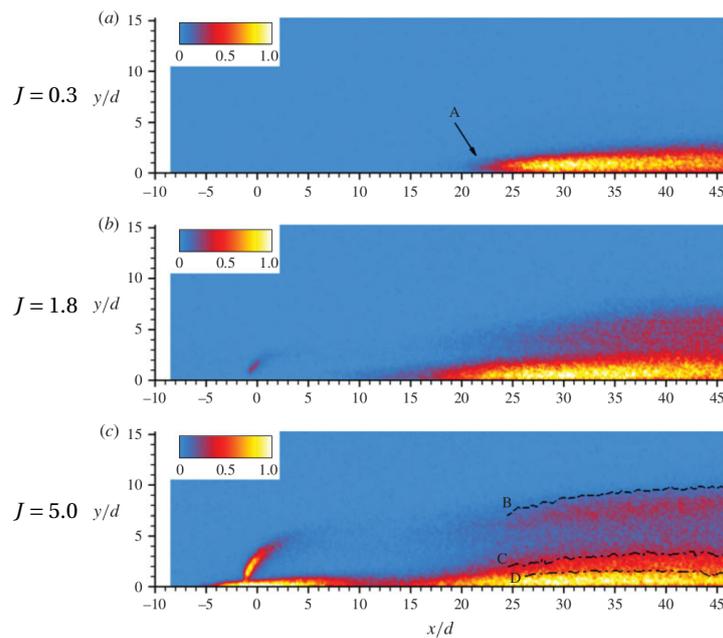
INGENITO *et al.* [98] montrent, par leur simulation LES, l'importance du terme barocline et des effets dilatationnels sur le mélange, la zone de stabilisation de la combustion et sur les échelles de la turbulence. Ils utilisent pour cela des propriétés de transport simplifiées basées sur l'approximation d'Hirschfelder et Curtiss. Le modèle EDC [126] est employé avec le mécanisme cinétique détaillé de Warnatz (9 espèces + 38 réactions). Leur rapport de flux de quantité de mouvement est plus faible ( $J \approx 0.5$ ) que notre propre point de fonctionnement, mais leur richesse globale est équivalente à notre cas ( $\Phi = 0.426$ ). Leurs résultats montrent une distribution de l'émission moyenne du radical OH similaire à celle observée par GAMBA et MUNGAL [71] pour  $J = 0.3$ . Cependant, la largeur de la zone réactive en aval du jet semble se restreindre à celle de son sillage et est confinée en hauteur. L'émission moyenne du radical OH semble prendre la forme d'un demi-cône, dont le sommet est positionné dans la zone de stabilisation de la combustion et dont la base est orientée vers l'aval de l'écoulement. Nous interprétons cette structure particulière en observant leurs différentes coupes longitudinale passant par l'injection ; transversales à l'écoulement et parallèles à la paroi.

GAMBA et MUNGAL [71] réalisent une étude expérimentale relativement poussée en comparant la structure de flamme sur la configuration JISCF pour différentes valeurs du rapport de flux de quantité de mouvement  $J \in [0.3, 5]$ . Ils montrent que ce paramètre  $J$  contrôle le processus de combustion, sans pour autant préciser pour chaque cas la valeur de la richesse globale  $\Phi$ , avec l'apparition de 2 principaux modes (cf. Fig. 7.1) :

- (i) les faibles valeurs de  $J < 1$  : la flamme est *liftée* / décrochée et stabilisée dans le sillage du jet, près de la paroi. Après l'auto-allumage et un prémélange partiel, le dégagement de chaleur est prépondérant en proche paroi où le radical OH est très présent,
- (ii) les fortes valeurs de  $J > 3$  : la flamme est accrochée dans la zone de recirculation en amont du jet et reste attachée à la paroi dans la couche limite où le radical OH s'étend sur une grande région en amont du jet ainsi qu'en largeur. Par conséquent, il y a une interaction forte entre le choc

courbé, le jet, la couche limite et la flamme. La couche de mélange entre le jet et l'écoulement amont est par ailleurs fortement réactive et semble associée à la présence d'une flamme mince.

Il est essentiel de noter que ces auteurs utilisent les techniques de visualisation par chimiluminescence et PLIF (*Planar Laser Induced Fluorescence*), qui permettent de marquer la présence respective du radical  $\text{OH}^*$  (état excité) et  $\text{OH}$  (niveau fondamental) en supposant que ces derniers sont des traceurs du taux de dégagement de chaleur. Ils établissent ainsi une succession de post-traitements, relatifs à ces visualisations, en considérant que l'intensité émise par la présence du  $\text{OH}$  est proportionnel au taux de dégagement de chaleur. Nous reviendrons sur cette hypothèse lors de l'analyse de nos propres résultats.



**FIG. 7.1** – Champs moyens de chimiluminescence sur  $\text{OH}^*$  sur le plan  $XY$  en  $z/D = 0$  pour différentes valeurs de  $J$ . Durée d'exposition =  $2 \mu\text{s}$ . D'après GAMBA et MUNGAL [71].

Pour différentes valeurs de  $J$ , la Fig. 7.1 permet d'identifier clairement, par la technique de chimiluminescence<sup>1</sup>, les différentes régions où la réaction chimique a lieu, les structures de la flamme ainsi que les différents lieux de stabilisation  $x_s$  (Fig. 7.1, point A) de cette dernière. Dans les expériences menées par GAMBA et MUNGAL [71], l'écoulement amont est fixé à  $\text{Ma}_\infty = 2.4$ ,  $T_\infty = 1400 \text{ K}$  et  $p_\infty = 40 \text{ kPa}$ . La pression d'injection du combustible varie de manière à ce que le paramètre  $J$  soit compris entre 0.3 à 5 pour les différents points de fonctionnement. Les Figs. 7.1 à 7.3 permettent de mieux appréhender les structures de flamme et notamment les régions fortement réactives en proche paroi, via des plans  $XY$  longitudinaux et  $XZ$  parallèles à la paroi. Ainsi pour :

- $J = 0.3 < 1$  : la flamme est décrochée (A) et reste localisée au voisinage paroi. La zone réactive est confinée sur une épaisseur d'environ 2 mm et l'émission la plus intense du radical  $\text{OH}$  semble être située légèrement au-dessus de la paroi (et non à même la paroi).
- $J = 1.8 \gtrsim 1$  : la pénétration du jet augmente et la zone de stabilisation remonte vers l'injecteur. Les zones réactives sont localisées (i) entre le choc courbé et l'amont du jet (bien que la réaction  $y$  est très faible), (ii) dans la zone de sillage du jet (avec une émission moyenne) et (iii) en proche paroi où la flamme semble rester confinée avec une émission plus intense du radical  $\text{OH}$ .

1. La technique de chimiluminescence sur  $\text{OH}^*$  permet de mettre en évidence les régions entières où l'espèce  $\text{OH}^*$  est présente, cependant, les zones correspondantes sont intégrées spatialement suivant la profondeur de champ de la détection du signal.

- $J = 5.0 > 3$  : la zone réactive qui était initiée dans la couche de mélange, entre le choc courbé et l'injection, s'étend dans la zone de recirculation située en amont du jet et à la paroi. Cette dernière zone réactive va s'étendre jusqu'à fusionner avec la flamme stabilisée en aval du jet qui reste la région où l'émission du radical OH est la plus importante. Ainsi, dans ces conditions, la stabilisation de la combustion s'opère, non plus en aval du jet, mais en amont. Par ailleurs, la zone réactive qui se situait dans le sillage du jet, s'étend maintenant à la couche de mélange, côté écoulement principal (Fig. 7.1(c), ligne B). La zone inerte, sans aucune émission, correspondrait à une région d'extinction de la flamme dans la couche de mélange, certainement provoquée par le jet de combustible sous-détendu. En effet, lors de sa détente, celui-ci va voir sa température et sa pression diminuer de telle sorte que les conditions deviennent défavorables à la stabilisation de la combustion. De plus, l'accélération de l'écoulement augmente l'étirement tourbillonnaire dans la couche de mélange.

Cependant, le mélange entre le combustible et l'écoulement oxydant étant très rapide, les conditions de température et de pression sont relativement favorables pour ré-initier les processus d'auto-allumage.

Ces différentes études permettront d'apporter quelques éléments de comparaison avec notre propre simulation LES réactive dont les principales caractéristiques sont présentées ci-après.

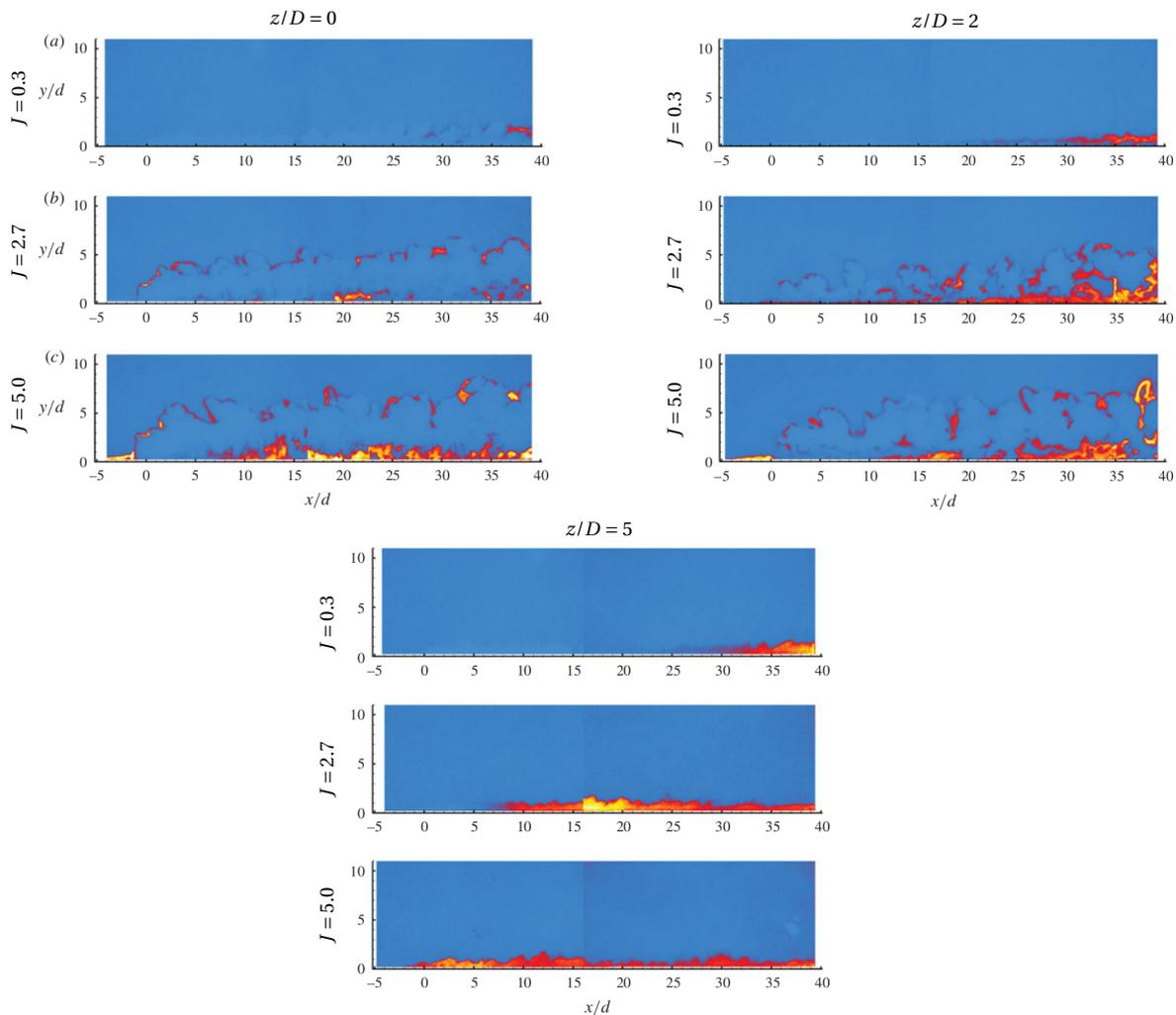
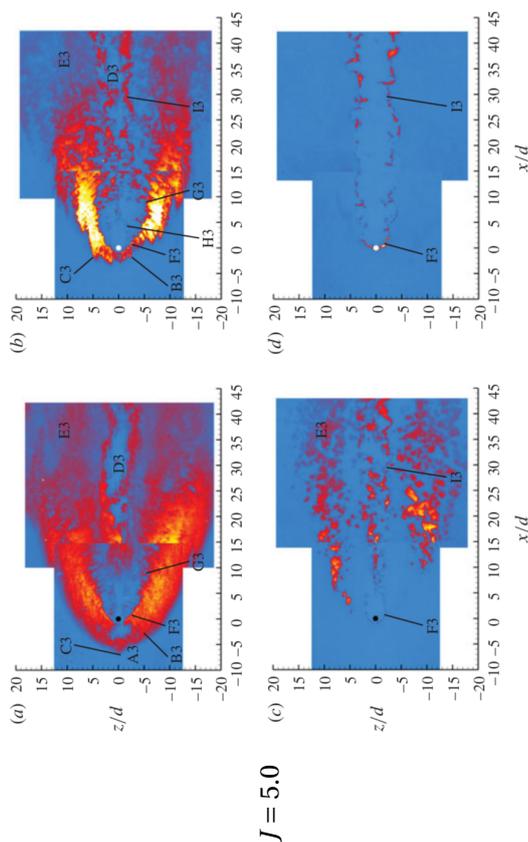
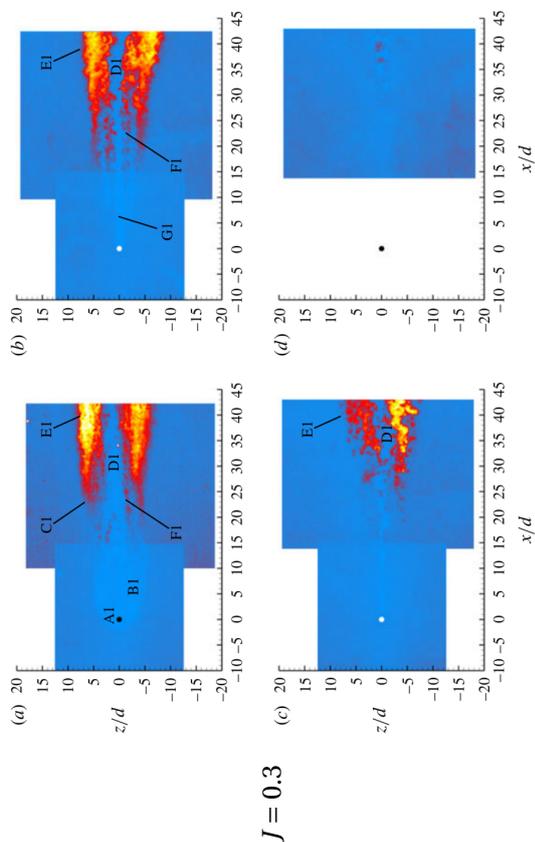
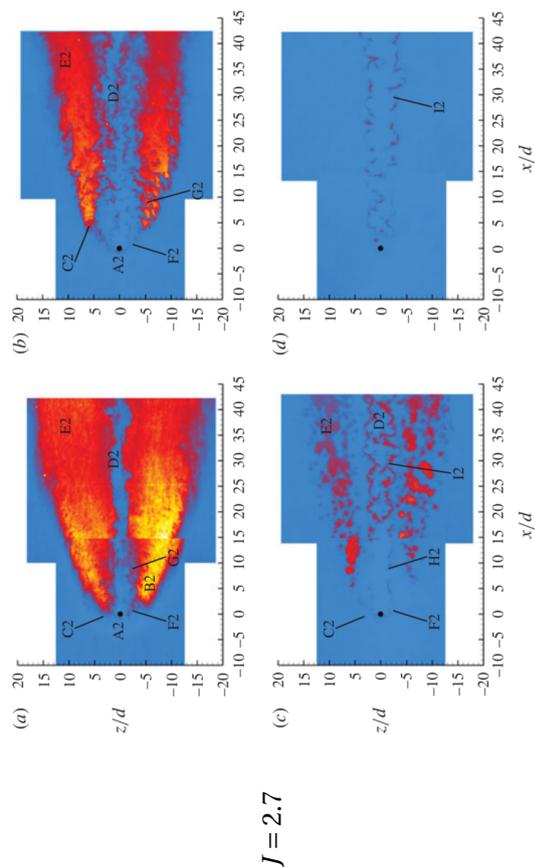


FIG. 7.2 – Champs instantanés de la PLIF par OH pour différentes valeurs de  $J$  et plans XY situés en  $z/D = 0, 2$  et  $5$ . D'après GAMBA et MUNGAL [71].



- A Point d'allumage
- B Zone de recirculation des tourbillons en fer à cheval
- C Point d'allumage ou de stabilisation
- D Zone de sillage non-réactive du jet en proche paroi, dans la couche limite
- E Région étendue de distribution du radical OH
- F Couches minces de OH dans la région en proche paroi
- G Structures pénétrantes en forme de doigts de OH dans le sillage en proche paroi
- H Couche mince de OH en proche paroi
- I Couche mince de OH dans la couche de mélange en champ lointain

Légendes des figures

**FIG. 7.3** – Champs instantanés de la PLIF par OH, pour différentes valeurs de  $J$ , sur les plans XZ en (a)  $y/D = 0.25$ , (b)  $y/D = 0.5$ , (c)  $y/D = 1.0$  et (d)  $y/D = 1.5$ . D'après GAMBA et MUNGAL [71].

## 7.2 Paramètres de simulation

La simulation aux grandes échelles réactive a été effectuée sur la configuration JISCF dont le domaine et le maillage retenus correspondent au « Mesh 2 » présenté § 5.2.2.

Cette simulation est basée sur une résolution simultanée, d'une part des équations filtrées de masse (3.11), de quantité de mouvement (3.12), d'espèce (3.13), d'énergie totale (3.22) (seconde formulation – VREMAN [205]), et d'autre part, de l'équation de la fraction de mélange filtrée (6.6). Une description simplifiée des flux moléculaires (§ 2.5, approximation d'Hirschfelder et Curtiss : niveau 1) ainsi que des coefficients de transport (§ 2.6) est retenue. Le modèle de viscosité SGS WALE (3.37) a été utilisé et la partie isotrope du tenseur de viscosité SGS  $\tau_{kk}^{\text{sgs}}$  est modélisée par le modèle de Yoshizawa (3.41). Les paramètres de modélisation sont fixés à  $(C_s, C_I, Sc_{\text{sgs}}, Pr_{\text{sgs}}) = (0.1, 0.066, 0.7, 0.7)$ . Le senseur de choc modifié d'ADAMS et SHARIFF [1] (§ 3.5.3.2) est utilisé pour le déclenchement de la pondération non linéaire du schéma WENO7 à partir d'une valeur seuil  $\sigma_{\text{seuil}}$  réglée entre 10 à 15 %, les coefficients optimaux étant utilisés par défaut. Le senseur de DUCROS *et al.* [56] (§ 3.5.3.2) est par ailleurs utilisé pour annuler la viscosité SGS dans les zones de choc. Le paramètre de stabilité CFL est ajusté durant la simulation entre 0.9–1.2 ; tandis que, le nombre de Fourier  $Fo$  a été fixé à 0.9 et la variation de température maximale admise durant l'intégration des termes sources chimiques est fixé à  $\Delta \tilde{T}_{\text{max}} = 20 \text{ K}$  mais ces derniers ne sont jamais limitants. Le modèle PSR (§ 4.4) est utilisé pour évaluer les termes sources chimiques, par conséquent nous considérerons que  $\tilde{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) = \hat{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{\mathbf{Y}})$  (4.22). Le schéma cinétique réduit de BOIVIN *et al.* [19] à 4 étapes, 6(+1) espèces et 2 espèces en AEQS est utilisé. Ce dernier est présenté Annexe D.2.1 et bien qu'il a été testé et validé sur de nombreux cas tests, ce dernier ne semble jamais avoir été utilisé sur un quelconque système réactif canonique, ainsi le travail présenté ici est inédit. Enfin, l'intégration de ces termes sources est conditionnée par une pré-évaluation d'une variation  $|\Delta Y_\alpha| > 10^{-15}, \forall \alpha$ .

Les conditions aux limites sont celles présentées § 5.3 et nous rappellerons principalement que le rapport de flux de quantité de mouvement est  $J = 2.56$  et la richesse globale est  $\Phi = 0.4$ . Ce calcul réactif a été initialisé à partir du calcul inerte où l'écoulement est considéré comme établi, présenté au § 5.4 « Simulations aux grandes échelles inerte du JISCF », dans lequel il a été simulé un temps physique correspondant à environ  $t \approx 150D/u_\infty \approx 230 \mu\text{s}$ . Il est important de noter que ce calcul inerte a été lui-même initialisé, dans tout le domaine, avec la condition au limite d'entrée de l'écoulement transverse via les profils de vitesse et de température (cf. Fig. 5.7). Par conséquent, avec ces conditions, la paroi est déjà hors température ambiante d'expérimentation (300 K, généralement) et est donc initialement à environ  $T_w(t=0) = 1200 \text{ K}$  lorsque le calcul inerte démarre. Puis, lorsque ce calcul réactif démarre, la température de paroi est déjà comprise entre au moins 1130 et 1530 K, suivant le champ Fig. 5.32. Ainsi, il est fort probable que nous nous éloignons un peu plus des conditions expérimentales qui sont d'une part, celle de VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202], mais aussi d'autres configurations expérimentales initialisées de la même façon.

Pour cette phase de calcul réactif, le temps physique simulé est d'environ  $t = 170D/u_\infty = 260 \mu\text{s}$ . Durant ce temps, 2250 champs sont enregistrés avec une fréquence d'acquisition de 8.70 MHz, soit toutes les 0.115  $\mu\text{s}$ , permettant ainsi de capturer la phase transitoire d'auto-allumage et des éventuels mécanismes instationnaires de propagation–diffusion de la flamme. Cependant, la convergence statistique en champ lointain n'est pas nécessairement atteinte du fait des ressources de calcul limitées et des temps de restitution relativement longs. Le pas de temps moyen du calcul (CFL limitant) est de l'ordre de 3 ns. Enfin, ce calcul a consommé environ 3 600 000 h scalaire avec 16 384 processus MPI, sur le super-calculateur Turing de l'IDRIS [97]. Par la suite, nous adimensionnerons le temps par  $t^* = u_\infty(t - t_i)/D$ , avec  $t_i$  le temps initial à partir duquel la combustion est activée.

## 7.3 Dynamique de l'écoulement réactif et structure de flamme

### 7.3.1 Évolution temporelle de l'écoulement réactif

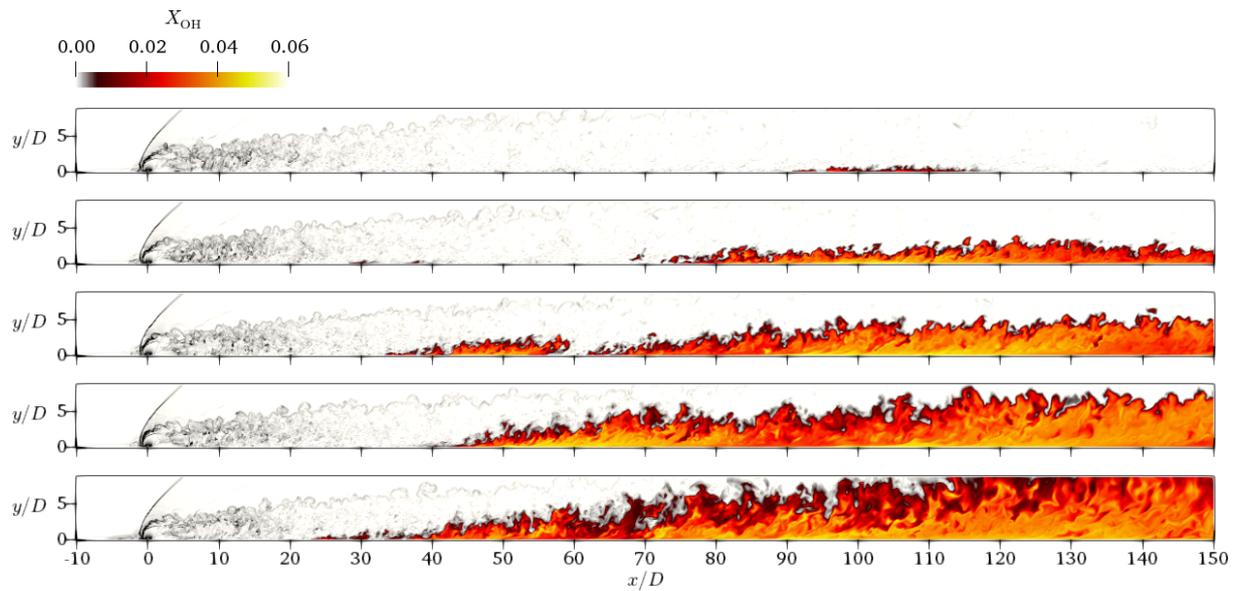
Afin d'étudier la dynamique de l'écoulement réactif, les Figs. 7.4 et 7.5 présentent différents champs instantanés de la fraction molaire du radical OH, cette dernière pourrait se comparer à d'éventuelles visualisations expérimentales par PLIF sur cette même espèce. Ces champs sont extraits sur le plan médian XY passant par l'injection et le plan parallèle à la paroi XZ à  $y/D = 0.25$ , aux instants  $t^* = 40, 60, 80, 100$  et  $170$  où l'intervalle  $\Delta t = 20D/u_\infty \approx 30.5 \mu\text{s}$ . À titre d'information, pour atteindre ces différents instants, il aura fallu consommer respectivement 1.03, 1.08, 1.72, 2.05 et 3.60 millions d'heures scalaires de calcul à partir de l'état initial non réactif.

Nous voyons clairement qu'à  $t^* = 40$ , l'auto-allumage du mélange a commencé à se mettre en place en proche paroi. Ceci peut s'expliquer par des temps de résidence plus longs du fait de la condition d'adhérence auxquels s'ajoute l'augmentation de la température par le frottement visqueux, favorisant ainsi des conditions propices à l'auto-allumage au voisinage de la paroi. FUREBY *et al.* [68] décrivent en revanche un allumage par focalisation des chocs et soutenu par la recirculation des gaz brûlés. MOULE *et al.* [142] expliquent aussi un processus d'allumage et de stabilisation relativement similaire, *i.e.* par une influence directe des zones de recompression qui induisent l'allumage du mélange sur la configuration de la flamme jet supersonique de CHENG *et al.* [46]. Il serait néanmoins possible de voir à  $t^* = 20$  (non affiché), sur ces mêmes plans, que l'auto-allumage a aussi déjà débuté mais la production du radical OH à cet instant reste trop faible pour être visible sur l'échelle de couleur retenue ( $X_{\text{OH}}$  entre 0 et 0.06). Ce constat permet de mettre en évidence de façon assez remarquable, que l'estimation du délai d'auto-allumage, via la réactivité  $\lambda$ , en post-traitement du calcul *non-réactif* moyenné (Fig. 5.34) est plutôt satisfaisante. En effet, une estimation à  $t_{\text{igni}} = 38.3 \mu\text{s} \approx 25u_\infty/D$  était initialement prédite dans la zone en proche paroi aux environs de la position  $x/D = 60$ , ce qui correspond bien au point d'allumage le plus proche de l'injection, comme le montre la Fig. 7.5. Par ailleurs, l'allumage ne se produit pas dans le sillage du jet, en proche paroi, mais de part et d'autre du sillage, formant 2 points ou « doigts » d'allumage. Ceci s'explique par le fait que la réactivité est moins importante dans le sillage du jet, étant donné que les structures cohérentes (paire de tourbillons contra-rotatifs et tourbillons en fer à cheval) tendent à ramener de l'hydrogène froid à la paroi comme l'ont montré les Figs. 5.32 et 5.33.

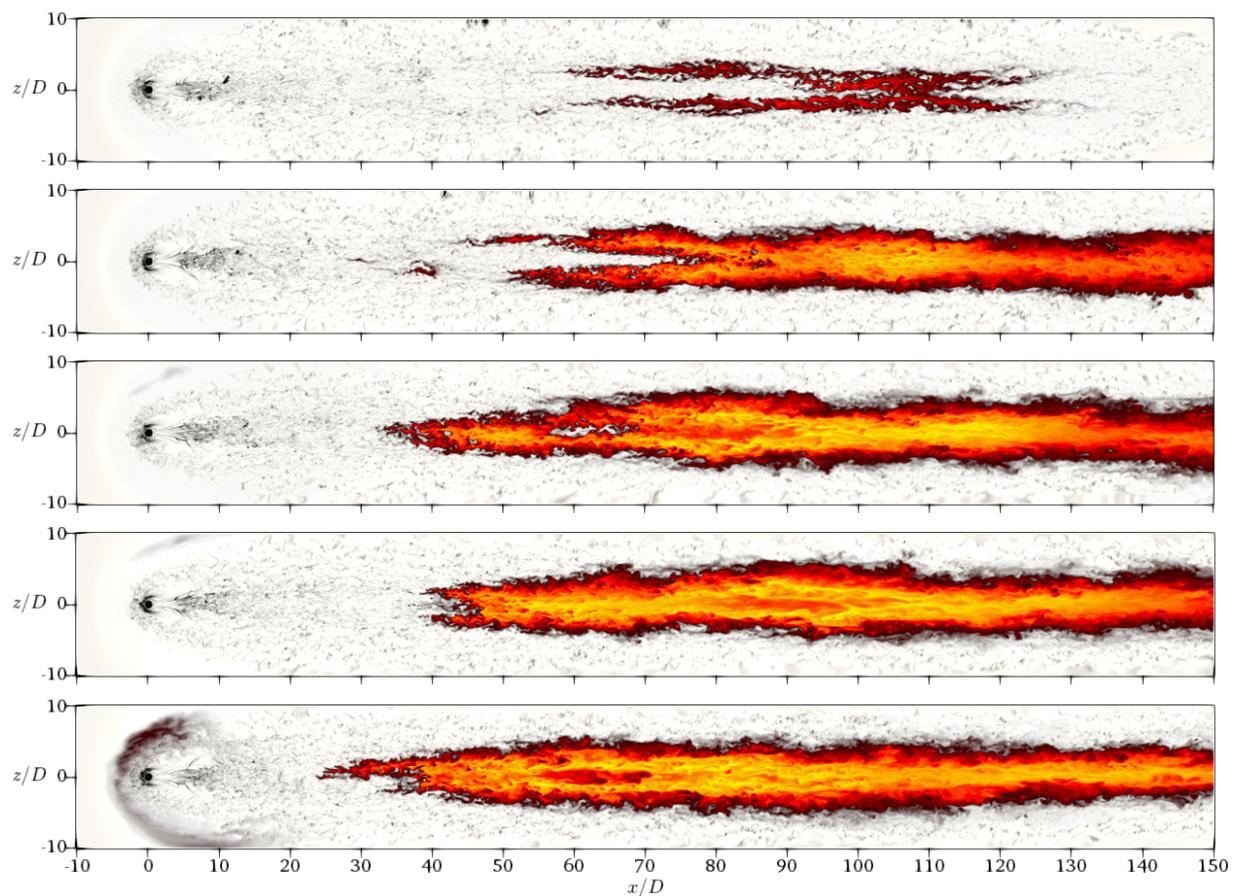
À  $t^* = 60$ , l'allumage du mélange se propage de proche en proche à partir de ces doigts d'allumage par augmentation de température issue du dégagement de chaleur initial, c'est l'emballement thermique (*thermal runaway*). Cette propagation se fait dans les 3 directions, sur la largeur, en hauteur, et surtout longitudinalement où elle s'étend extrêmement rapidement en aval de ces doigts mais aussi vers l'amont. Les autres instants  $t^* = 80, 100$  et  $170$  montrent que la zone réactive remonte vers l'injecteur et oscille, en passant de  $x/D = 60, 35, 40$  à  $x/D = 25$  où elle se stabilise. Les doigts d'allumage fusionnent complètement après  $t^* = 80$  pour atteindre une largeur s'étendant à  $z/D = \pm 5$ . La propagation de la zone réactive n'est pas confinée en proche paroi, elle se fait aussi sur la hauteur comme le montre la Fig. 7.4 où elle sort même du domaine de calcul à  $t^* = 170$ . Ceci ne semble pas incohérent avec les observations expérimentales de VINCENT-RANDONNIER *et al.* [202] réalisées pour un point de fonctionnement à  $\Phi = 0.2$ , en incluant un 2<sup>e</sup> injecteur, symétriquement positionné sur la paroi supérieure. Enfin, la concentration la plus importante du radical OH reste localisée en proche paroi, suggérant que la couche limite est une zone fortement réactive et nécessite donc une résolution fine pour capturer à la fois le gradient de vitesse mais aussi la réaction chimique qui s'y développe.

### 7.3.2 Structure de flamme

Lorsque l'écoulement est considéré comme établi à  $t^* = 170$ , les Figs. 7.6 et 7.7 montrent des champs de la fraction molaire  $X_{\text{OH}}$  pour différentes coupes spatiales suivants XY et XZ. Ainsi, nous pouvons voir sur les champs XZ à  $y/D = 0.25$  et  $0.5$ , que la zone de recirculation en amont du jet, for-



**FIG. 7.4** – Évolution temporelle sur le plan médian XY ( $z/D = 0$ ), du champ de fraction molaire du radical OH avec, en arrière plan, un Schlieren numérique. De haut en bas, à  $t^* = 40, 60, 80, 100$  et  $170$ .



**FIG. 7.5** – Évolution temporelle sur le plan XZ parallèle à la paroi, à  $y/D = 0.25$ , du champ de fraction molaire du radical OH avec, en arrière plan, un Schlieren numérique. De haut en bas,  $t^* = 40, 60, 80, 100$  et  $170$ .

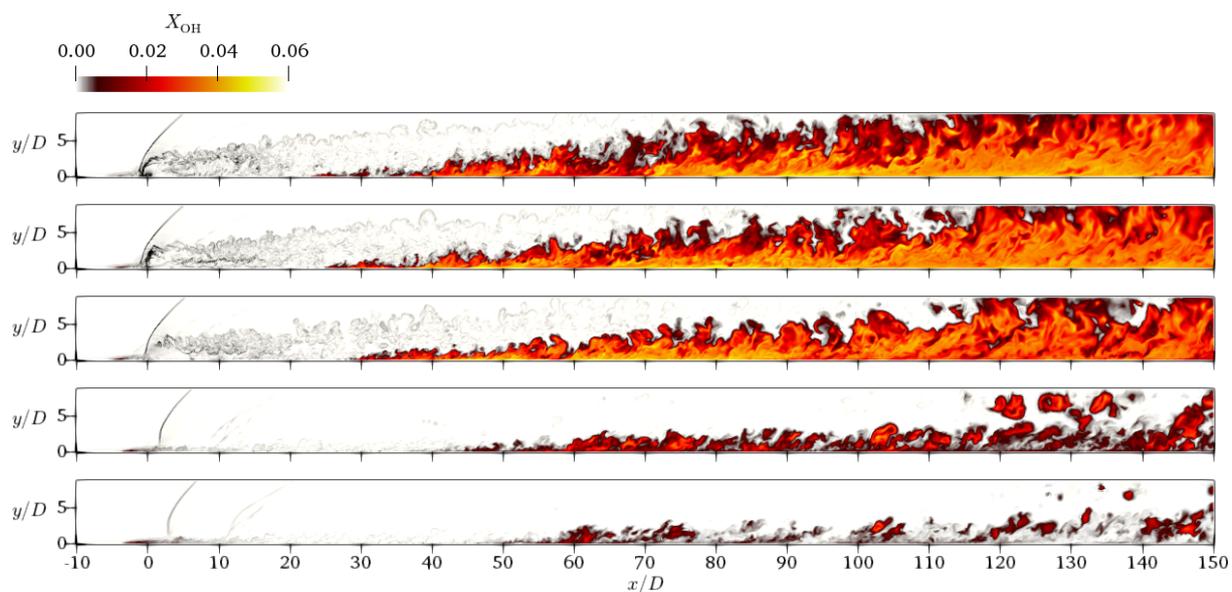


FIG. 7.6 – Évolution spatiale à  $t^* = 170$  du champ de fraction molaire du radical OH, sur différents plans longitudinaux XY avec, en arrière plan, un Schlieren numérique. De haut en bas,  $z/D = 0, 1, 2, 4$  et  $5$ .

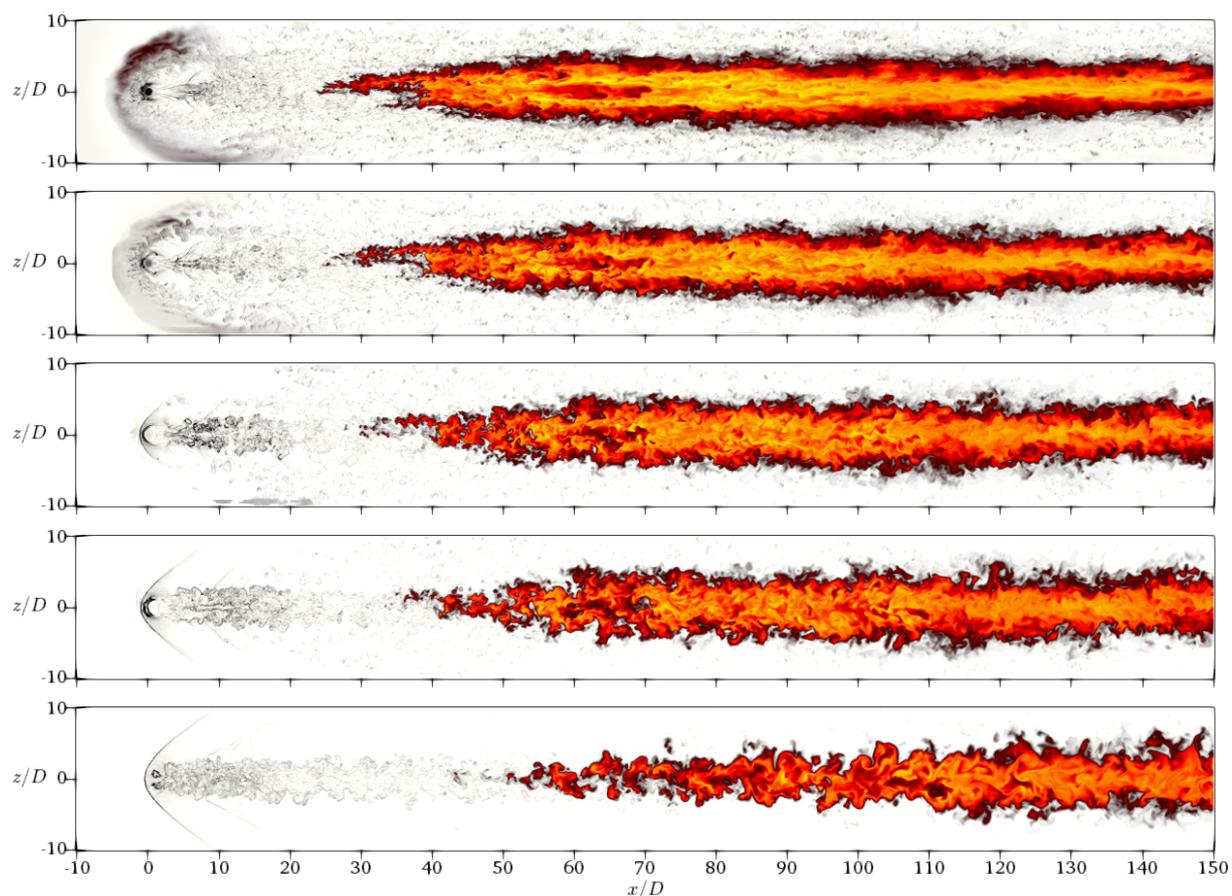


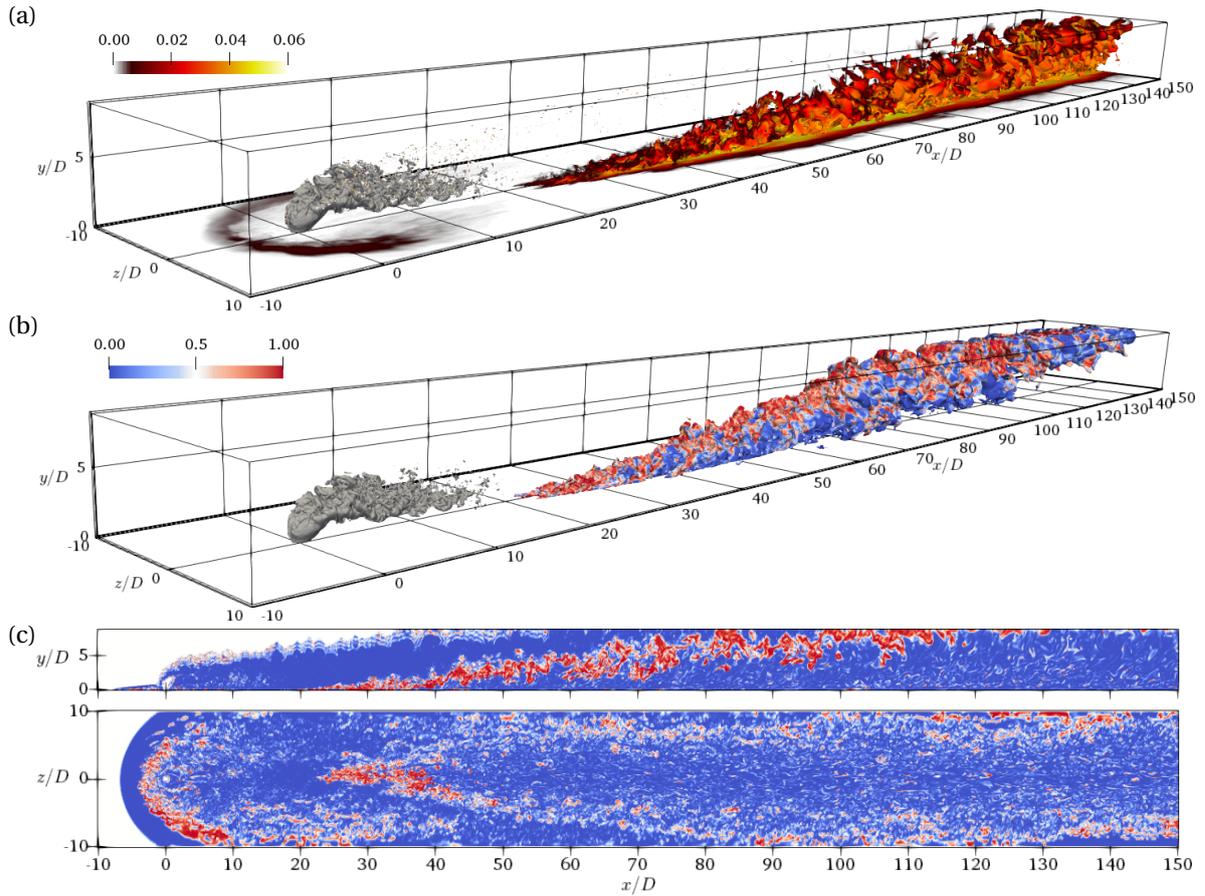
FIG. 7.7 – Évolution spatiale à  $t^* = 170$  du champ de fraction molaire du radical OH, sur différents plans parallèles à la paroi XZ avec, en arrière plan, un Schlieren numérique. De haut en bas,  $y/D = 0.25, 0.5, 1, 1.5$  et  $3$ .

mée au pied du choc en «  $\lambda$  », présente de faibles niveaux de concentration du radical OH, suggérant que cette zone est faiblement réactive. Néanmoins, comme nous l'avons vu précédemment, le sillage du jet en proche paroi est fortement réactif, est confiné en largeur entre  $z/D = \pm 5$  et l'extrémité de la zone réactive se stabilise en aval de l'injection vers  $x_s/D = 25$ . La zone de réaction n'est cependant pas confinée en hauteur et s'étend au-delà du domaine de calcul à partir de  $x/D \approx 110$ . Il semble que la couche de mélange sur la face supérieure du jet, ne soit pas réactive : elle ne produit pas de radical OH.

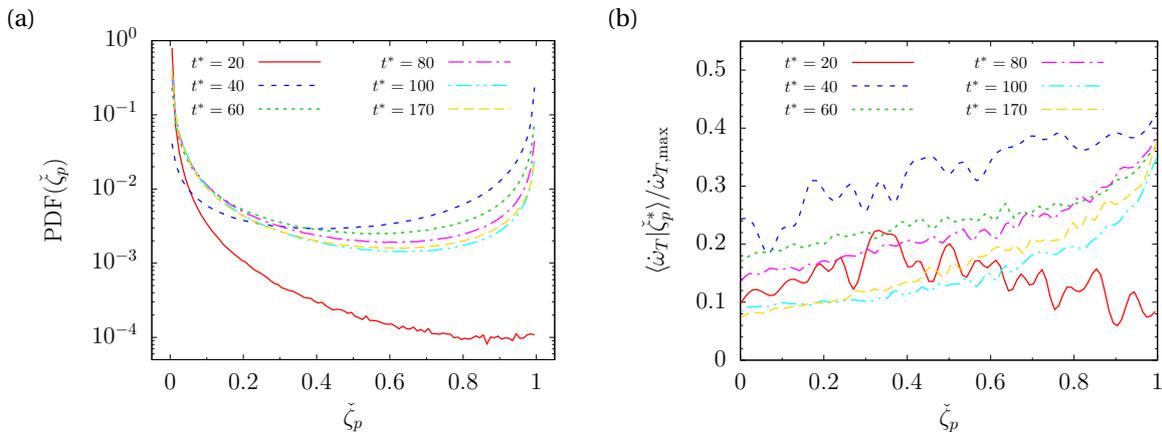
Ces différentes caractéristiques ne sont pas observées par GAMBA et MUNGAL [71] pour  $J \gtrsim 1$  (cf. Figs. 7.2 et 7.3). Ceci est certainement dû à des conditions d'écoulement non identiques, notamment pour l'écoulement transverse amont qui est, pour leurs conditions, plus rapide ( $Ma_\infty = 2.4$ ), plus chaud ( $T_\infty = 1400$  K) et de pression statique plus faible ( $p_\infty = 40$  kPa). De plus, il semblerait que leur écoulement principal soit constitué d'air pur. Ceci tend à confirmer que le seul paramètre  $J$  ne peut être suffisant pour décrire l'écoulement réactif et plus particulièrement la structure de flamme dans ce type de configuration. Malgré cela, il est possible de retrouver certaines de nos caractéristiques dans la structure de flamme d'INGENITO *et al.* [98] pour  $J = 0.4$  et  $\Phi = 0.426$ , qui simule des injecteurs multiples positionnés côte à côte ; ce qui serait équivalent à imposer des conditions de périodicité sur les faces latérales de notre domaine. Ces auteurs utilisent par ailleurs une paroi adiabatique, comme dans notre cas. Nous retrouvons, dans leur cas comme dans le notre, le confinement de la zone réactive sur la largeur du sillage du jet et en proche paroi ; une expansion de la zone réactive en forme de rampe (cf. Fig. 7.6 en  $z/D = 0$ ) et l'absence de réaction dans la couche de mélange, côté écoulement principal. Il semblerait donc que la structure spatiale de la flamme dépende fortement non seulement de la richesse  $\Phi$ , mais aussi des conditions de paroi retenues pour la simulation.

La reconstruction en 3D des Figs. 7.6 et 7.7 montre une structure de flamme en forme de « demi-V » ou de « demi-cône » dont le sommet correspond au point de stabilisation du front de réaction et dont la base est orientée vers la sortie du domaine. Cette vision est confirmée par les structures 3D instantanées des Figs. 7.8(a) et 7.8(b) qui montrent respectivement, une iso-surface de la fraction de mélange stœchiométrique  $\tilde{\zeta}_{st}$  colorée par la fraction molaire  $X_{OH}$  et une iso-surface du taux de dégagement de chaleur à  $0.1\dot{\omega}_{T,max}$  colorée par l'indice de prémélange  $\check{\zeta}_p$  (5.13). On rappelle que cet indice évalue l'orientation locale des gradients de fraction massique de combustible et d'oxydant afin d'évaluer si l'on est en présence d'une structure de flamme de prémélange ( $\check{\zeta}_p = 1$ ) ou de diffusion ( $\check{\zeta}_p = 0$ ). De façon plus générale, BUTTAY *et al.* [37] ont évalué cet indice à partir des directions associées aux vitesses de diffusion du combustible et de l'oxydant. Le seuil à 10 % du taux de dégagement de chaleur maximal est choisi afin d'identifier les zones où la réaction commence à devenir significative. Ainsi, les Figs. 7.8(b) et 7.8(c) permettent de voir que la flamme se développe en régime partiellement prémélangée, avec une structure de flamme de prémélange au niveau du point de stabilisation du front de flamme qui se maintient sur le bord en demi-V de la zone réactive dans le plan médian ( $z/D = 0$ ). Ensuite, de part et d'autre de ce plan, suivant la direction  $z$ , et dans le sillage de ce cône, la réaction semble essentiellement se dérouler dans un mode de combustion non-prémélangé. Cette structure assez particulière diffère de la structure « classique » de la flamme triple partiellement prémélangée. D'autre part, cet indice de prémélange permet de confirmer que la zone de recirculation en amont du jet est une région où le temps de résidence des particules est long et permet dans notre cas de former une faible quantité de OH. Dans d'autres cas, l'allumage et la stabilisation de la flamme peuvent se produire à ce niveau [71, 179].

Suite à ce constat, il peut être intéressant d'étudier la répartition du mode de combustion prémélangée et non-prémélangée au cours du temps, dans tout le volume réactif formé par  $\dot{\omega}_T > 0.01\dot{\omega}_{T,max}$ . Ainsi, la Fig. 7.9(a) illustre cette répartition en traçant les PDF spatiales de cet indice de prémélange  $\check{\zeta}_p$  (en échelle log-linéaire) aux différents instants  $t^* = 20, 40, 60, 80, 100$  et  $170$  ; tandis que la Fig. 7.9(b) montre la moyenne conditionnée du taux de dégagement de chaleur, normalisée par le dégagement maximal à l'instant  $t^*$ , en fonction de l'indice de prémélange.



**FIG. 7.8** – Visualisations instantanées à  $t^* = 170$ , de la structure de flamme. (a) Iso-surface de la fraction de mélange stœchiométrique  $\tilde{\xi}_{st}$  colorée par la fraction molaire  $X_{OH}$  ainsi que le champ pariétal de ce dernier. (b) Iso-surface du taux de dégagement de chaleur à  $0.1\dot{\omega}_{T,\max}$  colorée par l'indice de prémélange  $\tilde{\zeta}_p$ . (c) Champs sur les plans XY médian et XZ à  $y/D = 0.25$ , de l'indice de prémélange  $\tilde{\zeta}_p$ . Sur (a) et (b), l'iso-surface à  $\tilde{\xi} = 0.5$  est représentée en gris.



**FIG. 7.9** – Contribution du mode prémélangé et non-prémélangé à  $t^* = 20, 40, 60, 80, 100$  et  $170$  dans le volume réactif. (a) Fonction de densité de probabilité spatiale de l'indice de prémélange  $\tilde{\zeta}_p$ . (b) Taux de dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  moyen conditionné par l'indice de prémélange et adimensionné par le taux de dégagement maximal.

On voit d'après la Fig. 7.9(a) que la répartition de ces modes n'évolue pas de façon monotone au cours du temps. En effet, à l'instant  $t^* = 20$ , où le mélange s'auto-allume, le mode « diffusion » est le plus important, ce qui est plutôt inattendu étant donné que pour un auto-allumage favorable, le mélange devrait être majoritairement prémélangé ; cependant, le dégagement de chaleur conditionné (Fig. 7.9(b)) montre que la répartition du dégagement de chaleur est quasi-uniforme sur le mode prémélangé et non-prémélangé. Ceci indique que le faible volume prémélangé dégage autant de chaleur que le volume majoritaire non-prémélangé. À l'instant  $t^* = 40$  suivant, le mode prémélangé ( $\zeta_P = 1$ ) est statistiquement majoritaire avec une probabilité à 20 %, ce dernier commence aussi à apporter un dégagement de chaleur significatif par rapport au mode de diffusion. Enfin, après cet instant, le mode de combustion non-prémélangé devient prépondérant ; néanmoins, de façon attendue, c'est le mode prémélangé qui apporte bien l'essentiel du dégagement de chaleur, ce qui n'est pas surprenant.

### 7.3.3 Champs aérodynamiques globaux à $t^* = 170$

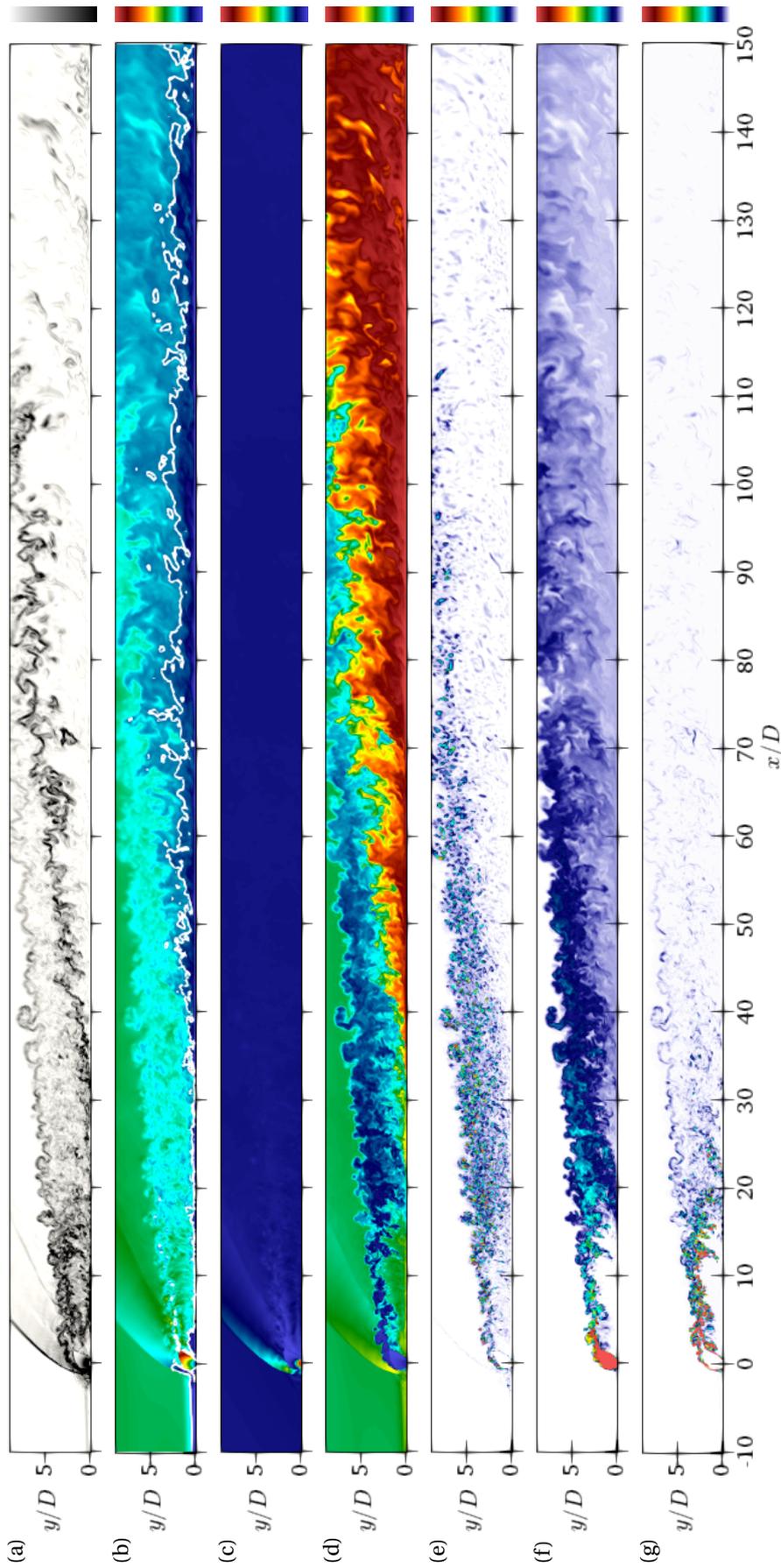
La Fig. 7.10 présente des champs instantanés, sur le plan médian XY à  $t^* = 170$ , lorsque l'écoulement est établi, d'un Schlieren numérique, du nombre de Mach, de la pression, température et viscosité SGS adimensionnées, ainsi que de la fraction de mélange et de son taux de dissipation scalaire.

Le champ de Schlieren, Fig. 7.10(a), permet d'identifier la limite relativement nette de la zone réactive, en forme de rampe, grâce au gradient de masse volumique important au niveau du front de flamme, identifié par une structure de flamme de prémélange, d'après l'indice de prémélange (Fig. 7.8(c)). On retrouve par ailleurs, les structures classiques de la configuration JISCF, à savoir : le choc courbé créé en amont du jet, le choc en tonneau, la couche de mélange qui se développe par les instabilités de cisaillement entre le jet et l'écoulement principal et la zone de recirculation en amont du jet. Le champ du nombre de Mach, Fig. 7.10(b), montre qu'au sein de la zone réactive, une part non négligeable de la réaction se déroule dans un régime d'écoulement subsonique, et est localisée en proche paroi. Ceci s'explique par le dégagement de chaleur qui va aussi diminuer la vitesse de l'écoulement mais aussi probablement les fluctuations turbulentes à travers le front de réaction [122].

La Fig. 7.10(c) montre que la variation du champ de pression est quasi-nulle dans la zone réactive, de l'ordre de  $\pm 5\%$ , ceci provient d'une part de l'absence totale de confinement de l'écoulement et d'autre part de la forte détente du jet combustible dans le courant principal qui va rétablir très rapidement la pression et cela, bien avant que la combustion n'ait lieu (hors longueur d'induction). Par conséquent nous pouvons considérer que la réaction a lieu à la pression quasi-constante  $p_\infty$  correspondant à celle de l'écoulement principal. Cette observation conduit à exclure tout phénomène d'allumage du mélange suite à une quelconque recompression de l'écoulement comme l'ont observé FUREBY *et al.* [68] et MOULE *et al.* [142]. Les Fig. 7.10(d) et 7.10(f) montrent que le combustible froid est ramené au niveau de la paroi par le mélange à grande échelle principalement, aux alentours de  $x/D \approx 20$ . Ensuite, comme nous l'avons vu sur les champs établis du radical OH (Figs. 7.6 et 7.7), la combustion se stabilise un peu en aval de ce point, autour de  $x_s/D = 25$ .

La Fig. 7.10(g) montre que dans la couche de mélange, formée par le jet combustible et l'écoulement principal supersonique, le gradient scalaire est important, ce qui explique que le taux de dissipation scalaire est également important en champ proche de l'injection. Ce taux important, associé à la basse température du jet détendu, n'est pas favorable pour que l'auto-allumage se présente à ce niveau. On voit cependant qu'en champ lointain, après  $x/D = 20-25$ , le taux de dissipation scalaire diminue très rapidement dans la zone où le front de réaction s'est stabilisé. Il serait possible que le mécanisme stabilisant puisse être ici, l'auto-allumage du mélange à la paroi au voisinage de laquelle on retrouve de faibles niveaux du taux de dissipation scalaire (MASTORAKOS *et al.* [134]).

Le champ du rapport de la viscosité SGS et moléculaire, Fig. 7.10(e), indique une contribution négligeable de la diffusion de sous-maille dans la zone réactive, du fait de l'augmentation de la température et par conséquent, des effets de diffusion moléculaire qui deviennent plus importants.



**FIG. 7.10** – Champs instantanés à  $t^* = 170$ , dans le plan médian XY ( $z/D = 0$ ). (a) Schlieren numérique  $S_{\bar{\rho}}$  [0.98, 1]; (b) Nombre de Mach  $Ma$  [0, 5] et son iso-ligne  $Ma = 1$  en blanc; (c) Rapport de pression  $\bar{p}/p_{\infty}$  [0.03, 9]; (d) Rapport de température  $\bar{T}/T_{\infty}$  [0.04, 2.5]; (e) Rapport de viscosité SGS et moléculaire  $\mu_{sgs}/\tilde{\mu}$  [0, 20]; (f) Fraction de mélange  $\tilde{\xi}$  [0, 1]; (g) Taux de dissipation scalaire  $\chi_{\xi}$  [0,  $10^3$ ] ( $s^{-1}$ ).

Enfin, la Fig. 7.11 permet de visualiser les structures tourbillonnaires via une iso-surface du critère- $Q$ . Elle permet d'identifier la paire de tourbillons contra-rotatifs (CVP) ainsi que les tourbillons en fer à cheval. Ces structures cohérentes se développent très rapidement en aval du jet ainsi qu'en proche paroi. Cependant, on voit que les structures à grandes échelles (CVP), qui se développent dans le sillage du jet, sont quasi inexistantes à la traversée de la zone réactive. Cette caractéristique n'est pas observée par FUREBY *et al.* [68] sur la configuration confinée du *HyShot II*. En effet, le confinement induit un train de choc qui permet de maintenir un niveau important de fluctuations turbulentes à travers chacun des chocs réfléchis. Dans notre cas, ce comportement est probablement, soit (i) dû au dégagement de chaleur à travers la flamme qui va aussi conduire à une diminution des fluctuations turbulentes, soit (ii) l'absence de confinement qui n'engendre aucune réflexion de choc (train de choc), qui aurait pu maintenir un niveau de fluctuation à chaque passage à travers un choc réfléchi. Cependant, d'après l'analyse *inerte* de cet écoulement, effectuée § 5.4 « Simulations aux grandes échelles inerte du JISCF », il semblerait que la diminution de l'intensité de turbulence observée au sein du domaine, soit due à l'absence de confinement, plutôt qu'au dégagement de chaleur provoqué par la combustion.

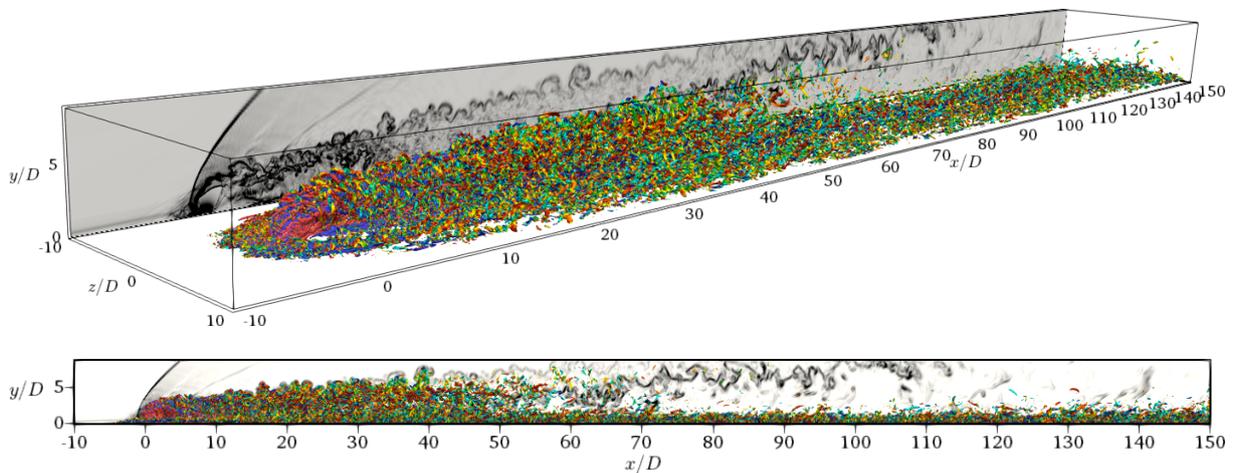
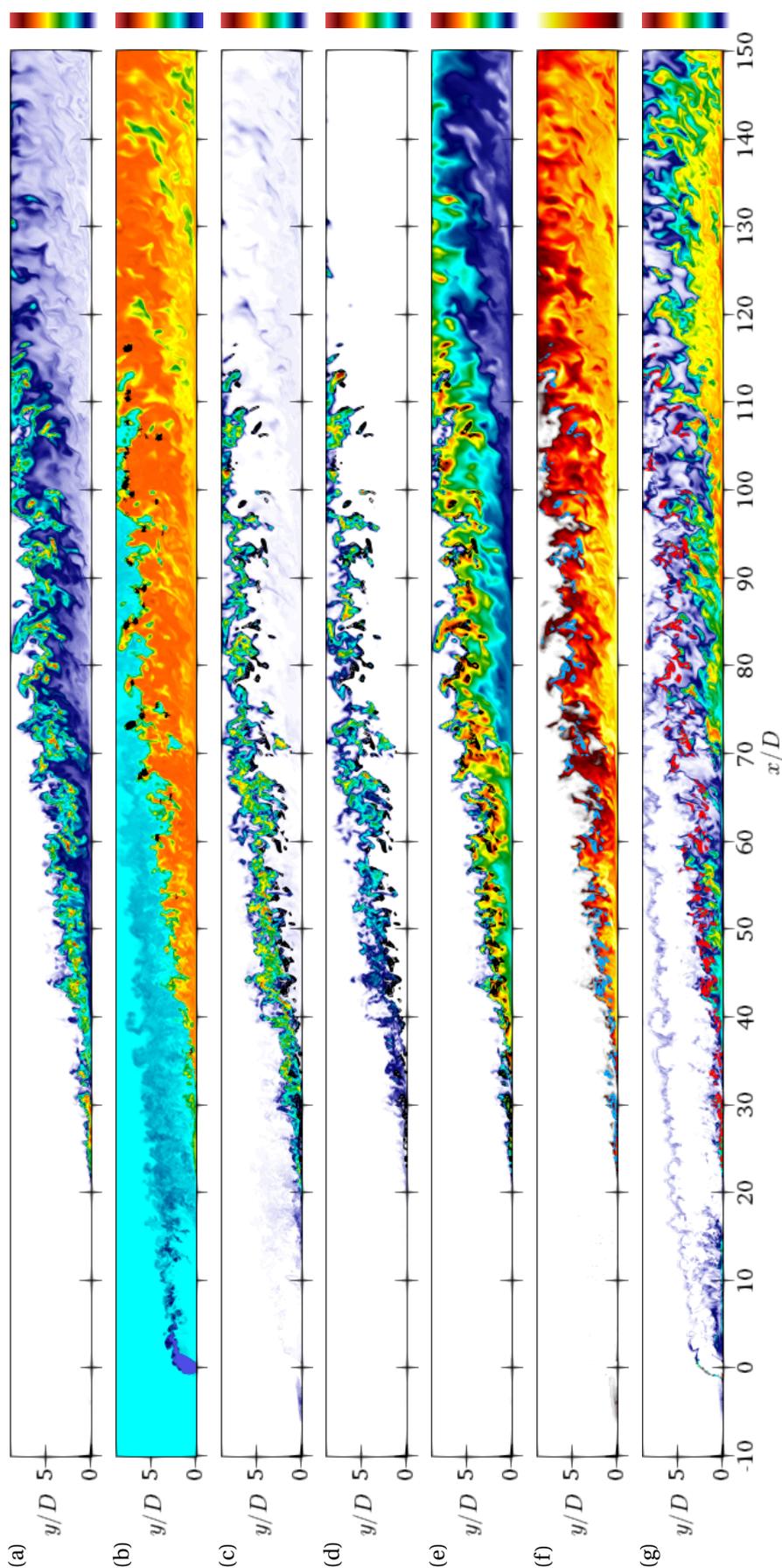


FIG. 7.11 – Visualisation des structures tourbillonnaires : iso-surface du critère- $Q$  à  $Q = (a_\infty/D)^2$  colorée par la vorticité longitudinale. En arrière plan : un champ de Schlieren numérique.

### 7.3.4 Champs réactifs globaux à $t^* = 170$

#### Champs longitudinaux

La Fig. 7.12 montre cette fois plusieurs champs permettant de suivre le développement de la réaction chimique à  $t^* = 170$ . Il est remarquable d'y voir une décorrélation nette entre les zones de concentration du radical  $\tilde{Y}_{OH}$  (Fig. 7.12(f)) et du dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  (Fig. 7.12(a)). Cela confirme qu'utiliser le radical OH comme traceur des niveaux de dégagement de chaleur, ne constitue pas la solution la plus pertinente, étant donné qu'il n'est pas majoritairement présent dans les zones de dégagement de chaleur maximal. Cette observation remet notamment en cause l'hypothèse de départ faite dans les expériences de GAMBA et MUNGAL [71] qui suppose que les émissions du radical OH est proportionnel au dégagement de chaleur. En effet, le radical OH, s'il est bien produit dans la zone réactive (où le taux de dégagement de chaleur est significatif) n'est ensuite consommé que très lentement par le biais de réactions de recombinaison. Lorsque le mélange réactif le permet, on combine ce diagnostic par exemple avec la PLIF sur le radical formaldéhyde  $CH_2O$  qui est quant à lui produit dans la phase initiale de rupture de chaîne de l'espèce combustible. Malheureusement, ce radical n'est pas produit dans les conditions considérées ici ( $H_2$  et air vicié). Une solution peut



**FIG. 7.12**—Champs instantanés à  $t^* = 170$ , sur le plan médian  $XY$  ( $z/D = 0$ ) (suite). (a) Taux de dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  [ $0, 1.7 \times 10^{11}$ ] W/kg; (b) Fraction massique  $\tilde{Y}_{H_2O}$  [ $0, 0.58$ ] avec iso-contours à  $\tilde{Y}_{H_2O} = 0.45$  et  $0.5$  (ligne noire); (c) Fraction massique  $10^3 \times \tilde{Y}_{H_2O_2}$  [ $0, 0.953$ ]; (d) Fraction massique  $10^5 \times \tilde{Y}_{H_2O_2}$  [ $0, 7.13$ ]; (e) Fraction massique  $10^3 \times \tilde{Y}_H$  [ $0, 8.20$ ]; (f) Fraction massique  $\tilde{Y}_{OH}$  [ $0, 0.04$ ]; (g) Taux de réactivité  $\lambda$  [ $0, 10^6$ ]  $s^{-1}$ ; Pour les fractions massiques de  $H_2O_2$ , H,  $HO_2$  et OH ainsi que la réactivité  $\lambda$ , les iso-contours à 50, 70 et 90 % du taux de dégagement de chaleur maximal sont superposés en lignes noires (c, d, e), bleus (f) ou rouge (g).

consister à considérer un mélange acétylène–hydrogène en lieu et place de l’hydrogène pour pouvoir mettre en œuvre ce diagnostic, comme cela a été fait par MICKA [137].

Comme l’ont montré ECHEKKI et CHEN [60], YOO *et al.* [217], nous pouvons confirmer que le radical  $\text{HO}_2$  est bien un précurseur de l’auto-allumage, puisqu’il semble être produit en grandes quantités avant que l’allumage ait lieu, puis il est consommé presque totalement à travers le front de flamme, cf. Fig. 7.12(c). Il semblerait qu’il en soit de même pour le radical  $\text{H}_2\text{O}_2$ , cf. Fig. 7.12(d), mais qui est produit en moindre quantité. Dans cette région, nous pouvons considérer que cette espèce est bien dans un état quasi-stationnaire, pouvant permettre l’utilisation éventuelle du mécanisme réduit à 3 étapes valide pour  $T > T_c$ , développé par BOIVIN *et al.* [17, 20].

Ensuite, sur et à travers le front de flamme, la Fig. 7.12(b) montre que le produit  $\text{H}_2\text{O}$  est fortement concentré dans des zones réduites, comme le montrent les iso-lignes à  $\tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}} = 0.45$  et  $0.5$ . Ces fortes concentrations du produit principal de la réaction ne sont pas localisées dans les zones de dégagement de chaleur le plus important, ce qui confirme que les temps caractéristiques liés à la production d’ $\text{H}_2\text{O}$  sont beaucoup plus longs que les temps caractéristiques de la turbulence, liés à la convection par les grandes structures tourbillonnaires. Ainsi, on pourrait s’attendre à ce que le nombre de Damköhler  $Da$  soit inférieur à l’unité. La Fig. 7.12(e) montre que le radical  $\text{H}$  est fortement concentré dans les zones de fort dégagement de chaleur, ce qui en fait un candidat de choix pour tracer les niveaux élevés du taux de dégagement de chaleur, bien qu’il ait aussi, comme le  $\text{OH}$ , un temps de relaxation relativement long. Numériquement, le radical  $\text{H}$  est aussi un bon indicateur pour conditionner le calcul a posteriori de la concentration du radical  $\text{OH}$ , *i.e.*  $C_{\text{OH}}$  (D.5a), qui présente une singularité si  $C_{\text{H}_2}$  et  $C_{\text{H}}$  sont nulles (division par zéro).

Enfin, la Fig. 7.12(g) indique les zones potentielles où l’auto-allumage peut se dérouler. En effet, à l’aide de la réactivité  $\lambda$ , nous pouvons voir qu’il semble possible d’auto-allumer le mélange au niveau de (i) la zone de recirculation en amont de l’injection, (ii) dans la couche de mélange supérieure (côté écoulement principal) et (iii) inférieure (côté paroi) au jet, (iv) dans la zone de recirculation en aval direct du jet et (v) dans le sillage en proche paroi. Nous voyons que la région où la réactivité est la plus importante est localisée dans cette dernière zone : le sillage en proche paroi, là où finalement le front de flamme se stabilise.

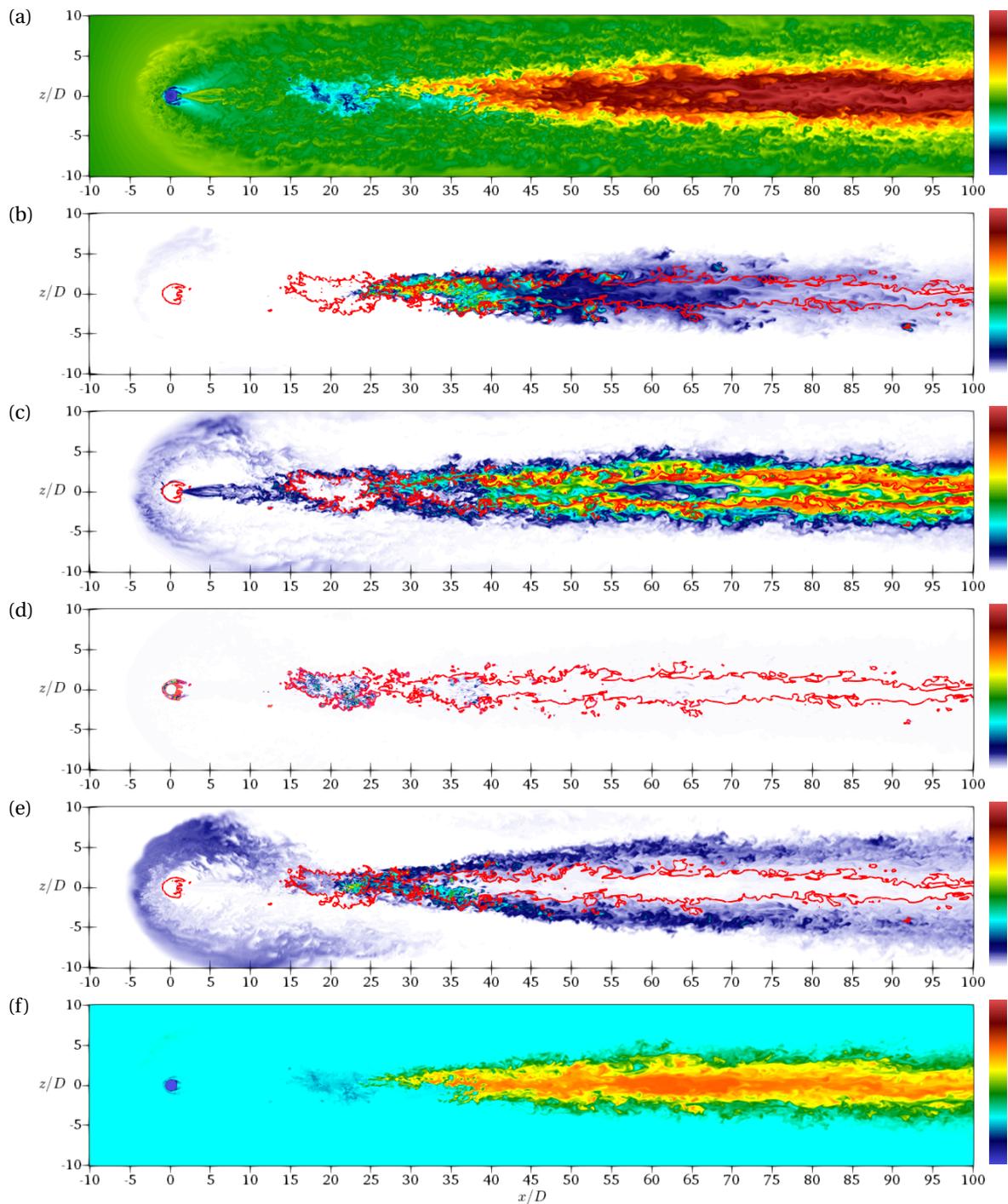
### Champs extraits parallèlement à la paroi

D’après ce que nous venons de voir, il apparaît essentiel d’étudier plus en détail l’écoulement en proche paroi, zone pour laquelle, la littérature disponible fournit finalement assez peu d’information. La Fig. 7.13 expose d’autres champs  $XZ$ , parallèle à la paroi à  $y/D = 0.25$ , complémentaires aux champs longitudinaux  $XY$  précédemment analysés.

Nous constatons sur la Fig. 7.13(a), qu’en aval de l’injection la température est quasi-constante entre  $x/D = 2.5$ – $15$ , puis diminue fortement dans une zone située entre  $x/D = 15$ – $25$ . Ce comportement est celui que nous avons observé à partir du calcul inerte (cf. Fig. 5.32). Il s’explique par le fait que du combustible froid est mélangé et ramené à la paroi via les structures tourbillonnaires (CVP et fer à cheval, principalement). Ensuite, l’augmentation de température très rapide après  $x/D = 25$  indique le point de stabilisation de la combustion, où le dégagement de chaleur est le plus important comme le montre la Fig. 5.32(b).

La Fig. 7.13(b) met tout de même en évidence un très faible dégagement de chaleur dans la zone de recirculation en amont du jet. Néanmoins, la majorité du dégagement de chaleur se produit dans la zone de stabilisation et s’étend jusqu’à environ  $x/D = 40$ – $45$ , où l’indice de Takeno met en évidence une zone prémélangée avec  $\zeta_p \approx 1$  (cf. Fig. 7.8(c)). Le dégagement de chaleur diminue ensuite très rapidement en s’éloignant de l’injecteur, confirmant encore qu’il n’est pas corrélé avec les zones de forte concentration du radical  $\text{OH}$  (cf. Fig. 7.7). Enfin, nous voyons qu’une infime partie du dégagement de chaleur est localisée au voisinage de la ligne stœchiométrique à  $\zeta_{\text{st}}$ .

En réalité, les Figs. 7.13(c, d, e, f) semblent être les plus pertinentes étant donné qu’elles montrent une corrélation forte entre les champs (c) de la réactivité, (d) du taux de dissipation scalaire  $\tilde{\chi}_\xi$ , (e) de



**FIG. 7.13** – Champs instantanés à  $t^* = 170$  suivant le plan XZ parallèle à la paroi à  $y/D = 0.25$  (a) température  $\tilde{T}/T_\infty$  [0.04, 2.5]; (b) taux de dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  [0,  $1.7 \times 10^{11}$ ] W/kg; (c) réactivité  $\lambda$  [0,  $10^6$ ]  $\text{s}^{-1}$ ; (d) taux de dissipation scalaire  $\check{\chi}_\xi$  [0,  $10^3$ ]  $\text{s}^{-1}$ ; (e) fraction massique  $10^3 \times \tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}_2}$  [0, 0.953]; (f) fraction massique  $\tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}}$  [0, 0.58]. L'iso-ligne rouge correspond à  $\xi_{st} = 0.03$ .

la fraction massique de  $\text{HO}_2$  et (f) celle de  $\text{H}_2\text{O}$ . Nous voyons que la « poche » froide, inerte, située entre  $x/D = 15-25$  est associée à de forts niveaux du taux de dissipation scalaire et la réactivité  $\lambda$  y est nulle, et est délimitée par la fraction de mélange stœchiométrique. Cette poche correspond à une zone d'induction précédant l'auto-allumage, où le précurseur de l'auto-allumage  $\text{HO}_2$  se forme rapidement en quantités suffisamment importantes, notamment par dissociation de la vapeur d'eau  $\text{H}_2\text{O}$  contenue dans l'air vicié et du combustible  $\text{H}_2$ . Elle est ensuite suivie d'une grande réactivité  $\lambda$  pour des valeurs de la fraction de mélange proches de la stœchiométrie et où la flamme se stabilise. Cette réactivité élevée est associée à la fois à de faibles niveaux de dissipation scalaire ainsi qu'à une concentration importante du radical  $\text{HO}_2$ . Après  $x/D = 40$ , la réactivité maximale semble s'être décalée vers la fraction de mélange stœchiométrique, comparé au cas inerte (cf. Fig. 5.35). Ceci est confirmé par la Fig. 7.18 qui indique une fraction de mélange la plus réactive  $\xi_{\text{mr}}$  très proche de la stœchiométrie  $\xi_{\text{mr}} \approx 0.02 \approx \xi_{\text{st}}$ . Nous reviendrons sur cette figure plus loin. Puis, après  $x/D = 40$ , la structure de flamme est celle d'une flamme de diffusion où : (i) la réactivité reste tout aussi élevée mais la dissipation scalaire est quasi-nulle ; (ii) le radical  $\text{HO}_2$  semble être totalement consommé et (iii) le produit de réaction  $\text{H}_2\text{O}$  se forme dans la zone délimitée par  $\xi_{\text{st}}$ . Au-delà, ces espèces sont largement diffusées de part et d'autre de cette limite. Enfin, en amont et aval direct de l'injection, la réactivité est non nulle dans les zones de recirculation (amont et sillage du choc en tonneau), la dissipation scalaire est extrêmement faible. Cependant, le radical  $\text{HO}_2$  n'est pas produit en quantité suffisante pour conduire à l'auto-allumage.

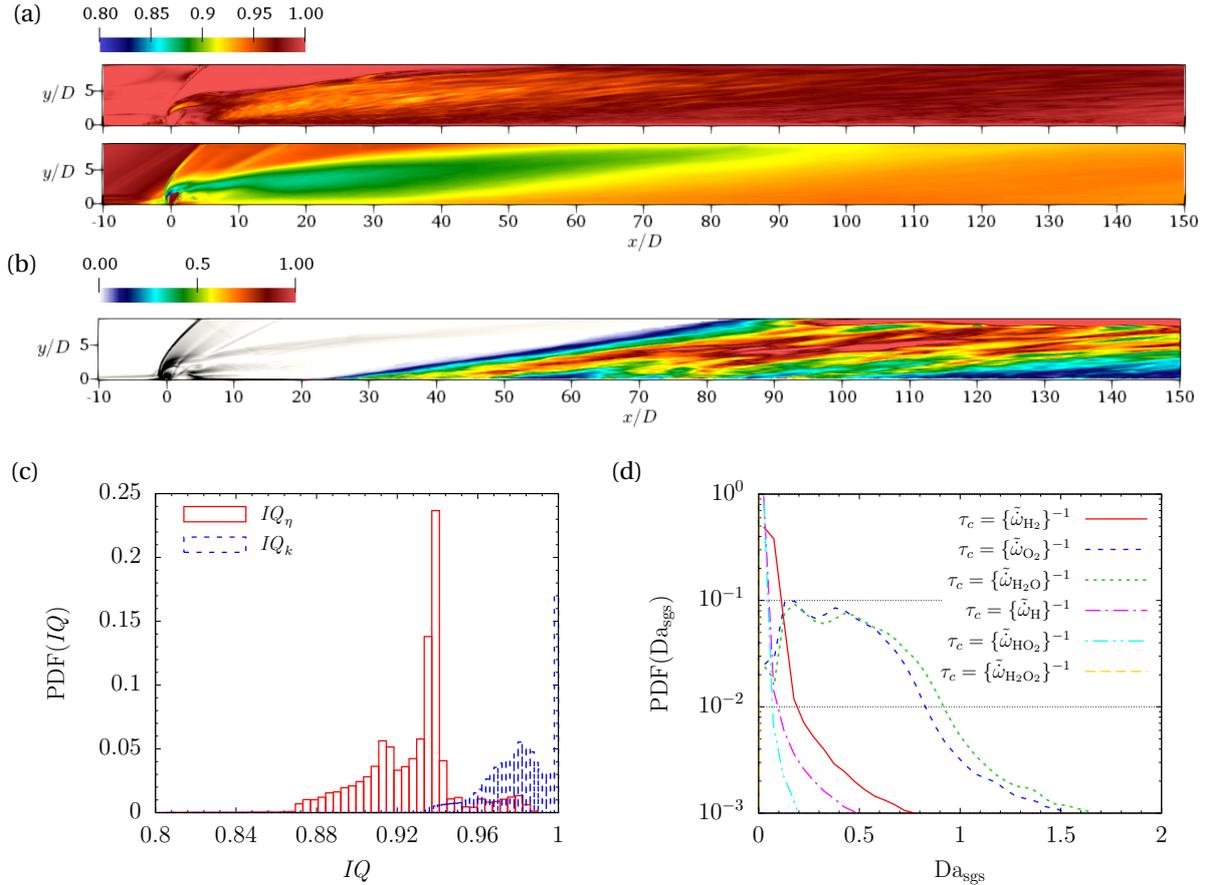
## 7.4 Analyse globale des grandeurs moyennes

### 7.4.1 Résolution du calcul

La Fig. 7.14 montre quelques indices de qualité, qui permettent de juger du niveau de résolution du calcul LES réactif effectué. Ainsi, les indices de qualité de POPE [169] (modifié)  $IQ_k$  (5.9) et de CELIK *et al.* [43]  $IQ_\eta$  (5.10) sont représentés sur les champs Figs. 7.14(a) et 7.14(c). Ils indiquent un très bon niveau de résolution de l'aérodynamique globale de l'écoulement étant donné que  $IQ_k$  et  $IQ_\eta$  sont, en moyenne, respectivement égaux à 0.98 et 0.94. Rappelons que ces critères sont définis de façon à considérer un bon niveau de résolution s'ils sont respectivement supérieurs à 0.8 et 0.97. DUWIG *et al.* [59] ont par ailleurs introduit, dans leur étude d'une flamme jet pilote de prémélange pauvre, un critère essentiel permettant de justifier l'utilisation du modèle PSR. Il est basé sur un nombre de Damköhler de sous-maille (cf. § 4.4)

$$\text{Da}_{\text{sgs}} = \tau_{\text{sgs}} / \tau_c \quad (7.1)$$

avec  $\tau_{\text{sgs}}$  et  $\tau_c$ , respectivement, deux échelles de temps caractéristiques de la sous-maille et de la chimie. Dans leur étude, DUWIG *et al.* [59] utilisent  $\tau_c = \delta_L^0 / S_L^0$  ainsi que  $\tau_{\text{sgs}} = \bar{\rho} C_s^2 \Delta^2 / \mu_{\text{sgs}}$  et considèrent que l'utilisation du modèle PSR est valide si  $\text{Da}_{\text{sgs}} \ll 1$ . Nous étendons son utilisation au cadre des flammes de diffusion en prenant  $\tau_c = |\{\tilde{\omega}_\alpha\}|^{-1}$  et  $\tau_{\text{sgs}} = \Delta^2 / D_{\text{sgs}}$ . Ce dernier a été utilisé pour modéliser le temps de relaxation de la variance SGS dans notre étude consacrée à sa modélisation (cf. § 6.2.2). Les Figs. 7.14(b) et 7.14(d) soulignent le très bon niveau de résolution de la simulation réalisée pour capturer les taux de production / destruction des espèces  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{HO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Les espèces  $\text{O}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  semblent être les espèces résolues qui ont les taux de réaction les plus importants mais le temps de mélange en sous-maille semble être bien plus faible que leurs temps caractéristiques de production / consommation. Ceci permet donc de considérer que les fluctuations de composition à l'échelle de la sous-maille sont suffisamment faibles pour considérer que le mélange est homogène à l'échelle non-réolue et permet donc de justifier de la bonne adéquation du modèle PSR.



**FIG. 7.14** – Champs sur le plan XY médian de (a) l'indice de qualité de POPE [169]  $IQ_k$  (haut) et de CELIK *et al.* [43]  $IQ_\eta$  (bas); (b) du nombre de Damköhler de sous-maille  $Da_{sgs}$  basé sur le taux de réaction moyen  $\{\tilde{\omega}_{H_2O}\}$  et conditionné dans la zone réactive. En arrière plan : un schlieren numérique. PDF (spatiales) (c) des deux critères de qualité et (d) du nombre de Damköhler basé sur différents taux de réaction des espèces transportées.

### 7.4.2 Champs moyens réactifs

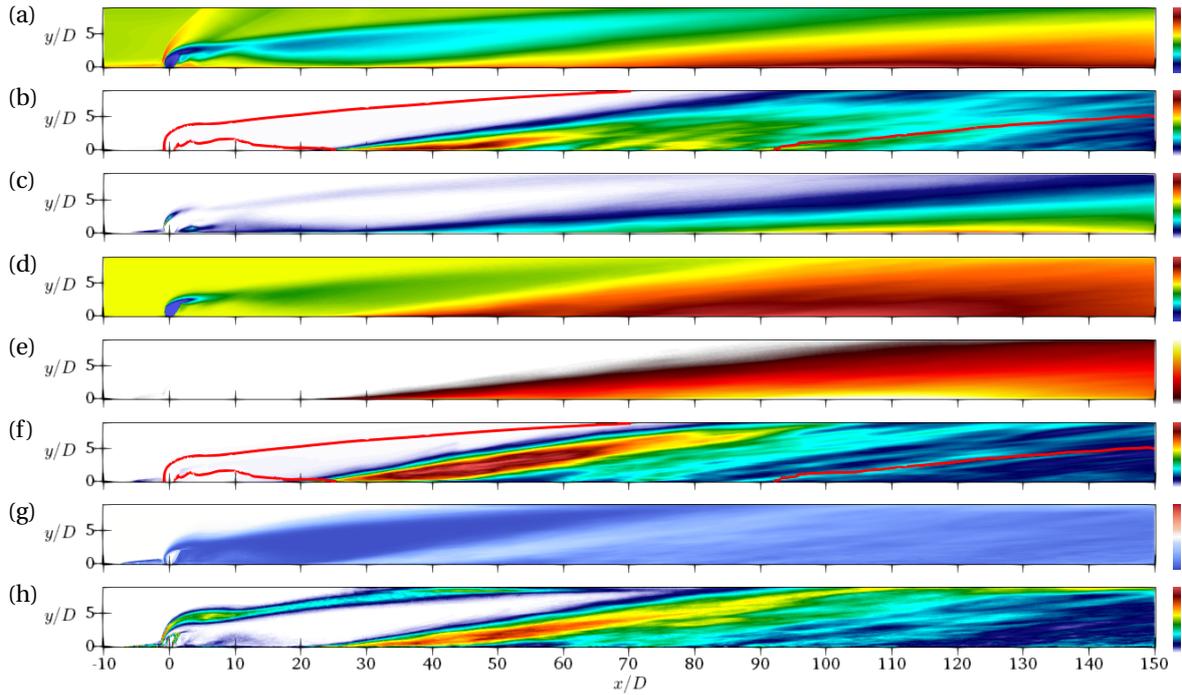
Les Figs. 7.15 et 7.16 montrent les champs moyens, sur le plan XY médian et XZ à la paroi, de la température, du dégagement de chaleur, de la réactivité, des fractions massique d' $H_2O$ , du radical OH, de l'indice de prémélange ainsi que de la probabilité d'être dans une zone de combustion prémélangée (PCZ = *Premixed Combustion Zone*) que nous définirons par

$$P_{PCZ}(\vec{x}) = \int_{\check{\zeta}_p^{\text{seuil}}}^1 P(\check{\zeta}_p)(\vec{x}) d\check{\zeta}_p \quad (7.2)$$

avec

- $P(\check{\zeta}_p)$ , la fonction densité de probabilité de l'indice de prémélange;
- $\check{\zeta}_p^{\text{seuil}}$ , la valeur seuil de l'indice de prémélange, prise à 0.7, pour laquelle nous considérerons que le régime de combustion est prémélangé.

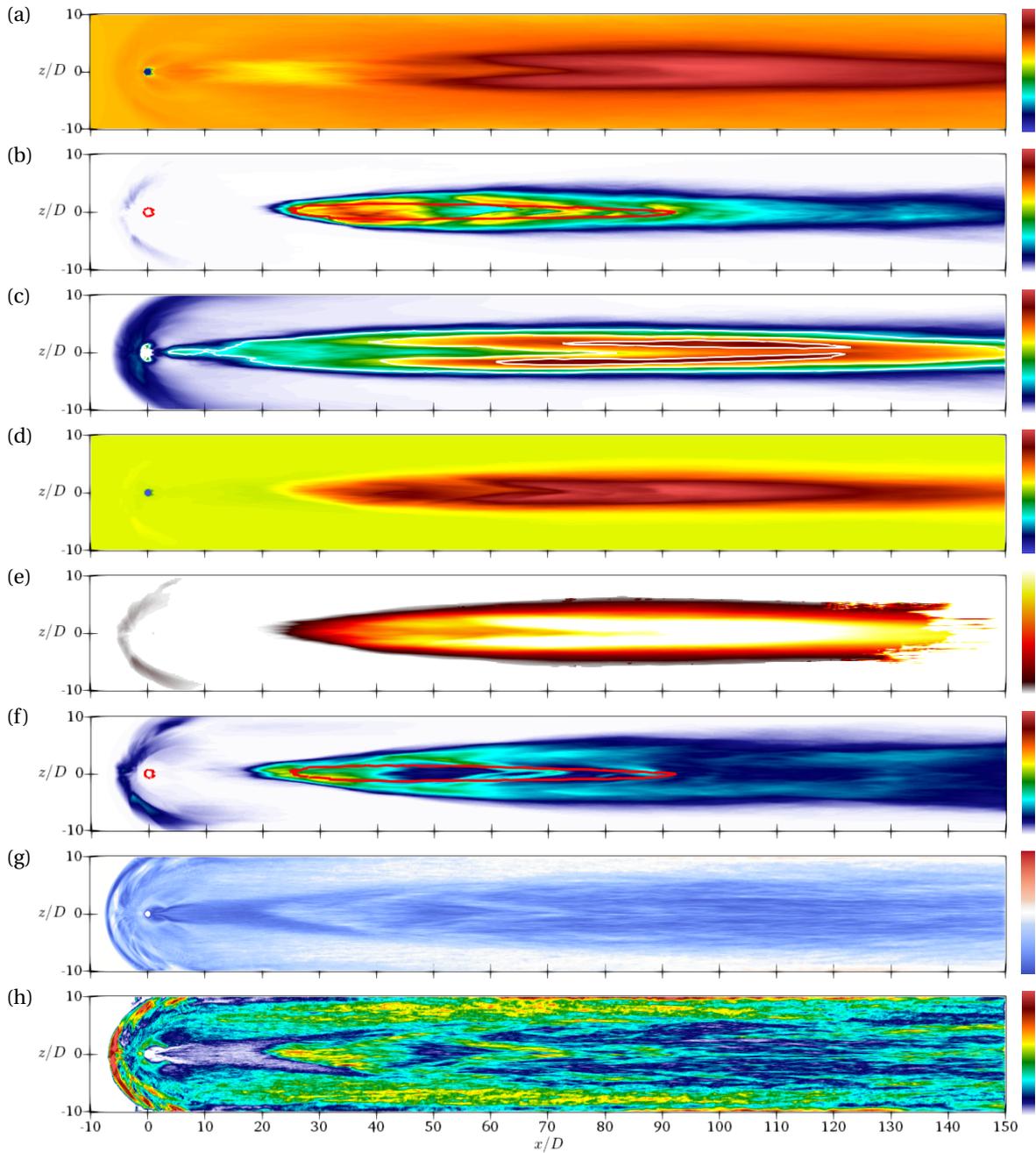
Cette dernière grandeur est introduite afin de pallier la perte d'information que nous apporte l'indice de prémélange moyen (Figs. 7.15(f) et 7.16(f)) qui indique que le mode de diffusion prédomine. Or, comme nous l'avons vu § 7.3.2, la structure de flamme instantanée fait clairement apparaître une flamme partiellement prémélangée, présentant des zones de combustion non-prémélangée et prémélangée qu'on ne peut omettre. L'étude du moment d'ordre 2 de l'indice de prémélange pourrait permettre éventuellement d'obtenir cette information. Cependant, elle ne définirait qu'un intervalle



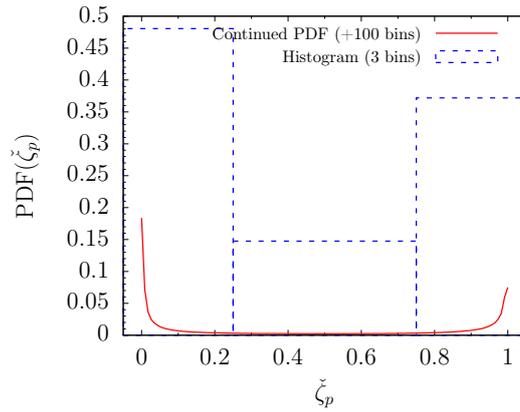
**FIG. 7.15** – Champs moyens sur le plan XY médian de (a) la température  $\{\tilde{T}\}$  [40, 2100] K; (b) du taux de dégagement de chaleur  $\{\dot{\omega}_T\}$  [0,  $3.5 \times 10^{10}$ ] W/kg; (c) la réactivité  $\langle \lambda \rangle$  [0,  $75 \times 10^4$ ]  $s^{-1}$ ; (d) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{H_2O}\}$  [0, 0.3]; (e) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{OH}\}$  [0, 0.02]; (f) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{HO_2}\}$  [0,  $13 \times 10^{-5}$ ]; (g) l'indice de prémélange  $\langle \check{\zeta}_P \rangle$  [0, 1] et (h) la probabilité du mode prémélangé  $P_{PCZ}$  [0, 0.4]. L'iso-ligne rouge indique la valeur stœchiométrique à  $\xi_{st} = 0.03$ .

autour de la valeur moyenne par  $\langle \check{\zeta}_P \rangle \pm \sqrt{\langle \check{\zeta}_P'^2 \rangle}$  et les valeurs inférieures à  $\check{\zeta}_P^{seuil}$  ne sont pas pertinente pour caractériser la zone potentiellement prémélangée. Nous étudierons plus loin, les régimes de combustion (cf. § 7.5) où il est nécessaire de discriminer les zones où la combustion se déroule sur un mode de prémélange ou de diffusion. La grandeur ainsi définie nous guidera dans ces analyses.

Les Figs. 7.15(h) et 7.16(h) montrent que les zones de prémélange probable sont localisées dans la zone de recirculation en amont du jet, et surtout en aval de l'injection. En effet, à la paroi, la zone de stabilisation du front de flamme se situe entre  $x/D = 20-40$  où une probabilité du mode prémélangé est importante, jusqu'à 35–40 %. Ceci est confirmé par la Fig. 7.17, qui représente l'intégration de la PDF par le biais de l'histogramme à 3 classes. Dans cette zone de stabilisation, la température moyenne évolue progressivement d'un état froid, issu du combustible qui est transporté par la turbulence jusqu'à la paroi, à un état chaud dans la zone de réaction établie. Cependant, il s'avère que la réactivité moyenne  $\langle \lambda \rangle$  est relativement faible dans cette zone, indiquant que le délai d'auto-allumage est long comparé à celui observé dans la zone située plus en aval, à partir de  $x/D = 50-60$ . Par conséquent, il semble judicieux de se poser la question de savoir quel mécanisme permet la stabilisation de la combustion ? En effet, si, dans la zone de stabilisation le délai d'auto-allumage est court mais le mode de combustion s'avère être prémélangé, alors se pourrait-il que le mécanisme de stabilisation soit un mécanisme de propagation d'une flamme de prémélange ? Est-ce qu'il y a une compétition entre auto-allumage et propagation ? Le précurseur de l'auto-allumage  $HO_2$  est en fait fortement présent dans cette zone de stabilisation et est rapidement consommé. En conséquence, il semblerait que l'auto-allumage soit le mécanisme principal de stabilisation, bien qu'il se fasse dans une zone où la réactivité moyenne  $\langle \lambda \rangle$  n'est pas la plus importante. D'autre part, il convient de constater que la stabilisation de la flamme s'opère dans des conditions proches de la stœchiométrie, ceci est confirmé par la Fig. 7.18 sur laquelle nous reviendrons plus loin.



**FIG. 7.16** – Champs moyens sur la paroi (plan XZ à  $y/D = 0$ ) de (a) la température  $\{\tilde{T}\}$  [40, 2100] K; (b) du taux de dégagement de chaleur  $\{\dot{\omega}_T\}$  [0,  $3.5 \times 10^{10}$ ] W/kg avec l'iso-ligne rouge à  $\xi_{st} = 0.03$ ; (c) la réactivité  $\{\lambda\}$  [0,  $75 \times 10^4$ ]  $s^{-1}$  avec les iso-lignes à  $\langle \lambda \rangle = k \times 10^5 s^{-1}$  où  $k = 2, 4$  et  $6$ ; (d) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{H_2O}\}$  [0, 0.3]; (e) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{OH}\}$  [0, 0.02] (au-delà de  $x/D = 120$ , des singularités de calcul apparaissent dans son estimation a posteriori); (f) la fraction massique  $\{\tilde{Y}_{HO_2}\}$  [0,  $13 \times 10^{-5}$ ]; (g) l'indice de prémélange  $\{\check{\zeta}_p\}$  [0, 1] et (h) la probabilité du mode prémélangé  $P_{PCZ}$  [0, 0.4]. L'iso-ligne rouge indique la valeur stœchiométrique à  $\xi_{st} = 0.03$ .



**FIG. 7.17** – Fonction de densité de probabilité (semi-spatiale et temporelle) de l'indice de prémélange  $\check{\zeta}_p$  dans la zone de stabilisation  $(x/D, y/D) \in [24, 26] \times [0, 0.25]$ .

La probabilité d'être situé dans une zone de prémélange est aussi importante sur la limite de la zone réactive, *i.e.* au bords du « demi-V » formé sur le plan médian, comme l'indique la Fig. 7.15(h). Dans cette limite, le radical  $\text{HO}_2$  est formé en grandes quantités mais la réactivité moyenne est faible, ce qui suggère cette fois-ci une structure de flamme en propagation où le dégagement de chaleur moyen diminue rapidement en s'éloignant de la paroi.

Cette probabilité  $P_{\text{PCZ}}$  est non-négligeable ( $\sim 10\%$ ) dans la couche de mélange supérieure (côté écoulement principal, cf. Fig. 7.15(h)) et quasi-nulle dans la zone de recirculation en aval du jet, dans le sillage du choc en tonneau. Bien que ces zones présentent aussi une réactivité moyenne non négligeable, il apparaît que l'absence totale du radical  $\text{HO}_2$  ainsi que de  $\text{H}_2\text{O}_2$  (champ non affiché) ne permet pas l'auto-allumage dans ces régions.

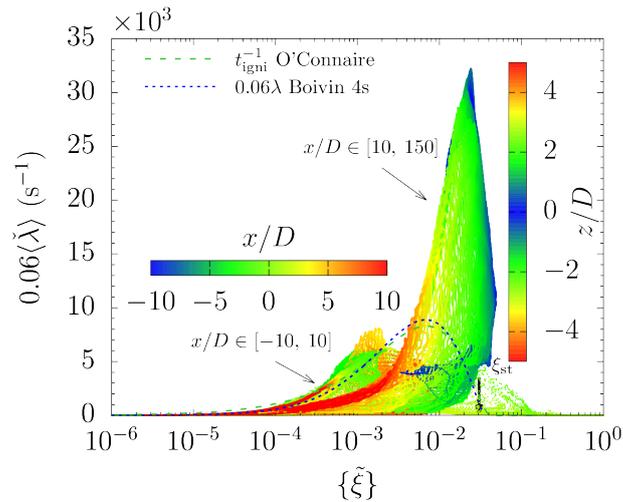
Enfin, en aval de la zone de stabilisation ( $x/D > 40-50$ ), la probabilité du mode prémélangé diminue. Bien que la réactivité moyenne semble être la plus importante, l'absence de  $\text{HO}_2$  ne permet pas l'auto-allumage du mélange, qui serait par ailleurs défavorable étant donné que cette zone est statistiquement une région où la réaction a lieu dans un mode non-prémélangé. Le dégagement de chaleur y serait donc moins important. Néanmoins la température augmente de façon notable en s'éloignant de l'injection et la concentration du radical  $\text{OH}$  devient plus importante.

La Fig. 7.18 montre qu'un extremum local de la réactivité moyenne est positionné autour de  $\{\check{\xi}\} = 0.002$  et est localisé en aval de l'injection, entre  $x/D = 0$  à 5. Par ailleurs, il s'avère qu'en amont de l'injection, la réactivité moyenne est légèrement moins élevée entre  $x/D = -5$  et 0, ce qui indiquerait tout de même une forte possibilité d'allumage dans ces zones. Néanmoins, nos conditions ne sont pas favorables pour que la limite d'explosion soit atteinte, probablement due à une température inférieure à la température de croisement, ne permettant pas la production suffisante du radical  $\text{HO}_2$ , comparé à son taux de consommation. Cette figure indique finalement que l'état le plus réactif  $\check{\xi}_{\text{mr}} \approx 0.02$  se situe proche de la stœchiométrie, ainsi qu'entre  $z/D = \pm 2$ . La réactivité diminue ensuite jusqu'à  $z/D = \pm 5$  pour être quasi-nulle au-delà. Ainsi, de part et d'autre de la zone de sillage du jet, dans la direction  $z$ , l'auto-allumage du mélange n'est pas possible.

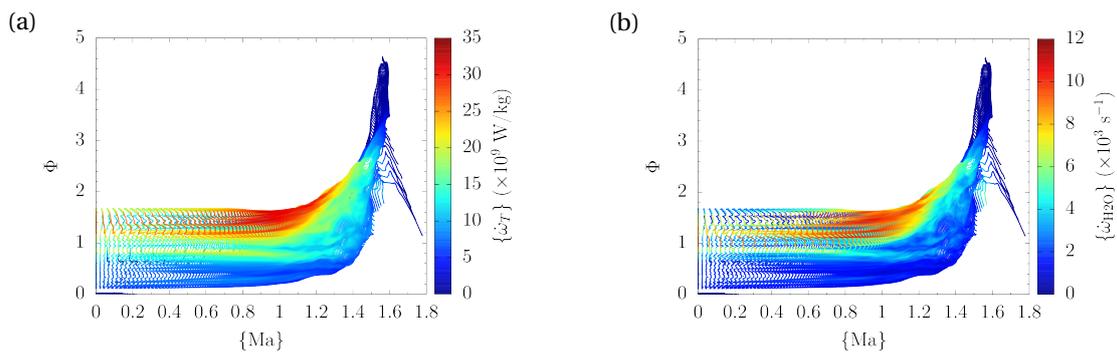
## 7.5 Analyse des régimes de combustion rencontrés dans le JISCF

### 7.5.1 Régimes d'écoulement

La Fig. 7.19 présente une distribution du régime de l'écoulement (subsonique / supersonique) dans la zone réactive. Nous voyons que le dégagement de chaleur ainsi que le taux de réaction d' $\text{H}_2\text{O}$  sont, en moyenne, les plus importants autour d'un nombre de Mach sonique et une richesse locale supérieure à la stœchiométrie ( $\Phi \approx 1.5$ ). Ces taux de dégagement de chaleur importants sont localisés



**FIG. 7.18** – Scatterplots de la réactivité en fonction de la fraction de mélange, issu du champ XZ moyen à  $y/D = 0.25$  : (i) au niveau de l’injection, pour  $x/D \in [-10, 10]$ , et coloré par la position longitudinale  $x/D$  ; ainsi que (ii) en aval de l’injection  $x/D > 10$  et coloré par la position transversale  $z/D$ . Comparaison avec des calculs 0D de PSR (lignes) utilisant le schéma de Ó Conaire et le mécanisme réduit de BOIVIN *et al.* [19].



**FIG. 7.19** – Distribution du régime d’écoulement (subsonique / supersonique) dans la zone réactive via un *scatterplot* de la richesse locale  $\Phi$  en fonction du nombre de Mach  $Ma$  et coloré par (a) le taux de dégagement de chaleur moyen et (b) le taux de réaction d’ $H_2O$ .

dans la zone de stabilisation de la flamme, en proche paroi, et donc dans la couche limite. Il semblerait que le régime de combustion supersonique soit pleinement atteint pour des fortes richesses ( $\Phi > 2$ ), assurément localisées dans la zone de sillage du jet combustible où le mode de diffusion est plus important et où le dégagement de chaleur n’est pas significatif.

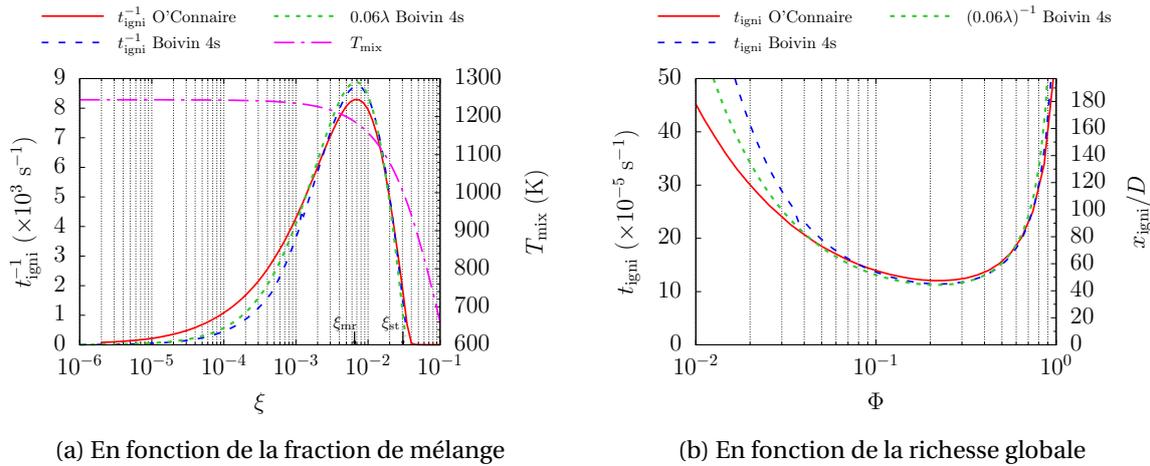
### 7.5.2 Études préliminaires : auto-allumage *versus* propagation

Faisant face à une structure de flamme décrochée partiellement prémélangée et probablement stabilisée par un processus d’auto-allumage, il semble essentiel de pouvoir discriminer ces 2 principaux mécanismes. Rappelons néanmoins qu’une flamme de diffusion ne possède pas à proprement parler d’échelle caractéristique de longueur ou de vitesse, comme son homologue prémélangée qui peut être caractérisée par son épaisseur  $\delta_L^0$  ou sa vitesse de flamme  $S_L^0$ . Ainsi, une étude préliminaire simple a été effectuée, qui permet de distinguer les 2 phénomènes (auto-allumage et propagation) à l’aide de calculs préalables de PSR conduits avec le logiciel *SENKIN* (de la librairie *CHEMKIN*) ainsi que des calculs de flammes laminaires de prémélange stationnaires planes non étirées avec le logiciel *CANTERA*.

### 7.5.2.1 Paramètres de calcul

Ces calculs ont été effectués en considérant un mélange isobare à  $p_\infty = 56$  kPa et une température de mélange  $T_{\text{mix}}(\xi)$  évoluant de façon non linéaire avec la fraction de mélange, via la relation (5.12), qui tient compte de la composition et de la différence de température entre l'air vicié ( $T_\infty = 1108$  K) et l'hydrogène ( $T_{\text{jet}} = 248$  K) (cf. Tab. 5.3), ainsi que la présence de la paroi. Nous supposons que le mélange est isobare dans le domaine de variation de la fraction de mélange  $\xi$ , et donc de la richesse  $\Phi$ , car nous avons vu que la pression était quasi-constante et égale à  $p_\infty$  dans la zone réactive.

### 7.5.2.2 Caractérisation de l'auto-allumage



**FIG. 7.20** – Délai d'auto-allumage  $t_{\text{igni}}$  en fonction de (a) la fraction de mélange  $\xi$  ou (b) de la richesse globale  $\Phi$  (plage de variation équivalente à  $\xi \in [3 \times 10^{-4}, \xi_{\text{st}}]$ ), à  $p_\infty = 56$  kPa et  $T_{\text{mix}}(\xi)$  (5.12). Comparaison avec le mécanisme détaillé de Ó CONAIRE *et al.* [221] (21 étapes + 9 espèces), le mécanisme réduit de BOIVIN *et al.* [19] (4 étapes + 6 espèces + 2 stationnaires) et la réactivité  $\lambda$  obtenue à l'instant initial du calcul. Estimation de position spatiale du point d'allumage par  $x_{\text{igni}} = 0.6u_\infty t_{\text{igni}}$ .

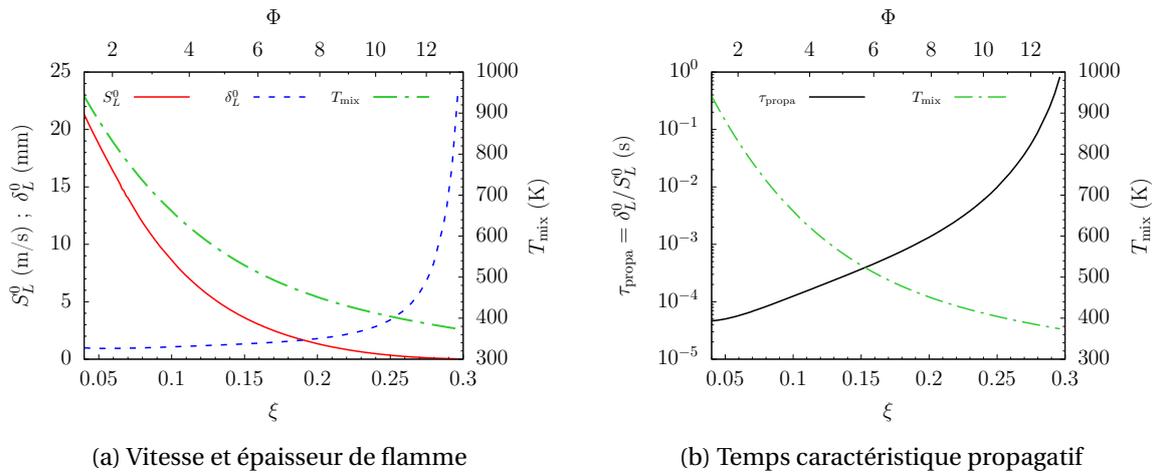
La Fig. 7.20 montre l'évolution du temps d'auto-allumage dans le domaine de variation de la fraction de mélange  $\xi \in [0, 1]$  et donc de la richesse globale  $\Phi \in [0, +\infty[$ . Elle présente, par ailleurs, l'évolution de la température de mélange initiale des gaz frais  $T_{\text{mix}}(\xi)$  en fonction de la fraction de mélange. Il est remarquable de constater que la réactivité  $\lambda$ , qui est obtenue à partir de l'état initial du mélange, permet d'estimer de façon relativement précise le délai d'auto-allumage avant même l'intégration temporelle du réacteur.

De plus, ces courbes mettent en évidence d'une part, que l'évolution du délai d'auto-allumage est fortement non-linéaire en fonction de la fraction de mélange  $\xi$  (et donc de la richesse  $\Phi = \frac{\xi(1-\xi_{\text{st}})}{\xi_{\text{st}}(1-\xi)}$ , Éq. 4.9). Ce temps caractéristique est très long pour les mélanges pauvres ( $\xi \rightarrow 0$  ou  $\Phi \rightarrow 0$ ), puis diminue jusqu'à atteindre un minimum local caractérisé par l'état le plus réactif, pour ensuite augmenter vers des temps très longs pour les mélanges riches ( $\xi \rightarrow 1$  ou  $\Phi \rightarrow \infty$ ). L'état le plus réactif, qui est estimé par un délai d'auto-allumage minimal, n'est pas localisé à la stœchiométrie ( $\xi_{\text{st}}$  et donc à  $\Phi = 1$ ) mais à la valeur  $\xi_{\text{mr}} \approx 0.0065$ , soit  $\Phi_{\text{mr}} \approx 0.207 < 1$ . Ce décalage est le résultat de la différence importante de température entre le courant combustible (froid) et oxydant (très chaud et vicié), qui déplace l'état le plus réactif vers ce courant oxydant chaud et vicié. On peut noter qu'approximativement on a :  $\xi_{\text{mr}} \approx (T_{\text{jet}}/T_\infty) \times \xi_{\text{st}}$ . D'autre part, nous voyons clairement qu'à partir de  $\xi > \xi_{\text{st}}$  (ou  $\Phi > 1$ ), le délai-d'auto-allumage tend vers l'infini (l'inverse tendant vers 0), ce qui montre que pour des fortes richesses, le régime d'auto-allumage spontané ne peut être établi. Plus exactement, il pourrait être établi pour des temps infiniment grands, en revanche, il serait possible de retrouver des régimes de propagation. Au contraire, pour  $\xi < \xi_{\text{st}}$ , les régimes de propagation de flamme ne semblent pas

envisageables et nous supposons donc que seul le régime d'auto-allumage est susceptible d'être rencontré.

Enfin, une première estimation de la position du point d'allumage pourrait être donnée par  $x_{\text{igni}} = 0.6u_\infty t_{\text{igni}}$ . Ainsi, dans nos conditions (cf. Tab. 5.3,  $\Phi = 0.4$ ), une position du point d'allumage est estimée à  $x_{\text{igni}}/D = 50$ , comparée à  $x_{\text{igni}}/D \approx 60$  estimée par le calcul non-réactif a posteriori (cf. Fig. 5.34) et qui est retrouvée par le présent calcul réactif (cf. § 7.3.1). GAMBA et MUNGAL [71] essaient de la même manière de trouver un estimateur du point d'allumage mais en utilisant une vitesse de convection à  $0.5u_\infty$  et dont le facteur est choisi arbitrairement. Cependant, leur approximation fournit un point d'allumage qui correspond à leur point de stabilisation de la flamme.

### 7.5.2.3 Caractérisation des phénomènes de propagation de flamme

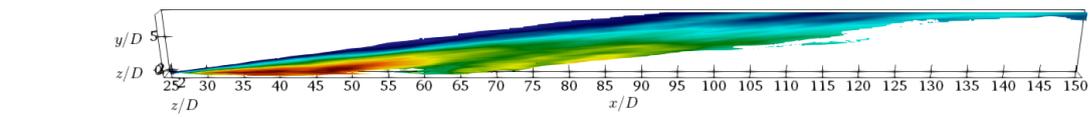


**FIG. 7.21** – Vitesse de flamme laminaire  $S_L^0$ , épaisseur thermique  $\delta_L^0$  et temps caractéristique de la propagation  $\tau_{\text{propa}} = \delta_L^0/S_L^0$  en fonction de la fraction de mélange  $\xi$  (ou de la richesse globale  $\Phi$ , abscisse secondaire) à  $p_\infty = 56$  kPa et  $T_{\text{mix}}(\xi)$  (5.12). Calcul réalisé avec le mécanisme détaillé de Jachimowski (1995) (18 étapes + 9 espèces).

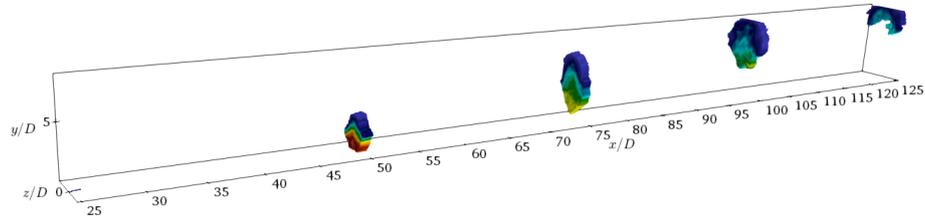
La Fig. 7.21 présente l'évolution de la vitesse de flamme plane laminaire non étirée  $S_L^0$  et de son épaisseur thermique  $\delta_L^0$  en fonction de la fraction de mélange, calculées à partir du mécanisme cinétique détaillé de Jachimowski (18 étapes + 9 espèces). Cette figure se veut complémentaire de la Fig. 7.20 en terme de domaine de variation de la fraction de mélange  $\xi \in [0, 1]$ . En effet, sur la Fig. 7.21, seul le domaine  $\xi \in [0.04, 0.3]$  est représenté car en-dessous de la borne minimale, le phénomène propagatif n'est plus significatif car seul l'auto-allumage devient possible dans ce domaine. Le calcul de vitesse et d'épaisseur de flamme avec *CANTERA* varie énormément d'un point de calcul à un autre (résultats non présentés) et dépend fortement des paramètres de simulation (longueur du domaine, nombre de point, pas de temps, etc.). Enfin, au-delà de la borne maximale, la vitesse de flamme laminaire tend vers 0 : la limite haute d'inflammabilité est atteinte. Nous voyons que la vitesse de flamme est décroissante dans ce sous-domaine de variation de  $\xi$ . Elle devrait atteindre un maximum et une épaisseur de flamme minimale au niveau de la stœchiométrie ( $\xi_{\text{st}} = 0.03$ ), mais le mécanisme d'auto-allumage y est prépondérant. En augmentant la richesse, la vitesse de flamme diminue et son épaisseur augmente jusqu'à atteindre la limite de propagation.

### 7.5.3 Régimes de combustion turbulente prémélangée

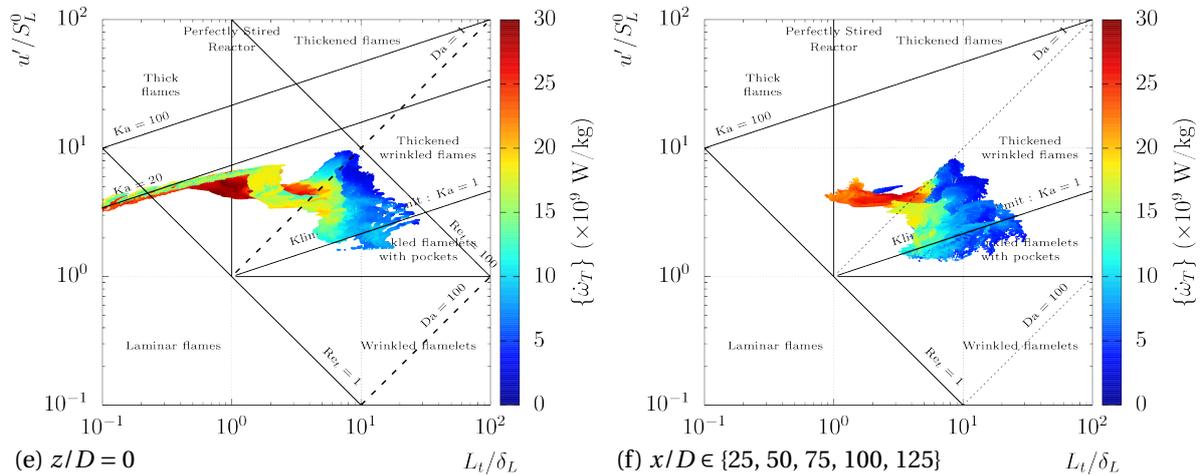
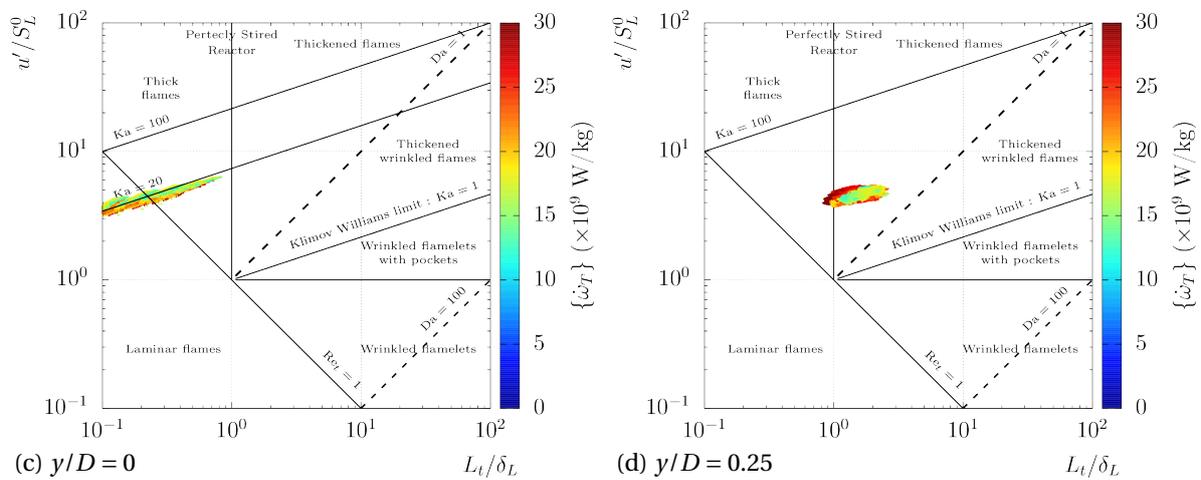
Afin de déterminer la variabilité du régime de combustion prémélangée dans la configuration JISCF, on procède à une projection des données par *scatterplot* dans le diagramme de combustion turbulente prémélangé ( $u_{\text{rms}}/S_L^0, L_t/\delta_L^0$ ). Ce diagramme, présenté Fig. 4.4, a été largement modifié



(a) Localisation des zones probables de combustion prémélangée dans les plans XY médian et XZ à  $y/D = 0$  et  $0.25$ .



(b) Localisation des zones probables de combustion prémélangée dans les plans YZ transversaux



**FIG. 7.22** – (a) et (b) Visualisation des zones conditionnées et où le régime de combustion prémélangée est probable (10 %) de se produire. Évolution du régime de combustion dans le diagramme de combustion turbulente prémélangée, basé sur les coordonnées de BARRÈRE et BORGHI [25]) pour la configuration JISCF à  $J = 2.56$  et  $\Phi = 0.4$ , pour les plans XZ (parallèles à la paroi) localisés en (c)  $y/D = 0$  et (d)  $y/D = 0.25$ ; le plan XY médian longitudinal localisé en (e)  $z/D = 0$ ; et les plans YZ transversaux (f) positionnés en  $x/D = 25, 50, 75, 100$  et  $125$  (tous confondus sur le graphe). Données colorées par le taux de dégagement de chaleur moyen  $\{\dot{\omega}_T\}$ .

dans la littérature et adapté dans le cadre de la LES en comparant les échelles caractéristiques de la chimie avec celles de sous-maille [162, 164].

Les échelles de la turbulence sont estimées, via l'hypothèse classique d'une THI, pour la vitesse fluctuante  $u_{\text{rms}}$  et l'échelle intégrale  $L_t$ , ainsi

$$u_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{2k}{3}} \quad (7.3)$$

$$L_t = \frac{u_{\text{rms}}^3}{\varepsilon} \quad (7.4)$$

avec  $k = \frac{1}{2} \{u_i'' u_i''\}$ , l'énergie cinétique turbulente et  $\varepsilon$  son taux de dissipation (E.1).

Les échelles de la chimie ( $S_L^0, \delta_L^0$ ) sont recalculées judicieusement en chaque point de calcul à condition :

- (i) d'être dans une zone probable de combustion prémélangé, que l'on considérera à partir du moment où  $P_{\text{PCZ}}$  (7.2) est au moins supérieure à 10 %,
- (ii) que la fraction de mélange  $\xi$  soit comprise dans le sous-domaine de variation où nous pré-supposons qu'il est possible de propager une flamme de prémélange, *i.e.* d'après la Fig. 7.21,  $\xi \in [0.04, 0.3]$ .

Dans la plupart des analyses disponibles dans la littérature [40, 138, 170, 207], un unique couple de valeur ( $S_L^0, \delta_L^0$ ) est généralement considéré et ce, pour une seule condition de richesse  $\Phi$ , de pression  $p$  et de température  $T$ . En ce qui nous concerne, nous allons considérer une tabulation 1D des valeurs de ( $S_L^0, \delta_L^0$ ) en fonction de la fraction de mélange  $\xi$  (ou richesse  $\Phi$ ), présentée à la Fig. 7.21. Ainsi, en chaque point de calcul pourvu que les conditions (i) et (ii) soient vérifiées, il est possible d'estimer la vitesse de flamme laminaire et son épaisseur par le biais de la seule connaissance de la fraction de mélange.

Les Figs. 7.22(a) et 7.22(b) montrent les zones probables du mode prémélangé et où une flamme peut potentiellement se propager. Il serait possible de voir la taille de ces zones diminuer en augmentant la probabilité seuil d'être dans une zone de combustion prémélangée  $P_{\text{PCZ}}$ , de sorte qu'aucune région ne devient identifiable si le seuil est supérieur à 35–40 % (cf. Figs. 7.15(h) et 7.16(h)).

La Fig. 7.22(e) montre que sur le plan XY à  $z/D = 0$ , les régimes de combustion prémélangée rencontrés sont variés ; on passe d'un régime laminaire, de flamme épaisse, de flamme épaissie (suivant l'iso-ligne à  $Ka = 20$ ) jusqu'à un régime de flamme plissée et épaissie, nous effleurons aussi le régime de flammelette avec le régime de flammelette plissée avec des poches. Les Figs. 7.22(c) et 7.22(d) indiquent en revanche qu'en proche paroi (plans XZ à  $y/D = 0$  et 0.25), les régimes laminaires et de flammes épaisses prédominent. Globalement, pour des taux dégagements de chaleur significatifs, le nombre de Damköhler est inférieur à l'unité. Par conséquent, les temps caractéristiques de la turbulence sont faibles par rapport à ceux de la propagation de flamme, de sorte qu'on se trouve dans un régime proche de celui du PSR, et la chimie peut être considérée comme laminaire ou lente. La construction de ce diagramme semble indiquer des nombres de Reynolds turbulent assez faibles, compris entre 1 et 100 ; ceci peut paraître trompeur car ce nombre de Reynolds est défini par (4.35) :  $Re_t = Da^2 Ka^2 = \frac{u_{\text{rms}}}{S_L^0} \frac{L_t}{\delta_L^0}$ , et considère donc une diffusivité associée à celle de la flamme, *i.e.* donnée par  $S_L^0 \times \delta_L^0$ , et non celle de l'écoulement. Nous verrons sur les diagrammes de combustion turbulente ( $Da, Re_t$ ) § 7.5.4, que le Reynolds turbulent effectif est nettement plus important.

En s'éloignant de la paroi et de l'injection, les Figs. 7.22(e) et 7.22(f) montrent qu'il est possible d'atteindre des régimes de flamme épaissie et plissée par la turbulence où  $Da > 1$ . Les temps caractéristiques de propagation de la flamme commencent à être plus faibles que les temps caractéristiques de la turbulence. Les structures tourbillonnaires sont susceptibles de plisser la flamme jusqu'à provoquer des extinctions locales. C'est ce que l'on peut voir sur les champs instantanés en bordure du « demi-V » formé par la zone réactive de prémélange. De plus, le régime probable semble se situer à

des valeurs de  $Ka = (\delta_L^0/L_\eta)^2 \gtrsim 1$ , ce qui indique que l'hypothèse de flamme mince n'est pas vérifiée, i.e.  $\delta_L^0 > L_\eta$ .

Les différents diagrammes de la Fig. 7.22 montrent les mêmes variabilités des régimes de combustion turbulente prémélangée. Ceci indique finalement que le plan médian XY passant par l'injection est représentatif de tous les régimes de combustion turbulente prémélangée rencontrés dans la configuration JISCF. Ceci est confirmé par la Fig. 7.22(b), qui montre une faible dispersion du mode de prémélange dans la direction transversale  $z$  par rapport au plan XY médian.

Enfin, la forme que prend la distribution du nuage de points correspond, par transformation homotétique, relativement bien à celle obtenue par QUINLAN *et al.* [170] par le biais d'un calcul RANS, avec le modèle PSR et une paroi adiabatique, sur la configuration *HIFiRE Direct Connect Rig* en mode *scramjet*. La différence ne correspond qu'à un léger décalage (translation) de cette distribution vers le haut à droite avec une distribution présentant une « langue » au voisinage de  $(L_t/\delta_L^0, u_{rms}/S_L^0) \approx (10^{-1}, 10)$  suivant l'iso-ligne à  $Ka = 100$  jusqu'à  $L_t/\delta_L^0 \approx 10^2$  (réduction). Les différences observées s'expliquent par une configuration différente, comprenant des cavités, des injections multiples mais surtout un point de fonctionnement différent en termes de pression, température, richesse et de combustible utilisé (méthane + éthylène).

Cette étude, associée à celle de QUINLAN *et al.* [170], semblent montrer que la présence de la paroi conditionne de manière importante la dispersion des régimes de combustion turbulente prémélangée qui s'y développent. En particulier, il semble que le nombre de Karlovitz  $Ka$  est quasiment constant en proche paroi, la valeur que prend ce paramètre dépend de la configuration et est probablement fixée par l'épaisseur de la couche limite (échelle dissipative) ainsi que celle de la flamme (échelle chimique).

### 7.5.4 Régimes de combustion turbulente sur le diagramme $(Da, Re_t)$

En vue de compléter l'analyse précédente des régimes de combustion turbulente prémélangée qui s'est focalisée sur le mode de propagation de la flamme, nous poursuivons cette étude avec une représentation différente en utilisant un diagramme de combustion turbulente basé sur le couple  $(Da, Re_t)$  généralement appelé coordonnées de WILLIAMS, présenté à la Fig. 4.5. Cette étude comparera notamment les 2 mécanismes principaux de stabilisation que sont la propagation et l'auto-allumage.

Dans ce diagramme, BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3] ainsi qu'INGENITO et BRUNO [99] tentent de définir le domaine probable associé aux régimes de combustion supersonique, délimitant la plage de fonctionnement des *scramjets*. Ces domaines sont illustrés dans les Figs. 7.23, 7.25 et 7.26 par les cadres rouge, bleu et vert. La définition de ces domaines passe par une considération d'un nombre de Mach de vol  $Ma$  compris entre 1–4 [3] ou 7–9 [99], une température de 300–1200 K pour [3] ou 1000 K [99] et une pression statique de 0.3–5 atm. BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3] approximent une intensité de turbulence très importante à 50 % dans la chambre de combustion alors que INGENITO et BRUNO [99] ne retiennent finalement que 0.5–10 %. Pour l'échelle intégrale, BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3] considère la longueur de la chambre de combustion puis, en s'appuyant sur des calculs de flamme de diffusion à contre-courant pour différents taux d'étirement, ces auteurs délimitent la zone la plus probable des régimes de combustion susceptibles d'être rencontrés dans les *scramjets*. Cependant, comme le précisent les auteurs, cette dernière ne tient pas compte du dégagement de chaleur sur l'énergie cinétique turbulente qui provoquerait une diminution de cette dernière par l'augmentation de viscosité induite par la température [122]. Cet effet est probablement pris en compte par INGENITO et BRUNO [99] qui choisissent une intensité de turbulence, et donc un nombre de Reynolds turbulent, plus faible. Enfin, quelques incertitudes subsistent sur l'effet de l'auto-allumage qui pourrait diminuer le nombre de Damköhler  $Da$  et pourrait donc diminuer la limite basse du domaine possible de combustion supersonique. INGENITO et BRUNO [99] définissent ce domaine probable des régimes de combustion supersonique par le biais des résultats issus de leurs calculs LES sur le banc SCHOLAR [49], avec un mécanisme réactionnel global à 1 étape. Ces derniers auteurs utilisent pour

cela, une définition du temps caractéristique chimique basée sur le taux de production du produit  $\dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}}$ . Cependant, ce résultat est susceptible d'être biaisé car, en utilisant un schéma réactionnel à 1 seule étape, ces auteurs font l'approximation d'une chimie rapide. Par conséquent, il est fort probable que la zone prédite soit biaisée par cette considération, sur-estimant les taux de réaction d' $\text{H}_2\text{O}$  et donc, sur-estimant le nombre de Damköhler. De plus, d'autres incertitudes subsistent car la méthode d'injection du combustible ainsi que la géométrie de la chambre vont modifier le mélange, et donc affecter le nombre de Damköhler. Ces derniers vont aussi fortement dépendre des conditions aux limites telle que le niveau d'enthalpie totale de l'écoulement principal entrant dans la chambre de combustion. Comme l'ont montré BERGLUND et FUREBY [12], BERGLUND *et al.* [13], il est effectivement possible d'évoluer à partir de régimes de flammelette jusqu'à des régimes de combustion distribuée en passant d'une configuration à une autre.

Dans le cas précédent, le nombre de Damköhler est estimé par (4.19) :  $\text{Da} = \tau_t / \tau_c$  avec  $\tau_t = L_t / u_{\text{rms}} = k / \varepsilon$ , le temps de retournement des grandes structures et  $\tau_c$ , une échelle de temps caractéristique de la chimie. Nous retiendrons 3 possibilités pour estimer le temps caractéristique de la chimie qui seront basées sur : (i) la production d' $\text{H}_2\text{O}$ , (ii) la propagation de la flamme ou encore (iii) l'auto-allumage

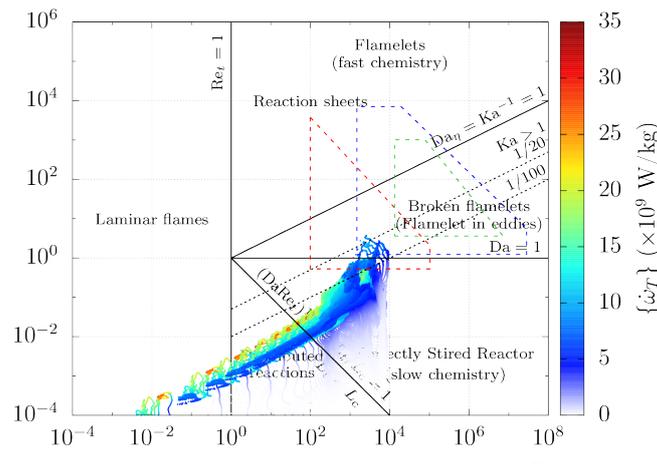
$$\tau_{\text{prod}} = \{\tilde{\omega}_{\text{H}_2\text{O}}\}^{-1} \rightarrow \text{Da}_{\text{prod}} \quad (7.5)$$

$$\tau_{\text{propa}} = \delta_L^0 / S_L^0 \rightarrow \text{Da}_{\text{propa}} \quad (7.6)$$

$$\tau_{\text{igni}} = \langle \lambda \rangle^{-1} \rightarrow \text{Da}_{\text{igni}} \quad (7.7)$$

Ces différents temps permettent de définir des nombres de Damköhler basés respectivement sur la production d' $\text{H}_2\text{O}$  sur les mécanismes de propagation et enfin, sur les processus d'allumage. Enfin, le nombre de Reynolds turbulent (effectif : ne supposant pas une THI) sera calculé par (3.71) :  $\text{Re}_t = u_{\text{rms}} L_t / \langle \nu \rangle = k^2 / \langle \nu \rangle \varepsilon$ .

#### 7.5.4.1 Nombre de Damköhler basé sur la production de vapeur d'eau



**FIG. 7.23** – Diagramme de combustion turbulente ( $\text{Da}_{\text{prod}}, \text{Re}_t$ ) pour la configuration JISCF à  $J = 2.56$  et  $\Phi = 0.4$ , avec un temps caractéristique chimique représentatif de la production de vapeur d'eau :  $\tau_c = \tau_{\text{prod}} = \{\tilde{\omega}_{\text{H}_2\text{O}}\}^{-1}$ , sur le plan XY médian ( $z/D = 0$ ). Coloration du nuage de points par le taux de dégagement de chaleur moyen  $\{\dot{\omega}_T\}$ . Les cadres rouge, bleu et vert, représentent les domaines probables des régimes de combustion supersonique tels que définis par INGENITO et BRUNO [99] en rouge, par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3] en bleu (pour le domaine possible) et en vert (pour le domaine le plus probable).

La Fig. 7.23 présente un premier diagramme de combustion turbulente dans le plan  $(Da, Re_t)$ . Ce diagramme est construit en utilisant les mêmes définitions qu'INGENITO et BRUNO [99] concernant notamment les temps caractéristiques de la chimie. À savoir, un temps chimique représentatif de la production d' $H_2O$ . Nous constatons dans ce cas que les régimes de combustion supersonique sont situés en-dessous de la zone prédite par INGENITO et BRUNO [99]. Ce résultat concorde avec les observations de COCKS [47] qui a comparé les effets d'une chimie détaillée (finie) par rapport à un mécanisme global (chimie infiniment rapide) sur le nombre de Damköhler. L'écart important que nous obtenons par rapport à INGENITO et BRUNO [99], est d'environ 2 décades. Il est dû aux effets de chimie finie associés à l'emploi d'un mécanisme comportant plusieurs étapes, dans notre cas, un mécanisme réduit, par rapport à un schéma global. Ainsi, ce constat conduit aussi à se questionner sur l'étude réalisée par BOUHERAOUA [27] qui utilise la première version du mécanisme cinétique réduit de BOIVIN *et al.* [17] (3 étapes + 5 espèces, adapté pour  $T > T_c$ ) et prédit tout de même des régimes de combustion supersonique correspondant à ceux d'INGENITO et BRUNO [99] en considérant un mécanisme à une seule étape appliqué au calcul de la flamme jet supersonique de CHENG *et al.* [46].

Comme nous l'avons constaté sur les diagrammes  $(u_{rms}/S_L^0, L_t/\delta_L^0)$  de combustion turbulente prémélangée, les valeurs du nombre de Reynolds turbulent sont beaucoup plus importantes dans cette nouvelle représentation du diagramme de combustion. En effet, des valeurs du nombre de Reynolds turbulent de l'ordre de  $10^4$  sont obtenues ici, comparées à celles atteintes sur le diagramme de combustion turbulente prémélangée précédent qui étaient de l'ordre de  $10^2$ . Nous constatons, sur la Fig. 7.24, que le nombre de Reynolds de flamme  $Re_F = S_L^0 \delta_L^0 / \langle \nu \rangle$  (4.36) diffère significativement de l'unité. Rappelons ici que les valeurs de  $(S_L^0, \delta_L^0)$  sont issues de la tabulation 1D (Fig. 7.21) à partir du champ de  $\{\tilde{\xi}\}$ . Le champ de viscosité cinématique  $\langle \nu \rangle$  correspond à celui obtenu localement par le présent calcul CFD. Ceci tend à remettre en cause l'hypothèse utilisée pour construire le diagramme de combustion turbulente prémélangée qui suppose que  $Re_F \sim 1$ . Ainsi, ce facteur explique l'écart entre ces deux estimations du nombre de Reynolds turbulent présent dans ces 2 diagrammes de combustion turbulente.

Par ailleurs, nous voyons que pour cette configuration, nous nous plaçons à la limite inférieure gauche (borne minimale en  $Re_t$  et  $Da$ ), du « domaine possible » (en bleu, Fig. 7.23), prédit par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3]. Comme l'ont souligné ces auteurs, le dégagement de chaleur aurait pour principal effet de diminuer l'énergie cinétique turbulente  $k$ , or cet effet a été négligé par les auteurs dans la construction des domaines probables de combustion supersonique. Cependant, cet effet a été probablement pris en compte par INGENITO et BRUNO [99] qui considèrent une intensité de turbulence plus faible (0.5–10 %) et donc un nombre de Reynolds turbulent moins important. Les études de COCKS [47] et, très récemment, de FUREBY [70] semblent confirmer les observations de LIBBY et WILLIAMS [122] quant aux effets du dégagement de chaleur sur l'intensité de la turbulence à travers la flamme. Bien que le dernier auteur montre des effets de compressibilité très importants avec des nombres de Mach turbulent de l'ordre de  $Ma_t \sim 1.5$  mais des nombres de Reynolds turbulent compris entre  $10^2$ – $10^4$ . Dans notre configuration, on pourrait observer (résultat non-affiché) une diminution de l'intensité de turbulence de 10 à 5 %, au passage de la zone réactive. Ce qui correspond aux observations faites par INGENITO et BRUNO [99]. Néanmoins, dans notre cas, cette faible intensité semble plutôt provenir de l'absence de confinement comme précédemment discuté.

Le diagramme  $(Da, Re_t)$  n'est en réalité qu'un changement de repère par rapport au diagramme de combustion turbulente prémélangée présenté précédemment. Ceci est la raison pour laquelle, nous retrouvons une distribution du nuage de points identique, par transformation homothétique, avec la forme caractéristique allongée de la distribution et parallèle aux iso-lignes de Karlovitz ; puis une accumulation des points à son extrémité.

Cette définition du Damköhler basé sur la production, indique que le régime de combustion, est essentiellement un régime de PSR où la chimie est laminaire et lente. Cependant, nous allons voir

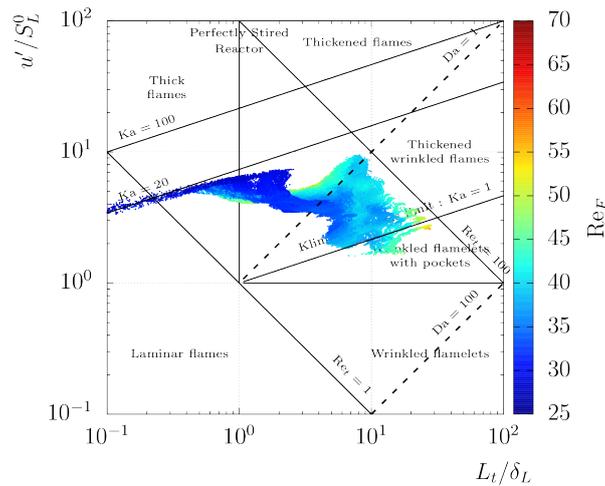


FIG. 7.24 – Nombre de Reynolds de flamme  $Re_F = S_L^0 \delta_L^0 / \langle v \rangle$ .

que les autres formulations du nombre de Damköhler, basés sur la propagation et l'auto-allumage conduisent à des régimes de combustion supersonique notablement plus étendus.

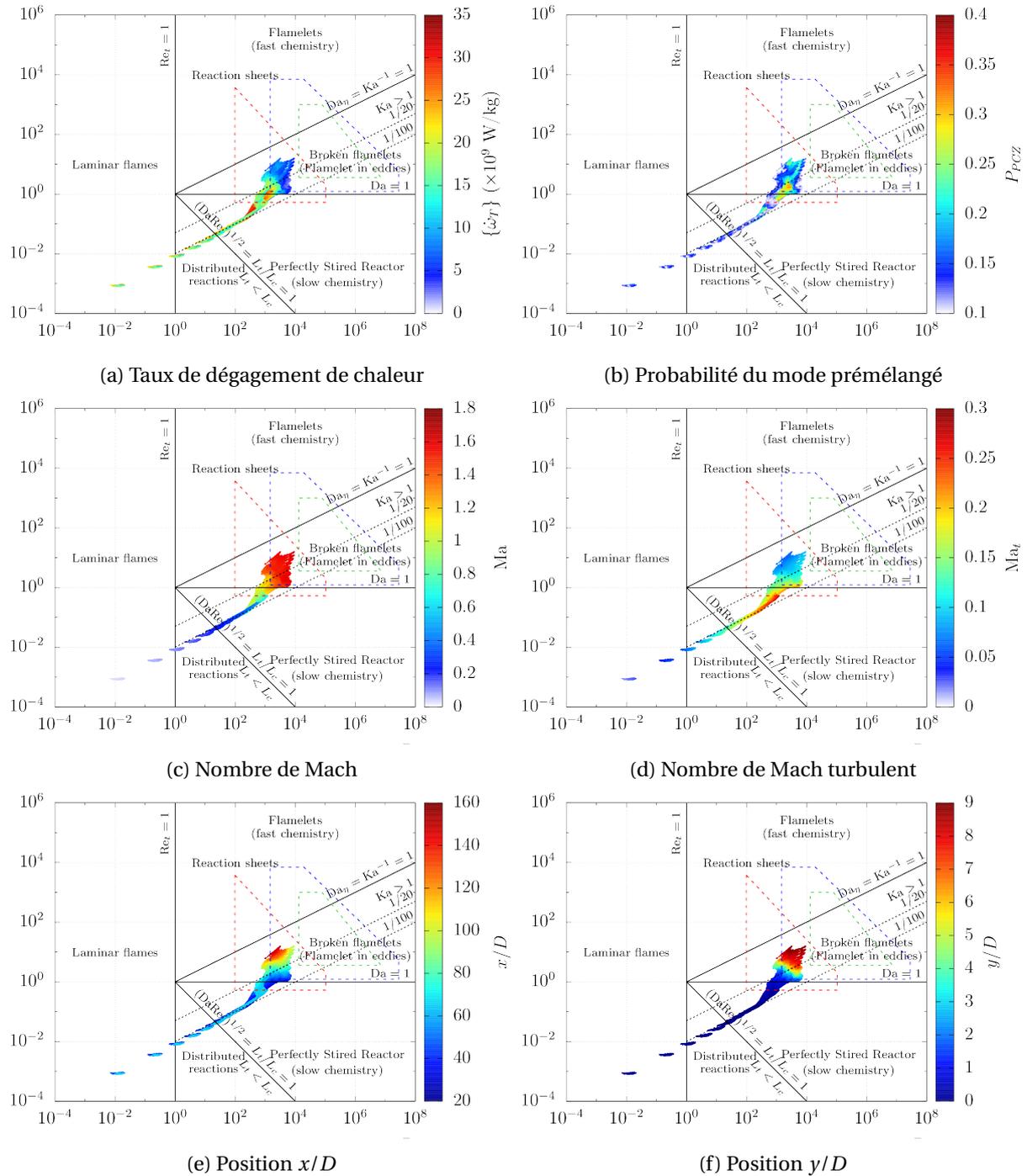
#### 7.5.4.2 Nombre de Damköhler basé sur la propagation de la flamme

La Fig. 7.25 représente cette fois le diagramme  $(Da, Re_t)$ , en utilisant un nombre de Damköhler basé sur le mécanisme de propagation de la flamme. Par conséquent, un conditionnement similaire à celui proposé au § 7.5.3 est retenu afin d'être le plus représentatif possible d'un régime de propagation de flamme.

La Fig. 7.25(a) montre que le nuage de points a été translaté vers le haut d'environ une décade afin d'atteindre le régime dit de *broken flamelets* où  $Da_{\text{propa}} > 1$ . La forme effilée du nuage de points suit cette fois l'iso-ligne  $Ka = 100$ . La dispersion du nuage de points atteint les domaines prédits par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3], INGENITO et BRUNO [99] pour les régimes de combustion supersonique. Cependant, la majorité du dégagement de chaleur semble se produire dans les régimes de PSR comme l'avaient déjà indiqué les diagrammes de combustion turbulente prémélangée, Fig. 7.22.

La Fig. 7.25(b) montre que les zones où le mode de prémélange est le plus probable, se situent aux alentours d'un Damköhler unitaire mais plus particulièrement dans les régimes de *broken flamelets*, équivalents aux régimes de flamme plissée épaissie en combustion turbulente prémélangée. En effet, nous avons vu qu'en proche paroi, la seule zone où le mode de prémélange est significatif se situe au niveau de la zone de stabilisation, au-delà, la probabilité du mode prémélangé est plus important dans la bordure en forme de demi-V de la zone réactive. C'est dans cette zone que la flamme va fortement interagir avec l'écoulement turbulent et présenter des zones d'extinctions locales ainsi qu'un plissement et un épaississement notable. Cette zone est aussi caractérisée par un régime d'écoulement supersonique comme le montre la Fig. 7.25(c) et indique que la ligne sonique délimite assez bien la limite basse du domaine de combustion supersonique prédie par INGENITO et BRUNO [99].

Comme l'ont souligné BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3], ce diagramme n'incorpore ni les effets de la compressibilité ni ceux du Mach, qui peuvent devenir importants en combustion supersonique. C'est pourquoi nous avons choisi d'ajouter ces autres dimensions sur les Figs. 7.25(c) et 7.25(d). Ainsi, la Fig. 7.25(d) montre que le Mach turbulent, qui permet de mesurer les effets de compressibilité sur la turbulence, est important (entre 0.2–0.3) dans la zone où le dégagement de chaleur moyen est le plus élevé, en proche paroi ( $y/D \lesssim 1$ ), puis s'atténue dans la zone de régime *broken flamelet*. D'après les précédentes discussions, ce comportement est probablement dû à l'absence de confinement et donc de réflexions de choc qui auraient pu maintenir un niveau relativement important du nombre de Mach turbulent à chaque traversée d'un choc réfléchi.



**FIG. 7.25** – Diagrammes de combustion turbulente ( $Da_{\text{propa}}, Re_t$ ) pour la configuration JISCF à  $J = 2.56$  et  $\Phi = 0.4$ , avec un temps caractéristique chimique représentatif de la propagation de flamme  $\tau_c = \tau_{\text{propa}} = \delta_L^0/S_L^0$ , sur le plan XY médian ( $z/D = 0$ ) conditionné par une probabilité du mode prémélangé supérieure à 10 %. Coloration du nuage de points par (a) le taux de dégagement de chaleur moyen  $\{\dot{\omega}_T\}$ ; (b) la probabilité d'être dans un mode de combustion prémélangé  $P_{\text{PCZ}}$ ; (c) le nombre de Mach  $Ma$ ; (d) le nombre de Mach turbulent  $Ma_t$ ; ainsi que les positions spatiales (e)  $x/D$  et (f)  $y/D$ .

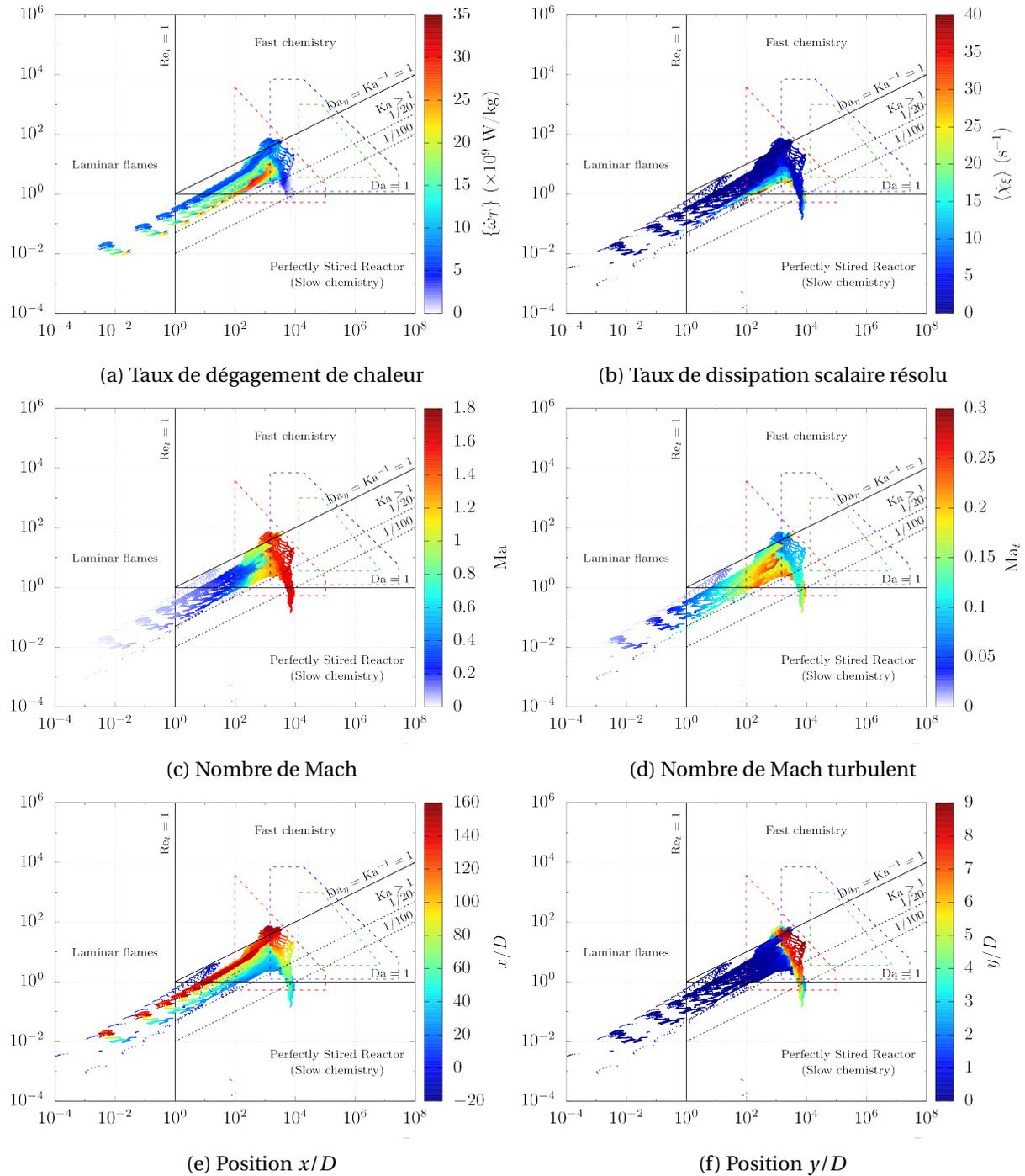
FUREBY [70] a très récemment effectué un travail analogue sur la configuration *HyShot II* et mesure des effets de compressibilité étonnamment importants, avec un nombre de Mach turbulent pouvant atteindre localement 1.5. L'auteur explique que ces régions à fort nombre de Mach turbulent sont issues des CVP, des zones de réflexion de chocs et des zones où les chocs induisent l'allumage. En effet, dans la configuration simulée, le train de choc, créé par le confinement, permet certainement la conservation d'un degré élevé de fluctuation à chaque franchissement de chocs réfléchis. Cela pourrait expliquer le nombre de Mach turbulent important, ainsi qu'un maintien des structures tourbillonnaires qui se sont étirées dans la direction longitudinale de l'écoulement. Toutefois, l'auteur ne précise pas, dans son étude, le temps caractéristique chimique retenu pour calculer le nombre de Damköhler. Malgré tout, les régimes de combustion turbulente qu'il rencontre sur la configuration *HyShot II* sont globalement compris entre  $10^2 < Re_t < 10^4$  ce qui correspond bien au domaine prédit par INGENITO et BRUNO [99]. Ces régimes sont voisins du régime de PSR ( $Da > 10^{-1}$ ), puis passent par le régime de *broken flamelets* et s'étendent même jusqu'au régime dénommé *reaction sheets* ( $Da \sim 10^5$  équivalent au régime de flammelette plissée, éventuellement avec des poches, pour des flammes turbulentes de prémélange). Concernant ce dernier régime, la densité du nuage de points est relativement faible, suggérant finalement que seule une infime partie de son domaine se situe dans ce régime de combustion. La densité de points la plus importante est comprise entre  $10^{-1} < Da < 10^2$  et donc dans le domaine prédit par INGENITO et BRUNO [99] et en partie par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3]. En revanche, il ne rencontre ni le régime dit de *distributed reaction* ni le régime laminaire. Pour ces deux derniers régimes, il est probable que les données obtenues (i) au voisinage de la paroi et / ou (ii) dans les régions d'écoulement subsonique, n'ont pas été prises en compte

Enfin, les Figs. 7.25(e) et 7.25(f) permettent de localiser spatialement, dans l'écoulement, ces différents régimes. En proche paroi et en champ proche de l'injecteur, le régime de combustion est plutôt celui d'un PSR, alors qu'en s'éloignant de la paroi et de l'injection, le régime est celui des *broken flamelets*.

#### 7.5.4.3 Nombre de Damköhler basé sur l'auto-allumage

La Fig. 7.26 utilise cette fois, un nombre de Damköhler basé sur le mécanisme d'auto-allumage pour construire ces diagrammes de combustion turbulente dans le plan  $(Da_{igni}, Re_t)$ . Étant donné que ce phénomène est intrinsèquement 0D, les zones correspondant à des structures de flamme ont été omises des diagrammes. Ainsi, seules 3 principales zones subsistent : le régime laminaire, le régime de PSR (chimie lente) et de chimie rapide.

La Fig. 7.26(a) montre un épaississement du nuage de points car la zone considérée est celle du volume réactif tout entier, délimitée par  $\{\dot{\omega}_T\} > 0.001 \{\dot{\omega}_{T,max}\}$ . Par conséquent, le domaine d'étude est plus large. Ainsi, il est remarquable de noter que ce nuage de points a été translaté vers le haut d'environ une décade, par rapport aux résultats basés sur un Damköhler de propagation, de sorte que la partie allongée de la distribution varie maintenant entre  $Ka = 1-20$  environ. Ceci se traduit par des temps caractéristiques d'auto-allumage plus faibles que les temps de propagation, et par conséquent, à des nombres de Damköhler d'allumage plus importants. Ainsi, il semblerait que le mécanisme principal de stabilisation de la flamme, puisse être l'auto-allumage. De plus, l'utilisation de ce Damköhler d'auto-allumage montre que les régimes de combustion supersonique correspondent relativement bien à la région prédite par INGENITO et BRUNO [99] et en partie à celle de BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3]. Le régime de combustion se situe autour d'un Damköhler unitaire mais le dégagement de chaleur le plus important est localisé dans un régime de chimie rapide où  $1 < Da_{igni} < 100$ . La Fig. 7.26(b) indique que lorsque le dégagement de chaleur est le plus important, le taux de dissipation scalaire est faible, confirmant que l'auto-allumage se produit majoritairement dans les zones de faible SDR. Les Figs. 7.26(c) et 7.26(d) indiquent que la zone correspondant à une chimie relativement rapide ( $Da_{igni} < 10^2$ ) se situe dans la région où l'écoulement est pleinement supersonique ( $Ma > 1.2$ ). Les effets de compressibilité, mesurés par la valeur du nombre de Mach turbulent, sont importants en proche paroi  $y/D \lesssim 1$  et pour des taux de dégagement de chaleur importants. Enfin,



**FIG. 7.26** – Diagrammes de combustion turbulente ( $Da_{\text{ign}}, Re_{\tau}$ ) pour la configuration JISCF à  $J = 2.56$  et  $\Phi = 0.4$ , avec un temps caractéristique chimique représentatif de l’auto-allumage  $\tau_c = \tau_{\text{igni}} \equiv \langle \lambda \rangle^{-1}$ , sur le plan XY médian ( $z/D = 0$ ). Coloration du nuage de points par (a) le taux de dégagement de chaleur moyen  $\langle \dot{\omega}_T \rangle$ ; (b) le taux de dissipation scalaire résolu moyen  $\langle \chi_{\xi} \rangle$ ; (c) le nombre de Mach  $Ma$ ; (d) le nombre de Mach turbulent  $Ma_{\tau}$ ; ainsi que les positions spatiales (e)  $x/D$  et (f)  $y/D$ .

le régime de chimie rapide semble être présent sur l'intégralité du domaine simulé : sur la longueur (Fig. 7.26(e)) mais aussi sur la hauteur (Fig. 7.26(f)). Ces résultats montrent finalement bien que les modèles basés sur l'hypothèse de chimie rapide sont inadaptés pour les configurations du type JISCF et que la prise en compte du caractère fini de la cinétique chimique est essentielle.

## 7.6 Conclusion

La simulation aux grandes échelles 3D réactive, utilisant le modèle PSR et le mécanisme cinétique de BOIVIN *et al.* [19], a été réalisée sur la configuration d'un jet pariétal se développant dans un écoulement supersonique (JISCF, *Jet In Supersonic Cross-Flow*) à  $Ma_\infty = 2$ . Les paramètres globaux de cette configuration sont : un rapport de flux de quantité de mouvement  $J = 2.56$  et une richesse globale  $\Phi \approx 0.40$ . Cette étude s'est principalement focalisée sur l'analyse de la structure de flamme, les mécanismes de stabilisation ainsi que les différents régimes de combustion pouvant être présents sur cette configuration représentative des *scramjets*.

Des méthodes d'anticipation de la zone d'allumage ont été présentées. Elles reposent sur une estimation par (i) le calcul inerte a posteriori ou (ii) un calcul 0D de PSR via une estimation du délai d'auto-allumage. Ces méthodes font intervenir la réactivité  $\lambda$  introduite par BOIVIN *et al.* [17, 20] qui correspond à la valeur propre réelle et positive de la matrice caractéristique du système différentiel basé sur les évolutions des concentrations de H, O et OH. Cette grandeur est notamment caractéristique du mécanisme de branchement pour lequel la 2<sup>e</sup> limite d'explosion est atteinte et, par conséquent, elle est caractéristique et inversement proportionnelle au délai d'auto-allumage. Elle nous permet ainsi d'estimer l'extrémité de la zone d'allumage à  $x/D \approx 60$  avec (i) et  $x/D = 50$  avec (ii).

L'évolution temporelle de l'écoulement réactif montre un auto-allumage du mélange au voisinage de la paroi et donc dans la couche limite. La réaction se développe très rapidement en aval, dans la direction normale à la paroi et surtout, remonte vers l'injection en présentant une oscillation de la zone réactive. La combustion se stabilise finalement en aval du jet, au voisinage de  $x/D = 25$ .

La structure de flamme instantanée obtenue est caractéristique d'une flamme partiellement prémélangée. Lorsque l'écoulement est établi, elle prend la forme d'un demi-cône dont le sommet est celui de la zone de stabilisation et la base orientée vers la sortie du domaine. INGENITO et BRUNO [99] retrouvent cette structure particulière et les régions réactives correspondantes. Cependant, GAMBA et MUNGAL [71] semblent observer une structuration de l'écoulement réactif relativement différente pour un rapport de flux de quantité de mouvement  $J$  du même ordre de grandeur, laissant entendre que la structure de flamme puisse être dépendante des paramètres  $J$ ,  $\Phi$  mais certainement encore plus dépendante de la physique de paroi (rugosité, adiabatique, isotherme).

La stabilisation par auto-allumage est observée, via l'augmentation de la réactivité et de la présence importante du précurseur de l'auto-allumage  $HO_2$  localisé dans des zones de faible SDR et proche de la fraction de mélange stœchiométrique.

Le dégagement de chaleur est significatif en proche paroi autour d'un Mach sonique et pour des conditions riches ( $\Phi \approx 2$ ) mais la combustion a bien lieu à des vitesses supersoniques en s'éloignant de la paroi en dépit d'un taux de dégagement de chaleur plus faible.

Les régimes de combustion turbulente supersonique ont été étudiés en détail avec l'utilisation (i) du diagramme de combustion turbulente prémélangée  $(u_t/S_L^0, L_t/\delta_L^0)$  de BORGHI [22] ainsi que (ii) du diagramme de combustion turbulente  $(Da, Re_t)$ , tel que proposé par WILLIAMS [213]. Le premier est notamment construit à partir des zones probables où le prémélange peut avoir lieu. Dans le second, 3 différents nombres de Damköhler caractéristiques de (a) la production d' $H_2O$ , (b) la propagation de flamme et (c) l'auto-allumage ont été considérés. Ces différents diagrammes mettent en évidence des régimes de combustion turbulente présentant des effets de cinétique chimique finie importants. En effet, les nombres de Damköhler formulés sont globalement proches ou inférieurs à l'unité. Ainsi, les régimes de flammelette, *i.e.* de chimie infiniment rapide, sont exclus de notre configuration représentative de la combustion supersonique. Enfin, les régimes de combustion superso-

nique rencontrés correspondent assez bien à ceux prédits par BALAKRISHNAN et WILLIAMS [3], INGENITO et BRUNO [99] et il semblerait que les effets de compressibilité soient importants au niveau des zones associées à de forts taux de dégagement de chaleur.

## Chapitre 8

# Perspectives et conclusions

### Sommaire

<b>8.1</b>	<b>Modèle hybride de combustion turbulente</b>	<b>167</b>
8.1.1	Contribution du terme résolu pondéré $(1 - S_\xi)\dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y})$	168
8.1.2	Contribution du terme de sous-maille $S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}}$	168
<b>8.2</b>	<b>LES réactive du JISCF basée sur un modèle hybride de combustion turbulente</b>	<b>169</b>
8.2.1	Paramètres de simulation	169
8.2.2	Résultats et éléments de comparaisons avec le modèle PSR	170
<b>8.3</b>	<b>Conclusions générales</b>	<b>173</b>
<b>8.4</b>	<b>Perspectives générales</b>	<b>175</b>

### 8.1 Modèle hybride de combustion turbulente

Nous avons vu que l'utilisation du modèle PSR pré-suppose un mélange parfaitement homogène (en composition, pression, température) au sein de la maille et que par conséquent, les fluctuations de sous-maille sont négligées. Le modèle présenté dans ce paragraphe de perspective vise à tenir compte de l'influence de tout ou partie de ces fluctuations de sous-maille afin de tendre vers un terme source chimique laminaire / résolu  $\check{\omega}_\alpha(\rho, T, Y) = \dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y})$ , dans le cas où la résolution du maillage est suffisante pour considérer les fluctuations de sous-maille négligeables. Dans le cas contraire, le modèle tendra vers la contribution chimique de sous-maille  $\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}}$  qui inclut les effets d'interaction entre la chimie et la turbulence de sous-maille.

Pour cela, on se propose d'estimer les niveaux des fluctuations de composition en utilisant le taux de ségrégation du scalaire passif

$$(6.2) : \quad S_\xi = \frac{\tilde{V}_\xi}{\tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})} \in [0, 1] \mid \tilde{\xi} \in ]0, 1[$$

Cette grandeur est facilement utilisable comme facteur de pondération car elle est bornée entre 0 et 1. On supposera que la température et la pression sont uniformes à l'échelle de la maille de calcul. Ainsi, en s'inspirant (i) d'une fermeture de type "bridging" telle que celle utilisée dans le modèle de dissipation scalaire pour la combustion partiellement prémélangée de MURA *et al.* [147] ainsi que (ii) du développement en série de Taylor du terme source chimique (cf. § 4.5, BORGHINI [23]), on modélisera le taux de réaction chimique filtré par

$$\tilde{\omega}_\alpha(\rho, T, Y) = (1 - S_\xi)\dot{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y}) + S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}} \quad (8.1)$$

Dans cette fermeture, seules les fluctuations engendrées par le mélange turbulent (de sous-maille) sont prises en compte. En réalité, il faudrait discriminer les fluctuations de composition / scalaire

dues à (i) la réaction chimique de celles associées au (ii) mélange moléculaire. En effet, même si le niveau de fluctuation turbulente en sous-maille est faible ( $S_\xi \rightarrow 0$ , *i.e.* richesse locale homogène), on peut ne pas être suffisamment résolu et devoir tout de même utiliser une contribution de sous-maille  $\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}}$  et pas uniquement une contribution résolue  $\check{\omega}_\alpha$ . Effectivement, en sous-maille, il pourrait subsister de petites flammelettes prémélangées (minces) qui se maintiennent. Néanmoins, si le mélange turbulent est réellement très important (nombre de Damköhler  $Da < 1$ ), ce type de structures laminaires prémélangées ne devrait pas se maintenir.

### 8.1.1 Contribution du terme résolu pondéré $(1 - S_\xi)\check{\omega}_\alpha(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{Y})$

Le terme source chimique résolu sera estimé par la loi d'Arrhenius (2.45) ou (4.22) en ne tenant compte que des grandeurs filtrées, *i.e.* masse volumique, température et fractions massiques d'espèces filtrées. Rappelons que cette loi de comportement s'appuie sur un modèle 0D, établi quelle que soit la manière dont le mélange s'est préalablement opéré et donc quel que soit le mode de combustion, à savoir : prémélangé, non-prémélangé ou partiellement prémélangé. En particulier, il nous permettra de restituer fidèlement le processus d'auto-allumage, ainsi que les zones où le mode de combustion est prémélangé. En effet, nous avons vu § 7.5.4.2 « Nombre de Damköhler basé sur la propagation de la flamme », que les zones de fort dégagement de chaleur étaient associées à des nombres de Damköhler de propagation  $Da_{\text{propa}} \lesssim 1$ , ce qui tend à justifier l'utilisation du modèle de PSR (4.22).

Cette première contribution pourrait constituer à elle seule un modèle de combustion turbulente explicite étant donné qu'elle témoigne, en partie, de l'interaction entre la chimie et la turbulence de sous-maille via le taux de ségrégation. En particulier, si l'hétérogénéité de composition est maximale, *i.e.* forte alternance d'oxydant et de combustible, le taux de réaction tend à s'annuler dans ce cas.

### 8.1.2 Contribution du terme de sous-maille $S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}}$

Le terme source à l'échelle non-résolue  $\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}}$  doit en revanche être fermé par un modèle de combustion de sous-maille explicite et approprié aux régimes de flamme rencontrés. Cependant, dans certains cas, comme celui des flammes de diffusion décrochées, la présence d'une zone d'induction, avant l'apparition du *front de flamme*, fait que le combustible et l'oxydant peuvent localement et à certains instants disposer du temps nécessaire pour se mélanger à l'échelle moléculaire. Il peut ainsi y avoir un prémélange partiel entre les réactifs, c'est pourquoi, on se propose d'utiliser l'indice de Takeno [216] normalisé à l'échelle résolue<sup>1</sup>, ou fraction de prémélange (5.13) :

$$\check{\zeta}_P = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\vec{\nabla} \tilde{Y}_F \cdot \vec{\nabla} \tilde{Y}_O}{\|\vec{\nabla} \tilde{Y}_F\| \|\vec{\nabla} \tilde{Y}_O\| + \epsilon} \right)$$

qui, comme nous l'avons vu § 7.3.2, est un critère local utile pour discriminer les différents régimes de flamme.

On se propose ensuite d'utiliser un second modèle de type *bridging*, semblable à celui fourni par (8.1), pour construire un terme source chimique de sous-maille qui puisse restituer les différents modes de combustion. Pour cela, on introduit cette fois-ci une pondération des termes sources chimiques turbulents avec l'indice de prémélange résolu, par l'expression suivante

$$\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs}} = (1 - \check{\zeta}_P)\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs},NP} + \check{\zeta}_P\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs},P} \quad (8.2)$$

où les exposants  $P$  et  $NP$  correspondent respectivement, à un terme source chimique provenant d'un sous-modèle de combustion de sous-maille prémélangée et non-prémélangée. Une procédure de ce type a déjà été proposée par DOMINGO *et al.* [52]. La prise en compte de ces 2 sous-modèles, dans

1. Idéalement, il serait plus rigoureux d'évaluer  $\vec{\nabla} \tilde{Y}_F \cdot \vec{\nabla} \tilde{Y}_O$ , c'est-à-dire de tenir compte de l'orientation à l'échelle résolue et de sous-maille ( $\vec{\nabla} \tilde{Y}_F \cdot \vec{\nabla} \tilde{Y}_O - \nabla \tilde{Y}_F \cdot \nabla \tilde{Y}_O$ ) qu'il faudrait alors modéliser. Cela compliquerait davantage le problème initial. Cette difficulté a déjà été discutée par DOMINGO *et al.* [52].

la modélisation de la combustion partiellement prémélangée, implique généralement d'introduire 2 variables de modélisation : une variable d'avancement de la réaction  $c$ , pour la partie prémélangée ; et une variable de mélange  $\xi$ , pour la partie non-prémélangée. De plus, si ces deux variables ne sont pas statistiquement indépendantes l'une de l'autre, les équations de transport des moments de sous-maille d'ordre 2 font intervenir les taux de dissipation  $\chi_c, \chi_\xi, \chi_{\xi,c}$ , qui sont respectivement, celui de la variable de progrès, de la fraction de mélange, ainsi que de la corrélation croisée entre ces dernières qu'il est primordial de modéliser [32, 147].

### Modélisation du terme prémélangé de sous-maille $\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs},P}$

Nombreux sont les modèles de combustion prémélangée de sous-maille qui peuvent être utilisés. Cependant, pour notre étude, la prise en compte de ce terme source turbulent prémélangé ne sera pas intégrée dans la modélisation de la configuration de JISCF.

En effet, nous avons vu d'une part, § 7, que la stabilisation de la zone réactive semblait être assurée par le biais des processus d'auto-allumage, plutôt que par ceux de propagation de flamme prémélangée. D'autre part, les zones probables du mode prémélangé, mesurées par la quantité  $P_{\text{PCZ}}$ , sont limitées au maximum à 40 % et en moyenne à 30 %, *i.e.* plus faible que celles associées au mode de diffusion. De plus, il a aussi été vu que les régions présentant les niveaux de dégagement de chaleur les plus importants sont associées à de faibles valeurs du nombre de Damköhler basé sur le mécanisme de propagation  $\text{Da}_{\text{propa}} \lesssim 1$ , ce qui permet l'emploi du modèle PSR. En effet, la combustion a lieu très loin en aval de l'injection, par conséquent, les fluctuations de composition à l'échelle non-résolue sont faibles. Ainsi, le terme source chimique filtré (8.1) tendra naturellement vers une chimie laminaire qui restitue à la fois le mode prémélangé et de diffusion.

On supposera dans ce qui suit que seule la contribution de sous-maille non-prémélangée doit être fermée par un modèle explicite.

### Modélisation du terme non-prémélangé de sous-maille $\tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs},NP}$

La contribution non-prémélangée à l'échelle de sous-maille du terme source chimique, présente dans (8.2) sera modélisée par le modèle de combustion intermittent Lagrangien, MIL (§ 4.6),

$$(4.32) : \quad \tilde{\omega}_\alpha^{\text{sgs},NP} = \tilde{\omega}_\alpha^{\text{MIL}}(\xi)$$

Ce modèle a déjà été largement utilisé dans la littérature pour la modélisation RANS [82, 101, 145], cependant, il semblerait qu'aucune application n'est répertoriée à ce jour pour la modélisation LES, c'est pourquoi, le travail présenté ici peut être considéré comme inédit.

## 8.2 Simulation aux grandes échelles réactive du JISCF basée sur un modèle hybride de combustion turbulente

### 8.2.1 Paramètres de simulation

Une simulation aux grandes échelles réactive a été effectuée avec ce modèle de combustion explicite sur la configuration JISCF dont le domaine et le maillage retenus correspondent au « Mesh 2 » présenté § 5.2.2. Les paramètres de simulation sont pratiquement tous identiques à ceux déjà présentés § 7 pour la simulation basée sur un modèle implicite PSR uniquement. Entre autres, les différences sont les suivantes : (i) la résolution de l'équation de transport pour la variance SGS de la fraction de mélange (6.18) (Modèle I) est utilisée pour estimer la PDF présumée ( $\beta$ -fonction) dans le modèle MIL ; (ii) un nombre de CFL, plus élevé, est ajusté entre 1.2–1.6 (les critères de stabilité diffusive,  $\text{Fo} = 0.9$ , et chimique ne sont jamais limitants) ; (iii) le modèle hybride de combustion turbulente présenté précédemment § 8.1 et pouvant se résumer à

$$\tilde{\omega}_\alpha(\rho, T, \mathbf{Y}) = (1 - S_\xi)\dot{\omega}_\alpha^{\text{PSR}}(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{\mathbf{Y}}) + S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{\text{MIL}} \quad (8.3)$$

Concernant la contribution de sous-maille par le modèle MIL, la pré-tabulation des temps caractéristiques chimiques, comme présenté par IZARD *et al.* [101], MURA et DEMOULIN [145], est remplacée par un calcul analytique de la réactivité  $\lambda$  (D.8) calculée à partir de la composition et de la température locale, *i.e.* en chaque point. Ceci permet une réduction du coût de calcul de près de 14 % d'après les travaux préalables de BRIDEL-BERTOMEU et BOIVIN [33].

Les conditions aux limites restent inchangées (cf. § 5.3) et nous rappellerons principalement que le rapport de flux de quantité de mouvement est  $J = 2.56$  et la richesse globale est  $\Phi = 0.4$ . Ce calcul a été initialisé de la même manière que le calcul précédent, *i.e.*, à partir du calcul inerte où l'écoulement est considéré comme établi à l'issue d'une phase transitoire d'environ  $t \approx 150D/u_\infty \approx 230 \mu\text{s}$ .

Enfin, pour ce calcul réactif, le temps physique simulé est d'environ  $t = 170D/u_\infty = 260 \mu\text{s}$ . Durant ce temps, environ 2250 champs ont été enregistrés avec une fréquence d'acquisition de 8.70 MHz, soit toutes les 0.115  $\mu\text{s}$ , permettant ainsi de capturer la phase transitoire d'auto-allumage et des éventuels mécanismes instationnaires de propagation–diffusion de la flamme. Les calculs de ces statistiques sont encore en cours d'exploitation. Le pas de temps moyen du calcul (CFL limitant) est de l'ordre de 3.9 ns. Enfin, ce calcul a nécessité près de 8 000 000 h scalaire avec 16 384 processus MPI, sur le super-calculateur Turing de l'IDRIS [97].

## 8.2.2 Résultats et éléments de comparaisons avec le modèle PSR

Avant toute chose, il convient de rappeler que les résultats présentés ci-dessous ne fournissent que des comparaisons qualitatives, étant donné qu'aucune mesure expérimentale n'est disponible pour cette géométrie simplifiée. Il s'agit ici de voir dans un premier temps l'influence qualitative de la prise en compte des fluctuations de sous-maille sur le taux de réaction filtré et d'en étudier son influence sur la topologie générale de l'écoulement.

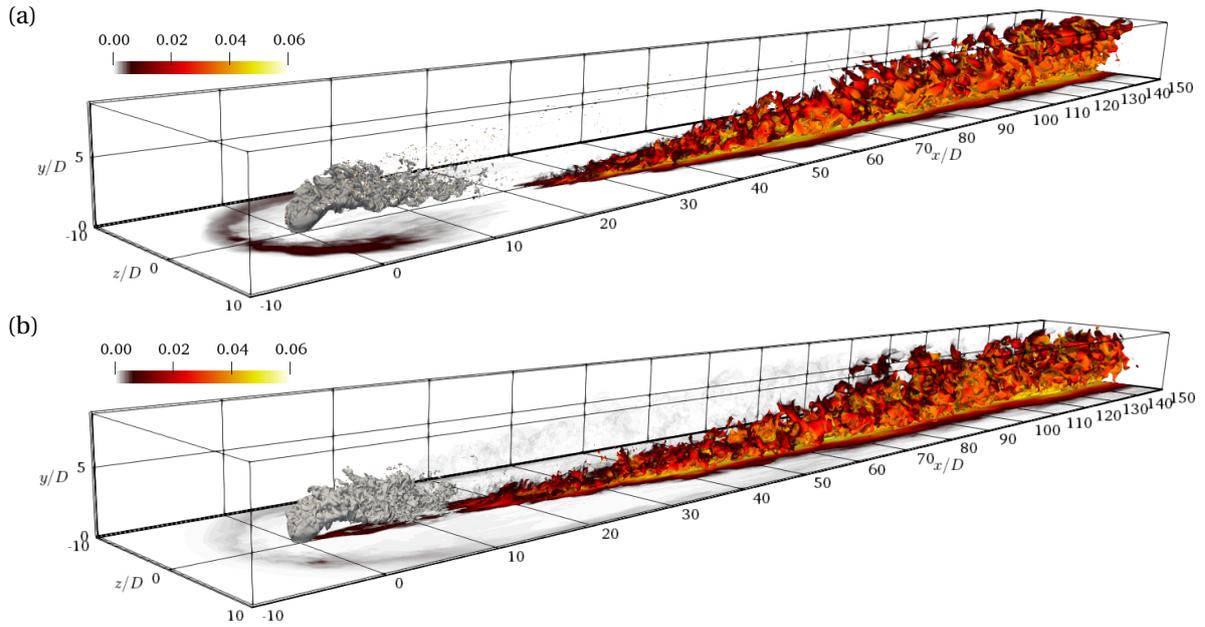
La Fig. 8.1 montre quelques différences notables sur la structure de flamme entre les deux calculs conduits, l'un avec le modèle PSR (Fig. 8.1(a)), l'autre avec le modèle hybride de combustion turbulente (Fig. 8.1(b)). Par rapport au premier cas, le second calcul montre tout d'abord une réduction significative du niveau de production du radical OH au pied du choc courbé, situé en amont de l'injecteur. Par ailleurs, directement en aval de l'injection (du choc en tonneau), la réaction a lieu en proche paroi mais est limitée en hauteur ainsi qu'en largeur, alors que dans le calcul basé sur le modèle PSR, aucune réaction chimique n'a lieu à ce niveau : aucun radical, ni produit de combustion n'est formé. De plus, le sillage en champ proche de l'injection est faiblement réactif, la production du radical OH est minimale mais non nulle comparé au résultat du premier calcul. Enfin, à première vue, en champ lointain, la structure de flamme est sensiblement identique pour ces deux cas de calcul et présente toujours un développement en demi-cône, dont le sommet est situé dans la zone de stabilisation.

Les Figs. 8.2 et 8.3 comparent, sur les différents plans XY médian et XZ parallèle à la paroi (à  $y/D = 0.25$ ), les champs de température, du dégagement de chaleur filtré, de la réactivité, de la fraction massique de OH et HO<sub>2</sub>. Concernant le dégagement de chaleur filtré  $\tilde{\omega}_T$ , celui-ci est évalué, pour le calcul basé sur le modèle hybride (8.3), par

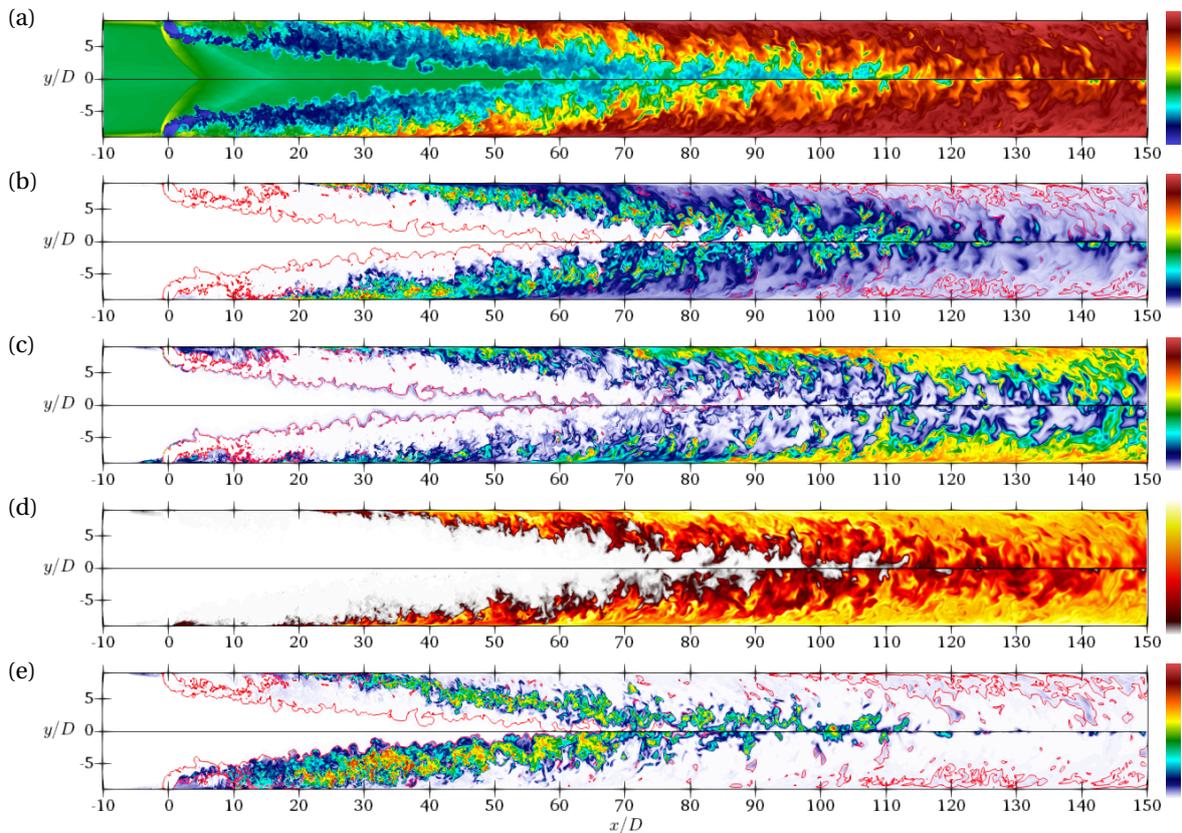
$$\tilde{\omega}_T(\rho, T, \mathbf{Y}) = (1 - S_\xi)\tilde{\omega}_T^{\text{PSR}}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{\mathbf{Y}}) + S_\xi\tilde{\omega}_T^{\text{MIL}} \quad (8.4)$$

Ce dernier ne sera comparé qu'à la partie résolue  $\tilde{\omega}_T(\rho, T, \mathbf{Y}) = \tilde{\omega}_T^{\text{PSR}}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \tilde{\mathbf{Y}})$ , dans le calcul mené avec le modèle PSR, Fig. 8.2(b) et Fig. 8.3(b).

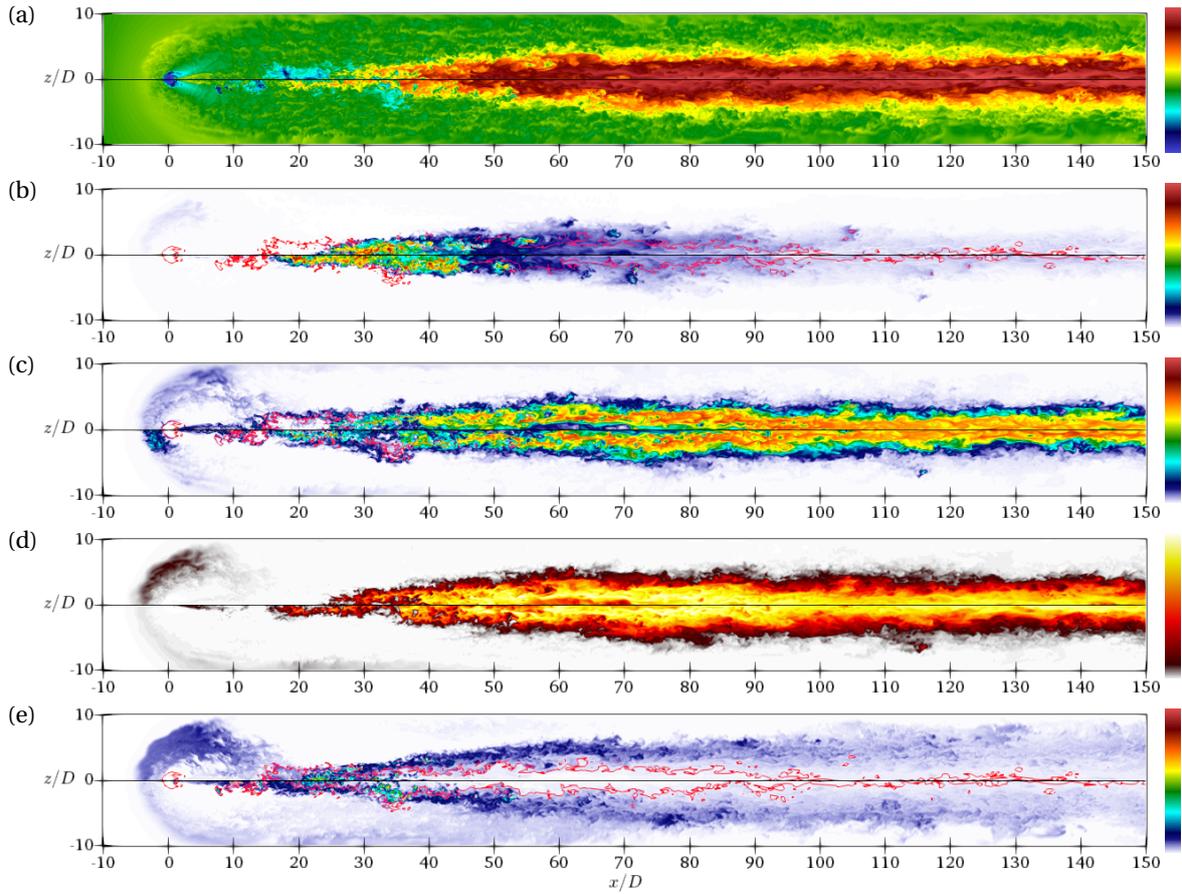
Pour ce dernier calcul, nous voyons que la stabilisation de la zone réactive a lieu relativement proche de l'injection, en aval de celle-ci et en proche paroi. Par ailleurs, les champs de dégagement de chaleur ainsi que ceux de la température, Fig. 8.2(a,b), montrent relativement bien un élargissement de la zone réactive engendrant une expansion des gaz plus importante. Bien que, le dégagement de



**FIG. 8.1** – Comparaison de la structure de flamme instantanée à  $t^* = 170$  entre (a) le modèle PSR et (b) le modèle hybride de combustion turbulente. Visualisation de l'iso-surface de la fraction de mélange stoechiométrique  $\tilde{\xi}_{st}$  colorée par la fraction molaire  $X_{OH}$  ainsi que le champ pariétal de ce dernier. L'iso-surface à  $\tilde{\xi} = 0.5$  est représentée en gris.



**FIG. 8.2** – Comparaison des champs instantanés à  $t^* = 170$  sur le plan XY médian, à  $z/D = 0$  de (a) la température  $\tilde{T}/T_\infty$  [0.04, 2.5]; (b) du taux de dégagement de chaleur  $\tilde{w}_T$  [0,  $1.6 \times 10^{11}$ ] W/kg; (c) la réactivité  $\lambda$  [0,  $10^6$ ]  $s^{-1}$ ; (d) la fraction massique de  $Y_{OH}$  [0, 0.04]; (e) la fraction massique  $10^3 \times \tilde{Y}_{HO_2}$  [0, 0.953]. L'iso-ligne rouge correspond à  $\tilde{\xi}_{st} = 0.03$ . En haut : modèle PSR; en bas : modèle hybride



**FIG. 8.3** – Comparaison des champs instantanés à  $t^* = 170$  sur le plan XZ parallèle à la paroi, à  $y/D = 0.25$  de (a) la température  $\tilde{T}/T_\infty$   $[0.04, 2.5]$ ; (b) du taux de dégagement de chaleur  $\tilde{\omega}_T$   $[0, 1.6 \times 10^{11}]$  W/kg; (c) la réactivité  $\lambda$   $[0, 10^6]$   $s^{-1}$ ; (d) la fraction massique de  $Y_{OH}$   $[0, 0.04]$ ; (e) la fraction massique  $10^3 \times \tilde{Y}_{HO_2}$   $[0, 0.953]$ . L'iso-ligne rouge correspond à  $\xi_{st} = 0.03$ . En haut : modèle PSR; en bas : modèle hybride

chaleur filtré évalué par (8.4) soit du même ordre de grandeur que celui évalué uniquement à partir des grandeurs résolues (1<sup>er</sup> calcul), l'apport de la contribution SGS semble être suffisant pour créer une expansion des gaz plus importante et une stabilisation de la réaction plus en amont.

Sur le plan XY, Fig. 8.2(c), la zone de forte réactivité  $\lambda$  semble être moins étendue (suivant la direction  $y$ ) en champ lointain. Cependant, il est remarquable de noter que sur la Fig. 8.3(c), elle est plus importante directement en amont de l'injection sur le dernier calcul. Par conséquent, le délai d'auto-allumage est plus faible que dans le premier cas, et pourrait potentiellement conduire à l'allumage du mélange dans cette zone. Néanmoins, comme discuté précédemment, cette zone de recirculation se traduit par une forte ségrégation  $S_\xi$  du scalaire et ne favorise donc pas l'auto-allumage du mélange à ce niveau. En effet, elle aura pour action de diminuer la contribution du terme source chimique résolu  $(1 - S_\xi)\tilde{\omega}_\alpha^{PSR}$  comme le montre la Fig. 8.3(b) sur le taux de dégagement de chaleur filtré, alors que la contribution de sous-maille  $\tilde{\omega}_\alpha^{MIL}$  est quasi-nulle du fait de la forte ségrégation et de la présence quasi-inexistante du réactif  $H_2$ . En effet, bien que le modèle MIL repose sur un comportement de type PaSR, il s'appuie aussi sur l'emploi d'une fraction de mélange et lorsque celle-ci reste homogène et nulle, aucune réaction chimique n'est possible. Ceci constitue aussi probablement une limite pour les modèles de flammelettes de diffusion, qui dans leur formulation classique ne peuvent pas restituer les mécanismes de dissociation à haute température des espèces telles que la vapeur d'eau  $H_2O$  présente dans l'air vicié. Finalement, cela explique aussi la diminution de la concentration en radical

OH dans le pied du choc courbé. Par ailleurs, la diminution du dégagement de chaleur en amont de l'injection, montre que la réaction est moins importante et donc que la concentration en oxygène est plus grande, ce qui explique probablement l'augmentation de la réactivité  $\lambda$ .

Enfin, les différences les plus frappantes apparaissent sur le champ de la fraction massique du radical HO<sub>2</sub>. En effet, dans ce dernier cas de calcul, une quantité relativement faible est produite directement en aval de l'injection, juste après le choc en tonneau (Fig. 8.2(e)), cette zone de production semble être restreinte en largeur, dans le sillage du choc en tonneau (Fig. 8.3(e)). Ensuite, une quantité très importante commence à être produite entre  $x/D = 10-15$  en proche paroi mais aussi dans le sillage même du jet, comme le montre la Fig. 8.2(e), dans la zone délimitée par l'iso-contour à  $\xi_{st}$ . Ceci est à l'origine de la stabilisation prématurée de la zone réactive en aval de l'injection, à environ  $x/D = 15$  comparé à  $x/D = 25$  pour le premier calcul. Une dernière différence notable semble apparaître sur la Fig. 8.3(e), où ce même radical est produit en quantités relativement faibles, mais non nulles, dans le sillage du choc courbé (*bow shock*) et en proche paroi. Ainsi, de part et d'autre du sillage du jet, ce précurseur de l'auto-allumage est présent et pourrait potentiellement provoquer l'auto-allumage du mélange. Cependant, les conditions ne semblent pas être favorables pour que cela ait lieu, en particulier, la réactivité  $\lambda$  est nulle dans cette zone et donc l'auto-allumage dans le sillage du choc courbé est peu probable.

Finalement, les différences les plus significatives n'apparaissent qu'en champ proche de l'injection, là où finalement, les fluctuations de sous-maille du champ scalaire sont non négligeables et conduisent à (i) diminuer en partie la contribution résolue  $(1 - S_\xi)\dot{\omega}_\alpha^{PSR}$  et (ii) augmenter la partie non-résolue (fluctuation SGS)  $S_\xi\tilde{\omega}_\alpha^{MIL}$  du taux de réaction filtré. C'est pourquoi, en s'éloignant de l'injection, lorsque les fluctuations de composition diminuent, le mélange en sous-maille s'homogénéise, la ségrégation est telle que  $S_\xi \rightarrow 0$  et seul le taux de réaction à l'échelle résolue contribue à la conversion des réactifs en produits de combustion : le comportement chimique tend à être quasi-laminaire et aucune différence notable n'apparaît plus en champ lointain entre les deux calculs.

### 8.3 Conclusions générales

Les études effectuées durant cette thèse ont porté principalement sur des simulations aux grandes échelles ou LES (*Large-Eddy Simulation*) inertes et réactives, implicite et explicite, d'un jet pariétal d'hydrogène dans un écoulement transverse supersonique d'air vicié, JISCF (*Jet In Supersonic Cross-Flow*). Cette configuration est représentative des conditions d'écoulement rencontrées dans les moteurs aérobies de type super-statoréacteurs (*scramjets*) où la combustion a lieu dans des régimes d'écoulement supersonique.

Pour cela le code de calcul de *haute précision CREAMS (Compressible REActive Multi-species Solver)*, qui a été initialement développé au sein de l'Institut Pprime [38, 130] pour réaliser des simulations numériques directes (DNS) d'écoulements compressibles réactifs a été doté de modélisations pour les termes de sous-maille nécessaires pour la réalisation de simulations aux grandes échelles explicites. Dans ce but, différents modèles de viscosité de sous-maille (SGS) ainsi que différentes équations de transport pour la variance scalaire de sous-maille et pour l'énergie totale, ont été implémentées et vérifiées. Pour la partie réactive, les différents mécanismes cinétiques réduits H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>, développés par BOIVIN *et al.* [17, 19, 20] ont aussi été implémentés et validés dans notre code de calcul. Enfin, le modèle hybride de combustion turbulente proposé dans cette dernière partie du manuscrit a également été testé.

Les simulations inertes ont permis de caractériser l'importance des interactions choc/turbulence ainsi que le rôle des structures tourbillonnaires fortement tridimensionnelles dans le mécanisme d'entraînement et de mélange turbulent du combustible en aval de l'injection. Ce mécanisme est

extrêmement important et va conditionner la structure de l'écoulement réactif. En effet, du combustible froid est entraîné par les structures cohérentes jusqu'à la paroi et le frottement pariétal augmente significativement par effet visqueux la température en aval de l'injection. Les cartographies de température et de composition vont jouer un rôle déterminant dans la structuration des zones réactives car l'auto-allumage et la stabilisation de la flamme ont lieu en proche paroi. Cela ouvre une question cruciale sur le choix de la physique de paroi considérée et modélisée. Par ailleurs, compte tenu des résultats disponibles dans la littérature, il paraît évident que l'effet de confinement va jouer un rôle important dans la structuration de l'écoulement. En effet, le confinement va engendrer une structure de choc complexe, s'apparentant à un train de choc, qui va augmenter de manière considérable les interactions choc/turbulence/couche-limite, s'écartant ainsi des cas académiques plus classiques d'interaction choc/turbulence ou choc/couche-limite.

En particulier, nous nous sommes concentrés sur la description des fluctuations de composition à l'échelle non-résolue (*i.e.* sous-maille) par le biais de la modélisation de la variance scalaire SGS. Une étude de sensibilité au modèle de viscosité SGS ainsi qu'à différentes modélisations de la variance SGS a été réalisée. Les principaux résultats de cette analyse détaillée suggèrent l'utilisation d'une équation de transport, écrite pour la variance SGS, car (i) elle est la seule modélisation, parmi celles proposées, à avoir un comportement asymptotique cohérent avec la limite DNS; (ii) elle semble, par sa nature, réalisable en tout point et ne conduit pas à des niveaux de variance négatifs ou supérieurs à la variance maximale théorique et (iii) elle introduit des erreurs de troncature moins importantes.

Compte tenu de leurs niveaux de résolution, les simulations réactives ont permis une analyse détaillée de la structure de flamme, du mode de stabilisation et des régimes de combustion turbulente rencontrés dans cette configuration représentative des *scramjets*. Cette dernière étude a ainsi apporté des informations très précieuses sur l'orientation des choix et des stratégies de modélisation pour ce type de conditions extrêmes.

Les principaux résultats ont permis d'établir une estimation du temps et de la position de la zone d'auto-allumage du mélange à l'aide du temps caractéristique du mécanisme de branchement pour lequel la 2<sup>e</sup> limite d'explosion est atteinte, via la réactivité  $\lambda$ , qui est inversement proportionnelle au délai d'auto-allumage. Ces estimations ont été réalisées à partir (i) d'un calcul préliminaire 0D de réacteur parfaitement mélangé et (ii) de la cartographie de cette grandeur caractéristique calculée à partir de l'écoulement non-réactif. Par ailleurs, la dynamique de l'écoulement réactif a montré une forte instationnarité de l'écoulement, notamment entre le moment où il s'auto-allume en proche paroi, dans la couche limite, et le moment où la zone réactive se stabilise dans une région donnée de l'écoulement. Durant ce temps, la zone réactive s'étend, oscille et remonte progressivement vers l'écoulement amont. Cette structure de flamme est très particulière et n'est pas retrouvée par tous les auteurs étudiant une configuration similaire. Elle est fortement dépendante d'une part du rapport de flux de quantité de mouvement  $J$ , qui peut être relié à la richesse globale  $\Phi$ , mais est certainement encore plus dépendante de la physique de paroi retenue pour le problème (adiabatique, isotherme, rugosité, ...) étant donné que les zones les plus réactives sont localisées en proche paroi. De plus, le confinement semble aussi avoir une importance cruciale dans la topologie de l'écoulement réactif car il induit des effets de compressibilité non négligeables via les réflexions de choc se développant dans la chambre de combustion.

Enfin, une étude approfondie sur les régimes de combustion turbulente a été réalisée, en comparant notamment les principaux mécanismes de stabilisation de la flamme pouvant entrer en compétition (propagation et auto-allumage). Pour cela, différents nombres de Damköhler ont été introduits, ces derniers sont basés sur les temps caractéristiques des mécanismes de propagation, d'auto-allumage, mais aussi de production de la vapeur d'eau  $H_2O$ . Les résultats ont mis en évidence les effets d'une chimie finie dans ces conditions représentatives des *scramjets*. Elle se traduit par des mécanismes physico-chimiques interdépendants et entrant en compétition les uns avec les autres, ces processus sont d'une part ceux de l'écoulement (mélange à grande et petite échelle) et, d'autre part, ceux de la chimie (propagation, diffusion, auto-allumage, etc.). Elle exclut ainsi, dans ces conditions,

les hypothèses de chimie infiniment rapide, telles que celles utilisées dans les modélisations de type flammelette qui, dans leurs formulations standards, ne semblent pas pouvoir rendre compte des effets de chimie hors équilibre, tels que la dissociation à haute température.

## 8.4 Perspectives générales

Les perspectives spécifiques associées à l'étude de cette configuration de jet pariétal en écoulement supersonique sont nombreuses, il serait intéressant d'effectuer des études complémentaires sur les points suivants.

- Étudier l'influence de la nature de l'écoulement amont (laminaire / turbulent) dans le cas réactif. En effet, la structure de flamme en proche paroi est susceptible de dépendre de (i) la nature de la couche limite de l'écoulement amont et (ii) du rapport de flux de quantité de mouvement  $J$ . Ce dernier paramètre va piloter l'intensité du blocage et du choc courbé induit qui, à son tour, va définir le niveau de mélange entre l'oxydant et le combustible dans la zone de recirculation amont et au pied du choc courbé dans la direction transverse (suivant  $z$ ). Par conséquent, ce paramètre joue certainement un rôle dans le mécanisme de stabilisation de la flamme.
- À cet égard, la largeur du domaine (suivant  $z$ ) est aussi probablement à prendre en compte, tout comme son niveau de résolution. Ce dernier va permettre (ou non), le développement d'un choc courbé qui peut initier la réaction et même la stabiliser dans la zone de recirculation amont formée par la structure de choc en «  $\lambda$  ».
- À ce dernier point s'ajoute l'effet d'un (pseudo-)confinement (symétrie, périodicité, paroi adhérente) car, dans le cas où le domaine est restreint, le développement du choc courbé sera alors perturbé et va se réfléchir si les conditions aux limites, dans les directions normale et latérale, rendent compte d'un (pseudo-)confinement. En effet, suivant les dimensions du domaine (largeur, hauteur), les cellules de chocs réfléchis seront différentes et peuvent donc favoriser l'allumage dans certaines régions.
- Enfin, l'influence de la physique de paroi (isotherme, adiabatique, rugosité, ...) va certainement aussi jouer un rôle capital sur la structure de flamme en proche paroi, étant donné que la combustion et les zones de fort dégagement de chaleur se situent au niveau de la paroi. Elle soulève un problème de modélisation important, à savoir, quelle physique de paroi faut-il retenir afin d'avoir des conditions aussi représentatives que possible des écoulements rencontrés dans les *sramjets*?
- Une analyse dynamique fréquentielle via des spectres et des corrélations en deux points (inter-corrélations) serait intéressante à conduire en différents points du jet. Cela permettrait de voir les niveaux de corrélation des structures cohérentes se développant à grandes échelles dans le sillage du jet, la zone de recirculation ou en proche paroi et pourrait mettre en évidence des fréquences ou longueurs d'onde caractéristiques associées au mécanisme d'entraînement du combustible.

Finalement, la plupart de ces perspectives touchent aux effets potentiels des changements de condition aux limites pour lesquelles il semblerait que la littérature n'a pas encore permis d'aboutir à des conclusions définitives. D'autre part, les simulations effectuées constituent une base de donnée importante mise à disposition de la communauté. Elle pourrait notamment permettre d'étudier par exemple : les interactions entre la combustion et la couche-limite / paroi ou la dynamique de l'écoulement réactif en champ lointain.

Les études effectuées sur la théorie du mélange scalaire et de la combustion ont par ailleurs soulevé d'autres problématiques et perspectives de recherche.

- Les erreurs de troncature associées à l'évaluation du scalaire filtré au carré ont mis en lumière un problème plus général et potentiellement troublant. Quelle est finalement l'erreur qui est commise lorsqu'on estime le carré d'une grandeur quelconque (scalaire ou vectorielle) ?

- Concernant la modélisation de l'interaction chimie–turbulence de sous-maille, le modèle proposé dans cette dernière partie aurait mérité d'être étudié dans des situations simples, afin de vérifier et valider le modèle. Une telle formulation est très attractive car la littérature ne semble pas apporter de solution spécifique à la modélisation de la combustion partiellement prémélangée; elle se contente souvent de fournir un modèle de combustion prémélangé ou non-prémélangé suivant la configuration d'injection du combustible et de l'oxydant. Enfin, il serait bien sûr intéressant de réaliser des simulations complémentaires avec un ou plusieurs autres modèles de combustion turbulente, tels que les modèles PaSR et UPaSR qui sont utilisés en LES de la combustion supersonique.

À moyen terme, il semble essentiel de poursuivre le travail de développement qui a été réalisé sur le code de calcul *CREAMS* en y implémentant des modèles de parois, des modèles de viscosité SGS plus récents mais aussi d'autres modèles de combustion turbulente explicite. Ceci permettrait de diminuer considérablement le coût de calcul d'une telle configuration. En effet, la résolution explicite de la combustion ou de l'écoulement, se développant au voisinage d'une paroi, rend prohibée la simulation de configurations pratiques telle que celle étudiée expérimentalement à l'ONERA et incluant les effets de confinement ainsi que la seconde injection. Des développements sont actuellement en cours, dans le cadre de deux autres thèses, afin d'atteindre cet objectif et ainsi permettre la prise en compte de géométries plus complexes par la méthode de frontières immergées (IBM), l'injection de fluctuations de vitesse et scalaire en entrée du domaine de calcul et enfin l'utilisation d'autres modèles de combustion turbulente explicite de sous-maille.

## Annexe A

# Tables thermodynamiques

Les tables thermodynamiques au format international fournissent les coefficients d'interpolation qui permettent de calculer les enthalpies molaires, les capacités calorifiques molaires à pression constante ainsi que les entropies molaires de chaque espèce  $\alpha$  grâce aux fonctions d'interpolations suivantes

$$\frac{\widehat{C}_{p,\alpha}(T)}{R} = a_{1\alpha} + a_{2\alpha}T + a_{3\alpha}T^2 + a_{4\alpha}T^3 + a_{5\alpha}T^4 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\widehat{H}_\alpha(T)}{R} = a_{1\alpha}T + a_{2\alpha}\frac{T^2}{2} + a_{3\alpha}\frac{T^3}{3} + a_{4\alpha}\frac{T^4}{4} + a_{5\alpha}\frac{T^5}{5} + a_{6\alpha} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\widehat{S}_\alpha(T, p_0)}{R} = a_{1\alpha}\ln T + a_{2\alpha}T + a_{3\alpha}\frac{T^2}{2} + a_{4\alpha}\frac{T^3}{3} + a_{5\alpha}\frac{T^4}{4} + a_{7\alpha} \quad (\text{A.3})$$

où  $R$  est la constante des gaz parfaits. Ces dernières sont issues de mesures expérimentales obtenues à la pression standard  $p_0 = 1 \text{ atm}$ <sup>1</sup>.

Les principales tables thermodynamiques existantes sont celles de :

- NASA Glenn, construites par Gordon et McBride du NASA Lewis Research Center ;
- JANAF [188], utilisées par le logiciel *CHEMKIN* du laboratoire SANDIA ;
- BURCAT, construites, mises à jour et distribuées par Burcat.

Elles ont généralement la forme standard suivante :

$M_\alpha$	...	$T_{\min}$	$T_{\max}$	$T_{\text{inter}}$
$a_{1\alpha}^+$	$a_{2\alpha}^+$	$a_{3\alpha}^+$	$a_{4\alpha}^+$	$a_{5\alpha}^+$
$a_{6\alpha}^+$	$a_{7\alpha}^+$	$a_{1\alpha}^-$	$a_{2\alpha}^-$	$a_{3\alpha}^-$
$a_{4\alpha}^-$	$a_{5\alpha}^-$	$a_{6\alpha}^-$	$a_{7\alpha}^-$	XX

La première ligne contient habituellement l'espèce chimique  $M_\alpha$  ainsi que les intervalles de température dans lesquelles ont été établies ces fonctions d'interpolations. On distingue deux intervalles : un intervalle pour les hautes températures comprises entre  $[T_{\text{inter}}, T_{\max}]$  et associé aux coefficients  $a_{l\alpha}^+$  avec  $l \in \llbracket 1, 7 \rrbracket$  ; un autre intervalle pour les basses températures entre  $[T_{\min}, T_{\text{inter}}]$  et associé aux coefficients  $a_{l\alpha}^-$ . Les bornes de température s'étendent essentiellement entre 300 K et 5000 K. Malheureusement, dans certains cas, il arrive que le gaz se détende à des températures inférieures à 300 K, notamment s'il est injecté à une température initialement basse. C'est pourquoi, au-delà de ces bornes, certains auteurs extrapolent linéairement ces polynômes.

Pour les tables NASA Glenn, la coupure de la température intermédiaire est  $T_{\text{inter}} = 1000 \text{ K}$ , de sorte que sur le dernier élément de la première ligne,  $T_{\text{inter}}$  est remplacée par la masse molaire de l'espèce  $W_\alpha$ .

1. L'hypothèse de gaz parfait implique que l'énergie interne et l'enthalpie ne dépendent que de la température. Par sa définition, la chaleur spécifique ne dépend aussi que de la température, c'est pourquoi la dépendance à la pression a été omise dans (A.1) et (A.2)

Dans le cas où l'élément « XX » serait présent en fin de table (cas de NASA Glenn et BURCAT), ce dernier correspond à la valeur exacte (non interpolée) du rapport entre l'enthalpie standard molaire de formation et la constante des gaz parfaits, soit  $XX = \Delta \hat{H}_{f,\alpha}^0 / R$ . Sinon (table de JANAF), ce dernier est obtenu grâce aux coefficients d'interpolation polynomiale à la température standard<sup>2</sup>  $T_0 = 298$  K.

Finalement, les enthalpies et chaleurs spécifiques de chaque espèce sont obtenues par les relations

$$(2.16) \implies h_\alpha(T) = \Delta h_{f,\alpha}^0 + \int_{T_0}^T c_{p,\alpha}(\theta) d\theta = \frac{\hat{H}_\alpha(T)}{W_\alpha} \quad (\text{A.4})$$

$$(2.17) \implies c_{p,\alpha}(T) = \frac{\hat{C}_{p,\alpha}(T)}{W_\alpha} \quad (\text{A.5})$$

**Artifice numérique** L'utilisation des fonctions puissances étant numériquement coûteuse, certains auteurs préfèrent utiliser : soit une tabulation de ces grandeurs pour une large gamme de température (par exemple : 0 à 5000 K par pas de 100 K) ; soit une forme factorisée par  $T$  telle que proposée par NIEMEYER *et al.* [151]

$$\frac{\hat{C}_{p,\alpha}(T)}{R} = a_{1\alpha} + T(a_{2\alpha} + T(a_{3\alpha} + T(a_{4\alpha} + a_{5\alpha}T))), \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\hat{H}_\alpha(T)}{R} = T \left( a_{1\alpha} + T \left( a_{2\alpha} \frac{1}{2} + T \left( a_{3\alpha} \frac{1}{3} + T \left( a_{4\alpha} \frac{1}{4} + a_{5\alpha} \frac{T}{5} \right) \right) \right) \right) + a_{6\alpha}, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\hat{S}_\alpha(T, p_0)}{R} = a_{1\alpha} \ln T + T \left( a_{2\alpha} + T \left( a_{3\alpha} \frac{1}{2} + T \left( a_{4\alpha} \frac{1}{3} + a_{5\alpha} \frac{1}{4} \right) \right) \right) + a_{7\alpha}. \quad (\text{A.8})$$

2. Le choix de cette température standard est arbitraire, il serait plus judicieux en réalité de prendre  $T_0 = 0$  K, comme le préconise REYNOLDS et PERKINS [174]. Cependant, obtenir des résultats expérimentaux dans ces conditions est loin d'être aisé.

## Annexe B

# Systèmes pour l'équation de l'énergie totale filtrée

Le développement de l'équation pour l'énergie totale filtrée dans le cadre des écoulements compressibles étant relativement récent (fin du 20<sup>e</sup> siècle) ; l'adaptation au cas multi-espèces et compressible n'est généralement qu'une application des expressions établies pour *des gaz diatomiques idéaux — tels que l'air — et supposés calorifiquement parfaits*.

Il existe en réalité dans la littérature une multitude de formulation pour l'équation de l'énergie totale filtrée. Ces différents systèmes sont établis à partir d'un jeu initial d'expressions pour : l'énergie totale, la loi d'état, la pression et la température. Ces dernières vont faire intervenir, ou non, un terme non-résolu qui peut être interprété soit comme une énergie cinétique turbulente en sous-maille, soit comme une pression de sous-maille et / ou une température de sous-maille (cf. 2<sup>e</sup> ligne du Tab. B.1) ; dans ces deux derniers cas, on parlera de *macro-pression* et de *macro-température*, respectivement [120].

À partir de ces différentes formulations, plusieurs équations de bilan pour l'énergie totale filtrée peuvent être établies (cf. 3<sup>e</sup> ligne du Tab. B.1). Elles impliquent un nombre important de termes de sous-maille qui peuvent se retrouver de façon analogue d'une formulation à une autre (cf. 4<sup>e</sup> ligne du Tab. B.1).

La littérature actuelle compte assez peu d'analyses a priori des poids et contributions de chacun des termes de sous-maille qui apparaissent dans les équations de Navier–Stokes filtrées et notamment celle pour l'énergie totale filtrée. VREMAN *et al.* [204], VREMAN [205] analysent des résultats filtrés a priori de calculs DNS 2D de couches de mélange compressibles pour différentes valeurs du Mach convectif. Ensuite, ils comparent le poids de chacun des termes SGS des Systèmes B = “II” et D = “I” présentés dans le Tab. B.1 et effectuent une classification de chacune des contributions via une évaluation d'ordre de grandeur basée sur l'estimation de la norme  $L_2$ . MARTÍN *et al.* [129] analysent de la même façon le système développé initialement par RAGAB *et al.* [171], noté Système A, sur un calcul DNS 3D d'une dégénérescence de THI. La classification de chacun de ces termes SGS pour les Systèmes A, B et D est synthétisée dans le Tab. B.2. Pour d'autres analyses 3D, le lecteur pourra se référer à BRANDT [29], PARK *et al.* [152].

	Système A [55, 113, 158, 171] ( $\bar{e}_t, \bar{p}, \tilde{T}$ )	Système B = "II" [204] ( $\bar{e}_t, \hat{p}, \hat{T}$ )	Système C [118] ( $\bar{e}_t, \bar{\mathcal{P}}, \hat{T}$ )	Système D = "I" [205] ( $\bar{e}_t, \bar{p}, \tilde{T}$ )
Énergie totale	$\bar{\rho} \bar{e}_t = \frac{\bar{p}}{\gamma-1} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i + \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$	$\bar{\rho} \bar{e}_t = \frac{\hat{p}}{\gamma-1} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$	$\bar{\rho} \bar{e}_t = \bar{p} c_v \hat{T} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$	$\bar{\rho} \bar{e}_t = \frac{\bar{p}}{\gamma-1} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$
Loi d'état	$\bar{p} = \bar{\rho} r \tilde{T}$	$\hat{p} = \bar{\rho} r \hat{T}$	$\bar{\mathcal{P}} = \bar{\rho} r \hat{T} - \frac{3\gamma-5}{6} \tau_{kk}^{sgs}$	$\bar{p} = \bar{\rho} r \tilde{T}$
Pression	$\bar{p}$	$\hat{p} = \bar{p} + \frac{\gamma-1}{2} \tau_{kk}^{sgs}$	$\bar{\mathcal{P}} = \bar{p} + \frac{1}{3} \tau_{kk}^{sgs}$ (macro-pressure)	$\bar{p}$
Température	$\tilde{T}$	$\hat{T} = \tilde{T} + \frac{1}{2c_v \bar{\rho}} \tau_{kk}^{sgs}$ (macro-temp.)	$\hat{T} = \tilde{T} + \frac{1}{2c_v \bar{\rho}} \tau_{kk}^{sgs}$ (macro-temp.)	$\tilde{T}$
Équation de l'énergie totale filtrée	$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \hat{\mathcal{P}}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} =$ $-(B_1 + B_2 + B_3) + (B_4 + B_5 + B_6) - B_7$	$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \hat{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} =$ $-(B_1 + B_2 + B_3) + (B_4 + B_5 + B_6) - B_7$	$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{\mathcal{P}}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} =$ $-(B_1 + B_2 + B_3) + (B_4 + B_5 + B_6) - B_7$	$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial x_j}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - \frac{\partial \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} =$ $-(B_1 + B_2 + B_3) + (B_4 + B_5 + B_6) - B_7$
Explication des termes résolus et de sous-maillages	<ul style="list-style-type: none"> <li>◦ <math>\tilde{t}_{ij} = 2\mu(\tilde{T}) \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right)</math></li> <li>◦ <math>\hat{q}_j = -\lambda(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>\mathcal{Q}_j^A = (\rho e_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{p}) \tilde{u}_j = c_p \theta_j^{sgs} + \psi_j - \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_j</math> <math>= c_p \theta_j^{sgs} + \psi_j - \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_j</math> (1)</li> <li>◦ <math>\theta_j^{sgs} = \overline{\rho u_j \tilde{T}} - \bar{\rho} \tilde{T}</math> (2)</li> <li>◦ <math>\psi_j = \frac{1}{2} (\overline{\rho u_k u_k u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_k \tilde{u}_j)</math></li> <li>◦ <math>B_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u_j} - \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i) = \frac{\partial \mathcal{D}_j^{sgs}}{\partial x_j}</math> (3)</li> <li>◦ <math>B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j - \hat{q}_j)</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>◦ <math>\tilde{t}_{ij} = 2\mu(\hat{T}) \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right)</math></li> <li>◦ <math>\hat{q}_j = -\lambda(\hat{T}) \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>\mathcal{Q}_j^B = (\rho e_t + \bar{p}) \tilde{u}_j - (\bar{\rho} \tilde{e}_t + \bar{\mathcal{P}}) \tilde{u}_j = c_p \theta_j^{sgs} + \psi_j - \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_j</math> <math>= c_p \theta_j^{sgs} + \psi_j - \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_j</math></li> <li>◦ <math>D_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u_j} - \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i)</math></li> <li>◦ <math>D_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j - \hat{q}_j)</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>◦ <math>\tilde{t}_{ij} = 2\mu(\tilde{T}) \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right)</math></li> <li>◦ <math>\hat{q}_j = -\lambda(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_1 = \frac{1}{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{p} \tilde{u}_j - \bar{p} \tilde{u}_j) = \frac{\partial c_v \theta_j^{sgs}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_2 = \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \Pi_{dil}^{sgs}</math> (4)</li> <li>◦ <math>B_3 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}^{sgs} \tilde{u}_i)</math></li> <li>◦ <math>B_4 = \tau_{ij}^{sgs} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_5 = \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \tilde{t}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \epsilon_v^{sgs}</math> (5)</li> <li>◦ <math>B_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u_j} - \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i) = \frac{\partial \mathcal{D}_j^{sgs}}{\partial x_j}</math> (3)</li> <li>◦ <math>B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j - \hat{q}_j)</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>◦ <math>\tilde{t}_{ij} = 2\mu(\tilde{T}) \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right)</math></li> <li>◦ <math>\hat{q}_j = -\lambda(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_1 = \frac{1}{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{p} \tilde{u}_j - \bar{p} \tilde{u}_j) = \frac{\partial c_v \theta_j^{sgs}}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_2 = \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \Pi_{dil}^{sgs}</math> (4)</li> <li>◦ <math>B_3 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}^{sgs} \tilde{u}_i)</math></li> <li>◦ <math>B_4 = \tau_{ij}^{sgs} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}</math></li> <li>◦ <math>B_5 = \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \tilde{t}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \epsilon_v^{sgs}</math> (5)</li> <li>◦ <math>B_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u_j} - \tilde{t}_{ij} \tilde{u}_i) = \frac{\partial \mathcal{D}_j^{sgs}}{\partial x_j}</math> (3)</li> <li>◦ <math>B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j - \hat{q}_j)</math></li> </ul>

(0) Les termes  $B_1, \dots, B_7$  ainsi que  $D_3, D_6, D_7$  ne présentent pas d'indice "j" car ce sont des scalaires indépendants de cet indice muet. (1)  $\psi_j - \frac{1}{2} \tau_{kk}^{sgs} \tilde{u}_j$  est la diffusion turbulente SGS. (2)  $\theta_j^{sgs}$  est le flux de température SGS. (3)  $\mathcal{D}_j^{sgs}$  est la diffusion visqueuse SGS. (4)  $\Pi_{dil}^{sgs}$  est la pression-dilatation SGS. (5)  $\epsilon_v^{sgs}$  est le taux de dissipation visqueuse SGS.

**TAB. B.1** – Systèmes possibles pour l'équation de l'énergie totale filtrée pour un gaz calorifiquement parfait. Les termes en gras permettent de mettre en évidence les modifications apportées à la formulation de l'énergie totale, la loi d'état, la pression et / ou la température, avec l'introduction d'un terme de sous-maillage.

Importance	Système A	Système D = "I"	Système B = "II"
Grande	$\partial_j((\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{p})\tilde{u}_j)$	$\partial_j((\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{p})\tilde{u}_j)$	$\partial_j((\bar{\rho}\tilde{e}_t + \dot{P})\tilde{u}_j)$
Moyenne	$\partial_j(\check{\tau}_{ij}\tilde{u}_i), \partial_j\mathcal{D}_j^A$	$\partial_j(\check{\tau}_{ij}\tilde{u}_i), \partial_j\check{q}_j, B_1, B_2, B_3$	$\partial_j(\check{\tau}_{ij}\tilde{u}_i), \partial_j\check{q}_j, \partial_j\mathcal{D}_j^B$
Faible	$B_5$	$B_4, B_5$	$D_3, D_6, D_7$
Négligeable	$B_2, B_6, B_7^{(1)}$	$B_6, B_7$	

<sup>(1)</sup> En réalité, MARTÍN *et al.* [129] n'ont pas quantifié le flux  $B_7$  mais l'ont directement négligé dans leur équation.

**TAB. B.2** – Classification des différents flux de l'équation de l'énergie totale filtrée pour les systèmes de Ragab et Sreedhar (Système A) et ceux de Vreman (Systèmes D = "I" et B = "II") (adapté de [74, 129, 204]).

Les deux études montrent finalement qu'on peut négliger les parties de sous-maille des flux diffusifs moléculaires dans l'équation de quantité de mouvement (B.1) (cf. GARNIER *et al.* [74]) et d'énergie (B.3) et (B.4). VREMAN *et al.* [204] montrent aussi que le terme  $B_4$  a une contribution suffisamment « Faible » pour pouvoir être aussi négligé ; certains auteurs négligent ce terme du fait de sa forme non conservative une fois que  $\tau_{ij}^{sgs}$  est modélisé. Ainsi,

$$\partial_j(\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij}) \approx \vec{0} \quad (\text{B.1})$$

$$B_4 = \tau_{ij}^{sgs} \partial_j \tilde{u}_i \approx 0 \quad (\text{B.2})$$

$$B_6 = \partial_j \mathcal{D}_j = \partial_j(\bar{\tau}_{ij} u_j - \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i) \approx 0 \quad (\text{B.3})$$

$$B_7 = \partial_j(\bar{q}_j - \check{q}_j) \approx 0 \quad (\text{B.4})$$

Ces considérations, incitent souvent les auteurs à exprimer les flux filtrés de la même façon que leurs homologues instantanés <sup>1</sup>

$$\bar{\tau}_{ij} \approx \check{\tau}_{ij} = 2\mu(\tilde{T}) \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (\text{B.5})$$

$$\bar{\tau}_{ij} u_j \approx \bar{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \approx \check{\tau}_{ij} \tilde{u}_i \quad (\text{B.6})$$

$$\bar{q}_j \approx \check{q}_j = \lambda(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (\text{B.7})$$

Cependant, ceci se justifie aussi probablement par l'héritage du développement des équations LES pour les gaz diatomiques en écoulement incompressible. De façon analogue, il en est de même pour  $D_6 = D_7 = 0$ . Cependant, ces études divergent sur l'importance relative du terme  $B_2$  dans le jeu d'équations respectif du Système A et D. Dans les cas pratiques, les auteurs recommandent d'au moins modéliser les contributions d'ordre « Moyen » et de négliger les termes de moindre importance, *i.e.* « Faible » et « Négligeable ».

Enfin, *si l'on néglige le terme isotropique du tenseur de viscosité de sous-maille*  $\tau_{kk}^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_k u_k} - \tilde{u}_k \tilde{u}_k)$ , alors :

1. les différentes formulations pour la loi d'état, la pression et la température sont équivalentes :  
 $\bar{p} = \dot{P} = \overline{\mathcal{P}}$  et  $\tilde{T} = \dot{T}$  ;

1. Remarquons que ceci est d'une part, un abus de notation car ce n'est pas la différence  $\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij} \approx 0$  mais son gradient  $\partial_j(\bar{\tau}_{ij} - \check{\tau}_{ij})$  qui est négligeable et d'autre part, en utilisant (B.5) à (B.7), ce n'est finalement pas le flux du tenseur visqueux filtré qui est calculé mais le flux du tenseur visqueux estimé à partir des grandeurs filtrées. Il en est de même pour pratiquement tous les autres termes de sous-maille des flux moléculaires qui sont exprimés par leurs contributions résolues.

2. le terme  $D_3 = 0$  et  $\mathcal{Q}_j^A = \mathcal{Q}_j^B = \mathcal{Q}_j^C$ .

Ainsi les Systèmes A, B et C deviennent parfaitement équivalentes. En revanche, le Système D (Vreman I) reste inchangé.

**Développement de  $\mathcal{Q}_j$  :** En supposant un *gaz caloriquement parfait*, l'énergie totale filtrée s'écrit, pour le Système A par exemple,

$$\overline{\rho e_t} = \overline{\rho \tilde{e}_t} = \overline{\rho c_v \tilde{T}} + \frac{1}{2} \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i} + \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} \quad (\text{B.8})$$

Avec l'approximation de la loi des gaz parfaits (3.14)  $\overline{p} \approx \overline{\rho R \tilde{T}} / \overline{W}$  et la relation de Mayer (2.10), on peut écrire

$$(\overline{\rho \tilde{e}_t} + \overline{p}) \tilde{u}_j = \overline{\rho c_p \tilde{T} \tilde{u}_j} + \frac{1}{2} \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} \tilde{u}_j \quad (\text{B.9})$$

et sachant qu'on peut écrire

$$\overline{(\rho e_t + p) u_j} = \overline{\left( \rho c_v T + \frac{1}{2} \rho u_i u_i + p \right) u_j} = \overline{\rho c_p T u_j} + \frac{1}{2} \overline{\rho u_i u_i u_j} + \overline{p u_j} \quad (\text{B.10})$$

on en déduit

$$\mathcal{Q}_j^A = \left[ \overline{(\rho e_t + p) u_j} - (\overline{\rho \tilde{e}_t} + \overline{p}) \tilde{u}_j \right] = \underbrace{\left( \overline{\rho c_p T u_j} - \overline{\rho c_p \tilde{T} \tilde{u}_j} \right)}_{q_j^{\text{sgs}}} + \frac{1}{2} \underbrace{\left( \overline{\rho u_i u_i u_j} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} \right)}_{\psi_j} - \frac{1}{2} \tau_{ii}^{\text{sgs}} \tilde{u}_j \quad (\text{B.11})$$

où  $q_j^{\text{sgs}} = c_p \theta_j$  est le flux de chaleur de sous-maille et  $\psi_j$  le vecteur des corrélations triples de vitesse.

## Annexe C

# Dérivation des équations de transport pour la variance scalaire de sous-maille

### Sommaire

C.1 Équation de la fraction de mélange $\xi$ . . . . .	183
C.2 Équation du scalaire au carré $\xi^2$ . . . . .	184
C.3 Équation du scalaire filtré au carré $\tilde{\xi}^2$ . . . . .	184
C.4 Équation de la variance scalaire de sous-maille $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}^2 - \xi^2$ . . . . .	185
C.5 Équation de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$ . . . . .	185

### C.1 Équation de la fraction de mélange $\xi$

#### Forme instantanée

$$(4.12) : \quad \mathcal{L}_i(\xi) = \frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi}{\partial x_i} + \frac{\partial J_{\xi,i}}{\partial x_i} = 0 \quad (C.1)$$

avec

- $\mathcal{L}_i$ , l'opérateur *des termes sources / puits* pour la forme conservative instantanée, représentée par l'indice  $i$  ;
- $J_{\xi,i} = -\rho D \partial_i \xi$ , le flux de masse surfacique du scalaire  $\xi$ .

#### Forme filtrée

$$(C.1) \iff \overline{\mathcal{L}_i(\xi)} = \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}) = \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\xi}}{\partial x_i} + \frac{\partial \check{J}_{\xi,i}}{\partial x_i} + \frac{\partial J_{\xi,i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{J}_{\xi,i} - \check{J}_{\xi,i}) = 0$$

$$\iff \begin{cases} \mathcal{L}_f(\tilde{\xi}) = 0 \\ \tilde{\xi} \in [\tilde{\xi}_{\min}, \tilde{\xi}_{\max}] \end{cases} \quad (C.2)$$

avec

- $\mathcal{L}_f$ , l'opérateur *des termes sources / puits* pour la forme conservative filtrée, représentée par l'indice  $f$  ;
- $\check{J}_{\xi,i} = -\bar{\rho} \tilde{D} \partial_i \tilde{\xi}$ , le flux de masse moléculaire résolu du scalaire ;
- $J_{\xi,i}^{\text{sgs}} = \bar{\rho} \xi u_i - \bar{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_i$ , le flux de masse de sous-maille du scalaire ;
- $(\bar{J}_{\xi,i} - \check{J}_{\xi,i})$ , la partie de sous-maille du transport moléculaire du flux de masse du scalaire. D'après les hypothèses vues au § 3.2, p. 32, concernant les termes de sous-maille :  $\partial_i (\bar{J}_{\xi,i} - \check{J}_{\xi,i}) \approx \bar{0}$ , *quel que soit le scalaire considéré*. Ce terme sera donc négligé dans tous les développements suivants.

**Remarques :** Par la suite, dans l'opérateur  $\mathcal{L}$  des termes sources / puits, on présentera pour plus de clarté **les termes sources en rouge** et **les termes puits en bleu**.

## C.2 Équation du scalaire au carré $\xi^2$

Forme instantanée

$$2\xi(\text{C.1}) \iff \frac{\partial \rho \xi^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi^2}{\partial x_i} = 2\xi \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D 2\xi \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \quad (\text{C.3a})$$

$$\iff \mathcal{L}_i(\xi^2) = \frac{\partial \rho \xi^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \xi^2}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i} \right) = -2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \quad (\text{C.3b})$$

$$\iff \mathcal{L}_i(\xi^2) = -2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = -2\rho \chi_\xi \quad (\text{C.3c})$$

avec  $\chi_\xi = D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}$ , le taux de dissipation scalaire. Notons que l'identité essentielle suivante a été utilisée dans (C.3)

$$2\xi \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D 2\xi \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) - 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \quad (\text{C.4})$$

Forme filtrée

$$\overline{(\text{C.3})} \iff \mathcal{L}_f(\widetilde{\xi^2}) = \frac{\partial \overline{\rho \xi^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \xi^2}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{J_{\xi^2,i}}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{J_{\xi^2,i}^{\text{sgs}}}}{\partial x_i} = -2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \quad (\text{C.5a})$$

$$\iff \begin{cases} \mathcal{L}_f(\widetilde{\xi^2}) = -2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = -2\overline{\rho \chi_\xi} \\ \widetilde{\xi^2} \in [\widetilde{\xi^2}, \widetilde{\xi \xi_{\max}}] \end{cases} \quad (\text{C.5b})$$

avec  $\widetilde{\chi_\xi} = \overline{D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i}}$ , le taux de dissipation scalaire filtré.

## C.3 Équation du scalaire filtré au carré $\widetilde{\xi^2}$

$$2\widetilde{\xi}(\text{C.2}) \iff \frac{\partial \overline{\rho \xi^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \xi^2}}{\partial x_i} - 2\widetilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \right) = -2\widetilde{\xi} \frac{\partial J_{\xi,i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} \quad (\text{C.6})$$

Encore une fois, des identités similaires à (C.4), pour des variables filtrées sont utilisées

$$\begin{cases} 2\widetilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D} 2\widetilde{\xi} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \right) - 2\overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \end{cases} \quad (\text{C.7a})$$

$$\begin{cases} 2\widetilde{\xi} \frac{\partial J_{\xi,i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( 2\widetilde{\xi} J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \right) - 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \end{cases} \quad (\text{C.7b})$$

Afin d'obtenir

$$\mathcal{L}_f(\widetilde{\xi^2}) = \frac{\partial \overline{\rho \xi^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \xi^2}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi^2}}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( 2\widetilde{\xi} J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \right) = -2\overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} + 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \quad (\text{C.8a})$$

$$\iff \begin{cases} \mathcal{L}_f(\widetilde{\xi^2}) = -2\overline{\rho D} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} + 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} = -2\overline{\rho \chi_\xi} + 2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_i} \\ \widetilde{\xi^2} \in [\widetilde{\xi_{\min}^2}, \widetilde{\xi_{\max}^2}] \end{cases} \quad (\text{C.8b})$$

avec

- $\frac{\partial}{\partial x_i} (2\tilde{\xi} J_{\xi,i}^{\text{sgs}})$  représente un flux diffusif en sous-maille ;
- $\tilde{\chi}_\xi = \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$ , le taux de dissipation scalaire résolu ;
- $2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i}$ , un terme puit lié à la dissipation en sous-maille.

## C.4 Équation de la variance scalaire de sous-maille $\tilde{V}_\xi = \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$

En retranchant (C.5) – (C.8), on obtient

$$\frac{\partial \tilde{V}_\xi}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{V}_\xi}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{V}_\xi}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( J_{\xi^2,i}^{\text{sgs}} - 2\tilde{\xi} J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \right) = -2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - (2\tilde{\rho} \tilde{\chi}_\xi - 2\tilde{\rho} \tilde{\chi}_\xi) \quad (\text{C.9})$$

avec  $\tilde{\chi}_\xi - \tilde{\chi}_\xi = \chi_\xi^{\text{sgs}}$ , le taux de dissipation scalaire de sous-maille.

En utilisant la définition de la variance SGS  $V_\xi \stackrel{\text{def}}{=} (\xi - \tilde{\xi})^2 = \xi^2 + \tilde{\xi}^2 - 2\xi\tilde{\xi}$  ainsi que  $\tilde{V}_\xi \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2$ , on peut montrer que

$$J_{\xi^2,i}^{\text{sgs}} - 2\tilde{\xi} J_{\xi,i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho (u_i \xi^2 - \tilde{u}_i \tilde{\xi}^2)} - 2\tilde{\xi} \overline{\rho (u_i \xi - \tilde{u}_i \tilde{\xi})} \quad (\text{C.10a})$$

$$= \overline{\rho u_i \xi^2} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}^2} - 2\overline{\rho u_i \xi \tilde{\xi}} + 2\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi} \tilde{\xi}} \quad (\text{C.10b})$$

$$= \overline{\rho u_i V_\xi} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}^2} - \overline{\rho u_i \tilde{\xi}^2} \quad (\text{C.10c})$$

$$= \overline{\rho u_i V_\xi} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{V}_\xi} \quad (\text{C.10d})$$

$$= J_{V_\xi,i}^{\text{sgs}} \quad (\text{C.10e})$$

Ceci conduit finalement à

$$\begin{cases} \mathcal{L}_f(\tilde{V}_\xi) = -2J_{\xi,i}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - 2\tilde{\rho} \chi_\xi^{\text{sgs}} \\ \tilde{V}_\xi \in [0, (\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_{\min})(\tilde{\xi}_{\max} - \tilde{\xi})] \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

avec ici <sup>1</sup>  $(\xi_{\min}, \xi_{\max}) = (0, 1)$

## C.5 Équation de l'écart à la variance maximale $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$

Considérons à présent l'écart  $\Delta_\xi = \xi - \xi^2$ , dont la forme filtrée est  $\tilde{\Delta}_\xi = \tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2 = \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi}) - \tilde{V}_\xi$ . Cette dernière quantité mesure l'écart à la variance maximale  $\tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})$  et donc à la ségrégation maximale. Son équation de transport est obtenue en retranchant (C.2) – (C.5) et en développant de la même façon que (C.10) la différence suivante

$$J_{\xi,i}^{\text{sgs}} - J_{\xi^2,i}^{\text{sgs}} = \overline{\rho u_i \xi} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}} - \left( \overline{\rho u_i \xi^2} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\xi}^2} \right) \quad (\text{C.12a})$$

$$= \overline{\rho u_i (\xi - \xi^2)} - \overline{\rho \tilde{u}_i (\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^2)} \quad (\text{C.12b})$$

$$= \overline{\rho u_i \Delta_\xi} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\Delta}_\xi} \quad (\text{C.12c})$$

$$= J_{\Delta_\xi,i}^{\text{sgs}} \quad (\text{C.12d})$$

Ce qui permet finalement d'écrire

$$\mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi) = \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\Delta}_\xi}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\Delta}_\xi}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{J}_{\Delta_\xi,i}}{\partial x_i} + \frac{\partial J_{\Delta_\xi,i}^{\text{sgs}}}{\partial x_i} = 2\tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \quad (\text{C.13})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \mathcal{L}_f(\tilde{\Delta}_\xi) = 2\tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} = 2\tilde{\rho} \tilde{\chi}_\xi \\ \tilde{\Delta}_\xi \in [0, \tilde{\xi}(1 - \tilde{\xi})] \end{cases} \quad (\text{C.14})$$

1. Ce n'est pas le cas pour un mélange diphasique



## Annexe D

# Cinétique des réactions H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>

### Sommaire

---

<b>D.1 Auto-allumage des mélanges H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub></b> . . . . .	<b>187</b>
<b>D.2 Schémas cinétiques réduits de BOIVIN <i>et al.</i></b> . . . . .	<b>189</b>
D.2.1 Mécanisme 4 étapes + 6 espèces + 2 stationnaires . . . . .	191
D.2.2 Mécanisme 3 étapes + 5 espèces + 3 stationnaires pour $T > T_c$ . . . . .	192
D.2.3 Mécanisme 3 étapes hybrides + 5 espèces + 3 à 4 stationnaires . . . . .	193
D.2.4 Vérification de l'implémentation et discussions . . . . .	193

---

### D.1 Auto-allumage des mélanges H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>

Pour plus de détails sur la phénoménologie de l'allumage spontané ou forcé des flammes de diffusion, le lecteur intéressé pourra consulter les travaux de MASTORAKOS [135]. Nous ne rappellerons ici que quelques définitions et aspects phénoménologiques de l'auto-allumage.

L'auto-allumage (auto-inflammation) est défini comme l'allumage spontané du mélange lorsque les conditions de pression, de température et de richesse le permettent, et cela sans apport d'énergie externe, via par exemple une bougie d'allumage. Ce mécanisme est intrinsèquement 0D, il est généralement associé à la cinétique (évolution temporelle) du mélange au sein d'un réacteur de type PSR. Le temps caractéristique associé est appelé *délai (ou temps) d'auto-allumage*  $\tau_{\text{igni}}$  et peut avoir différentes définitions. Nous considérerons qu'il correspond au temps où se situe le point d'inflexion de  $T(t)$ , l'évolution temporelle de la température. D'autres auteurs s'appuient par exemple sur le gradient de la concentration d'H<sub>2</sub>O ou par le temps nécessaire pour atteindre un incrément donné de la température  $\Delta T = T(\tau_{\text{igni}}) - T(t = 0)$ .

Au sein d'un système réactif, au moins 1D, il existe des zones de prédilection où l'auto-allumage a lieu. D'après MASTORAKOS *et al.* [134], ces zones peuvent être fortement modifiées lorsqu'il y a présence d'un écoulement turbulent qui peut interagir avec les mécanismes chimiques. Ces zones préférentielles ne sont pas nécessairement localisées à la stœchiométrie ( $\xi_{\text{st}}$ ), mais plus souvent au niveau *des fractions de mélange les plus réactives (most reactive,  $\xi_{\text{mr}}$ )* ou dans les régions de faibles taux de dissipation scalaire [134]. La fraction de mélange la plus réactive  $\xi_{\text{mr}}$  peut être définie comme la fraction de mélange pour laquelle le délai d'auto-allumage est le plus court [135]. D'après SREEDHARA et LAKSHMISHA [185], pour des mécanismes cinétiques complexes, il n'existe pas seulement une, mais plusieurs valeurs possibles de la fraction de mélange la plus réactive. Ensuite, lorsque l'allumage du mélange a lieu, il est fréquemment suivi d'une réaction qui se propage de proche en proche par augmentation de la température engendrée au niveau du point initial d'allumage : c'est l'emballement thermique (*thermal runaway*), la zone réactive s'étend ou s'épaissit.

L'allumage est un premier élément caractéristique. Cependant, la stabilisation de la zone réactive en est une autre. Cette dernière résulte d'une compétition entre un temps caractéristique de l'écoulement, généralement assimilé à un temps de résidence, et un temps caractéristique chimique : le délai d'auto-allumage. Pour le cas des écoulements subsoniques, la stabilisation de la zone réactive est couramment obtenue en créant des zones de recirculation, permettant de créer des zones de vitesses faibles, d'atteindre des temps de résidence longs et d'accumuler des gaz brûlés qui vont stabiliser la flamme. Cependant, dans le cadre de la combustion supersonique, la difficulté majeure réside dans les ordres de grandeur des vitesses et des temps de résidence rencontrés, qui peuvent être du même ordre de grandeur que les échelles caractéristiques chimiques.

D'après KREUTZ et LAW [114], la température d'auto-allumage peut être associée, de manière approximative, à la *température de croisement*  $T_c$  et ce, sur une large gamme de pression et ne dépend pas de l'étirement ou de la concentration des espèces. Par exemple, pour un mécanisme  $H_2/O_2$ , cette température de croisement correspond à la température pour laquelle la vitesse de réaction de branchement ( $k_{1f}$ ) et de terminaison ( $k_4$ ) sont du même ordre de grandeur (cf. Tab. D.1), *i.e.*,

$$2k_{1f}(T_c) = k_4(T_c) \quad \text{à pression } p \text{ et richesse } \Phi \text{ fixées} \quad (\text{D.1})$$

Enfin, la *limite d'explosion ou d'auto-allumage* vérifie

$$2k_{1f} > k_4 \iff T > T_c \quad \text{à } p \text{ et } \Phi \text{ fixées} \quad (\text{D.2})$$

Cette dernière délimite le domaine :

- d'auto-allumage explosive à haute pression, qui présente une période d'induction où les radicaux se forment par dissociation des réactifs, puis elle est suivie d'une inflammation rapide du mélange ;
- d'auto-allumage thermique à basse pression, qui présente aussi une période d'induction qui est ensuite suivie d'une augmentation progressive de la température et va initier la réaction de manière rapide ou non. Au-delà de cette limite, le taux de production de radicaux est supérieur à sa consommation, la réaction peut alors s'auto-entretenir.

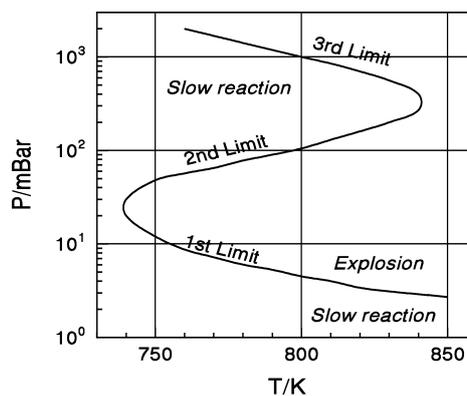


FIG. D.1 – Limite d'inflammabilité d'un mélange  $H_2/O_2$  à  $\Phi = 1$ .

Il est usuel de représenter les limites d'inflammation d'un mélange  $H_2/O_2$  pour une richesse donnée, sur un diagramme  $(p, T)$ . Un exemple est fourni Fig. D.1 et met en évidence 3 principales limites, délimitées par une courbe en « Z ».

**1<sup>re</sup> limite d'explosion** Elle correspond à la branche inférieure en basse pression ( $\partial p/\partial T < 0$ ) où la diffusion de masse joue un rôle non négligeable et est pilotée par la production–destruction du radical H dans les étapes respectives de branchement ( $k_{1f}$ ) et de terminaison ( $k_4$ ).

**2<sup>e</sup> limite d'explosion** Cette limite est la branche intermédiaire en moyenne pression ( $\partial p/\partial T > 0$ ). Elle est caractérisée par un pic de production des radicaux H, O et OH, mais sans dégagement

de chaleur significatif. Ces espèces sont considérées être à l'état d'équilibre car leurs taux de production–destruction sont peu affectés par les phénomènes de transport. En revanche les espèces  $\text{HO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  sont soit stables, soit méta-stables, elles sont formées rapidement dans le noyau d'allumage et sont ensuite transportées en dehors de celui-ci en raison de leur faible réactivité.

**3<sup>e</sup> limite d'explosion** Elle correspond à la branche supérieure en haute pression ( $\partial p/\partial T < 0$ ) où encore une fois, la diffusion de masse joue un rôle important. Elle est caractérisée par la compétition entre la réaction de propagation–branchement ( $2 \text{HO}_2 \xrightarrow{10} \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{OH} + \text{O}_2$  et  $\text{HO}_2 + \text{H}_2 \xrightarrow{11} \text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow 2 \text{OH} + \text{H}$ ) avec la réaction de terminaison ( $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \xrightarrow{4} \text{HO}_2 (+\text{M})$ ).

## D.2 Schémas cinétiques réduits de BOIVIN *et al.*

BOIVIN *et al.* [17, 19, 20] réduisent le schéma cinétique squelettique  $\text{H}_2/\text{O}_2$  de San Diego (12 réactions + 8 espèces, Tab. D.1) suivant différents niveaux de réduction brièvement présentés dans les paragraphes suivants et récapitulés au Tab. D.2. Le mécanisme initial de SAXENA et WILLIAMS (21 étapes + 8 espèces) permet de restituer correctement les vitesses de flammes laminares, les temps d'auto-allumage, les températures maximales obtenues sur une flamme à contre-courant pour différents taux de déformation, etc. Les différents schémas réduits diffèrent essentiellement par leur domaine de validité, qui est conditionné par l'AEQS (Approximation de l'état quasi-stationnaire, cf. § 2.2.4) effectuée notamment sur  $\text{HO}_2$  et/ou  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Par conséquent, ces schémas vont être, a priori, valides soit en dessous, soit au-dessus de la température de croisement  $T_c$ . En effet, BOIVIN *et al.* [20] ont montré que l'AEQS sur l'espèce  $\text{H}_2\text{O}_2$  était valide à  $T > T_c$ , due au fait que sa concentration soit négligeable. Par contre, durant la phase d'emballlement thermique ( $T < T_c$ ), cette hypothèse n'est pas vérifiée.

Réaction	$A^{(a)}$	$n$	$E_a$ (kJ/mol)	$A^{(a)}$	$n$	$E_a$ (kJ/mol)		
1 $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	$k_f$	$3.52 \times 10^{16}$	-0.7	71.42	$k_b$	$7.04 \times 10^{13}$	-0.26	0.60
2 $\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	$k_f$	$5.06 \times 10^4$	2.67	26.32	$k_b$	$3.03 \times 10^4$	2.63	20.23
3 $\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$k_f$	$1.17 \times 10^9$	1.3	15.21	$k_b$	$1.28 \times 10^{10}$	1.19	78.25
4 $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \rightarrow \text{HO}_2 (+\text{M})^{(b)}$	$k_0$	$5.75 \times 10^{19}$	-1.4	0.0	$k_\infty$	$4.65 \times 10^{12}$	0.44	0.0
5 $\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2 \text{OH}$		$7.08 \times 10^{13}$	0.0	1.23				
6 $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	$k_f$	$1.66 \times 10^{13}$	0.0	3.44	$k_b$	$2.69 \times 10^{12}$	0.36	231.86
7 $\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$		$2.89 \times 10^{13}$	0.0	-2.08				
8 $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}^{(c)}$	$k_f$	$4.00 \times 10^{22}$	-2.0	0.0	$k_b$	$1.03 \times 10^{23}$	-1.75	496.14
9 $2 \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}^{(c)}$	$k_f$	$1.30 \times 10^{18}$	-1.0	0.0	$k_b$	$3.04 \times 10^{17}$	-0.65	433.09
10 $2 \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$		$3.02 \times 10^{12}$	0.0	5.8				
11 $\text{HO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}$		$1.62 \times 10^{11}$	0.61	100.14				
12 $\text{H}_2\text{O}_2 (+\text{M}) \rightarrow 2 \text{OH} (+\text{M})^{(d)}$	$k_0$	$8.15 \times 10^{23}$	-1.9	207.62	$k_\infty$	$2.62 \times 10^{19}$	-1.39	214.74

(a) Unité en mol, s,  $\text{cm}^3$ , kJ et K.

(b) Efficacité de Chaperon :  $\eta_{\text{H}_2} = 2.5$ ,  $\eta_{\text{H}_2\text{O}} = 16.0$  et 1.0 pour les autres espèces, Troe falloff :  $F_c = 0.5$ .

(c) Efficacité de Chaperon :  $\eta_{\text{H}_2} = 2.5$ ,  $\eta_{\text{H}_2\text{O}} = 12.0$  et 1.0 pour les autres espèces.

(d) Efficacité de Chaperon :  $\eta_{\text{H}_2} = 2.5$ ,  $\eta_{\text{H}_2\text{O}} = 6$  et 1.0 pour les autres espèces, Troe falloff :  $F_c = 0.265 \exp(-T/94 \text{ K}) + 0.735 \exp(-T/1756 \text{ K}) + \exp(-5182 \text{ K}/T)$ .

**TAB. D.1** – Mécanisme cinétique squelettique  $\text{H}_2/\text{O}_2$  de San Diego (12 réactions + 8 espèces).

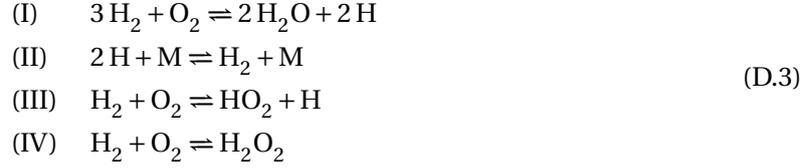
Ces mécanismes ont tous été implémentés et vérifiés, ils ont été également testés pour simuler la configuration du JISCF, présentée § 7 « LES réactive du JISCF basée sur le modèle PSR ». Cependant, seul le mécanisme à 4 étapes a été retenu et présenté dans ce mémoire, c'est pourquoi il sera développé plus en détail.

	3 étapes		3 étapes hybride [19]	4 étapes [19]
	(a) sans $k_4$ [17]	(b) avec $k_4$ [20]		
Étapes réactionnelles	(I) $3H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O + 2H$ (II) $2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$ (III) $H_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H$	(I) $3H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O + 2H$ (II) $2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$ (III) $H_2 + O_2 \rightleftharpoons X + H$ avec $X = HO_2$ , si $T < T_c$ , $X = H_2O_2$ , sinon.	(I) $3H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O + 2H$ (II) $2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$ (III) $H_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H$ (IV) $H_2 + O_2 \rightleftharpoons H_2O_2$	
Espèces transportées	5 espèces $H_2, O_2, H_2O, H, HO_2$	5 espèces $H_2, O_2, H_2O, H, X = HO_2$		6 espèces $H_2, O_2, H_2O, H, HO_2, H_2O_2$
Espèces stationnaires	3 espèces $OH, O, H_2O_2$	3-4 espèces $OH, O, X \in \{H_2O_2, HO_2\}$		2 espèces $OH, O$
Commentaires	Non adapté pour $T < T_c$ . N'inclut pas $k_4$ dans la correction de la réactivité $\lambda$ .	Non adapté pour $T < T_c$ . Inclut $k_4$ dans la correction de la réactivité $\lambda$ .	Adapté quel que soit $T$ . Convergence difficile dans le code CFD pour notre configuration.	Adapté quel que soit $T$ . Convergence réussie dans le code CFD

**TAB. D.2** – Récapitulatif des schémas cinétiques réduits de BOIVIN *et al.* [17, 19, 20].

### D.2.1 Mécanisme 4 étapes + 6 espèces + 2 stationnaires

Ce mécanisme réduit à 4 étapes fait intervenir 6 espèces ( $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{HO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$ ) et considère l'AEQS seulement pour les éléments O et OH.



L'importance de la réaction (III) à haute température a été décrite dans [17], alors que les réactions (I, III et IV) sont essentielles pour décrire la production du radical  $\text{H}_2\text{O}_2$  à basse température. Les taux d'avancement,  $\omega_i \mid i \in \{\text{I, II, III, IV}\}$ , de ce mécanisme réduit s'obtiennent par combinaisons linéaires des taux d'avancement du mécanisme présenté Tab. D.1

$$\omega_{\text{I}} = \omega_1 + \omega_{5f} + \omega_{12f} \tag{D.4a}$$

$$\omega_{\text{II}} = \omega_{4f} + \omega_8 + \omega_9 - \omega_{10f} - \omega_{11f} \tag{D.4b}$$

$$\omega_{\text{III}} = \omega_{4f} - \omega_{5f} - \omega_6 - \omega_{7f} - 2\omega_{10f} - \omega_{11f} \tag{D.4c}$$

$$\omega_{\text{IV}} = \omega_{10f} + \omega_{11f} - \omega_{12f} \tag{D.4d}$$

Ces taux d'avancement nécessitent la connaissance des concentrations de OH et O qui sont déterminées analytiquement via l'AEQS

$$C_{\text{OH}} = \frac{\sqrt{A_1^2 + 4A_0A_2} - A_1}{2A_2} \tag{D.5a}$$

$$C_{\text{O}} = \frac{k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2} + k_{2b}C_{\text{OH}}C_{\text{H}}}{k_{1b}C_{\text{OH}} + k_{2f}C_{\text{H}_2}} \tag{D.5b}$$

avec

$$A_0 = C_{\text{H}_2} k_{2f} (2k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2} + k_{3b}C_{\text{H}}C_{\text{H}_2\text{O}} + 2k_{5f}C_{\text{H}}C_{\text{HO}_2} + 2k_{12f}C_{\text{H}_2\text{O}_2}C_{\text{M}_{12}} + k_{8b}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}_2\text{O}}) \tag{D.6a}$$

$$\begin{aligned}
 A_1 = & C_{\text{H}_2} k_{2f} (k_{8f}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}} + k_{7f}C_{\text{HO}_2} + k_{3f}C_{\text{H}_2}) \\
 & - k_{1b} (k_{3b}C_{\text{H}}C_{\text{H}_2\text{O}} + 2k_{5f}C_{\text{H}}C_{\text{HO}_2} + 2k_{12f}C_{\text{H}_2\text{O}_2}C_{\text{M}_{12}} + k_{8b}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}_2\text{O}})
 \end{aligned} \tag{D.6b}$$

$$A_2 = k_{1b} (2k_{2b}C_{\text{H}} + k_{3f}C_{\text{H}_2} + k_{7f}C_{\text{HO}_2} + k_{8f}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}}) \tag{D.6c}$$

La concentration  $C_{\text{O}}$  (D.5b) est la même que celle du mécanisme à 3 étapes (cf. Annexe D.2.2 et [17]), alors que la concentration  $C_{\text{OH}}$  (D.5a) est modifiée pour tenir compte de l'évolution de  $\text{H}_2\text{O}_2$  qui n'est plus considérée comme stationnaire.

Pendant, afin de tenir compte de la limite de validité de l'AEQS pour O et OH durant la phase initiale de branchement des radicaux, c'est-à-dire lorsque la quantité de radicaux n'est pas suffisamment importante, les auteurs introduisent un facteur correctif  $\Lambda$  sur les taux d'avancement  $\omega_i$  [17, 20]. Autrement, l'AEQS est valide, notamment dans les zones réactives formées par une flamme de prémélange ou de diffusion. Pour cela, ils définissent le paramètre d'état stationnaire  $SS_\alpha$  de l'espèce  $\alpha$  (appliqué seulement pour  $\text{HO}_2$  et H) qui s'écrit

$$SS_\alpha = \left( \frac{\text{Taux de production} - \text{Taux de consommation}}{\text{Taux de production}} \right)_\alpha \tag{D.7}$$

ainsi que le taux de réactivité  $\lambda$  (en  $\text{s}^{-1}$ ) [17, 20]

$$\lambda = \frac{\sqrt{l_1^2 + 4l_0l_2} - l_1}{2l_2} \tag{D.8}$$

avec

$$l_0 = (2k_1 C_{O_2} - k_4 C_{O_2} C_{M_4}) k_2 k_3 C_{H_2}^2 \quad (D.9a)$$

$$l_1 = k_2 k_3 C_{H_2}^2 + (k_2 + k_3) k_4 C_{H_2} C_{O_2} C_{M_4} \quad (D.9b)$$

$$l_2 = k_1 C_{O_2} + k_2 C_{H_2} + k_3 C_{H_2} + k_4 C_{O_2} C_{M_4} \quad (D.9c)$$

Alors, le facteur d'échelle  $\Lambda$  (ou facteur correctif) est estimé par

$$\Lambda = \begin{cases} \frac{\lambda}{(2k_1 - k_4) C_{O_2}} & \text{si } SS_{HO_2} \text{ et } SS_H < \varepsilon, \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (D.10)$$

Finalement, le taux d'avancement corrigé  $\omega_i^*$  de la  $i^e$  réaction chimique est

$$\omega_i^* = \Lambda \omega_i \mid i \in \{I, II, III, IV\} \quad (D.11)$$

D'une part, ce mécanisme réduit est valide sur un large domaine de température (inférieure et supérieure à la température de croisement). D'autre part, son implémentation dans le code de calcul CFD *CHEM3D* a montré une convergence réussie lors des phases d'intégration des termes sources chimiques via le solveur *DVODE* de la librairie *CHEMKIN* (contrairement au schéma hybride à 3 étapes (cf. Annexe D.2.3 et Tab. D.2). Ceci est la raison pour laquelle ce mécanisme a été retenu pour simuler la configuration du JISCF (cf. § 7). Par ailleurs, suivant le point de fonctionnement, il est possible de stabiliser la zone réactive en amont du jet froid de combustible [71]. La température en champ proche est donc potentiellement inférieure à la température de croisement, c'est pourquoi le choix de ce mécanisme cinétique réduit semble plus pertinent. Enfin, il semblerait que ce mécanisme n'a pas encore été référencé et appliqué sur un quelconque système réactif canonique.

## D.2.2 Mécanisme 3 étapes + 5 espèces + 3 stationnaires pour $T > T_c$

Ce mécanisme réduit à 3 étapes, initialement présenté dans [17] et récapitulé dans le Tab. D.2, fait intervenir 5 espèces ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H$  et  $HO_2$ ) et considère l'AEQS pour les éléments O, OH et  $H_2O_2$ . La concentration  $C_O$  est estimée par (D.5b), en revanche, celle pour OH est modifiée, du fait de l'utilisation de l'AEQS sur  $H_2O_2$ , par

$$C_{OH} = \frac{\sqrt{A_1^2 + 4A_0A_2} - A_1}{2A_2}$$

mais avec

$$A_0 = C_{H_2} k_{2f} \left( 2k_{1f} C_H C_{O_2} + k_{3b} C_H C_{H_2O} + 2k_{5f} C_H C_{HO_2} + 2k_{10f} C_{HO_2}^2 + 2k_{11f} C_{HO_2} C_{H_2} + k_{8b} C_{M_8} C_{H_2O} \right) \quad (D.12a)$$

$$A_1 = C_{H_2} k_{2f} \left( k_{8f} C_{M_8} C_H + k_{7f} C_{HO_2} + k_{3f} C_{H_2} - k_{1b} \left( k_{3b} C_H C_{H_2O} + 2k_{5f} C_H C_{HO_2} + 2k_{10f} C_{HO_2}^2 + 2k_{11b} C_{HO_2} C_{H_2} + k_{8b} C_{M_8} C_{H_2O} \right) \right) \quad (D.12b)$$

$$(D.6c): \quad A_2 = k_{1b} \left( 2k_{2b} C_H + k_{3f} C_{H_2} + k_{7f} C_{HO_2} + k_{8f} C_{M_8} C_H \right)$$

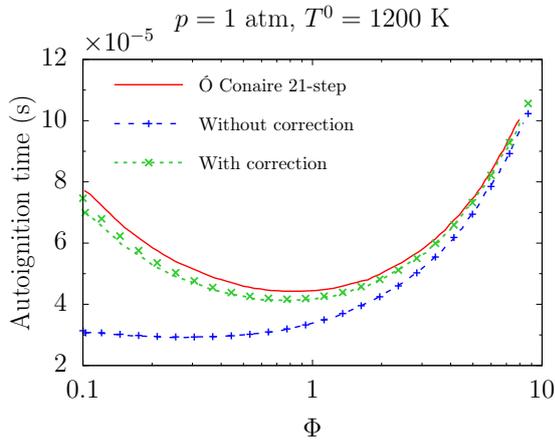
Ce schéma montre de très bons résultats sur les vitesses de flammes laminaires (notamment à haute pression), les températures maximales produites lors de la réaction, les délais d'auto-allumage et la position de la flamme. Cependant, il n'est pas adapté pour des températures inférieures au croisement, car il ne tient pas compte de l'évolution d' $H_2O_2$ , qui n'est pas stationnaire lorsque  $T < T_c$ , *i.e.* en dessous de la 2<sup>e</sup> limite d'explosion. Une version améliorée de ce mécanisme est ensuite présentée par BOIVIN *et al.* [20]. Ces auteurs complètent la validation de ce mécanisme en simulant la flamme jet à co-courant supersonique de la configuration de CHENG *et al.* [46]. Ils améliorent notamment le mécanisme en incluant la réaction de terminaison  $k_4$  dans l'estimation de la réactivité  $\lambda$ , qui permet de corriger l'AEQS sur les espèces O et OH dans l'étape de branchement.

### D.2.3 Mécanisme 3 étapes hybrides + 5 espèces + 3 à 4 stationnaires

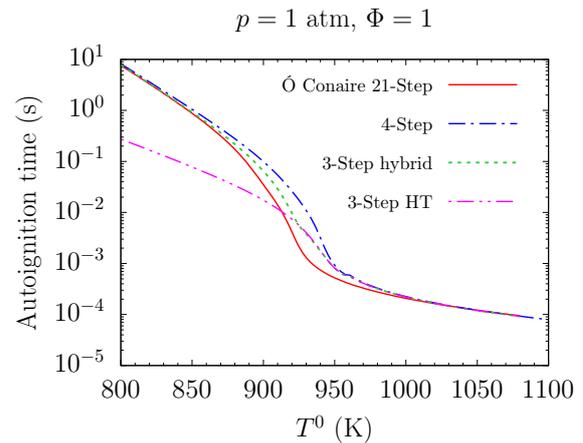
Les erreurs concernant la description de l'auto-allumage en dessous de la 2<sup>e</sup> limite d'explosion du schéma réduit présenté dans Annexe D.2.2 et [17], provient de l'AEQS sur l'espèce  $H_2O_2$ . C'est pourquoi BOIVIN *et al.* ont ensuite développé un mécanisme réduit à 3 étapes qu'ils qualifient d'« universel ». Ils introduisent pour cela une espèce de substitution X qui sera soit  $X = H_2O_2$  pour les faibles températures ( $T < T_c$ ), sinon  $X = HO_2$ , ce qui permet d'étendre la plage d'utilisation de ce mécanisme jusqu'aux températures inférieures au croisement. Les auteurs notent que cette modification engendre une erreur sur la production de  $H_2$  mais qui reste négligeable pour l'étude de l'allumage, étant donné que ce réactif est rapidement consommé par l'effet de l'emballement thermique.

La description de ce mécanisme ne sera pas fournie ici, car elle est relativement complexe et sort du cadre de ce manuscrit, le lecteur pourra se référer à l'article [19] pour plus de détails. Cependant, ce schéma a été implémenté et testé sur la simulation réactive du JISCF et la non-convergence du solveur *DVODE* avec ce schéma réduit nous a finalement incités à renoncer à son utilisation.

### D.2.4 Vérification de l'implémentation et discussions



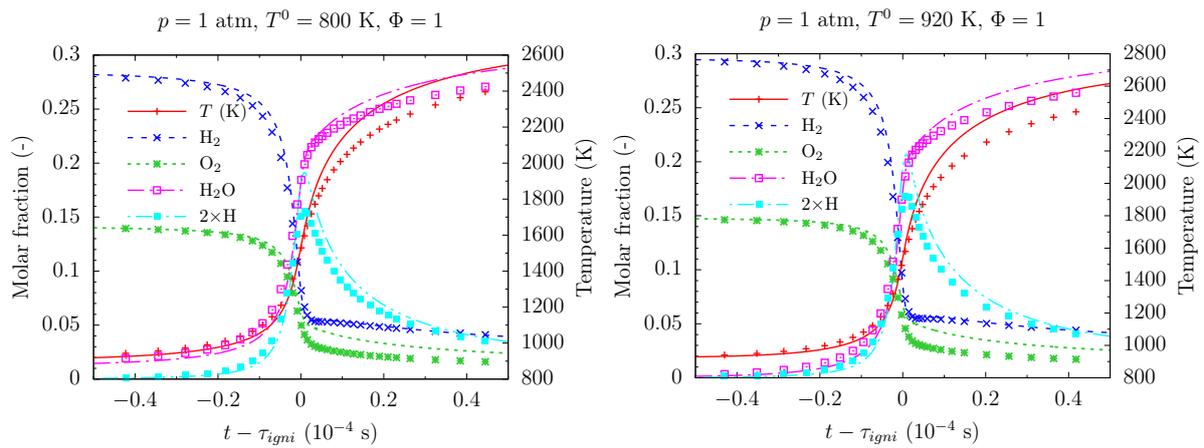
**FIG. D.2** – Délai d'auto-allumage en fonction de la richesse  $\Phi$ , pour une combustion isobare à  $p = 1$  atm et une température initiale  $T^0 = 1200$  K, avec/sans facteur correctif  $\Lambda$ . Lignes : schéma réduit à 3 étapes de BOIVIN *et al.* [20]. Symboles : vérification de l'implémentation. Comparaison avec la chimie détaillée d'Ô CONAIRE *et al.* [221].



**FIG. D.3** – Délai d'auto-allumage en fonction de la température initiale du mélange  $T^0$ , pour une combustion isobare à  $p = 1$  atm et stœchiométrique. Comparaison de la chimie détaillée d'Ô CONAIRE *et al.* [221] avec l'implémentation de la chimie réduite de BOIVIN *et al.* à 3 étapes hybride [19], 4 étapes [19] et 3 étapes adaptée pour des hautes températures (HT) [20].

La Fig. D.2 montre que sans le facteur correctif  $\Lambda$ , le délai d'auto-allumage est grandement sous-estimé pour des faibles richesses, alors que pour des grandes valeurs de la richesse, l'écart diminue par rapport à une chimie détaillée. En revanche, lorsque la correction est appliquée, les écarts deviennent négligeables. On voit ainsi que cette correction est essentielle pour une grande partie des systèmes réactifs étant donné que les richesses globales considérées dans la plupart des points de fonctionnement sont pauvres.

La Fig. D.3 montre bien que le schéma à 3 étapes, présenté Annexe D.2.2 et [20], n'est pas valide pour des températures inférieures au croisement, ici  $T_c \approx 920$  K à  $p = 1$  atm et  $\Phi = 1$ . En revanche, les mécanismes cinétiques réduits à 3 étapes hybrides et 4 étapes [19] suivent très bien la courbe du délai d'auto-allumage du schéma détaillé de Ô CONAIRE *et al.* [221]. Les écarts sont quasi-nuls pour de très fortes ( $T \gg T_c$ ) et de très faibles ( $T \ll T_c$ ) températures et sont relativement faibles autour de



**FIG. D.4** – Évolution temporelle, centrée sur le temps d’auto-allumage  $\tau_{\text{igni}}$ , des fractions molaires ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$  et  $H$ ) et de la température pour une combustion isobare (1 atm) stœchiométrique à une température initiale de  $T^0 = 800$  K et  $T^0 = 920$  K. Comparaison entre (lignes) le schéma réduit à 4 étapes de BOIVIN *et al.* [19] et (symboles) le schéma détaillé à 21 étapes de Ô CONAIRE *et al.* [221].

la température de croisement. On peut s’attendre donc à obtenir des erreurs importantes sur ce point de fonctionnement. Cependant, la Fig. D.4 montre qu’en recentrant les évolutions temporelles des fractions molaires et de température pour les cas « critiques » ( $T^0 < T_c$  et  $T^0 \approx T_c$ ), les erreurs peuvent en réalité être considérées comme négligeables.

## Annexe E

# Équation de transport de l'énergie cinétique turbulente

$$\frac{D\langle\rho\rangle k}{Dt} = \langle\rho\rangle(\mathcal{P} - \varepsilon) - \mathcal{T} + \Pi + \Sigma \quad (\text{E.1})$$

avec

- $\mathcal{P}$ , le terme de production ;
- $\varepsilon$ , le terme de dissipation ;
- $\mathcal{T}$ , le terme de transport ;
- $\Pi$ , le terme de pression-dilatation ;
- $\Sigma$ , le terme de flux massique.

Cette équation (E.1) est obtenue à partir de l'équation de transport du tenseur des contraintes de Reynolds suivante

$$\frac{D\langle\rho\rangle R_{ij}}{Dt} = \langle\rho\rangle(\mathcal{P}_{ij} - \varepsilon_{ij}) - \frac{\partial\mathcal{T}_{ijk}}{\partial x_k} + \Pi_{ij} + \Sigma_{ij} \quad (\text{E.2})$$

en contractant les indices, *i.e.*  $k = R_{ii}/2$  et donc  $\varepsilon = \varepsilon_{ii}/2$ . Le terme de production est

$$\mathcal{P}_{ij} = -\left(R_{ik}\frac{\partial\{u_j\}}{\partial x_k} + R_{jk}\frac{\partial\{u_i\}}{\partial x_k}\right) \quad (\text{E.3})$$

le taux de dissipation est

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{\langle\rho\rangle}\left\langle\tau'_{ik}\frac{\partial u''_j}{\partial x_k} + \tau'_{jk}\frac{\partial u''_i}{\partial x_k}\right\rangle \quad [\text{m}^2/\text{s}^3] \quad (\text{E.4})$$

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

$$\mathcal{T}_{ijk} = \left\langle\rho u''_i u''_j u''_k + p' u'_i \delta_{jk} + p' u'_j \delta_{ik} - \tau'_{jk} u''_i + \tau'_{ik} u''_j\right\rangle \quad (\text{E.5})$$

le terme de pression-dilatation est

$$\Pi_{ij} = \left\langle p' \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i}\right)\right\rangle \quad (\text{E.6})$$

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

$$\Sigma_{ij} = \left\langle u''_i \left(\frac{\partial\langle\tau_{jk}\rangle}{\partial x_k} - \frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x_j}\right) + \left\langle u''_j \left(\frac{\partial\langle\tau_{ik}\rangle}{\partial x_k} - \frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x_i}\right)\right\rangle \right\rangle \quad (\text{E.7})$$



# Bibliographie

- [1] ADAMS, N. A. et SHARIF, K. « A high-resolution hybrid compact-ENO scheme for shock-turbulence interaction problems ». *Journal of Computational Physics* 127 (1996), p. 27–51 (cf. p. [37](#), [44](#), [51](#), [81](#), [115](#), [136](#)).
- [2] ATKINSON, K. E. *An introduction to numerical analysis*. Wiley, 1989 (cf. p. [44](#), [47](#)).
- [3] BALAKRISHNAN, G. et WILLIAMS, F. A. « Turbulent combustion regimes for hypersonic propulsion employing hydrogen-air diffusion flames ». *Journal of Propulsion and Power* 10 (1994), p. 434–437 (cf. p. [43](#), [67](#), [68](#), [158–161](#), [163](#), [166](#)).
- [4] BALARAC, G., PITSCH, H. et RAMAN, V. « Development of a dynamic model for the subfilter scalar variance using the concept of optimal estimators ». *Physics of Fluids* 20 (2008), p. 035114 (cf. p. [108](#), [112](#)).
- [5] BALARAC, G., PITSCH, H. et RAMAN, V. « Modeling of the subfilter scalar dissipation rate using the concept of optimal estimators ». *Physics of Fluids* 20 (2008), p. 091701 (cf. p. [111](#)).
- [6] BALSARA, D. S. et SHU, C.-W. « Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy ». *Journal of Computational Physics* 160 (2000), p. 405–452 (cf. p. [44](#)).
- [7] BAYA TODA, H., CABRIT, O., BALARAC, G., BOSE, S., LEE, J., CHOI, H. et NICOUD, F. « A subgrid-scale model based on singular values for LES in complex geometries ». *Center for Turbulence Research, Proceeding of the Summer Program* (2010), p. 193–202 (cf. p. [36](#), [95](#)).
- [8] BAYA TODA, H. « Is the dynamic procedure appropriate for all SGS models? » *V European Conference on Computational Fluid Dynamics*. 2010 (cf. p. [35](#)).
- [9] BEN-DOR, G. *Shock wave reflection phenomena*. Springer, 1991 (cf. p. [47](#), [48](#)).
- [10] BEN-YAKAR, A. et HANSON, R. K. « Experimental investigation of flame-holding capability of hydrogen transverse jet in supersonic cross-flow ». *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998), p. 2173–2180 (cf. p. [72](#)).
- [11] BEN-YAKAR, A., MUNGAL, M. G. et HANSON, R. K. « Time evolution and mixing characteristics of hydrogen and ethylene transverse jets in supersonic crossflows ». *Physics of Fluids* 18 (2006), p. 026101 (cf. p. [73](#), [82](#)).
- [12] BERGLUND, M. et FUREBY, C. « LES of supersonic combustion in a scramjet engine model ». *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), p. 2497–2504 (cf. p. [72](#), [159](#)).
- [13] BERGLUND, M., FEDINA, E., FUREBY, C., TEGNÉR, J. et SABEL'NIKOV, V. « Finite Rate Chemistry Large-Eddy Simulation of Self-Ignition in Supersonic Combustion Ramjet ». *AIAA Journal* 48 (2010), p. 540–550 (cf. p. [159](#)).
- [14] BERMEJO-MORENO, I., LARSSON, J., CAMPO, L., BODART, J., HELMER, D., HAM, F. et EATON, J. K. « Wall-modeled large-eddy simulations of shock/turbulent-boundary layer interaction in a duct ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2011) (cf. p. [76](#)).
- [15] BILGER, R. W. « The structure of diffusion flames ». *Combustion Science and Technology* 13 (1976), p. 155–170 (cf. p. [58](#), [59](#)).

- [16] BILGER, R. W. « Turbulent jet diffusion flames ». *Progress in Energy and Combustion Science* 1 (1976), p. 87–109 (cf. p. 108).
- [17] BOIVIN, P., JIMÉNEZ, C., SÁNCHEZ, A. L. et WILLIAMS, F. A. « An explicit reduced mechanism for H<sub>2</sub>-air combustion ». *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011), p. 517–523 (cf. p. 6, 18, 76, 102, 146, 160, 165, 173, 189–193).
- [18] BOIVIN, P., SÁNCHEZ, A. L. et WILLIAMS, F. A. « Explicit analytic prediction for hydrogen–oxygen ignition times at temperatures below crossover ». *Combustion and Flame* 159 (2012), p. 748–752 (cf. p. 18).
- [19] BOIVIN, P., SÁNCHEZ, A. L. et WILLIAMS, F. A. « Four-step and three-step systematically reduced chemistry for wide-range H<sub>2</sub>-air combustion problems ». *Combustion and Flame* 160 (2013), p. 76–82 (cf. p. 6, 18, 103, 136, 153, 154, 165, 173, 189–191, 193, 194).
- [20] BOIVIN, P., DAUPTAIN, A., JIMÉNEZ, C. et CUENOT, B. « Simulation of a supersonic hydrogen–air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry ». *Combustion and Flame* 159 (2012), p. 1779–1790 (cf. p. 6, 18, 72, 76, 102, 105, 146, 165, 173, 189–193).
- [21] BORGHI, R. et GONZALEZ, M. « Applications of lagrangian models to turbulent combustion ». *Combustion and Flame* 63 (1986), p. 239–250 (cf. p. 62, 64, 108).
- [22] BORGHI, R. « Combustion turbulente ». *Techniques de l'Ingénieur* (2003) (cf. p. 66, 67, 165).
- [23] BORGHI, R. « Réactions chimiques en milieu turbulent ». Thèse de doct. Université Pierre et Marie Curie, 1978 (cf. p. 63, 167).
- [24] BORGHI, R. et CHAMPION, M. *Modélisation et théorie des flammes*. Editions Technip, 2000 (cf. p. 22, 55, 66, 67).
- [25] BORGHI, R. et DESTRIAU, M. *Combustion and flames*. Editions Technip, 1998 (cf. p. 67, 156).
- [26] BOUCHEZ, M. « Propulsion aérospatiale : Introduction ». *Techniques de l'ingénieur. Génie mécanique* (2010) (cf. p. 2).
- [27] BOUHERAOUA, L. « Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersonique ». Thèse de doct. Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2014 (cf. p. 160).
- [28] BOUSSINESQ, J. *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section*. Gauthier-Villars et fils, Comptes rendus des séances de l'Académie des sciences, 1897 (cf. p. 34).
- [29] BRANDT, T. « A priori tests on numerical errors in large eddy simulation using finite differences and explicit filtering ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51 (2006), p. 635–657 (cf. p. 179).
- [30] BRAY, K. N. C. « The challenge of turbulent combustion ». *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996), p. 1–26 (cf. p. 111).
- [31] BRAY, K. N. C., LIBBY, P. A. et WILLIAMS, F. A. « High speed turbulent combustion ». *Turbulent Reacting Flows*. Sous la dir. de LIBBY, P. A. et WILLIAMS, F. A. T. 44. Topics in Applied Physics. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1980, p. 609–638 (cf. p. 60).
- [32] BRAY, K., DOMINGO, P. et VERVISCH, L. « Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion ». *Combustion and Flame* 141 (2005), p. 431–437 (cf. p. 169).
- [33] BRIDEL-BERTOMEU, T. et BOIVIN, P. « Explicit Chemical Timescale as a Substitute for Tabulated Chemistry in a H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> Turbulent Flame Simulation ». *Combustion Science and Technology* 187 (2015), p. 739–746 (cf. p. 170).
- [34] BROWN, P. N., BYRNE, G. D. et HINDMARSH, A. C. « VODE : A Variable-Coefficient ODE Solver ». *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 10 (1989), p. 1038–1051 (cf. p. 44).

- [35] BURKE, S. P. et SCHUMANN, T. E. W. « Diffusion flames ». *Proceedings of the Symposium on Combustion* 1–2 (1948), p. 2–11 (cf. p. 61).
- [36] BURROWS, M. et KURKOV, A. « Supersonic combustion of hydrogen in a vitiated air stream using stepped-wall injection ». *7th Propulsion Joint Specialist Conference, Joint Propulsion Conferences*. 1971 (cf. p. 72).
- [37] BUTTAY, R., GOMET, L., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Highly resolved numerical simulation of combustion downstream of a rocket engine igniter ». *Shock Waves* 27 (2017), p. 655–674 (cf. p. 44, 140).
- [38] BUTTAY, R. « Etude de l'interaction choc/turbulence/combustion en écoulement cisailé réactif : analyse des jets réactifs fortement sous-détendus. » Thèse de doct. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2015 (cf. p. 21, 33, 44, 173).
- [39] BUTTAY, R., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Analysis of small-scale scalar mixing processes in highly under-expanded jets ». *Shock Waves* 26 (2016), p. 193–212 (cf. p. 44, 111).
- [40] BÉNARD, P. « Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles ». Thèse de doct. INSA de Rouen, 2015 (cf. p. 157).
- [41] CARATI, D., GHOSAL, S. et MOIN, P. « On the representation of backscatter in dynamic localization models ». *Physics of Fluids* 7 (1995), p. 606–616 (cf. p. 34).
- [42] CECERE, D., INGENITO, A., ROMAGNOSI, L., BRUNO, C. et GIACOMAZZI, E. « Shock/Boundary Layer/Heat Release Interaction in the HyShot II Scramjet Combustor ». *46th AIAA Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2010) (cf. p. 80).
- [43] CELIK, I. B., CEHRELI, Z. N. et YAVUZ, I. « Index of resolution quality for large eddy simulations ». *Journal of Fluids Engineering* 127 (2005), p. 949–958 (cf. p. 88, 89, 148, 149).
- [44] CHAI, X., IYER, P. S. et MAHESH, K. « Numerical study of high speed jets in crossflow ». *Journal of Fluid Mechanics* 785 (2015), p. 152–188 (cf. p. 72, 73, 78, 79, 95, 99, 105).
- [45] CHAPMAN, C. J. *High Speed Flow*. Cambridge University Press, 2000 (cf. p. 46).
- [46] CHENG, T., WEHRMEYER, J., PITZ, R., JARRETT, O. et NORTHAM, G. « Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame ». *Combustion and Flame* 99 (1994), p. 157–173 (cf. p. 65, 72, 137, 160, 192).
- [47] COCKS, P. A. T. « Large eddy simulation of supersonic combustion with application to scramjet engines ». Thèse de doct. University of Cambridge, 2011 (cf. p. 160).
- [48] CUENOT, B. et POINSOT, T. « Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion combustion ». *Symposium (International) on Combustion* 25 (1994), p. 1383–1390 (cf. p. 69).
- [49] CUTLER, A. D., DANEHY, P. M., SPRINGER, R. R., O', S., BYRNE, CAPRIOTTI, D. P. et DELOACH, R. « Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopic Thermometry in a Supersonic Combustor ». *AIAA Journal* 41 (2003), p. 2451–2459 (cf. p. 72, 158).
- [50] DALY, B. J. et HARLOW, F. H. « Transport Equations in Turbulence ». *Physics of Fluids (1958-1988)* 13 (1970), p. 2634–2649 (cf. p. 39).
- [51] DOMINGO, P., VERVISCH, L. et RÉVEILLON, J. « DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air ». *Combustion and Flame* 140 (2005), p. 172–195 (cf. p. 104).
- [52] DOMINGO, P., VERVISCH, L. et BRAY, K. « Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion ». *Combustion Theory and Modelling* 6 (2002), p. 529–551 (cf. p. 168).
- [53] DOPAZO, C. et O'BRIEN, E. E. « An approach to the autoignition of a turbulent mixture ». *Acta Astronautica* 1 (1974), p. 1239–1266 (cf. p. 65).

- [54] DOWDY, M. W. et NEWTON, J. « Investigation of liquid and gaseous secondary injection phenomena on a flat plate with  $M= 2.01$  to  $M= 4.54$  ». *Jet Propulsion Lab., California Institute of Technology, Pasadena, Calif., TR* (1963), p. 32–542 (cf. p. [73](#), [99](#)).
- [55] DUBOIS, T., DOMARADZKI, J. A. et HONEIN, A. « The subgrid-scale estimation model applied to large eddy simulations of compressible turbulence ». *Physics of Fluids* 14 (2002), p. 1781–1801 (cf. p. [30](#), [180](#)).
- [56] DUCROS, F, FERRAND, V, NICOUD, F, WEBER, C, DARRACQ, D, GACHERIEU, C et POINSOT, T. « Large-eddy simulation of the shock/turbulence interaction ». *Journal of Computational Physics* 152 (1999), p. 517–549 (cf. p. [37](#), [81](#), [84](#), [115](#), [136](#)).
- [57] DUWIG, C. et FUCHS, L. « Large Eddy Simulation of a H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> lifted flame in a vitiated co-flow ». *Combustion Science and Technology* 180 (2008), p. 453–480 (cf. p. [33](#), [63](#)).
- [58] DUWIG, C. et DUNN, M. J. « Large Eddy Simulation of a premixed jet flame stabilized by a vitiated co-flow : Evaluation of auto-ignition tabulated chemistry ». *Combustion and Flame* 160 (2013), p. 2879–2895 (cf. p. [33](#)).
- [59] DUWIG, C., NOGENMYR, K.-J., CHAN, C.-k. et DUNN, M. J. « Large Eddy Simulations of a piloted lean premix jet flame using finite-rate chemistry ». *Combustion Theory and Modelling* 15 (2011), p. 537–568 (cf. p. [33](#), [63](#), [148](#)).
- [60] ECHEKKI, T. et CHEN, J. H. « Direct numerical simulation of autoignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures ». *Combustion and Flame* 134 (2003), p. 169–191 (cf. p. [146](#)).
- [61] EIDSON, T. M. « Numerical simulation of the turbulent Rayleigh–Bénard problem using sub-grid modelling ». *Journal of Fluid Mechanics* 158 (1985), p. 245–268 (cf. p. [38](#)).
- [62] ERLEBACHER, G., HUSSAINI, M. Y., SPEZIALE, C. G. et ZANG, T. A. « Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows ». *Journal of Fluid Mechanics* 238 (1992), p. 155–185 (cf. p. [36](#)).
- [63] ERN, A. et GIOVANGIGLI, V. *Eglib : A general-purpose fortran library for multicomponent transport property evaluation*. Technical report. CERMICS, 2004 (cf. p. [20](#), [22](#), [23](#), [44](#)).
- [64] ERN, A. et GIOVANGIGLI, V. « Fast and Accurate Multicomponent Transport Property Evaluation ». *Journal of Computational Physics* 120 (1995), p. 105–116 (cf. p. [20–23](#), [44](#)).
- [65] FALEMPIN, F, BOUCHEZ, M. et CALABRO, M. « The microspace launcher : first step to the fully air-breathing space launcher ». *Progress in Propulsion Physics*. T. 1. EDP Sciences. 2009, p. 569–592 (cf. p. [4](#)).
- [66] FAVRE, A. « Turbulence - Space-time statistical properties and behavior in supersonic flows ». *Physics of Fluids* 26 (1983), p. 2851–2863 (cf. p. [29](#)).
- [67] FEDKIW, R. P., BARRY, M. et OSHER, S. *Numerical methods for a mixture of thermally perfect and/or calorically perfect gaseous species with chemical reactions*. Dept. of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1996 (cf. p. [45](#)).
- [68] FUREBY, C., CHAPUIS, M., FEDINA, E. et KARL, S. « CFD analysis of the HyShot II scramjet combustor ». *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011), p. 2399–2405 (cf. p. [80](#), [84](#), [132](#), [137](#), [142](#), [144](#)).
- [69] FUREBY, C. « Comparison of Flamelet and Finite Rate Chemistry LES for Premixed Turbulent Combustion ». *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2007) (cf. p. [33](#), [63](#)).
- [70] FUREBY, C. « On the Supersonic Flame Structure in the HyShot II Scramjet Combustor ». *26th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*. Boston, USA, 2017 (cf. p. [160](#), [163](#)).

- [71] GAMBA, M. et MUNGAL, M. G. « Ignition, flame structure and near-wall burning in transverse hydrogen jets in supersonic crossflow ». *Journal of Fluid Mechanics* 780 (2015), p. 226–273 (cf. p. 72, 73, 79, 80, 82, 95, 100, 103, 132–135, 140, 144, 155, 165, 192).
- [72] GAMBA, M., TERRAPON, V., SAGHAFIAN, A., MUNGAL, M. G. et PITSCH, H. « Assessment of the combustion characteristics of hydrogen transverse jets in supersonic crossflow ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2011) (cf. p. 79, 80).
- [73] GARDNER, A., HANNEMANN, K., PAULI, A. et STEELANT, J. « Ground testing of the HyShot supersonic combustion flight experiment in HEG ». *Shock Waves* (2005), p. 329–334 (cf. p. 72).
- [74] GARNIER, E., ADAMS, N. et SAGAUT, P. *Large Eddy Simulation for compressible flows*. Springer, 2009 (cf. p. 28, 34, 36, 181).
- [75] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. et CABOT, W. H. « A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model ». *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)* 3 (1991), p. 1760–1765 (cf. p. 35).
- [76] GHOSAL, S. et MOIN, P. « The basic equations for the Large Eddy Simulation of turbulent flows in complex geometry ». *Journal of Computational Physics* 118 (1995), p. 24–37 (cf. p. 28).
- [77] GILBERT, R. G., LUTHER, K. et TROE, J. « Theory of thermal unimolecular reactions in the Fall-off range. II. Weak collision rate constants ». *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie* 87 (1983), p. 169–177 (cf. p. 14, 15).
- [78] GIOVANGIGLI, V. et DARABIHA, N. « Vector computers and complex chemistry combustion ». *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*. Sous la dir. de BRAUNER, C.-M. et SCHMIDT-LAINÉ, C. NATO ASI Series. Springer Netherlands, 1988, p. 491–503 (cf. p. 23).
- [79] GOLDIN, G. « Evaluation of LES subgrid reaction models in a lifted flame ». *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2005) (cf. p. 33, 63).
- [80] GOMET, L., ROBIN, V. et MURA, A. « A multiple-inlet mixture fraction model for nonpremixed combustion ». *Combustion and Flame* 162 (2015), p. 668–687 (cf. p. 107).
- [81] GOMET, L., ROBIN, V. et MURA, A. « Influence of Residence and Scalar Mixing Time Scales in Non-Premixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows ». *Combustion Science and Technology* 184 (2012), p. 1471–1501 (cf. p. 103).
- [82] GOMET, L., ROBIN, V. et MURA, A. « Lagrangian modelling of turbulent spray combustion under liquid rocket engine conditions ». *Acta Astronautica* 94 (2014), p. 184–197 (cf. p. 62, 65, 169).
- [83] GOTTLIEB, S. et SHU, C.-W. « Total variation diminishing Runge-Kutta schemes ». *Math. Comput.* 67 (1998), p. 73–85 (cf. p. 44).
- [84] GOYNE, C. P., MCDANIEL, J. C., QUAGLIAROLI, T. M., KRAUSS, R. H. et DAY, S. W. « Dual-Mode Combustion of Hydrogen in a Mach 5, Continuous-Flow Facility ». *Journal of Propulsion and Power* 17 (2001), p. 1313–1318 (cf. p. 72).
- [85] GRINSTEIN, F. F. et KAILASANATH, K. « Three-dimensional numerical simulations of unsteady reactive square jets ». *Combustion and Flame* 101 (1995), p. 2–10 (cf. p. 33, 63).
- [86] GRINSTEIN, F. F., MARGOLIN, L. G. et RIDER, W. J. *Implicit Large Eddy Simulation : computing turbulent fluid dynamics*. Cambridge University Press, 2007 (cf. p. 33).
- [87] GRUBER, M. R. et GOSS, L. P. « Surface Pressure Measurements in Supersonic Transverse Injection Flowfields ». *Journal of Propulsion and Power* 15 (1999), p. 633–641 (cf. p. 83, 98).
- [88] GRUBER, M. R., NEJADT, A. S., CHEN, T. H. et DUTTON, J. C. « Mixing and penetration studies of sonic jets in a Mach 2 freestream ». *Journal of Propulsion and Power* 11 (1995), p. 315–323 (cf. p. 72).
- [89] GÉNIN, F. et MENON, S. « Dynamics of sonic jet injection into supersonic crossflow ». *Journal of Turbulence* 11 (2010), N4 (cf. p. 36, 72, 80).

- [90] HADJADJ, A. et KUDRYAVTSEV, A. « Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics ». *Journal of Turbulence* 6 (2005), N16 (cf. p. 81).
- [91] HICKEL, S., ADAMS, N. A. et DOMARADZKI, J. A. « An adaptive local deconvolution method for implicit LES ». *Journal of Computational Physics* 213 (2006), p. 413–436 (cf. p. 33).
- [92] HILL, D. et PULLIN, D. « Hybrid tuned center-difference-WENO method for large eddy simulations in the presence of strong shocks ». *Journal of Computational Physics* 194 (2004), p. 435–450 (cf. p. 37).
- [93] HINDMARSH, A. C., BROWN, P. N., GRANT, K. E., LEE, S. L., SERBAN, R., SHUMAKER, D. E. et WOODWARD, C. S. « SUNDIALS : Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers ». *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 31 (2005), p. 363–396 (cf. p. 44).
- [94] HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F. et BIRD, R. B. *Molecular theory of gases and liquids*. Structure of matter series. Wiley, 1964 (cf. p. 22, 23).
- [95] HUCK, R. J. et THORNTON, E. « Sutherland-Wassiljewa coefficients for the viscosities of binary rare gas mixtures ». *Proceedings of the Physical Society* 92 (1967), p. 244 (cf. p. 23).
- [96] HUNT, J. C. R., WRAY, A. A. et MOIN, P. « Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows ». *Center for Turbulence Research, Proceeding of the Summer Program* (1988) (cf. p. 82).
- [97] *IDRIS Turing*. <http://www.idris.fr/turing/> (cf. p. 53, 81, 116, 136, 170).
- [98] INGENITO, A., CECERE, D. et GIACOMAZZI, E. « Large Eddy simulation of turbulent hydrogen-fuelled supersonic combustion in an air cross-flow ». *Shock Waves* 23 (2013), p. 481–494 (cf. p. 36, 72, 76, 80, 87, 132, 140).
- [99] INGENITO, A. et BRUNO, C. « Physics and Regimes of Supersonic Combustion ». *AIAA Journal* 48 (2010), p. 515–525 (cf. p. 68, 158–161, 163, 165, 166).
- [100] IZARD, J.-F. « Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides ». Thèse de doct. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2009 (cf. p. 60).
- [101] IZARD, J.-F., LEHNASCH, G. et MURA, A. « A Lagrangian Model of Combustion in High-Speed Flows : Application to Scramjet Conditions ». *Combustion Science and Technology* 181 (2009), p. 1372–1396 (cf. p. 65, 169, 170).
- [102] JIMÉNEZ, C., DUCROS, F., CUENOT, B. et BÉDAT, B. « Subgrid scale variance and dissipation of a scalar field in large eddy simulations ». *Physics of Fluids* 13 (2001), p. 1748–1754 (cf. p. 108, 110, 112).
- [103] KARACA, M., LARDJANE, N. et FEDIOUN, I. « Implicit Large Eddy Simulation of high-speed non-reacting and reacting air/H<sub>2</sub> jets with a 5th order WENO scheme ». *Computers & Fluids* 62 (2012), p. 25–44 (cf. p. 33, 63).
- [104] KAUL, C. M., RAMAN, V., BALARAC, G. et PITSCH, H. « Numerical errors in the computation of subfilter scalar variance in large eddy simulations ». *Physics of Fluids* 21 (2009), p. 055102 (cf. p. 110, 112–114, 116, 117, 121, 126, 129).
- [105] KAWAI, S. et LELE, S. « Dynamics and mixing of a sonic jet in a supersonic turbulent crossflow ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2009) (cf. p. 72, 82, 95, 105).
- [106] KAWAI, S. et LELE, S. « Large-eddy simulation of jet mixing in supersonic turbulent crossflow ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2008) (cf. p. 72, 79, 83, 105).
- [107] KAWAI, S. et LELE, S. « Mechanisms of jet mixing in a supersonic crossflow : a study using large-eddy simulation ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2007) (cf. p. 72, 83, 93, 105).

- [108] KEE, R. J., GRGAR, J. F., SMOOKE, M. D. et MILLER, J. A. « A Fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames ». *Sandia national laboratories report SAND96-8240* (1992) (cf. p. 23).
- [109] KEE, R. J., DIXON-LEWIS, G., WARNATZ, J., COLTRIN, M. E. et MILLER, J. A. « A Fortran computer code package for the evaluation of gas-phase multicomponent transport properties ». *Sandia National Laboratories Report SAND86-8246* 13 (1986) (cf. p. 22, 24, 44).
- [110] KEE, R. J., RUPLEY, F. M., MEEKS, E. et MILLER, J. A. « CHEMKIN-III : A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics ». *Sandia national laboratories report SAND96-8216* (1996) (cf. p. 15, 24).
- [111] KEMENOV, K. A., WANG, H. et POPE, S. B. « Modelling effects of subgrid-scale mixture fraction variance in LES of a piloted diffusion flame ». *Combustion Theory and Modelling* 16 (2012), p. 611–638 (cf. p. 42, 108, 110, 112–115, 117, 121, 127, 128, 130).
- [112] KLEIN, M., SADIKI, A. et JANICKA, J. « A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations ». *Journal of Computational Physics* 186 (2003), p. 652–665 (cf. p. 79).
- [113] KOSOVIC, B., PULLIN, D. I. et SAMTANEY, R. « Subgrid-scale modeling for large-eddy simulations of compressible turbulence ». *Physics of Fluids* 14 (2002), p. 1511–1522 (cf. p. 30, 180).
- [114] KREUTZ, T. G. et LAW, C. K. « Ignition in nonpremixed counterflowing hydrogen versus heated air : Computational study with detailed chemistry ». *Combustion and Flame* 104 (1996), p. 157–175 (cf. p. 188).
- [115] LARSSON, J., VICQUELIN, R. et BERMEJO-MORENO, I. « Large eddy simulations of the HyShot II scramjet ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2011) (cf. p. 76, 78, 79, 93, 132).
- [116] LARSSON, J. et LELE, S. K. « Direct numerical simulation of canonical shock/turbulence interaction ». *Physics of Fluids* 21 (2009), p. 126101 (cf. p. 37).
- [117] LELE, S. K. « Compact finite difference schemes with spectral-like resolution ». *Journal of Computational Physics* 103 (1992), p. 16–42 (cf. p. 118).
- [118] LESIEUR, M., MÉTAIS, O. et COMTE, P. *Large-eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press, 2005 (cf. p. 34, 180).
- [119] LESIEUR, M. *Turbulence in fluids*. Fluid mechanics and its applications. Springer, 2008 (cf. p. 76, 87).
- [120] LESIEUR, M., MÉTAIS, O. et COMTE, P. *Large-eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press, 2005 (cf. p. 179).
- [121] LI, H. et BEN-DOR, G. « Reconsideration of pseudo-steady shock wave reflections and the transition criteria between them ». *Shock Waves* 5 (1995), p. 59–73 (cf. p. 47, 48).
- [122] LIBBY, P. A. et WILLIAMS, F. A., éd. *Turbulent Reacting Flows*. T. 44. Topics in Applied Physics. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1980 (cf. p. 142, 158, 160).
- [123] LILLY, D. K. « A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method ». *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4 (1992), p. 633–635 (cf. p. 35).
- [124] LINDEMANN, F. A., ARRHENIUS, S., LANGMUIR, I., DHAR, N. R., PERRIN, J. et LEWIS, W. C. M. « Discussion on “the radiation theory of chemical action” ». *Transactions of the Faraday Society* 17 (1922), p. 598–606 (cf. p. 14).
- [125] LUO, K. H. et BRAY, K. N. C. « Combustion-induced pressure effects in supersonic diffusion flames ». *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998), p. 2165–2171 (cf. p. 60).

- [126] MAGNUSSEN, B. F. et HJERTAGER, B. « On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow ». *19th AIAA aerospace meeting, St. Louis, USA*. T. 198. 1981 (cf. p. 62, 132).
- [127] MANTEL, T. et BORGHI, R. « A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation ». *Combustion and Flame* 96 (1994), p. 443–457 (cf. p. 111).
- [128] MARINOV, N. M., WESTBROOK, C. K. et PITZ, W. J. « Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen ». *8th Int. Symp. Transp. Prop.* (1995) (cf. p. 13, 18).
- [129] MARTÍN, M. P., PIOMELLI, U. et CANDLER, G. V. « Subgrid-Scale Models for Compressible Large-Eddy Simulations ». *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 13 (2000), p. 361–376 (cf. p. 32, 179, 181).
- [130] MARTÍNEZ FERRER, P. J., BUTTAY, R., LEHNASCH, G. et MURA, A. « A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier–Stokes solvers ». *Computers & Fluids* 89 (2014), p. 88–110 (cf. p. 44, 173).
- [131] MARTÍNEZ FERRER, P. J. « Etude par simulation numérique de l’auto-allumage en écoulement turbulent cisailé supersonique. » Thèse de doct. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d’Aérotechnique - Poitiers, 2013 (cf. p. 21, 33, 44).
- [132] MARTÍNEZ FERRER, P. J., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Compressibility and heat release effects in high-speed reactive mixing layers I. : Growth rates and turbulence characteristics ». *Combustion and Flame* 180 (2017), p. 284–303 (cf. p. 44).
- [133] MARTÍNEZ FERRER, P. J., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Compressibility and heat release effects in high-speed reactive mixing layers II. Structure of the stabilization zone and modeling issues relevant to turbulent combustion in supersonic flows ». *Combustion and Flame* 180 (2017), p. 304–320 (cf. p. 44).
- [134] MASTORAKOS, E., BARITAUD, T. A. et POINSOT, T. J. « Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows ». *Combustion and Flame* 109 (1997), p. 198–223 (cf. p. 142, 187).
- [135] MASTORAKOS, E. « Ignition of turbulent non-premixed flames ». *Progress in Energy and Combustion Science* 35 (2009), p. 57–97 (cf. p. 187).
- [136] MATHUR, S., TONDON, P. K. et SAXENA, S. C. « Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases ». *Molecular Physics* 12 (1967), p. 569–579 (cf. p. 23).
- [137] MICKA, D. J. « Combustion stabilization, structure, and spreading in a laboratory dual-mode scramjet combustor ». Thèse de doct. University of Michigan, 2010 (cf. p. 146).
- [138] MINAMOTO, Y., AOKI, K., TANAHASHI, M. et SWAMINATHAN, N. « DNS of swirling hydrogen–air premixed flames ». *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (2015), p. 13604–13620 (cf. p. 157).
- [139] MITCHELL, R. E. et KEE, R. J. « A general-purpose computer code for predicting chemical-kinetic behavior behind incident and reflected shocks ». *NASA STI/Recon Technical Report N* 83 (1982), p. 27169 (cf. p. 46, 47).
- [140] MOUANGUE, R., OBOUNOU, M., GOMET, L. et MURA, A. « Lagrangian Intermittent Modelling of a Turbulent Lifted Methane-Air Jet Flame Stabilized in a Vitiated Air Coflow ». *Flow, Turbulence and Combustion* 92 (2014), p. 731–765 (cf. p. 62).
- [141] MOULE, Y. « Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs. » Thèse de doct. Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d’Aérotechnique - Poitiers, 2013 (cf. p. 3).
- [142] MOULE, Y., SABELNIKOV, V. et MURA, A. « Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen–air coflowing jets ». *Combustion and Flame* 161 (2014), p. 2647–2668 (cf. p. 62, 72, 137, 142).

- [143] MOUREAU, V. R., VASILEV, O. V. et ANGELBERGER, C. « Commutation errors in Large-Eddy Simulation on moving grids : Application to piston engine flows ». *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2004) (cf. p. 28).
- [144] MURA, A. et BORCHI, R. « Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion ». *Combustion and Flame* 133 (2003), p. 193–196 (cf. p. 111).
- [145] MURA, A. et DEMOULIN, F.-X. « Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames ». *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007), p. 227–257 (cf. p. 62, 108, 169, 170).
- [146] MURA, A. et IZARD, J.-F. « Numerical Simulation of Supersonic Nonpremixed Turbulent Combustion in a Scramjet Combustor Model ». *Journal of Propulsion and Power* 26 (2010), p. 858–868 (cf. p. 65, 72).
- [147] MURA, A., ROBIN, V. et CHAMPION, M. « Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames ». *Combustion and Flame* 149 (2007), p. 217–224 (cf. p. 111, 167, 169).
- [148] NAGARAJAN, S., LELE, S. K. et FERZIGER, J. H. « A robust high-order compact method for large eddy simulation ». *Journal of Computational Physics* 191 (2003), p. 392–419 (cf. p. 118).
- [149] NICOUD, F. et DUCROS, F. « Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor ». *Flow, Turbulence and Combustion* 62 (1999), p. 183–200 (cf. p. 35, 36, 95, 108).
- [150] NICOUD, F., BAYA TODA, H., CABRIT, O., BOSE, S. et LEE, J. « Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations ». *Physics of Fluids* 23 (2011), p. 085106 (cf. p. 36).
- [151] NIEMEYER, K. E., CURTIS, N. J. et SUNG, C.-J. « pyJac : Analytical Jacobian generator for chemical kinetics ». *Computer Physics Communications* 215 (2017), p. 188–203 (cf. p. 178).
- [152] PARK, N., YOO, J. Y. et CHOI, H. « Toward improved consistency of a priori tests with a posteriori tests in large eddy simulation ». *Physics of Fluids* 17 (2004), p. 015103 (cf. p. 179).
- [153] PETERS, N. « Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion ». *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984), p. 319–339 (cf. p. 58, 61).
- [154] PETERS, N. « Laminar flamelet concepts in turbulent combustion ». *Symposium (International) on Combustion* 21 (1988), p. 1231–1250 (cf. p. 108).
- [155] PETERS, N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000 (cf. p. 55, 60).
- [156] PIERCE, C. D. et MOIN, P. « A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar ». *Physics of Fluids* 10 (1998), p. 3041–3044 (cf. p. 111, 112).
- [157] PIERCE, C. D. et MOIN, P. « Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion ». *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), p. 73–97 (cf. p. 58).
- [158] PIOMELLI, U. « Large-eddy simulation : achievements and challenges ». *Progress in Aerospace Sciences* 35 (1999), p. 335–362 (cf. p. 30, 180).
- [159] PIOMELLI, U. et CHASNOV, J. R. « Large-Eddy Simulations : Theory and Applications ». *Turbulence and Transition Modelling*. Sous la dir. d’HALLBÄCK, M., HENNINGSON, D. S., JOHANSSON, A. V. et ALFREDSSON, P. H. ERCOFTAC Series. Springer Netherlands, 1996, p. 269–336 (cf. p. 39, 87).
- [160] PIOMELLI, U. et BALARAS, E. « Wall-layer models for large-eddy simulations ». *Annual Review of Fluid Mechanics* 34 (2002), p. 349–374 (cf. p. 39, 87).
- [161] PIROZZOLI, S., BERNARDINI, M. et GRASSO, F. « Direct numerical simulation of transonic shock / boundary layer interaction under conditions of incipient separation ». *Journal of Fluid Mechanics* 657 (2010), p. 361–393 (cf. p. 37).

- [162] PITSCH, H. et DUCHAMP DE LAGENESTE, L. « Large-eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach ». *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), p. 2001–2008 (cf. p. 157).
- [163] PITSCH, H. et PETERS, N. « A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects ». *Combustion and Flame* 114 (1998), p. 26–40 (cf. p. 24, 59).
- [164] PITSCH, H. « Large-eddy simulation of turbulent combustion ». *Annual Review of Fluid Mechanics* 38 (2006), p. 453–482 (cf. p. 157).
- [165] POINSOT, T. et VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc., 2005 (cf. p. 22, 41, 42, 55, 60).
- [166] POINSOT, T. et LELE, S. « Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows ». *Journal of Computational Physics* 101 (1992), p. 104–129 (cf. p. 80).
- [167] POPE, S. B. « A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow ». *Combustion Science and Technology* 25 (1981), p. 159–174 (cf. p. 41, 62).
- [168] POPE, S. B. « PDF methods for turbulent reactive flows ». *Progress in Energy and Combustion Science* 11 (1985), p. 119–192 (cf. p. 41, 62).
- [169] POPE, S. B. « Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows ». *New Journal of Physics* 6 (2004), p. 35 (cf. p. 33, 42, 87–89, 114, 148, 149).
- [170] QUINLAN, J., MCDANIEL, J. C., DROZDA, T. G., LACAZE, G. et OEFELEIN, J. C. « A Priori Analysis of Flamelet-based Modeling for a Dual-Mode Scramjet Combustor ». *50th AIAA Joint Propulsion Conference, AIAA Propulsion and Energy Forum*. 2014 (cf. p. 104, 157, 158).
- [171] RAGAB, S. A., SHEEN, S.-C. et SREEDHAR, M. « An investigation of finite-difference methods for large-eddy simulation of a mixing layer ». *AIAA Paper 92-0554* (1992) (cf. p. 30, 115, 179, 180).
- [172] RAMAN, V., PITSCH, H. et FOX, R. O. « Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-density-function approach for simulating turbulent combustion ». *Combustion and Flame* 143 (2005), p. 56–78 (cf. p. 110, 112).
- [173] RETAUREAU, G. et MENON, S. « Experimental Studies on Flame Stability of a Fueled Cavity in a Supersonic Crossflow ». *46th AIAA Joint Propulsion Conference & Exhibit, Joint Propulsion Conferences*. 2010 (cf. p. 72).
- [174] REYNOLDS, W. C. et PERKINS, H. C. *Engineering thermodynamics*. New York : McGraw-Hill, 1977 (cf. p. 178).
- [175] ROGALLO, R. S. et MOIN, P. « Numerical Simulation of Turbulent Flows ». *Annual Review of Fluid Mechanics* 16 (1984), p. 99–137 (cf. p. 39, 87).
- [176] SABEL'NIKOV, V., DESHAIES, B. et FIGUEIRA DA SILVA, L. F. « Revisited Flamelet Model for Non-premixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows ». *Combustion and Flame* 114 (1998), p. 577–584 (cf. p. 62).
- [177] SABEL'NIKOV, V. A. et FIGUEIRA DA SILVA, L. F. « Partially stirred reactor : study of the sensitivity of the Monte-Carlo simulation to the number of stochastic particles with the use of a semi-analytic, steady-state, solution to the pdf equation ». *Combustion and Flame* 129 (2002), p. 164–178 (cf. p. 62).
- [178] SAGAUT, P. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows : An Introduction*. Springer Science & Business Media, 2006 (cf. p. 28, 33, 34, 78).
- [179] SAGHAFIAN, A., TERRAPON, V. E. et PITSCH, H. « An efficient flamelet-based combustion model for compressible flows ». *Combustion and Flame* 162 (2015), p. 652–667 (cf. p. 72, 78–80, 140).

- [180] SANDHAM, N., LI, Q. et YEE, H. « Entropy Splitting for High-Order Numerical Simulation of Compressible Turbulence ». *Journal of Computational Physics* 178 (2002), p. 307–322 (cf. p. 118).
- [181] SAXENA, P. et WILLIAMS, F. A. « Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide ». *Combustion and Flame* 145 (2006), p. 316–323 (cf. p. 18, 189).
- [182] SMAGORINSKY, J. « General circulation experiments with the primitive equations ». *Monthly Weather Review* 91 (1963), p. 99–164 (cf. p. 35, 108).
- [183] SMART, M. K., HASS, N. E. et PAULL, A. « Flight Data Analysis of the HyShot 2 Scramjet Flight Experiment ». *AIAA Journal* 44 (2006), p. 2366–2375 (cf. p. 72).
- [184] SOD, G. A. « A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws ». *Journal of Computational Physics* 27 (1978), p. 1–31 (cf. p. 45).
- [185] SREEDHARA, S. et LAKSHMISHA, K. N. « Autoignition in a non-premixed medium : DNS studies on the effects of three-dimensional turbulence ». *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), p. 2051–2059 (cf. p. 187).
- [186] STEWART, P. H., LARSON, C. W. et GOLDEN, D. M. « Pressure and temperature dependence of reactions proceeding via a bound complex. 2. Application to  $2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$  ». *Combustion and Flame* 75 (1989), p. 25–31 (cf. p. 14, 15).
- [187] STRIKWERDA, J. C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations, Second Edition*. Society for Industrial et Applied Mathematics, 2004 (cf. p. 44).
- [188] STULL, D. R., PROPHET, H., UNITED STATES et NATIONAL BUREAU OF STANDARDS. *JANAF thermochemical tables*. U.S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, 1971 (cf. p. 44, 177).
- [189] SUTHERLAND, J. C., SMITH, P. J. et CHEN, J. H. « Quantification of differential diffusion in non-premixed systems ». *Combustion Theory and Modelling* 9 (2005), p. 365–383 (cf. p. 58).
- [190] TECHER, A., LEHNASCH, G., MURA, A. et MOULE, Y. « Large Eddy Simulations of Combustion in a Supersonic Mach 2 Transverse Flow ». *20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference* (2015) (cf. p. 107).
- [191] TECHER, A., MOULE, Y., LEHNASCH, G. et MURA, A. « Mixing of a fuel jet in a supersonic cross-flow : estimation of subgrid-scale scalar fluctuations ». *AIAA Journal* (2017) (cf. p. 107).
- [192] TENAUD, C. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide compressible*. Cours à l'École de mécanique des fluides numérique. 1999 (cf. p. 39).
- [193] TERRAPON, V., HAM, F., PECNIK, R. et PITSCH, H. « A flamelet-based model for supersonic combustion ». *Annual research briefs* (2009), p. 47–58 (cf. p. 78, 80).
- [194] THOMPSON, K. W. « Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems, II ». *Journal of Computational Physics* 89 (1990), p. 439–461 (cf. p. 80).
- [195] URBIN, G. et KNIGHT, D. « Large-Eddy Simulation of a Supersonic Boundary Layer Using an Unstructured Grid ». *AIAA Journal* 39 (2001), p. 1288–1295 (cf. p. 78).
- [196] VAN DRIEST, E. R. « On Turbulent Flow Near a Wall ». *Journal of the Aeronautical Sciences* 23 (1956), p. 1007–1011 (cf. p. 35).
- [197] VANLERBERGHE, W. M., SANTIAGO, J. G., DUTTON, J. C. et LUCHT, R. P. « Mixing of a Sonic Transverse Jet Injected into a Supersonic Flow ». *AIAA Journal* 38 (2000), p. 470–479 (cf. p. 73).
- [198] VEDOVOTO, J. M., SILVEIRA NETO, A. da, FIGUEIRA DA SILVA, L. F. et MURA, A. « Influence of synthetic inlet turbulence on the prediction of low Mach number flows ». *Computers & Fluids* 106 (2015), p. 135–153 (cf. p. 79, 80).

- [199] VERVISCH, L., DOMINGO, P., LODATO, G. et VEYNANTE, D. « Scalar energy fluctuations in Large-Eddy Simulation of turbulent flames : Statistical budgets and mesh quality criterion ». *Combustion and Flame* 157 (2010), p. 778–789 (cf. p. 42, 108).
- [200] VEYNANTE, D. et KNIKKER, R. « Comparison between LES results and experimental data in reacting flows ». *Journal of Turbulence* 7 (2006), N35 (cf. p. 42).
- [201] VEYNANTE, D. et VERVISCH, L. « Turbulent combustion modeling ». *Progress in Energy and Combustion Science* 28 (2002), p. 193–266 (cf. p. 69).
- [202] VINCENT-RANDONNIER, A., MOULE, Y. et FERRIER, M. « Combustion of hydrogen in hot air flows within LAPCAT-II dual mode ramjet combustor at Onera-LAERTE facility : experimental and numerical investigation ». *19th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*. 2014 (cf. p. 4, 74, 76–80, 103, 136, 137).
- [203] VREMAN, A. W. « An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications ». *Physics of Fluids* 16 (2004), p. 3670–3681 (cf. p. 36).
- [204] VREMAN, B., GEURTS, B. et KUERTEN, H. « A priori tests of large eddy simulation of the compressible plane mixing layer ». *Journal of Engineering Mathematics* 29 (1995), p. 299–327 (cf. p. 31, 32, 179–181).
- [205] VREMAN, B. « Direct and Large-Eddy Simulation of the compressible turbulent mixing layer ». Thèse de doct. University of Twente, 1995 (cf. p. 31, 80, 136, 179, 180).
- [206] WAIDMANN, W., ALFF, F., BÖHM, M., BRUMMUND, U., CLAUSS, W. et OSCHWALD, M. « Supersonic Combustion of Hydrogen/Air in a Scramjet Combustion Chamber. » *Space Technology* 15, No. 6 (1996), p. 421–429 (cf. p. 65, 72).
- [207] WANG, H., LUO, K., LU, S. et FAN, J. « Direct numerical simulation and analysis of a hydrogen/air swirling premixed flame in a micro combustor ». *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011), p. 13838–13849 (cf. p. 157).
- [208] WARNATZ, J., MAAS, U. et DIBBLE, R. W. *Combustion : Physical and Chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*. Springer Science & Business Media, 2006 (cf. p. 16).
- [209] WATANABE, J., KOUCHI, T., TAKITA, K. et MASUYA, G. « Large-Eddy Simulations of hydrogen and ethylene injections into a supersonic crossflow ». *47th AIAA Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2011) (cf. p. 80).
- [210] WHITE, F. M. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, 2006 (cf. p. 79).
- [211] WILKE, C. R. « A viscosity equation for gas mixtures ». *The Journal of Chemical Physics* 18 (1950), p. 517–519 (cf. p. 23).
- [212] WILLIAMS, F. A. « Turbulent Combustion ». *The Mathematics of Combustion*. Sous la dir. de BUCKMASTER, J. D. Society for Industrial et Applied Mathematics, 1985, p. 97–131 (cf. p. 41).
- [213] WILLIAMS, F. A. *Combustion theory : the fundamental theory of chemically reacting flow systems*. Combustion science and engineering series. Perseus Books, 2000 (cf. p. 24, 55, 67, 68, 165).
- [214] WON, S.-H., JEUNG, I.-S., PARENT, B. et CHOI, J.-Y. « Numerical Investigation of Transverse Hydrogen Jet into Supersonic Crossflow Using Detached-Eddy Simulation ». *AIAA Journal* 48 (2010), p. 1047–1058 (cf. p. 80).
- [215] WOODWARD, P. et COLELLA, P. « The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks ». *Journal of Computational Physics* 54 (1984), p. 115–173 (cf. p. 47–49).

- 
- [216] YAMASHITA, H., SHIMADA, M. et TAKENO, T. « A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames ». *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996), p. 27–34 (cf. p. 104, 168).
- [217] YOO, C. S., SANKARAN, R. et CHEN, J. H. « Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated coflow : flame stabilization and structure ». *Journal of Fluid Mechanics* 640 (2009), p. 453–481 (cf. p. 146).
- [218] YOSHIZAWA, A. « Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling ». *Physics of Fluids (1958-1988)* 29 (1986), p. 2152–2164 (cf. p. 36, 89).
- [219] ZHAO, S. « Explicit and implicit large eddy simulation of turbulent combustion with multi-scale forcing ». Thèse de doct. Université d'Orléans, 2016 (cf. p. 33, 78).
- [220] ZHAO, S., LARDJANE, N. et FEDIOUN, I. « Comparison of improved finite-difference WENO schemes for the implicit large eddy simulation of turbulent non-reacting and reacting high-speed shear flows ». *Computers & Fluids* 95 (2014), p. 74–87 (cf. p. 33).
- [221] Ó CONAIRE, M., CURRAN, H. J., SIMMIE, J. M., PITZ, W. J. et WESTBROOK, C. K. « A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation ». *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (2004), p. 603–622 (cf. p. 18, 56, 103, 154, 193, 194).





# Simulation aux grandes échelles implicite et explicite de la combustion supersonique

Cette Thèse de doctorat est consacrée à l'étude, par simulation aux grandes échelles ou LES (*Large-eddy simulation*), d'un jet pariétal d'hydrogène sous-détendu dans un écoulement transverse supersonique d'air vicié. Cette configuration est représentative des conditions d'écoulement rencontrées dans les moteurs aérobies de type super-statoréacteurs (*scramjets*). En effet, les futurs systèmes de transport à grande vitesse dépendent fortement du développement de ce type de moteur. Dans de telles conditions, l'écoulement d'air chaud est maintenu supersonique dans la chambre de combustion afin de réduire les effets induits par l'échauffement et la dissociation de l'air. Nous étudions les processus de mélange et de combustion qui se développent en aval du jet de combustible. Ce travail s'appuie sur l'emploi d'un outil de simulation numérique *haute fidélité* : CREAMS (*Compressible REActive Multi-species Solver*) développé à l'Institut Pprime. Ce code de calcul met en oeuvre des schémas numériques d'ordre élevé : schéma Runge–Kutta d'ordre 3 pour l'intégration temporelle combiné à un schéma WENO d'ordre 7 et centré d'ordre 8 pour la discrétisation spatiale. Les simulations réalisées dans des conditions inertes permettent de caractériser l'importance des interactions choc/turbulence avec une attention particulière accordée à la description des fluctuations de composition à l'échelle non-résolue (*i.e.* sous-maille). Compte tenu de leur niveau de résolution, les simulations réactives permettent quant à elles une analyse détaillée du mode de stabilisation et des régimes de combustion turbulente rencontrés fournissant ainsi des informations très précieuses quant à l'adéquation des modélisations existantes pour ces conditions extrêmes.

**Mots clés :** Statoréacteurs à combustion supersonique / Simulation des grandes échelles / Jets pariétaux / Compressibilité / Mélange / Auto-allumage / Hydrogène / Régime de combustion supersonique.

---

## Implicit and Explicit Large-Eddy Simulation of Supersonic Combustion

This dissertation is devoted to the Large-eddy simulation (LES) study of a wall hydrogen under-expanded jet in a supersonic crossflow of vitiated air. This configuration is representative of flow conditions encountered in aerospace engines such as supersonic combustion ramjet (scramjets). Indeed, future of high-speed transport systems heavily depends on the development of this type of engine. Under such conditions, the high temperature flow of vitiated air is maintained supersonic in the combustion chamber to reduce effects of heating and dissociation. The mixing and combustion processes that develop downstream of the fuel jet are studied. This work is based on the use of a *high fidelity* numerical simulation: CREAMS (Compressible REActive Multi-species Solver) which is developed at the Pprime Institute. This computational solver makes use of high precision numerical schemes: a 3<sup>rd</sup> order Runge–Kutta scheme for the time integration combines with a 7<sup>th</sup> order WENO and 8<sup>th</sup> order centered scheme for the spatial discretisation. Non-reactive simulations allow to characterize the importance of shock/turbulence interactions with special attention paid to the description of the unresolved (*i.e.* sub-grid scale) scalar fluctuations. The reactive simulations allow to perform a detailed analysis of the stabilization mode and turbulent combustion regimes that are encountered, thus providing valuable information about the possible adequacy of the available representation for these extreme conditions.

**Keywords:** Supersonic combustion ramjet / Large-Eddy Simulation / Wall jets / Compressibility / Mixing / Auto-ignition / Hydrogen / Supersonic combustion regime.