



**HAL**  
open science

# Simulation haute-fidélité de la combustion pour les moteurs-fusées

Umut Guven

► **To cite this version:**

Umut Guven. Simulation haute-fidélité de la combustion pour les moteurs-fusées. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Normandie Université, 2018. Français. NNT: 2018NORMIR30. tel-02173327

**HAL Id: tel-02173327**

**<https://theses.hal.science/tel-02173327>**

Submitted on 4 Jul 2019

**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.



Normandie Université

## THÈSE

**Pour obtenir le diplôme de doctorat**

**Spécialité Mécanique des Fluides**

**Préparée à l'INSA de Rouen**

### **SIMULATION HAUTE-FIDÉLITÉ DE LA COMBUSTION POUR LES MOTEURS-FUSÉES**

présentée et soutenue par

**UMUT GUVEN**

**Thèse soutenue publiquement le 17 Décembre 2018**

**devant le jury composé de**

V. GIOVANGIGLI	Directeur de Recherche CMAP-CNRS, Ecole Polytechnique	Rapporteur
D. VEYNANTE	Directeur de Recherche EM2C-CNRS, CentraleSupélec	Rapporteur
M. CHAMPION	Directeur de Recherche PPRIME-CNRS, ISAE-ENSMA	Examinateur
A. VINCENT	Ingénieur de Recherche, ONERA	Examinateur
J. REVEILLON	Professeur des Universités, CORIA-CNRS, Université de Rouen	Codir. de thèse
G. RIBERT	Maître de Conférences, CORIA-CNRS, INSA de Rouen Normandie	Dir. de thèse

■ Thèse dirigée par **Guillaume RIBERT** et **Julien REVEILLON**, laboratoire **CORIA (UMR 6614 CNRS)**







## Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Guillaume Ribert d'avoir encadré ma thèse. Sa disponibilité et ses conseils ont toujours été précieux. Sans son soutien dans des moments professionnels et humains difficiles je n'aurais probablement jamais soutenu. Un grand merci aussi à tous les membres du jury pour l'intérêt montré à ce travail de thèse. Merci à Vincent Giovangigli et Denis Veynante pour avoir accepté de juger ce manuscrit en qualité de rapporteurs. Merci à Michel Champion d'avoir présidé ce jury et à Julien Réveillon et Axel Vincent d'avoir participer à ce jury. Je tiens aussi à remercier Pascale Domingo et Luc Vervisch pour m'avoir accueilli très chaleureusement dans le groupe d'étude de la combustion numérique au seins du laboratoire CORIA-UMR-CNRS-6614. J'adresse aussi de chaleureux remerciements à tout le personnel du CORIA de m'avoir accueilli en tant que doctorant et ainsi de m'avoir permis de réaliser cette thèse dans de bonnes conditions de travail.

Je souhaite maintenant remercier mes collègues du laboratoire avec lesquels j'ai passé trois années plus que formidable. Un grand merci à Baba, Lolo et Kéké avec qui j'ai partagé le bureau pendant deux ans. A Ben, Lola, Carlo pour m'avoir accueilli dans leur bureau au cours de ma première année de thèse et des conseils qui m'ont apporté. A Andrea, Alex et Nico Jaouen pour leur gentillesse. Je remercie également les autres doctorants du groupe qui ont toujours été à mes cotés : Nico Legrand, Dodo, Eurielle, JB, Brijesh, Franschesco, Yann, Hako, Lancelot et Patricia. Et bien sur, un très grand merci à Pierro le loup qui m'a toujours soutenu avec ses conseils tout le long de ma thèse.

Un pensée aussi à toute ma famille qui m'ont toujours fait confiance au cours de mes 8 années d'études sans jamais remettre en cause mes envies et mes choix.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>7</b>
1.1	L'industrie spatiale . . . . .	8
1.1.1	Les lanceurs . . . . .	8
1.1.2	Moteurs-fusées et injecteurs . . . . .	15
1.1.2.1	Moteurs-fusées . . . . .	15
1.1.2.2	Les injecteurs de moteurs-fusées . . . . .	19
1.2	Challenges scientifiques . . . . .	23
1.3	Objectives et choix méthodologiques de la thèse . . . . .	34
<b>2</b>	<b>Les Fondamentaux</b>	<b>37</b>
2.1	Les équations de l'aérothermochimie . . . . .	38
2.1.1	Description de la composition d'un mélange . . . . .	38
2.1.2	Equation d'état . . . . .	39
2.1.2.1	Equation des gaz parfaits . . . . .	39
2.1.2.2	Les équations cubiques . . . . .	39
2.1.3	Propriétés thermodynamiques . . . . .	41
2.1.3.1	Propriétés basse pression . . . . .	41
2.1.3.2	Propriétés haute pression . . . . .	42
2.1.4	Propriétés de transport . . . . .	43
2.1.4.1	La viscosité dynamique . . . . .	43
2.1.4.2	La conductivité thermique . . . . .	44
2.1.4.3	Coefficient de diffusion binaire des espèces . . . . .	45
2.1.5	Cinétique chimique . . . . .	46
2.1.6	Les équations de bilans . . . . .	47
2.1.6.1	Equation de conservation de la masse . . . . .	47
2.1.6.2	Equation de conservation de la quantité de mouvement . . . . .	47
2.1.6.3	Equation de conservation des espèces . . . . .	47
2.1.6.4	Equation de conservation de l'énergie totale non-chimique . . . . .	52
2.2	Modélisation des écoulements turbulents . . . . .	52
2.2.1	La Simulation aux Grandes Echelles des écoulements turbulents . . . . .	52
2.2.2	Les équations de conservations filtrées . . . . .	53
2.2.3	Modèles de fermeture des équations de bilan . . . . .	54
2.2.3.1	Fermeture de l'équation de la quantité de mouvement . . . . .	54
2.2.3.2	Fermeture des équations des espèces et de l'énergie . . . . .	55
2.3	Le solver SiTCom-B . . . . .	56

---

2.4	Développement réalisées au cours de cette thèse . . . . .	57
<b>3</b>	<b>Simulation aux Grandes Echelles de la combustion supersonique H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> : Application à un allumeur de moteur-fusée</b>	<b>64</b>
3.1	Introduction . . . . .	65
3.2	L'allumage . . . . .	67
3.3	Article publié dans le journal "Journal of Propulsion and Power" . . . . .	69
<b>4</b>	<b>Simulation numérique des écoulements supercritiques non-réactifs et réactifs H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> .</b>	<b>88</b>
4.1	Objectifs . . . . .	89
4.2	Introduction . . . . .	89
4.3	Configuration . . . . .	92
4.3.1	Description du cas de référence . . . . .	92
4.3.2	Conditions aux limites et initiales . . . . .	93
4.3.3	Géométrie et maillages . . . . .	95
4.3.4	Stratégie de modélisation . . . . .	95
4.4	Résultats et discussion . . . . .	97
4.4.1	Résultats non-réactif . . . . .	97
4.4.1.1	Comparaison des 3 codes . . . . .	97
4.4.1.2	Influence du maillage sur les résultats . . . . .	105
4.4.1.3	Impact du modèle de diffusion des espèces . . . . .	109
4.4.2	Résultats réactifs . . . . .	118
4.4.2.1	Flamme 1D laminaire prémélangées . . . . .	119
4.4.2.2	Couche de mélange réactive 2D . . . . .	121
4.5	Conclusion . . . . .	135
<b>5</b>	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>137</b>
5.1	Conclusions . . . . .	137
5.2	Perspectives . . . . .	140
	<b>Bibliographie</b>	<b>161</b>



# Chapitre 1

## Introduction

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>L'industrie spatiale</b>	<b>8</b>
1.1.1	Les lanceurs	8
1.1.2	Moteurs-fusées et injecteurs	15
1.1.2.1	Moteurs-fusées	15
1.1.2.2	Les injecteurs de moteurs-fusées	19
<b>1.2</b>	<b>Challenges scientifiques</b>	<b>23</b>
<b>1.3</b>	<b>Objectives et choix méthodologiques de la thèse</b>	<b>34</b>

---

## 1.1 L'industrie spatiale

### 1.1.1 Les lanceurs

Les applications spatiales deviennent de plus en plus importantes dans notre vie quotidienne. Les prévisions météorologiques, le contrôle du trafic aérien, les systèmes de navigation GPS, les communications téléphoniques, la télévision par satellite, l'accès à internet (pour bientôt) et bien d'autres activités du quotidien, seraient presque inexistantes aujourd'hui sans la technologie par satellite.

L'industrie spatiale est néanmoins relativement réduite par rapport aux autres secteurs manufacturiers : par exemple, l'industrie automobile a un chiffre d'affaire d'environ dix fois plus important que l'industrie spatiale. Cependant, le dynamisme technologique et l'importance stratégique, surtout du point de vue milliaire, octroient aux activités liées à l'espace un rôle de plus en plus crucial dans la société moderne.

L'industrie spatiale peut se décomposer en trois grandes catégories d'activité. On distingue l'activité militaire et de défense, l'activité scientifique et enfin l'activité commerciale. La première est financée en intégralité par le budget de la défense nationale des états et est fermée à la concurrence. Les programmes de recherche scientifique, tels que les satellites d'observation de la Terre, sont généralement financés par des programmes gouvernementaux. Ils sont donc aussi quasi-fermés à la concurrence dans le but de favoriser l'industrie spatiale nationale. Par exemple, aux Etats-Unis, le Buy American Act prévoit que tout satellite payé par le contribuable américain doit être lancé par une fusée fabriquée à plus de 51% aux Etats-Unis [1]. De même en Europe, le projet Galileo [2] qui vise à mettre 30 satellites en orbite moyenne (23222 Km d'altitude) pour concurrencer le système GPS a entièrement été financé par la commission européenne et intégralement lancé avec des lanceurs européens. Identiquement, en Chine et en Russie, 100% des satellites institutionnels sont mis en orbite par des fusées nationales.

Seules les activités commerciales du secteur sont donc ouvertes à la concurrence et sont majoritairement dominées par les lanceurs européens et américains. Ce marché de lancement de satellites (télécommunications, internet, téléphonie, télévision, etc.) est partagé depuis des décennies entre ces deux lanceurs. Mais, du fait des enjeux géopolitiques et économiques, des nations maîtrisant les technologies du spatial comme la Chine ou la Russie envoient eux-mêmes des satellites de télécommunication.

Concernant la fiabilité des lanceurs, point d'achoppement il y a quelques années, elle est de nos jours de moins en moins d'actualité. En 2016, seulement trois échecs ont été constatés sur 85 lancements orbitaux, ce qui représente un taux de réussite de 96%. Par exemple, la fusée européenne Ariane 5 en est à son 82ème lancement consécutif sans échec, ce qui prouve sa fiabilité et son succès. Enfin, l'année 2016 peut être considérée comme une année de réussite spatiale avec 164 satellites mis en orbite avec succès, pour une masse totale satellisée de 342.5 tonnes. A cela, il faut ajouter 5 vols habités dont 4 vers l'ISS et un vers la station spatiale chinoise, cette dernière s'étant écrasée le 1 avril 2018. Le tableau 1.1 représente les chiffres clés de l'année 2016 en fonction des pays.



Pays	Nombre de lancements	Nombre de satellites lancés	Masse satellisée (tonnes)
Etats-Unis	22	40	107.7
Russie	17	18	75.1
Chine	22	39	66.6
Europe	11	27	61.1
Japon	4	7	21.7
Inde	7	33	9.7
Israël	1	1	0.4
Corée du Nord	1	1	0.2

TABLE 1.1: Récapitulatif des lancements pour l'année 2016.

L'industrie spatiale est aussi en plein essor industriel. Le marché était estimé à \$35 Milliards (Md\$) en 2002, 110 Md\$ en 2006 avant d'atteindre 350 Md\$ en 2017. Les prévisions annoncent 1100 Md\$ pour 2040 [3]. On assiste alors à une compétition très féroce pour l'accès à l'espace. Les récents projets de lanceurs récupérables des entreprises américaines, SpaceX et BlueOrigin, ce dernier étant spécialisé dans le tourisme spatial (figure 1.1), et du lanceur low-cost de RocketLab, spécialisé quant à lui dans les fusées de petites charges, ont ensemble mis en lumière la compétition technologique du secteur spatial. Il est évident que les prix actuels sont très élevés et de nombreux projets sur des nouveaux lanceurs vont voir le jour. Le fondateur de l'entreprise américaine SpaceX, Elon Musk, avait donné le message suivant aux leaders de l'industrie spatiale en 2006 lors du salon satellite à Washington *“Salut à tous, je m'appelle Elon Musk. Je suis le fondateur de SpaceX et dans 5 ans vous êtes tous morts.”*. Tous les lancements de SpaceX jusqu'en 2008 se sont soldés par des échecs, mais grâce à ses récents succès, en particulier sur la récupération de lanceur, cette firme américaine s'est imposée dans le monde de l'aérospatial et fait maintenant trembler les plus grands.

En effet, son objectif premier était de concevoir des lanceurs capables de réduire fortement, au moins d'un facteur de dix, le coût de mise en orbite et ainsi permettre l'essor de l'industrie spatiale civile [4]. Pour atteindre cet objectif, SpaceX s'est lancé dans plusieurs programmes de recherche et de développement sur la récupération des lanceurs afin de les réutiliser par la suite.

Les débuts de SpaceX ont été difficiles. Le premier lanceur léger développé par l'entreprise (le Falcon 1) n'a connu son premier succès que lors de son quatrième vol [4], les trois premiers ayant échoué. Puis, entre 2006 et 2010, la société a développé une nouvelle fusée, la Falcon 9 qui peut mettre en orbite basse 10 tonnes de masse satellisée i.e. bien plus que les 670 Kg de la Falcon 1. De plus, tout ou partie de la fusée devait être réutilisable afin de diminuer le coup d'accès à l'espace, son principal objectif. Les premières Falcon 9 étaient donc équipées de parachutes afin d'être récupérées en mer, mais toutes les tentatives se sont soldées par des échecs (figure 1.2(a)). La cause principale était qu'au moment de la séparation des étages, le lanceur n'arrivait pas à faire face à la séparation à grande vitesse et aux contraintes thermiques. Fin 2011, SpaceX adopte une nouvelle technologie et équipe ses fusées de train d'atterrissage afin de les faire atterrir sur des plateformes de tirs, en mer ou sur terre ferme (figure 1.2(b)).

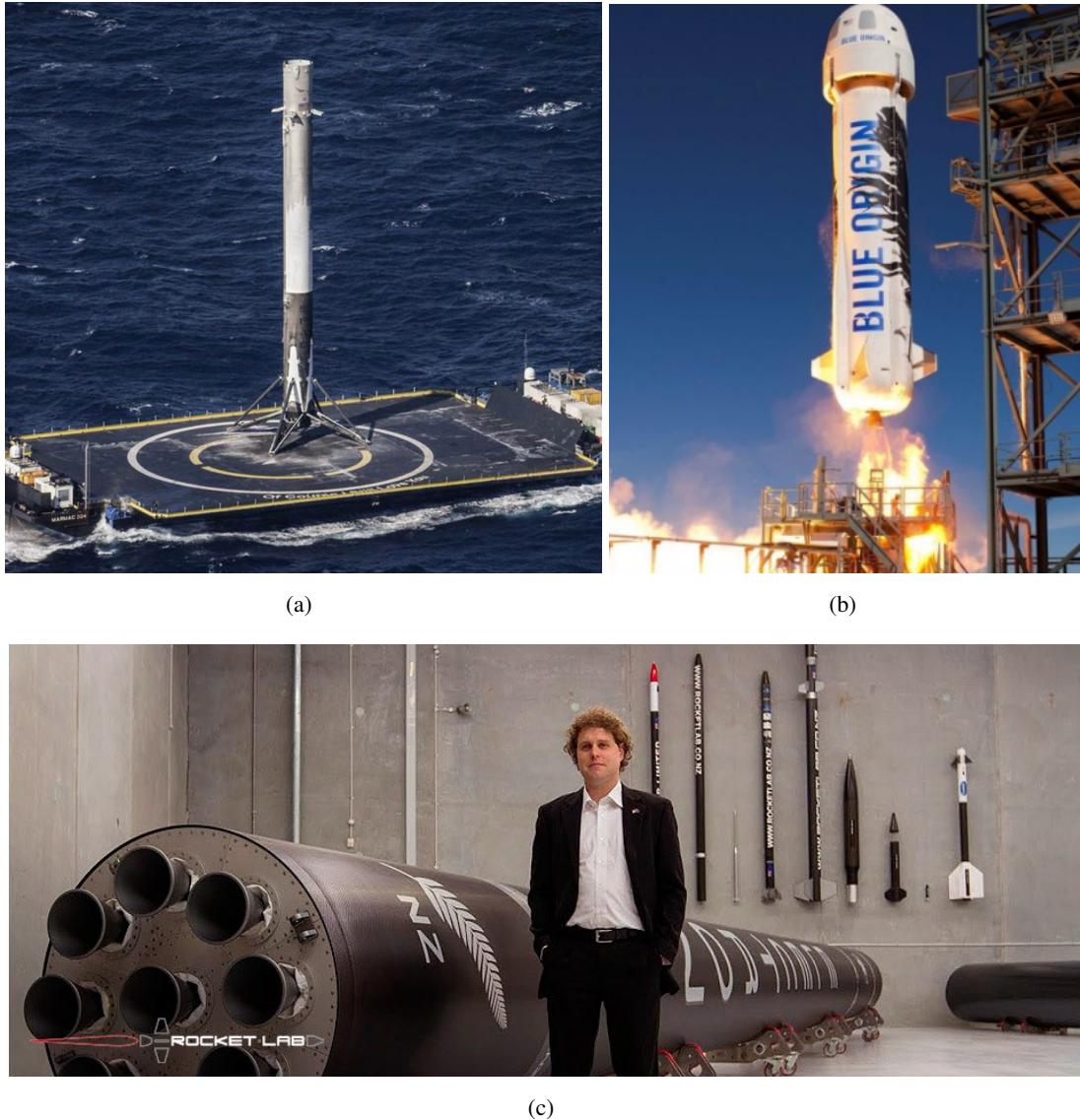
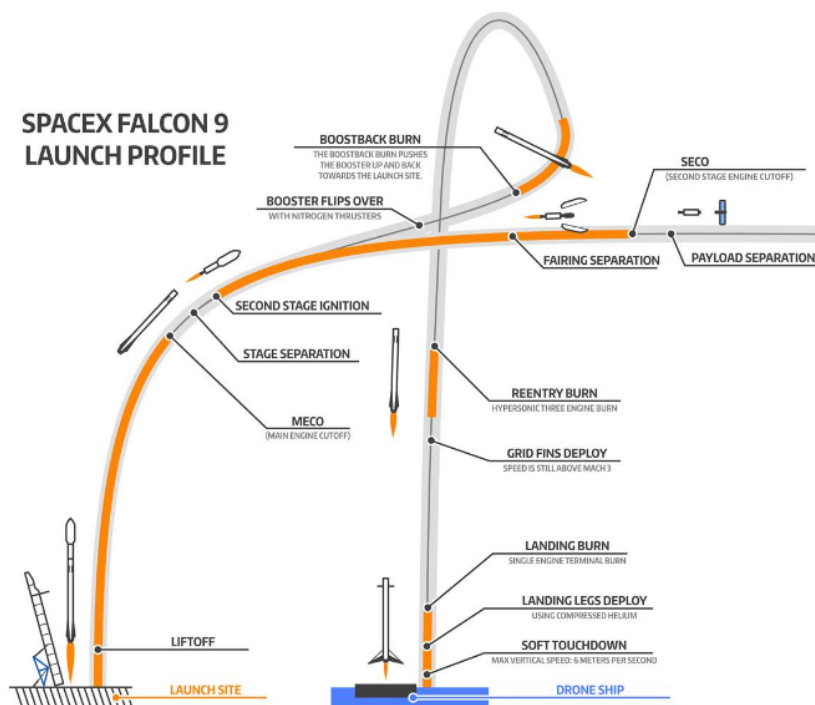


FIGURE 1.1: (a) : Lanceur récupéré de SpaceX en 2016 [Crédit : SpaceX]. (b) : Décollage de la fusée New Shepard de Blue Origin lors d'un vol d'essai en janvier 2017 [Crédit : Blue Origin]. (c) : Fusée Atea-1 de RocketLab avec son fondateur Peter Back [Crédit : RocketLab USA].

Ce défi nécessite un allumage moteur au moment de la phase d'atterrissage pour diminuer la vitesse de retombée de la fusée. Une partie de l'ergol doit être conservée et 3 des 9 moteurs du premier étage doivent fonctionner lors de cette phase d'atterrissage. En janvier 2015 a eu lieu la toute première tentative de récupération du premier étage du lanceur sur une plateforme en mer, lors d'une mission commerciale. Celle-ci sera soldée par un échec car l'engin avait réussi à s'approcher de la plateforme mais s'était ensuite renversé en mer, détruisant la majeure partie de celui-ci. En mai 2015, l'objectif était atteint. 13 ans après sa création, le premier étage d'une fusée Falcon a atterri avec succès sur une plateforme sur terre ferme. Ce succès a été suivi par deux autres en 2016. Puis en 2017, SpaceX réutilise un premier étage récupéré pour la première fois et arrive à le récupérer à nouveau.



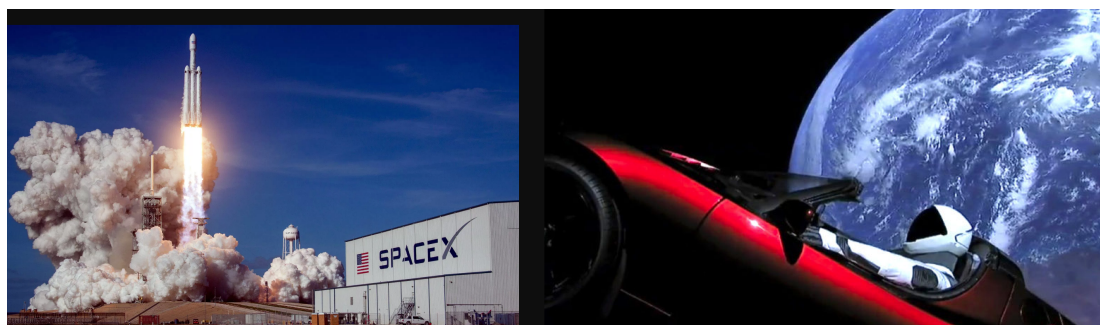
(a)



(b)

FIGURE 1.2: (a) : 22 Aout 2014, échec de récupération d'un lanceur Falcon 9 équipé de parachutes [Crédit : KWTX-TV]. (b) : Falcon 9 , les étapes de lancement d'une mission avec réatterrissage du lanceur [Crédit : SpaceX].

Enfin, le 6 février dernier (2018) a eu lieu le premier vol de la nouvelle fusée Falcon Heavy (figure 1.3(a)), reconnue comme étant la fusée la plus puissante au monde depuis la fameuse Saturn V des missions Apollo. De ce fait, ce vol a connu un retentissement planétaire (figure 1.3(b)). SpaceX vient aussi d'annoncer son entrée dans le marché du tourisme spatiale. Le 1er touriste spatiale, le milliardaire japonais Yusaku Maezawa prendra place à bord du lanceur en développement nommé le Big Falcon Rocket pour un périple autour de la lune prévu en 2023.



(a) Falcon Heavy

(b) Starman

FIGURE 1.3: Projé X : Starman en route vers Mars [Crédit : SpaceX].

Cet enchaînement de succès a créé un mouvement de panique chez tous les concurrents. Aujourd'hui, le prix annoncé d'un lancement réalisé avec SpaceX est d'environ 50 millions de dollars pour 5 tonnes de masse satellisée et pourrait descendre jusqu'à 20, voire 10 millions de dollars [3]. Son concurrent européen (Ariane 5) qui domine depuis des décennies le marché spatial, facture quant à lui un lancement à 100 millions de dollars et compte réduire ce prix à 50 millions avec sa future fusée Ariane 6. Celle-ci sera néanmoins toujours plus chère que son concurrent SpaceX [3].

La course à l'espace passe donc par la mise au point d'un lanceur capable de réaliser de plus en plus de missions et peu cher. Parmi les leaders du marché, on trouve la fusée européenne Ariane 5 (figure 1.4(c)). Cette fusée à deux étages a été conçue et fabriquée par l'Agence Spatiale Européenne (ESA) et commercialisée par la société Arianespace. Elle a été principalement construite pour placer des charges lourdes en orbite basse (jusqu'à 21 T) et des satellites en orbite géostationnaire (jusqu'à 10,5 T). Le corps de cette fusée est principalement constitué d'un alliage d'aluminium, qui a la caractéristique d'être léger.

Le premier étage d'Ariane 5 est composé d'un corps central à propulsion cryotechnique, réalisé avec un moteur Vulcain utilisant des ergols cryotechniques, associant de l'hydrogène à de l'oxygène liquide. Avec une poussée de 1350 kN, ce moteur n'assure qu'environ 10% de la poussée produite lors du décollage. Le reste est réalisé par les deux boosters à poudre, aussi dit étage d'accélération à poudre (EAP). Après seulement deux minutes de combustion, ces deux boosters se séparent du corps central à 60 km d'altitude, au-dessus de l'Atlantique.

Le deuxième étage est quant à lui, composé d'un moteur HM-7B d'une poussée de 30 kN, pouvant transporter 160 tonnes d'ergols cryotechnique  $LO_x/LH_2$  ou d'un moteur Aestus d'une poussée de 65 kN, pouvant transporter 9,7 tonnes d'ergols liquide  $N_2O_4/UDHH$ , le choix du moteur de ce dernier dépendant de la mission. Enfin, ce moteur ne s'allume qu'une seule fois et n'est pas rallumable en vol, dans les conditions de l'espace.

De son côté, SpaceX dispose donc de la Falcon 9. C'est aussi une fusée à deux étages (figure 1.4(b)), conçue et fabriquée par SpaceX pour le lancement de satellites et de la navette spatiale Dragon en orbite. La configuration simple à deux étages de la Falcon 9 minimise le nombre d'événements de séparation. Par ailleurs, avec neuf moteurs de premier étage, elle peut accomplir sa mission en toute sécurité même en cas de coupure d'un des moteurs. Falcon 9, ainsi que le vaisseau spatial Dragon, ont

été conçus dès le départ pour transporter des humains dans l'espace. Pour ce faire, en vertu d'un accord avec la NASA, SpaceX travaille activement sur la réalisation de cet objectif. Cependant, de nombreux vols commerciaux ont aussi été réalisés avec ce lanceur. A ce jour, 61 lancements ont été réalisés avec la Falcon 9 pour seulement deux échecs.

Le premier étage de la Falcon 9 comprend neuf moteurs Merlin et des réservoirs en alliage aluminium-lithium, contenant de l'oxygène liquide et de kérosène liquide (RP-1). Après l'allumage, un système de vérification assure que tous les moteurs sont allumés pour une performance de pleine poussée avant que la fusée soit libérée pour le vol. Puis, avec une poussée supérieure à cinq Boeing 747 à pleine puissance, les moteurs Merlin lancent la fusée dans l'espace. Contrairement aux avions, la poussée d'une fusée augmente avec l'altitude. Falcon 9 génère alors plus de 7650 kN de poussée au niveau de la mer, mais atteint plus de 8280 kN de poussée dans le vide de l'espace. De plus, étant donné que la masse de la fusée diminue avec la combustion du carburant, les moteurs du premier étage sont progressivement ralentis vers la fin de la phase propulsive afin de limiter l'accélération du lanceur. Avec ses neuf moteurs Merlin du premier étage regroupés (figure 1.4(a)), la fusée Falcon 9 peut supporter jusqu'à deux arrêts du moteur pendant le vol et mener sa mission avec succès. Il s'agit du seul moteur de fusée dans sa catégorie avec cette caractéristique majeure de fiabilité.

Le deuxième étage, propulsé par un seul moteur "Merlin vide"<sup>1</sup> fournit la charge utile au Falcon 9 pour arriver à l'orbite désirée. Le moteur du second étage s'allume quelques secondes après la séparation des étages et peut être redémarré plusieurs fois, pour placer plusieurs charges utiles sur différentes orbites. Comme le premier étage, le deuxième étage est fait d'un alliage d'aluminium-lithium à haute résistance.

La dernière fusée développée par SpaceX est la Falcon Heavy (figure 1.4(b)). Elle est la fusée opérationnelle la plus puissante au monde depuis la fameuse Saturn V de la mission Apollo. En effet, avec la capacité de monter en orbite près de 64 tonnes de masse satellisée - une masse supérieure à un Boeing 737 chargé de passagers, équipage, bagages et carburant - Falcon Heavy peut mettre en orbite plus de deux fois plus de charge utile que la prochaine opération de la fusée Delta IV Heavy développée par l'United Launch Alliance et ce, au tiers du coût. Avec plus de 20 000 kN de poussée au décollage, soit l'équivalent de la poussée de dix-huit Boeing 747. En terme de charge, seule la fusée lunaire Saturn V, lancée pour la dernière fois en 1973 a livré plus de charge utile en orbite.

Le premier étage est composé de trois cœurs de neuf moteurs Merlin. Les cœurs latéraux ou boosters sont connectés à la base et au sommet du réservoir d'oxygène liquide du cœur central. Les trois cœurs, avec un total de 27 moteurs Merlin génèrent 22 819 kN de poussée au décollage. Le décollage de cette fusée est réalisé par l'intermédiaire des moteurs des cœurs latéraux, puis peu de temps après, les moteurs du cœur central sont allumés. Après séparation des cœurs latéraux, les moteurs du noyau central sont accélérés jusqu'à la pleine poussée.

En s'appuyant sur la performance éprouvée de la fusée Falcon 9, les concepteurs de la Falcon Heavy ont minimisé les événements de séparation et maximisé la fiabilité. Au deuxième étage de la fusée Falcon

---

1. Le Merlin vide, est une version du Merlin optimisée pour le fonctionnement dans le vide et qui équipe le deuxième étage du lanceur Falcon 9. La tuyère est allongée pour permettre une meilleure efficacité dans le vide.



Heavy, on retrouve un moteur Merlin identique à son homologue du Falcon 9, qui délivre la charge utile de la fusée en orbite après la coupure des moteurs principaux et la séparation du premier étage. Il peut alors être redémarré plusieurs fois pour placer des charges utiles sur une variété d'orbites.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 1.4: (a) : 1er étage de la fusée Falcon 9 [Crédit : SpaceX]. (b) : Falcon 9 à gauche et Falcon Heavy à droite [Crédit : SpaceX]. (c) : Ariane 5 [Crédit :ESA].

## 1.1.2 Moteurs-fusées et injecteurs

### 1.1.2.1 Moteurs-fusées

Les moteurs-fusées sont donc un élément-clé d'une fusée. Ils peuvent soit fonctionner avec des propergols solides ou liquides, ou même encore combiner les deux (moteur à propulsion hybrid) comme lors de la mission SpaceShipOne. Les moteurs de fusée à propulsion liquide peuvent se diviser en deux catégories : on distingue les systèmes de propulsion monergol des systèmes bi-ergol. Les moteurs monergols fonctionnent soit en simple combustion du fluide froid ou en utilisant un catalyseur pour une décomposition exothermique du carburant, tels qu'avec l'hydrazine ( $N_2H_4$ ) ou le protoxyde d'azote ( $N_2O$ ) [5]. Généralement, ces types de moteurs sont utilisés dans les systèmes de propulsion de satellite à faible poussée. Les moteurs à propulsion bi-ergol utilisent pour leur part des propergols stockables sur Terre, comme l'UDMH (ldiméthylhydrazine asymétrique) ou le MMH (monométhylhydrazine) qui sont une combinaison entre un acide nitrique et un des dérivés de l'hydrazine, ou bien encore un mélange entre des propergols stockables et cryogéniques, tels que le  $LO_x$ /kérosène, ou le  $LO_x$ / $GH_2$ . Le groupe Ariespace s'intéresse aussi au couple  $LO_x/CH_4$ . La future fusée Ariane 6 sera équipée à l'horizon 2030 par un moteur Prometheus dont la propulsion sera réalisée par le couple oxygène liquide - méthane. Le méthane liquide remplacera donc l'hydrogène liquide, plus facile à stocker et à manipuler que ce dernier. De plus, sa densité et sa température de liquéfaction sont proches de celles de l'oxygène, ce qui permettra d'envisager la réalisation de certaines pièces comme les réservoirs et les turbopompes, sur une même architecture [6].

Les moteurs-fusées sont aussi des systèmes très complexes de conversion d'énergie, avec une puissance calorifique dans la chambre de combustion dépassant les valeurs typiques des centrales nucléaires (environ 3/4 GW). Alors que les moteurs de fusées à propergols solides peuvent atteindre des niveaux de puissance supérieur à 30 GW, les moteurs de fusée à propulsion liquide les plus puissants ont des puissances de pointe pouvant atteindre 20 GW. La majorité d'entre eux fonctionne néanmoins avec des valeurs inférieures à 10 GW.

La manière la plus simple de distinguer les différents types de moteurs-fusées est de les classer selon leurs méthodes de pressurisation et leurs systèmes d'alimentation en propergol au niveau de la chambre de combustion. La majorité des moteurs-fusées utilise des turbopompes afin d'amener les propergols au niveau de pression souhaité. Les moteurs de petite taille fonctionnent à basse pression, utilisent quant à eux seulement des réservoirs sous pression pour alimenter en combustible la chambre de combustion. La figure 1.5 schématise ces différents cycles de fonctionnement d'un moteur-fusée [7]. Ils sont maintenant expliqués :

#### **Cycle à alimentation par pressurisation des réservoirs :**

Il existe principalement deux types de moteurs fonctionnant en cycle d'alimentation par pressurisation du réservoir : l'auto-pressurisation et la pressurisation par un gaz neutre. L'auto-pressurisation est généralement appliquée pour les moteurs monergols, où l'alimentation en ergol de ce dernier est réalisée par l'évaporation du propergol liquide ou par décomposition thermique causée par un catalyseur. La pressurisation par un gaz neutre quant à elle est généralement utilisée avec les moteurs bi-ergols. Dans ce système une pression forte est maintenue dans le réservoir du propergol grâce à l'injection d'un gaz inerte comme de l'azote, ce dernier étant contenu dans un autre réservoir à haute pression (très souvent

supérieur à 30 MPa). Cependant, cette méthode impose que les réservoirs aient des parois suffisamment épaisses pour résister aux hautes pressions, ce qui rend cette solution très pénalisante pour les moteurs de fortes poussées ayant des réservoirs de grandes tailles. Ce système est néanmoins utilisé avec le moteur Aestus du lanceur Ariane 5.

### Cycle à alimentation par turbopompe :

Ces types de moteur utilisent le principe du turbocompresseur pour amener les propergols à une forte pression. Dans ce système, une turbopompe permet d'augmenter la pression des propergols. Celle-ci est entraînée par une turbine à gaz, elle-même alimentée par un générateur de gaz. On distingue trois principaux cycles de moteur utilisant ce principe (figure 1.5) :

- Le cycle en générateur de gaz : Ce système consiste à brûler une partie du propergol, dans un générateur de gaz afin d'utiliser les gaz chauds pour alimenter la turbine. Puis, ces gaz sont rejetés sans passer par la chambre de combustion.
- Le cycle à flux intégré (staged combustion) : Ce cycle est une amélioration du précédent. Les gaz qui sortent de la turbine sont ici ré-injectés dans la chambre de combustion afin d'accroître la poussée. Cependant ce système aboutit à des moteurs plus lourds et plus complexes.
- Le cycle "expand" : Dans ce système la turbopompe n'est pas alimentée par des gaz brûlés issus d'une première combustion, mais par la détente de l'ergol liquide qui circule dans les parois de la chambre de combustion afin de la refroidir, tout en passant d'un état liquide à un état gazeux. Ce cycle permet de supprimer le générateur de gaz, il ne permet pas a contrario d'obtenir de grandes pressions dans la chambre de combustion.

### Pressure-fed system

### Pump-fed systems

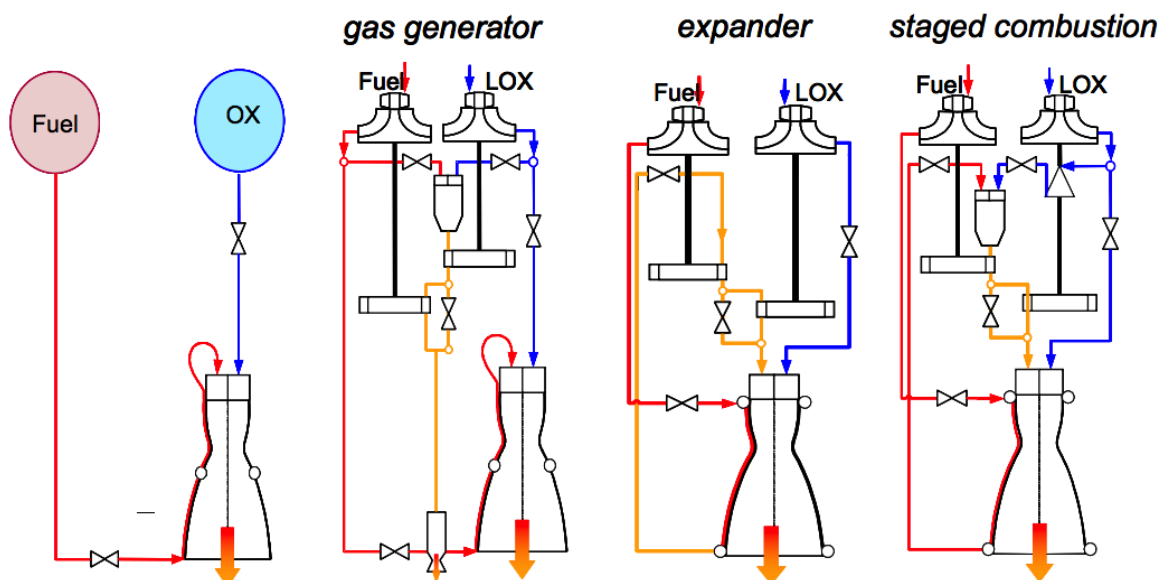


FIGURE 1.5: Les différents cycles de fonctionnement d'un moteur-fusée [5].

Nous allons maintenant voir en détail deux moteurs aux architectures différentes mais tout aussi compétitifs. Le moteur Merlin de SpaceX et le moteur Vinci de la future fusée Ariane 6.



### **Le moteur Merlin :**

Fabriqué et développé par SpaceX, le moteur Merlin (figure 1.6) équipe en intégralité les lanceurs Falcon 9 et Falcon Heavy, au nombre de 10 et 28 respectivement. Merlin possède une poussée de 850 kN au décollage et peut s'élever jusqu'à 920 kN lors de la phase de sortie de l'atmosphère. Avec un rapport poussée-poids dépassant 150, le moteur Merlin est un propulseur efficace qui possède des marges de sécurité structurelle et thermique nécessaires au transport de satellites et d'astronautes, au rallumage dans l'espace, et enfin, à sa récupération sur Terre.

Ce moteur brûle un mélange oxygène/kérosène liquide, ce qui constitue le mélange le plus utilisé par les moteurs développés récemment. Le carburant et le comburant sont injectés par un circuit d'alimentation composé d'une seule turbopompe à double-turbines, alimentée par un générateur de gaz. Cette turbopompe alimente aussi un système hydraulique qui permet d'orienter la poussée du moteur. Il utilise un cycle en générateur de gaz (voir figure 1.5).

Dans la chambre de combustion principale, la pression de combustion est de 110 bar. Des injecteurs type "Pintle" (voir 1.1.2.2) sont utilisés par le moteur Merlin. Ces injecteurs ont été utilisés pour la première fois, lors du programme Apollo pour le moteur d'atterrissage du module lunaire. Grâce aux injecteurs "Pintle", la puissance du moteur Merlin est modulable de 40% à 100% de sa puissance et il n'est pas enclin aux problèmes d'instabilité de combustion pouvant causer la destruction en entier du moteur. Cependant malgré tous ces avantages, SpaceX est la seule entreprise spatiale à utiliser ces injecteurs.

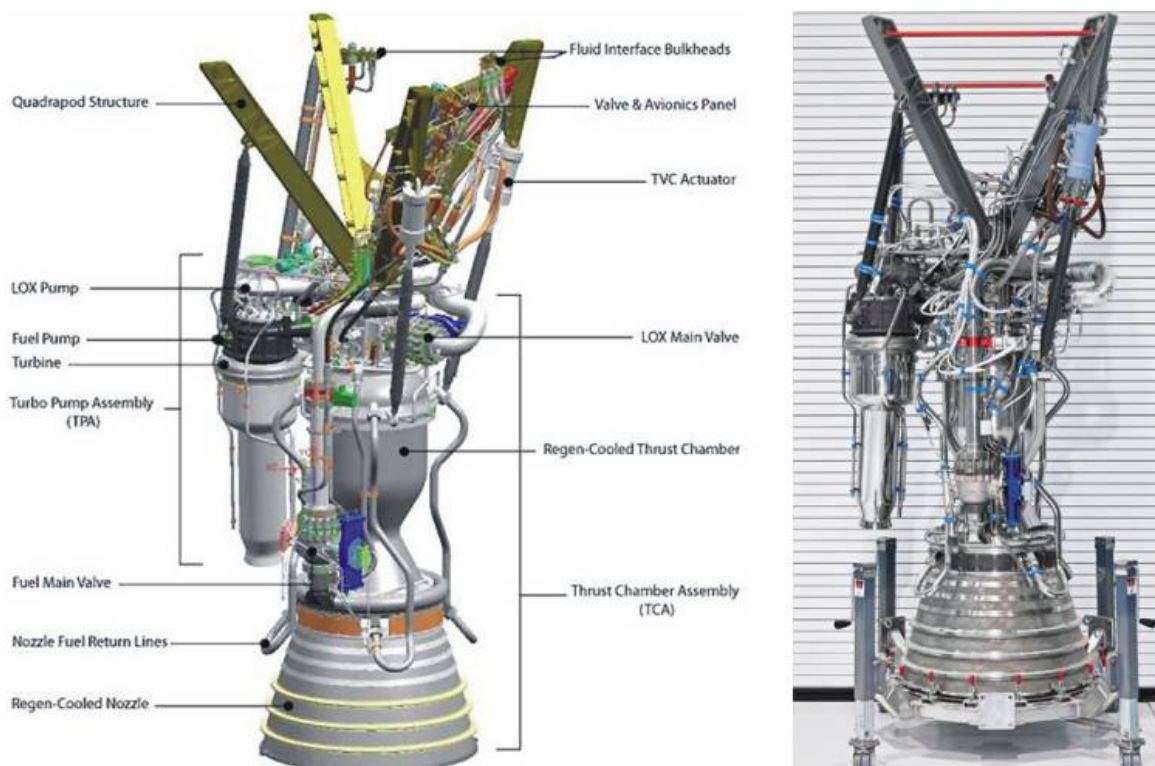


FIGURE 1.6: Le moteur Merlin [Crédit : SpaceX].

### Le moteur Vinci :

Pour combler son retard face à ses concurrents qui possèdent tous au moins un moteur d'étage supérieur rallumable en vol, l'Agence Spatiale Européenne (ESA) lance en 1999, le programme Vinci. L'objectif est de concevoir un nouveau moteur d'une poussée allant jusqu'à 18 tonnes. Avec une capacité de rallumage en vol, afin de pouvoir effectuer plusieurs missions au cours du même vol et par conséquent de réduire le coût d'accès à l'espace.

Actuellement, le programme Vinci est en phase finale. Les essais de la phase de démonstration de rallumage ont été réalisés entre 2005 et 2008 au DLR<sup>2</sup>. Au 1er juin 2011, 55 essais de moteur ont déjà été réalisés pour une durée cumulée d'environ 12 000 s [8–11]. Le premier lancement de la fusée Ariane 6, équipée du moteur Vinci est prévu au début des années 2020.

Dans Vinci, on utilise des réactifs stockés à basse température. Etant le plus énergétique, le couple  $H_2-O_2$  a été préféré aux couples kérosène- $O_2$  ou  $CH_4-O_2$  qui sont moins chers et demandent une technologie moins coûteuse. Le moteur Vinci utilise un cycle expander pour lequel tous les réactifs embarqués dans la chambre principale sont consommés, contrairement aux autres cycles. Cette particularité permet alors de fournir plus d'énergie à la poussée.

L'injection du combustible est réalisée avec 122 injecteurs coaxiaux. Pour éviter les problèmes d'allumage dans les conditions de l'espace, l'allumage de ce moteur est réalisé par un allumeur dont le but est d'injecter des gaz brûlés dans la chambre de combustion (voir chapitre 3 pour plus de détails concernant l'allumage). Une fois le moteur allumé, on assiste à la montée en pression de la chambre. En régime établi la pression de la chambre atteint 60.8 bar, ce qui est supérieur aux pressions critiques de l'oxygène et de l'hydrogène. On assiste alors à une combustion supercritique  $H_2/O_2$ .



FIGURE 1.7: (a) : Test d'allumage du moteur Vinci dans une installation du DLR [8]. (b) : Le moteur Vinci [Crédit : ESA].

---

2. DLR : Agence Spatiale Allemande.

### 1.1.2.2 Les injecteurs de moteurs-fusées

Le rôle principal de l'injecteur est de délivrer les propergols dans la chambre de combustion, dans les bonnes proportions et dans de bonnes conditions afin de produire un processus de combustion efficace et stable. En effet, chaque perte de pourcentage de l'efficacité de la combustion entraîne une perte de même ampleur de l'efficacité globale du propulseur. Cette mesure principale de la performance d'un moteur fusée dépend de son impulsion spécifique, qui est déterminée prioritairement par les propriétés de l'injecteur. De plus, les niveaux élevés d'efficacité de combustion dérivent d'une distribution uniforme du mélange oxydant/réducteur souhaitée et d'une atomisation fine des propergols liquide. Ce mélange doit se réaliser à un niveau pratiquement microscopique pour assurer des rendements de combustion approchant les 100%.

Par ailleurs, la stabilité du processus de combustion est une exigence majeure de la part des constructeurs, rendant ainsi secondaire les hautes performances et l'efficacité de l'injecteur si l'injecteur déclenche des instabilités de combustion ou des vibrations mécaniques pouvant détruire le moteur.

Il existe quatre types principaux d'injecteurs, leur utilisation va dépendre principalement de leurs applications : on distingue les injecteurs coaxiaux (swirler ou non), les injecteurs "impinging" (en impaction), les injecteurs "showerhead" et les injecteurs "Pintle".

**Injecteurs coaxiaux :** Il existe deux catégories d'injecteurs coaxiaux : le coaxial cisailé (ICC) et celui à swirl (ICS) (voir tableau 1.2). L'ICC est l'injecteur le plus utilisé aujourd'hui. Dans ce système, l'oxydant (LOx) est injecté par le jet central de l'injecteur et le combustible par l'anneau extérieur de celui-ci. Le mélange est réalisé par le contact direct des deux jets créant une couche de mélange. En général, le jet central est injecté à une vitesse plus faible que le jet extérieur, afin d'entraîner une forte force de cisaillement et donc d'améliorer le mélange [12]. Les avantages principaux sont une excellente efficacité de combustion, une très bonne flexibilité (modulabilité) et un bon environnement thermique sur la paroi [13]. Ces avantages majeurs, font de l'injecteur coaxial cisailé, l'un des plus utilisés pour les moteurs à propergol liquide. Il est utilisé avec le moteur Vulcain et Vinci de la fusée Ariane et aussi avec le moteur RS-68 du lanceur Delta IV. Cependant, ce système pose des problèmes d'instabilités de combustion et la conception devient difficile si le rayon extérieur est très faible.

L'ICS possède les mêmes caractéristiques que l'ICC excepté le fait que le jet central est mis en rotation. Cette rotation rend le mélange encore meilleur que dans le cas de l'ICC mais il pose des problèmes thermiques à la paroi et des difficultés de conception plus importantes. Ce type d'injecteur swirler est notamment utilisé avec le moteur américain RL-10.

**Injecteurs de type impactant (impinging) :** Ce type d'injecteur est principalement utilisé avec les propergols à faible taux d'évaporation, tels que le  $N_2O_4$  [12]. Cette configuration d'injecteur est majoritairement conçue avec des longueurs de chambre courtes afin de réaliser très rapidement le mélange. Les jets sont injectés avec un angle de 120 degrés à la surface d'injection, ce qui implique que les deux jets s'entrechoquent et se mélangent instantanément. Il existe 4 types d'injecteurs impinging : doublet, triplet, quadruplet et quintuplet (voir le tableau 1.2 qui résume les différents injecteurs avec les principaux avantages et désavantages). L'avantage majeur de ce système est une bonne efficacité en termes de mélange et d'évaporation. Néanmoins il est très sensible et peut causer des problèmes d'instabilités

mécaniques et de combustion. L'injecteur impinging a été utilisé principalement aux Etats-Unis avec les moteurs-fusées Thor, Atlas et Saturn pour une combustion LOx/kérosène et avec le lanceur Titan 2 qui utilise du  $N_2O_4$ .

**Injecteurs “showerhead” :** Appelé aussi pomme de douche, ces injecteurs sont ceux qui nécessitent le minimum d'efforts lors de sa fabrication. Ils possèdent les contraintes thermiques les plus faibles et posent rarement des problèmes d'instabilités. Cependant son inconvénient majeur est un très mauvais rapport de mélange, entraînant une très faible efficacité de combustion. Ceci s'explique par l'injection séparé des deux fluides, de ce fait le mélange est piloté par les grandes structures tourbillonnaires présentes dans la chambre de combustion. Il a été testé avec le lanceur expérimental américain X-15 [13].

**Injecteurs “Pintle” :** Cette configuration semble être la moins utilisée et étudiée par comparaison aux autres types d'injecteurs. Ce système d'injecteur (voir figure 1.8) est semblable à un injecteur coaxial avec une partie mobile qui permet de régler le débit des injections et l'angle d'injection, déterminant ainsi le lieu de la collision entre les deux fluides [14, 15]. L'avantage majeur de l'injecteur “Pintle” provient du bon niveau du mélange tout en évitant les problèmes d'instabilités de combustion. Il permet aussi de moduler la puissance au cours du vol grâce à sa partie mobile. Ce type d'injecteur avait notamment été utilisé avec le module lunaire de la mission Apollo et est à l'origine du succès de SpaceX via son moteur Merlin qui équipe les fusées Falcon. De nombreux groupes de recherche comme l'Université de Purdue et l'Institut National Scientifique et Technique de l'Université de Chine essaient de nos jours de développer des injecteurs Pintle [16]. Depuis plus de 40 ans, ce type d'injecteur est étudié avec la compagnie privée TRW (autrefois Space Technology Laboratory). Plusieurs campagnes d'essais ont été menées sur des moteurs expérimentaux tels que le LMDE, le TR201, le ISPS et le MMBPS [17]. Les résultats de ces essais n'ont montré aucune défaillance de vol ni d'instabilité de combustion malgré des rapports de pression testés allant de 250 :1 à 50000 :1 et avec une combinaison de 25 propergols différents. Cependant, rares sont les moteurs utilisant ce type d'injecteur, car l'absence de corrélations entre le niveau du mélange et les caractéristiques du spray nécessiterait une grande phase d'étude avant toute exploitation. D'ailleurs en URSS, ce type d'injecteur avait été testé sur le moteur NK-33 néanmoins ce moteur n'avait jamais réussi à faire décoller un lanceur [18].

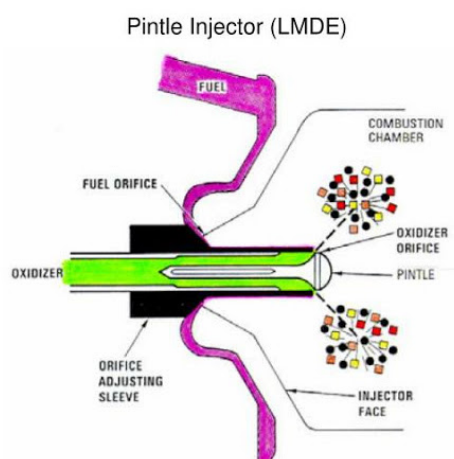


FIGURE 1.8: Injecteur Pintle [17].

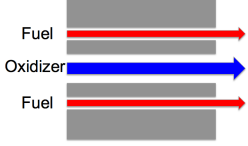
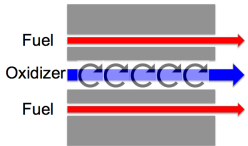

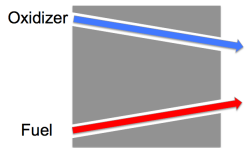

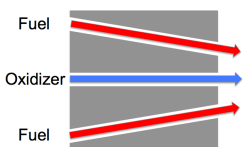
Désignation de l'élément	Configuration et direction de l'écoulement	Avantages	Inconvénients	Application
Injecteur coaxial cisailé		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon rapport de mélange</li> <li>- Bonne flexibilité</li> <li>- Bon environnement thermique à la paroi</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Problèmes d'instabilité de combustion</li> <li>- Difficile à concevoir si le rayon est trop petit</li> </ul>	Vulcain ; Vinci ; RS-68
Injecteur coaxial swirler		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Très bon rapport de mélange</li> <li>- Bonne flexibilité</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Problèmes d'instabilité de combustion et de thermique à la paroi</li> <li>- Difficile à concevoir</li> </ul>	RL-10
Impinging doublet 		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon rapport de mélange</li> <li>- Simple à concevoir</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Problèmes d'instabilités thermique et mécanique</li> <li>- Risque d'explosion avec des propergols hypergoliques</li> <li>- faiblement modulable</li> </ul>	LEM (Lunar Excursion Module)[13]
Impinging triplet 		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon rapport de mélange</li> <li>- Simple à concevoir</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Problèmes d'instabilités thermique et mécanique</li> <li>- faiblement modulable</li> </ul>	Agena ; Rocketdyne [13]

TABLE 1.2: Récapitulatif des principaux injecteurs de moteur fusée (1/2).


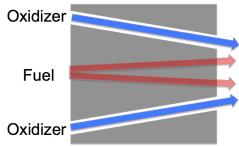

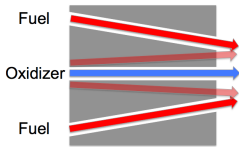
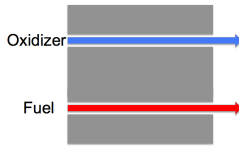
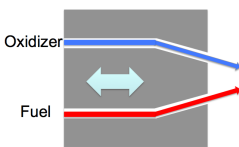
Désignation de l'élément	Configuration et direction de l'écoulement	Avantages	Inconvénients	Application
Impinging quadruplet 		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon rapport de mélange</li> <li>- Très bonne répartition thermique à la paroi</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- faiblement modulable</li> </ul>	Redstone ; Jupiter ; Thor ; Atlas booster [13]
Impinging quintuplet 		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon rapport de mélange</li> <li>- Applicable pour de large gradient de densité</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Problèmes d'instabilités thermique et mécanique</li> <li>- difficile à concevoir</li> </ul>	Moteur expérimentale [13]
Showerhead		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Pose rarement des problèmes d'instabilités</li> <li>- Très simple à concevoir</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mauvais rapport de mélange</li> <li>- Mauvaise efficacité de combustion</li> </ul>	X-15 [13]
Pintle		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Très bon rapport de mélange</li> <li>- Modulable</li> <li>- Ne pose jamais de problème d'instabilité</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Manque de corrélation sur le spray</li> </ul>	Merlin

TABLE 1.3: Récapitulatif des principaux injecteurs de moteur fusée (2/2).



## 1.2 Challenges scientifiques

Un moteur-fusée à propulsion liquide de type Vinci ou Vulcain se compose d'une plaque d'injection, d'une tuyère de sortie et d'une chambre de combustion située en amont de cette dernière [19]. Avant allumage du moteur, la pression dans cette chambre est à la pression atmosphérique pour le cas d'un allumage sur Terre (Vulcain) et très faible dans les conditions de rallumage en vol (Vinci) [20]. Dès la mise en route du moteur, les propergols cryogéniques stockés dans les réservoirs passent par une turbopompe. A la sortie de celle-ci, la pression des propergols augmente d'une manière considérable, puis ils sont injectés à haute pression dans la chambre de combustion. Dû au large gradient entre la pression de la chambre et la pression d'injection, les vitesses d'injections deviennent supersoniques. On assiste alors à des jets sous-détendus avec l'apparition de plusieurs structures de chocs. Instantanément par l'injection de gaz brûlés issus de l'allumeur dans la chambre de combustion (allumage du moteur Vinci [21]), une combustion supersonique  $H_2/O_2$  donne lieu à l'allumage du moteur. De plus, la pression de la chambre étant faible (beaucoup plus petite que les pressions critiques<sup>3</sup> de l'oxygène et de l'hydrogène), l'oxygène liquide est atomisé par l'hydrogène gazeux très rapidement. Une fois le moteur allumé, la pression augmente jusqu'à atteindre une pression supercritique, ceci étant causé par l'injection à haute pression des propergols. On observe alors une diminution des vitesses d'injection dans la chambre de combustion, les rendant ainsi subsoniques. On assiste ici à une combustion supercritique entre l'oxygène et l'hydrogène.

Le cycle de mise en route d'un moteur fusée s'avère complexe car il consiste en un couplage de plusieurs phénomènes physiques. De ce fait, la simulation entière de tous ces processus est de nos jours hors de portée. Les disciplines abordées étant d'une grande variété scientifique, on s'intéresse donc, en général à chaque problématique indépendamment. Les difficultés en terme de modélisation sont nombreuses et peuvent être répertoriées de la manière suivante :

- **L'allumage** : L'allumage est une des tâches les plus difficiles à maîtriser, surtout dans les conditions de l'espace. Un retard de l'allumage, ne serait ce que de quelques millisecondes, peut conduire à une accumulation de combustible dans la chambre de combustion et engendrer une violente surpression lors de l'inflammation de celle-ci, néfaste à tout le système. Pour ces raisons, le moteur Vulcain est allumé au sol sans jamais être éteint lors de la mission. Ces craintes techniques montrent un manque de connaissances sur l'allumage. A cela il est important de noter la rareté des bancs d'essais permettant l'étude de la transition lors de la phase d'allumage [22–24]. Ce n'est que vers le milieu des années 2000, dans le but d'étudier cette transition que le DLR a expérimenté l'allumage laser du couple  $GH_2/GO_2$  (banc M3 du DLR [25]).

D'autre part, les études numériques sont rares et souvent réalisées en 2D sur des régimes établis (RANS) [26, 27]. Ce n'est que très récemment en 2009 que Lacaze et al. [28] ont étudié par simulations aux grandes échelles (LES) le banc expérimental M3 du DLR. Même si les résultats concernant l'évolution de pression de la chambre lors de la phase transitoire sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, il est important de noter que l'allumage de cette chambre

---

3. La pression critique d'un fluide pur est sa pression au point critique, d'un point de vue thermodynamique, c'est le point à partir de laquelle la différence de masse volumique entre liquide et gaz devient nulle. A ce moment là, on ne distingue plus d'état liquide et gazeux. Si la pression d'un fluide est supérieure à sa pression critique, on dit alors que ce fluide se trouve dans un état supercritique.

est réalisé expérimentalement par l'intermédiaire d'un laser et numériquement par un dépôt d'énergie. Cette modélisation reste loin de la configuration actuelle des moteurs-fusées (voir Chapitre 3 pour plus de détails sur l'allumage).

- **Les écoulements supersoniques sous-détendus :** Dans la configuration des moteurs-fusées, les injections issues de l'allumeur et des injecteurs coaxiaux de  $LO_x$  et de  $GH_2$  sont réalisées à hautes pressions dans une chambre à très faible pression [29]. Lorsque le rapport de pressions statiques (NPR<sup>4</sup>) est de l'ordre de 10 ou plus, les fluides subissent de fortes détentes [30, 31]. Les vitesses d'injections deviennent alors supersoniques et l'on a donc un écoulement sous-détendu avec une structure en disque de Mach. La figure 1.9 illustre ce type particulier de jet.

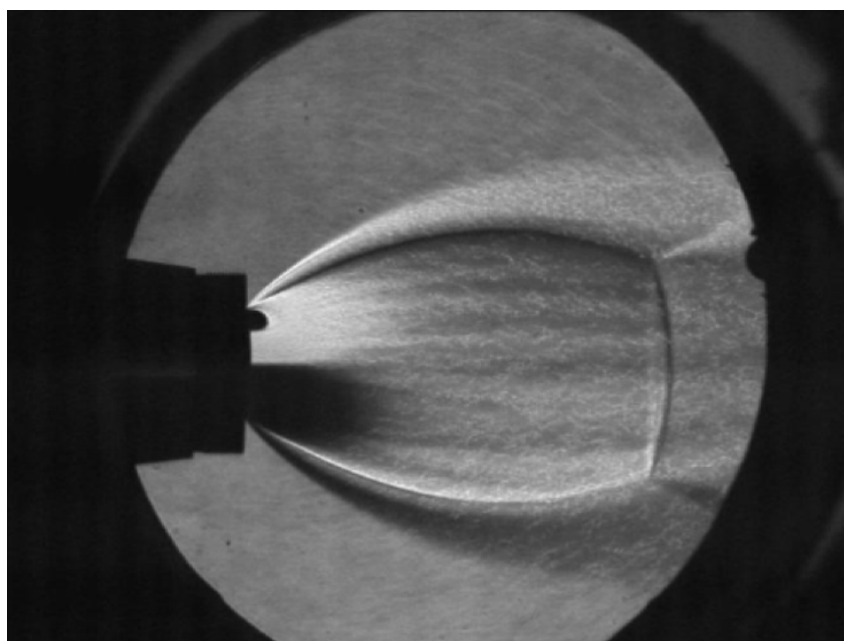


FIGURE 1.9: Expérience d'un jet sous-détendu supersonique [32].

La structure et la topologie des jets sous-détendus dépendent principalement du rapport des pressions entre l'injecteur et la chambre (NPR) mais aussi de la géométrie et de la nature du gaz. D'après Donaldson et Sredekern [31] pour un NPR supérieur à dix, l'écoulement est supersonique avant le disque de Mach, et subsonique après.

Pour ce qui est des études expérimentales sur les jets sous-détendus, elles ont débuté dans les années 60, dans un contexte de guerre froide. Ces types d'écoulements intervenant dans des missiles ou des superstratoplaneurs (scramjets), où est favorisé l'investissement de l'armée américaine et de l'armée russe, leur étude a fait l'objet d'investissements conséquents sur les budgets de défense conduisant à des avancées scientifiques conséquentes dans ce domaine. Ces études [30, 32–36] ont permis de déterminer les liens entre la longueur et le diamètre du disque de Mach, en fonction de l'espèce mise en jeu et de la valeur du NPR.

Quant aux premières simulations des écoulements sous-détendus, notamment grâce à la méthode des caractéristiques, elles ont débuté dans les années 80 [37–40]. De nos jours, de nombreux

4. Nozzle Pressure Ratio : Rapport entre la pression statique d'injection et de celle de la chambre.



codes numériques sont susceptibles de traiter ce genre de problème, principalement en LES avec des schémas de type WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) sur des maillages structurées [39, 41–43].

- **La combustion supersonique :** La combustion supersonique apparaît lors de la phase d’allumage du moteur-fusée, plus précisément lorsque les gaz brûlés et l’oxygène sont injectés dans une chambre remplie d’hydrogène à des vitesses supersoniques depuis l’allumeur. Les deux réactifs réagissent spontanément dans l’écoulement supersonique et l’on parle alors de combustion supersonique. Cependant, les travaux d’analyses des phénomènes liés à la combustion supersonique ont principalement été effectués dans le but d’obtenir une meilleure compréhension des super-stato-réacteurs (scramjet). Avec cette technologie de combustion supersonique [44–48], les scramjets peuvent atteindre des vitesses de vol supérieures à Mach 5, i.e. des performances proches des moteurs-fusées. Les configurations étudiées, avec [49] et sans [46] cavité, sont néanmoins loin des préoccupations des allumeurs de moteurs-fusées. A titre d’exemple, la figure 1.10 représente le premier vol d’un avion hypersonique réalisé par la NASA, il s’agit de l’avion expérimental X-43A [50].



FIGURE 1.10: Premier vol du X-43A en novembre 2004 (Mach=9,8) [50].

Néanmoins, la physique intrinsèque à l’écoulement supersonique observé dans un scramjet peut comporter des similitudes intéressantes, en particulier dans le cas de configurations de laboratoire. Par exemple, le brûleur supersonique H<sub>2</sub>/Air de Cheng [46], figure parmi les plus populaires. Il s’agit d’une configuration d’injecteur coaxiale, a priori simple et pourvue de données expérimentales sur la fraction massique des espèces mises en jeu et la température.

La modélisation et la simulation de la combustion supersonique a elle aussi fait l’objet de plusieurs études [51–58]. On constate que peu de modèles pour la combustion turbulente sont spécifiquement développés pour le régime d’écoulement supersonique [59]. Les techniques classiques de modélisation en subsonique sont très souvent transposées vers le cas supersonique. Le cas des flammelettes de diffusion en est un bon exemple [60]. Les approches “PDF” (Proba-

bility Density Function) qui ont tendance à donner de bons résultats sur les flammes turbulentes non-prémélangées [61, 62], ont aussi été étendues à la combustion supersonique [55, 56].

Enfin, on pourra noter le travail réalisé par Bouheraoua et al. [63] qui ont simulé avec succès le brûleur de Cheng (fig.1.11) avec le code cible de cette thèse, SiTCom-B. Ces résultats ont été obtenus avec un maillage très raffiné contenant 268 millions de cellules avec une approche “quasi-laminaire” pour la combustion turbulente. D’excellentes concordances ont été obtenues entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux.

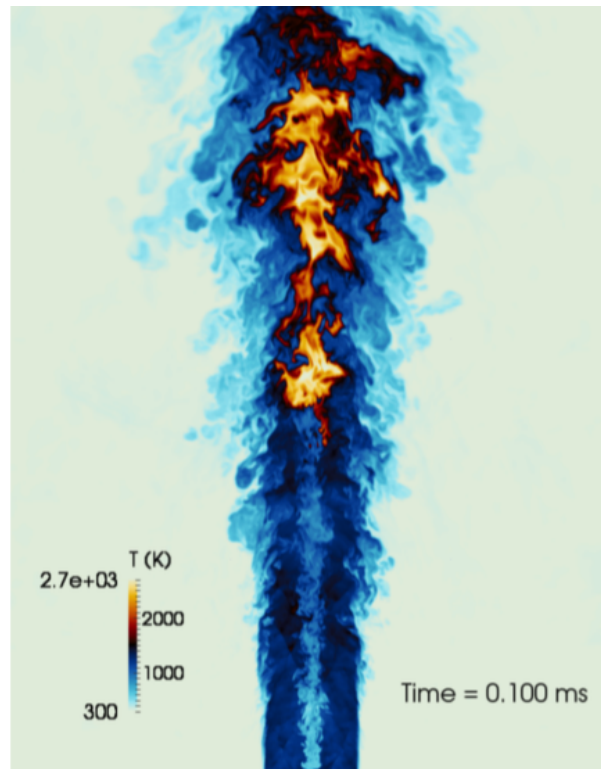


FIGURE 1.11: Simulation aux grandes échelles du brûleur de Cheng réalisée avec SiTCom-B [63].

- **Les effets diphasiques** : Lors de la phase d’allumage, la pression de la chambre étant faible, des effets diphasiques de l’oxygène sont observés. Dans chaque injecteur coaxial, le jet central d’oxygène liquide est atomisé par le jet issu de la couronne extérieur d’hydrogène gazeux.

Dans la littérature, selon Lefebvre [64], ce processus est réalisé en trois étapes. Tout d’abord a lieu l’atomisation primaire, au cours de laquelle la désintégration du jet central de l’oxygène liquide commence et des ligaments sphériques et non-sphériques se détachent du jet central. Cette phase est principalement enclenchée par les structures turbulentes du jet et dépend fortement des propriétés physiques de l’injecteur et de sa géométrie. Ensuite, a lieu l’atomisation secondaire, où le jet central d’oxygène liquide se transforme en intégralité en multitude de ligaments de tailles très variées. Enfin, lors de la dernière étape, où tout l’oxygène liquide est en forme de gouttes dispersées, on assiste alors à l’évaporation et à la combustion de ces gouttelettes d’oxygène.

De nombreuses études expérimentales ont été menées sur le spray diphasique, ce qui a permis de bien développer la théorie sur ce type d'injection. Plusieurs nombres adimensionnels ont été introduits pour décrire ces écoulements [65–67], ce qui a permis de classer les différents régimes observés expérimentalement [68]. Les grandeurs caractéristiques, tels que la répartition des gouttes, les diamètres moyens et les diamètres représentatifs, ont pratiquement tous été corrélés [64, 69].

Les simulations numériques sur le spray sont aussi nombreuses. Elles sont souvent séparées en deux catégories : l'une avec une formulation lagrangienne et l'autre avec une formulation eulérienne [70]. Dans la formulation lagrangienne, chaque goutte est suivie indépendamment. L'évolution de sa vitesse, sa position et sa taille sont résolus puis couplés avec la simulation de la phase gazeuse. Cette approche est de nos jours la plus utilisée [71–73]. Néanmoins, le temps de calcul devient très important lorsque le nombre de gouttes est grand et la parallélisation des codes de calcul nécessite un vrai savoir-faire à cause du caractère très hétérogène de la répartition des gouttes. De plus, le modèle sphérique des gouttes souvent utilisé, ne correspond pas à la réalité des ligaments, rendant le modèle moins réaliste. Dans la formulation eulérienne, deux systèmes d'équations sont résolus, l'un pour la phase liquide et l'autre pour la phase gazeuse [74–76]. Des transferts de masse, de quantité de mouvement, d'espèce et d'énergie ont lieu entre les différentes phases. L'inconvénient majeur de cette approche est de doubler le nombre d'équations à résoudre et le nombre de grandeurs à transporter.

- **Les écoulements supercritiques :** Le point critique de toute substance pure, peut être défini par la pression,  $P_c$ , et la température,  $T_c$ , les plus élevées pour lesquelles on peut encore observer une distinction entre les phases liquides et gazeuses [77]. Lorsque la pression est supérieure à la pression critique  $P_c$ , les distinctions entre les phases liquides et gazeuses disparaissent, et les effets non-idéaux (gaz réel) doivent être considérés avec précision. Pour les mélanges binaires ou multicomposants, plusieurs types de loi sont définis afin de prédire le point critique du mélange en fonction de la concentration de chaque espèce. Les études de Konynenburg et Scott [78] ont permis de classer le comportement des mélanges en six types de loi pour la détermination du point critique. Par exemple, le mélange binaire hydrogène/oxygène est défini de type I, i.e. la ligne de distinction entre les phases liquides et gazeuses est une continuité des points critiques issu du mélange de ces deux espèces en question, tandis que pour le mélange binaire éthane/azote qui est de type III, la ligne de distinction liquide/gaz s'étend de l'espèce ayant la température critique la plus élevée jusqu'au point critique de l'autre espèce mais avec un changement brutale de direction aux hautes pressions. De tels phénomènes peuvent être rencontrés dans les moteurs-fusées à propulsion liquide, dans les turbines à gaz ou dans les moteurs diesel à injection tardive [79]. Ces hauts niveaux de pression ont un impact direct sur le nombre de Reynolds de l'écoulement, par l'intermédiaire de la viscosité cinématique. Ce nombre de Reynolds augmente avec la pression, entraînant une diminution de l'échelle de Kolmogorov avec des conséquences sur les exigences en maillage [80]. De plus, dans ces conditions thermodynamiques extrêmes, les flammes deviennent très fines de l'ordre du micromètre [81, 82], ce qui signifie que les simulations numériques directes (DNS) sont actuellement hors de portée des configurations réalistes et pratiques. Un effort de modélisation est alors requis pour

la description des écoulements turbulents et pour les applications aux systèmes propulsifs. Dans le cadre des moteurs-fusées, après avoir allumé le moteur, la pression de la chambre augmente jusqu'à atteindre une pression supercritique. On assiste alors à une combustion supercritique.

Dans les moteurs fusées de type Vinci ou Vulcain, les ergols sont injectés au sein de la chambre de combustion par plusieurs injecteurs coaxiaux. L'ergol froid et dense ( $LO_x$ ) est injecté au centre, alors que l'ergol plus léger ( $GH_2$ ) est injecté par l'écoulement externe de forme annulaire. La vitesse d'injection de ce dernier est en général d'un ordre supérieur à celle du  $LO_x$ . Une couche de mélange dite interne est localisée au niveau de l'interface entre les deux fluides. Une deuxième couche de mélange est aussi développée entre le combustible et le fluide externe dans la chambre de combustion. La figure 1.12 donne une représentation schématique d'un injecteur coaxial ainsi que le champ dynamique de l'écoulement.

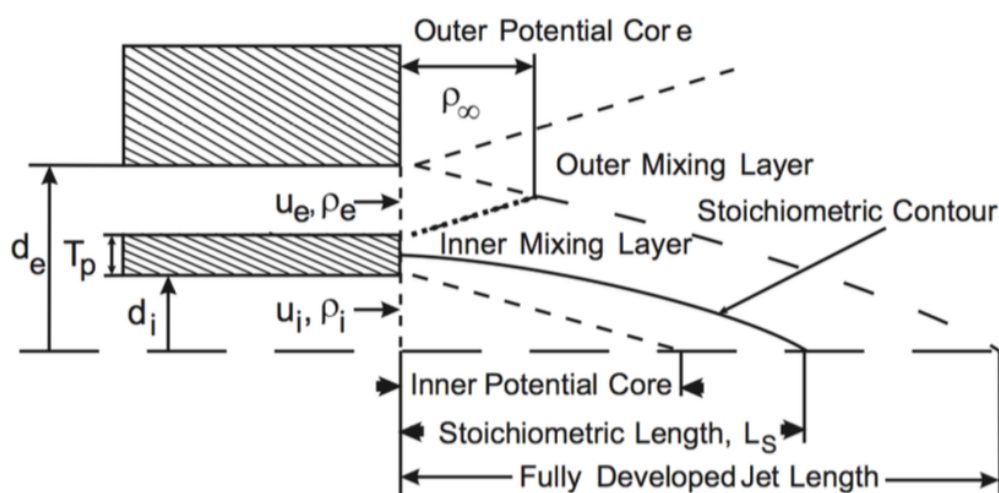


FIGURE 1.12: Représentation schématique d'un injecteur coaxial [83].

Au cours des décennies précédentes, beaucoup d'aspects liés aux phénomènes supercritiques [77, 84–87] ont été abordés : "atomisation" et "évaporation" supercritique, mélange supercritique non-réactif, thermodynamique haute-pression, structure, dynamique et stabilisation des flammes supercritiques.

Les études expérimentales sur les injections supercritiques menées par Mayer et al., depuis le milieu des années 90 [88–91] avaient pour but une meilleure compréhension de l'injection et du mélange à haute pression, dans les moteurs fusées. Afin de s'approcher au mieux des conditions de fonctionnement des moteurs-fusées, deux espèces inertes aux propriétés proches de celles de l'oxygène et de l'hydrogène ont été utilisées pour les expériences : il s'agit de l'azote et de l'hélium, qui sont plus simples à transporter et à manipuler que l'hydrogène et l'oxygène. Mayer et al. ont tiré comme conclusions de ces expériences que, lorsque la pression est supérieure aux pressions critiques des deux fluides, c'est-à-dire en régime supercritique, la tension de surface disparaissant, le processus d'atomisation ne peut plus se faire de façon classique. En effet les

ligaments et gouttes habituellement observées ne sont plus présents. A la place, une interface diffuse sépare le fluide dense du fluide léger, des poches de fluide dense peuvent être arrachées et de nouvelles structures apparaissent. La figure 1.13 illustre ces observations. Pour une pression sous-critique, la désintégration du jet par atomisation est clairement visible. Par contre, pour une pression supercritique, l'interface devient plus diffuse et il n'y a plus de goutte.

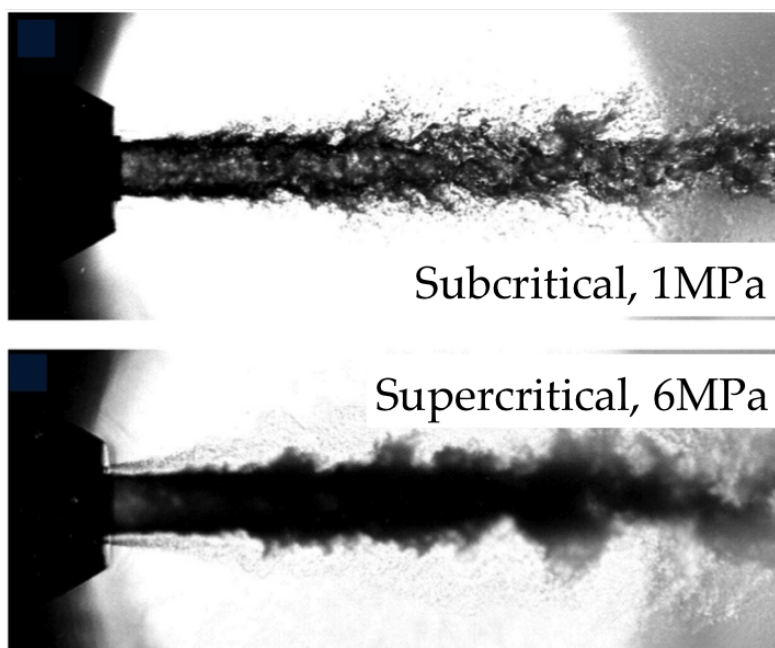


FIGURE 1.13: Visualisation du jet central d'azote entouré par de l'hélium à deux pressions différentes [91].

Concernant les bancs d'essais dédiés à l'étude de la combustion supercritique, elles ont débuté au début des années 90. On s'intéresse principalement à la combustion  $LO_x/GH_2$ . En 1991, le banc d'essai supercritique MASCOTTE voit le jour à l'ONERA [92]. Un peu plus tard le DLR montera lui aussi son propre banc d'essai supercritique, similaire à celui de l'ONERA [91]. L'analyse est principalement basée sur des images issues de rétro-éclairage et par les émissions du radical  $OH^*$ . La figure 1.14 représente un exemple du champ instantané expérimental de l'émission du radical  $OH^*$ . A haute pression, le processus de combustion est totalement différent de celui rencontré à basse pression car les notions d'atomisation et d'évaporation n'existent plus [93]. Dans ces conditions, le processus de contrôle de l'écoulement est identifié à un transfert de masse entre la phase dense supercritique et le milieu environnant. La figure 1.15 schématise une flamme sous-critique et une flamme supercritique. Les données expérimentales montrent que l'angle d'expansion de la flamme est plus faible en régime supercritique qu'en régime sous-critique. Les gouttelettes pulvérisées à pression sous-critique doivent d'abord s'évaporer avant de brûler, ce qui va conduire à des flammes plus larges. La flamme coaxiale supercritique est par conséquent, plus mince et reste proche du jet dense d'oxygène.

D'autres études menées par Singla et al. se sont intéressées plus particulièrement à la stabilisation de la flamme  $LO_x/GH_2$  dans les injecteurs coaxiaux [94]. En effet ce phénomène influence

le comportement du moteur pouvant entraîner de fortes oscillations de la flamme, de grandes fluctuations de la pression et des anomalies de combustion. Dans leurs études sur une flamme  $H_2/LO_x$  à 6.3 MPa, ils ont clairement montré que cette dernière était bien établie dans la région proche de la lèvre d'injection, sans jamais la toucher (figure 1.16). Un zoom sur la région du champ proche de l'injecteur montre que, le maximum de l'émission du radical  $OH^*$  est situé juste à côté de la lèvre de l'injecteur. Ce dernier oscille sur une distance de l'ordre d'une à deux épaisseurs de lèvre. Malgré ces avancées, les données expérimentales restent néanmoins très limitées du fait de la difficulté à travailler à haute pression.

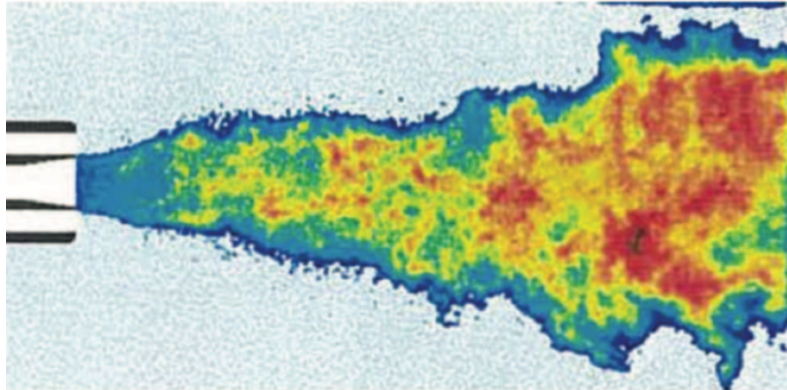


FIGURE 1.14: Champ instantané de l'émission du radical  $OH^*$  dans une flamme supercritique  $H_2/O_2$  [94].

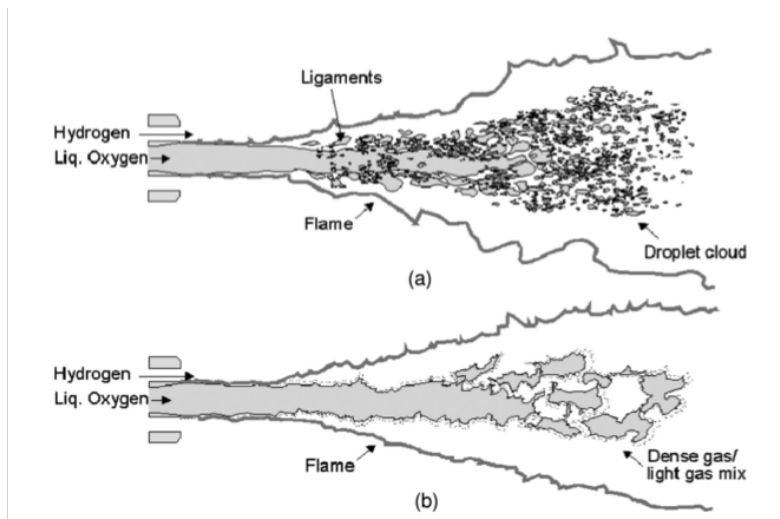


FIGURE 1.15: Représentation schématique d'une flamme jet (a) sous-critique et (b) supercritique [93].



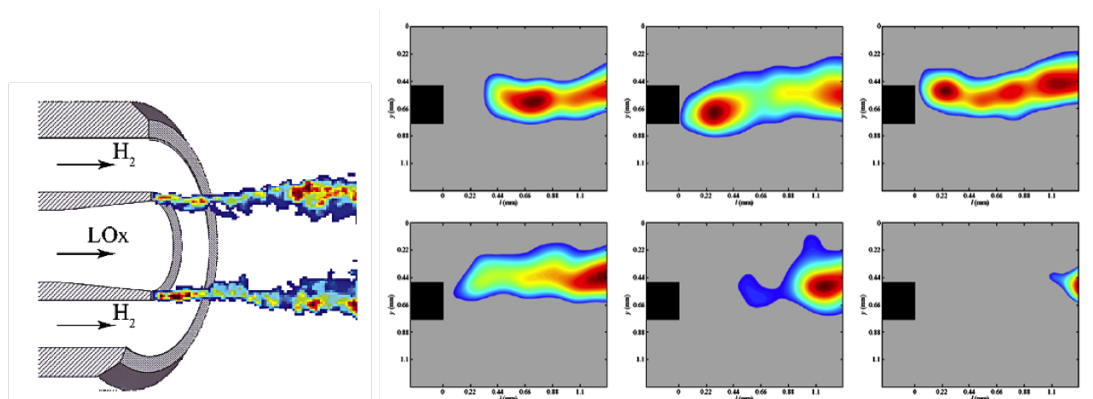


FIGURE 1.16: Schéma de l'expérience de Singla [94] (à gauche). Champs du maximum d'émission de  $OH^*$  (à droite).

Les études numériques du régime supercritique sont tout aussi difficiles à mener et restent donc limitées. De plus, il existe peu de données expérimentales pour guider les simulations et peu de modèles sont développés pour le régime supercritique. On a tendance alors à utiliser les fermetures basse pression en régime supercritique [95–98]. Bien que Ern et Giovangigli [99] aient montré la nécessité d'utiliser une approche non-idéale pour la modélisation du flux de diffusion, il est le seul avec Bellan [84] à les prendre en compte. Toutes les corrélations pour le calcul des coefficients de transport nécessitent donc une correction en pression, pour prendre en compte les effets haute pression, ce qui complique et ralentit les simulations [80]. Les études numériques sur les flammes unidimensionnelles  $H_2/O_2$  en régime supercritique de Ribert et al. [100], Giovangigli et al. [81, 101] et d'autres groupes de recherche [82, 102, 103] ont montré que l'épaisseur d'une telle flamme est de l'ordre du micromètre, ce qui complique encore plus les simulations. Une prise en compte d'une équation d'état bien adaptée à la haute pression est aussi nécessaire.

Malgré ces difficultés, parallèlement aux études expérimentales, des bases de données ont été créées à partir de DNS [104–108] pour appréhender la modélisation nécessaire dans le cadre de la simulation aux grandes échelles (LES), que ce soit pour des écoulements supercritiques avec et sans réactions chimiques. Ces simulations sont limitées à des cas où le nombre de Reynolds est faible et pour des géométries simples, des conditions plus réalistes nécessitant des maillages extrêmement raffinés. Un exemple récent d'une telle base de données a été proposé par Ruiz et al. [109] où un cas-test numérique 2D a été proposé, prenant en compte des écoulements supercritiques à grand nombre de Reynolds avec des gradients de densité élevés mais sans combustion et en deux dimensions. Cette configuration de plaque séparatrice (splitter plate) est inspirée des travaux de Oefelein [80, 106, 110, 111] où une quasi-DNS est effectuée pour un cas de combustion  $H_2/O_2$  à haute pression. Différentes LES ont été proposées dans la littérature en utilisant soit des modèles standards à basse pression pour la turbulence ou la combustion, soit des modèles dérivés des analyses DNS. En particulier, la configuration du jet non réactif a été simulée [97, 112–117] avec plus ou moins de succès en fonction du raffinement du maillage et du modèle de turbulence utilisé. Des cas réactifs ont été réalisés par LES depuis les années 90, [80, 110, 118] où les processus de mélange à haute pression et de combustion

sont traités sur une configuration de plaque de séparation avec et sans transfert thermique. Plus récemment, [111, 113, 114, 119, 120] plusieurs configurations ont été simulées à l'aide de modèles de combustion simples (quasi-laminaire ou à l'équilibre) pour la contribution à l'échelle de sous-maille des termes sources chimiques. Ribert et al. [121] ont proposé quant à eux une fermeture basée sur une méthode de tabulation [122] de flammelles supercritiques et mis en exergue le problème lié à l'utilisation d'une équation d'état de type gaz parfait [123] ou gaz réel [124] dans le cadre de la LES. En effet, pour les LES d'écoulements multi-composants et entièrement compressibles, la pression filtrée spatialement doit être évaluée. L'écoulement n'étant pas homogène dans le volume considéré, l'équation d'état liant la pression, la densité, la température et les fractions massiques des espèces ne devrait pas être directement appliquée à leurs valeurs résolues sur la maille LES. En pratique, les corrélations non résolues entre ces grandeurs sont généralement négligées dans le calcul de la pression filtrée à partir de champs résolus. Ce point semble ne plus fonctionner pour l'oxy-combustion ou dans le cadre d'équations d'état de type gaz réel.

- **Les instabilités de combustion :** Lors de la phase d'allumage du moteur, on assiste à une combustion instable due au changement de structure de l'écoulement et à la chaleur générée par la flamme. Même en régime établi, les structures turbulentes peuvent générer des fluctuations importantes du dégagement de chaleur, pouvant conduire à une combustion instable. Lors de ces instabilités, la chambre de combustion est soumise à de fortes contraintes mécaniques et thermiques, pouvant détruire entièrement le moteur [125, 126]. Un régime de combustion instable, pose aussi d'autres problèmes telles que des vibrations de la chambre de combustion et une usure accélérée du moteur [127].

Il existe donc de nombreuses difficultés à étudier expérimentalement les instabilités de combustion : risque d'explosion, conditions extrêmes de fonctionnement, etc. On notera en particulier les études réalisées sur le banc MASCOTTE de l'ONERA [128–130]. Ces études [131–133] se limitent souvent à seulement quelques injecteurs où les modes azimutaux sont indétectables [127].

Les études numériques sont aussi largement utilisées pour comprendre les instabilités de combustion. Aujourd'hui, la simulation aux grandes échelles est un outil capable de prédire le mélange turbulent [134, 135], le comportement d'une flamme stable [136] et ses interactions acoustiques [137, 138]. Un code LES compressible possède donc la capacité de prédire les instabilités de combustion dans un brûleur comme démontré par Staffelback et al. [139] sur une chambre de combustion d'hélicoptère. Les modes d'oscillations et leurs amplitudes ont pu être aussi déterminés. En 2016, Urbano et al. [140, 141] ont simulé un moteur de fusée à petite échelle, comprenant une tête d'injecteur, une chambre de combustion et une tuyère de sortie. Ce moteur-fusée possédait 42 injecteurs coaxiaux (figure 1.17), alimentant la chambre de combustion haute pression avec de l'hydrogène gazeux et de l'oxygène liquide. Une étude sur la prédiction et l'occurrence des instabilités transverses de combustion à haute fréquence a été réalisée (figure 1.18). Néanmoins, les résultats de ces études ont rarement été confrontés aux données expérimentales. Dans le cadre d'un moteur fusée, il est impossible de nos jours d'effectuer une LES complète de la chambre de combustion, de même une configuration réduite



ne permettra pas de capturer tous les modes d'oscillations, notamment les modes azimutaux.

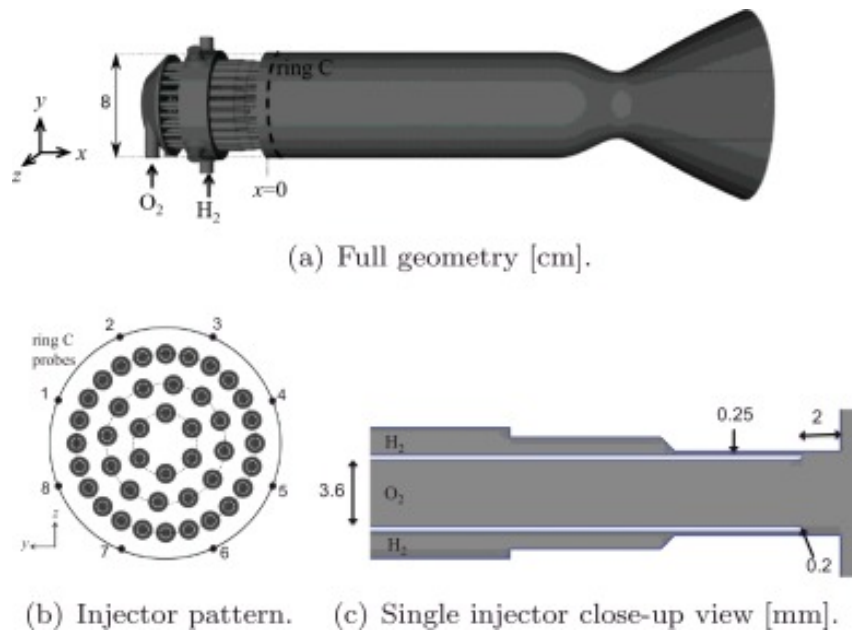


FIGURE 1.17: Configuration de la simulation du moteur fusée à petite échelle de Urbano et al. [140].

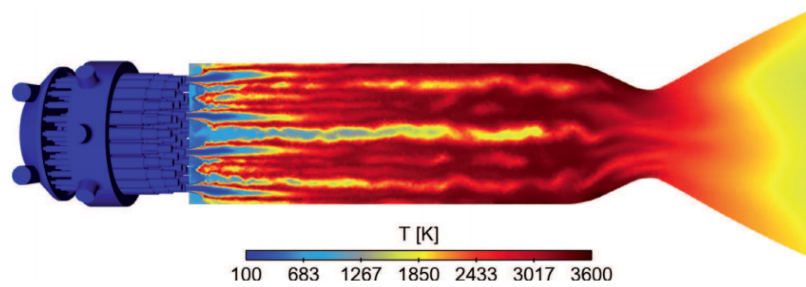


FIGURE 1.18: Champs de température de l'étude de Urbano et al. [140].

### 1.3 Objectives et choix méthodologiques de la thèse

L'objectif principal de cette thèse est d'apporter une meilleure compréhension de la combustion ayant lieu dans les moteurs-fusées. Précédemment, il a été vu que la simulation numérique entière d'un moteur-fusée est de nos jours hors de portée. Les difficultés en termes de modélisation sont nombreuses, on s'intéresse donc, en général à chaque problématique indépendamment. Au cours de cette thèse, l'étude a été focalisée sur la séquence d'allumage qui est une des tâches les plus difficiles à maîtriser, faisant intervenir plusieurs disciplines scientifiques d'une très grande variété. On a donc fait le choix de s'intéresser indépendamment à l'allumeur en lui-même (point de départ de la mise en route) et à la combustion supercritique (début du régime stabilisé).

L'organisation de ce manuscrit se présente de la manière suivante :

- **Chapitre 1** : Introduction.
- **Chapitre 2** : Ce chapitre présente les grandeurs et les équations nécessaires à la réalisation de simulations numériques d'écoulements réactifs, supersoniques ou supercritiques. Les propriétés thermodynamiques requises pour ces simulations seront introduites avec deux différentes approches : la première considère une modélisation idéale (gaz parfait) alors que la seconde utilise une modélisation non-idéale (gaz réel).
- **Chapitre 3** : Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés aux premiers instants de l'allumage d'un moteur fusée de type Vinci. Le processus complet d'allumage d'un moteur fusée a été étudié et simulé, depuis la purge de la chambre par un gaz neutre, jusqu'à l'établissement de la flamme dans celle-ci. L'écoulement sous-détendu, le mode d'allumage ainsi que la flamme supersonique résultante ont été détaillés. Cette étude a fait l'objet d'une publication dans "Journal of Power and Propulsion" [142].
- **Chapitre 4** : Dans ce chapitre, les écoulements supercritiques réactifs et non-réactifs ont été étudiés. La simulation numérique d'une flamme supercritique  $H_2/O_2$ , dans une configuration proche aux injecteurs de moteur-fusée a été réalisée en utilisant différentes stratégies de modélisation pour le transport à haute pression. Cette étude a apporté une meilleure compréhension des flammes supercritiques et elle offrira une base de donnée pour les études numériques. Ces travaux ont fait l'objet d'une publication dans "Proceeding of the Combustion Institute" [143].
- **Chapitre 5** : Ce chapitre apporte une conclusion générale de l'étude et propose des perspectives de recherche, principalement orientée sur le couplage de ces deux études (premiers instants de l'allumage et combustion supercritique représentant le début du régime stable) intervenant lors de l'allumage d'un moteur-fusée. Le couplage de ces deux extrêmes permettra de réaliser la simulation numérique entière de la mise en route d'un tel moteur-fusée.
- **Annexe** : Au cours de cette thèse, une collaboration a été réalisée avec Nathalie VALLEE, docto-

rante du CORIA sur le projet REFINE<sup>5</sup>. Son travail de thèse consistait à mettre en place un banc d'essai expérimental non-réactif d'un jet coaxial dans des conditions supercritiques. Au cours du programme d'été TRR-40<sup>6</sup>, la simulation numérique avec SiTCom-B du banc expérimental REFINE a été initiée. Le rapport de cette étude a été inséré en Annexe.

---

5. [http://www.agence-nationale-recherche.fr/projet-anr/?tx\\_lwmsuivibilan\\_pi25%BCODE%5D=ANR-13-BS09-0007](http://www.agence-nationale-recherche.fr/projet-anr/?tx_lwmsuivibilan_pi25%BCODE%5D=ANR-13-BS09-0007)

6. <http://www.sfbtr40.de/>



# Chapitre 2

## Les Fondamentaux

### Sommaire

---

<b>2.1 Les équations de l'aérothermochimie</b> . . . . .	<b>38</b>
2.1.1 Description de la composition d'un mélange . . . . .	38
2.1.2 Equation d'état . . . . .	39
2.1.2.1 Equation des gaz parfaits . . . . .	39
2.1.2.2 Les équations cubiques . . . . .	39
2.1.3 Propriétés thermodynamiques . . . . .	41
2.1.3.1 Propriétés basse pression . . . . .	41
2.1.3.2 Propriétés haute pression . . . . .	42
2.1.4 Propriétés de transport . . . . .	43
2.1.4.1 La viscosité dynamique . . . . .	43
2.1.4.2 La conductivité thermique . . . . .	44
2.1.4.3 Coefficient de diffusion binaire des espèces . . . . .	45
2.1.5 Cinétique chimique . . . . .	46
2.1.6 Les équations de bilans . . . . .	47
2.1.6.1 Equation de conservation de la masse . . . . .	47
2.1.6.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement . . . . .	47
2.1.6.3 Equation de conservation des espèces . . . . .	47
2.1.6.4 Equation de conservation de l'énergie totale non-chimique . . . . .	52
<b>2.2 Modélisation des écoulements turbulents</b> . . . . .	<b>52</b>
2.2.1 La Simulation aux Grandes Echelles des écoulements turbulents . . . . .	52
2.2.2 Les équations de conservations filtrées . . . . .	53
2.2.3 Modèles de fermeture des équations de bilan . . . . .	54
2.2.3.1 Fermeture de l'équation de la quantité de mouvement . . . . .	54
2.2.3.2 Fermeture des équations des espèces et de l'énergie . . . . .	55
<b>2.3 Le solver SiTCom-B</b> . . . . .	<b>56</b>
<b>2.4 Développement réalisées au cours de cette thèse</b> . . . . .	<b>57</b>

---

Ce chapitre présente les grandeurs et les équations nécessaires pour la réalisation de simulations numériques d'écoulements réactifs supersoniques et supercritiques.

Les propriétés thermodynamiques requises pour ces simulations sont introduites avec deux différentes approches : la première considère une modélisation idéale (gaz parfait) utilisée dans les applications basses pressions du Chapitre 3, alors que la seconde utilise une modélisation non-idéale (gaz réel) pour les applications hautes pressions du Chapitre 4.

La méthode de Simulation au Grandes Echelles (LES) utilisée dans cette thèse est aussi introduite. Tout comme le solver SiTCom-B utilisé pour l'ensemble des développements et simulations réalisés dans cette thèse.

## 2.1 Les équations de l'aérothermochimie

### 2.1.1 Description de la composition d'un mélange

La masse volumique,  $\rho$ , d'un volume de contrôle  $V$  contenant une masse  $m$  est définie par :

$$\rho = \frac{m}{V}. \quad (2.1)$$

La masse molaire moyenne,  $W$ , d'un mélange est donnée par la formule suivante :

$$W = \frac{m}{n}, \quad (2.2)$$

où  $n$  représente le nombre de mole présent dans le volume de contrôle  $V$ .

La composition d'un mélange contenant  $N_{sp}$  espèces est déterminée par les fractions massiques,  $Y_k$ , et molaires,  $X_k$ , pour  $k \in [1, N_{sp}]$ .

Celles-ci sont définies par :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad \text{et} \quad X_k = \frac{n_k}{n}, \quad (2.3)$$

où  $m_k$  et  $n_k$  sont respectivement la masse et le nombre de mole de l'espèce  $k$  dans le volume de contrôle  $V$ . Chacune des sommes des fractions massiques et molaires doit être égale à 1 afin de conserver la masse et le nombre de mole total :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k = 1. \quad (2.4)$$

Le passage des fractions molaires aux fractions massiques se fait par :

$$Y_k = \frac{W_k}{W} X_k. \quad (2.5)$$

La masse molaire d'un mélange  $W$  est alors définie par :

$$W = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k W_k \quad \text{ou} \quad \frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k}, \quad (2.6)$$

avec  $W_k$ , la masse molaire de l'espèce  $k$ .

## 2.1.2 Equation d'état

En physique, plus particulièrement en thermodynamique, une équation d'état est une équation thermodynamique reliant les variables d'état qui décrivent l'état de la matière, telles que la pression, le volume, la température ou l'énergie interne. Dans les applications à basse pression, le modèle gaz parfait est employé, tandis que pour les applications à haute pression une modélisation plus sophistiquée est nécessaire.

### 2.1.2.1 Equation des gaz parfaits

Dans la formulation gaz parfait, l'équation d'état qui relie la pression  $p^{PG}$ , la densité  $\rho$  et la température  $T$  s'écrit :

$$p^{PG} = \rho r T = \rho \frac{R}{W} T = \rho R T \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k}, \quad (2.7)$$

où  $R$  est la constante des gaz parfaits,  $R = 8.314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$ .

### 2.1.2.2 Les équations cubiques

Pour les applications hautes pressions, les équations d'état de type cubique ont été choisies. Elles sont simples à utiliser, précises (loin du point critique) et offrent un très bon compromis entre précision et coût numérique [144]. Ces équations sont des relations explicites en pression mais du troisième ordre en volume molaire ( $v$ ) ou masse volumique ( $\rho$ ). Elles sont de la forme suivante pour un fluide pur :

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha(\omega, T)}{v^2 + ubv + wb^2}, \quad (2.8)$$

ou encore,

$$P = \frac{\rho RT}{W - \rho b} - \frac{\rho^2 a\alpha(\omega, T)}{W^2 + ubW\rho + wb^2\rho^2}, \quad (2.9)$$

avec  $W$ , la masse molaire du fluide considéré et  $v$ , le volume molaire défini par :  $v = W/\rho$ .

Les équations cubiques les plus utilisées sont les équations de Van Der Waals (VDW) [145], de Soave-Redlich-Kwong (SRK) [146] et de Peng-Robinson (PR) [147].

Les constantes  $u$  et  $w$  dépendent de l'équation cubique utilisée. Elles valent respectivement, 1 et 0 pour SRK, 2 et -1 pour PR et enfin elles sont nulles pour VDW.

Les coefficients  $a$  et  $b$  permettent de prendre en compte les interactions inter-moléculaires. Le coefficient



$a$  modélise les forces attractives qui peuvent exister entre les molécules d'un fluide, et le coefficient  $b$  les forces répulsives.  $b$  est aussi appelé co-volume et peut être assimilé au volume qu'occupe une molécule de fluide considéré.

Ces deux coefficients dépendent des conditions critiques et sont définis de telle manière qu'au point critique, les conditions suivantes soient respectées :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T_c} = 0 \quad \text{et} \quad \left(\frac{\partial P^2}{\partial v^2}\right)_{T_c} = 0 \quad , \quad (2.10)$$

Ceci entraîne pour  $a$  et  $b$  :

$$a = k \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad \text{et} \quad b = k' \frac{R T_c}{P_c} \quad , \quad (2.11)$$

où  $T_c$  et  $P_c$  représentent respectivement la température et la pression critique du fluide. Les coefficients  $k$  et  $k'$  sont des constantes dépendant de l'équation cubique considérée. Avec l'équation SRK, elles valent respectivement 0,42747 et 0,08664 et avec PR, 0,45724 et 0,07780. Le coefficient  $\alpha(T, \omega)$  permet de prendre en compte la non-sphéricité des molécules composant le fluide étudié et il est calculé avec l'équation PR par :

$$\alpha(T, \omega) = \left[ 1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad , \quad (2.12)$$

pour SRK, il devient :

$$\alpha(T, \omega) = \left[ 1 + (0.48 + 1.5474\omega - 0.176\omega^2) \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad . \quad (2.13)$$

Le facteur acentrique  $\omega$  est une constante qui dépend du fluide considéré.

Dans le cas d'un mélange d'espèces, des règles de mélange doivent s'appliquer pour permettre de prendre en compte la composition du mélange. Dans le cas des équations cubiques, ces règles s'appliquent aux coefficients " $a\alpha$ " et " $b$ " qui sont les seuls paramètres qui tiennent compte de la nature du constituant. Ces règles de mélange sont principalement empiriques. Celles proposées par Van Der Waals [145] et conseillées par Reid et al. [148] ont été utilisées au cours de cette thèse. Dans les équations (2.8) et (2.9)  $a\alpha$  est ainsi remplacé par  $a\alpha_m$  et  $b$  par  $b_m$  avec :

$$b_m = \sum_i X_i b_i \quad , \quad (2.14)$$

$$a\alpha_m = \sum_i \sum_j X_i X_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j} (1 - \kappa_{ij}) \quad , \quad (2.15)$$

où,  $a\alpha_i$  et  $b_i$  sont les paramètres de l'espèce " $i$ ", calculés avec les formules précédentes. " $a\alpha_m$ " et " $b_m$ " sont les paramètres du mélange.  $\kappa_{ij}$  est le coefficient d'interaction binaire, il s'agit d'une correction permettant de prendre en compte les interactions entre espèces. Dans la majorité des cas, il est fixé à zéro.

## 2.1.3 Propriétés thermodynamiques

### 2.1.3.1 Propriétés basse pression

L'évaluation des propriétés thermodynamiques à pression atmosphérique sont généralement utilisée dans les calculs utilisant le modèle gaz parfait. Elles seront à l'origine de leurs évaluations à haute pression. L'énergie et l'enthalpie des espèces sont définies par rapport à une température de référence ( $T_0$ ). Ainsi l'enthalpie  $h_k$ , de l'espèce  $k$  est la somme de son enthalpie sensible  $h_{sk}$  et de son enthalpie standard de formation,  $\Delta h_{f,k}^0$ , prise à la température de référence  $T = T_0$  :

$$h_k = h_{sk} + \Delta h_{f,k}^0 \quad . \quad (2.16)$$

La description de l'enthalpie sensible  $h_{sk}$ , introduit les capacités calorifiques massiques à pression constante  $c_{pk} = \left( \frac{\partial h_k}{\partial T} \right)_P$ , par la relation suivante :

$$h_{sk} = \int_{T_0}^T C_{pk}(T') dT' \quad . \quad (2.17)$$

De la même manière, l'énergie interne  $e_k = h_k - \frac{RT}{W_k}$  de l'espèce  $k$  peut être séparée en une contribution sensible et une contribution standard [149] :

$$e_k = e_{sk} + \Delta h_{f,k}^0 = \left( \int_{T_0}^T C_{vk}(T') dT' - \frac{RT_0}{W_k} \right) + \Delta h_{f,k}^0 \quad , \quad (2.18)$$

où, les  $c_{vk} = \left( \frac{\partial h_k}{\partial T} \right)_V$  sont les capacités calorifiques massiques à volume constante. Pour un gaz parfait, la relation de Mayer entre  $c_{vk}$  et  $c_{pk}$  est utilisée :

$$c_{pk} = c_{vk} + \frac{R}{W_k} \quad . \quad (2.19)$$

Pour un mélange composé de  $N_{sp}$  espèces, les capacités calorifiques à pression et volume constant du mélange, s'écrivent respectivement :

$$c_p = \sum_{k=1}^{N_{sp}} c_{pk} Y_k \quad \text{et} \quad c_v = \sum_{k=1}^{N_{sp}} c_{vk} Y_k \quad . \quad (2.20)$$

En notant  $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$  on écrit, dans le cas d'un gaz parfait, la vitesse du son  $c$  comme :

$$c = \sqrt{\gamma r T} \quad . \quad (2.21)$$

La somme sur les  $N_{sp}$  espèces permet également de trouver l'enthalpie du mélange,  $h$  et son énergie interne,  $e$  :

$$h = \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k Y_k \quad \text{et} \quad e = \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_k Y_k \quad . \quad (2.22)$$

De la même manière, pour les parties sensibles de l'énergie,  $h_s$  et de l'enthalpie du mélange,  $h_s$  on a :

$$h_s = \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{sk} Y_k \quad \text{et} \quad e_s = \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_{sk} Y_k \quad . \quad (2.23)$$

On a donc finalement :

$$h = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \left( \int_{T_0}^T C_{pk}(T') dT' + \Delta h_{f,k}^0 \right) Y_k \quad , \quad (2.24)$$

et

$$e = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \left( \int_{T_0}^T C_{vk}(T') dT' - \frac{RT_0}{W_k} + \Delta h_{f,k}^0 \right) Y_k \quad . \quad (2.25)$$

En permutant la somme et l'intégrale, ces relations se simplifient de la façon suivante :

$$h = \int_{T_0}^T C_p dT' + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k = h_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad , \quad (2.26)$$

et

$$e = \int_{T_0}^T C_v dT' - \frac{RT_0}{W} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k = e_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad . \quad (2.27)$$

Finalement, en ajoutant l'énergie cinétique,  $e_c (= \frac{1}{2}u_i^2)$  à l'énergie sensible,  $e_s$ , on obtient l'énergie totale non chimique,  $E$ . Et en ajoutant  $e_c$  à l'énergie interne,  $e$ , on obtient l'énergie totale,  $e_t$ . Les définitions de l'énergie et de l'enthalpie sont synthétisées dans le tableau 2.1.

Forme	Energie	Enthalpie
Sensible	$e_s = \int_{T_0}^T C_v dT' - \frac{RT_0}{W}$	$h_s = \int_{T_0}^T C_p dT'$
Interne	$e = e_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k$	$h = h_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k$
Totale non chimique	$E = e_s + \frac{1}{2}u_i^2$	$H = h_s + \frac{1}{2}u_i^2$
Totale	$e_t = e + \frac{1}{2}u_i^2$	$h_t = h + \frac{1}{2}u_i^2$

TABLE 2.1: Synthèse des différentes définitions d'énergies et d'enthalpies.

### 2.1.3.2 Propriétés haute pression

Les relations précédentes utilisées pour estimer les propriétés thermodynamiques d'un fluide à basse pression dépendent uniquement de la température. Leurs évaluations à pression atmosphérique sont généralement utilisées pour les applications utilisant le formalisme des gaz parfaits. Cependant, la dépendance en pression de ces grandeurs doit impérativement être prise en compte pour leurs estimations à haute pression. Ces propriétés peuvent être directement tirées des relations thermodynamiques fondamentales basées sur le principe des "fonctions écarts" [148], valables pour tout état thermodynamique. Ce principe des fonctions écarts permet de décomposer les propriétés thermodynamiques en un terme "gaz parfait" auquel on vient ajouter une correction de manière à prendre en compte de sa dépendance en pression. On obtient ainsi pour l'énergie interne,  $e$ , l'enthalpie,  $h$ , l'entropie,  $s$ , et les capacités calorifiques,  $c_p$  et  $c_v$ , les relations suivantes :

$$e(T, \rho) = e^{PG}(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right]_{T} \partial \rho \quad , \quad (2.28)$$

$$h(T, P) = h^{PG}(T) + \int_{P_0}^P \left[ \frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{P} \right]_{T} \partial P \quad , \quad (2.29)$$

$$s(T, \rho) = s^{PG}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right]_{T} \partial \rho \quad , \quad (2.30)$$

$$c_v(T, \rho) = c_v^{PG}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_{\rho} \right]_{T} \partial \rho \quad , \quad (2.31)$$

$$c_p(T, \rho) = c_v^{PG}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_{\rho} \right]_{T} \partial \rho + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T} \quad . \quad (2.32)$$

Les indices ‘‘PG’’ font r ference   un  tat dans lequel le fluide se comporte comme un gaz parfait. Ces relations sont valables pour un fluide pur et aussi dans un cas de m lange. Les d riv es partielles utilis es dans ces fonctions sont directement calcul es   partir de l’ quation d’ tat utilis es. Les diff rentes d riv es partielles des  quations cubiques utilis es, sont rassembl es dans [150].

## 2.1.4 Propri t s de transport

### 2.1.4.1 La viscosit  dynamique

Pour les applications   basse pression, la viscosit  dynamique d’une esp ce  $k$  ( $\eta_k^{PG}$ ) est g n ralement prise   pression atmosph rique et d pend uniquement de la temp rature. D’apr s la th orie de Chapman-Enskog, la viscosit  d’une esp ce  $k$  peut  tre calcul e   partir de la relation suivante :

$$\eta_k^{PG} = 26.69 \frac{\sqrt{W_k T}}{\sigma_k^2 \Omega_k^{(2,2)*}} \quad , \quad (2.33)$$

o ,  $\sigma_k$  repr sente le diam tre de collision de Lennard-Jones de l’esp ce  $k$  et d’apr s Chung et al. [151], il est calcul  par la formule suivante :

$$\sigma_k = 0.809 v_{ck}^{1/3} \quad , \quad (2.34)$$

avec  $v_{ck}$ , le volume molaire critique de l’esp ce  $k$ .  $\Omega_k^{(2,2)*}$  repr sente l’int grale de collision, elle est calcul e avec la relation empirique propos e par Neufeld [148] :

$$\Omega_k^{(2,2)*} = A. (T_k^*)^{-B} + C. \exp(-DT_k^*) + E. \exp(-FT_k^*) + G. T_k^{*B} \cdot \sin(S. T_k^{*W} - H) \quad , \quad (2.35)$$

avec  $A = 1.16145$ ,  $B = 0.14874$ ,  $C = 0.52487$ ,  $D = 0.77320$ ,  $E = 2.16178$ ,  $F = 2.42787$ ,  $G = -0.00006435$ ,  $H = 7.27371$ ,  $S = 18.0323$  et  $W = -0.76830$ .

$T_k^*$  repr sente la temp rature adimensionnelle de l’esp ce  $k$  et est d finie par :

$$T_k^* = 1.2593 T_{rk} \quad , \quad (2.36)$$

o   $T_{rk}$  repr sente la temp rature r duite de l’esp ce  $k$  ( $= T/T_{ck}$ ).

Pour les applications   haute pression, Chung et al. [151] sugg rent d’utiliser pour le calcul de la viscosit  dynamique de l’esp ce  $k$  ( $\eta_k$ ), la formulation suivante :

$$\eta_k = \eta_k^{PG} \left( \frac{1}{G_2} + E_6 y \right) + \eta_{kp} \quad , \quad (2.37)$$

et

$$\eta_{kp} = \left( \frac{36.344 \cdot 10^{-6} - (W_k T_{kc})^{1/2}}{V_{kc}^{2/3}} \right) E_7 y^2 G_2 \exp \left( E_8 + \frac{E_9}{T_k^*} + \frac{E_{10}}{T_k^{*2}} \right) , \quad (2.38)$$

où,  $G_2$  est défini par :

$$G_2 = \frac{\frac{E_1(1-\exp(-E_4 y))}{y} + E_2 G_1 \exp(E_5 y) + E_3 G_1}{E_1 E_4 + E_2 + E_3} \quad \text{avec} \quad G_1 = \frac{1 - 0.5y}{(1 - y)^3} . \quad (2.39)$$

La grandeur  $y$  est calculée à partir du volume critique et vaut  $y = v_c/6v$ . Les grandeurs  $E_i$  sont des fonctions linéaires dépendant du facteur acentrique et du moment dipolaire et sont définies dans [144].

Dans le cas d'un mélange, la viscosité dynamique  $\eta$  est calculée à partir de la formule [152] :

$$\eta = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{X_k \eta_k}{\sum_{j=k}^{N_{sp}} X_j \Phi_{kj}} \quad \text{avec} \quad \Phi_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_k}{W_j}\right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\eta_k}{\eta_j}\right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_k}\right)^{1/2}\right]^2 . \quad (2.40)$$

### 2.1.4.2 La conductivité thermique

Pour les applications à basse pression, la conductivité thermique d'une espèce  $k$  ( $\lambda_k^{PG}$ ) est calculée avec le modèle proposée par Chung et al. [151] qui est un bon compromis entre temps de calcul et précision. Elle est définie avec la formule suivante :

$$\lambda_k^{PG} = \frac{3.75 R \Theta_k \eta_k^{PG}}{W_k} , \quad (2.41)$$

où  $\eta_k^{PG}$  représente la viscosité dynamique basse pression de l'espèce  $k$ .  $\Theta_k$  est calculé avec la formule suivante :

$$\Theta_k = 1 + \alpha_k \frac{0.215 + 0.28288\alpha_k - 1.061\beta_k + 0.26665 Z_{coll,k}}{0.6366 + \beta_k Z_{coll,k} + 1.061\alpha_k \beta_k} , \quad (2.42)$$

avec :

$$Z_{coll,k} = 2 + 10.5 T_{rk}^2 , \quad \alpha_k = \frac{C_{vk}}{R} - \frac{3}{2} \quad \text{et} \quad \beta_k = 0.7862 - 0.7109 \omega_k + 1.3168 \omega_k^2 , \quad (2.43)$$

où  $\omega_k$  représente le facteur acentrique de l'espèce  $k$ .

Pour les applications à haute pression, Chung et al. [151] suggèrent d'utiliser la définition suivante, pour le calcul de la conductivité thermique haute pression de l'espèce  $k$  :

$$\lambda_k^{RG} = \lambda_k^{PG} \left( \frac{1}{H_2} + B_6 y \right) + \lambda_{kp} , \quad (2.44)$$

et

$$\lambda_{kp} = 3.586 \cdot 10^{-3} \left( \frac{T_{ck}}{W_k} \right)^{1/2} \frac{1}{v_{ck}^{2/3}} \sqrt{T_{rk}} B_7 y^2 H_2 , \quad (2.45)$$

où,  $H_2$  est défini par :

$$H_2 = \frac{\frac{B_1(1-\exp(-E_4 y))}{y} + E_2 G_1 \exp(E_5 y) + B_3 G_1}{B_1 B_4 + B_2 + B_3} \quad \text{avec} \quad G_1 = \frac{1 - 0.5y}{(1 - y)^3} . \quad (2.46)$$

La grandeur  $y$  est calculée à partir du volume critique est vaut  $y = v_c/6v$ . Les grandeurs  $B_i$  sont des fonctions linéaires dépendant du facteur acentrique et du moment dipolaire et sont définies dans [144].

Dans le cas d'un mélange de  $N_{sp}$  espèces, la conductivité thermique du mélange est calculée avec la formule suivante :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left( \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k + \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k / \lambda_k} \right) . \quad (2.47)$$

### 2.1.4.3 Coefficient de diffusion binaire des espèces

Pour le calcul du coefficient de diffusion binaire de l'espèce  $i$  dans l'espèce  $j$  ( $D_{ij}^{bin,PG}$ ) à basse pression, plusieurs possibilités sont envisageables. Les deux possibilités les plus utilisées dans la littérature sont, la corrélation empirique proposée par Fuller et al. [153] :

$$D_{ij}^{bin,PG} = \frac{0.00143T^{1.75}}{PW_{ij}^{1/2}[(\epsilon_v)_i^{1/3} + (\epsilon_v)_j^{1/3}]^2} \quad \text{avec} \quad W_{ij} = 2 \frac{W_i W_j}{W_i + W_j} , \quad (2.48)$$

où  $\epsilon_v$  est donnée pour chaque composant en sommant les volumes de diffusion atomique dans [148], ou la bibliothèque CHEMKIN [154] qui tabule les valeurs calculées d'après la théorie cinétique des gaz. Pour chaque couple d'espèce ( $i,j$ ) quatre coefficients constants sont stockés ( $d_{n,ij}$ ) afin de calculer, le coefficient binaire de diffusion de la manière suivante :

$$\ln(D_{ij}^{bin,PG} P) = \sum_{n=1}^4 d_{n,ij} (\ln T)^{n-1} . \quad (2.49)$$

Ces deux modélisations sont disponibles dans le solver SiTCom-B utilisé dans cette thèse.

Pour les applications à hautes pression, une correction en pression est nécessaire. Deux d'entre elles ont été utilisées au cours de cette thèse :

- La méthode de Takahashi [155] basée sur le principe des états correspondants <sup>1</sup> :

$$\frac{D_{ij}^{bin} P^{RG}}{(D_{ij}^{bin} P)^{PG}} = f(T_r, P_r) . \quad (2.50)$$

La fonction  $f(T_r, P_r)$  représente un facteur de correction, basée sur les pressions et températures réduites, permettant de prendre en compte l'effet des hautes pressions. Ce facteur à été tabulé par Takahashi.

Dans le cas d'un mélange, les pressions et températures réduites sont calculées à partir des pseudo-conditions critiques du mélanges définies de la manière suivante :

$$T_c = \sum_i X_i T_{c,i} \quad P_c = \sum_i X_i P_{c,i} . \quad (2.51)$$

---

1. Le principe des états correspondants formulé par Van Der Waals [145] énonce que pour tout fluide aux mêmes température réduite ( $T_r = T/T_c$ ) et pression réduite ( $P_r = P/P_c$ ), un comportement analogue est observé.

- La deuxième correction étudiée pendant cette thèse est l'approche proposée par Kurochkin et al. [156]. Elle consiste à utiliser la corrélation de Beijeren et Ernst [157] [158] qui fut améliorée par Kurochkin et al. [156]. Dans cette méthode, les coefficients de diffusion binaire haute pression peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$D_{ij}^{bin,RG} = \frac{P}{P^{st} \chi_{ij}} D_{ij}^{bin,PG} = R(i, j, P, T) D_{ij}^{bin,PG} , \quad (2.52)$$

où  $\frac{1}{\chi_{ij}}$  est un facteur d'encombrement qui peut s'écrire [156] :

$$\chi_{ij} = 1 + \sum_{k=1}^{N_{sp}} n_k a_{ij}^k , \quad (2.53)$$

avec  $n_k$  la concentration moléculaire de l'espèce  $k$  et les  $a_{ij}^p$  sont évalués à partir des diamètres moléculaires de collisions  $\sigma_{ij}$  de la manière suivante :

$$a_{ij}^p = \frac{\pi}{12} [8(\sigma_{ip}^3 + \sigma_{jp}^3) - 6(\sigma_{ip}^2 + \sigma_{jp}^2)\sigma_{ij} - 3(\sigma_{ip}^2 - \sigma_{jp}^2)^2 \sigma_{ij}^{-1} + \sigma_{ij}^3] \quad (2.54)$$

Cette formulation a notamment été utilisée par Giovangigli et à fait l'objet de plusieurs publications [159] [160].

L'ensemble de ces modèles a été intégré dans le code cible de cette thèse SiTCom-B par X. Petit [144], excepté le modèle de Kurochkin qui fut ajouté pendant cette thèse.

D'autres formulations ont aussi été proposées par Leahy-Dios et Firoozabadi [161] et Harstad et Bellan [162] qui reposent en grande partie sur des interpolations de données expérimentales.

### 2.1.5 Cinétique chimique

Une réaction chimique est généralement représentée par une équation globale faisant intervenir les réactifs et les produits de la réaction.

Un système de  $N_r$  réactions pour  $N_{sp}$  espèces s'écrit de la façon suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \zeta_{kr}' M_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_{sp}} \zeta_{kr}'' M_k \quad \text{pour } r \in [1, N_r] , \quad (2.55)$$

$M_k$  représente l'espèce  $k$ ,  $\zeta_{kr}'$  et  $\zeta_{kr}''$  sont les coefficients stoechiométriques de l'espèce  $k$  pour la réaction  $r$ . En introduisant le coefficient stoechiométrique net  $\zeta_{kr} = \zeta_{kr}'' - \zeta_{kr}'$ , la conservation de la masse durant la réaction  $r$  implique la relation suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \zeta_{kr}' W_k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \zeta_{kr}'' W_k \quad \text{soit} \quad \sum_{k=1}^{N_{sp}} \zeta_{kr} W_k = 0 . \quad (2.56)$$

Le taux de réaction  $Q_r$  de la réaction  $r$  peut ensuite être calculé par :

$$Q_r = k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\zeta_{kr}'} - k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\zeta_{kr}''} . \quad (2.57)$$

$k_{fr}$  et  $k_{br}$  sont les constantes de réaction directe et inverse de la réaction  $r$ . Avec la loi d'Arrhenius  $k_{fr}$  est calculée avec la formule suivante :

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) = A_{fr} T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right), \quad (2.58)$$

où  $A_{fr}$ ,  $T^{\beta_r}$  et  $E_a (= RT_a)$  sont les constantes pour cette réaction  $r$ . Pour le calcul de  $k_{br}$ , on utilise la constante d'équilibre de la réaction  $r$ , qui est égale au quotient de  $k_{fr}$  avec  $k_{br}$ .

L'objectif final étant de déterminer  $\dot{\omega}_k$ , qui représente le terme source de l'espèce  $k$  et qui intervient dans l'équation de conservation pour  $(\rho Y_k)$ , celui-ci est calculé par :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^{N_r} \zeta_{kr} Q_r. \quad (2.59)$$

## 2.1.6 Les équations de bilans

### 2.1.6.1 Equation de conservation de la masse

Pour un fluide compressible, l'équation de la conservation de la masse s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0, \quad (2.60)$$

où  $u_i$  est la composante suivant l'axe  $i$  de la vitesse.

### 2.1.6.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement

En négligeant les forces volumiques s'appliquant sur le fluide, telles que la gravité ou les forces électromagnétiques, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est de la forme :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}, \quad (2.61)$$

où  $\tau_{ij}$  représente le tenseur de contrainte visqueuse qui s'exprime, dans le cadre d'un fluide Newtonien par :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \eta \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.62)$$

où  $\eta$  représente la viscosité dynamique du mélange et  $\delta_{ij}$ , le tenseur de Kronecker.

### 2.1.6.3 Equation de conservation des espèces

L'équation de transport pour une espèce  $k$  a pour bilan :

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Y_k u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_k V_{k,j}) + \rho \dot{\omega}_k, \quad (2.63)$$

où  $V_{k,j}$  est la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$ , dans la direction  $j$ , et  $\dot{\omega}_k$  est le taux de production de l'espèce  $k$ . Afin de vérifier la conservation de la masse totale, l'égalité (2.63) est sommée pour toutes les espèces  $k = 1, \dots, N_{sp}$  :



$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \left( \frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_k(u_j))}{\partial x_j} \right) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \left( -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_k V_{k,j}) + \rho \dot{\omega}_k \right), \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} (Y_k V_{k,j}) \right) + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k, \quad (2.65)$$

Il vient donc naturellement que :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} (Y_k V_{k,j}) = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0. \quad (2.66)$$

La détermination de la vitesse de diffusion des espèces, dans un système multi-espèces n'est pas simple et peut être très coûteuse. Pour cette raison on utilise régulièrement des simplifications. Dans cette section, les différentes méthodes de calcul des vitesses de diffusion ont été étudiées.

### A. Expression générale pour la vitesse de diffusion

L'expression générale de la vitesse de diffusion de l'espèce  $i$  est exprimée de la manière suivante :

$$\mathbf{v}_i = \sum_{k=1}^{N_{sp}} D_{ik} \mathbf{d}_k - D_i^T \frac{\nabla T}{T} - D_i^P \frac{\nabla P}{P}. \quad (2.67)$$

Dans cette expression  $D_{ik}$ ,  $D_i^T$  et  $D_i^P$  correspondent respectivement, au coefficient de diffusion multi-espèces, au coefficient thermo-diffusif et au coefficient baro-diffusif.

- D'après les propriétés multicomposantes, l'évaluation des coefficients  $D_{ik}$  nécessite l'inversion d'une matrice  $L$  de taille  $(N_{sp}, N_{sp})$ , à chaque pas de temps et pour chaque cellule. Cette matrice est définie par [163] [154] :

$$L_{ij} = \frac{16T}{25P} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{X_k}{W_i D_{ik}^{bin}} [W_j X_j (1 - \delta_{ik}) - W_i X_i (\delta_{ij} - \delta_{jk})]. \quad (2.68)$$

Après inversion, le coefficient de diffusion  $D_{ik}$  est calculé par :

$$D_{ik} = X_i \frac{16TW}{25PW_k} (p_{ik} - p_{ii}) \quad \text{avec} \quad (p) = (L^{-1}). \quad (2.69)$$

- Le second terme de l'Eq. (2.67) où apparaît un gradient de température est appelé effet Soret. Ce terme a tendance à diffuser les espèces légères vers les zones de haute température et les espèces lourdes vers les régions de basse température [164]. Dans la plupart des simulations en combustion, ce terme est négligé, cependant il joue un rôle important notamment, lors de la combustion de l'hydrogène avec de l'oxygène [99].  $D_i^T$  est évalué par l'inversion d'un système matricielle de taille  $(N_{sp}, N_{sp})$  [165]. Le calcul de ce coefficient ralentit le code d'une manière très importante.

- le dernier terme de l'Eq. (2.67) correspond à l'effet baro-diffusif, i.e. l'effet du gradient de pression sur la diffusion de l'espèce. Celui-ci sera négligé par la suite.

Dans l'Eq. (2.67),  $\mathbf{d}_k$  représente la force principale pilotant la diffusion de l'espèce  $k$ . Avec l'hypothèse de gaz parfait, ce terme est modélisé par le gradient de la fraction massique de l'espèce  $k$ . Pour les applications utilisant le formalisme des gaz réels, Giovangigli et al. [101] ont démontré que cette modélisation n'est pas une bonne approximation et celui-ci est modélisé par :

$$\mathbf{d}_k = X_k(\nabla\mu_k)_T, \quad (2.70)$$

où  $\mu_k$  représente le potentiel chimique de l'espèce  $k$ , il dépend de l'équation d'état utilisée et est défini comme :

$$\mu_k = \frac{g_k W_k}{RT} \quad \text{avec} \quad g_k = \frac{\partial e}{\partial Y_k} - T \frac{\partial s}{\partial Y_k}, \quad (2.71)$$

où  $g_k$  représente la fonction de Gibbs de l'espèce  $k$ .

En définissant  $\Phi$  comme la différence en pression avec une modélisation gaz parfait,

$$\Phi = P^{EoS} - P^{PG}. \quad (2.72)$$

Le calcul de l'énergie  $e$  (Eq. (2.28)) et de l'entropie  $s$  (Eq. (2.30)) deviennent alors :

$$e = e^{PG} - \int_{v'}^{\infty} T^2 \frac{\partial}{\partial T} (\Phi/T) \partial v' \quad \text{et} \quad s = s^{PG} - \int_{v'}^{\infty} T^2 \frac{\partial \Phi}{\partial T} \partial v', \quad (2.73)$$

avec  $v' = v/W$ .

En utilisant l'équation d'état cubique Peng-Robinson (Eq. (2.8)), on a :

$$\begin{aligned} \Phi^{PR} &= P^{PR} - P^{PG} \\ &= \frac{\rho RT}{W} \left( \frac{\rho b^*}{1 - \rho b^*} \right) + \frac{\rho a \alpha(\omega, T)}{2\sqrt{2}b} \left[ \frac{1}{W + (1 + \sqrt{2}\rho b)} - \frac{1}{W + (1 - \sqrt{2}\rho b)} \right], \end{aligned}$$

avec  $b^* = b/W$ .

On obtient donc :

$$e^{PR} = e^{PG} + \frac{\frac{\partial a \alpha}{\partial T} T - a \alpha}{2\sqrt{2}bW} \ln \left( \frac{Wv' + (1 + \sqrt{2})b}{Wv' + (1 - \sqrt{2})b} \right) \quad (2.74)$$

et

$$s^{PR} = s^{PG} + \frac{R}{W} \ln \left( 1 - \frac{b^*}{v'} \right) + \frac{\frac{\partial a \alpha}{\partial T}}{2\sqrt{2}bW} \ln \left( \frac{Wv' + (1 + \sqrt{2})b}{Wv' + (1 - \sqrt{2})b} \right). \quad (2.75)$$

$\mu_k$  est ensuite calculé par :

$$g_k^{PR} = \frac{\partial e^{PR}}{\partial Y_k} - T \frac{\partial s^{PR}}{\partial Y_k} = \frac{\partial}{\partial Y_k} (e^{PR} - T s^{PR}) \quad (2.76)$$

avec

$$e^{PR} - T s^{PR} = e^{PG} - T s^{PG} - \frac{a \alpha}{2\sqrt{2}bW} \ln \left( \frac{Wv' + (1 + \sqrt{2})b}{Wv' + (1 - \sqrt{2})b} \right) - \frac{RT}{W} \ln \left( 1 + \frac{b^*}{v'} \right). \quad (2.77)$$

Finalement on obtient :

$$\mu_i^{PR} = \ln(X_i) + \mu_i^{sm,PR} \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} \mu_l^{sm,PR} = & \frac{W_l g_l^{PG^*}}{R_u T} - \frac{\rho b_l}{\rho b - W} \ln\left(\frac{\rho R_u T}{p^{st}(W - b\rho)}\right) + \frac{W_l}{2\sqrt{2}R_u T} \left(\frac{\frac{\partial a\alpha}{\partial Y_l} b - a\alpha \frac{W}{W_l}(b_l - 2b)}{b^2 W}\right) \\ & \ln\left(\frac{W + (1 + \sqrt{2})b\rho}{W + (1 - \sqrt{2})b\rho}\right) - \frac{a\alpha\rho W}{bR_u T\sqrt{2}} \cdot \frac{b + \sqrt{2}b_l - \sqrt{2}b}{(W + (1 + \sqrt{2})b\rho)(W + (1 - \sqrt{2})b\rho)} \end{aligned} \quad (2.79)$$

Avec  $g_l^{PG^*}$ , la fonction de Gibbs de l'espèce  $l$ , à la pression standard  $p^{st}$  calculée avec l'approximation du gaz parfait. Dans le chapitre 4, l'influence de cette modélisation a été étudiée.

Avec l'approche basse pression i.e. modèle gaz parfait, on retrouve la formulation classique [101] :

$$\mathbf{d}_k = \nabla X_k \quad (2.80)$$

### **B. Modélisation de la vitesse de diffusion**

Pour le calcul de  $V_i$ , l'approximation proposée par Curtiss et Hirschfelder [166] figure parmi les plus utilisées avec l'approche utilisant un nombre de Schmidt constant.

#### **Modèle de Curtiss et Hirschfelder**

La simplification proposée par Curtiss et Hirschfelder [166] est exprimée de la manière suivante :

$$V_k = -\frac{D_{km}}{X_k} \mathbf{d}_k \quad (2.81)$$

où  $D_{km}$  est le coefficient de diffusion moyen de l'espèce  $k$ , calculé avec la formule :

$$D_{km} = \frac{1 - X_k}{\sum_{j=1, j \neq k}^{N_{sp}} X_j / D_{kj}^{bin}} \quad (2.82)$$

dans cette expression  $D_{kj}^{bin}$  correspond au coefficient de diffusion binaire de l'espèce  $k$  dans  $j$ . Cette approche sera dénommé "MIXTURE\_AVERAGE".

#### **Ajout de l'effet thermo-diffusif (effet Soret)**

A cette expression (Eq. 2.81), un effet thermo-diffusif peut être ajouté ( $V_{k,2}$ ) :

$$V_k = V_{k,1} + V_{k,2} \quad (2.83)$$

avec

$$V_{k,1} = \frac{D_{km}}{X_k} \mathbf{d}_k \quad , \quad V_{k,2} = D_i^T \frac{\nabla T}{T} = \frac{D_{km} \Theta_k}{X_k} \frac{\nabla T}{T} \quad \text{et} \quad \Theta_k = \sum_j \theta_{kj} \quad (2.84)$$

$\Theta_k$  et  $\theta_{kj}$  correspondent respectivement, au ratio thermo-diffusif totale de l'espèce  $k$  et au ratio thermo-diffusif binaire du couple  $(k, j)$ .

Plusieurs possibilités sont envisageables pour le calcul du coefficient binaire  $D_i^T$ , une première méthode consiste à utiliser l'approche "Multicomposante" évoquée précédemment, qui consiste à inverser un système matriciel de taille  $(2*N_{sp}, 2*N_{sp})$  [164] à chaque pas d'intégration et pour chaque cellule. Cette méthode est néanmoins très coûteuse en temps de calcul et selon Hilbert et al. [165], la prise en compte de l'effet thermo-diffusif avec le modèle d'inversion matricielle pour calculer les coefficients nécessaires multipliera le temps de calcul par un facteur d'au moins 3. Une autre solution, moins coûteuse mais moins précise, consiste à utiliser la méthode dite "LIGHT\_SPECIES" dans laquelle le ratio thermo-diffusif total est uniquement estimé pour les espèces légères ( $W < 5$  g/mol) [167]. Pour cela la bibliothèque CHEMKIN (tabulation de la théorie cinétique des gaz) a été employée où pour chaque couple  $(i, j)$  trois coefficients constants sont stockés ( $A_{n,ij}$ ) afin de calculer le coefficient binaire thermo-diffusif du couple  $(i, j)$  :

$$\frac{\theta_{ij}}{X_i X_j} = \sum_{n=1}^3 A_{n,ij} T^{n-1} . \quad (2.85)$$

### Vitesse de correction

Cependant avec cette approximation d'ordre 0 "MIXTURE\_AVERAGE", la conservation de masse des espèces n'est pas respectée (2.66) :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} (Y_k V_{k,j}) \neq 0 , \quad (2.86)$$

pour cela, il est classique d'introduire une vitesse de correction  $V_c$  de la manière suivante :

$$V_k = V_k^* + V_c \quad \text{avec} \quad V_c = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k V_k^* , \quad (2.87)$$

où  $V_k$  est la nouvelle vitesse de diffusion et  $V_k^*$  la vitesse de diffusion calculée de la manière précédente.

### **Modèle à nombre de Schmidt constant :**

Cette approche consiste à utiliser l'approximation de Curtiss et Hirschfelder [166] et de définir un nombre de Schmidt constant par espèce. On obtient alors pour  $D_{km}$  :

$$D_{km} = \frac{\mu}{\rho S_{c,k}} , \quad (2.88)$$

Cette méthode est la moins coûteuse en terme de temps CPU et a été utilisée dans de nombreuses publications [28, 98, 109].

### 2.1.6.4 Equation de conservation de l'énergie totale non-chimique

En négligeant les forces volumiques et les flux radiatifs, cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E) = \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j (\tau_{ij} - p \delta_{ij})) + \rho \dot{\omega}_T, \quad (2.89)$$

$q_i$  est le flux de diffusion de la chaleur :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} V_{k,i} Y_k - p \sum_{k=1}^{N_{sp}} D_k^T \mathbf{d}_k, \quad (2.90)$$

le dernier terme de cette équation représente l'effet Dufour. Il sera appliqué si et seulement si l'effet thermo-diffusif est prise en compte.  $h_{s,k}$  est l'enthalpie sensible de l'espèce  $k$  et  $\lambda$  la conductivité thermique du mélange.

## 2.2 Modélisation des écoulements turbulents

Les applications CFD, que ce soit pour les écoulements naturels ou à but technologique, exigent la capacité de gérer les écoulements turbulents. Il s'agit des situations les plus largement rencontrées. Il est donc nécessaire de prendre en compte les effets de la turbulence sur le débit moyen. Cela nécessite des modèles approximatifs, car la Simulation Numérique Directe (DNS) de toutes les échelles n'est pas une option envisageable dans beaucoup de cas [168]. Deux catégories de modèles sont actuellement disponibles, la simulation aux Grandes Echelles (LES) de la même catégorie que la DNS en ce qu'elle calcule directement les fluctuations turbulentes dans l'espace et le temps mais seulement au-dessus d'une certaine échelle de longueur. Au-dessous de cette échelle, la turbulence est modélisée par des lois semi-empiriques. L'autre catégorie est le modèle Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS), dans lequel les fluctuations turbulentes sont ignorées et seulement l'écoulement moyen est calculé. C'est actuellement l'approximation la plus largement appliquée dans la pratique CFD [168]. La hiérarchie entre ces trois niveaux de modélisation de la turbulence est résumée dans la figure 2.1, qui montre le spectre d'énergie turbulente en fonction du nombre d'ondes  $k$  et les limites de la plage d'application des modèles LES et RANS.

### 2.2.1 La Simulation aux Grandes Echelles des écoulements turbulents

Les équations décrivant les modèles LES sont obtenues à partir des lois de conservation des équations de Navier-Stokes, par une opération de filtrage. En pratique, les échelles les plus petites ne sont pas résolues et par conséquent, des modèles de sous-maillages sont utilisés pour les modéliser. Cette approche est caractérisée par une échelle de coupure qui sépare les échelles résolues des échelles modélisées. Mathématiquement, cette séparation est obtenue par une opération de filtrage des équations de la DNS. Il s'agit d'un filtre passe haut pour les échelles de la turbulence et correspond à un produit de convolution dans l'espace physique, défini de la manière suivante :

$$\bar{\Phi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\zeta, t) G_{\Delta}(x - \zeta) \partial^3 \zeta, \quad (2.91)$$

où  $\bar{\Phi}$  correspond à la quantité filtrée de  $\Phi$  avec le filtre  $G_{\Delta}$ . Ce filtre est associé à l'échelle  $\Delta$ .

On peut alors séparer  $\Phi$  en deux parties.  $\bar{\Phi}$  qui correspond à la partie évoluant aux échelles supérieures à  $\Delta$ , donc il s'agit de la partie résolue et à  $\Phi'$ , la partie modélisée :

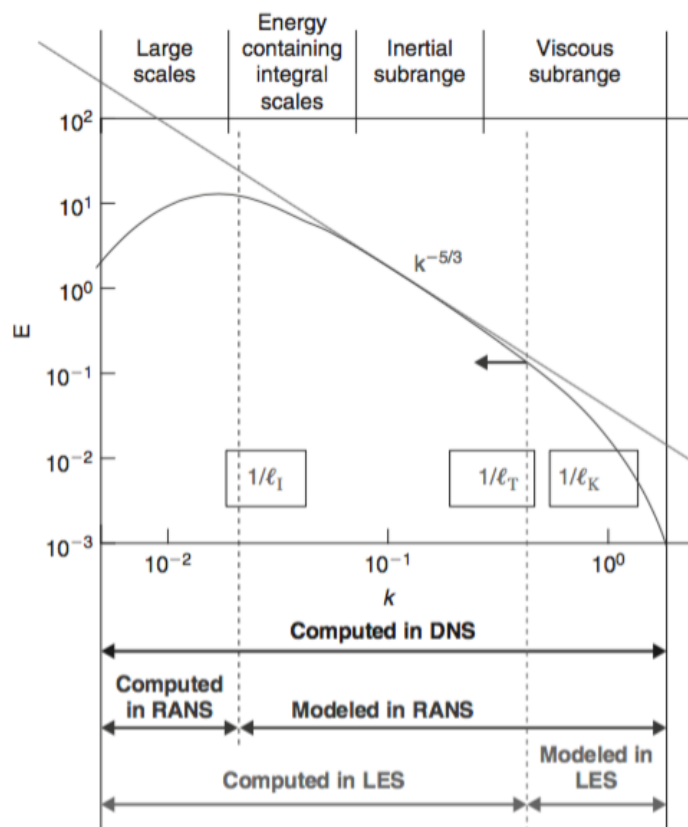


FIGURE 2.1: Spectre d'énergie de la turbulence en fonction de la longueur d'onde  $k$  [168].

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' . \tag{2.92}$$

Pour les écoulements compressibles, le processus de moyennage conduit à des produits de fluctuations entre la densité et d'autres variables, telles que la vitesse ou l'énergie interne. Afin d'éviter cela, une moyenne pondérée par la densité peut être introduite. Il s'agit de la notion de filtre de Favre :

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\bar{\rho}} . \tag{2.93}$$

### 2.2.2 Les équations de conservations filtrées

Dans le cas d'écoulements compressibles, les équations filtrées sont obtenues en appliquant le filtre de Favre aux équations de conservations vues dans la section précédente.

#### Equation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) = 0 . \tag{2.94}$$

#### Equation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}[\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j)] . \tag{2.95}$$

**Equation de conservation des espèces :**

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \tilde{\rho} \tilde{Y}_k \sum_{j=1}^{N_{sp}} D_{kj} \tilde{\mathbf{d}}_j \right) + \tilde{\rho} \tilde{\omega}_k - \frac{\partial}{\partial x_i} [\tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)] . \quad (2.96)$$

**Equation de conservation de l'énergie totale non-chimique :**

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{E}) = \tilde{\rho} \tilde{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\rho} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \tilde{h}_{sk} D_k \tilde{Y}_k \tilde{V}_{k,i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} [\tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E})] . \quad (2.97)$$

Dans ces équations apparaissent trois termes, appelés termes de sous-maillages, qui nécessitent d'être modélisés. Il s'agit de :  $\tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ ,  $\tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)$  et  $\tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E})$ .

## 2.2.3 Modèles de fermeture des équations de bilan

### 2.2.3.1 Fermeture de l'équation de la quantité de mouvement

Définissons  $\tau'_{ij} = \tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$  : le terme à modéliser souvent appelé le terme de sous-maille aérodynamique. Pour modéliser ce terme, l'approche de Boussinesq [169] dans laquelle les effets des petites échelles non résolues sont représentés par une viscosité additionnelle à ajouter est généralement employé. Le tenseur de sous-maille aérodynamique peut alors s'écrire de la manière suivante :

$$\tau'_{ij} = 2\eta_t \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) , \quad (2.98)$$

où  $\tilde{S}_{ij}$  représente la partie déviatrice du tenseur de contrainte filtré et  $\eta_t$  correspond à la viscosité turbulente :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) , \quad (2.99)$$

Il existe de nombreuses fermetures pour les termes de sous-maille dans la littérature [170]. Durant cette thèse, le modèle de Smagorinsky [171] a été employé. Celui-ci figure parmi les modèles les plus utilisés en LES. Il est basé sur l'hypothèse d'un équilibre entre la production et la dissipation de l'énergie cinétique, au niveau de l'échelle de coupure. Dans ce cas, la viscosité turbulente s'exprime :

$$\eta_t = (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}| = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} , \quad (2.100)$$

$\Delta$  est la largeur du filtre et  $C_s$  est la constante de Smagorinsky. Cette constante dépend de la configuration de l'étude, mais elle est souvent prise égale à 0.15. Cependant, la détermination de cette constante représente le principal défaut du modèle. Pour cela Germano et al. [172] ont proposé une amélioration de ce modèle de turbulence, en rendant cette constante dynamique au cours de la simulation. Il s'agit du modèle de Smagorinsky dynamique, dans cette approche un filtre légèrement plus large que le filtre LES a été défini et on superpose deux champs de variable issus du calcul LES et d'un nouveau calcul obtenu avec le filtrage par le nouveau filtre (fig.2.2). En reformulant la viscosité turbulente à partir de ces résultats filtrés, la constante de Smagorinsky adopte un comportement dynamique avec des variations spatio-temporelles issues des champs instantanés.

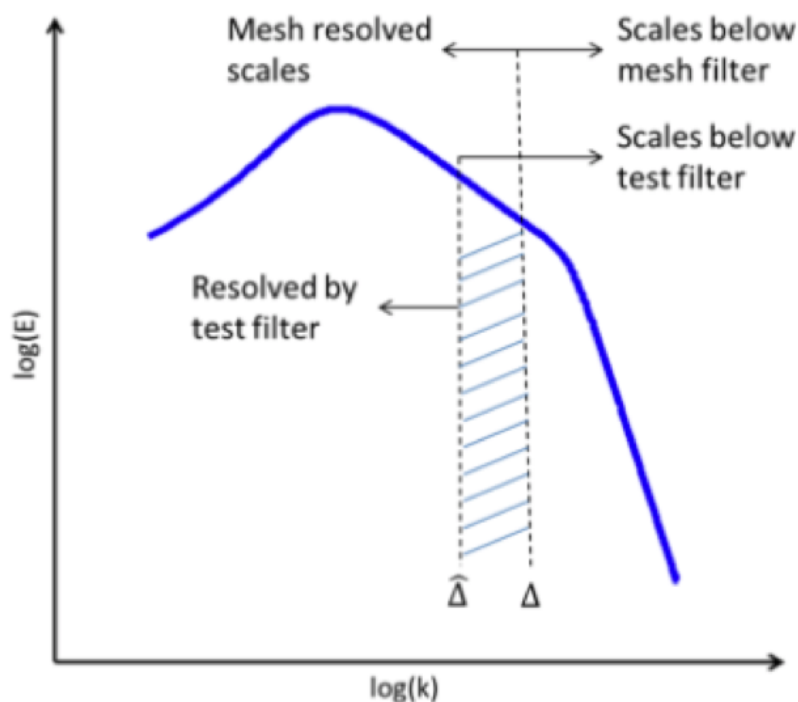


FIGURE 2.2: Principe de l'approche du Smagorinsky dynamique [173].

### 2.2.3.2 Fermeture des équations des espèces et de l'énergie

Définissons  $F_{k,i} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)$  et  $H_i = \bar{\rho}(\widetilde{u_i E} - \tilde{u}_i \tilde{E})$  les termes à modéliser souvent appelés respectivement le terme de sous-maille pour le transport scalaire et de l'énergie. Pour modéliser ces termes, comme précédemment l'approche de Boussinesq qui consiste à faire un équilibre du transfert d'espèce et d'énergie entre les échelles résolues et les échelles modélisées est employée. Dans ce cas, le concept de viscosité turbulente est remplacé par des termes de viscosité moléculaire et thermique pour les termes de sous-maillages.

Pour les espèces :

$$F_{k,i} = -\frac{\eta_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad Sc_{t,k} = \frac{\eta_t}{D_k} . \quad (2.101)$$

Pour l'énergie :

$$H_i = -\frac{\eta_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad Pr_t = \frac{\nu_t c_p}{\lambda} , \quad (2.102)$$

$Sc_{t,k}$  correspond au nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k, et  $Pr_t$  est le nombre de Prandtl turbulent.



## 2.3 Le solveur SiTCom-B

Il s'agit d'un code numérique, utilisé et développé dans le groupe d'étude sur la combustion numérique du laboratoire CORIA- CNRS UMR 6614<sup>2</sup>. SiTCom-B (Simulation of Turbulent Combustion with Billions of points) est le solveur utilisé dans cette thèse pour les simulations et les développements. Ce code résout les équations instationnaires compressibles de Navier-Stokes, sur des maillages cartésiens. Il a été principalement développé pour des applications DNS et LES hautement résolues, sur des centaines voire milliers de processeurs.

Comme pour la majorité des codes en CFD, le formalisme des Volumes Finis (FV) est employé, avec l'approche "Cell-Centered" pour laquelle, les inconnues sont localisées au centre des cellules et les valeurs voisines sont moyennées sur les frontières entre les cellules. Un schéma d'ordre 4 de type "skew-symmetric" [174] est utilisé pour la discrétisation spatiale. Afin de stabiliser ce schéma numérique, une dissipation artificielle du second et du quatrième ordre a été développées [175]. L'intégration temporelle est réalisée avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Le traitement des conditions aux limites est réalisé avec la méthode d'analyse caractéristique NSCBC (Navier Stokes Characteristics Boundary Conditions), développée par Poinot et Lele [176]. Dans cette méthode la décomposition en ondes caractéristiques des équations d'Euler est utilisée pour estimer les flux convectifs au niveau des frontières. Pour simuler des géométries complexes, la méthode des frontières immergées est utilisée [177].

---

2. <http://www.coria-cfd.fr/index.php/sitcom-b>.

## 2.4 Développement réalisées au cours de cette thèse

Au cours de cette thèse, différents développements ont été réalisés pour modéliser le flux de diffusion à haute pression :

- La modélisation non-idéale du flux de diffusion adaptée à l'équation d'état cubique Peng-Robinson.
- L'effet thermo-diffusif avec l'approche "LIGHT\_SPECIES".
- L'approche multicomposante pour le calcul de la vitesse de diffusion des espèces.
- La correction en pression de Kurochkin sur le coefficient de diffusion binaire.

Les différentes possibilités pour la détermination de la vitesse de diffusion dans SiTCom-B sont répertoriées dans la figure 2.3.

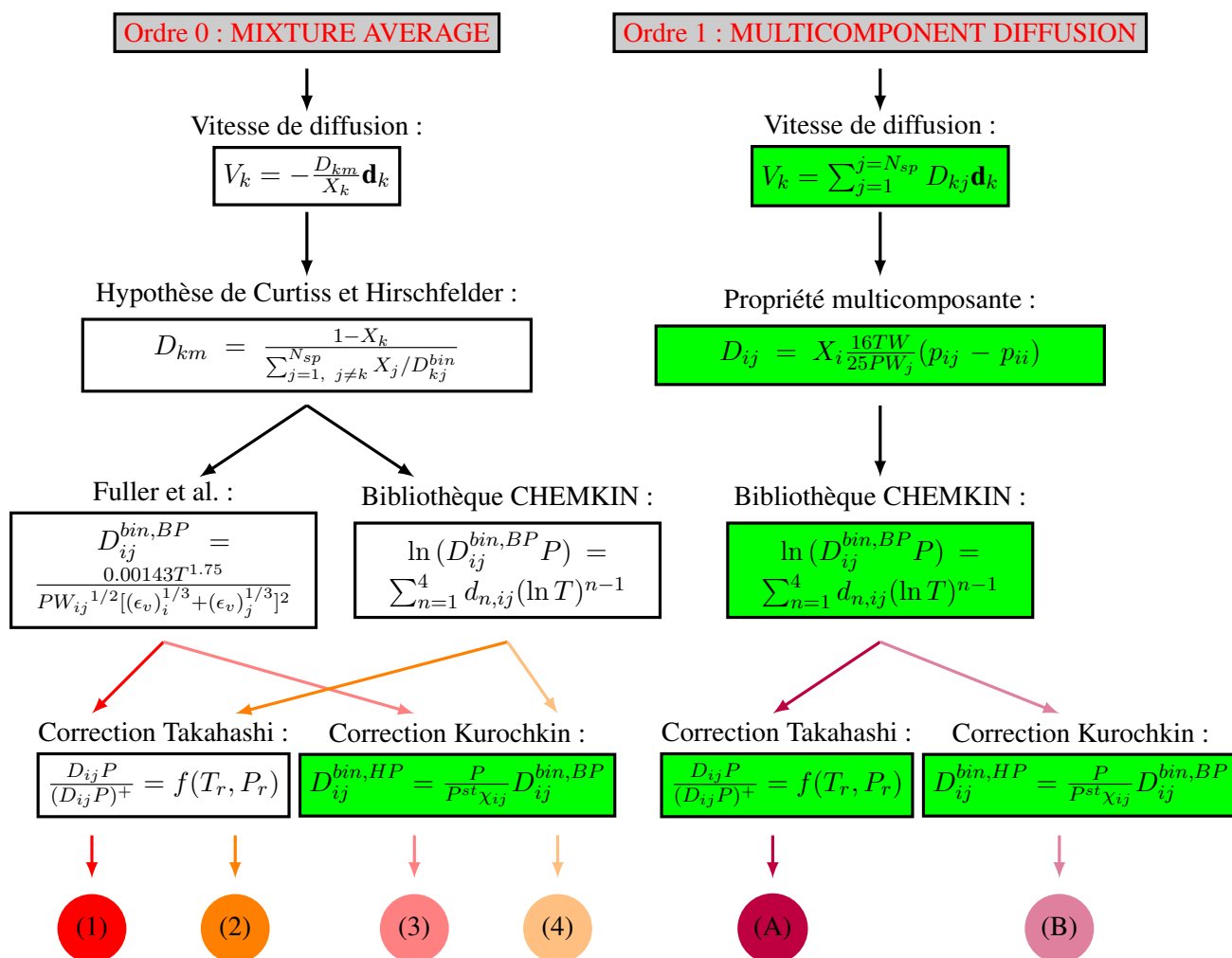


FIGURE 2.3: Schéma récapitulatif pour le calcul de la vitesse de diffusion dans SITCom-B (en vert, les développements réalisés au cours de cette thèse).

Afin de valider le développement de l'effet thermo-diffusif dans notre solveur, une flamme unidimensionnelle a été simulée avec le code SiTCom-B et les résultats ont été comparés avec ceux obtenus par le code académique REGATH [178] du laboratoire EM2C de CentraleSupélec.

La flamme unidimensionnelle en question est une flamme prémélangée stoechiométrique  $H_2/O_2$  à pression 1 bar, simulée avec le schéma détaillé de San Diego (8 espèces pour 21 réactions) [179]. Une température de 300 K a été prise pour les gaz frais. L'hypothèse de Curtiss et Hirschfelder est utilisée pour la vitesse de diffusion et l'effet thermo-diffusif est activé avec l'approche "LIGHT\_SPECIES".

Les figures 2.4(a), 2.4(b), 2.4(c) et 2.4(d) représentent respectivement les champs de vitesse, température, densité et fraction massique des espèces. Les résultats obtenus entre les deux solveurs sont identiques, ce qui valide le développement de l'effet thermo-diffusif dans SiTCom-B.

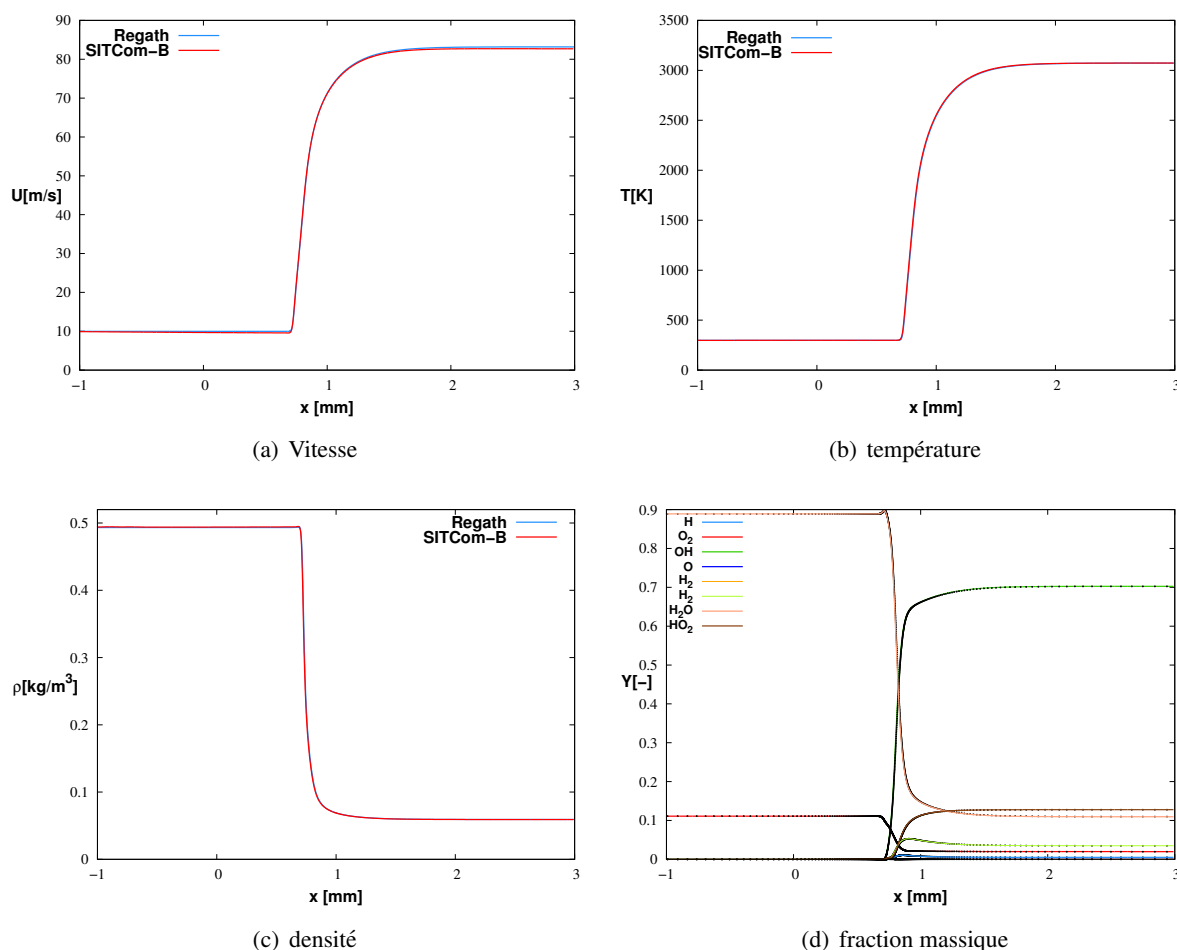


FIGURE 2.4: Comparaison SiTCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à  $P = 1$  bar, avec l'approche "LIGHT\_SPECIES".

L'intégration de l'approche multicomposante dans SiTCom-B a été validée de façon similaire. Les figures 2.5(a), 2.5(b), 2.5(c) et 2.5(d) représentent respectivement les champs de vitesse, température, densité et fraction massique des espèces. Les résultats obtenus entre les deux solveurs sont identiques, ce qui valide le développement de la modélisation multicomposante dans SiTCom-B.

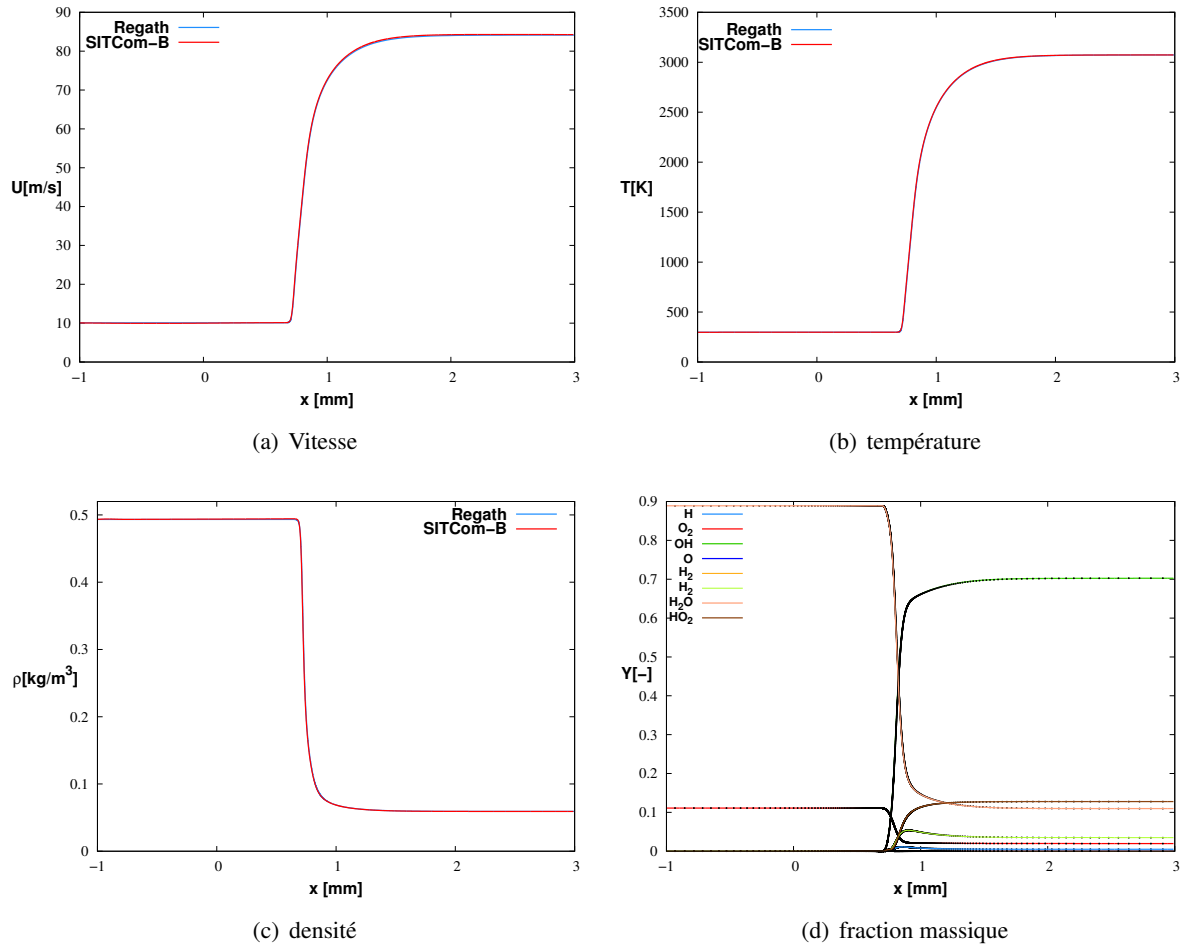


FIGURE 2.5: Comparison SITCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à  $P = 1$  bar, avec le modèle multicomposante.

En combinant la modélisation multicomposante et l'approche "LIGHT\_SPECIES", on obtient, ici encore, un très bon accord entre SiTCom-B et REGATH (figure 2.6).

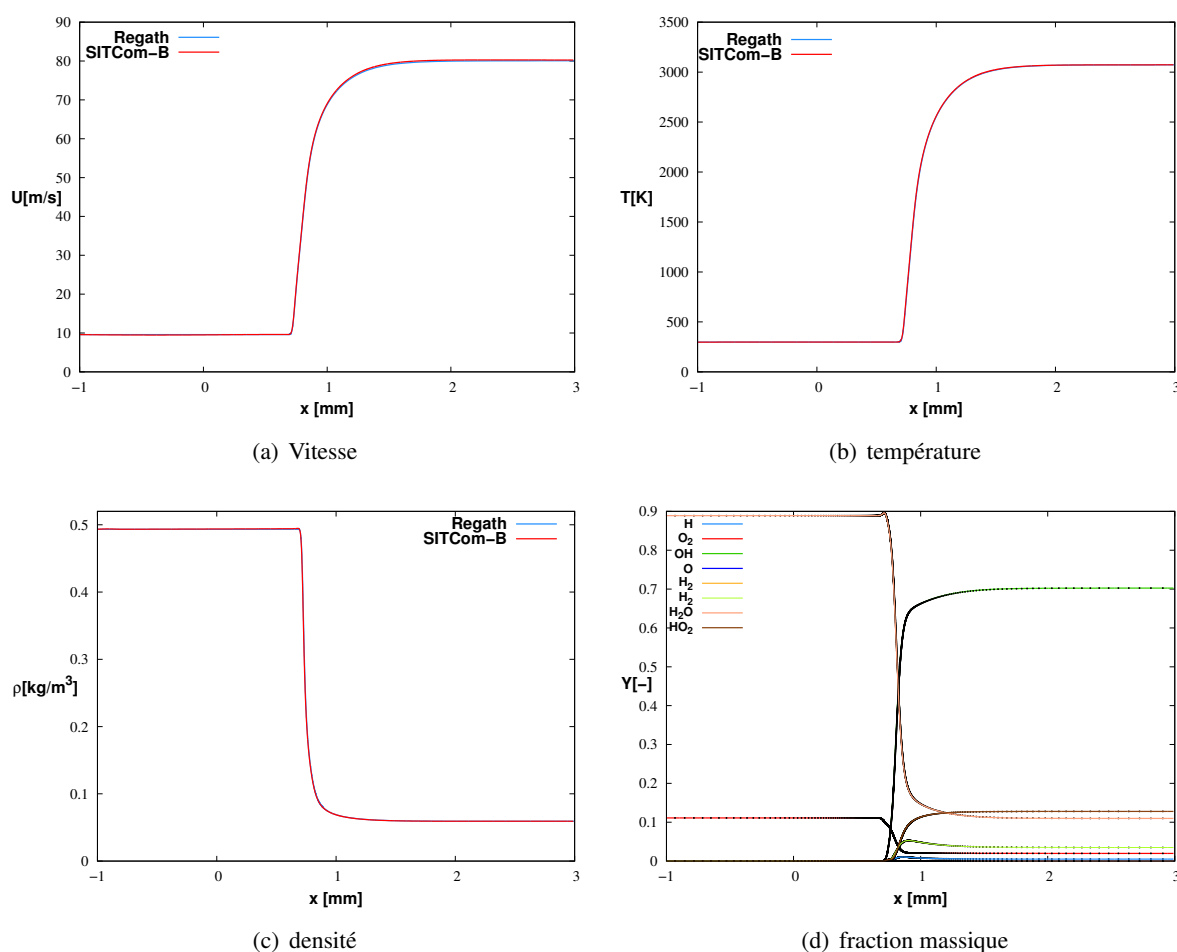


FIGURE 2.6: Comparaison SiTCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à  $P = 1$  bar, avec le modèle multicomposante et l'approche "LIGHT\_SPECIES".

Afin de connaître l'influence de la correction en pression (Kurochkin et Takahashi) sur le coefficient de diffusion binaire des espèces, trois flammes unidimensionnelles à trois pressions différentes (0.1 MPa, 1.0 MPa et 10.0 MPa) ont été simulées avec chacune de ces corrections. La flamme en question est la même flamme  $H_2/O_2$  que détaillée précédemment. Avec chaque correction et sur chacune de ces flammes, ce facteur de correction moyenné sur l'ensemble des espèces mises en jeu a été enregistré en chaque point de la flamme. Puis, il a été moyenné sur l'ensemble des points. Les valeurs maximales ont aussi été relevées. Le tableau 2.2 représente le maximum et la moyenne de ce facteur de correction, pour chaque pression de calcul. Comme attendu, ces résultats montrent que pour des pressions faibles loin des pressions critiques des espèces, ces corrections sont négligeables et qu'à haute pression, ces corrections modifient d'environ 5% les corrélations basse pression du coefficient binaire de diffusion. Cependant la correction de Kurochkin a été préférée à celle de Takahashi car à 0.1 MPa, la correction apportée par Takahashi (1.57% en moyenne) est beaucoup plus importante que celle de Kurochkin (0.05% en moyenne), alors que celles-ci devraient tendre vers zéro.

La même simulation a aussi été réalisée avec les deux différentes approches pour calculer la vitesse de diffusion (ordre 0 : “MIXTURE\_AVERAGE” et ordre 1 : “MULTICOMPOSANTE”). Cette simulation n’a été réalisée que pour une pression de 0.1 MPa. Les flux de diffusion ont été comparés pour chaque espèce entre ces deux résultats, en chaque point de la flamme. Le tableau 2.3 donne les écarts moyens entre les flux de diffusion pour chaque espèce, les résultats montrent que l’écart varie de 6% pour l’espèce H<sub>2</sub>O à plus de 25% pour l’espèce H, ce qui n’est pas du tout négligeable.

Comme énoncé précédemment, le choix d’une modélisation est aussi dicté par son coût en temps de calcul. Le tableau 2.4 répertorie les temps CPU suivant les différentes approches choisies. Les résultats montrent qu’utiliser une correction haute pression pour le coefficient de diffusion des espèces ralentit le code d’environ 10% avec la correction de Kurochkin et d’environ 20% avec la correction de Takahashi. L’ajout du terme thermo-diffusif avec l’approche “LIGHT\_SPECIES” n’a quant à lui pas d’impact (<1%). Les résultats obtenus avec une modélisation multicomposante coûtent environ deux fois plus en temps CPU par rapport aux mêmes simulations réalisées avec la modélisation “MIXTURE\_AVERAGE”, cependant ce rapport dépend fortement du nombre d’espèces mises en jeu. Pour cela, plusieurs simulations ont été réalisées avec des nombres d’espèces allant de 2 à 70. La figure 2.7 donne le rapport entre le temps de simulation avec l’approche multicomposante et l’approche “MIXTURE\_AVERAGE”, en fonction du nombre d’espèces. Cette figure montre que, pour un grand nombre d’espèces transportées la méthode multicomposante est très coûteuse, comparée aux approches “MIXTURE\_AVERAGE”.

	$P = 0.1 \text{ MPa}$	$P = 1 \text{ MPa}$	$P = 10 \text{ MPa}$
Max. du rapport de correction avec Takahashi	5,14%	30,7%	64%
Max. du rapport de correction avec Kurochkin	0,17%	1,70%	17,03%
Moyenne du rapport de correction avec Takahashi	1,57%	2,01%	4,35%
Moyenne du rapport de correction avec Kurochkin	0,05%	0,52%	5,28%

TABLE 2.2: Comparaison statistique des corrections haute pression.

Espèce	H	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	O <sub>2</sub>	OH	HO <sub>2</sub>	O	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
Ecart	25,2%	12.51%	6.21%	8,80%	7,93%	11,8%	13,7%	10,8%

TABLE 2.3: Comparaison statistique des flux de diffusion, entre les modélisation “MIXTURE\_AVERAGE” et “MULTICOMPONENT”.

Ordre	Modèle	$T$ (s)	$T_{bis}$ (s)	$T^* = \frac{T}{95}$	$T_{bis}^* = \frac{T_{bis}}{95}$
MIXTURE AVERAGED	CHEMKIN	95,0	96,1	1	1,01
	CHEMKIN + Takahashi	118	120	1,24	1,26
	CHEMKIN + Kurochkin	105	107	1,10	1,12
	Fuller et al.	111	113	1,16	1,18
	Fuller et al. + Takahashi	130	131	1,36	1,37
	Fuller et al. + Kurochkin	121	123	1,27	1,29
MULTICOMPONENT	CHEMKIN	185	187	1,95	1,97
	CHEMKIN + Takahashi	219	222	2,30	2,33
	CHEMKIN + Kurochkin	202	205	2,12	2,15

TABLE 2.4: Comparaison des temps de simulation pour 100 itérations avec  $T$ , le temps de simulation sans l'effet thermo-diffusif et  $T_{bis}$  avec l'effet thermo-diffusif.

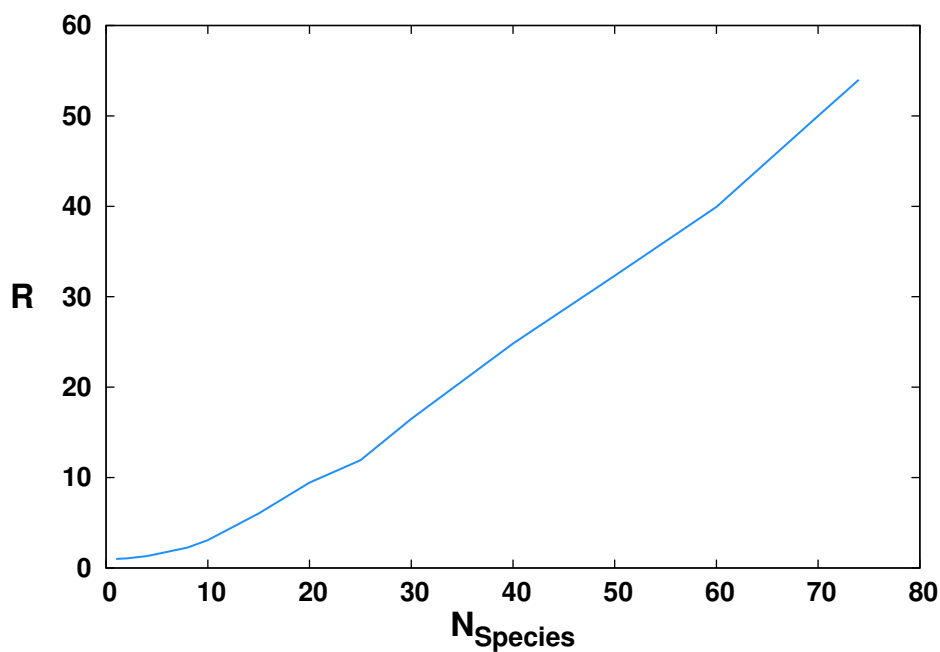


FIGURE 2.7: Rapport des temps de simulation entre les approches “MULTICOMPONENT” et “MIXTURE\_AVERAGE” en fonction du nombre d'espèces.





## Chapitre 3

# Simulation aux Grandes Echelles de la combustion supersonique $H_2/O_2$ : Application à un allumeur de moteur-fusée

### Sommaire

---

3.1	Introduction	65
3.2	L'allumage	67
3.3	Article publié dans le journal "Journal of Propulsion and Power"	69

---

### 3.1 Introduction

Dans ce chapitre, le caractère de ré-allumabilité d'un moteur-fusée de type VINCI a été étudié. Plusieurs simulations ont été réalisées en prenant en compte l'allumeur et la première couronne d'injection de l'hydrogène (voir 3.2). Le processus d'allumage d'un moteur-fusée a été qualitativement respecté : dans un premier temps, les jets d'hydrogène venant de la couronne extérieure de l'allumeur et de la première couronne d'injection ont été réalisés avec des vitesses supersoniques, dans une chambre remplie d'un gaz neutre au repos. La pression initiale de cette chambre est très faible car nos simulations correspondent au réallumage en vol, à très haute altitude. Puis, une fois la chambre remplie d'hydrogène et l'écoulement supersonique installé, l'allumage a lieu par l'injection supersonique des gaz brûlés issus de l'allumeur. La section 3.2 donne plus de détails concernant le processus d'allumage et la modélisation de l'allumeur qui est basé sur un jeu d'articles publiés au début des années 2000 [8, 19, 21, 29].

Ces simulations correspondent aux premiers instants de l'allumage d'un moteur-fusée, où une combustion supersonique  $H_2/O_2$  a lieu. Celle-ci est obtenue par un jet supersonique de gaz brûlés riche en oxygène dans une chambre remplie d'hydrogène. Plusieurs simulations 1D, 2D et 3D ont été réalisées afin de définir une stratégie numérique.

Tout d'abord le tube de Sod [180] a été simulé en DNS, dans le but de valider la capacité de notre solveur à capturer les ondes de choc. Il s'agit d'un long tube 1D, fermé aux extrémités et divisé en deux régions égales qui sont séparées par une paroi très fine. Chacune de ces régions est remplie par le même gaz au repos mais avec des propriétés thermodynamiques différentes (pression et densité). La soudaine rupture du diaphragme génère la propagation d'une onde de choc. La solution analytique de ce problème est connue [181]. Cette simulation a été réalisée avec deux différentes configurations. La première a été simulée avec un rapport de pression égale à 10 [180]. Dans la deuxième configuration, afin de s'approcher au mieux des conditions d'injections des gaz brûlés dans la chambre de combustion, les propriétés thermodynamiques et la composition des gaz brûlés ont été prise en compte dans une des deux régions alors que dans l'autre, les propriétés de l'hydrogène ont été considérées. Dans ce cas, le rapport des pressions vaut 100. Les résultats obtenus avec ces deux configurations sont en bon accord avec la solution analytique [181], ce qui valide SiTCom-B pour la capture de chocs. Cette étude a aussi permis de choisir un bon compromis entre les paramètres de la viscosité artificielle et la taille de maille pour les simulations 2D et 3D.

Ensuite, des simulations 2D représentatives du processus d'allumage décrite précédemment ont été réalisées. Tout d'abord, deux simulations ont été effectuées avec différents schémas cinétiques pour la combustion supersonique  $H_2/O_2$ . Il s'agit du schéma détaillé de San Diego [179] à 8 espèces et 21 réactions et du schéma réduit de Boivin à 5 espèces et 3 réactions globales [182, 183]. Grâce à la réduction de Boivin, le pas de temps du calcul est plus grand qu'avec le schéma détaillé et aussi trois espèces en moins ont été transportées lors du calcul, ce qui rend les simulations plus rapides. Les résultats moyens obtenus avec ces deux différentes modélisations de la chimie sont quasi-identiques, validant la réduction de Boivin pour cette configuration de combustion supersonique. Cette étude a permis de valider l'utilisation du schéma de Boivin pour les simulations 3D. Par ailleurs, ces simulations 2D ont aussi été réalisées avec 3 maillages différents, de taille de maille respectivement de  $25 \mu m$ ,  $50 \mu m$  et  $75 \mu m$  afin d'étudier l'influence du maillage. Les résultats ont montré que la même structure d'écoulement est observée avec ces 3 maillages, les résultats sur les champs moyens sont proches

avec des différences inférieures à 10%. Cependant, seul le maillage à 25  $\mu m$  permet un bon accord avec les critères de Duwig pour la combustion turbulente et de Pope pour la LES (voir 3.3). Enfin une dernière étude 2D a été réalisée avec 3 différentes conditions initiales, afin de connaître l'influence de la composition initiale de la chambre de combustion. La chambre étant initialement au repos et remplie par un gaz neutre, dans chacun de ces cas un fluide différent a été utilisé, il s'agit de l'azote, de l'hélium et de l'hydrogène. Les résultats obtenus montrent peu de différences entre ces trois approches.

Enfin, les simulations 3D ont été réalisées avec 3 maillages différents, de taille de maille et de nombre totale de cellules respectivement de 75  $\mu m$  pour 17 millions de cellules, 50  $\mu m$  pour 85 millions de cellules et 25  $\mu m$  pour 680 millions de cellules. Ici aussi, seul le maillage le plus raffiné avec 680 millions de cellules est en bon accord avec les critères de Duwig et de Pope. Les résultats obtenus avec ce maillage montrent que, aux tout premiers instants de l'injection des gaz brûlés, une combustion a lieu instantanément de manière très irrégulière. En effet, dans les zones où la dissipation scalaire est très élevée, le jet se détend avec une diminution de la température retardant ainsi la combustion. Une fois l'auto-allumage réalisé, une flamme de diffusion se développe sur la ligne stoechiométrique de la combustion H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>. Cette flamme reste attachée à la lèvres d'injection et interagit avec la dynamique du jet supersonique de l'hydrogène. Elle est aussi localisée sur une couche de mélange supersonique (voir l'article [142] reproduit en section 3.3 de ce manuscrit). La structure de cette flamme est semblable à celle d'une flamme non-prémélangée à contre-courant, ce qui signifie que la résolution du maillage est suffisamment fine pour capturer le comportement de cette flamme. Par conséquent, le développement d'un modèle LES de combustion turbulent basé sur une telle structure de flamme à contre courant pourra être réalisé. La même simulation a aussi été réalisée avec une approche non-réactive, les résultats en comparaison avec le cas réactif ont montré que les mécanismes physiques pilotant l'écoulement sont les effets aérodynamiques. Dans ces deux cas, la vitesse du choc généré par l'injection des gaz brûlés est semblable à celle du choc 1D décrite précédemment.

Les objectifs de cette étude sont double : premièrement, évaluer la capacité de la méthode LES pour prédire un écoulement multi-espèces sous-détendu réactif et deuxièmement, fournir quelques aspects fondamentaux de l'allumage d'un moteur-fusée et de la combustion supersonique.

Dans la section suivante (3.2), le processus d'allumage d'un tel moteur-fusée a été détaillé et ensuite l'article publié [142] contenant tous les détails de ces résultats a été inséré dans ce manuscrit.

## 3.2 L'allumage

Une bonne maîtrise des phases d'allumage et de réallumage est une des tâches les plus difficile et délicate pour un moteur-fusée, qui peut endommager l'ensemble du lanceur. Un retard, ne serait ce que de quelques millisecondes de l'allumage, peut conduire à une accumulation de combustible dans la chambre de combustion et produire une violente surpression. Cette forte surpression peut détruire la chambre de combustion ou générer des instabilités de combustion pouvant dégrader fortement les performances du moteur. Un allumage prématuré peut quant à lui empêcher l'allumage du moteur en raison d'un manque de combustible dans la chambre ou perturber la séquence globale d'une mise en orbite d'un satellite et entraîner sa perte. A cela viennent s'ajouter d'autres problématiques lors du réallumage en vol. Par exemple, la pression faible dans l'espace provoque une plus grande surpression lors de l'allumage et une moins bonne connaissance des conditions de l'espace que sur terre rendent le réallumage en vol plus difficile.

L'allumage d'un moteur-fusée de type moteur VINCI est réalisé par l'intermédiaire d'un allumeur (fig. 3.1). Il s'agit d'une petite chambre de combustion en amont de la chambre principale, reliée a celle-ci par l'intermédiaire d'un orifice. Dans cette petite chambre de combustion a lieu, une combustion très pauvre entre l'oxygène et l'hydrogène. Ce mélange est allumé par une étincelle de bougie. Les gaz résultants contiennent approximativement 80% d'oxygène imbrûlés et 20% d'eau (fraction molaire), le tout à une température aux environs de 2000 K. Ces gaz brûlés sont injectés dans la chambre principale, par la couronne centrale de l'allumeur et de l'hydrogène froid est injecté par la couronne extérieure de l'allumeur. L'oxygène résiduel est porté à haute température et réagit instantanément avec l'hydrogène de la couronne extérieur, ce qui initie la flamme dans la chambre principale (voir fig. 3.1).

La séquence d'allumage est réalisée en quatre temps :

- Initialement la chambre est purgée par un gaz neutre (souvent de l'hélium) pour 3 raisons principales : 1- Pour éviter toute combustion hasardeuse, inattendue lors de l'allumage. 2- Lors du réallumage en vol, dans les conditions de l'espace, ce gaz neutre comble rapidement le vide spatial, créant une faible pression avant l'arrivée des propergols. 3- L'oxygène et l'hydrogène, sont stockés à de très faibles températures, ce qui implique un très fort refroidissement des lignes d'injection. Dans ces conditions, lors de l'allumage sur terre, l'eau présente dans l'air peut se transformé en glace et boucher les conduites. Pour éviter cela, un gaz neutre de type hélium est injecté, car il a la capacité à rester gazeux jusqu'à une température de 4 K pour des pressions inférieures de 2.5 MPa.
- Ensuite, l'hydrogène gazeux est injecté, par les couronnes extérieures des injecteurs coaxiales (fig. 3.1). A cet instant, la pression de la chambre remplie par le gaz neutre est d'environ 0.01MPa. Comme le montre la figure (3.1), l'hydrogène est détendu et est injecté sous forme gazeuse. En raison du fort gradient de pression au moment de l'injection, l'hydrogène est injecté à une vitesse supersonique, faisant appel à la mécanique des fluides des écoulements sous-détendus.
- De l'hydrogène et de l'oxygène (en excès), sont injectés dans la chambre de combustion de l'allumeur. A l'aide d'une bougie, la combustion s'active. Le résultat de cette combustion donne

un mélange de gaz brûlés, principalement de l'eau et d'oxygène imbrûlé le tout à une très forte température. Ce mélange est ensuite, injecté dans la chambre principale remplie d'hydrogène. L'oxygène chaud imbrûlé réagit immédiatement avec l'hydrogène environnant. Ceci a pour but d'initier la flamme et la combustion dans le moteur.

- Enfin, afin d'allumer toute la chambre, l'oxygène liquide est injecté.

Une fois les flammes stabilisées pour chaque injecteur, le travail de l'allumeur est terminé. Il cesse de fonctionner et l'injecteur au centre de la plaque d'injection ne fournit plus de gaz brûlés. On assiste ensuite à la montée en pression de la chambre, qui entraîne une diminution du gradient de pression entre les injections et la chambre. Par conséquent les vitesses supersoniques des injections deviennent subsoniques. La pression de combustion atteint 60.8 bar (dans le cas de VINCI), ce qui reste supérieur à la pression critique de l'oxygène et de l'hydrogène. On a alors une combustion supercritique  $H_2/O_2$ .

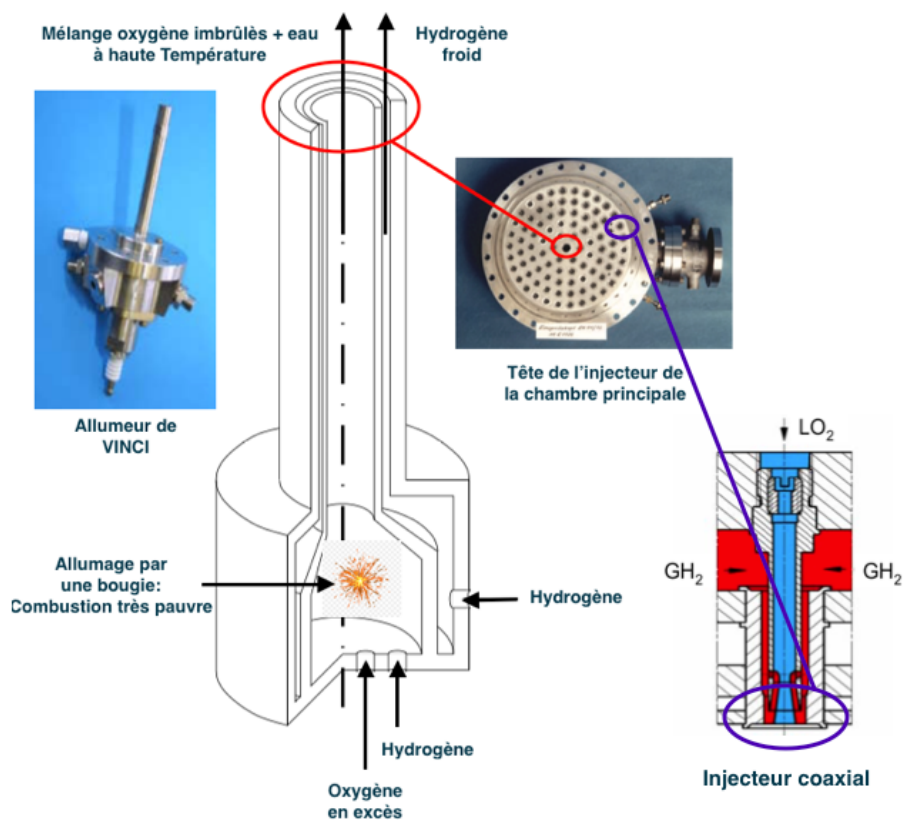


FIGURE 3.1: Modélisation de l'allumeur de VINCI.

### **3.3 Article publié dans le journal “Journal of Propulsion and Power”**



# Large-Eddy Simulation of Supersonic Hydrogen/Oxygen Combustion: Application to a Rocketlike Igniter

Umut Guven\* and Guillaume Ribert†

Normandie University, INSA de Rouen Normandie, 76000 Rouen, France

DOI: 10.2514/1.B36542

The three-dimensional simulation under consideration is related to the supersonic combustion of hydrogen with oxygen. The application under study corresponds to the early phase of ignition in a rocketlike engine. The configuration is a sonic jet of hot burned gases underexpanding into a combustion chamber filled with gaseous hydrogen. Two- and three-dimensional simulations are performed to assess the numerical strategy, define the mesh requirements, and to assist in the choice of the kinetic scheme for hydrogen/oxygen combustion. The large-eddy simulation tool is used with a reduced chemistry (five species and three global steps) on a mesh resolution fine enough to use the laminar model assumption ( $\Delta x = 25 \mu\text{m}$ , 680 million points). The Pope criterion and a subgrid-scale Damköhler number  $Da$  are provided with various definitions for the Damköhler number to validate the retained procedure for three-dimensional simulations. The sequence of ignition is detailed, revealing the flame behavior and shock arrangements. A diffusion flame develops in the supersonic mixing layer formed by the igniter flow and hydrogen injections. The flame structure is recovered with a counterflow flame configuration. A comparison with a nonreacting case shows that the driving physical mechanism is mainly linked to the aerodynamics of the igniter jet.

## Nomenclature

$D$	=	discontinuities
$Da$	=	Damköhler number
$E$	=	total nonchemical energy
$k$	=	kinetic energy
$L$	=	characteristic length
$M$	=	Mach number
$M_E$	=	Pope criterion
$N_s$	=	number of species
$p$	=	pressure
$R_u$	=	universal gas constant
$T$	=	temperature
$t$	=	time
$u_i$	=	$i$ th component of the velocity
$x_i$	=	coordinates
$Y_k$	=	mass fraction
$\lambda$	=	conductivity
$\rho$	=	density
$\tau$	=	characteristic time
$\bar{\Phi}$	=	Favre filtering of $\Phi$
$\tilde{\Phi}$	=	Reynolds filtering of $\Phi$
$\chi$	=	scalar dissipation rate
$\dot{\omega}$	=	chemical source term

## Subscripts

$c$	=	convective
$k$	=	species number

## Superscript

$*$ , $+$	=	nondimensional
-----------	---	----------------

## I. Introduction

**S**TUDYING the combustion in a liquid rocket engine (LRE) is a challenging task [1]. In particular, the structure of the supersonic flowfield and the flame structure during the early stages of the combustor lightoff process is not well described, but it appears to be an essential prerequisite for the ignition of the whole main chamber.

The rocket engine combustion chamber under consideration is composed of a plate with dozens of coaxial injectors. In precombustion chamber ignition, a small chamber is built next to the main combustion chamber and connected through an orifice [2], as in a Vinci engine [3]. This igniter is located in the plate center and allows the repeated starting of engines. A sequence of LRE firing may be summarized as follows: first, the combustion chamber is filled with an inert gas to avoid any hazardous combustion. Then, a high-pressure injection of hydrogen occurs through coaxial injectors for few milliseconds, creating underexpanding jets. Once the chamber is filled with hydrogen, the hot, burned gases coming from the igniter are injected at high speed. They are produced from the lean combustion of hydrogen with oxygen, i.e., with an excess of oxygen. An additional injection of hydrogen surrounding the igniter is performed to obtain a stoichiometric combustion, with the residual oxygen contained in the burned gases. Finally, the liquid oxygen (LOx) is injected through coaxial injectors and a flame propagates from injector to injector. A hydrogen jet is supersonic during ignition because of the high-pressure ratio that results from the low pressure in the main chamber. With the consecutive increase of pressure, such injections will consequently exhibit subsonic velocities. For a circular nozzle, Crist et al. [4] and then Donaldson and Snedeker [5] classified any inert jets as subsonic, moderately underexpanded, or highly underexpanded according to the ratio of the nozzle total pressure to the ambient static pressure, i.e., the nozzle pressure ratio (NPR). For a NPR above four, the jet is considered as highly underexpanded and exhibits the structure of a barrel shock, as shown in Fig. 1. The description of the whole phenomena observed in Fig. 1 can be found in [4]. For an NPR above eight, the subsonic flow observed behind the Mach disk may rapidly accelerate and become supersonic, creating a second shock cell similar to the previous one. It is expected to observe such a situation during the ignition process, especially for the hydrogen jet surrounding the jet of burned gases.

The proposed work is related to the early phase of ignition where a sonic jet of hot burned gases underexpands into a combustion chamber filled with gaseous hydrogen. Such a configuration can be recovered when studying the ignition of a scramjet in which a pilot

Received 15 November 2016; revision received 20 May 2017; accepted for publication 15 June 2017; published online 31 July 2017. Copyright © 2017 by the authors. Published by the American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., with permission. All requests for copying and permission to reprint should be submitted to CCC at [www.copyright.com](http://www.copyright.com); employ the ISSN 0748-4658 (print) or 1533-3876 (online) to initiate your request. See also AIAA Rights and Permissions [www.aiaa.org/randp](http://www.aiaa.org/randp).

\*Ph.D. Candidate, UNIROUEN, CNRS, CORIA.

†Associate Professor, UNIROUEN, CNRS, CORIA. Senior Member AIAA.



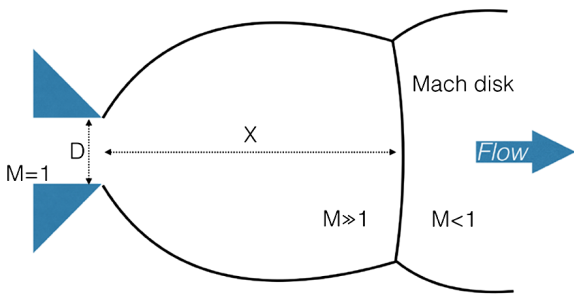
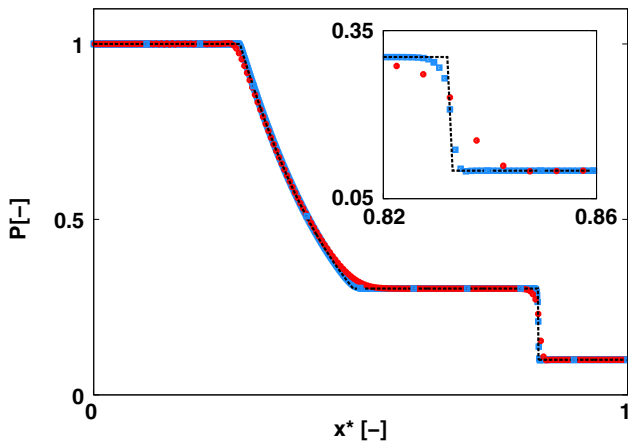
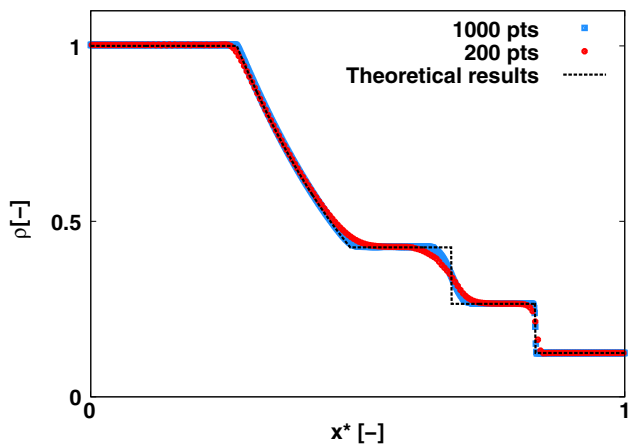


Fig. 1 Sketch of the near-nozzle structure of an underexpanded jet (inspired by [4]).



a) Pressure field



b) Density field

Fig. 2 Sod problem [35] with dimensionless variables of pressure and density.

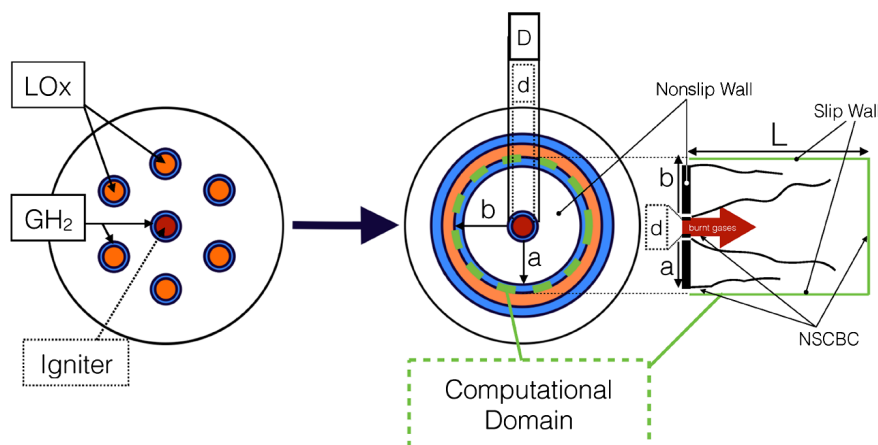


Fig. 3 Sketch of the igniter head modeling.

flame can be used to ignite a supersonic flow [6] or through a flow-assisted flameholding mechanism like plasma-assisted combustion [7]. In internal combustion engines, thermal explosions, supersonic autoignitive deflagrations, or developing detonations may appear [8] with similar characteristics. In the present configuration of a LRE, an injection of LOx from coaxial injectors is performed and may require additional modeling efforts [1] that are out of scope of this study. The ignition sequence of the LRE represents a critical operating point because any delayed ignition may lead to a chamber pressure peak that could damage the whole system. This configuration is a complex phenomenon associating highly compressible turbulent flows with finite rate chemistry effects. Numerical studies are scarce [9–11] and always based on Reynolds-averaged Navier–Stokes computations. Izard and Mura [11] recently performed a simulation of a torch igniter using a Modèle Intermittent Lagrangien model [12] extended to high-velocity flows [13]. A Mach disk was found ill-placed as compared to the value predicted by the empirical correlation of Ashkenas and Sherman [14], and no comparison with experimental data was available. Some related studies also exist for specific topics: the characteristic of nonreacting underexpanded jets has been known for decades [4,5,15–17], and a recent study on mixing with a gaseous hydrogen (and methane) injection into the air was performed by high-resolution large-eddy simulations (LESs) without combustion [18]. Various nozzle pressure ratios ranging from 8.5 to 70 were tested. The near-nozzle shock structure obtained by LES was in agreement with the available schlieren photograph, and the prediction of the Mach disk height correlated well with the empirical relation of [14]. Supersonic combustion was studied separately [19–22], and the numerical results were often compared to the experimental data coming from supersonic burners [23]. A laminar chemistry model (i. e., a no subgrid model for combustion) is often used, but the correction of a flamelet-based combustion model was recently developed in [22] and represents an extension of the low-Mach-number flamelet/progress variable approach [24]. To the knowledge of the authors, the only LES that tried to gather the whole physical phenomena was recently done by Lacaze et al. [25]. They performed an ignition sequence used for a single-injector rocket chamber ignited by a laser and fueled with gaseous oxygen and hydrogen. Comparisons of LES flowfields with experimental data are in good agreement, especially for the time evolution of the chamber pressure. However, this configuration is different from an ignition based on a precombustion chamber as studied here.

Studying the whole sequence of ignition in a LRE is a scientific challenge that has not been extensively addressed yet. The present study is focused on the simulation of the igniter start and represents the first necessary step toward more complex situations where the initial flame propagates through the combustion chamber and ignites coaxial injectors. The objectives are twofold: first, assess the ability of the LES technique to predict multispecies reacting under-expanding jets; and second, provide some fundamental aspects of supersonic flame ignition. The latter requires a numerical approach able to capture discontinuities such as shock waves, and its validation



**Table 1 Igniter characteristics**

Parameter	Value
Burned gases injection	
$T, K$	2000
$P, \text{bar}$	10.0
$U, \text{m/s}$	1000.0
Hydrogen injection	
$T, K$	200
$P, \text{bar}$	2.0
$U_h, \text{m/s}$	1500.0
Geometry	
$L, \text{mm}$	20.0
$a, \text{mm}$	4.0
$b, \text{mm}$	1.0
$d, \text{mm}$	6.5
$D, \text{mm}$	10.0

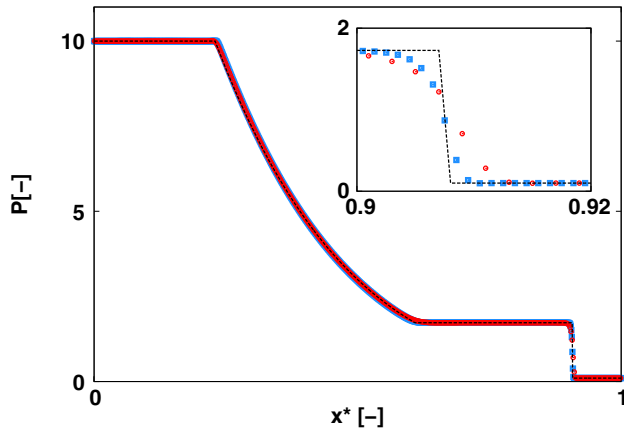
is provided in the next section. Reactive fronts are modeled with the use of a quasi-laminar chemistry modeling along with a very fine mesh resolution, as shown in Sec. III. A simplified geometry of the igniter configuration is simulated by a LES to detail the early instant of ignition. The LES is a powerful tool that has proven its capacity in the capture of complex flows for a large range of applications, such as gas turbine combustion chambers [26], but its potentiality in the design of LRE ignition must still be performed. Conclusions and perspectives are given in the last section.

## II. Numerics and Modeling

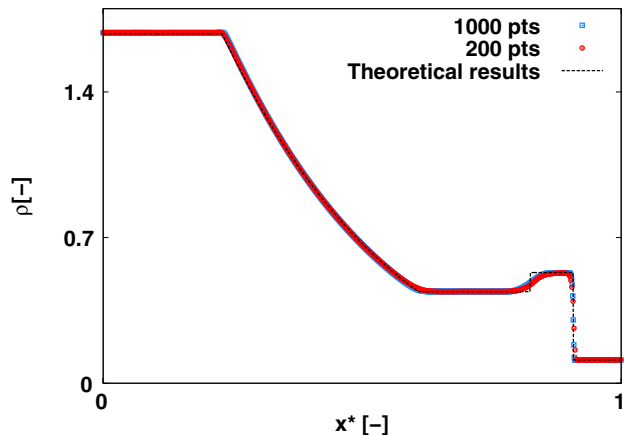
### A. Governing Equations and Numerics

#### 1. LES Solver

Simulations are carried out with the finite volume code SiTCom-B [27–29], which solves the unsteady compressible reacting Navier–



a) Pressure field



b) Density field

**Fig. 4 Sod problem [35] with dimensionless variables of pressure and density.**
**Table 2 Characteristics of 3-D simulations**

Name	$\Delta x, \mu\text{m}$	Mesh <sup>a</sup>	Runtime, h	Processor
MESH1	75	17M	55	512 <sup>b</sup>
MESH2	50	85M	111	1024 <sup>b</sup>
MESH3	25	680M	554	4096 <sup>c</sup>

<sup>a</sup>M denotes millions of points.

<sup>b</sup>IBM iDataPlex, Nehalem EP.

<sup>c</sup>IBM Blue Gene/Q, PowerPC A2.

Stokes equation system on Cartesian meshes. SiTCom-B is mainly designed to perform direct numerical simulation (DNS) and highly resolved LES on massively parallel computers.

The filtered balance equations written hereafter use the classical notations and Favre filtering operations [30]. The mass conservation for species  $k$  is written as follows:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k(\tilde{u}_i))}{\partial x_i} = -\frac{\partial\bar{\rho}F_{k,i}^d}{\partial x_i} - \frac{\partial\bar{\rho}F_{k,i}^c}{\partial x_i} + \bar{\rho}\tilde{\omega}_k \quad (1)$$

with  $k$  selected from a pool of  $N_s$  species.  $Y_k$  is the mass fraction of species  $k$ . The species mass flux  $F_{k,i}^d$  is expressed using the Hirschfelder and Curtiss approximation based on filtered quantities:

$$F_{k,i}^d = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial\tilde{X}_k}{\partial x_i}$$

with  $X_k$  being the species molar fraction,  $W_k$  the atomic weight of species  $k$ ,  $W$  the mean molar mass of the mixture, and  $D_k$  the diffusion coefficient of species  $k$  in the mixture. A correction velocity for diffusion is added to the convective term in Eq. (1) to ensure that the sum of all diffusive fluxes is zero:

$$V_{c,i} = \sum_{k=1}^{N_s} D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial\tilde{X}_k}{\partial x_i}$$

The subgrid-scale (SGS) term  $F_{k,i}^c = \widetilde{Y_k u_i} - \tilde{Y}_k \tilde{u}_i$  is modeled with the Smagorinsky closure [31]. The modeling of the filtered source term of species  $k$  ( $\tilde{\omega}_k$ ) is detailed in Sec. II.A.2.

The conservation of momentum is written as follows:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial\tilde{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

The viscous stress tensor  $\tilde{\sigma}_{ij}$  is classically expressed as follows:

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \mu(\tilde{T}, \tilde{Y}_k) \left[ \left( \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (3)$$

The unknown SGS fluxes  $\tau_{ij} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$  are modeled with the Smagorinsky closure [31].

The conservation of energy is based on the total nonchemical energy  $E$  [30] that is the sum of sensible energy  $e_s$  and kinetic energy:  $E = e_s + 0.5u_i^2$ . Sensible energy is defined as

$$e_s = \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0/W \quad (4)$$

with  $C_v$  as the heat capacity of the mixture at constant volume:

$$C_v = \sum_{k=1}^{N_s} C_{vk} Y_k$$

where the heat capacities  $C_{vk}$  of individual species are only depending on temperature. Knowing  $E$  (or  $e_s$ ) allows us to recover the value of temperature.

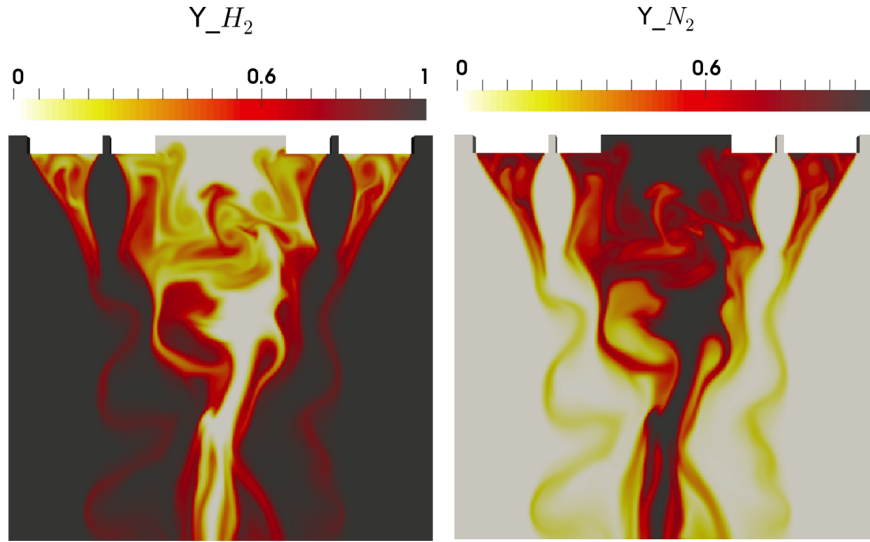


Fig. 5 2-D instantaneous field of species hydrogen and nitrogen mass fraction at  $t = 6.0 \times 10^{-5}$  s;  $\Delta x = 25 \mu\text{m}$ .

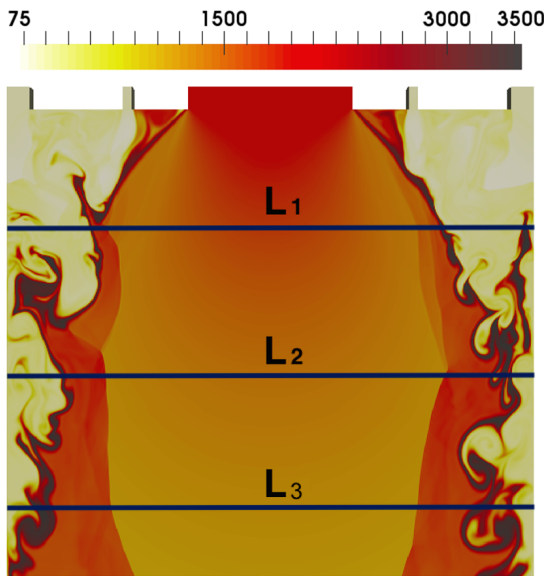


Fig. 6 2-D instantaneous field of temperature (in kelvins) at  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s with the kinetic scheme of [37]. Lines  $L_1$ ,  $L_2$ , and  $L_3$  are locations for statistics recording.

The filtered balance equation of the total nonchemical energy is written as follows:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{E})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathcal{H}}_i}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{\omega}_T \quad (5)$$

The heat release source term is written as follows:

$$\tilde{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N_s} \Delta h_{f,k}^0 \tilde{\omega}_k$$

with  $\Delta h_{f,k}^0$  as the formation enthalpy of species  $k$ . In addition,

$$q_i = -\lambda(\tilde{T}, \tilde{Y}_k) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} h_k^s F_{k,i}^d$$

with  $h_k^s$  as the nonchemical enthalpy of species  $k$ .  $\mathcal{H}_i = (\tilde{E} u_i - \tilde{E} \tilde{u}_i) + (\bar{p} u_i - \bar{p} \tilde{u}_i)$  is modeled as  $F_{k,i}^c$  neglecting the pressure subgrid contribution.

Constant subgrid Prandtl and Schmidt numbers have been set to unity. The ideal gas equation of state is expressed based on filtered variables:  $\bar{p} = \bar{\rho} \tilde{r} \tilde{T}$  with  $\tilde{r} = R_u / W(\tilde{Y}_k)$ , with  $R_u$  being the universal gas constant. The dynamic Smagorinsky model [32] is used for subgrid turbulence modeling.

Equations (1–5) are numerically integrated with a fourth-order skew-symmetric-like scheme augmented with a second- and fourth-order artificial viscosity for spatial discretization [33,34]. The latter requires coefficients that are set to those recommended in [33] ( $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ ;  $\beta_1 = 0.016$  and  $\beta_2 = 1.0$ ). Time advancement is performed using a fourth-order Runge–Kutta scheme with a Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) number equal to unity. Finally, inlet and outlet boundary conditions are treated with the classical NSCBC code [30], which adapts automatically, knowing the local Mach number. This strategy may be found in [28]. Finally, as SiTCom-B is a fully compressible solver, the maximum attainable time step  $\Delta t$  corresponds to the minimum value of the acoustic, diffusive, and chemical time step.

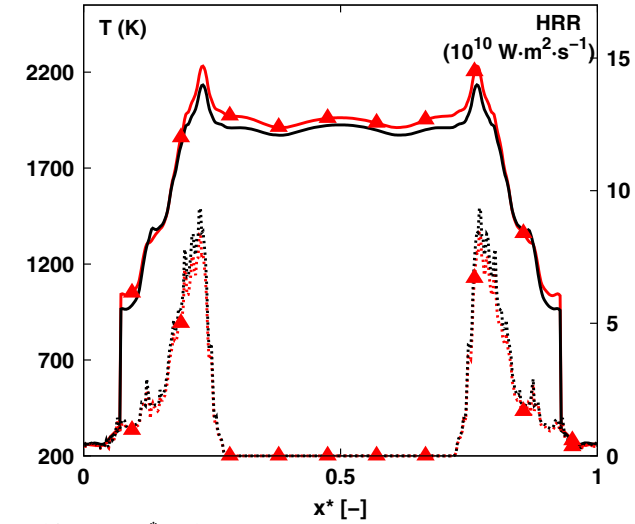
To validate the ability of the numerical scheme to capture shock waves, the Sod shock tube [35] is first studied by DNS. It consists of a long one-dimensional tube, which is closed at its ends and divided into two equal regions separated by a thin diaphragm. Each region is filled with the same gas but with different thermodynamic parameters. As the gas is initially at rest, the sudden breakdown of the diaphragm generates a high-speed flow with a shock wave propagating in the working section. The analytical solution of this problem can be found in [36]. The initial condition for the density  $\rho$ , velocity  $u$ , pressure  $p$ , and species mass fraction  $Y$  is given by the following:

$$(\rho, u, p, Y_{N_2}) = \begin{cases} (1, 0, 1, 1) & \text{if } 0 < x^* < 0.5 \\ (0.125, 0, 0.1, 1) & \text{if } 1 > x^* > 0.5 \end{cases} \quad (6)$$

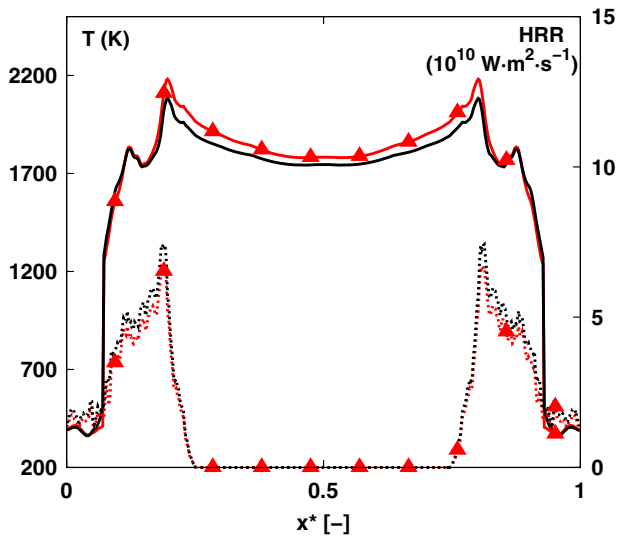
with  $x^*$  as the dimensionless coordinate along the tube ( $x^* = x/L_{\text{ref}}$  with  $L_{\text{ref}} = 1$  m). Similarly,  $p$ ,  $u$ , and  $\rho$  are dimensionless variables based on the following reference values:  $p_{\text{ref}} = 1$  bar,  $u_{\text{ref}} = 1$  m/s, and  $\rho_{\text{ref}} = 1$  kg/m<sup>3</sup>. The final time is  $t = 0.6$  ms. Results are displayed in Fig. 2 for two mesh resolutions, and very good results are observed, as stated in [33], validating the ability of SiTCom-B to capture shock waves. This strategy is then retained for the simulation of reacting cases. Indeed, it has already been used with success on the simulation of Cheng's burner [23,29] and is commonly employed in the scientific community [21].

## 2. Chemistry Modeling

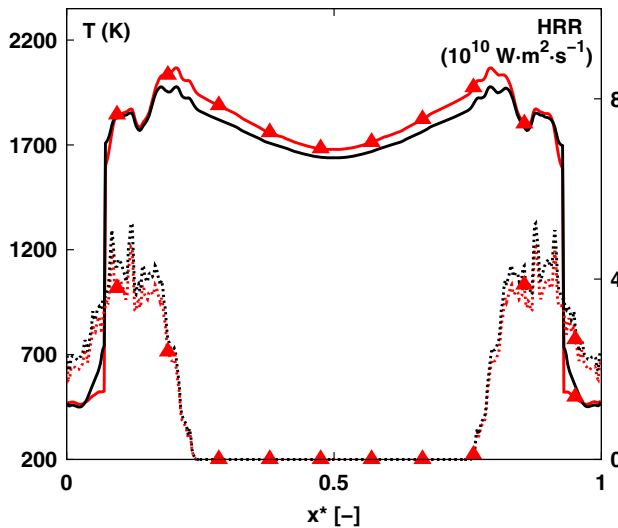
In SiTCom-B, the integration of the hydrogen–oxygen chemistry is fully explicit. Two kinetic schemes are used: the detailed chemistry of San Diego [37] that contains  $N_s = 8$  chemical species and  $N_R = 21$



a)  $y/d = 1(L_1)$ .  $x^* = x/L$



b)  $y/d = 2(L_2)$ .  $x^* = x/L$

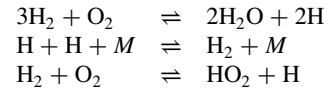


c)  $y/d = 3(L_3)$ .  $x^* = x/L$

**Fig. 7** Comparison of reduced (symbols) and detailed chemistry. Time-averaged profiles for temperature (solid lines) and HRR (dotted lines) over 10 convective times:  $10 \times t_c = 1.2 \times 10^{-4}$  s.

reversible elementary reactions, and the reduced chemistry of Boivin et al. [38] ( $N_S = 5$  and  $N_R = 3$  global steps). This reduction assumes the quasi steady state of O, OH, and  $H_2O_2$  among the eight species of the kinetic scheme developed by the group of San Diego

[37]:  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ , H, O, OH,  $HO_2$ , and  $H_2O_2$ . The resulting three-step scheme reads as



and is able to recover autoignition delays [38] with a reduced time step.

In this study, the LES technique is retained to simulate the flow exiting from the igniter duct and reacting inside the main combustion chamber. The flame–turbulence interaction is modeled with the assumption that the filtered source term of species  $k$  is based on LES filtered fields, i.e.,  $\tilde{\omega}_k(\rho, Y_k, T) = \tilde{\omega}_k(\tilde{\rho}, \tilde{Y}_k, \tilde{T})$  in Eq. (1), with  $Y_k$  being the  $k$ th species mass fraction and  $T$  as the temperature. The overbar denotes the spatial filtering operation, and the tilde operator is the density weighted filtering defined for any variable  $Q$  as  $\tilde{\rho} \tilde{Q} = \tilde{\rho Q}$ . This approximation led to very good results when used to model turbulent combustion in supersonic flows [21]. Note that the Favre filtering has been recently used to verify the behavior of large-scale hydrogen–air planar deflagration [39] and the Zel’dovich–von Neumann–Döring (known as ZND) theory of detonation [40], thus validating its use in the present configuration even if large density variations occur.

### B. Configuration and Mesh Resolution

The modeling of the target configuration is shown in Fig. 3, where the igniter, which is originally surrounded by coaxial injectors, is simulated alone with a hydrogen jet on the sides (as in [9]). A focus is then given on the intrinsic igniter characteristics without simulating the prohibitive and complex interaction between the igniter and the adjacent injectors that would require at least 5 billion mesh points. Jet properties are given in Table 1.

The igniter is a long tube of diameter  $d$  that links a small combustion chamber to the main combustion chamber. In the small chamber, the combustion of hydrogen with oxygen in excess occurs at high pressure and the resulting hot burned gases are delivered at a Mach number of  $M = 1$  into the main chamber [9]. The pressure of injection is close to  $p_{inj} = 10$  bar. A hydrogen cooling flow is positioned around the igniter tube (external diameter  $D$ ). This coolant hydrogen [41], flowing at 200 K, is injected in the main chamber at supersonic speed ( $M = 1.5$ ,  $p_{inj} = 2$  bar) and reacts with the resulting oxygen coming from the igniter to produce roughly a global stoichiometric combustion. Apart from the igniter is located the first row of coaxial injectors that feature an inner jet of oxygen surrounded by a flow of hydrogen. They are modeled by a single annular ring having an inner and outer radii of  $D/2 + a$  and  $D/2 + b$ , respectively. The composition of the burned gases exiting from the igniter results from the combustion of hydrogen with oxygen in excess at 1.0 MPa [42] to yield a temperature between 2000 and 3000 K [10,42]. An equilibrium calculation performed with the software EQUIL from the CHEMKIN package [43] generated the following composition of species:  $Y_{HO_2} = 0.0001$ ,  $Y_{H_2} = 0.0004$ ,  $Y_{O_2} = 0.7577$ ,  $Y_{H_2O} = 0.2299$ ,  $Y_{OH} = 0.0105$ , and  $Y_O = 0.0014$ . The incoming flow was then modeled by 75% oxygen and 25% water in the mass fraction at a temperature of 2000 K.

The initial state in the main chamber as well as in the igniter duct correspond to 100% of an inert gas (diluent) at low pressure ( $p_{ch} = 0.1$  bar) to mimic an ignition into space pseudoconditions. As a consequence, the pressure ratio is  $p_{inj}/p_{ch} = 100$ . The ability of the numerical solver to capture such discontinuity is assessed on a modified Sod configuration. For  $x^* \in [0; 0.5]$ , the properties of the burned gases coming from the igniter are used to compute the density value, whereas the initial conditions of the main chamber are considered when  $x^* \in [0.5; 1]$ :

$$(p, u, \rho, Y) = \begin{cases} (10, 0, 1.6, Y_1) & \text{if } 0 < x^* < 0.5, \\ (0.1, 0, 0.1, Y_2) & \text{if } 1 > x^* > 0.5. \end{cases} \quad (7)$$

with  $x^*$  the dimensionless coordinate along the tube ( $x^* = x/L_{ref}$  with  $L_{ref} = 20$  mm),  $Y_1 = Y_{O_2} + Y_{H_2O} = 1.0$ , and  $Y_2 = Y_{N_2} = 1.0$ .

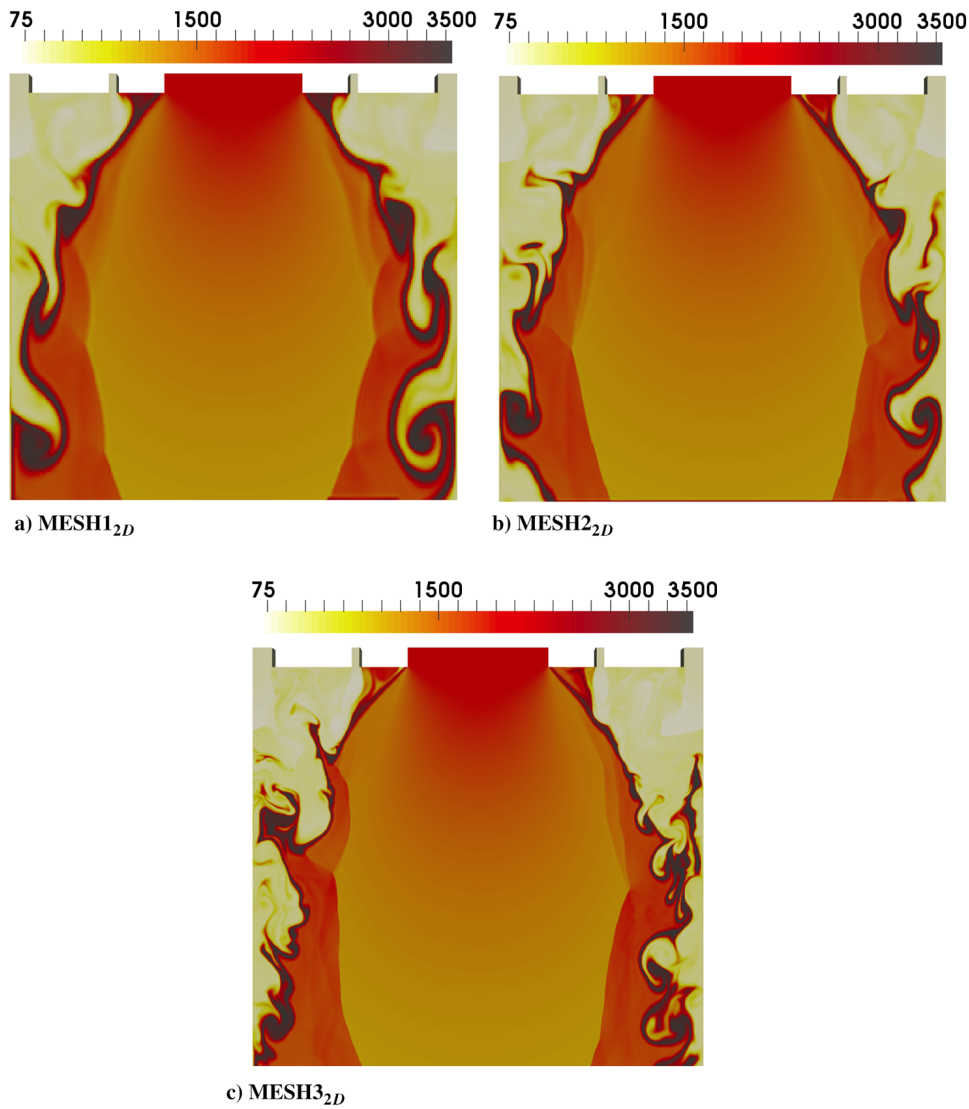


Fig. 8 2-D instantaneous temperature field (in kelvins) for three different grids. Instantaneous fields are given at  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s.

Note that  $p$ ,  $u$ , and  $\rho$  are dimensionless with  $p_{\text{ref}} = 1$  bar;  $u_{\text{ref}} = 1$  m/s, and  $\rho_{\text{ref}} = 1$  kg/m<sup>3</sup>. The mesh resolution and time step used for the finer mesh are  $\Delta x = 20$   $\mu\text{m}$  and  $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$  s, respectively. Here, again (Fig. 4), very good results are obtained as compared to the theoretical solution, thus validating the numerical solver for subsequent studies.

Two-dimensional (2-D) and three-dimensional (3-D) simulations of the igniter configuration are performed. The computational domain, which is indicated in Fig. 3, is delimited by the plate of injection at its top and the flow of hydrogen coming from coaxial injectors on sides. Dealing with an LOx jet is out of scope of this study and bounds our domain of simulation. An exit is positioned at the end. The flow inside the duct of injectors and igniter is simulated with the use of immersed boundary methods (IBMs) [44,45] for a length equal to one-third of the diameter of the igniter. Sidewalls are modeled with slip IBMs. The 2-D configuration corresponds to a square domain of length  $L$ . The 3-D case is a cylinder having the dimensions prescribed in Table 1 with length  $L$ . A constant mesh cell resolution is used with three different mesh sizes (see Table 2). Note that the proposed mesh resolutions are more stringent than the recommendations found in [46] for nonreactive jets when considering the sole igniter ( $\Delta x \ll d/30$ ), but they may have limitations for the surrounding hydrogen jet, especially for the coarser mesh.

### C. Preliminary Results

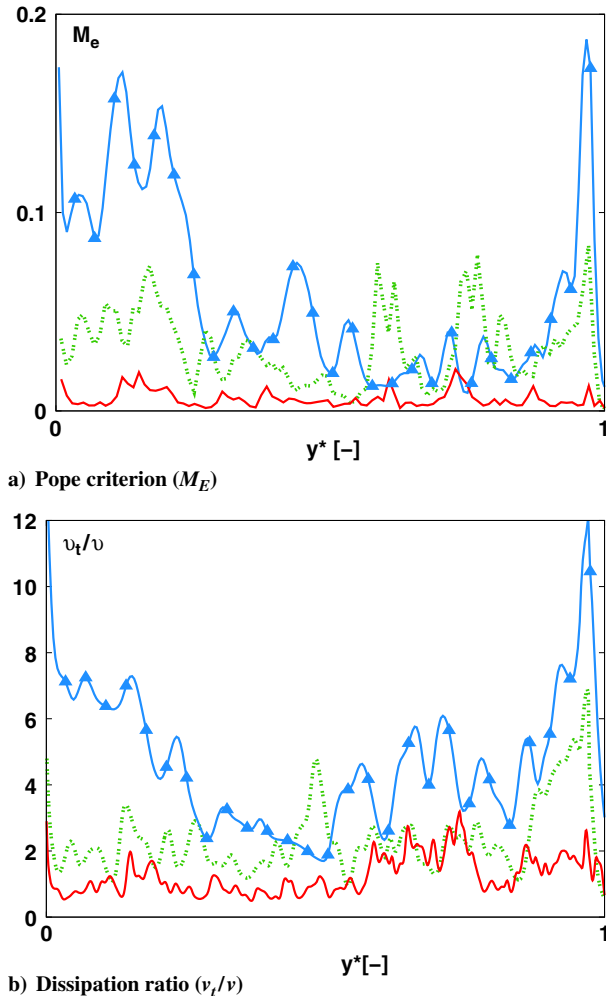
#### 1. 2-D Results

Two-dimensional simulations are performed to assess the validity of the reduced chemistry of Boivin et al. [38] by comparison with the

detailed chemistry developed by the group of San Diego [37]. Simulations are performed with a mesh size of 25  $\mu\text{m}$  for a total number of points of 0.75 million. Following the procedure described in the Introduction (Sec. I), hydrogen alone is injected in the main chamber ( $t = 0.0$  s). The boundary condition of the igniter tube is then considered as a wall. A mixing occurs with the nitrogen ambient gas. In particular, the igniter duct is still filled with this diluent, as shown in Fig. 5, where the fields of the species mass fraction of hydrogen and diluent are provided. In Appendix A, the flow behavior is described when helium replaces nitrogen. Defining the convective time  $t_c$  as  $t_c = U_h/L$ , where  $U_h$  is the bulk velocity of hydrogen (see Table 1), the burned gases are delivered to the main chamber by the igniter duct when the time reaches  $t = 5t_c = 6.0 \times 10^{-5}$  s. When these hot gases are injected into the chamber, the combustion between the hot oxygen present in the burned gases and the additional surrounding hydrogen starts instantaneously. After 10 convective times (i.e., at  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s), a zone of high temperature due to the reactions of combustion separates the two jets of hydrogen from the burned gases area (Fig. 6).

This reacting zone is detached from the shocks pattern created by the supersonic gas expansion, and it is highly perturbed by the turbulence generated by the multijet interaction. The gas flow temperature decreases with the distance from the igniter unless it crosses a shock. The latter leads to an increase of temperature about 400 K without any substantial change on the gas composition. These hot burned gases then react with hydrogen and lead to a temperature of 3500 K that is close to the equilibrium temperature of a stoichiometric mixture of hydrogen and oxygen at a pressure of 2 bar.





**Fig. 9** Influence of the mesh resolution: a)  $M_E$  and b)  $\langle \nu_t/\nu \rangle$ . [ $25 \mu\text{m}$  (plain, solid line),  $50 \mu\text{m}$  (dotted line), and  $75 \mu\text{m}$  (lines marked with triangles).] Note that  $y^* = y/L$ .

This configuration was computed with both kinetic schemes of Boivin et al. [38] and developed by the group of San Diego [37], and the statistics were recorded for the temperature  $T$  and the heat release rate (HRR) from  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s to  $t = 24.0 \times 10^{-5}$  s, i.e., for 10 convective times. In Fig. 7, the comparison between the detailed and reduced kinetic schemes is shown at three downstream locations of  $L_1$ ,  $L_2$ , and  $L_3$  (Fig. 6) corresponding to  $y/d = 1, 2$ , and  $3$ , respectively. From Figs. 6 and 7, a similar shape of mean temperature and mean HRR is observed for each location  $L_i$ . Two peaks of the mean HRR are also observed on both sides of the center of the domain of computation (i.e.,  $x^* = 0.5$ ). They represent the reaction zone located between the burned gases' inflow and hydrogen jets. Consequently, a rise of temperature occurs and reaches a maximum of the mean temperature of about 2200 K with the reduced chemistry and 2100 K with the detailed chemistry. These temperature values are far from the instantaneous value observed in Fig. 6 (3500 K), meaning that this flow configuration is highly turbulent. The flow under study is an expansion of burned gases with an excess of oxygen in an atmosphere of hydrogen. The distance between the center  $x^* = 0.5$  and the HRR peaks location increases with  $y/d$ . This flow expansion leads to a decrease of the temperature, with  $y/d$  of the gas coming from the igniter ( $T \approx 1900$  K at  $y/d = 1$ ;  $T \approx 1800$  K at  $y/d = 2$ ;  $T < 1700$  K at  $y/d = 3$ ) with consequences on the flame temperature. The maximum of the mean flame temperature also decreases with  $y/d$ . In addition, the peak of the HRR is sharp in  $L_1$  but spreads over the mixing layer as far as the flow expands. As the flame is highly turbulent, in statistics, it becomes impossible to distinguish the temperature increase due to the shocks pattern from the one coming from chemical reactions. Flame/turbulence interaction and compressibility effects are blurred in Fig. 7, contrary

to the snapshot of Fig. 6. A good agreement is found between the two considered kinetic descriptions for both the mean temperature and heat release rate.

Finally, the averaged time step for the chemistry of Boivin et al. [38] is  $\Delta t_B = 7.57 \times 10^{-10}$  s and  $\Delta t_{SD} = 4.51 \times 10^{-10}$  s for the chemistry proposed by the group of San Diego [37]. These chemical time steps  $\Delta t_{\text{Chem}}$  are the minimum values of the species chemical time step, which are defined as

$$\Delta t_{\text{Chem}} = \min_{k \in [1, N_s]} \left[ \frac{a_{\text{tol}} + r_{\text{tol}} \times \rho Y_k}{|\dot{\omega}_k|} \right] \quad (8)$$

where  $r_{\text{tol}}$  is set constant to 0.1, and  $a_{\text{tol}} = 1.0 \times 10^{-12}$  kg/m<sup>3</sup>. In the present case, using a reduced chemistry [i.e., having less species to consider in the calculation of  $\Delta t_{\text{Chem}}$  in Eq. (12)] makes  $\Delta t_B > \Delta t_{SD}$ . In addition, with the reduced chemistry of Boivin et al. [38], only five species are transported, meaning that the time required to compute numerical fluxes and evaluate transport properties is decreased as compared to a more detailed chemistry. For all these reasons, the chemistry of Boivin et al. is then retained for 3-D simulations because it gives an overall cost for one iteration that is 50% cheaper than with the chemistry proposed by the group of San Diego [37].

## 2. Impact of Mesh Resolution

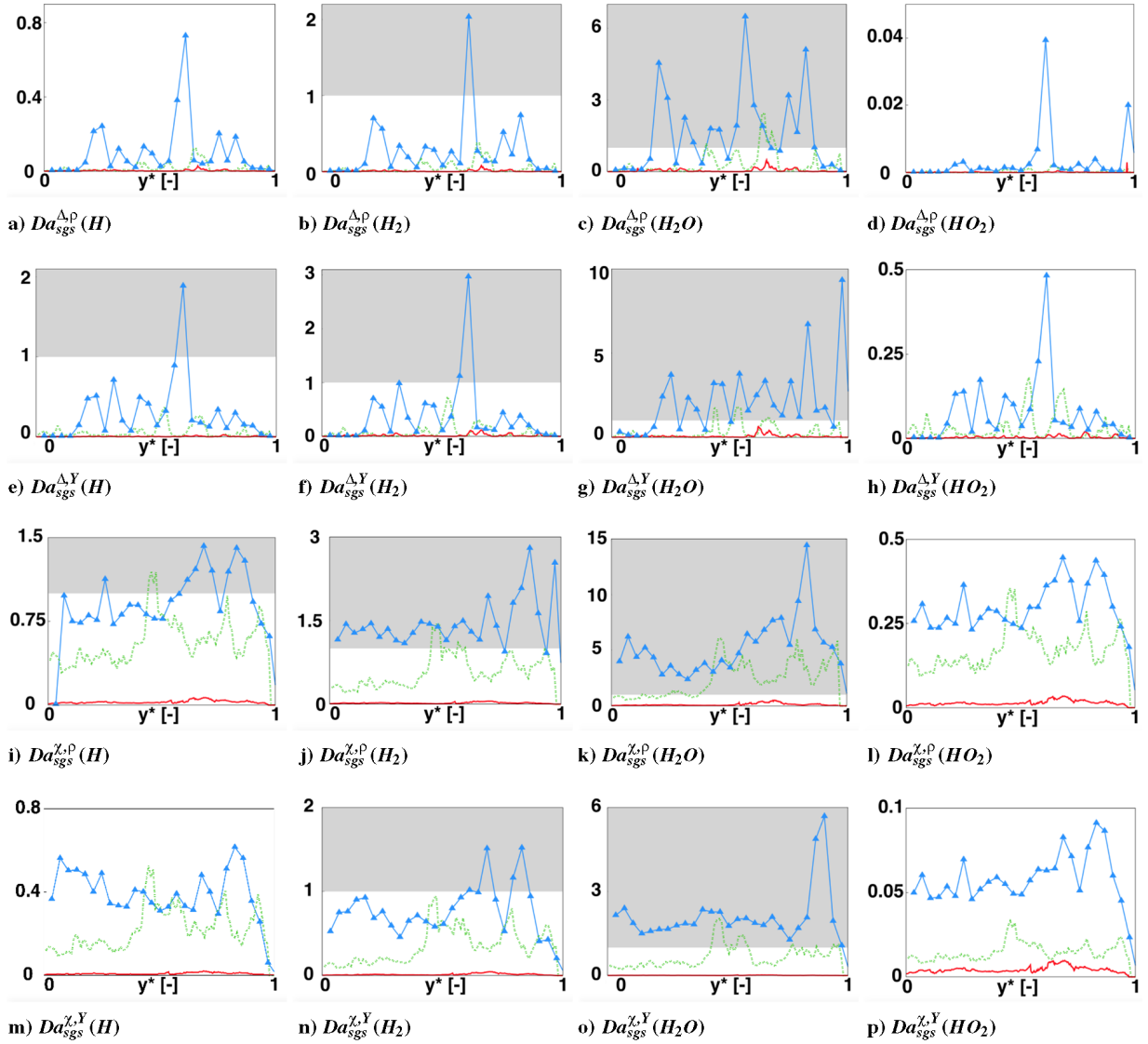
The simulations of the two-dimensional configuration were performed with three different meshes (MESH<sub>12D</sub>, MESH<sub>22D</sub>, and MESH<sub>32D</sub>) having mesh cell sizes  $\Delta x$  of 75, 50, and 25  $\mu\text{m}$ , respectively. The procedure to record statistics follows the one proposed in Sec. II.C.1 and is based on 10 convective times. Instantaneous fields of temperature are given in Fig. 8 and show a significant differences at  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s. Indeed, the more refined the mesh is, the more turbulent structures are present, especially in the zone separating the two jets of hydrogen from the burned gases. The shocks pattern exhibits a similar trend but is somewhat different, and it is always linked to the shapes of the eddies created in the supersonic mixing layer. The discontinuities observed in Fig. 8a on the pseudobarrel shock created by the igniter flow expansion are linked to the flame concavity. These structures are indeed created by the flow interaction coming from hydrogen injectors on one side and the igniter on the other side. This is confirmed on the finest mesh (Fig. 8c) where a clear asymmetry is observed. For instance, on the upper part of the flow, a large eddy exists on the left side but is not recovered on the right side. This structure leads to a well-detached shock, which is contrary to the one observed on the right side that stays closer to the flame sheet. In Appendix B, the impact of the mesh resolution is provided showing a maximum error of 13% between the different mesh resolutions, and an average difference less than 5%.

## III. Results and Discussion of 3-D Simulations

### A. Mesh Quality

Three-dimensional simulations are performed with the chemistry of Boivin et al. [38] and for three mesh resolutions, as summarized in Table 2. The quality of the LES can be assessed through the Pope criterion  $M_E$  [47], defined as  $M_E = k_{\text{sgs}}/[k_{\text{sgs}} + k_{\text{res}}]$ , where  $k_{\text{res}}$  is the resolved turbulent kinetic energy,  $k_{\text{sgs}}$  is the subgrid-scale turbulent kinetic energy, and the sum  $k_{\text{res}} + k_{\text{sgs}}$  is the total turbulent kinetic energy. The SGS turbulent kinetic energy is modeled by  $k_{\text{sgs}} = (\nu_t/[C_e^{1/3} C_s^{4/3} \Delta])^2$  with  $C_e = 1.05$  and  $C_s = 0.15$ .  $\Delta$  is the filter size equal to  $\Delta x$ , and  $\nu_t$  is the turbulent viscosity [31]. The resolved turbulent kinetic energy is modeled by  $k_{\text{res}} = 0.5(\langle \tilde{u}_i^2 \rangle) - \langle \tilde{u}_i \rangle^2$ .  $M_E$  is estimated along the  $y$  axis with the data extracted by a the spatial averaging  $\langle (\cdot) \rangle$  of 2-D planes parallel to the plane of injection, and the results are presented in Fig. 9a.

It was verified that this ratio was below the recommended value of 0.2, whatever the mesh resolution. To reinforce this result, a comparison of the subgrid-scale turbulent viscosity and the laminar viscosity  $(\nu_t/\nu)$  is given in Fig. 9b as a function of  $y^*$ , similarly to the procedure used to compute  $M_E$ . This ratio almost never exceeds 10,



**Fig. 10** Evolution of  $\langle Da_{sgs} \rangle$  along  $y^*$  axis with  $y^* = y/L$  and  $Da_{sgs}(k)$  from Eqs. (10)–(12). The mesh resolutions are  $25 \mu\text{m}$  (plain, solid line),  $50 \mu\text{m}$  (dotted line), and  $75 \mu\text{m}$  (lines marked with triangles).

whatever the mesh resolution, and is even below 3 with MESH3. An instantaneous comparison would show that  $\nu_i/\nu < 5$ , meaning that the turbulent structures are well resolved on the finest mesh [21].

### B. Laminar Model for Combustion

Duwig et al. [48] gave credit to the laminar model (i.e., the no-model assumption) when the subgrid Damköhler number  $Da_{sgs}$  was very small as compared to unity.  $Da_{sgs}$  may be defined [49] as the ratio of the characteristic time of the flow  $\tau_{sgs}$  over the characteristic time of chemistry  $\tau_c$ :

$$Da_{sgs} = \frac{\tau_{sgs}}{\tau_c} \quad (9)$$

Note that  $\tau_{sgs}$  can be computed, either based on the smallest resolved turbulent structure

$$\tau_{sgs}^{\Delta} = \frac{C_s^2 \Delta^2}{\nu_t} \quad (10)$$

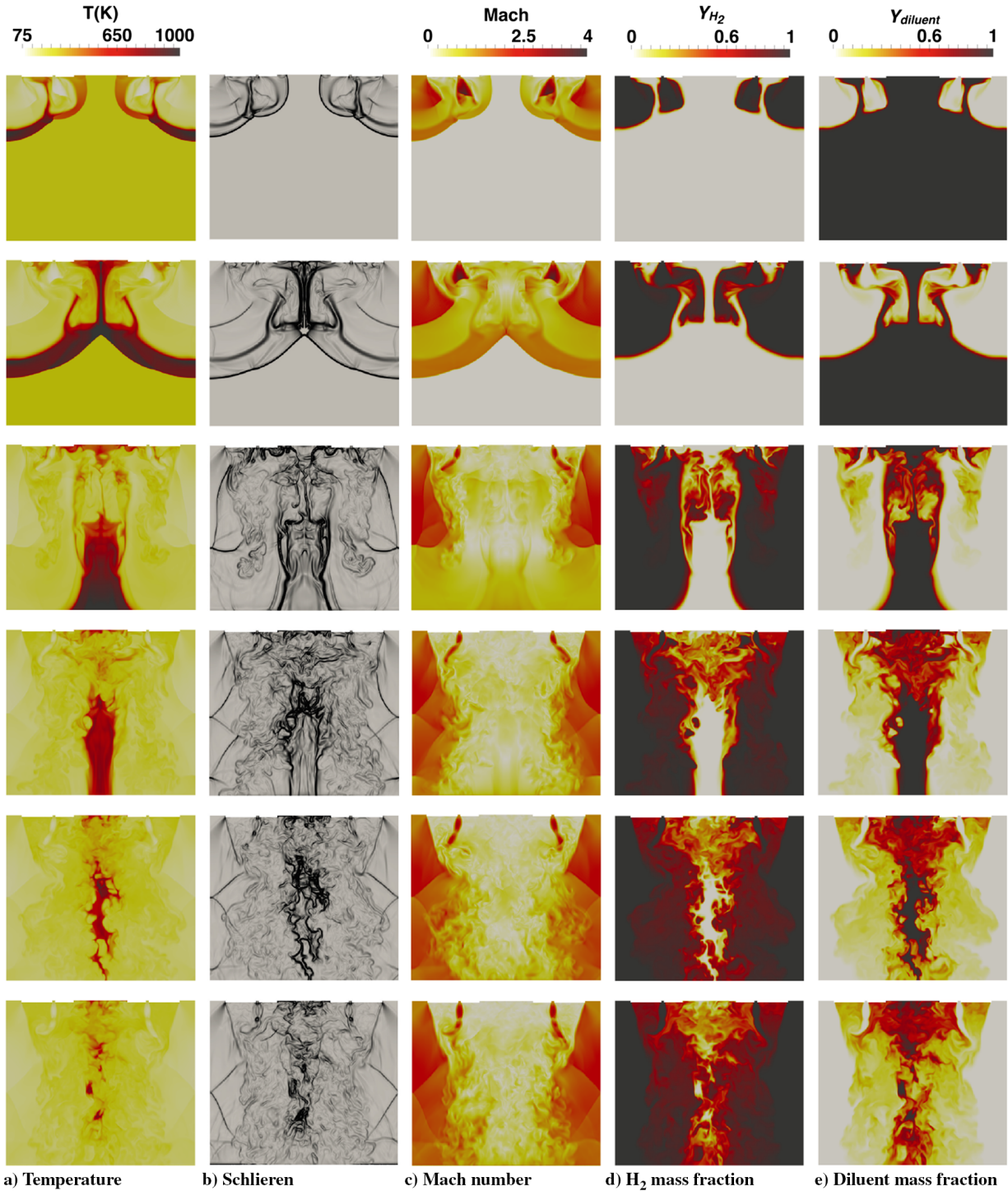
or considering the scalar dissipation rate  $\chi$ :

$$\tau_{sgs}^{\chi} = \frac{1}{\chi} \quad \text{with} \quad \chi = 2 \frac{\nu_t}{Sc_t} |\nabla Z|^2 \quad (11)$$

where  $Z$  is the mixture ratio computed with Bilger et al.'s definition [50], and  $Sc_t$  is the turbulent Schmidt number set to unity. The characteristic time of chemistry is defined by using the production rate of the species  $k$  as

$$\tau_c^Y(k) = \frac{\rho Y_k}{\dot{\omega}_k} \quad \text{or} \quad \tau_c^{\rho}(k) = \frac{\rho}{\dot{\omega}_k} \quad (12)$$

Several Damköhler numbers can then be computed using both definitions for  $\tau_{sgs}$  and  $\tau_c$ :  $Da_{sgs}^{\chi,\rho}(k)$ ,  $Da_{sgs}^{\chi,Y}(k)$ ,  $Da_{sgs}^{\Delta,\rho}(k)$ , and  $Da_{sgs}^{\Delta,Y}(k)$ . Their computations along the  $y$  axis were performed with the same procedure as for Pope's criterion [47], but only for points located in the flame, i.e., for a heat release rate equal to or above 1% of its maximum. Figure 10 shows the value of  $\langle Da_{sgs} \rangle$  obtained with 100 samples equally distributed for the solution at  $t = 6.3 \times 10^{-5}$  s. The condition  $\langle Da_{sgs} \rangle < 1$  is strictly respected for the finest mesh (MESH3) for all the mesh points and whatever is the definition of  $Da_{sgs}$  [Eq. (9)]. For the coarsest mesh (MESH1 and MESH2),  $\langle Da_{sgs}^{\chi,Y}(H_2O) \rangle$  is above unity, meaning that a subgrid-scale contribution should be added to chemical source term. The choice of the species used to compute the Damköhler number appears as crucial because it can yield erroneous information. For hydrogen/oxygen combustion, species  $H_2O$  appears to be the most constraining species, as was already used by Quinlan et al. in [51] for a study on combustion in a scramjet configuration. Equation (10) can be replaced by the following expression:



**Fig. 11** 2-D slices of the instantaneous 3-D field during the injection of hydrogen (MESH3). From top to bottom,  $t = 0.5, 1, 4, 6,$  and  $8;$  and  $10 \times t_F$  with  $t_F = 5.0 \times 10^{-6}$  s.

$$\tau_{\text{sgs}} = \frac{\Delta}{\sqrt{(2/3)k_{\text{sgs}}}} = \frac{\Delta^2 C_\epsilon^{1/3} C_s^{4/3}}{\sqrt{(2/3)\nu_t}} \approx 0.1 \frac{\Delta^2}{\nu_t} \approx 5\tau_{\text{sgs}}^{\Delta}$$

Using this definition leads to a value of the subgrid Damköhler number approximately five times larger than for  $Da_{\text{sgs}}^{\Delta}$ . The criterion  $\langle Da_{\text{sgs}} \rangle < 1$  is then respected for each species  $k$ , with the exception of

**Table 3** Evaluation of the Mach disk position based on empirical correlations with NPR = 20

Date	Authors	NPR range	$X/D = A(\text{NPR})^B$	Results
1958	Adamson and Nichols [52]	[2, 100]	$A = 0.986, B = 0.5025$	4.42
1962	Crist et al. [4]	[2, 40]	$A = 1.049, B = 0.4644$	4.2
1964	Lewis and Carlson [54]	[1, 100]	$A = 0.69M_e\gamma^{0.5}, B = 0.5$	5.0
1966	Ashkenas and Sherman [14]	[15, 10,000]	$A = 0.67, B = 0.5$	3.00
1995	Cumber et al. [53]	[1, 40]	$A = 1.2182, B = 0.4236$	4.33
1998	Hanson and Palmer [55]	[1, 1000]	$A = 0.8736, A = 0.5207$	4.1
2016	Present work	[-]	[-]	4.4



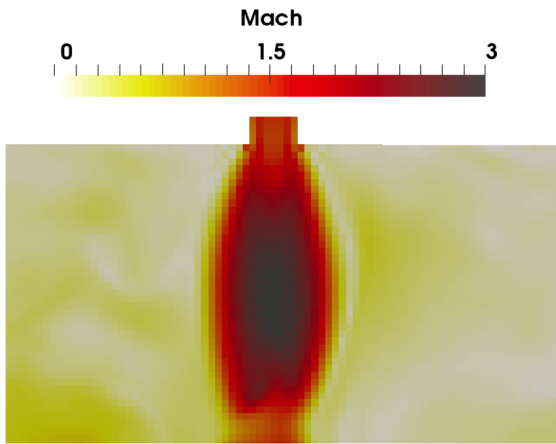


Fig. 12 Close-up view of the Mach number field in the vicinity of the hydrogen injector from the igniter.

$\text{H}_2\text{O}$ , which has an extreme value greater than one. Finally, estimating the Damköhler number from 2-D solutions leads to lower values than in 3-D cases because the turbulent viscosity is larger.

### C. Nonreacting Flow Evolution

The description of the nonreactive (and reactive) flow evolution is performed with MESH3. The mesh resolution and time step are then equivalent to those used with the modified Sod problem (see Sec. II.B). Figure 11 shows the temporal evolution ( $t = 0.5, 1, 4, 6, 8,$  and  $10 \times t_F$  with  $t_F = 5.0 \times 10^{-6}$  s) of the temperature, schlieren, Mach number, and species mass fraction during the supersonic jet of hydrogen into the combustion chamber, with the latter being already purged with an inert gas (diluent). Schlieren photographs are computed with the following relation:

$$\text{Schlieren} = \exp(C_0 S) \quad \text{with} \quad S = \frac{|\nabla \rho| - C_1 |\nabla \rho|_{\max}}{|(C_2 - C_1) \nabla \rho|_{\max}}$$

where the constants  $C_0$ ,  $C_1$ , and  $C_2$  must be tuned to obtain the best contrast of gray color and amplification of density gradients. The hydrogen delivery is performed through the injector of hydrogen surrounding the igniter as well as the coaxial injectors. Each of these injections forms an underexpanded jet exhibiting a Mach disk structure, similar to the 2-D case. Indeed, hydrogen is injected at  $p = 2.0$  bar with supersonic velocities into a combustion chamber having a pressure of  $p = 0.1$  bar. It corresponds to a nozzle pressure ratio of NPR = 20. This pressure discontinuity at injection creates a shock that propagates from the plate of injections to the outlet of the burner into a domain considered at rest. This primary shock generates a temperature increase of about 700 K. After one convective time (third row in Fig. 11), the primary shock and the heated area are evacuated, and the diluent is pushed away by the hydrogen. After four convective times, the burner is almost filled with hydrogen, except in the middle of the chamber, where the burned gases from the igniter will be injected, and in the zone of recirculation between the two jets of  $\text{H}_2$ , where some traces of the diluent are still present.

The Mach disk structure observed with the supersonic jet of  $\text{H}_2$  looks like the well-known barrel-shock structure described by Crist et al. [4]. In the present work, such an observation is made for the jet of hydrogen surrounding the igniter in Fig. 11c or in Fig. 12: two shock cells develop once the primary shock leaves the domain of computation. The near-nozzle sonic characteristics (in particular, the Mach disk position; i.e.,  $X/D$  in Fig. 1) can be estimated through empirical relations that only depend on the NPR. The results given in Table 3 [4,14,52–55] show a good agreement between the simulations that provides a value of  $X/D = 4.4$  for the surrounding jet of  $\text{H}_2$  and most of the proposed empirical models, especially with the one of Adamson and Nichols [52] and Cumber et al. [53]. The precise location of the Mach disk position would certainly require additional mesh points, as recommended in [46].

### D. Reacting Flow Evolution

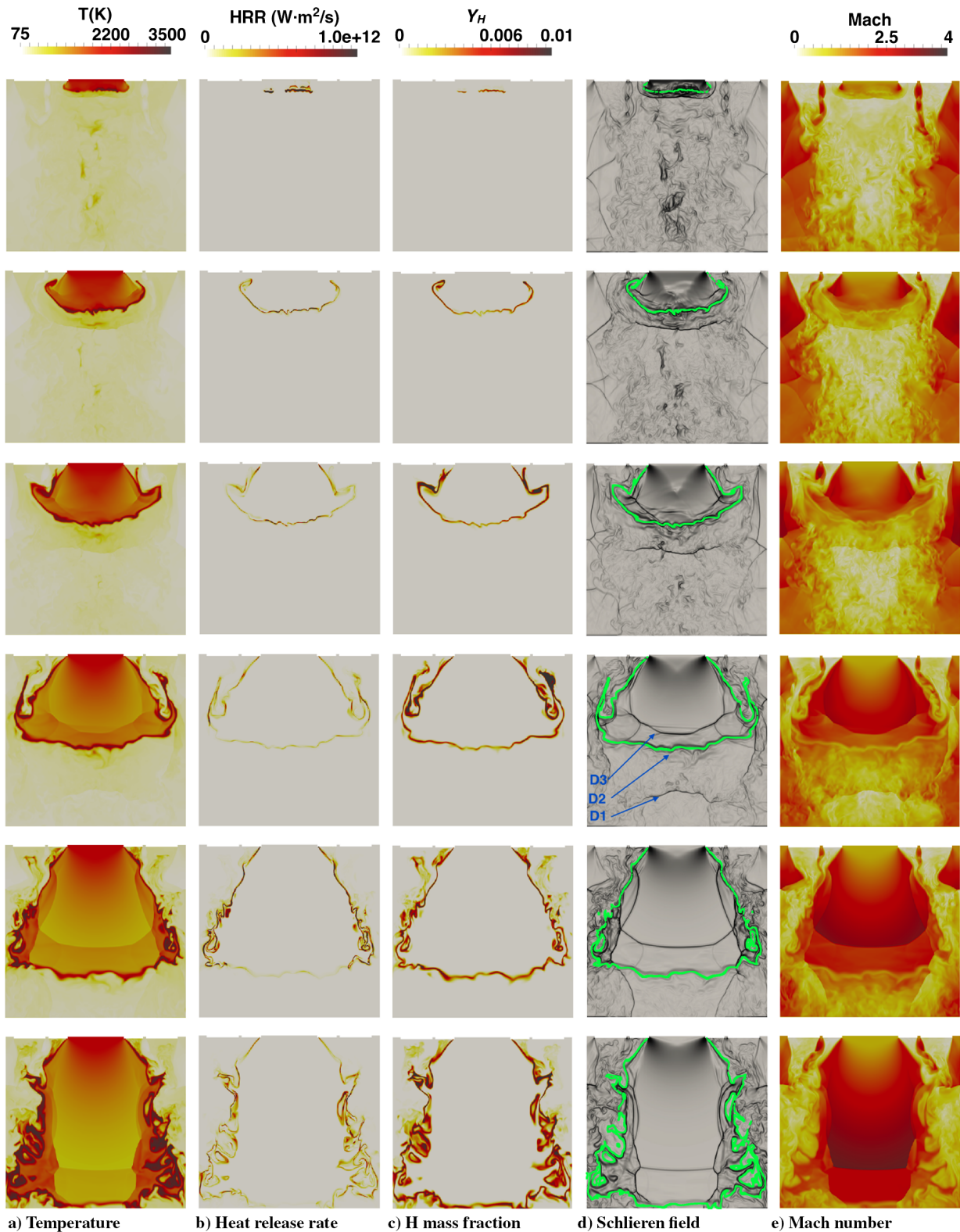
Figure 13 shows the temporal evolution ( $t = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8,$  and  $0.9 \times t_B + 10t_F$  with  $t_B = 1.5 \times 10^{-5}$  s) of the temperature, the heat release rate, the mass fraction of radical H, the Mach number, and the stoichiometric isoline on a schlieren field during the ignition process. The stoichiometric isoline was computed using Bilger et al.'s definition of the mixture fraction  $Z$  [50]:

$$Z = (Y_{\text{H}_2} - Y_{\text{O}_2}/8 + 0.1 \times Y_{\text{H}_2\text{O}} + 0.073)/1.073$$

When the burned gases start to get into the combustion chamber, the two injectors of hydrogen surrounding the igniter exhibit an underexpanded jet with equivalent barrel shocks and Mach disks [52]. The penetration of the burned gases strongly affects this structure modifying the angle of jet of hydrogen, as in a jet in crossflow [56]. At the early instants of the injection of burned gases (rows 1 and 2 of Fig. 13), the flame is not attached to the igniter lips, and preferential sites of autoignition (i.e., spontaneous ignition or self-ignition) appear. Their locations are driven by the local temperature, scalar dissipation ( $\chi = D|\nabla Z|^2$ , where  $D$  is diffusivity), and mixing [57]. Chemical reactions are then delayed if one locally observes a high scalar dissipation or a low temperature, or if the mixture is not optimal enough because the initial field that the burned gases collide with is inhomogeneous. In Fig. 14, the heat release rate is plotted for two moments ( $t = 5.045 \times 10^{-5}$  s and  $t = 5.090 \times 10^{-5}$  s) that are earlier than the snapshots given in Fig. 13 ( $t = 5.150 \times 10^{-5}$  s). Three spots of autoignition are found at  $t = 5.045 \times 10^{-5}$  s and develop over time. In areas where combustion has not started yet, three main reasons are invoked. First, on the sides, the flow accelerates (the Mach number increases in Fig. 13) with a decrease of temperature up to 1500 K in zone A of Fig. 14 because of the flow expansion. Second, the scalar dissipation rate may be significant, and thus delay combustion, as (for example) on the sides where the flow expands or between the two main reactive pockets on the right of Fig. 14. Finally, the initial field in which the burned gases are injected may be inhomogeneous in temperature and equivalence ratio, as shown in Fig. 14. Indeed, a large part of the flow has a mass fraction of hydrogen less than  $2.0 \times 10^{-4}$  and a temperature close to 1800 K (zone B). The pool of radicals is thus not strong enough to enhance combustion. Finally, in locations where all these considerations do not apply, ignition starts as shown in Fig. 14, where a hot spot develops on the left part of the flow. At  $t = 5.150 \times 10^{-5}$  s (row 1 of Fig. 13), the zone of reaction is more spread, but it does not affect the flow on the sides yet. However, at  $t = 5.300 \times 10^{-5}$  s (row 2 of Fig. 13), a vortex appears in the recirculation zone between the injection of burned gases and hydrogen, and it brings the reactive layer back to the lips of the injectors. Finally, the flame attaches definitively to the lips of the injector at  $t = 5.600 \times 10^{-5}$  s (row 3 of Fig. 13).

The burned gases jet opening occurs with a constant angle until it interacts with the hydrogen jets, creating a supersonic mixing layer (SML) of strong turbulence where the flame is located. In Fig. 11 (column 2) and Fig. 13 (column 4, rows 1 and 2), shock waves are reflected off the sidewalls. However, in subsequent figures (Fig. 13: column 4, rows 3–6), the presence of the flame in the supersonic mixing layer greatly alters the flow, which becomes very turbulent with a Mach number close to one because the injection of hydrogen on the sides cannot expand anymore (the Mach number is greater than 2.0 in Fig. 13: column 5, rows 1–3). The flame is stuck to the stoichiometric line where the production of radical H and heat release is maximal. A maximum temperature of 3500 K is found that is a common value for stoichiometric hydrogen–oxygen combustion [58]. Hence, the flame exhibits a structure of a diffusion flame from the exit of the igniter duct until the exit of the domain of simulation. This flame also ignites the hydrogen coming from the coaxial injectors as observed, for instance, on flame sides: a pocket of pure hydrogen is wrapped by the flame at  $t = 6/10t_B + 10t_F$  and is almost totally consumed at  $t = 9/10t_B + 10t_F$ . This flame structure is confirmed by the flame index (F.I.) of Yamashita et al. [59], defined as  $\text{F.I.} = \nabla_{\text{H}_2} \cdot \nabla_{\text{O}_2}$ . The flame is considered premixed when the F.I. is positive, and it is considered non-premixed (diffusion) when the F.I.





**Fig. 13** 2-D slices of the instantaneous 3-D field during the injection of burned gases. From top to bottom,  $t = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  and  $0.9 \times t_B + 10t_F$  with  $t_B = 1.5 \times 10^{-5}$  s.

I. is negative. In Fig. 15, a 3-D view of the flame structure colored by the flame index is shown (top view): F.I. < 0 everywhere, confirming the existence of a diffusion flame. This conclusion can also be confirmed by comparing the profiles of the species and temperature across the turbulent flame, with the flame structure observed in a classical counterflow laminar flame configuration, with the same conditions of injection. Such profiles of temperature and species mass fractions have then been extracted from the results of the DNS/LES solver at  $t = 9/10t_B + 10t_F$  for a very thin portion of flame to

minimize the impact of turbulence. Results are shown in Fig. 16. The REGATH [58,60] solver is used to compute the laminar flame structure in the physical space. The pressure is set to 2.5 bar, as observed in the LES results: indeed, the pressure is evolving from 2.6 bar in the fresh mixture to 2.4 bar in the burned gases. The unknown strain rate is adjusted close to  $8000 \text{ s}^{-1}$  to obtain the right flame thickness. A very good agreement is found between both simulations, meaning that the turbulent flame has a clear diffusion flame structure. This observation also means that diffusion flamelets

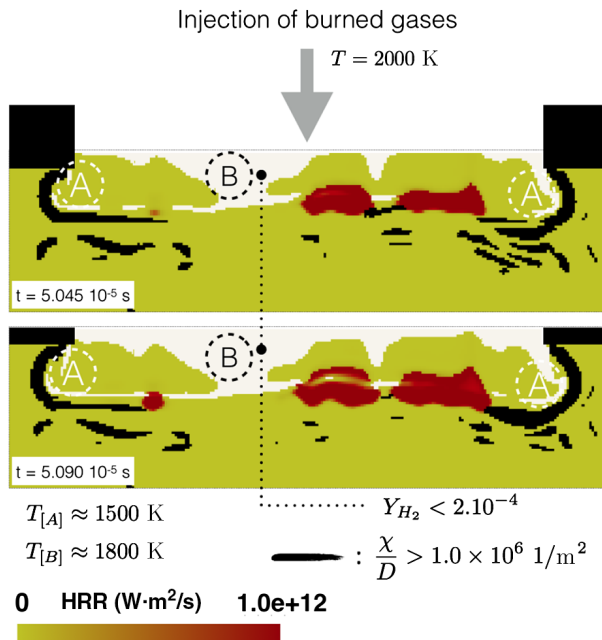


Fig. 14 Field of HRR just after the injection of burned gases.  $\chi$  (divided by diffusivity) in black and  $Y_{H_2}$  in white.

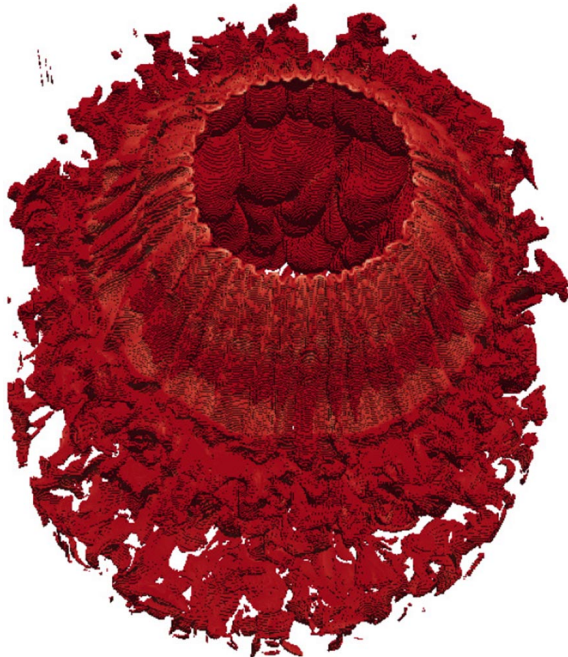


Fig. 15 3-D view of the flame colored by flame index. The sole color indicates a pure diffusion flame (F.I. < 0).

could be used into turbulent combustion modeling for supersonic flames if the mesh resolution is not fine enough to capture the whole flame structure. Finally, the use of a flamelet/progress variable approach to predict the local extinction and reignition effects in a non-premixed turbulent flame has been recently reported by Ihme et al. [61]. The use of this technique may be also found in [57] with consequences when dealing with real-gas flows [62,63]. Note that the probability of breaking the flame structure due to intense turbulence is low because an injection of hot gas is performed on one side of the flame and the combustion of hydrogen is very fast.

Finally, the comparison of results coming from 2-D and 3-D simulations exhibits the usual differences linked to the inherent three-dimensional structure of turbulence. Mixing is more efficient in 3-D

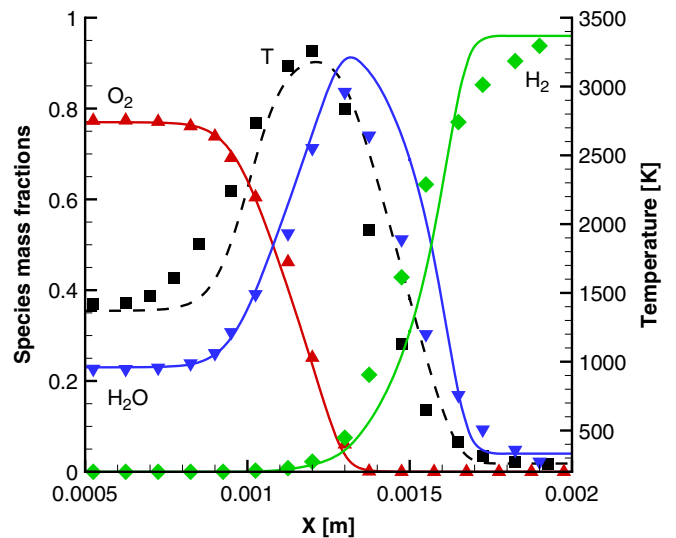


Fig. 16 Comparison of instantaneous flame structure between the turbulent flame (symbols) from SiTCom-B and the laminar flame (lines) from REGATH.

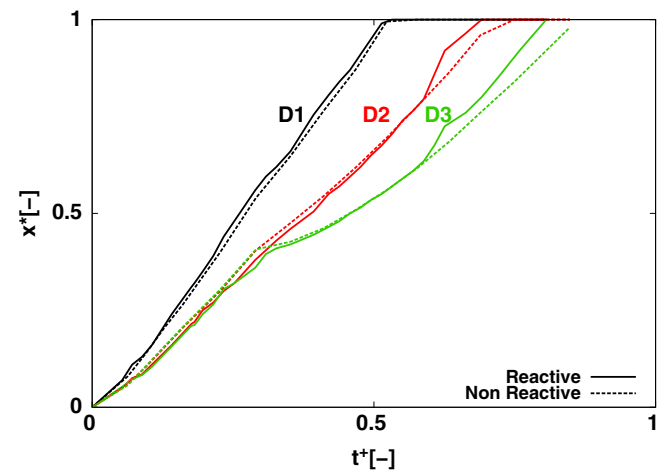


Fig. 17 Evolution on the igniter jet axis of three discontinuities (D) identified in Fig. 13:  $t^+ = (t - 10t_F)/(0.9t_B)$  with  $t_B = 1.5 \times 10^{-5}$  s,  $t_F = 6.5 \times 10^{-6}$  s, and  $x^* = x/L$ .

(Fig. 11) than in 2-D (Fig. 5), and the flame surface appears more wrinkled in 3-D (Fig. 13) than in 2-D (Fig. 8).

The positions of three discontinuities (D in Fig. 13 on the fourth line for the schlieren field) have been recorded on the igniter jet axis:  $D_1$  is the primary shock generated by the injection of burned gases;  $D_2$  is the stoichiometric isoline; and  $D_3$  is the discontinuity associated to the underexpanded jet of the igniter. In Fig. 17,  $D_1$  exhibits a constant velocity of  $c_{LES} = 1890$  m/s since the slope is linear. Theoretically, this configuration is equivalent to the solution of the problem of Sod [35]: the shock velocity is given by  $c_{th} = V_{inj}\rho_1/(\rho_1 - \rho_2)$ , where  $V_{inj}$  is the jet velocity (1000 m/s),  $\rho_1$  is the density behind the discontinuity, and  $\rho_2$ , the density in front of the discontinuity. The analytical solution gives  $c_{th} = 1830$  m/s, which represents a difference of 3% with  $c_{LES}$ . This observation means that the level of turbulence generated by the jet of hydrogen has no impact on the primary shock evolution.

This is confirmed when performing a nonreacting case, i.e., when chemical reactions are deactivated:  $D_1$  exhibits the same constant velocity as the reacting case. Moreover,  $D_2$  and  $D_3$  have the same behavior for  $t^+ \leq 0.35$  (with  $t^+ = (t - 10t_F)/(0.9t_B)$ ). Then, these two discontinuities split because of the transverse shocks generated by the instability (vortex ring) that are initially created when the burned gases start to be injected. A difference between the reacting and nonreacting cases occurs at  $t^+ = 0.6$  because the shocks arrangement must adapt to a SML with augmented instabilities and



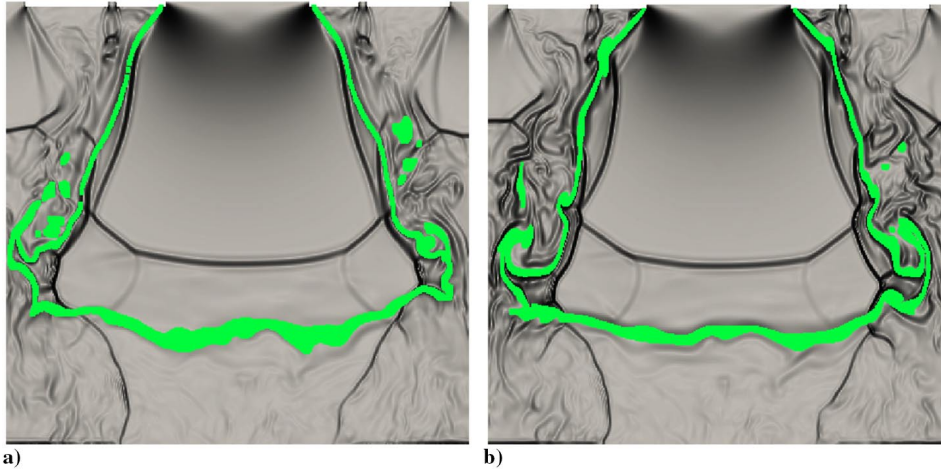


Fig. 18 Schlieren picture with stoichiometric isoline of a 2-D slice at  $t = 6.25 \times 10^{-5}$  s with a stoichiometric isoline (MESH2): a) nonreacting and b) reacting cases.

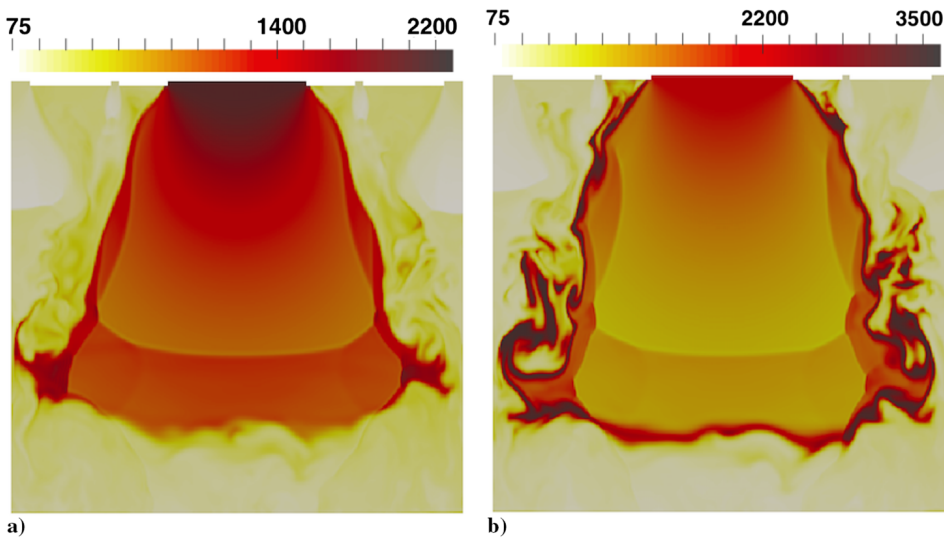


Fig. 19 Temperature fields (in kelvins) of a 2-D slice at  $t = 6.25 \times 10^5$  s (MESH2): a) nonreacting and b) reacting cases.

turbulence (Figs. 18 and 19). The presence of the turbulent diffusion flame in the SML modifies the structure of the incoming supersonic jet of burned gases. An oblique shock wave is then created in front of the flame (i.e., with a SML having a higher temperature and viscosity), and its position differs from the oblique shock wave observed in front of the SML in the nonreacting case (see Figs. 18 and 19). In Fig. 13, this discontinuity adapts continuously to the turbulent flame movement.

The driving physical phenomenon of this ignition configuration is then an aerodynamic effect. In addition, the combustion is sustained by the surrounding injector of hydrogen and yields enough energy to create reacting zones with hydrogen coming from coaxial injectors. Finally, the analysis made on the Mach disk location for the jet of hydrogen may be performed for the sole igniter for a steady stage. The relations given in Table 3 lead to a value of  $X \approx 7d$  that is well above the length used for the computational domain ( $L = 3d$ ).

#### IV. Conclusions

Studying the ignition process of a rocket engine is fundamental for the understanding of the firing of coaxial injectors. The large-eddy simulation of supersonic  $H_2/O_2$  combustion is performed for a simplified configuration of rocketlike igniter. The study is a supersonic injection of burned gases (hot oxygen and water) in a combustion chamber filled with hydrogen. Simulations are performed with the multispecies reactive solver SiTCom-B. The different ingredients required to perform with success such challenging simulation have been addressed. Hence, the numerical

scheme of Ducros et al. [33] and Tatsumi et al. [34] is assessed on the problem of Sod [35], validating the ability of the solver to capture shock waves and discontinuities. Two kinetic schemes have been introduced, and the reduced chemistry of Boivin et al. [21] led to very good results as compared to the detailed chemistry developed by the group of San Diego [37], with a reduced time step.

The 3-D large-eddy simulation is performed for three mesh resolutions, starting from 75 to 25  $\mu m$ . Pope's criterion  $M_E$  [47] is respected for all the meshes ( $M_E < 0.2$ ). The first stage of the ignition sequence was simulated introducing hydrogen into a quiescent chamber full of an inert species such as helium or nitrogen. A complex flow organization is found, with multiple interactions between shocks and turbulence. The structure of an underexpanded jet that resembles a barrel-shock shape is found for the hydrogen jet surrounding the igniter. The second stage of the ignition sequence (i.e., the introduction of lean hot burned gases) has been simulated with the use of a laminar combustion model, i.e.,  $\hat{\omega}_k(\cdot) = \hat{\omega}_k(\cdot)$ . Such a strategy has been evaluated based on the subgrid Damköhler number  $Da_{sgs}$  with various definitions. Only the finest mesh is found to respect the criterion  $Da_{sgs} < 1$ , and it is used for flow interpretation. The injection of burned gases into the chamber shows a spotty ignition: combustion cannot start because of compressibility effects, i.e., the flow expands with a decrease of temperature that delays combustion and in zones where the scalar dissipation rate is too large. Once the autoignition occurs, a diffusion flame attaches to the igniter lips and interacts with the different streams of hydrogen. The flame is located in the supersonic mixing layer, and little affects the burned gases' expansion, meaning that the aerodynamic effect of the injection of burned gases plays a

major role in flame establishment. The flame structure can be recovered with a counterflow non-premixed flame configuration, meaning that the mesh resolution is fine enough to capture the flame behavior. Consequently, the development of a turbulent combustion model based on such a counterflow flame structure is possible. Such strategy will lighten the number of mesh cells and allow simulation of a larger geometry, including the injection of liquid oxygen that will experience a pressure increase and reach supercritical pressures [28,58,62,63].

### Appendix A: Effect of Diluent on Flame Behavior

To study the impact of diluent on the flame behavior, 2-D simulations are performed, following the procedure described in Sec. II.C of replacing nitrogen with helium. The nonreacting simulation shows that helium is drained faster than nitrogen, but this flow modification does not affect the flame behavior in the present configuration (Fig. A1).

### Appendix B: Impact of the Mesh Resolution

To assess the impact of the mesh resolution on any variable  $\Phi \equiv (\bar{p}, \bar{T}, \bar{u}, \bar{Z})^T$ , where  $Z$  is the mixture fraction computed using Bilger et al.'s definition [50], the difference  $e_i$  observed on  $\Phi$  for two mesh resolutions located at point  $i$  is given in Fig. B1 for  $\Phi = \bar{T}$ . The

procedure to record statistics follows the one proposed in Sec. II.C.1 and is based on 10 convective times. Note that  $e_i$  is computed with the relation

$$e_i(\Phi_k, \Phi_l) = \frac{|\Phi_k^i - \Phi_l^i|}{0.5|\Phi_k^i + \Phi_l^i|} \quad (\text{B1})$$

where  $(k, l) \in [1, 3]$  are the subscripts for the mesh identification. With an identical mesh being used, an interpolation of MESH1<sub>2D</sub> and MESH2<sub>2D</sub> was performed on MESH3<sub>2D</sub>. In Fig. B1, the maximum error observed never exceeds 13% for the temperature field between two meshes and is located in the mixing zone formed between the two jets of hydrogen. Table B1 summarizes the maximum error  $e_{\max}$  found in the simulation for  $\Phi \equiv (\bar{p}, \bar{T}, \bar{u}, \bar{Z})^T$ :  $e_{\max} < 13\%$ .

Finally, the averaged difference  $E$  is defined as follows:

$$E(\Phi_k, \Phi_l) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n e_i(\Phi_k, \Phi_l) \quad (\text{B2})$$

The difference between the meshes for the average temperature, pressure, and velocity magnitude fields never exceeds 5%, as reported in Table B2. Statistically, the same behavior of the reacting flow evolution is obtained even if MESH1<sub>2D</sub> ( $\Delta x = 75 \mu\text{m}$ ) has nine times less mesh cells than MESH3<sub>2D</sub> ( $\Delta x = 25 \mu\text{m}$ ). Such behavior

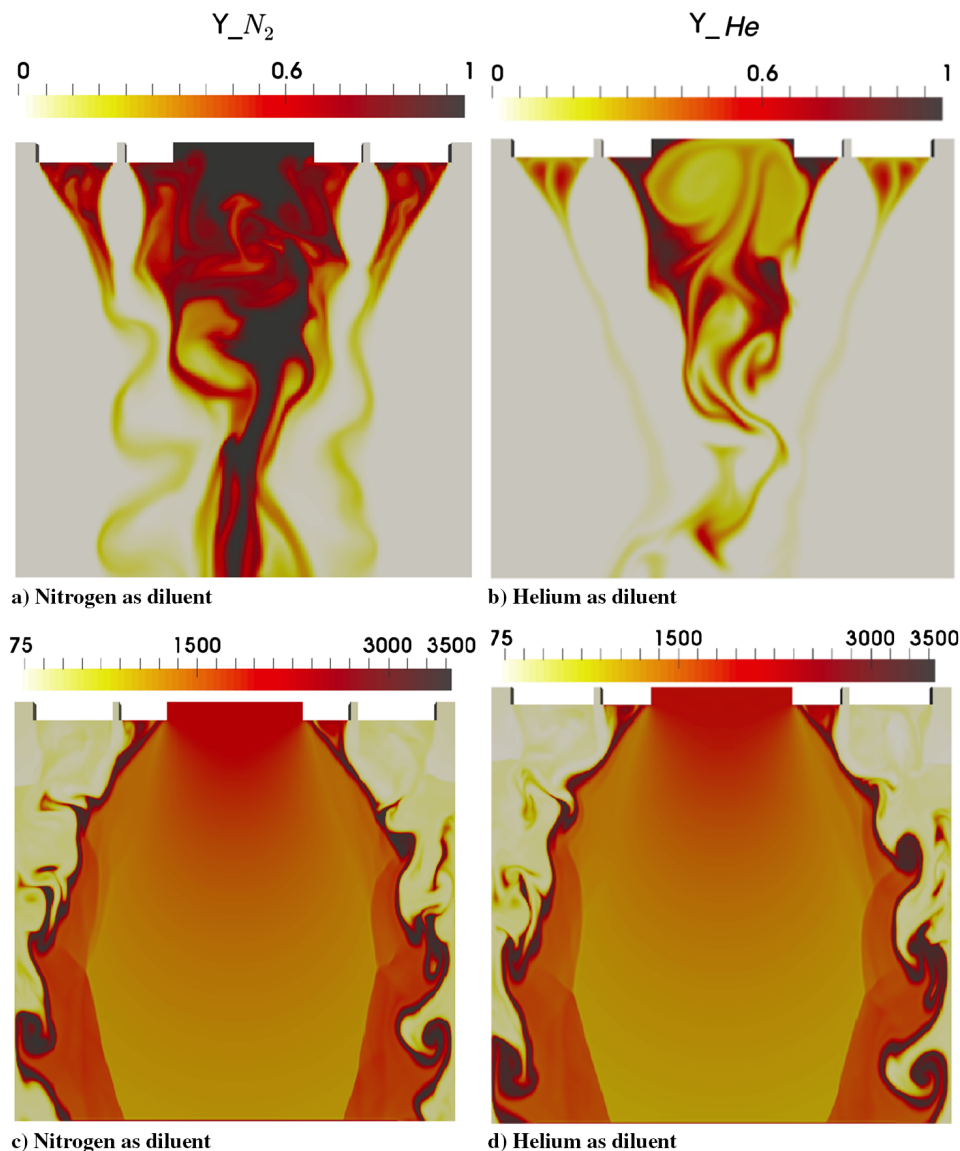


Fig. A1 2-D instantaneous field of a, b) diluent mass fraction at  $t = 6.0 \times 10^{-5}$  s and c, d) its effect on flame behavior at  $t = 12.0 \times 10^{-5}$  s through the temperature variable.

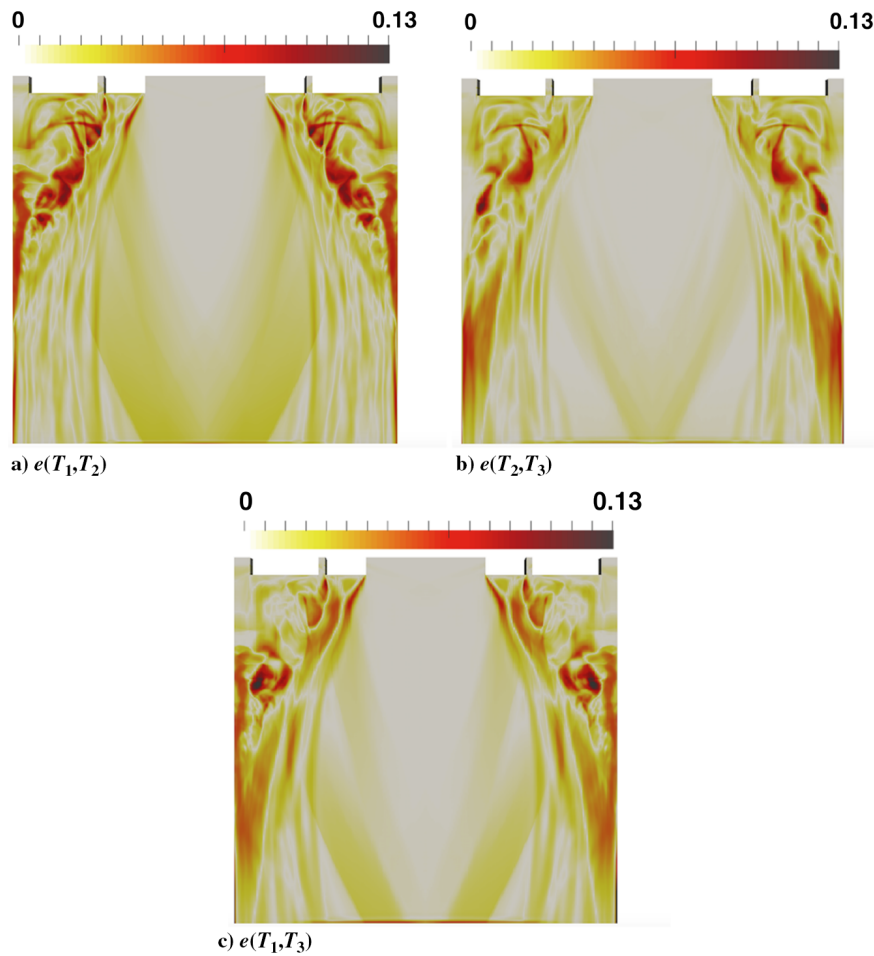


Fig. B1 Difference on statistical temperature field between two mesh resolutions.

Table B1 Maximum error between two meshes for mean values of the temperature, pressure, velocity magnitude, and mixture fraction

	Temperature, %	Pressure, %	Velocity magnitude, %	Mixture fraction, %
$e_{\max}(\Phi_1, \Phi_2)$	12.92	7.51	12.56	11.11
$e_{\max}(\Phi_1, \Phi_3)$	12.72	9.79	12.48	12.29
$e_{\max}(\Phi_2, \Phi_3)$	11.70	7.89	11.17	11.45

Table B2 Gap between two meshes for the mean values of the temperature, pressure, and velocity magnitude

	Temperature, %	Pressure, %	Velocity magnitude, %
$E(\Phi_1, \Phi_2)$	4.49	5.48	5.11
$E(\Phi_1, \Phi_3)$	4.77	4.54	5.27
$E(\Phi_2, \Phi_3)$	3.74	4.55	3.35

means that the finest mesh resolution used in our simulations is close to a mesh-independent solution.

**Acknowledgments**

Umut Guven was financially supported by the Région Haute-Normandie. Computations were performed using high performance computing resources from Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie and Grand Équipement National de Calcul Intensif.

**References**

[1] Yang, V., Habiballah, M., Hulka, J., and Popp, M., *Liquid Rocket Thrust Chambers: Aspects of Modeling, Analysis, and Design*, AIAA, Reston, VA, 2004, p. xvii.  
doi:10.2514/4.866760

[2] Sutton, G., and Biblarz, O., *Rocket Propulsion Elements*, 8th ed., Wiley-Interscience, New York, 2010, pp. 323–325.

[3] Frenken, G., Vermeulen, E., Bouquet, F., and Sanders, B., “Development Status of the Ignition System for Vinci,” AIAA Paper 2002-4330, 2002.  
doi:10.2514/6.2002-4330

[4] Crist, S., Sherman, P., and Glass, D., “Study of the Highly Underexpanded Sonic Jet,” *AIAA Journal*, Vol. 4, No. 1, 1966, pp. 68–71.  
doi:10.2514/3.3386

[5] Donaldson, D., and Snedeker, R., “A Study of Free Jet Impingement. Part 1. Mean Properties of Free and Impinging Jets,” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 45, No. 2, 1971, pp. 281–319.  
doi:10.1017/S0022112071000053

[6] Owens, M., Mullagiri, S., Segal, C., and Vinogradov, V., “Effects of Fuel Pre-Injection on Mixing in Mach 1.6 Airflow,” *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 3, 2001, pp. 605–610.  
doi:10.2514/2.5784

[7] Miki, K., Schulz, J., and Menon, S., “Large-Eddy Simulation of Equilibrium Plasma-Assisted Combustion in Supersonic Flow,” *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 32, No. 2, 2009, pp. 2413–2420.  
doi:10.1016/j.proci.2008.06.131

[8] Kalghatgi, G., “Developments in Internal Combustion Engines and Implications for Combustion Science and Future Transport Fuels,” *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 35, No. 1, 2015, pp. 101–115.  
doi:10.1016/j.proci.2014.10.002

- [9] Hensel, C., Wiedmann, D., Oechslein, W., and Gorgen, J., "Ignition Aspects for the Vinci Thrust Chamber," AIAA Paper 2002-4008, 2002. doi:10.2514/6.2002-4008
- [10] Oechslein, W., "Status of the Vinci Combustion Chamber Vacuum Ignition Tests," AIAA Paper 2004-3531, 2004. doi:10.2514/6.2004-3531
- [11] Izard, J.-F., and Mura, A., "Stabilization of Non-Premixed Flames in Supersonic Reactive Flows," *Comptes Rendus de Mécanique*, Vol. 337, Nos. 6–7, 2009, pp. 362–372. doi:10.1016/j.crme.2009.06.006
- [12] Obounou, M., Gonzales, M., and Borghi, R., "A Lagrangian Model for Predicting Turbulent Diffusion Flames with Chemical Kinetic Effects," *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 25, No. 1, 1994, pp. 1107–1113. doi:10.1016/S0082-0784(06)80748-4
- [13] Luo, K., and Bray, K., "Combustion-Induced Pressure Effects in Supersonic Diffusion Flames," *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 27, No. 2, 1998, pp. 2165–2171. doi:10.1016/S0082-0784(98)80065-9
- [14] Ashkenas, H., and Sherman, F., "Experimental Methods in Rarefied Gas Dynamics," NASA TR 32-869, 1966.
- [15] Damason, T., and Nicholls, J., "On the Structure of Jets from Highly Underexpanded Nozzles into Still Air," *Journal of the Aerospace Sciences*, Vol. 26, No. 1, 1959, pp. 16–24. doi:10.2514/8.7912
- [16] Abbett, M., "The Mach Disk in Underexpanded Exhaust Plumes," *AIAA Journal*, Vol. 9, No. 3, 1971, pp. 512–514. doi:10.2514/3.6212
- [17] Franquet, E., Perrier, V., Gibout, S., and Bruel, P., "Free Underexpanded Jets in a Quiescent Medium: A Review," *Progress in Aerospace Sciences*, Vol. 77, Aug. 2015, pp. 25–53. doi:10.1016/j.paerosci.2015.06.006
- [18] Hamzehloo, A., and Aleiferis, P., "Large-Eddy Simulation of Highly Turbulent Under-Expanded Hydrogen and Methane Jets for Gaseous-Fuelled Internal Combustion Engines," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 39, No. 36, 2014, pp. 21,275–21,296. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.10.016
- [19] Sabel'Nikov, V., Deshaies, B., and Figueira da Silva, L., "Revisited Flamelet Model for Nonpremixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows," *Combustion and Flame*, Vol. 114, Nos. 3–4, 1998, pp. 577–584. doi:10.1016/S0010-2180(97)00296-4
- [20] Ingenito, A., and Bruno, C., "Physics and Regimes of Supersonic Combustion," *AIAA Journal*, Vol. 48, No. 3, 2010, pp. 515–525. doi:10.2514/1.43652
- [21] Boivin, P., Dauplain, A., Jimenez, C., and Cuenot, B., "Simulation of a Supersonic Hydrogen-Air Autoignition-Stabilized Flame Using Reduced Chemistry," *Combustion and Flame*, Vol. 159, No. 4, 2012, pp. 1779–1790. doi:10.1016/j.combustflame.2011.12.012
- [22] Saghafian, A., Terrapon, V., and Pitsch, H., "An Efficient Flamelet-Based Combustion Model for Compressible Flows," *Combustion and Flame*, Vol. 162, No. 3, 2015, pp. 652–667. doi:10.1016/j.combustflame.2014.08.007
- [23] Cheng, T., Wehrleyer, J., Pitz, R., Jarrett, O., and Northan, G., "Raman Measurement of Mixing and Finite-Rate Chemistry in a Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 99, No. 1, 1994, pp. 157–173. doi:10.1016/0010-2180(94)90087-6
- [24] Pierce, C., and Moin, P., "Progress-Variable Approach for Large-Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 504, April 2004, pp. 73–97. doi:10.1017/S0022112004008213
- [25] Lacaze, G., Cuenot, B., Poinot, T., and Oswald, M., "Large-Eddy Simulation of Laser Ignition and Compressible Reacting Flow in a Rocket-Like Configuration," *Combustion and Flame*, Vol. 156, No. 6, 2009, pp. 1166–1180. doi:10.1016/j.combustflame.2009.01.004
- [26] Gicquel, L., Staffelbach, G., and Poinot, T., "Large-Eddy Simulations of Gaseous Flames in Gas Turbine Combustion Chambers," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 38, No. 6, 2012, pp. 782–817. doi:10.1016/j.pecs.2012.04.004
- [27] Domingo, P., Vervisch, L., Payet, S., and Hauguel, R., "DNS of a Premixed Turbulent V Flame and LES of a Ducted Flame Using a FSD-PDF Subgrid Scale Closure with FPI-Tabulated Chemistry," *Combustion and Flame*, Vol. 143, No. 4, 2005, pp. 566–586. doi:10.1016/j.combustflame.2005.08.023
- [28] Petit, X., Ribert, G., Lartigue, G., and Domingo, P., "Large-Eddy Simulation of Supercritical Fluid Injection," *Journal of Supercritical Fluids*, Vol. 84, Dec. 2013, pp. 61–73. doi:10.1016/j.supflu.2013.09.011
- [29] Bouheraoua, L., Domingo, P., and Ribert, G., "Interactions Between Shocks and Flame Structure in a Supersonic Lifted Jet Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 179, May 2017, pp. 199–218. doi:10.1016/j.combustflame.2017.01.020
- [30] Poinot, T., and Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, 3rd ed., 2012, <http://elearning.cerfacs.fr/combustion/onlinePoinotBook/buythirdedition/index.php>.
- [31] Smagorinsky, J., "General Circulation Experiments with the Primitive Equations," *Monthly Weather Review*, Vol. 91, No. 3, 1963, pp. 99–164. doi:10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2
- [32] Lilly, D., "A Proposed Modification of the Germano Sub-Grid Scale Closure Method," *Physics of Fluids, A: Fluid Dynamics*, Vol. 4, No. 3, 1992, pp. 633–635. doi:10.1063/1.858280
- [33] Ducros, F., Laporte, F., Souleres, T., Guinot, V., Moinat, P., and Caruelle, B., "High-Order Fluxes for Conservative Skew-Symmetric-Like Schemes in Structured Meshes: Application to Compressible Flows," *Journal of Computational Physics*, Vol. 161, No. 1, 2000, pp. 114–139. doi:10.1006/jcph.2000.6492
- [34] Tatsumi, S., Martinelli, L., and Jameson, A., "Flux-Limited Schemes for the Compressible Navier–Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 33, No. 2, 1995, pp. 252–261. doi:10.2514/3.12422
- [35] Sod, G., "A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws," *Journal of Computational Physics*, Vol. 27, No. 1, 1978, pp. 1–31. doi:10.1016/0021-9991(78)90023-2
- [36] Dullemond, A., and Johansen, A., "Lecture on Hydrodynamics II: Numerical Method and Application," 2007, Chap. 6, <http://www.mpi.ae/homes/dullemond/lectures/hydrodynamicsII/>.
- [37] Saxena, P., and Williams, F., "Testing a Small Detailed Chemical-Kinetic Mechanism for the Combustion of Hydrogen and Carbon Monoxide," *Combustion and Flame*, Vol. 145, Nos. 1–2, 2006, pp. 316–323. doi:10.1016/j.combustflame.2005.10.004
- [38] Boivin, P., Jimenez, C., Sanchez, A., and Williams, F., "An Explicit Reduced Mechanism for H<sub>2</sub>-Air Combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 33, No. 1, 2011, pp. 517–523. doi:10.1016/j.proci.2010.05.002
- [39] Molkov, V., Makarov, D., and Schneider, H., "LES Modelling of an Unconfined Large-Scale Hydrogen-Air Deflagration," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 39, No. 20, 2006, pp. 4366–4376. doi:10.1088/0022-3727/39/20/012
- [40] Zbikowski, M., Makarov, D., and Molkov, V., "LES Model of Large Scale Hydrogen-Air Planar Detonations: Verification by the ZND Theory," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33, No. 18, 2008, pp. 4884–4892. doi:10.1016/j.ijhydene.2008.05.071
- [41] Ribert, G., Taieb, D., and Yang, V., "Large-Eddy Simulation of a Supercritical Channel Flow Using a Shock Capturing Numerical Scheme," *Computers and Fluids*, Vol. 117, Aug. 2015, pp. 103–113. doi:10.1016/j.compfluid.2015.05.014
- [42] Lacaze, G., "Simulation aux Grandes Echelles de l'Allumage de Moteurs Fusées Cryotechniques," Ph.D. Thesis, Univ. of Toulouse, Toulouse, France, 2009.
- [43] Kee, R., Rumpley, F., and Miller, J., "Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," Rept. SAND89-9009B, Sandia National Labs., Livermore, CA, 1989.
- [44] Dadone, A., and Grossman, B., "Ghost-Cell Method for Inviscid Two-Dimensional Flows on Cartesian Grids," *AIAA Journal*, Vol. 42, No. 12, 2004, pp. 2499–2507. doi:10.2514/1.697
- [45] Merlin, C., Domingo, P., and Vervisch, L., "Immersed Boundaries in Large-Eddy Simulation of Compressible Flows," *Flow Turbulence and Combustion*, Vol. 90, No. 1, 2013, pp. 29–68. doi:10.1007/s10494-012-9421-0
- [46] Vuorinen, V., Yu, J., Tirunagari, S., Kaario, O., Larmi, M., Duwig, C., and Boersma, B., "Large-Eddy Simulations of Highly Underexpanded Transient Gas Jets," *Physics of Fluids*, Vol. 25, No. 1, 2013, Paper 016101. doi:10.1063/1.4772192
- [47] Pope, S., "Ten Questions Concerning the Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows," *New Journal of Physics*, Vol. 6, No. 1, 2004, p. 35. doi:10.1088/1367-2630/6/1/035
- [48] Duwig, C., Nogenmyr, K.-J., Chan, C.-K., and Dunn, M., "Large-Eddy Simulations of a Piloted Lean Premix Jet Flame Using Finite-Rate Chemistry," *Combustion Theory and Modeling*, Vol. 15, No. 4, 2011,

- pp. 537–568.  
doi:10.1080/13647830.2010.548531
- [49] Krol, M., Molemaker, M., and Arellano, J., “Effects of Turbulence and Heterogeneous Emissions on Photochemically Active Species in the Convective Boundary Layer,” *Journal of Geophysical Research*, Vol. 105, No. D5, 2000, pp. 6871–6884.  
doi:10.1029/1999JD900958
- [50] Bilger, R., Stamer, S., and Kee, R., “On Reduced Mechanisms for Methane Air Combustion in Non-Premixed Flames,” *Combustion and Flame*, Vol. 80, No. 2, 1990, pp. 135–149.  
doi:10.1016/0010-2180(90)90122-8
- [51] Quinlan, J., McDaniel, J., Drozda, T., Lacaze, G., and Oefelein, J., “A Priori Analysis of Flamelet-Based Modeling for a Dual-Mode Scramjet Combustor,” *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE JPC*, AIAA Paper 2014-3743, 2014.  
doi:10.2514/6.2014-3743
- [52] Adamson, T., and Nicholls, J., “On the Structure of Jets from Highly Underexpanded Nozzles into Still Air,” *Journal of the Aerospace Sciences*, Vol. 26, No. 1, 1959, pp. 16–24.  
doi:10.2514/8.7912
- [53] Cumber, P., Fairweather, M., Falle, S., and Giddings, J., “Predictions of the Structure of Turbulent, Highly Underexpanded Jets,” *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 117, No. 4, 1995, pp. 599–604.  
doi:10.1115/1.2817309
- [54] Carlson, D., and Lewis, C., “Normal Shock Location in Underexpanded Sonic Jet,” *AIAA Journal*, Vol. 2, No. 4, 1964, pp. 776–777.  
doi:10.2514/3.240935
- [55] Hanson, R., and Palmer, J., “Application of Method of Characteristics to Underexpanded, Free-Jet Flows with Vibrational Nonequilibrium,” *AIAA Journal*, Vol. 36, No. 2, 1998, pp. 193–200.  
doi:10.2514/2.7501
- [56] Gruber, M., Nejad, A., Chen, T., and Dutton, J., “Mixing and Penetration Studies of Sonic Jets in a Mach 2 Freestream,” *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 11, No. 2, 1995, pp. 315–323.  
doi:10.2514/3.51427
- [57] Mastorakos, E., “Ignition of Turbulent Non-Premixed Flames,” *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 35, Feb. 2009, pp. 57–97.  
doi:10.1016/j.pecs.2008.07.002
- [58] Ribert, G., Zong, N., Yang, V., Pons, L., Darabiha, N., and Candel, S., “Counterflow Diffusion Flames of General Fluids: Oxygen/Hydrogen Mixtures,” *Combustion and Flame*, Vol. 154, No. 3, 2008, pp. 319–330.  
doi:10.1016/j.combustflame.2008.04.023
- [59] Yamashita, H., Shimada, M., and Takeno, T., “A Numerical Study on Flame Stability at the Transition Point of Jet Diffusion Flames,” *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 26, No. 1, 1996, pp. 27–34.  
doi:10.1016/S0082-0784(96)80196-2
- [60] Pons, L., Darabiha, N., Candel, S., Ribert, G., and Yang, V., “Mass Transfer and Combustion in Transcritical Non-Premixed Counterflows,” *Combustion Theory and Modeling*, Vol. 13, No. 1, 2009, pp. 57–81.  
doi:10.1080/13647830802368821
- [61] Ihme, M., Cha, C. M., and Pitsch, H., “Prediction of Local Extinction and Re-Ignition Effects in Non-Premixed Turbulent Combustion Using a Flamelet/Progress Variable Approach,” *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, No. 1, 2005, pp. 793–800.  
doi:10.1016/j.proci.2004.08.260
- [62] Petit, X., Ribert, G., and Domingo, P., “Framework for Real-Gas Compressible Reacting Flows with Tabulated Thermochemistry,” *Journal of Supercritical Fluids*, Vol. 101, June 2015, pp. 1–16.  
doi:10.1016/j.supflu.2015.02.017
- [63] Ribert, G., Petit, X., and Domingo, P., “High-Pressure Methane-Oxygen Flames. Analysis of Sub-Grid Scale Contributions in Filtered Equations of State,” *Journal of Supercritical Fluids*, Vol. 121, March 2017, pp. 78–88.  
doi:10.1016/j.supflu.2016.08.020

J. M. Seitzman  
Associate Editor





## Chapitre 4

# Simulation numérique des écoulements supercritiques non-réactifs et réactifs $\text{H}_2/\text{O}_2$ .

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Objectifs</b>	<b>89</b>
<b>4.2</b>	<b>Introduction</b>	<b>89</b>
<b>4.3</b>	<b>Configuration</b>	<b>92</b>
4.3.1	Description du cas de référence	92
4.3.2	Conditions aux limites et initiales	93
4.3.3	Géométrie et maillages	95
4.3.4	Stratégie de modélisation	95
<b>4.4</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>97</b>
4.4.1	Résultats non-réactif	97
4.4.1.1	Comparaison des 3 codes	97
4.4.1.2	Influence du maillage sur les résultats	105
4.4.1.3	Impact du modèle de diffusion des espèces	109
4.4.2	Résultats réactifs	118
4.4.2.1	Flamme 1D laminaire prémélangées	119
4.4.2.2	Couche de mélange réactive 2D	121
<b>4.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>135</b>

---

## 4.1 Objectifs

Ce chapitre est consacré à l'étude des écoulements supercritiques réactifs et non-réactifs, dans une configuration proche des injecteurs de moteur-fusée. Plusieurs simulations ont été réalisées afin d'étudier la couche de mélange et la flamme H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> à haute pression. Les différentes stratégies de modélisation pour la haute pression ainsi que leurs écarts aux modèles basse pression ont été étudiés en détails.

Les objectifs de cette étude sont d'apporter une meilleure compréhension des flammes supercritiques H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>, d'étudier l'influence et la modélisation des phénomènes non-idéaux liés à la haute pression et d'offrir une base de données pour les études numériques supercritiques.

## 4.2 Introduction

Une meilleure compréhension du mélange turbulent ainsi que de la combustion se produisant à haute pression représente un défi scientifique de nos jours. Ces phénomènes apparaissent dans de nombreux systèmes d'ingénierie de haute performance, tels que les moteurs-fusées à propulsion liquide, les moteurs diesel et les turbines à gaz modernes. Ces systèmes sont caractérisés par de grands nombres de Reynolds et avec un rapport de densité élevé entre les différents réactifs. Dans le cadre des moteurs-fusées liquide H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> utilisant une technologie d'injecteur coaxiale, le rapport de densité est de l'ordre de 100 ( $\rho_{H_2} \approx 10$  à  $15 \text{ kg.m}^{-3}$  et  $\rho_{O_2} \approx 1000$  à  $1200 \text{ kg.m}^{-3}$ ) et l'écoulement dans la chambre de combustion possède un nombre de Reynolds supérieur à  $1.0 \cdot 10^5$  [109]. Dans ces conditions et à une pression supérieure aux pressions critiques des deux fluides, les processus classiques d'atomisation et d'évaporation, ainsi que la tension de surface entre les deux fluides disparaissent, laissant place à une interface diffuse qui sépare un fluide dense d'un fluide léger. Le processus de mélange est alors principalement piloté par le phénomène de diffusion moléculaire et par les structures turbulentes de cet écoulement qui augmentent les surfaces de contact entre les deux propergols.

La modélisation et la simulation du mélange et de la combustion supercritique requièrent une attention particulière aux problèmes habituellement rencontrés à basse pression, mais aussi aux problèmes posés par l'introduction de phénomènes non idéaux liés à la haute pression [80]. Il est maintenant établi que l'étude des écoulements supercritiques nécessitent un cadre bien dédié [81, 184, 185] qui inclut une équation d'état (EoS) du gaz réel bien adaptée et des flux de transport non idéaux. Des corrections en pression doivent aussi être prises en compte pour les coefficients de transports ( $\lambda, \eta, D$ ) car les corrélations de ces coefficients habituellement utilisées à basse pression dépendent uniquement de la température et sont prises à la pression atmosphérique. Néanmoins à haute pression, ces coefficients diffèrent de leur valeur à basse pression et l'ensemble des corrections à apporter a été explicité dans le Chapitre 2. A notre connaissance, une telle approche a seulement été exploitée par Bellan et ses collègues dans des simulations numériques directes (DNS) d'une couche de mélange non-réactive [77, 186, 187] et par Giovangigli et al. [101, 188] pour le calcul de flammes laminaires unidimensionnelles. Ce n'est que très récemment qu'une couche de mélange réactive a été réalisée en DNS [84] mais avec seulement une seule réaction d'oxydation de C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>.

Dans la majorité des calculs supercritiques, on a tendance à utiliser une équation d'état du gaz réel bien adaptée, mais couplée avec une modélisation idéale des flux de transport [95–98]. Des corrections en pression des coefficients de transports sont néanmoins utilisées [185, 186, 189, 190]. Récemment, Schmitt et al. [98] ont réalisé une LES-3D de la combustion supercritique d'un jet coaxial de  $LO_x/CH_4$  basée sur l'expérience de Singla et al. [191]. Cette LES a été réalisée avec un nombre de Schmidt constant pour chaque espèce et avec une modélisation idéale du flux de transport. Les tendances expérimentales ainsi que la longueur et l'angle d'ouverture de la flamme sont retrouvés de façon satisfaisante [98]. Mais, d'après Giovangigli et al. [101, 188], les effets non-idéaux sur les flux de transports ne peuvent pas être négligés et dans le chapitre 2, il a aussi été constaté qu'une correction en pression du coefficient de diffusion binaire modifiait celui-ci au maximum de 64% avec la correction de Takahashi et de 17% avec celle de Kurochkin, dans le cas de flamme prémélangées supercritiques  $H_2/O_2$ . La prise en compte de ces modèles paraît donc nécessaire pour les simulations d'écoulements supercritiques. Pour éclaircir cela, plusieurs simulations ont été réalisées avec différentes modélisations, dans le but de connaître l'écart de comportement entre ces modèles.

Il est aussi un défi scientifique de traiter avec la chimie haute pression détaillée, puisqu'il a été démontré que les flammes laminaires supercritiques de diffusion ou prémélangées peuvent être moins épaisses qu'un micromètre si l'étirement de la flamme devient significatif [100, 124, 192]. Traiter les écoulements supercritiques pose également des défis numériques [193, 194] liés à la présence de forts gradients de densité pouvant conduire à des oscillations numériques parasites.

En raison de l'extrême complexité des phénomènes physiques se produisant à haute pression, seuls quelques résultats expérimentaux sont disponibles pour la validation des codes de calcul [107, 191, 195–197]. Ce sont généralement, des écoulements coaxiaux avec un jet d'un fluide dense injecté au centre entouré d'un jet de fluide léger injecté par l'écoulement externe de forme annulaire. Les données disponibles de ces résultats expérimentaux sont habituellement des profils longitudinaux et radiaux moyens de la température, de la densité et de la fraction massique des espèces mises en jeu, ainsi que la longueur et l'angle d'ouverture du jet. Cependant, dans notre étude supercritique, nous nous sommes principalement intéressés à la modélisation physique et à l'influence des phénomènes non idéaux. Les simulations avec une modélisation non idéale sont très coûteuses, d'autant plus que la flamme supercritique étant très fine, un maillage très raffiné est nécessaire. Pour ces raisons, une simulation 3D-DNS avec une modélisation non-idéale d'un jet expérimental supercritique nous est hors de portée à ce jour.

Au cours de cette étude, le cas test 2D proposé par Ruiz et al. [109], d'un écoulement non réactif supercritique à nombre de Reynolds élevé qui tend à donner un bon compromis entre faisabilité et temps de calcul CPU a été utilisé. Il s'agit d'une configuration de couche de mélange étudiée en DNS bidimensionnelle permettant une bonne description du mélange de l'oxygène dense avec l'hydrogène léger à haute pression. Cette configuration avec des grandeurs proches aux injecteurs de moteur-fusée a été simulée avec deux différents codes de calcul compressibles [109] : AVBP<sup>1</sup> du laboratoire Cerfacs et RAPTOR<sup>2</sup> de Sandia Lab. Les résultats fournis sur les champs moyens de la température, la fraction massique des espèces et des vitesses axiales et transversales sont quasi-similaires entre les deux

---

1. <http://www.cerfacs.fr/avbp7x/>

2. <http://crf.sandia.gov/tag/raptor/>

codes de calcul ainsi que les tendances de l'écoulement. Dans un premier temps, cette configuration non-réactive a été simulée avec plusieurs modélisations différentes afin d'étudier leur impact à l'aide de notre code de calcul SiTCom-B<sup>3</sup> et les résultats obtenus ont été comparés avec ceux issus de [109]. Ensuite, cette configuration a été simulée avec quatre maillages structurés différents, de taille de maille de  $16.6 \mu m$ ,  $5.0 \mu m$ ,  $2.0 \mu m$  et  $1.0 \mu m$ , dans le but de faire une étude de sensibilité en maillage.

Afin d'étudier la combustion  $H_2/O_2$  supercritique, une première étude sur les flammes unidimensionnelles stoechiométriques  $H_2/O_2$  prémélangées, à une pression de 10.0 MPa et une température de gaz frais de 150 K, a été réalisée avec différentes stratégies de modélisation. Cette étude 1D a permis de connaître l'influence de ces modélisations, ainsi que leur coût CPU dans un cas réactif laminaire supercritique. La couche de mélange  $H_2/O_2$  a ensuite été utilisée comme point de départ d'un cas réactif utilisant le schéma cinétique proposé par Boivin et al. [182], contenant 8 espèces pour 12 réactions élémentaires. Ces simulations correspondent à la combustion ayant lieu dans les moteurs-fusées en régime établi. Elles ont été obtenues avec deux différentes stratégies de modélisation afin de connaître l'impact de la modélisation non-idéale dans un cas réactif 2D. La flamme correspondante  $H_2/O_2$  à 10.0 MPa a été étudiée et a montré que la température de flamme est dans les environs de 3800 K. L'indice de flamme calculé avec la formule proposée par Yamashita et al. [200] a permis de démontrer qu'il s'agit bien d'une flamme de diffusion.

A travers ces simulations l'influence des phénomènes physiques suivants en régime supercritique ont été analysés :

- **L'effet Soret (effet thermo-diffusif) :**

Souvent négligé dans les simulations numériques d'écoulements multi-espèces, ce phénomène joue un rôle important notamment lorsqu'il s'applique à des espèces légères comme l'hydrogène [101]. Cependant dans le cas non-réactif où les gradients de température sont faibles, cet effet est négligé. Dans le cas réactif où apparaissent de forts gradients de température, l'impact de l'effet Soret a été étudiée sur des flammes supercritiques  $H_2/O_2$  laminaires unidimensionnelles et turbulentes bidimensionnelles.

- **La modélisation du coefficient de diffusion des espèces ( $D_{ij}$ ) :**

Deux modélisations différentes ont été étudiées, il s'agit de l'approche d'ordre 0 (MIXTURE\_AVERAGE), connu comme étant l'hypothèse de Curtiss et Hirschfelder [166] et l'approche d'ordre 1 [154, 163], dite méthode multicomposante (cf. Chapitre 2 pour plus de détails concernant ces deux formulations).

Dans nos simulations non-réactives, ces deux modélisations sont équivalentes car avec seulement deux espèces transportées, les deux formulations sont identiques. Dans le cas réactif avec 8 espèces transportés ces deux modélisations diffèrent.

Il a aussi été constaté au Chapitre 2 que cette modélisation d'ordre 1 était très couteuse, avec seulement 8 espèces transportées le temps total de la simulation (CPU) était multiplié par un

---

3. Ce code a déjà fait l'objet de plusieurs publications pour des applications haute pression [115, 116, 124, 198, 199].

facteur de deux comparé à l'approche d'ordre 0. Pour cette raison à notre connaissance seulement Giovangigli et al. [101] se sont intéressés à l'impact de cette modélisation uniquement dans des simulations 1D. Nous avons par conséquent étudié l'impact de la modélisation multicomposante dans un calcul 2D réactif supercritique.

- **La correction en pression du coefficient de diffusion binaire des espèces ( $D_{ij}^{bin}$ ) :**

Dans les études à basse pression, le calcul de ce coefficient se fait en général à partir de la théorie cinétique des gaz. Elle dépend uniquement de la température et elle est prise à la pression atmosphérique [201, 202]. Cependant dans les études à haute pression, une correction doit être appliquée afin bien rendre en compte les effets de la haute pression. Dans cette étude, nous avons comparé des simulations réactives et non-réactives obtenues sans correction en pression, avec la correction proposée par Takahashi [203] et avec celle proposée par Kurochkin [204] (cf. Chapitre 2 pour les détails sur ces corrections en pression).

- **La modélisation des flux des espèces :**

Nous disposons de deux approches pour estimer ( $\mathbf{d}_k$ ) intervenant dans la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$  ( $V_k = \sum_{i=1}^{i=N_{sp}} D_{ik} \mathbf{d}_i$ ). La première utilise la modélisation non-idéale ( $\mathbf{d}_k = X_k(\nabla\mu_k)_T$ ), où la vitesse de diffusion des espèces est calculée à partir du gradient du potentiel chimique des espèces, couplé avec l'équation d'état cubique Peng-Robinson. A notre connaissance, nous sommes les premiers à avoir simulé une couche de mélange supercritique réactif avec cette modélisation. Giovangigli et al. [101] avaient étudié quant à eux une flamme supercritique unidimensionnelle, avec la modélisation non-idéale, mais en utilisant l'équation d'état cubique SRK. L'autre possibilité est la modélisation idéale ( $\mathbf{d}_k = \nabla X_k$ ), connue comme étant l'approche basse pression reposant uniquement sur le gradient des fractions massiques des espèces (cf. Chapitre 2 pour plus de détails).

## 4.3 Configuration

### 4.3.1 Description du cas de référence

Le cas étudié correspond au cas test proposé par Ruiz et al. [109], il s'agit d'une couche de mélange supercritique non-réactive entre de l'oxygène et de l'hydrogène réalisée en 2D avec l'approche DNS. Cette simulation possède un grand nombre de Reynolds avec un large gradient de densité.

Ce cas test de référence est conforme aux conditions applicables aux moteurs-fusées à propergol liquide en termes de tailles caractéristiques, de vitesse et température d'injections et de pression dans la chambre. Une lèvres de hauteur  $h = 0.5$  mm sépare les deux jets, ce qui est une valeur réaliste pour les moteurs-fusées. La pression ambiante est de 10.0 Mpa, beaucoup plus grande que les pressions critiques de l'oxygène (5.04 MPa) et de l'hydrogène (1.28 MPa).

Sur la figure 4.1, l'écoulement du bas représente l'injection centrale de l'oxygène dense liquide d'un injecteur coaxial de moteur-fusée. Cette injection est réalisée avec une vitesse de  $U_{O_2} = 30$ m/s donnant un nombre de Mach égal à  $Ma_{O_2} = 0.04$  et avec une température de 100 K, ce qui est inférieur à la température critique de l'oxygène (154.5 K). Dans ces conditions l'oxygène est assimilé à un fluide dans un état supercritique dense. Quant au jet du haut, il représente l'injection extérieure de l'hydrogène

d'un injecteur de moteur-fusée (injecté par l'écoulement externe de forme annulaire). Cette injection est réalisée avec une vitesse de  $U_{H_2} = 125$  m/s, donnant un nombre de Mach égale à  $Ma_{H_2} = 0.12$  et avec une température de 150 K, ce qui est supérieur à la température critique de l'hydrogène (33.0 K). Dans ces conditions l'hydrogène est assimilé à un fluide dans un état supercritique léger.

Le rapport de densité entre les jets d'oxygène et d'hydrogène est de 80, avec  $\rho_{O_2} = 1258$  kg.m<sup>-3</sup> et  $\rho_{H_2} = 15.8$  kg.m<sup>-3</sup>.

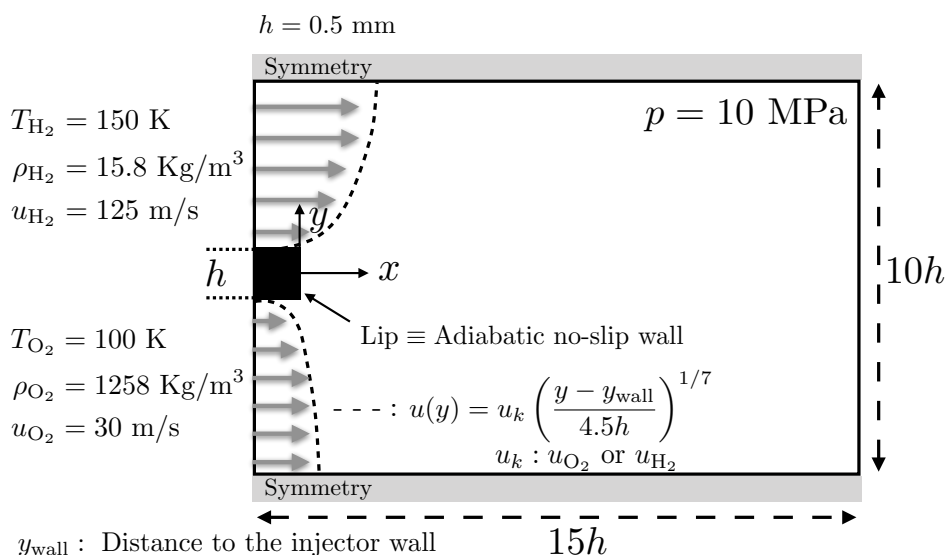


FIGURE 4.1: Description du cas test proposé par Ruiz et al. [109].

### 4.3.2 Conditions aux limites et initiales

La géométrie et les conditions aux limites sont représentés sur la figure 4.1. La condition d'injection de l'hydrogène et de l'oxygène a été réalisée avec l'approche en onde caractéristique (NSCBC) en configuration subsonique gaz réel [170]. Cette même approche a aussi été utilisée pour la condition de sortie. La pression de sortie a été imposée à 10.0 MPa, dans le but de maintenir cette pression dans la chambre.

La condition de symétrie a été utilisée pour le haut et le bas du domaine [109], alors que la lèvre a été modélisée avec la méthode des frontières immergés [205, 206] en configuration de mur adiabatique non-glissante, comme préconisé dans [109].

Une loi en puissance 1/7ème a été appliquée pour les vitesses d'injection dans les deux jets de la manière suivante :

$$u(y) = U \left( \frac{y - y_{wall}}{\delta_\omega} \right)^{1/7}, \quad (4.1)$$

où  $U$  est la vitesse d'injection du jet,  $(y - y_{wall})$  est la distance à la lèvre et  $\delta_\omega = 4.5h$ . Notons qu'aucune perturbation turbulente n'a été ajoutée aux vitesses d'injection dans le but de maintenir la

simplicité et la répétabilité des conditions limites.

Pour initialiser la simulation, les conditions aux limites d'entrée ont été prolongées sur l'axe de l'écoulement ( $x$ ) à travers l'ensemble du domaine. La figure 4.2 représente les champs initiaux de température, vitesse axiale et des fractions massiques d'hydrogène et d'oxygène. La pression initiale a été fixée à 10.0 MPa et la vitesse transversale à zéro.

Un profil en tangente hyperbolique  $\tilde{\eta}(y)$  a été utilisé pour l'initialisation des fractions massiques et de la température dans le sillage de la lèvre ( $-0.5h \leq y \leq 0.5h$ ), où les vitesses axiales et transversales ont été fixées initialement à zéro.

Pour  $y \in [-0.5h, 0.5h]$ , on a :

$$\tilde{\eta}(y) = \tanh\left(\frac{y - y_{wall,O_2}}{\delta_i}\right) \quad \text{avec} \quad y_{wall,O_2} = 0.5h \quad \text{et} \quad \delta_i = h/4 . \quad (4.2)$$

On obtient pour la température :

$$T(y) = T_{O_2} + (T_{H_2} - T_{O_2})\tilde{\eta}(y) , \quad (4.3)$$

et, pour les fractions massiques :

$$Y_{H_2} = \tilde{\eta}(y) \quad \text{et} \quad Y_{O_2} = 1.0 - Y_{H_2} . \quad (4.4)$$

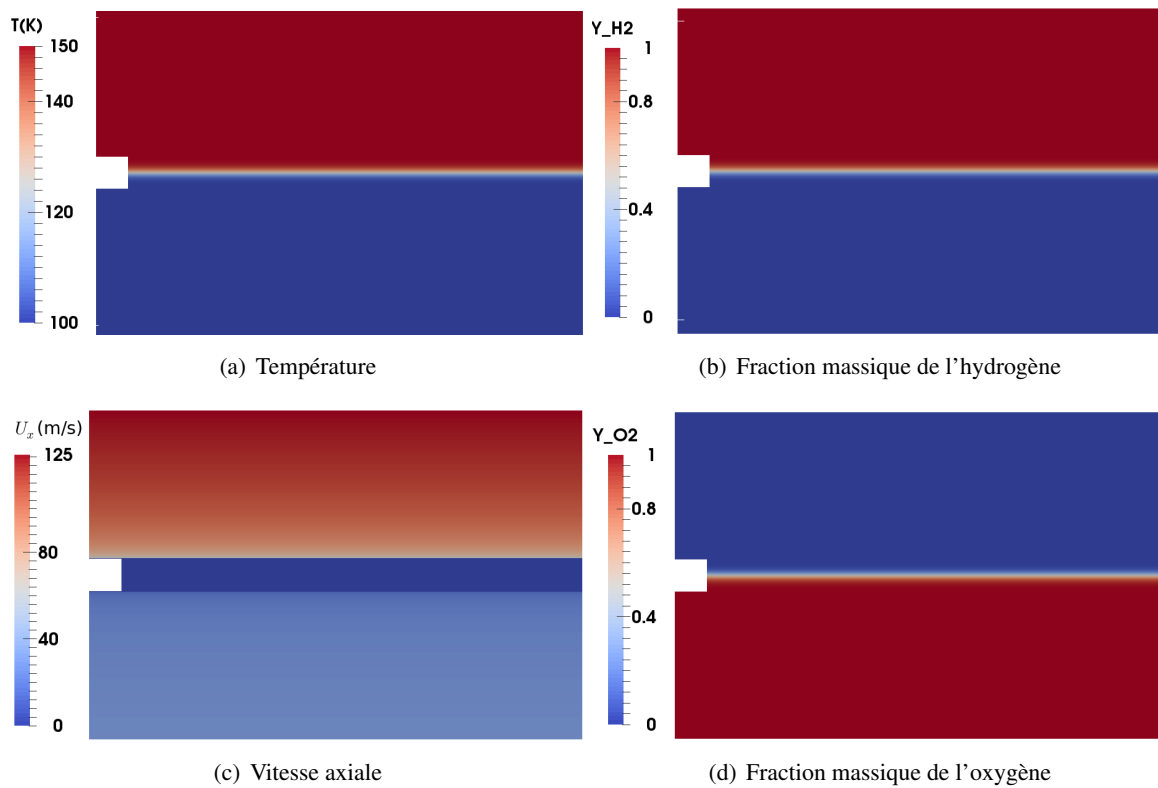


FIGURE 4.2: Conditions initiales de la simulation.

### 4.3.3 Géométrie et maillages

La géométrie du domaine est représentée sur la figure 4.1. La longueur est de  $15h$  suivant la direction axiale ( $x$ ) et de  $10h$  suivant la direction transversale ( $y$ ). La région d'intérêt s'étend axialement de 0 à  $10h$ . Une zone tampon, dans laquelle un ajout de viscosité artificielle a été réalisé, entre  $x = 14h$  et  $x = 15h$  afin d'éviter la génération d'ondes acoustiques parasites pouvant perturber la zone d'intérêt.

Quatre maillages structurés différents ont été utilisés pour les simulations avec SiTCom-B. De nom  $h_x$ , avec  $x = [30, 100, 250, 500]$  représentant le nombre de point sur la lèvre de taille  $h = 0.5$  mm.

Le tableau 4.1 récapitule les quatre maillages avec la taille de maille et le nombre total de cellules.

Nom	$\Delta_x(\mu m)$	Nombre totale de cellules
$h_{30}$	16.6	135.000
$h_{100}$	5	1.500.000
$h_{250}$	2	9.375.000
$h_{500}$	1	37.500.000

TABLE 4.1: Les différents maillages et leurs caractéristiques.

### 4.3.4 Stratégie de modélisation

Les résultats fournis par Ruiz et al. [109] sur ce cas test ont été réalisés avec deux codes de calcul en bon accord avec la thermodynamique des gaz réels. Il s'agit des codes AVBP [114] et de RAPTOR [106].

L'équation d'état cubique Peng-Robinson a été utilisée pour ces simulations, car d'après Ruiz et al. [109], parmi les équations cubiques, celle de Peng-Robinson est la plus proche des données NIST<sup>4</sup> dans cette gamme de pression et température pour le mélange binaire H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>.

Comme dans la majorité des simulations à haute pression, la modélisation du flux de diffusion des espèces est basée sur le gradient de la fraction massique des espèces. Celle-ci a été couplée avec l'approximation de Curtiss et Hirschfelder ( $V_k = D_k^{mix} \nabla X_k$ , voir Chapitre 2).

Concernant la modélisation des coefficients de transport ( $\eta$ ,  $\lambda$ ,  $D$ ), la formulation proposée par Chung et al. [151] pour le calcul de la viscosité dynamique et de la conductivité thermique a été appliquée dans le code AVBP. Cette formulation prend en compte les effets en pression, de ce fait elle est bien adaptée pour une configuration haute pression. Pour le coefficient de diffusion des espèces, l'approche en nombre de Schmidt constant a été utilisée :  $S_{c,H_2} = 0.3$  et  $S_{c,O_2} = 1.0$ . De ce fait :

$$D_k^{mix} = \mu / (\rho S_{c,k}) . \quad (4.5)$$

Avec le code RAPTOR, la formulation proposée par Ely et Hanley [207, 208] a été employé pour le calcul de la viscosité dynamique et de la conductivité thermique. Cette formulation est aussi en

4. NIST : National Institute of Standards and Technology



bon accord avec une configuration haute pression. Pour le coefficient de diffusion des espèces, tout comme avec AVBP, la modélisation proposée par Curtiss et Hirschfelder a été appliquée. Le coefficient de diffusion binaire des espèces intervenant dans cette formulation a été calculé à partir de la théorie cinétique des gaz [201, 202] corrigé par l'approche de Takahashi [203], afin de prendre en compte les phénomènes de haute pression.

Dans le code de calcul SiTCom-B, cette configuration a été simulée avec quatre différentes stratégies de modélisation (cas : #0, #1, #2, #3, voir le tableau 4.2) dans le but de connaître leurs impacts relatifs. Pour la modélisation du flux de diffusion, deux procédures différentes ont été exploitées. La première, i.e. les cas #0 et #1 correspondant à la modélisation idéale du flux de diffusion (cf. Chapitre 2), basée uniquement sur le gradient de la fraction massique des espèces, tandis que la deuxième, les cas #2 et #3 correspondent à la modélisation non-idéale du flux de diffusion, basée sur le gradient du potentiel chimique couplé avec l'équation d'état cubique Peng-Robinson.

Pour le calcul de la viscosité dynamique et de la conductivité thermique, de façon similaire à AVBP, la formulation proposée par Chung et al. [151] a été appliquée. Pour le calcul des coefficients de diffusion des espèces, de manière identique à RAPTOR la théorie cinétique des gaz [201, 202] a été utilisée. Cependant deux corrections différentes en pressions ont été appliquées à ce coefficient. Il s'agit de la correction de Takahashi avec les cas #0 et #2 et la correction de Kurochkin avec les cas #1 et #3.

Le tableau 4.2 résume les différentes stratégies de modélisation pour les simulations non réactives.

Cas	SiTCom-B				AVBP			
	$\mathbf{d}_l$	$D_{kj}^{\text{bin}}$	$F_c$	$\mu, \lambda$	$\mathbf{d}_l$	$D_{kj}^{\text{bin}}$	$F_c$	$\mu, \lambda$
#0	$\nabla X_l$	[201, 202]	[203]	[151]	$\nabla X_l$	$\mu/(\rho S_{c,k})$	$F_c = 1$	[151]
#1	$\nabla X_l$	[201, 202]	[204]	[151]	RAPTOR			
#2	$X_l(\nabla \mu_l)_T$	[201, 202]	[203]	[151]	$\mathbf{d}_l$	$D_{kj}^{\text{bin}}$	$F_c$	$\mu, \lambda$
#3	$X_l(\nabla \mu_l)_T$	[201, 202]	[204]	[151]	$\nabla X_l$	[201, 202]	[203]	[207, 208]

TABLE 4.2: Stratégie de modélisation utilisée dans les différents codes de calcul pour le cas non-réactif.  $F_c$  représente la correction en pression du coefficient de diffusion des espèces binaire.

Pour les simulations réactives 1D et 2D, la même stratégie que dans le cas non-réactif a été employée, où plusieurs simulations avec différentes stratégies de modélisation ont été réalisées afin d'étudier leurs impacts dans des calculs supercritiques réactifs laminaires et turbulents. Tout en ajoutant une étude sur l'influence de l'effet Soret et sur la formulation de la vitesse de diffusion (avec l'hypothèse de Curtiss et Hirschfelder et avec la méthode multicomposante)<sup>5</sup>.

5. Dans le cas non réactif, avec seulement deux espèces transportées, l'approximation de Curtiss and Hirschfelder et la modélisation multicomposante sont équivalentes.

## 4.4 Résultats et discussion

### 4.4.1 Résultats non-réactif

Les résultats numériques obtenus dans [109] avec AVBP et RAPTOR ont été fournis pour les valeurs moyennes et les fluctuations de la température, des vitesses axiale et transversale et des fractions massiques des espèces mises en jeu. Ces résultats statistiques ont été enregistrés suivant 4 coupes verticales définies en :  $x = h$ ,  $x = 3h$ ,  $x = 5h$  et  $x = 7h$ . Les champs moyens ont été obtenus pour une durée de 15 temps de parcours ( $T_{FT}$ ), ce qui est assez pour assurer la convergence [109].

Un temps de parcours  $T_{FT}$  est défini comme le temps nécessaire pour réaliser une distance axiale de  $10h$  [109], même si la longueur axiale du domaine vaut  $15h$  la zone d'intérêt se limite à  $10h$  et  $T_{FT}$  est calculée avec la formule suivante :

$$T_{FT} = \frac{10h}{U_{conv}} , \quad (4.6)$$

où  $U_{conv}$  correspond à la vitesse de convection moyenne calculée à partir de la formule suivante [209, 210] :

$$U_{conv} = \frac{U_{O_2} + (\rho_{H_2}/\rho_{O_2})^{1/2}U_{H_2}}{1 + (\rho_{H_2}/\rho_{O_2})^{1/2}} . \quad (4.7)$$

On trouve ainsi,  $U_{conv} = 39.6$  m/s, ce qui donne  $T_{FT} = 0.125$  ms. Bien que d'autres formulations existent pour calculer cette vitesse de convection [105, 211], celle-ci a été choisie par Ruiz et al. [109] pour ce cas test.

Les objectifs de cette étude sont :

- Simuler ce cas test non réactif avec une modélisation idéale du flux de diffusion (cas #0), tout comme avec AVBP et RAPTOR et comparer les résultats instantanés et moyens entre les 3 codes.
- Réaliser une étude de sensibilité en maillage (tableau 4.1).
- Evaluer la modélisation non-idéale du flux de diffusion et étudier l'écart avec les résultats issus d'une modélisation idéale.
- Evaluer les corrections de Takahashi et Kurochkin pour le coefficient de diffusion binaire des espèces. Puis comparer les résultats obtenus avec et sans les corrections en pression.

#### 4.4.1.1 Comparaison des 3 codes

Cette configuration a été simulée avec succès avec le code de calcul SiTCom-B du CORIA. Une modélisation non-idéale ainsi que la correction en pression de Takahashi ont été utilisées correspondant au cas #0 du tableau 4.2. Les résultats fournis par Ruiz et al. [109] ont été réalisées avec le maillage  $h_{250}$ , pour cela ce même maillage a été utilisé avec SiTCom-B lors de ce calcul. Et enfin, la même

procédure que Ruiz et al. [109] a été employée pour obtenir les champs moyens et les fluctuations.

Les figures 4.3 représentent les champs instantanés de la densité, de la fraction massique de l'oxygène et des vitesses axiale et transversale obtenus avec les différents codes à un instant convergé. Les résultats issus de ces trois codes montrent que la couche de mélange  $H_2/O_2$  est localisée tout le long du sillage de la lèvre. Elle est dominée par de larges structures tourbillonnaires qui sont du même ordre de grandeur que la taille de la lèvre. Cette couche de mélange s'élargit avec la position axiale ( $x$ ), tout comme les structures tourbillonnaires qui deviennent de plus en plus grandes. Celle-ci s'étale plus du côté de l'hydrogène que de l'oxygène, et ceci est principalement dû aux faibles densités des particules d'hydrogène qui favorisent la diffusion et le mélange dans cette direction. Sur les champs des vitesses axiales et transversales, trois structures tourbillonnaires distinctes l'une de l'autre d'environ ( $3h$ ) sont observées dans le sillage de la lèvre. Juste derrière la lèvre à environ  $0.5h$  de celle-ci une zone de recirculation est observée, ce qui induit un bon rapport de mélange derrière la lèvre (voir les champs de fraction massique d'oxygène de la figure 4.3). Ces grandes structures tourbillonnaires sur la couche de mélange permettent à des poches denses d'oxygène de se détacher et ainsi de se diffuser vers l'hydrogène plus léger. Beaucoup d'autres structures moins grandes sont aussi présentes, ce qui induit un mélange  $H_2/O_2$  à plusieurs niveaux comme nous les montrent les figures 4.3.

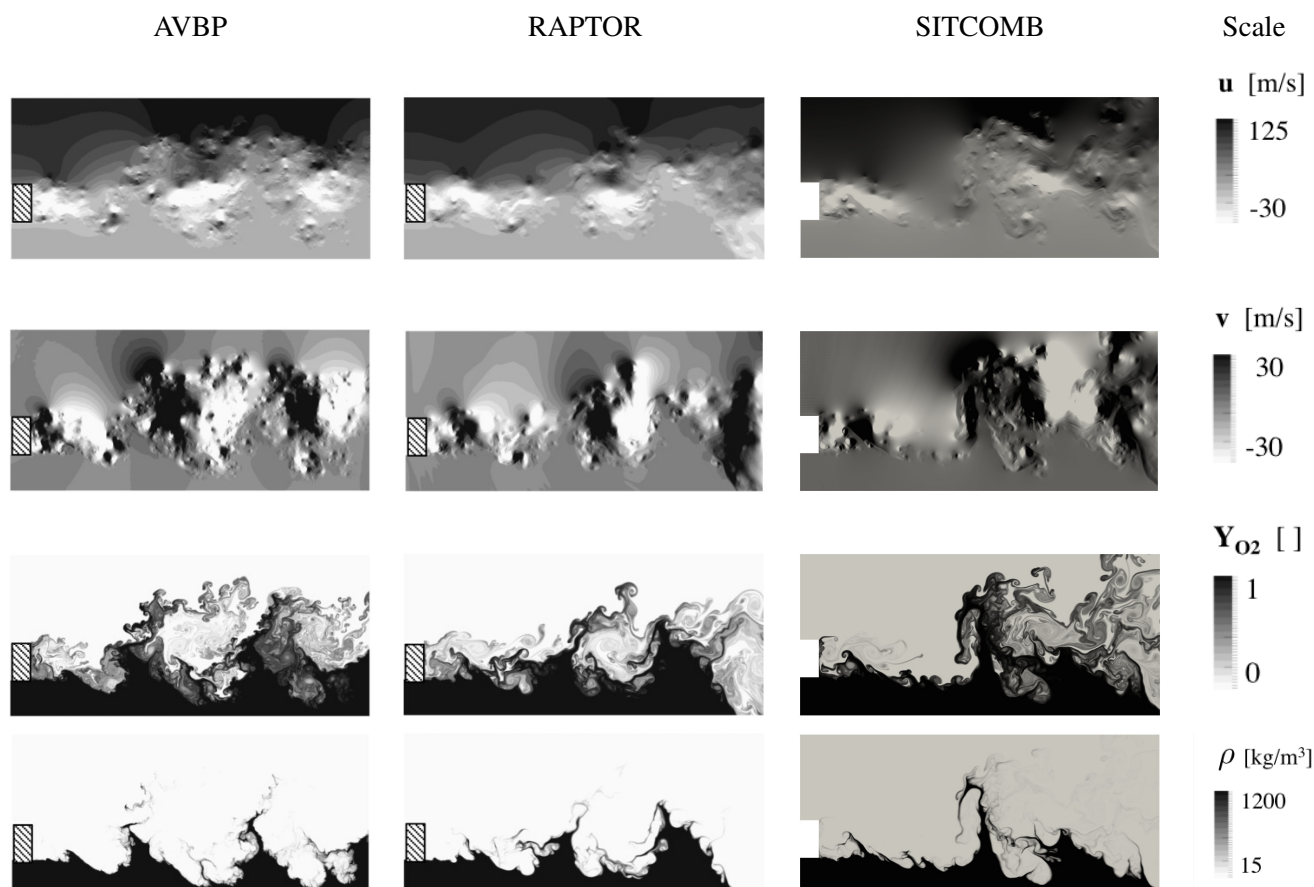


FIGURE 4.3: Champs instantanés des vitesses axiales et transversales, de la densité et de la fraction massique de l'oxygène obtenus avec les 3 différents solveurs.

Ces résultats montrent aussi que les profils instantanés obtenus avec les différents codes sont très proches. Les mêmes tendances au sein de cet écoulement sont bien retrouvées avec les trois solveurs. Les niveaux de mélange obtenus entre l'hydrogène et l'oxygène sont très similaires entre ces trois codes. Les structures turbulentes derrière la lèvre sont du même ordre de grandeur et la zone de recirculation juste derrière la lèvre est bien capturée avec ces différents codes.

Les figures 4.4 - 4.7 représentent les champs moyens et les fluctuations obtenus avec les différents codes. Les figures 4.4(a) - 4.4(d) montrent l'évolution de la vitesse axiale suivant l'axe ( $x$ ) pour les quatre coupes verticales, avec  $y$  variant de  $-5h$  à  $5h$ , l'origine  $y = 0$  étant prise au centre de la lèvre. Les profils obtenus avec les différents codes sont très proches. La vitesse axiale vaut bien 30 m/s en  $y = -5h$  et environ 130 m/s en  $y = 5h$ , ce qui est en bon accord avec les conditions aux limites imposées. Dans le sillage de la lèvre ( $-0.5 \leq y/h \leq 0.5$ ) la vitesse diminue sur les quatre coupes verticales ( $x/h = 1, 3, 5$  et 7), jusqu'à devenir négative sur la coupe ( $x/h = 1$ ), à cause de la zone de recirculation localisée juste derrière la lèvre. Puis, lorsqu'on s'éloigne de la lèvre ( $x/h = 3, x/h = 5$  et  $x/h = 7$ ), cette diminution dans le sillage de la lèvre a tendance à disparaître car les structures turbulentes s'élargissent.

Concernant les fluctuations de la vitesse axiale (figure 4.4(e) - 4.4(h)), les profils obtenus sont très proches entre les différents codes. Pour les 4 profils étudiés, on distingue trois parties : De  $y/h = -5$  jusqu'à  $y/h = -1$ , la zone est remplie par de l'oxygène et les fluctuations de la vitesse axiale sont nulles. La couche de mélange ne perturbe donc quasiment pas l'écoulement dense d'oxygène ( $\rho > 1000 \text{ kg/m}^3$ ) agissant comme un mur et réfléchissant la majeure partie des perturbations arrivant à lui. De  $y/h = -1$  à  $y/h = 1$ , i.e. dans le sillage de la lèvre, un profil grossièrement gaussien apparaît sur les champs de fluctuations de la vitesse axiale. Celui-ci est principalement causé par les vorticités présentes dans cette région et s'étalant au fur et à mesure de l'ouverture de la couche de mélange, et de façon asymétrique. De  $y/h = 1$  à  $y/h = 5$ , i.e. dans la zone remplie par de l'hydrogène, les fluctuations de vitesse axiale sont non nulles et quasi-constantes pour les quatre coupes verticales. Ces fluctuations ont tendance à augmenter avec la longueur axiale ( $x$ ). Avec SiTCom-B elles valent environ (1, 2.5, 5 et 8 m/s) sur les axes ( $x/h$ ) respectivement (1, 3, 5 et 7). Ceci signifie que les perturbations issues des structures tourbillonnaires dans la couche de mélange arrivent à perturber l'écoulement de l'hydrogène qui est beaucoup plus léger que l'oxygène. Ces perturbations s'amplifient avec l'axe  $x$  tout comme les structures tourbillonnaires dans la couche de mélange qui deviennent de plus en plus grandes.

Les figures 4.5(a) - 4.5(d) montrent l'évolution de la vitesse transversale moyenne. Cette vitesse est nulle en  $y/h = -5$  et  $y/h = 5$  respectant ainsi la condition limite de symétrie imposée aux extrémités du domaine de calcul. Pour les quatre coupes verticales, dans la partie liée à l'oxygène i.e. de  $y/h = -5$  à  $y/h = -1$ , la vitesse transversale moyenne est zéro, démontrant une fois de plus, que les perturbations issues de la couche de mélange ne perturbent pas l'écoulement dense de l'oxygène. Concernant la partie liée à l'hydrogène, la vitesse moyenne est maintenant non nulle. Sur la première coupe  $x/h = 1$ , elle est négative en  $y/h = 1$  pour ensuite tendre vers zéro en  $y/h = 5$ . Ceci s'explique par la présence d'une seule grande structure tourbillonnaire tournant dans le sens horaire dont le centre se trouve juste en amont de la première coupe verticale (voir les champs instantanés de la vitesse transversale de la figure 4.3). Pour les autres coupes  $x/h = 3, 5$  et 7, la vitesse moyenne est toujours négative en  $y/h = 1$ , mais elle devient positive avant de tendre vers 0 en  $y/h = 5$ , cette transition s'épaissit avec l'éloignement de la coupe verticale à la lèvre (i.e. avec l'axe  $x$ ) démontrant une fois de plus que les perturbations issues de

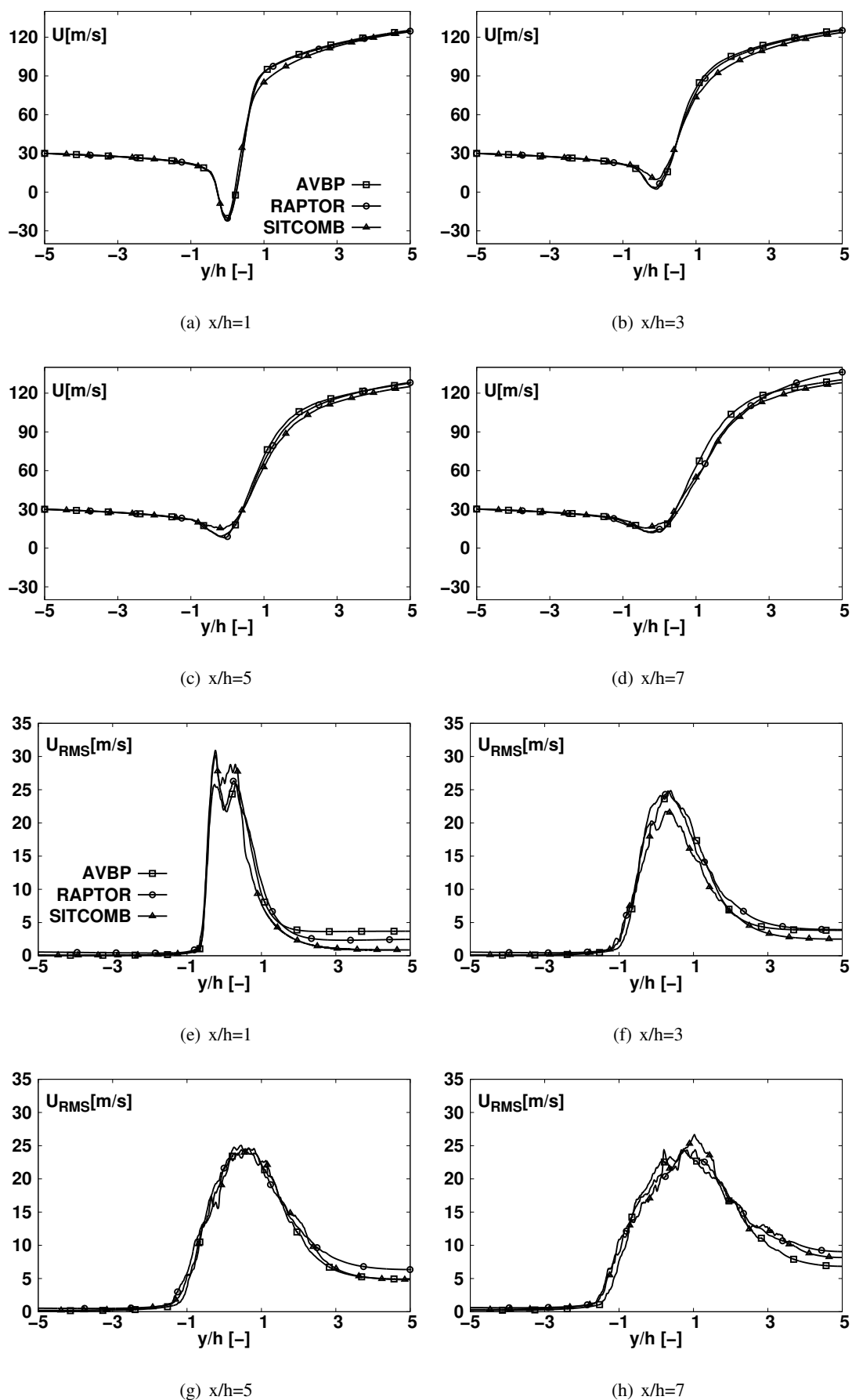


FIGURE 4.4: Champs moyens et fluctuations de la vitesse axiale suivant 4 coupes verticales.

la zone de mélange perturbent de plus en plus l'écoulement de l'hydrogène léger avec l'axe  $x$ . Enfin, dans la partie localisée dans le sillage de la lèvre allant de  $y/h = -1$  à  $y/h = 1$ , sur les quatre coupes verticales, cette vitesse moyenne part de zéro, atteint un minimum puis revient vers zéro. L'amplitude de cette vitesse moyenne diminue avec la distance axiale ( $x$ ). Ces tendances se retrouvent au sein des résultats issus de ces trois codes, même si de faibles différences sont observées, notamment sur les coupes  $x/h = 5$  et  $7$  où les résultats issus de SiTCom-B et AVBP sont quasi-identiques alors qu'une différence apparaît avec RAPTOR.

Concernant les fluctuations de vitesse transversale (4.5(e) - 4.5(h)), ici encore, les résultats issus de ces trois codes sont quasi-similaires. La même tendance est observée sur les quatre coupes verticales. Elles commencent toutes de zéro en  $y/h = -5$  atteignant un pic autour de  $y/h = 0$ , à cause de la zone de mélange avant de retourner à zéro en  $y/h = 5$ . L'amplitude de ce pic diminue avec la distance axiale ( $x$ ). La courbe s'étale aussi avec l'axe ( $s$ ), plus du côté de l'hydrogène que de l'oxygène.

Les figures 4.6(a) - 4.6(d) montrent l'évolution la température moyenne. Cette température vaut 100 K du côté de l'oxygène et 150 K du côté de l'hydrogène, ce qui est en bon accord avec les conditions aux limites d'injections. Une zone de transition est observée dans le sillage de la lèvre. Cette zone s'élargit avec la distance axiale en raison de l'épaississement de la couche de mélange. Les résultats obtenus avec SiTCom-B et RAPTOR sont très proches, alors qu'avec AVBP la pente de la transition est plus raide. Ceci peut s'expliquer par la méthode de modélisation du coefficient de diffusion des espèces, car avec AVBP une approche en nombre de Schmidt constant a été utilisée alors qu'avec RAPTOR et SiTCom-B, le coefficient de diffusion des espèces est calculé à partir de la théorie cinétique des gaz couplée avec la correction en pression de Takahashi. De même les fluctuations de température (figure 4.6(e) - 4.5(h)), obtenues avec RAPTOR et SiTCom-B sont très proches, alors qu'une déviation est observée avec AVBP. L'allure générale montre une courbe similaire aux fluctuations de la vitesse transversale.

Pour la fraction massique moyenne de l'oxygène (figures 4.7(a) - 4.7(d)) et ses fluctuations (figures 4.7(e) - 4.7(h)), les résultats entre les codes de calcul sont identiques sur les quatre coupes verticales.

On peut finalement conclure que, les résultats instantanés et moyens obtenus avec les trois différents codes de calcul sont très similaires. Ceci s'explique par le fait que la stratégie de modélisation utilisée avec ces trois codes est très proche. La même équation d'état a été utilisée, l'approche idéale pour le flux de diffusion a été appliquée et la seule différence apparaît sur la modélisation du coefficient de diffusion des espèces. Cette étude a permis de valider une fois de plus l'aptitude du code SiTCom-B à simuler de tels écoulements supercritiques.

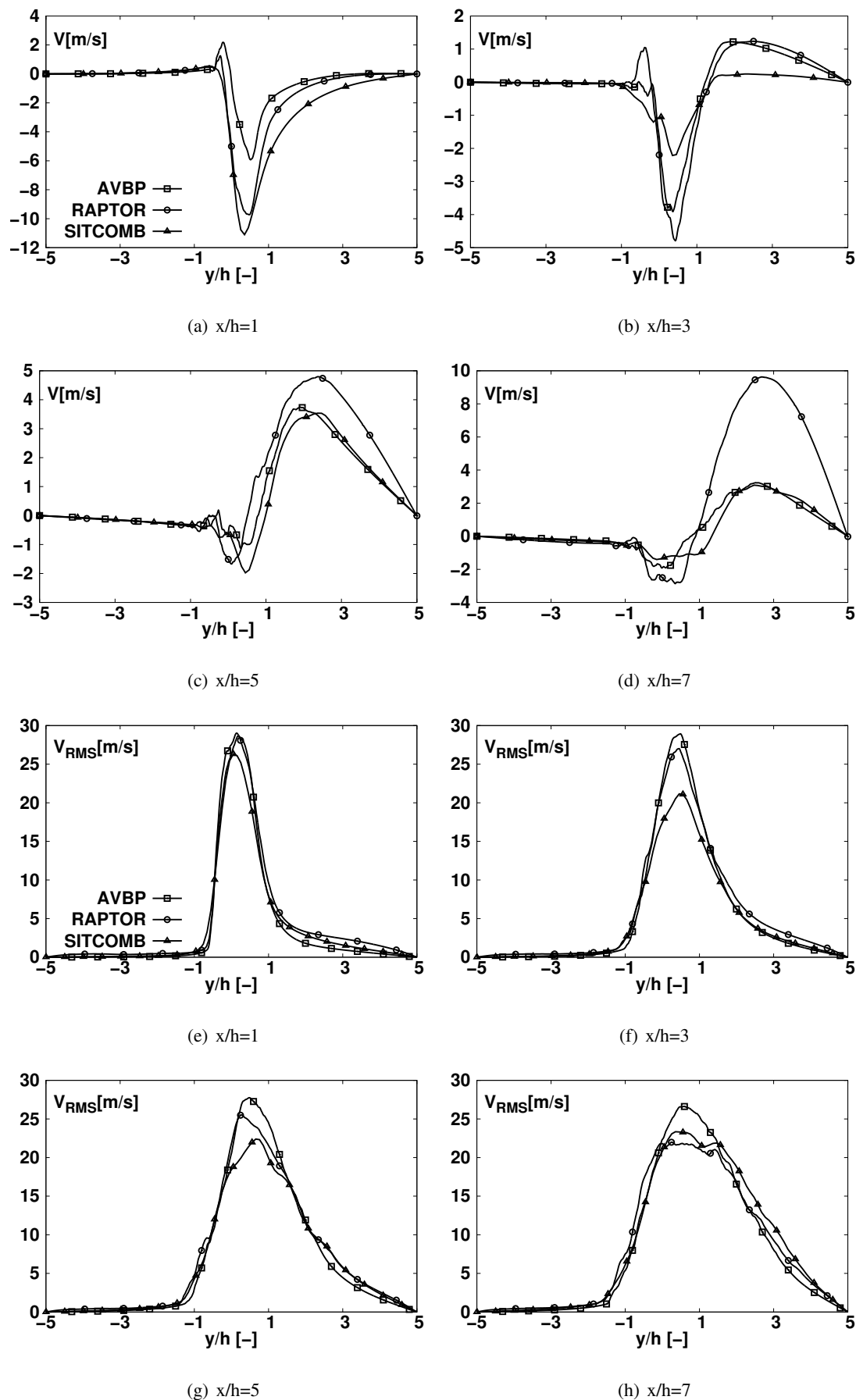


FIGURE 4.5: Champs moyens et fluctuation de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales.

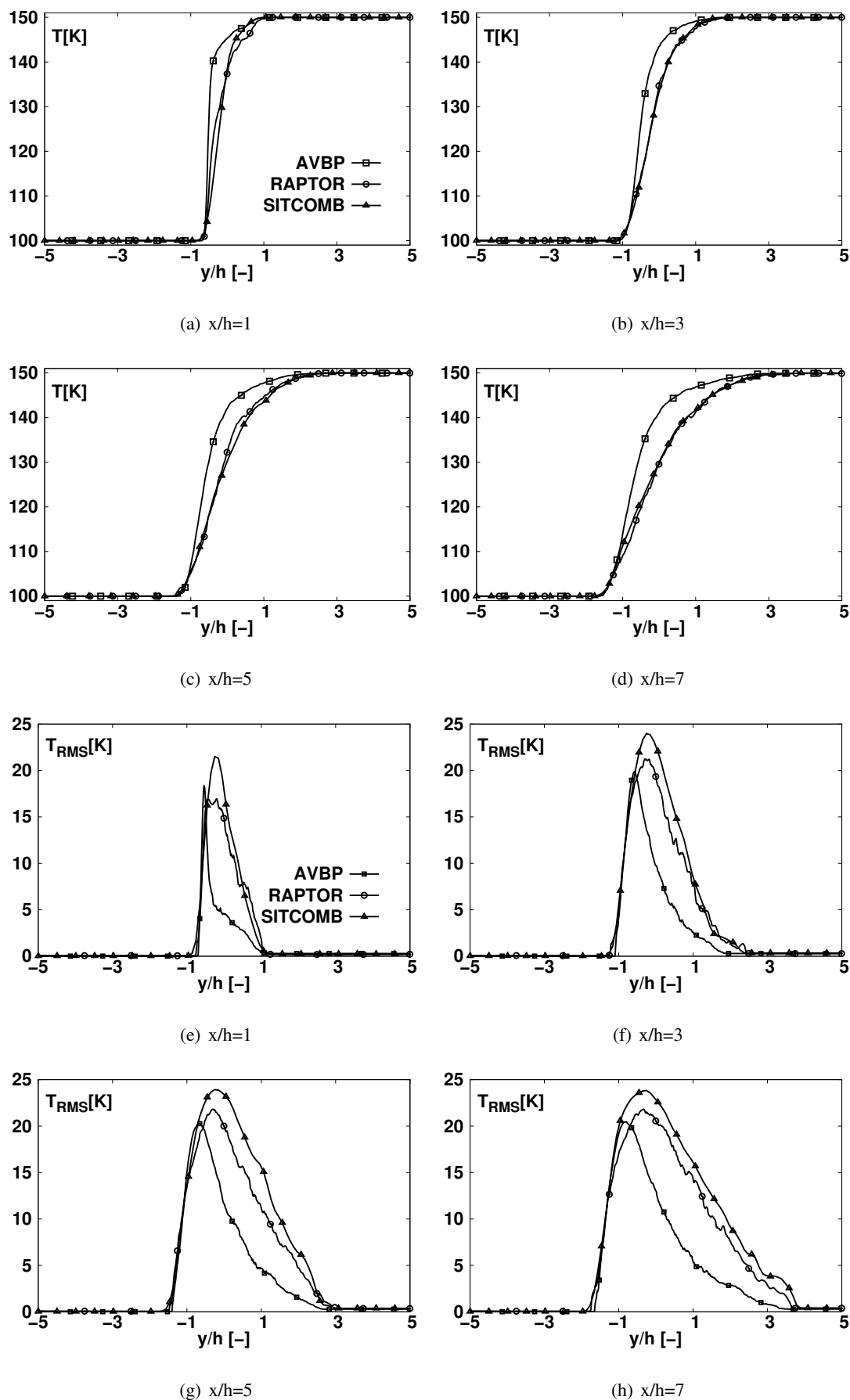


FIGURE 4.6: Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales.



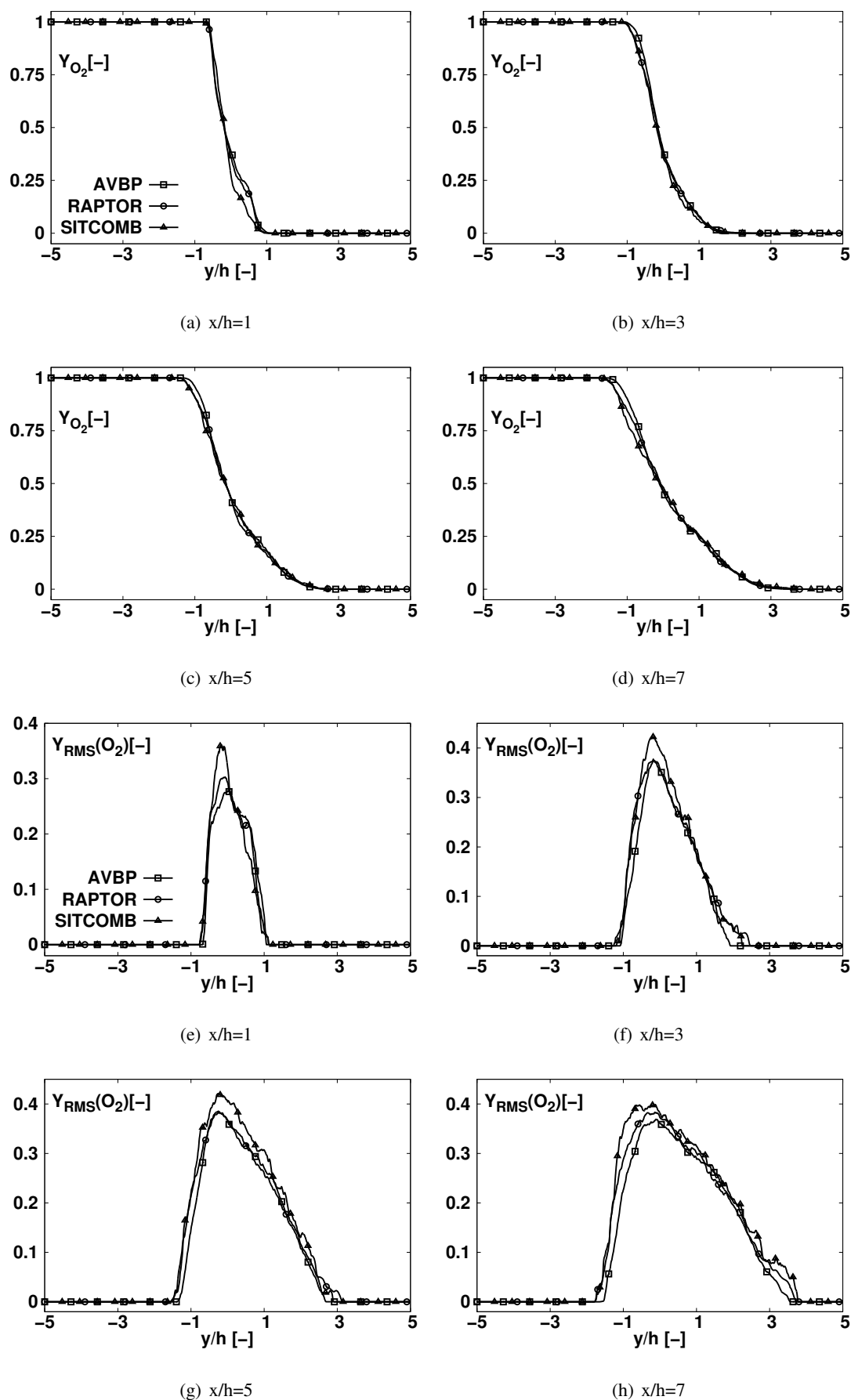


FIGURE 4.7: Champs moyens et fluctuations de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales.

#### 4.4.1.2 Influence du maillage sur les résultats

La simulation précédente a été réalisée sur le maillage  $h_{250}$ , i.e. avec 250 points dans le lèvre de l'injecteur. Trois autres simulations ont ensuite été réalisées avec  $h_{30}$ ,  $h_{100}$  et  $h_{500}$  afin d'étudier l'influence du maillage sur les résultats (voir le tableau 4.1 pour les caractéristiques des maillages). La même stratégie de modélisation que le cas précédent a été employée correspondant au cas #0 du tableau 4.2.

Les figures 4.8 - 4.11 représentent respectivement les champs instantanés des vitesses axiales et transversales, de la fraction massique de l'oxygène et de la densité, obtenus avec ces quatre maillages à un instant final convergé. Comme attendu des similarités sont observés entre ces différents résultats. La zone de recirculation juste derrière la lèvre est ainsi bien capturée avec ces quatre maillages. Les structures turbulentes dans la couche de mélange sont bien présentes sur les différents maillages, mais diffèrent beaucoup entre les maillages  $h_{30}$ ,  $h_{100}$  et le couple  $(h_{250}, h_{500})$ . Les structures sont beaucoup plus résolues avec  $h_{250}$  et  $h_{500}$  pour lesquelles les résultats sont très similaires. Les champs de densité montrent très bien que les maillages  $h_{30}$  et  $h_{100}$  capturent uniquement les grosses structures de l'écoulement, alors que des détails plus précis sont observés avec les maillages  $h_{250}$  et  $h_{500}$ . Quand on regarde précisément les champs de vitesse axiale, on voit très clairement que seules les trois plus grosses structures tourbillonnaires sont capturées avec le maillage  $h_{30}$ , alors qu'avec le maillage  $h_{100}$  une dizaine de structures plus petite sont capturées. Enfin, avec les maillages  $h_{250}$  et  $h_{500}$ , ces dernières sont beaucoup plus nombreuses. Concernant le mélange, les champs de fraction massique révèlent que le niveau du mélange est meilleur avec les maillages raffinés. Il s'agit en majorité de structures turbulentes qui pilotent le mélange en augmentant les surfaces de contact entre les deux fluides, et plus le maillage est raffiné plus le nombre de structures turbulentes capturées est important. On notera qu'entre les maillages  $h_{250}$  et  $h_{500}$  l'ordre de grandeur des structures turbulentes et le niveau du mélange sont très proches.

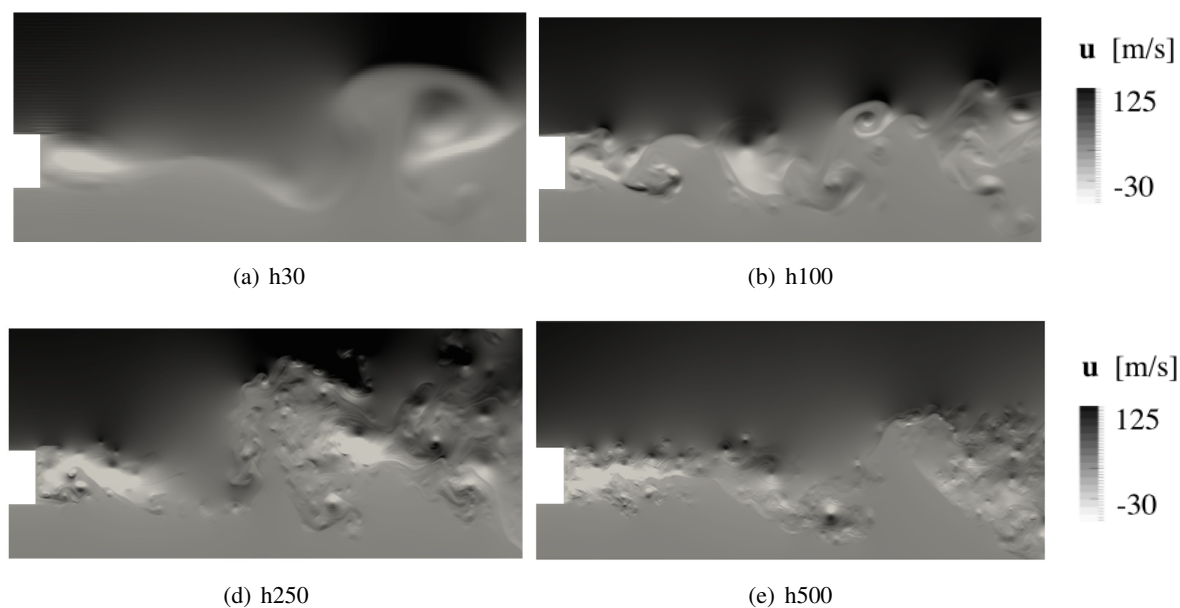


FIGURE 4.8: Champs instantanés de la vitesse axiale sur 4 maillages.

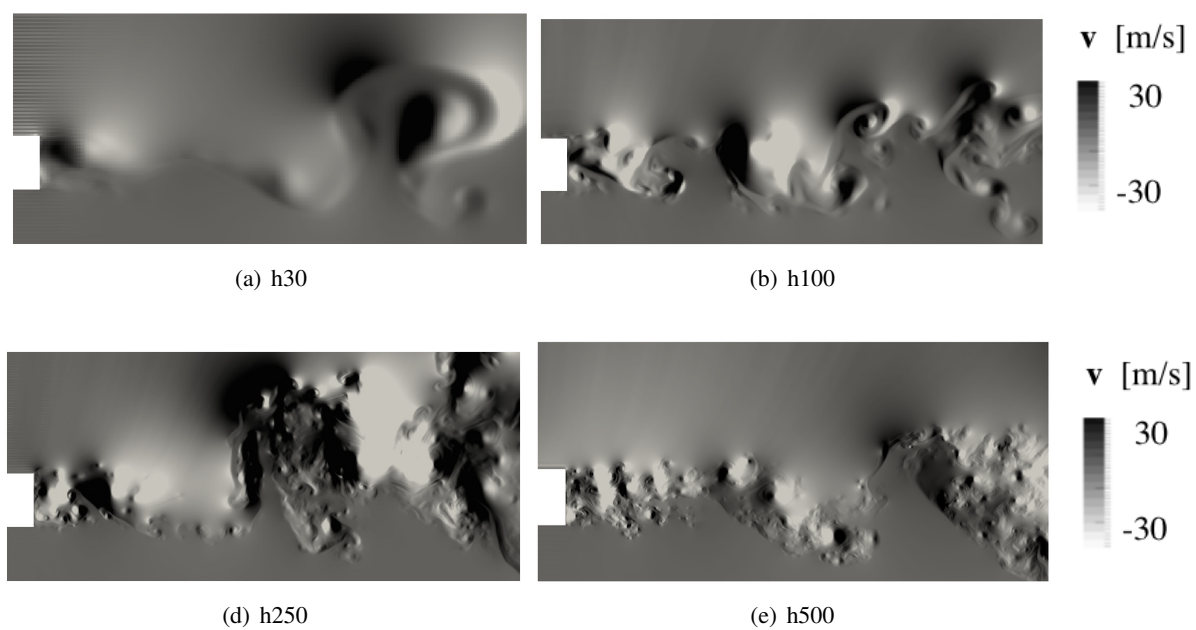


FIGURE 4.9: Champs instantanés de la vitesse transversale sur 4 maillages.

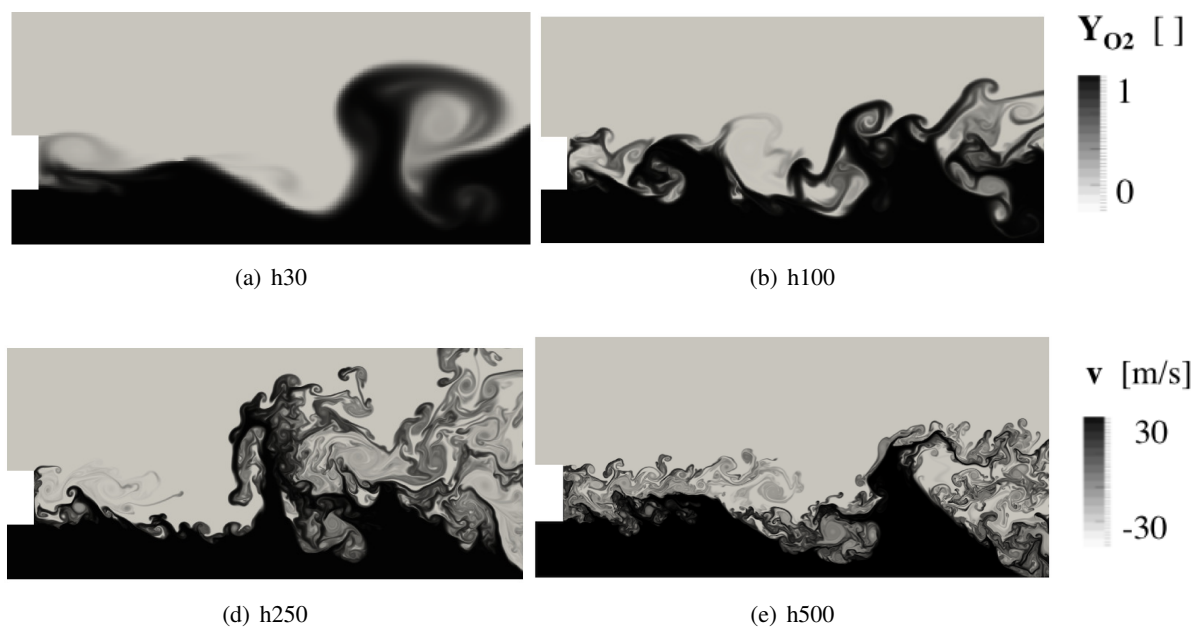


FIGURE 4.10: Champs instantanés de la fraction massique de l'oxygène sur 4 maillages.

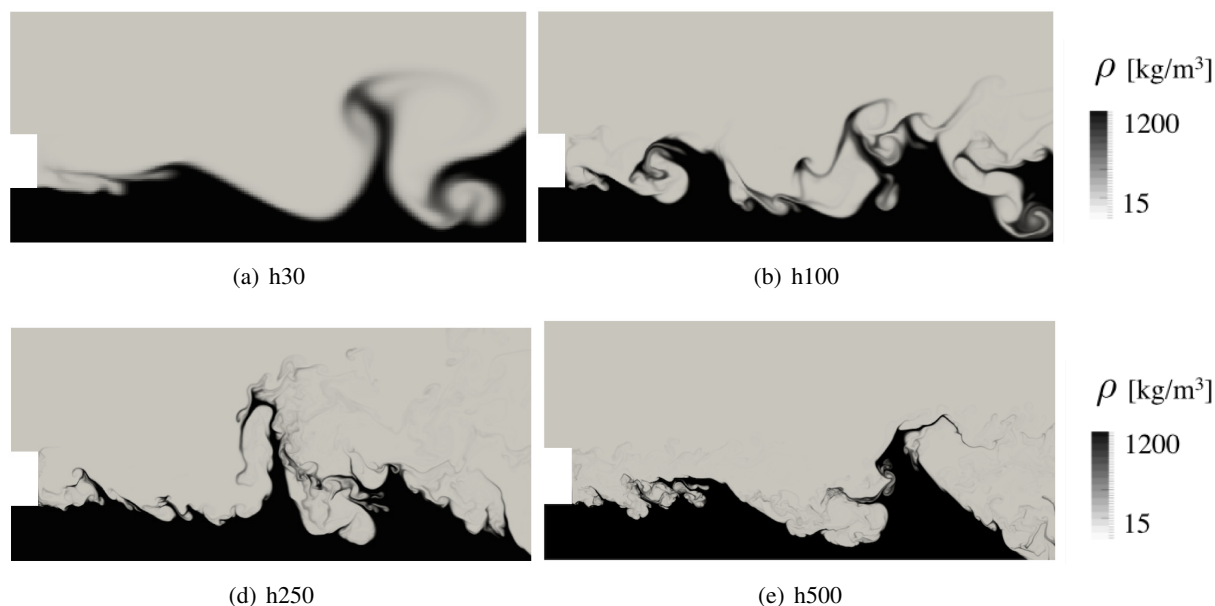


FIGURE 4.11: Champs instantanés de la densité sur 4 maillages.

Après avoir observé ces différences en maillage sur les champs instantanés, les résultats moyens obtenus ont été comparés entre eux. Les figures 4.12 - 4.15 représentent les résultats moyens et les fluctuations des vitesses axiales et transversales, de la fraction massique de l'oxygène et de la température.

Pour la vitesse axiale moyenne (figure 4.12), les résultats sont quasi-identiques quelle que soit la résolution du maillage. Les mêmes tendances de l'écoulement sont retrouvées au sein de ces quatre simulations d'une façon satisfaisante. Néanmoins, une différence apparaît sur l'axe  $x/h = 1$ , au niveau de la zone de recirculation derrière la lèvre où le minimum moyen avec  $h_{30}$  et  $h_{100}$  est d'environ  $(-10 \text{ m/s})$  alors que pour le couple  $(h_{250}, h_{500})$  elle est d'environ  $(-20 \text{ m/s})$ . Ceci peut s'expliquer par le fait qu'une seule grosse structure tourbillonnaire est capturée avec les maillages  $h_{30}$  et  $h_{100}$ , alors qu'avec les maillages  $h_{100}$  et  $h_{250}$ , en plus de cette grosse structure tourbillonnaire plusieurs autres structures de plus petite échelle sont présentes atténuant l'amplitude de la vitesse moyenne. Pour les autres coupes ( $x/h = 3,5$  et  $7$ ), les résultats entre  $h_{100}$ ,  $h_{250}$  et  $h_{500}$  sont identiques, alors qu'avec  $h_{30}$  une légère différence apparaît sur la pente entre  $y/h = 0$  et  $y/h = 3$ . Cette pente est plus raide avec le maillage le moins raffiné ( $h_{30}$ ) qu'avec les autres ( $h_{100}$ ,  $h_{250}$  et  $h_{500}$ ), ce qui montre que les perturbations issues de la zone de mélange se diffusent plus rapidement vers l'hydrogène avec le maillage  $h_{30}$  qu'avec les autres maillages.

Concernant les fluctuations de la vitesse axiale (figure 4.12) en  $x/h = 1$ , la même tendance est observée entre les différents maillages. Une différence apparaît néanmoins sur la valeur maximale au niveau de la zone de recirculation, entre les couples  $(h_{250}, h_{500})$  et  $(h_{30}, h_{100})$ . Ce maximum vaut environ  $25 \text{ m/s}$  avec le couple  $(h_{250}, h_{500})$  et elle vaut  $30 \text{ m/s}$  avec le couple  $(h_{30}, h_{100})$ . Cette différence montre que les structures tourbillonnaires sont beaucoup plus nombreuses et importantes avec les deux maillages les plus raffinés. Pour les autres coupes  $x/h = 3, 5$  et  $7$  les résultats sont très similaires entre  $h_{250}$  et  $h_{500}$ . Avec le maillage  $h_{30}$ , les valeurs maximales sont plus faibles car les structures

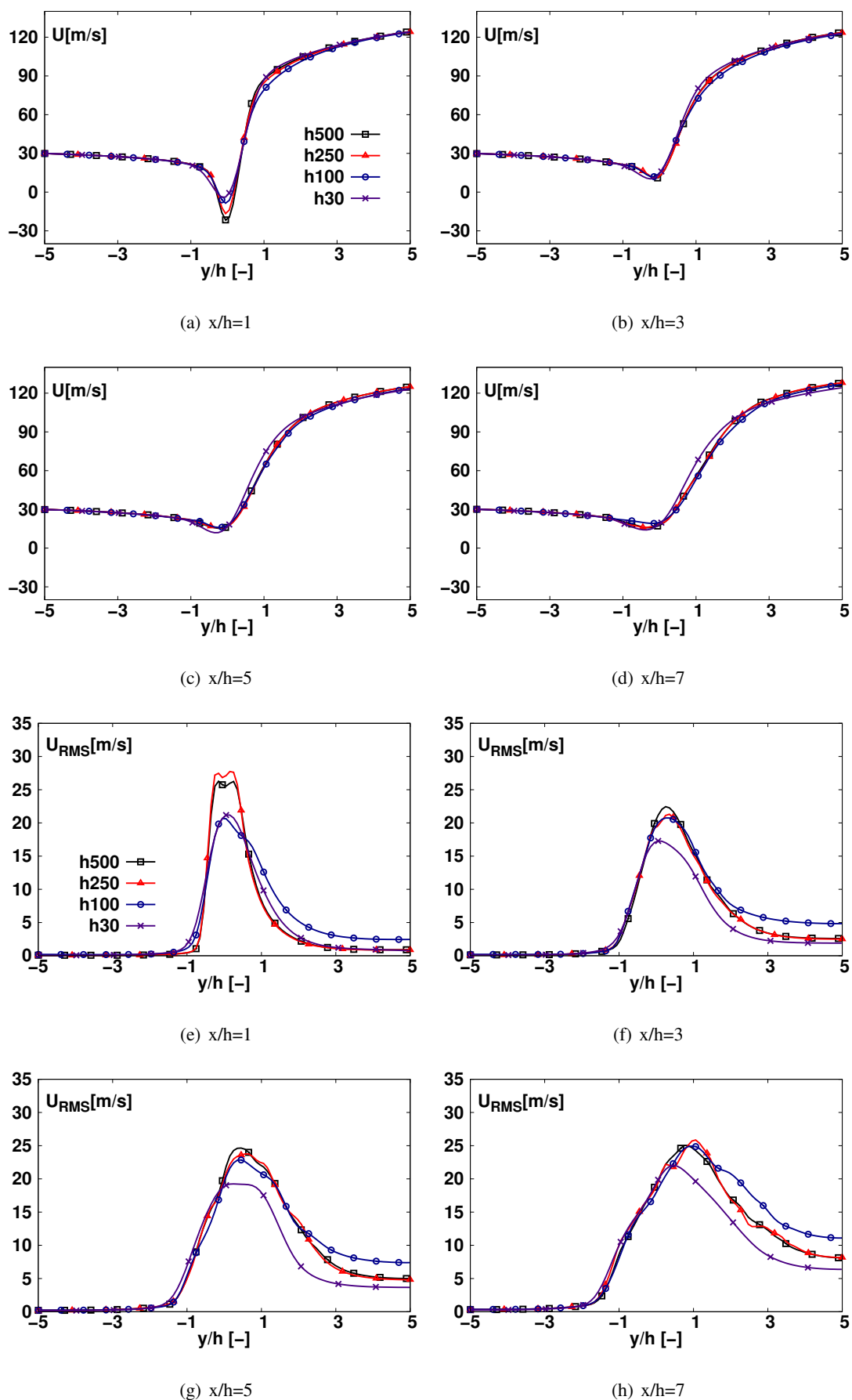


FIGURE 4.12: Champs moyens et fluctuation de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales.

tourbillonnaires sont beaucoup moins nombreuses. Les résultats avec  $h_{100}$  sont très proches des résultats obtenus avec le couple  $(h_{250}, h_{500})$  excepté sur l'axe  $y/h = 5$  où les fluctuations sont plus importantes.

Pour la vitesse transversale moyenne (figure 4.13) les profils obtenus présentent la même allure, les résultats obtenus avec  $h_{250}$  et  $h_{500}$  sont quasi-confondus. Les commentaires précédemment écrits pour la vitesse moyenne axiale sont ici identiques. Il en est de même pour les fluctuations de la vitesse transversale (figure 4.13), où ici encore les résultats sont quasi-identiques entre les maillages  $h_{250}$  et  $h_{500}$ .

Pour la température (figure 4.14), les résultats moyens et les fluctuations sont quasi-identiques, avec une légère différence observée sur le maillage  $h_{30}$ . Et enfin pour la fraction massique de l'oxygène (figure 4.15), les résultats sont la aussi très similaires, on identifie seulement une différence entre les couples  $(h_{250}, h_{500})$  et  $(h_{30}, h_{100})$  sur les fluctuations dans le sillage de la lèvre, car beaucoup plus de structures turbulentes sont capturées avec le couple  $(h_{250}, h_{500})$ .

Finalement, on peut conclure de cette étude en maillage que les champs instantanés ont montré que la même tendance de l'écoulement est retrouvée avec les différents maillages. Cependant plus le maillage est raffiné, plus de structures turbulentes sont capturées, excepté entre  $h_{250}$  et  $h_{500}$  où l'ordre de grandeur des structures tourbillonnaires est quasi-identique. Concernant le mélange, plus le maillage est raffiné et meilleur est le mélange, en raison du nombre des structures turbulentes qui augmente avec le raffinement du maillage. Ces structures pilotent en effet le mélange en augmentant les surfaces de contact entre les fluides. Malgré ces différences, les champs moyens montrent que même si les champs instantanés sont différents entre les quatre maillages, les résultats statistiques sont très proches. Pour le couple  $h_{250}$  et  $h_{500}$ , les résultats instantanés et moyens sont presque identiques alors que le maillage  $h_{500}$  compte quatre fois plus de cellules que  $h_{250}$ .

Dans la suite de notre étude, l'ensemble des simulations ont été réalisées avec le maillage  $h_{250}$ , tout comme dans le papier de Ruiz et al. [109], où les comparaisons entre les codes ont été réalisées seulement avec le maillage  $h_{250}$ .

#### 4.4.1.3 Impact du modèle de diffusion des espèces

Dans cette partie, l'influence de la modélisation non-idéale du flux de diffusion des espèces et des corrections du coefficient de diffusion binaire des espèces pour les hautes pressions ont été étudiées.

En raison des faibles connaissances dans le domaine supercritique comparé aux études à basse pression, on a généralement tendance à utiliser une modélisation idéale du flux de diffusion des espèces pour les simulations supercritiques [111, 212]. Peu d'études ont été réalisées avec l'approche du flux non-idéal. Néanmoins Giovangigli et al. [101] ont montré que sur une flamme prémélangée laminaire unidimensionnelle  $H_2/Air$  à une pression supercritique, l'écart entre les résultats obtenus avec une modélisation idéale et une modélisation non-idéale ne pouvait pas être négligé. Pour cette raison, dans cette étude, la couche de mélange supercritique a été simulée avec une modélisation non-idéale des flux de diffusion afin de connaître son impact dans un cas supercritique non-réactif très turbulent.

La simulation précédente a été réalisée avec quatre modélisations différentes (cf tableau 4.2). Les cas #0 et cas #1, correspondent à l'approche idéale. La correction haute pression du coefficient de diffusion

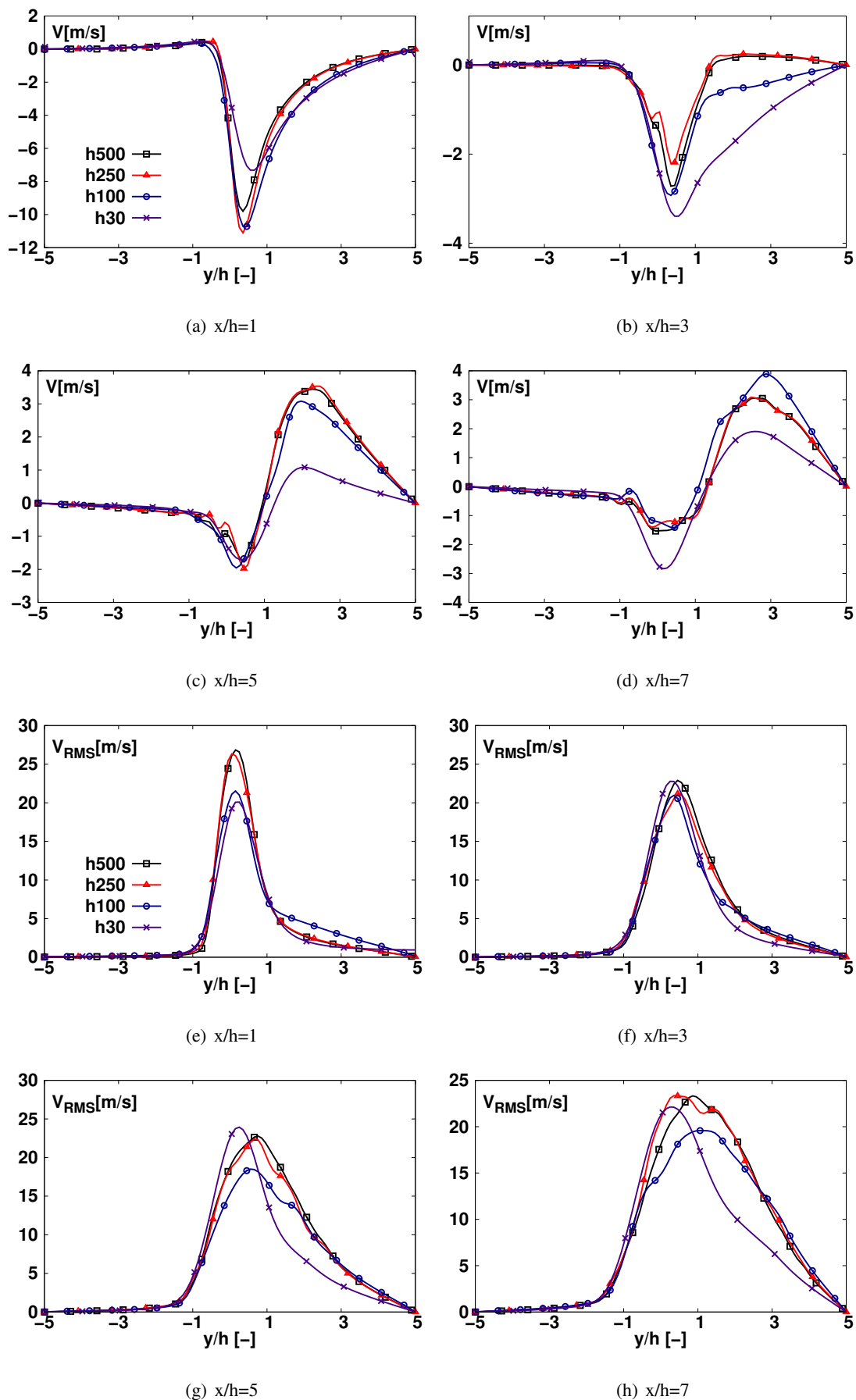


FIGURE 4.13: Champs moyens et fluctuation de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales.



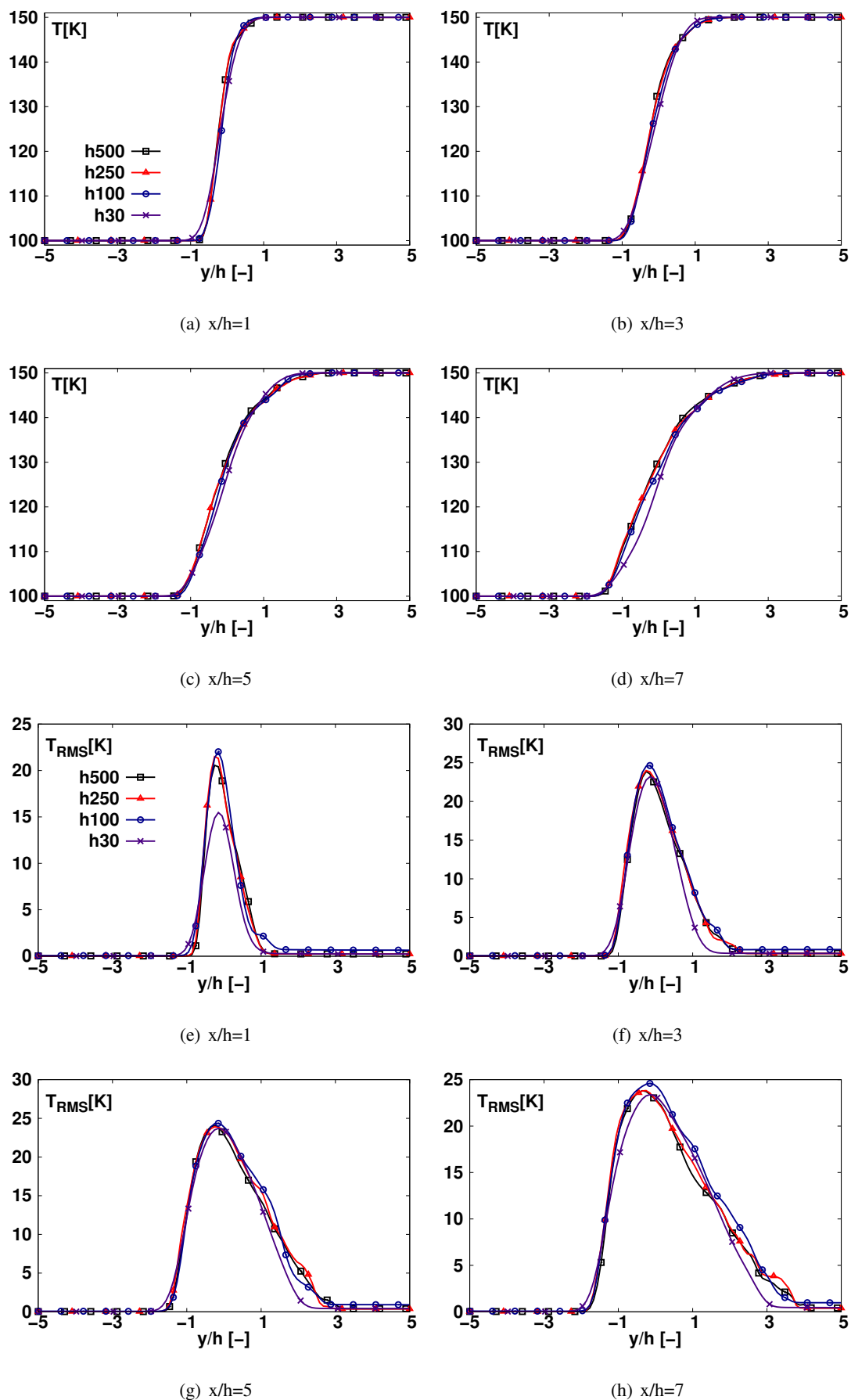


FIGURE 4.14: Champs moyens et fluctuation de la température suivant les 4 coupes verticales.

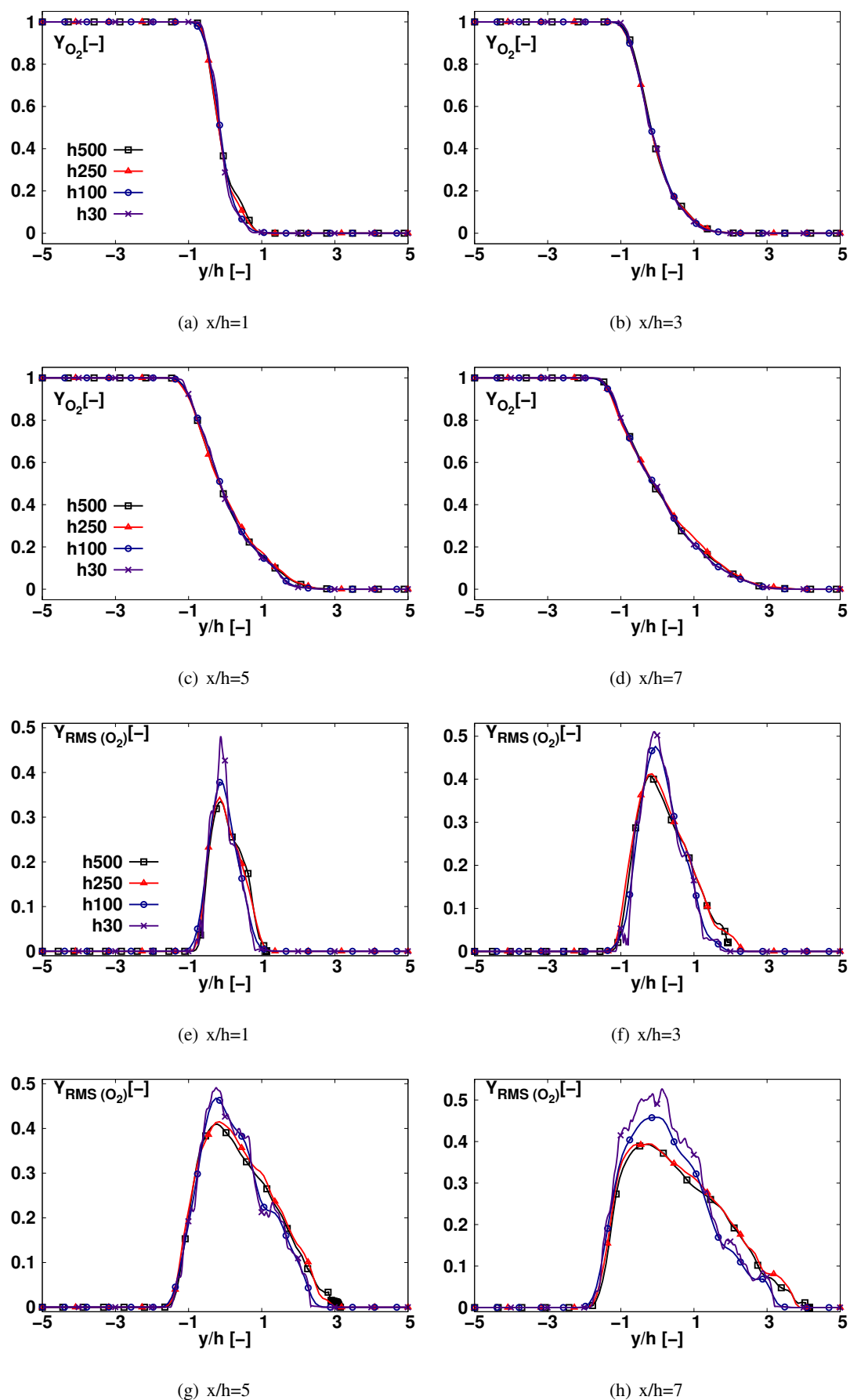


FIGURE 4.15: Champs moyens et fluctuation de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales.

binaire, proposée par Takahashi a été utilisée avec le cas #0, alors que celle proposée par Kurochkin a été utilisée avec le cas #1. Les cas #2 et cas #3 ont été réalisés avec l'approche non-idéale. La correction de Takahashi est utilisée avec le cas #2, tandis que celle de Kurochkin a été employée dans le cas #3.

Afin de comparer ces différents cas, les champs moyens et les fluctuations ont été obtenus pour les quatre mêmes coupes verticales que précédemment. Les figures 4.16(a) - 4.16(d) représentent les effets de ces modèles sur la vitesse axiale moyenne. On constate que ces résultats sont quasi-confondus quel que soit le cas envisagé. On observe juste une légère différence en  $x/h = 1$  (première coupe verticale), sur la valeur minimale qui se situe dans la zone de recirculation, juste derrière la lèvre. Elle vaut environ  $-30$  m/s avec les cas (#2, #3) et  $-25$  m/s avec les cas (#0, #1). Ce minimum est donc plus faible avec les cas (#0, #1), ce qui montre que la grosse structure tourbillonnaire en  $x/h = 1$  est plus importante avec une modélisation non-idéale qu'idéale.

Pour les valeurs moyennes des autres variables étudiées i.e. la vitesse transversale (figure 4.17(a) - 4.17(d)), la température (figure 4.18(a) - 4.18(d)) et la fraction massique de l'oxygène (figure 4.18(a) - 4.18(d)), comme précédemment avec la vitesse axiale moyenne, les résultats obtenus avec différentes corrections en pression (Takahashi et Kurochkin) sont très proches, alors qu'une différence apparaît sur les résultats obtenus avec différentes modélisations (idéale et non-idéale). Pour la vitesse transversale, cette différence apparaît dans la partie du mélange allant de  $y/h = -1$  à  $1$  où la valeur moyenne atteint un minimum, celle-ci est différente suivant le choix de modélisation du flux de diffusion (idéale et non-idéale). De plus à partir de la coupe  $x/h = 5$ , un décalage d'environ  $0.5h$  est observé sur ces résultats, dans la partie de l'hydrogène aussi une différence est constatée sur les résultats issus des différentes modélisation du flux (idéale et non-idéale), alors qu'elles sont identiques dans la partie de l'oxygène pour les quatre différentes modélisations. Pour la température moyenne, une différence entre les résultats avec une modélisation idéale et non-idéale apparaît uniquement dans la partie du mélange, où la pente de la transition est plus raide avec une modélisation idéale que non-idéale, ceci est causé par les structures turbulentes qui diffèrent entre ces deux modélisations. De plus, le décalage observé sur la vitesse transversale moyenne est aussi présent sur la température moyenne. Enfin, pour la fraction massique moyenne de l'oxygène, les résultats sont identiques pour ces quatre modélisations.

Pour les valeurs de fluctuation des différents variables étudiées, la même tendance est observée. Pour les vitesses axiales et transversales ainsi que la température un faible écart apparaît entre les cas (#0, #1) et (#2, #3) sur les valeurs extrêmes des fluctuations dans la partie du mélange, elles sont plus importantes avec une modélisation idéale que non-idéale. Le décalage précédemment constaté sur la vitesse transversale et la température à partir de la coupe verticale  $x/h = 5$  est aussi présent sur les fluctuations. Alors que pour les fluctuations de la fraction massique, comme avec sa valeur moyenne, les résultats obtenus sont identiques pour les quatre différentes modélisations.

On peut donc conclure sur cette partie que, le choix de la correction haute pression du coefficient de diffusion n'influe pas sur les résultats obtenus, alors que le choix de la modélisation du flux (idéale ou non-idéale) les influence clairement, de plus les structures tourbillonnaires dans le sillage de la lèvre sont plus importantes avec la modélisation non-idéale. Ces différences s'amplifient à mesure que l'on s'éloigne du plan d'injection. Ces résultats confirment la conclusion de Giovangigli et al. [101] affirmant qu'à haute pression la modélisation non-idéale doit être préférée à la modélisation idéale.

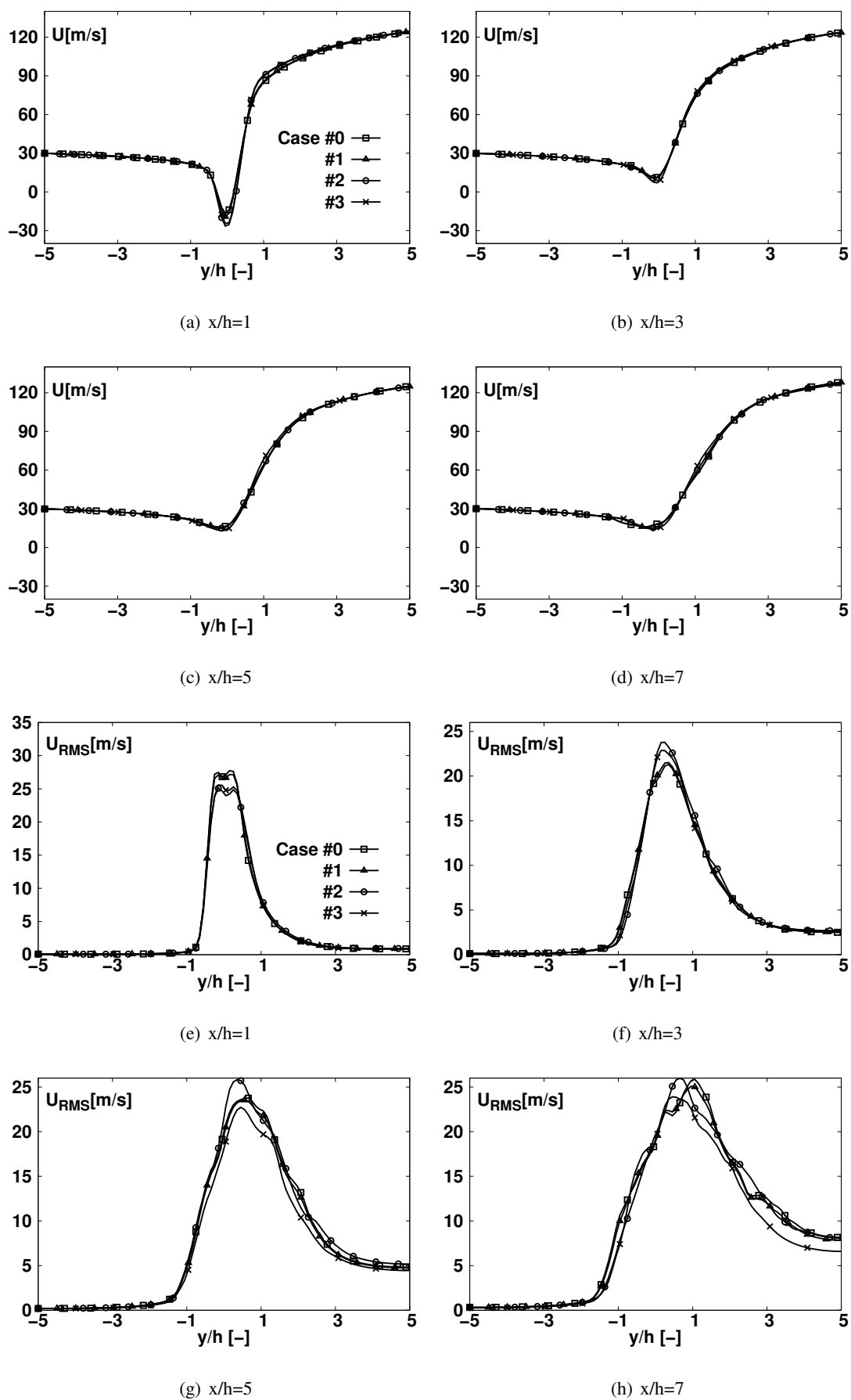


FIGURE 4.16: Champs moyens et fluctuation de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales.

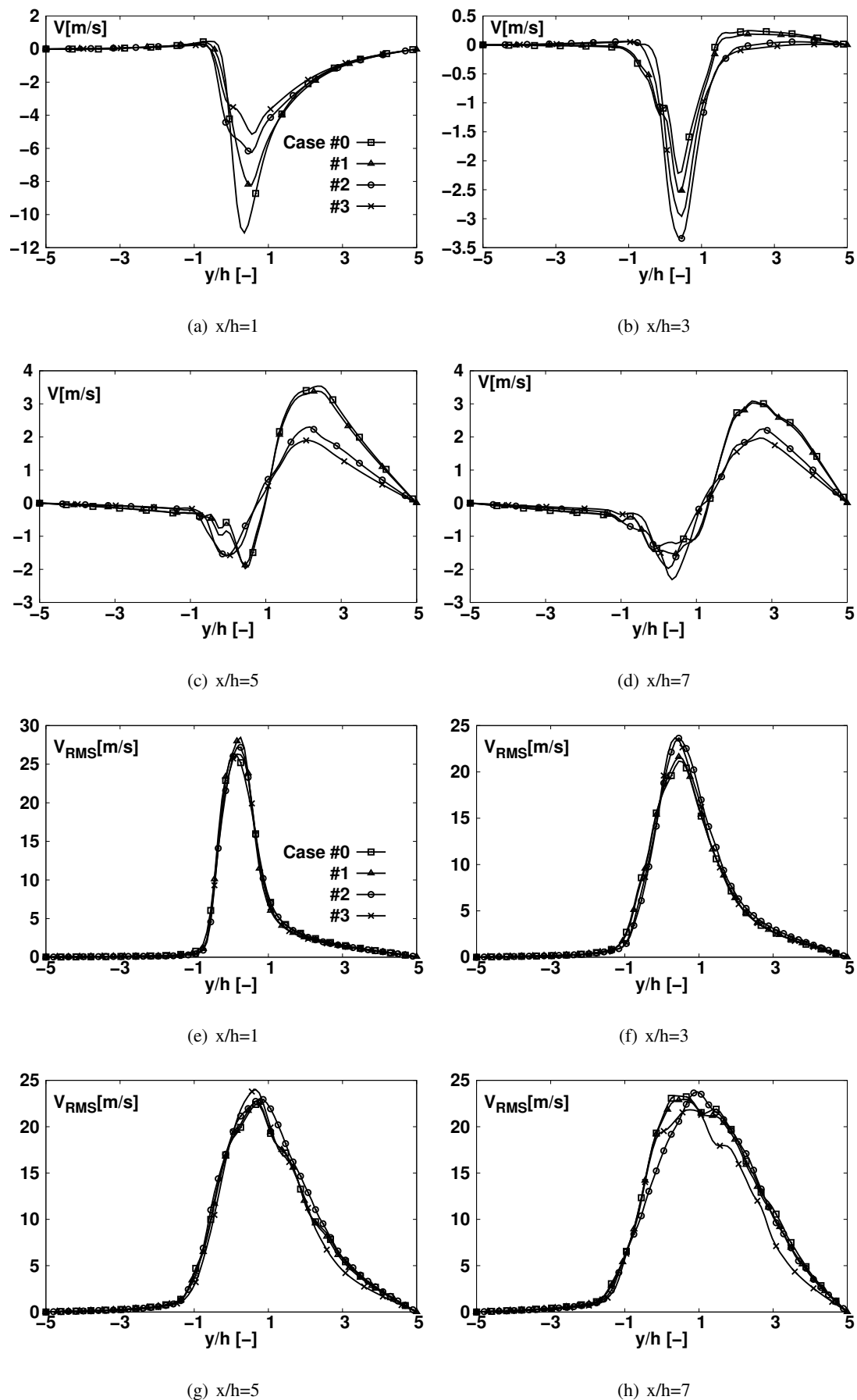


FIGURE 4.17: Champs moyens et fluctuations de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales.

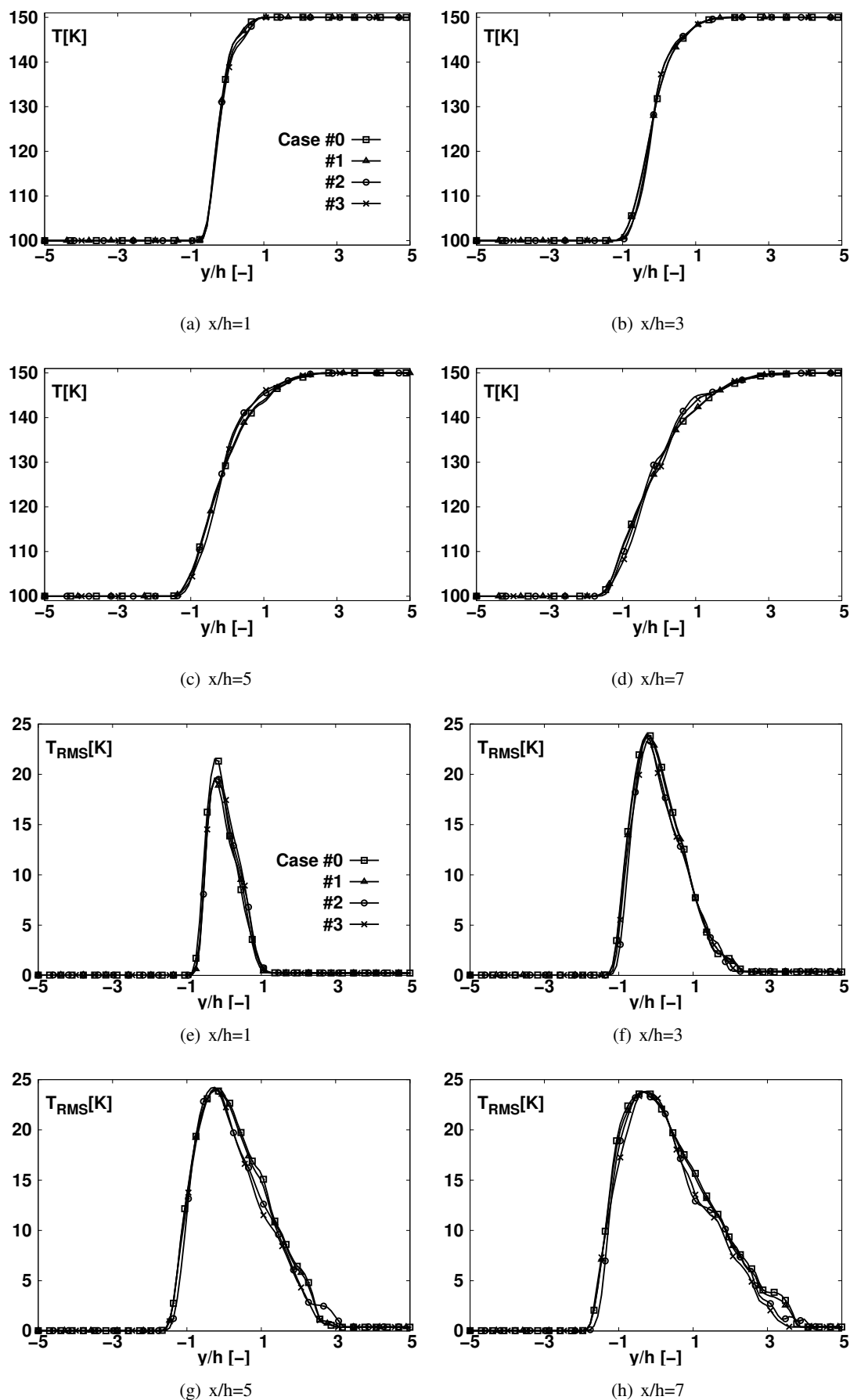


FIGURE 4.18: Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales.

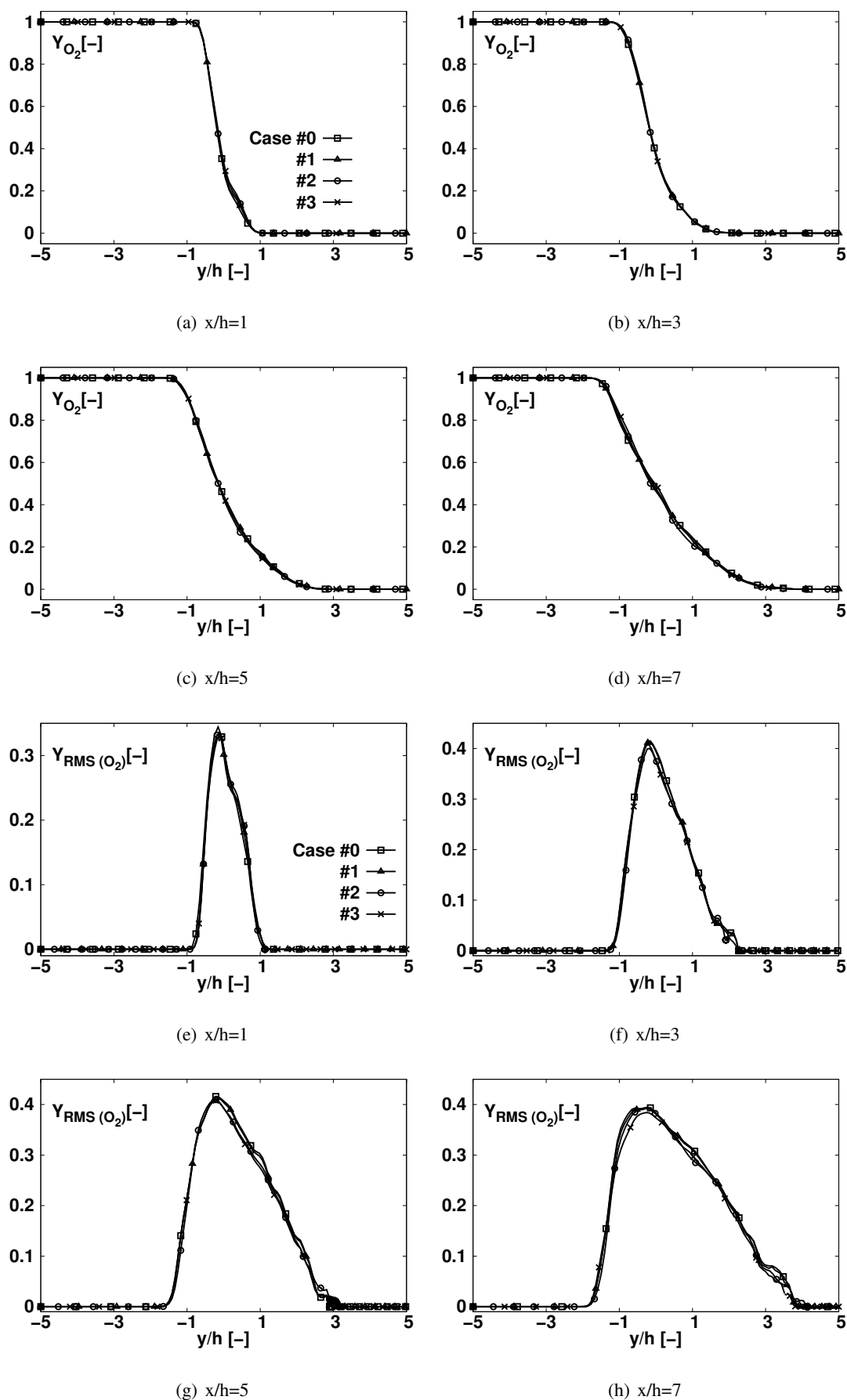


FIGURE 4.19: Champs moyens et fluctuations de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales.



## 4.4.2 Résultats réactifs

Dans cette section, les flammes H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> supercritiques ont été étudiées. Avant d'étendre la simulation de la couche de mélange définie précédemment au cas réactif, il est nécessaire de choisir un schéma cinétique bien adapté à cette configuration. Le schéma réduit de Boivin [182] à 8 espèces et 12 réactions a été choisi pour des raisons d'optimisation du temps de calcul (CPU). La figure 4.20 décrit le mécanisme de Boivin. Il résulte de la réduction du nombre de réactions du schéma détaillé dit "de San Diego" [179] qui possède 12 espèces pour 21 réactions élémentaires. Les travaux de Mari et al. [213] sur des flammes 1D prémélangées H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> avec une température de gaz frais de 150 K et une pression supercritique de 10.0 Mpa, ont permis de valider l'utilisation du schéma de Boivin pour des applications à 10.0 MPa.

Tout d'abord, plusieurs simulations d'une flamme supercritique stoechiométrique 1D prémélangée H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> ont été réalisées avec différentes modélisations afin de connaître l'impact de l'effet Soret, de la modélisation multicomposante, de la correction en pression des coefficients de diffusion binaire et de la modélisation non-idéale des flux de diffusion dans ce cas laminaire. Fort de ces résultats, la couche de mélange 2D de Ruiz et al. [109] a été simulée en considérant la combustion de l'hydrogène avec de l'oxygène tout en employant deux stratégies différentes de modélisation, pour connaître l'impact du transport non-idéal sur l'écoulement.

Reaction		A <sup>a</sup>	n	E <sup>a</sup>
1 H + O <sub>2</sub> ⇌ OH + O	<i>k<sub>f</sub></i>	3.52 10 <sup>16</sup>	-0.7	71.42
	<i>k<sub>b</sub></i>	7.04 10 <sup>13</sup>	-0.26	0.60
2 H <sub>2</sub> + O ⇌ OH + H	<i>k<sub>f</sub></i>	5.06 10 <sup>4</sup>	2.67	26.32
	<i>k<sub>b</sub></i>	3.03 10 <sup>4</sup>	2.63	20.23
3 H <sub>2</sub> + OH ⇌ H <sub>2</sub> O + H	<i>k<sub>f</sub></i>	1.17 10 <sup>9</sup>	1.3	15.21
	<i>k<sub>b</sub></i>	1.28 10 <sup>10</sup>	1.19	78.25
4 H + O <sub>2</sub> + M → HO <sub>2</sub> + M <sup>b</sup>	<i>k<sub>0</sub></i>	5.75 10 <sup>19</sup>	-1.4	0.0
	<i>k<sub>∞</sub></i>	4.65 10 <sup>12</sup>	0.44	0.0
5 HO <sub>2</sub> + H → 2 OH		7.08 10 <sup>13</sup>	0.0	1.23
6 HO <sub>2</sub> + OH ⇌ H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	<i>k<sub>f</sub></i>	1.66 10 <sup>13</sup>	0.0	3.44
	<i>k<sub>b</sub></i>	2.69 10 <sup>12</sup>	0.36	231.86
7 HO <sub>2</sub> + OH → H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>		2.89 10 <sup>13</sup>	0.0	-2.08
8 H + OH + M ⇌ H <sub>2</sub> O + M <sup>c</sup>	<i>k<sub>f</sub></i>	4.00 10 <sup>22</sup>	-2.0	0.0
	<i>k<sub>b</sub></i>	1.03 10 <sup>23</sup>	-1.75	496.14
9 2 H + M ⇌ H <sub>2</sub> + M <sup>c</sup>	<i>k<sub>f</sub></i>	1.30 10 <sup>18</sup>	-1.0	0.0
	<i>k<sub>b</sub></i>	3.04 10 <sup>17</sup>	-0.65	433.09
10 2 HO <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>		3.02 10 <sup>12</sup>	0.0	5.8
11 HO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H		1.62 10 <sup>11</sup>	0.61	100.14
12 H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M → 2 OH + M <sup>d</sup>	<i>k<sub>0</sub></i>	8.15 10 <sup>23</sup>	-1.9	207.62
	<i>k<sub>∞</sub></i>	2.62 10 <sup>19</sup>	-1.39	214.74

FIGURE 4.20: Schéma cinétique de Boivin [182]

<sup>a</sup> Les unités sont : mol, s, cm<sup>3</sup>, kJ et K.

<sup>b</sup> Coefficient de Chaperon H<sub>2</sub> : 2.5, H<sub>2</sub>O : 16.0, 1.0 pour les autres espèces. Troe falloff avec  $F_c = 0.5$ .

<sup>c</sup> Coefficient de Chaperon H<sub>2</sub> : 2.5, H<sub>2</sub>O : 12.0, 1.0 pour les autres espèces.

<sup>d</sup> Coefficient de Chaperon H<sub>2</sub> : 2.5, H<sub>2</sub>O : 6.0, 1.0 pour les autres espèces.

Troe falloff avec  $F_c = 0.265 \exp(-T/94) + 0.735 \exp(-T/1756) + \exp(-T/5182)$

#### 4.4.2.1 Flamme 1D laminaire prémélangées

La simulation de flammes laminaires prémélangées 1D a été réalisée avec le code SiTCom-B. La pression est fixée à 10.0 MPa et la température des gaz frais à 150 K avec une richesse de 1. Un maillage non-uniforme raffiné au centre et contenant 7000 points a été utilisé, cependant la zone d'intérêt se limite à  $5 \mu\text{m}$  et la taille de maille avoisine  $0.001 \mu\text{m}$  dans cette région.

Le modèle de transport idéal est tout d'abord utilisé, i.e. la modélisation cas #0 (tableau 4.2). Les figures 4.21(a) - 4.21(b) (dans effet Soret) représentent l'évolution spatiale de la température, de la masse volumique et de la fraction massique des espèces  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$  et  $H_2O_2$ . Les résultats montrent une tendance classique des profils de masse volumique, de température et de fraction massique des espèces mises en jeu, avec consommation des réactifs, création des produits et augmentation de la température. On notera en particulier la forte température adiabatique de flamme. Cette flamme a ensuite été simulée avec la même modélisation que précédemment, tout en activant l'effet Soret (thermo-diffusif) avec l'approche "LIGHT\_SPECIES" (Chapitre 2), cet effet jouant un rôle non négligeable dans des configurations avec de fortes gradients de température appliqués à des espèces légères comme l'hydrogène. Les figures 4.21(a) - 4.21(b) (avec effet Soret) représentent les résultats obtenus avec cette modélisation, les profils montrent que, l'activation de l'effet Soret pour les espèces légères ( $W < 5 \text{ g/mol}$ ) conduit à des flammes plus minces, avec des profils plus fins des fractions massiques des espèces et de la densité et avec une plus forte diffusion des gaz brûlés vers le mélange frais. La différence entre ces deux flammes n'est donc pas négligeable, ce qui prouve que l'effet Soret doit être absolument pris en compte pour les simulations de flamme  $H_2/O_2$  supercritique. L'ajout de l'effet Soret ralentit le code d'environ 5%.

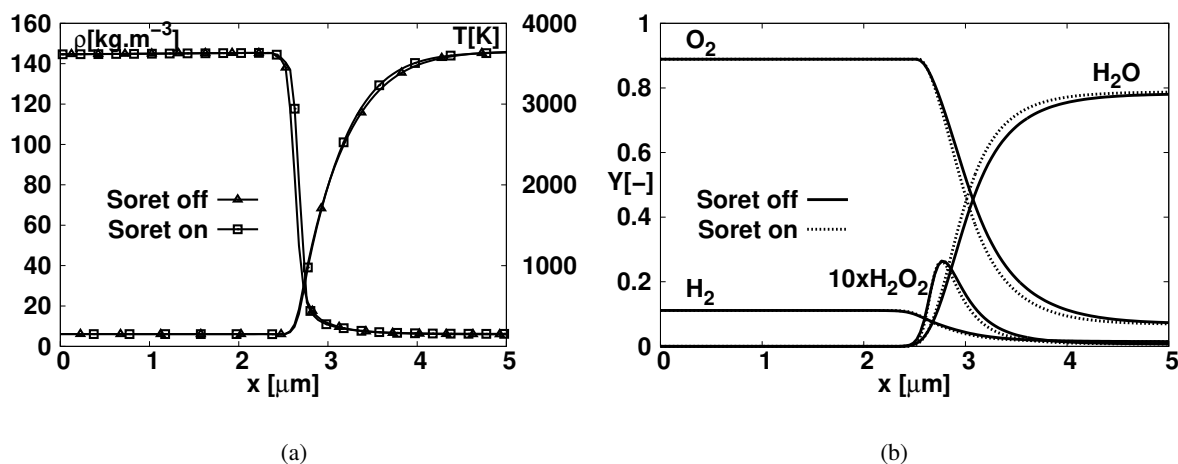


FIGURE 4.21: Etude de l'effet Soret à partir de la modélisation cas #0 pour une flamme 1D prémélangée.

Cette flamme a par la suite été simulée avec une modélisation non-idéale (cas #2) qui correspond au cas #0 auquel une modélisation non-idéale des flux de diffusion des espèces a été ajoutée. Dans la section précédente (étude non-réactive), il a été constaté que les effets non-idéaux sur le flux de diffusion ne pouvaient pas être négligés et qu'ils influençaient fortement les structures turbulentes, nous allons par conséquent l'étudier maintenant pour un cas réactif laminaire. Les figures 4.22(a) et 4.22(b) représentent les profils obtenus avec les cas #2 ( $\mathbf{d}_k = X_k(\nabla\mu_k)_T$ ) et cas #0 ( $\mathbf{d}_k = \nabla X_k$ ). Les résultats montrent que l'utilisation d'une modélisation non-idéale modifie les profils de densité et de fraction massique à

proximité de la région du mélange dense en accord avec les observations de Giovangigli [101] sur une flamme 1D prémélangée  $H_2/Air$  à une pression supercritique. Cependant cette modélisation non-idéale ralentit le calcul de 30% mais elle est nécessaire pour une bonne modélisation des effets supercritiques.

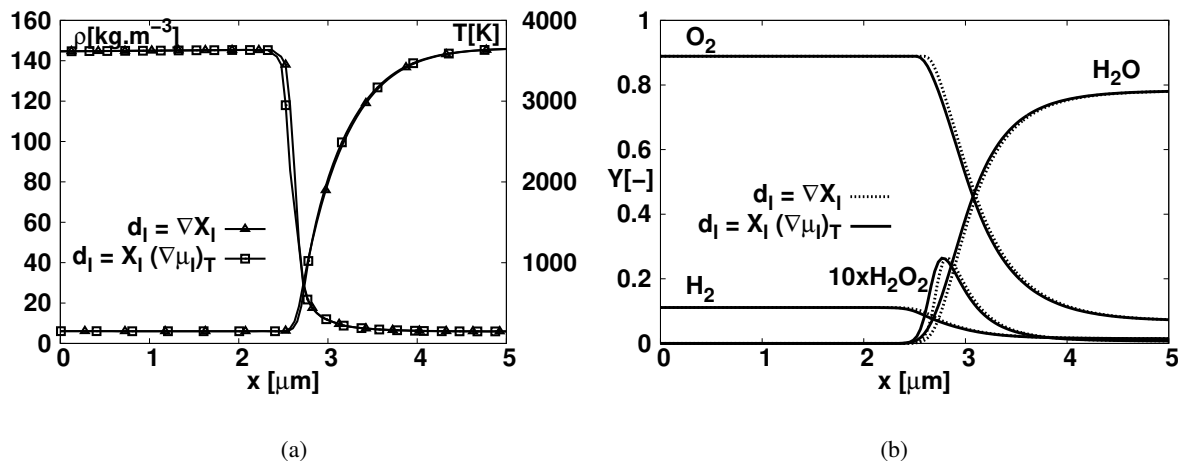


FIGURE 4.22: Impact de la modélisation non-idéale du flux de diffusion pour une flamme 1D prémélangée.

La modélisation de la vitesse de diffusion des espèces a aussi été étudiée sur cette flamme 1D. Généralement, pour les simulations numériques multi-espèces, la formulation simplifiée de Curtiss et Hirschfelder est employée car une modélisation multicomposante est très coûteuse, nous allons par conséquent étudier l'écart entre ces deux modèles dans ce cas réactif laminaire. Pour cela, la flamme décrite précédemment a été simulée avec une modélisation multicomposante i.e. le cas #0 sans l'hypothèse de Curtiss et Hirschfelder. Les figures 4.23(a) et 4.23(b) représentent la superposition des profils de flammes obtenus avec le cas #0 ( $D_k^{MIX}$ ) et cette nouvelle modélisation ( $D_{kj}$ ). La modélisation multicomposante se traduit tout comme l'effet Soret, par des profils plus fins des fractions massiques des espèces et de la densité, et avec une plus forte diffusion des gaz brûlés vers le mélange frais. Ces résultats montrent que pour les études supercritiques, une modélisation multicomposante doit être préférée à l'approximation de Curtiss et Hirschfelder. Cependant la modélisation multicomposante ralentit le code d'un facteur de deux comparé au cas #0 utilisant l'approximation de Curtiss et Hirschfelder.

Afin de connaître l'impact des corrections hautes pressions sur le coefficient de diffusion binaire des espèces, la flamme 1D avec le modèle cas #0 pour lequel la correction en pression de Takahashi est employée a été reprise et simulée pour deux autres modèles différents : cas #0 en désactivant la correction en pression ("without correction" sur les figures) et cas #0 en changeant la correction de Takahashi par celle de Kurochkin. Les figures 4.24(a) et 4.24(b) représentent les profils de flamme obtenus, montrant que les résultats avec les corrections de Takahashi et de Kurochkin sont quasi-identiques. Cependant, celle de Kurochkin a été préférée car elle n'a pas d'impact à la pression standard contrairement à la méthode de Takahashi (cf Chapitre 2). Les profils avec des corrections en pression sont plus diffusifs pour les espèces vers les gaz brûlés que les profils sans corrections. Cela montre la nécessité d'utiliser une correction en pression pour ce coefficient de diffusion.

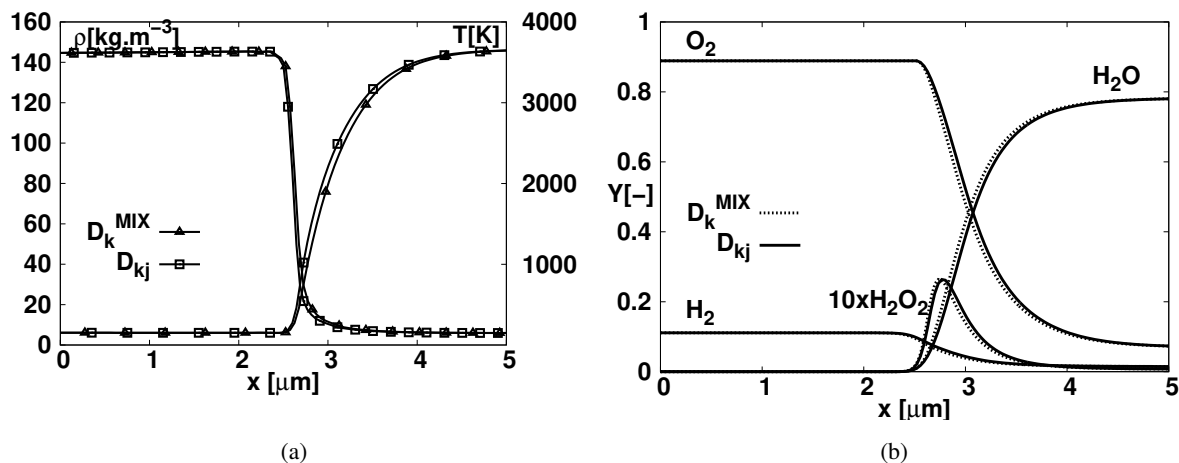


FIGURE 4.23: Impact de la modélisation multicomposante pour une flamme 1D prémélangée.

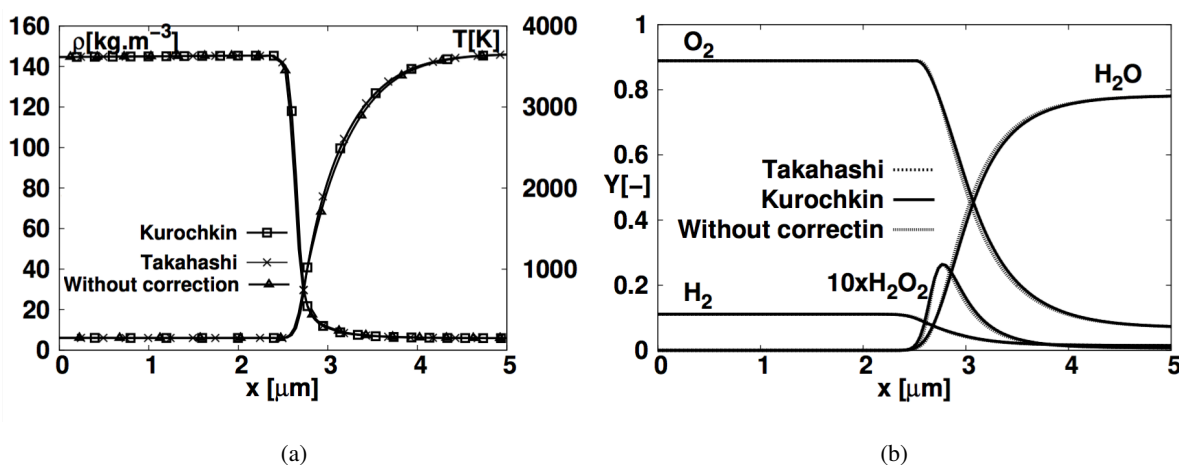


FIGURE 4.24: Impact de la correction en pression du coefficient de diffusion binaire des espèces pour une flamme 1D prémélangée.

On peut donc conclure que toutes ces modélisations (modélisation non-idéale du flux de diffusion, méthode multicomposante pour la vitesse de diffusion, effet Soret et correction en pression du coefficient de diffusion) ne peuvent être négligées dans une simulation supercritique réactive  $H_2/O_2$  laminaire. Cette précision se fait bien évidemment au détriment du coût de calcul.

#### 4.4.2.2 Couche de mélange réactive 2D

L'étude de la couche de mélange non-réactive proposée par Ruiz et al. [109] a été étendue au cas réactif. Cette simulation a été réalisée avec deux modélisations différentes, la première correspond au cas #0 du tableau 4.1, ce qui est une modélisation très courante dans le domaine de la combustion numérique, et la deuxième appelée "NIT" (Non-Ideal Transport) correspond à la configuration où une modélisation multicomposante est utilisée pour le calcul de la vitesse de diffusion, l'approche non-idéale

pour le flux de diffusion et la correction en pression de Kurochkin, tout en activant l'effet Soret avec l'approche "LIGHT\_SPECIES". La flamme 1D définie dans la section précédente a été simulée avec ces deux modélisations, les figures 4.25(a) et 4.25(b) représentent les résultats obtenus. Ces résultats montrent que la modélisation "NIT" conduit à des flammes plus épaisses avec des profils de fractions massiques plus larges pour cette configuration laminaire.

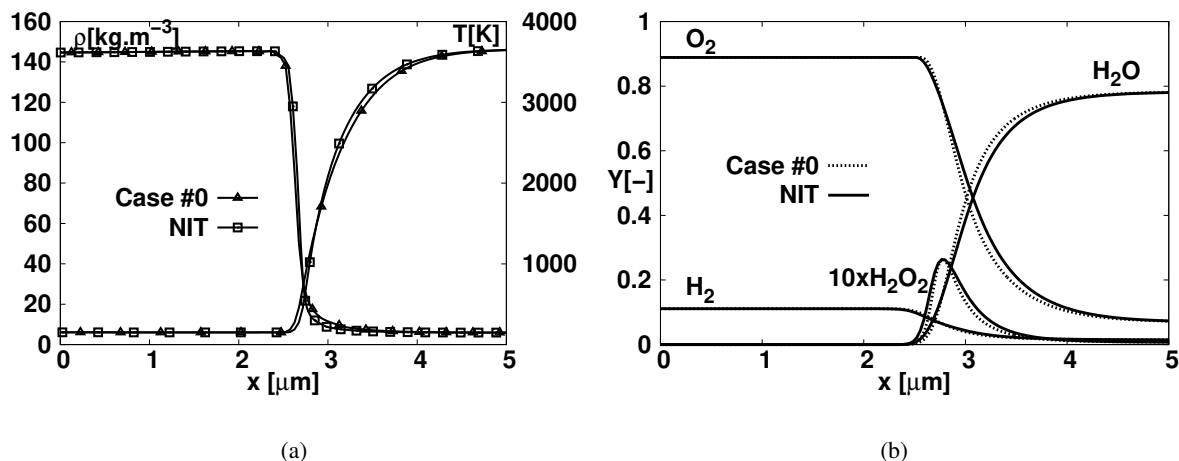


FIGURE 4.25: Impact de la modélisation "NIT" sur une flamme 1D prémélangée.

**Épaisseur de flamme :** Afin de définir un maillage pour la simulation de la couche de mélange réactive, l'épaisseur des flammes supercritiques  $H_2/O_2$  a été étudiée. D'après les études de Mari et al. [213] sur une flamme 1D  $H_2/O_2$  prémélangée stoechiométrique, avec une pression de 10.0 MPa et une température de gaz frais  $T = 150$  K. Une flamme de température maximale de 3700 K avec une épaisseur d'environ  $1 \mu m$  a été observée. Ces résultats sont en bon accord avec simulations de flammes 1D réalisées précédemment, où les ordres de grandeur de l'épaisseur de flamme et de température sont semblables (voir la figure 4.25).

Pour une flamme de diffusion, d'après les travaux de Ribert et al. [100] sur des flammes 1D  $H_2/O_2$  à contre courant, l'épaisseur de celle-ci ( $\delta_f$ ) dépend de la pression, de l'étiement et d'un coefficient C qui lui aussi dépend de la pression (pour une pression de 10.0 MPa ce coefficient vaut 90 [100]), avec la formule suivante :

$$\delta_f = \frac{C}{p\epsilon_s} . \quad (4.8)$$

Concernant, l'étiement, la figure 4.26 représente la courbe de la température de flamme en fonction de l'étiement tirée des travaux de Ribert et al. [100]. Pour deux valeurs extrêmes de l'étiement réaliste avec la température de flamme (voir figure 4.26), l'épaisseur de la flamme a été calculée avec la formule précédente.

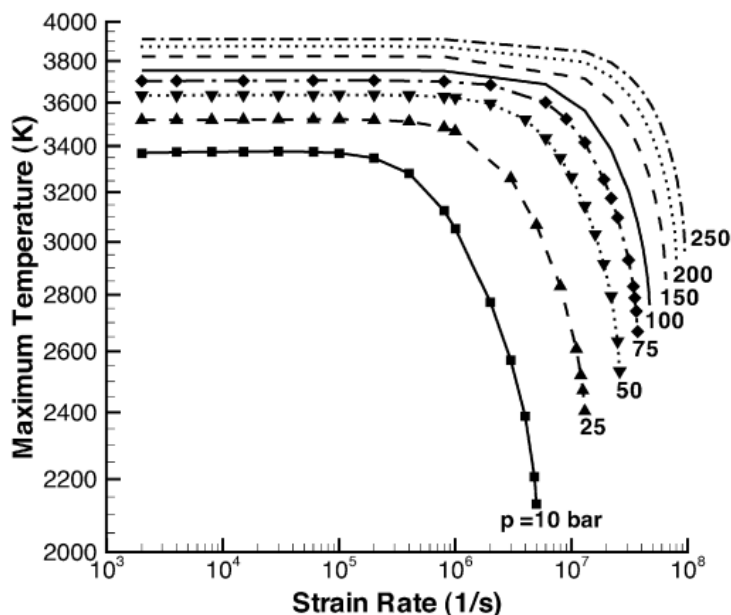


FIGURE 4.26: Température de flamme en fonction de l'étirement pour différentes pressions [100].

Pour  $\epsilon_s = 2.0 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$ , une épaisseur de  $\delta_f = 63 \text{ }\mu\text{m}$  est calculée et pour  $\epsilon_s = 1.0 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  elle vaut  $\delta_f = 9 \text{ }\mu\text{m}$ . Une température maximale d'environ 3750 K a aussi été observée sur les travaux de Ribert et al. [100].

Pour des raisons de temps de calcul (CPU), dans un premier temps, le cas réactif a été initié avec le maillage ( $h_{250}$ ) où la taille de maille est de 2  $\mu\text{m}$ .

**Modèle d'allumage :** Pour allumer ce mélange supercritique, le cas non-réactif avec le modèle cas #0 et le maillage ( $h_{250}$ ) a été repris à un temps final convergé. Un patch de température en tangente hyperbolique au niveau de la couche de mélange a été imposé (voir figure 4.27(a)). Pour ce patch, une température maximale de 1300 K a été choisie, ce qui correspond à environ un tiers de la valeur maximale de la température de flamme attendue. Ensuite, la chimie a été activée dans cette simulation à l'aide du schéma cinétique de Boivin. Comme attendu, cette manipulation a généré de nombreuses perturbations acoustiques, cependant elles finissent par quitter le domaine de calcul en sa sortie. Puis, après avoir effectué deux temps de parcours ( $T_{FT}$ ), une flamme transcritique avec une température de flamme d'environ 3800 K a été observée (voir figure 4.27(b)), ce qui est une valeur commune pour une telle combustion.

Cette flamme, comme attendu est localisée sur la couche de mélange. Elle est présente tout le long du sillage de la lèvres, atteignant les extrémités du domaine de calcul. Une structure de flamme turbulente est observée, s'élargissant avec la distance axiale s'orientant vers le côté de l'hydrogène. On observe aussi que des poches de gaz brûlés réagissent encore et peuvent se diffuser de l'oxygène vers l'hydrogène. Cette flamme, touche l'extrémité de la lèvres, ce qui est problématique car d'après les industriels la lèvres peut fondre si la température à sa surface est supérieure à environ 2000 K. Aussi, les études expérimentales de Singla et al. [94] sur une flamme  $GH_2/LO_x$  à une pression supercritique

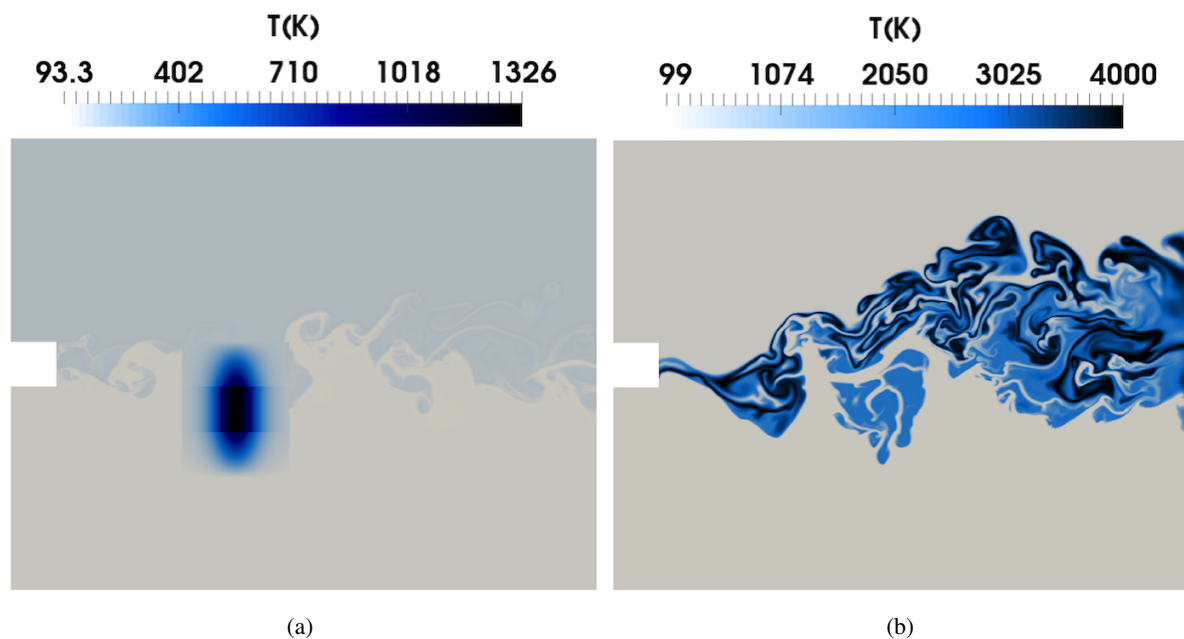


FIGURE 4.27: Champs de température. (a) : couche de mélange non-réactif avec un patch de température, (b) : flamme  $H_2/O_2$  supercritique obtenue après deux temps de parcours ( $T_{FT}$ ).

(6.35 MPa), ont montré que la flamme ne touche pas la lèvre et elle oscillent à plusieurs positions derrière celle-ci. D'après nos observations la raison principale de cette différence avec nos résultats est l'effet 2D, car en 3D les structures tourbillonnaires seraient plus grandes, ce qui faciliterait le détachement de la flamme de la lèvre. Pour des raisons de temps de calcul CPU, les simulations 3D dans cette configuration nous sont hors de portée pour l'instant.

**Transport non-idéal :** Afin de connaître l'influence du transport non-idéal sur cette couche de mélange réactif, celle-ci a aussi été simulée avec la modélisation "NIT". Avec chaque modélisation i.e. cas #0 et "NIT", des résultats moyens reposant sur 8 temps de parcours ( $T_{TF}$ ) ont été obtenus (pour des raisons de temps de calcul CPU nous n'avons pas pu aller plus loin). Les figures 4.28 et 4.29 représentent les champs instantanés du dégagement de chaleur, de la température avec la ligne iso-stoechiométrique en blanc et des fractions massiques des espèces  $H_2O$  et  $H$  obtenus avec la modélisation du cas #0 et respectivement, les figures 4.30 et 4.31 avec la modélisation "NIT".

Ces figures montrent peu de différences entre ces deux modélisations et les mêmes structures d'écoulements sont retrouvées au sein de ces deux simulations. Les maximums de dégagements de chaleurs sont localisés comme attendu, sur la couche de mélange au niveau de la ligne iso-stoechiométrique. De plus de fortes valeurs du dégagement de chaleur se diffusent des deux côtés de l'écoulement (vers l'hydrogène et l'oxygène) causés par de poches de gaz brûlés qui réagissent encore ont été observées. Ces poches de gaz brûlés peuvent atteindre une température de 2500 K alors que la température de flamme observée est de l'ordre de 3800 K. Sur la couche de mélange, la fraction massique de l'eau est proche de 100%, attestant d'une combustion locale quasi complète, l'eau étant le produit final (stable) de la réaction entre  $H_2/O_2$ . L'espèce la plus fine, l'hydrogène moléculaire ( $H$ ), montre que l'épaisseur de cette flamme varie, en raison de la structure de l'écoulement. Dans des zones à forte recirculation,



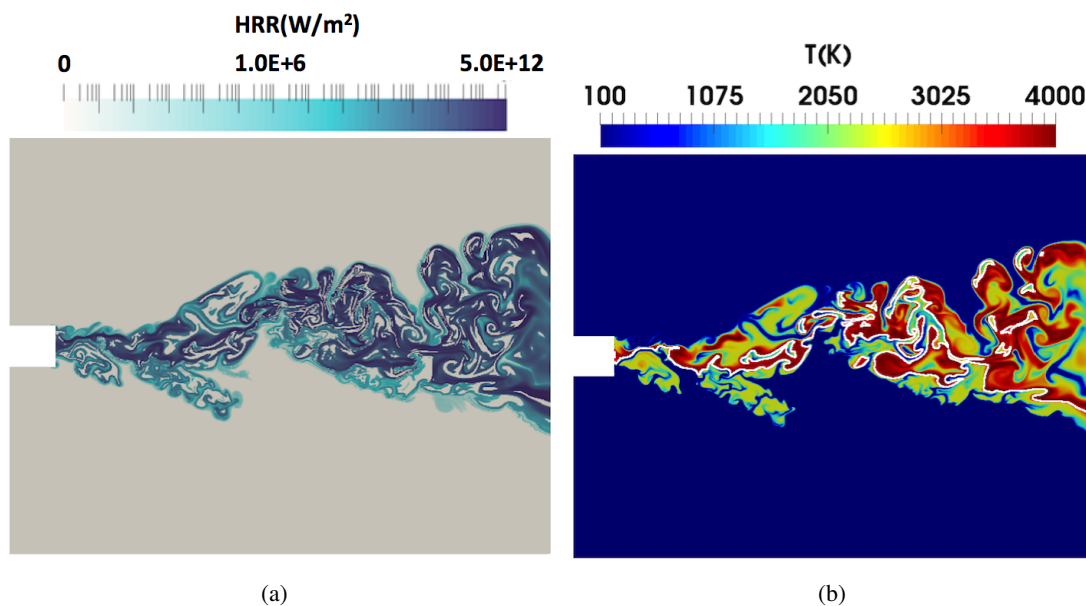


FIGURE 4.28: Champs instantanés du dégagement de chaleur et de la température du cas réactif avec le modèle cas #0 (1/2).

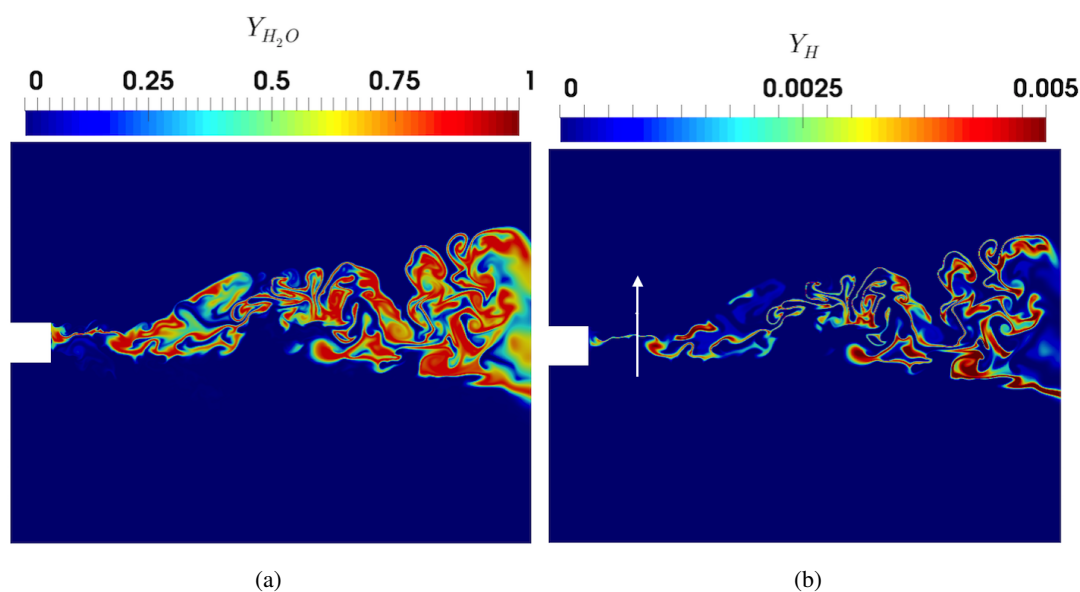


FIGURE 4.29: Champs instantanés des fractions massiques de l'eau et de l'hydrogène moléculaire du cas réactif avec le modèle cas #0 (2/2).

l'épaisseur de celle-ci a tendance à s'élargir.

Par la suite, une des portions les plus fines de cette flamme a été extraite avec les deux modélisations afin d'étudier plus en détails sa structure. Les zones d'études suivant une coupe verticale ( $x/h = 1$ ) juste en aval de la lèvre sont représentées par une flèche blanche sur le champ instantané de la fraction massique de l'espèce H (voir les figures 4.29 et 4.31). La figure 4.32(a) représente l'évolution de la température et des fractions massiques des espèces :  $H_2$ ,  $O_2$  et  $H_2O$  en fonction de l'axe transversale



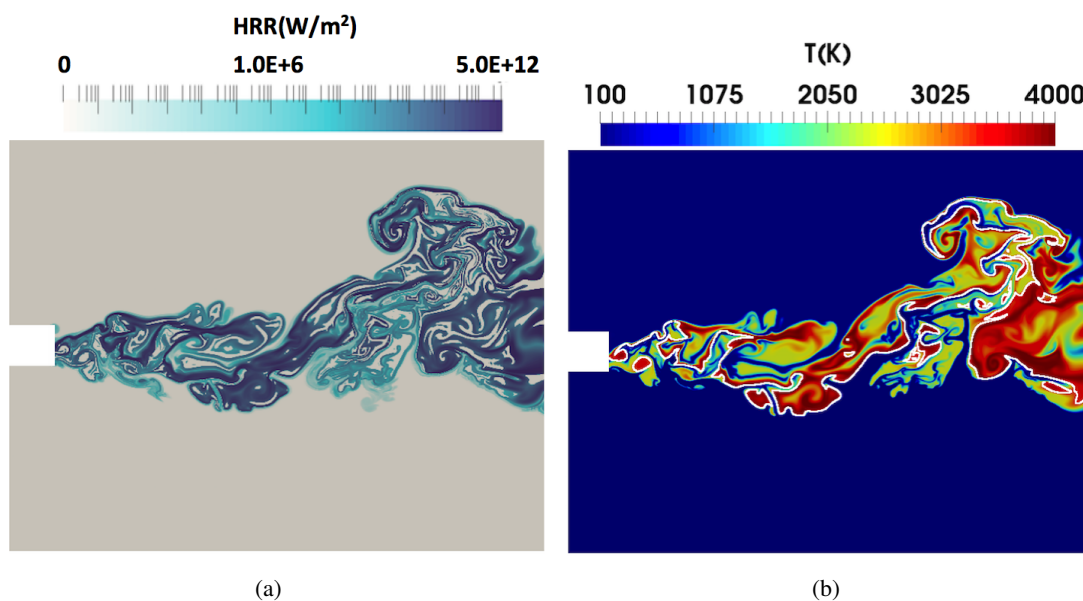


FIGURE 4.30: Champs instantanés du dégagement de chaleur et de la température du cas réactif avec le modèle "NIT" (1/2).

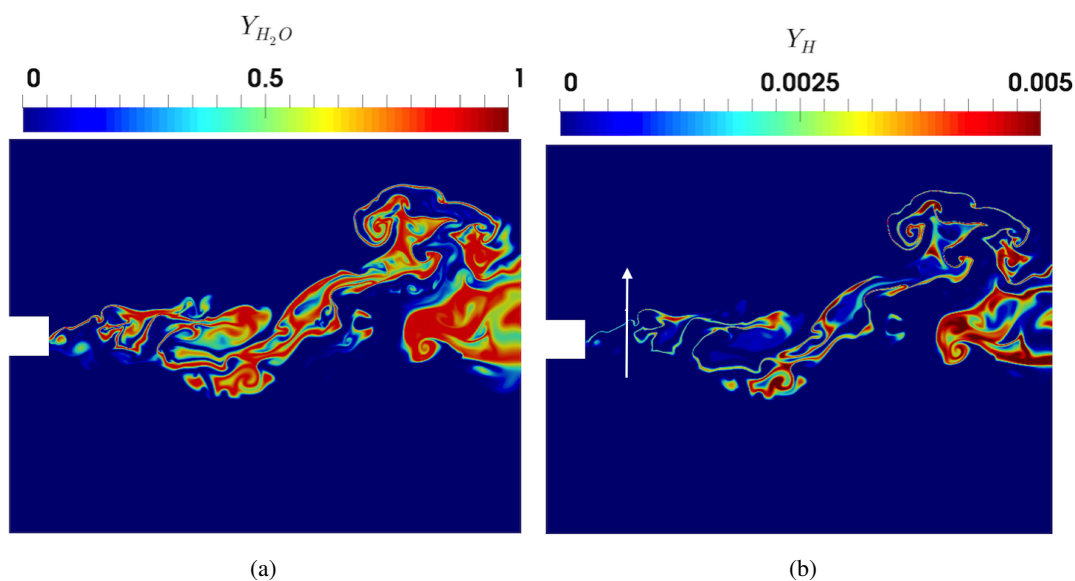


FIGURE 4.31: Champs instantanés des fractions massiques de l'eau et de l'hydrogène moléculaire du cas réactif avec le modèle "NIT" (2/2).

avec la modélisation cas #0. Idem sur la figure 4.32(b) avec la modélisation NIT. On à  $y^* = 0$ ,  $Y_{O_2} = 1$  avec une faible température. A  $y^* \approx 20 \mu m$  on observe le maximum de la fraction massique de l'eau avoisinant 0.9 et le maximum de température autour de 3800 K. Enfin vers  $y^* = 40 \mu m$ , on a  $Y_{H_2} = 1$  avec une faible température. On retrouve cette tendance sur les deux portions de flamme. Avec la modélisation cas #0, on a une valeur maximale de la température de flamme de 3853 K, et de 3755 K avec la modélisation "NIT". Soit un écart de 100 K ce qui n'est pas négligeable.

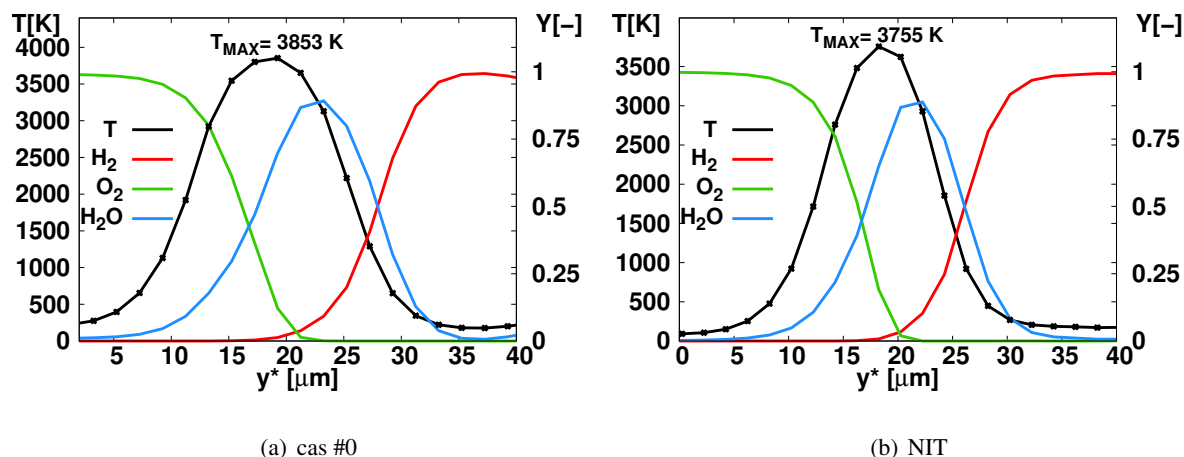


FIGURE 4.32: Evolution spatiale, d'une des parties les plus fines de la flamme.

On déduit de ces deux figures, une épaisseur de flamme autour de 20  $\mu\text{m}$ , ce qui correspond à 10 points dans nos simulations. Cette observation montre un profil proche d'une flamme de diffusion (voir section précédente : épaisseur de flamme). Pour confirmer cela, l'indice de flamme a été calculé (voir figures 4.33), et confirme une structure en flamme de diffusion, avec des petites portions de zone de flamme prémélangée pauvre dans le côté de l'oxygène et riche du côté de l'hydrogène, localisées principalement dans les zones de grandes structures tourbillonnaires. Les fractions massiques de tous les espèces avec leurs taux de production en fonction de  $y^*$  ont aussi été tracées sur ces deux portions de flammes, la figure 4.34 avec la modélisation cas #0 et la figure 4.35 avec la modélisation NIT. Les résultats sont cohérents pour une flamme  $H_2/O_2$ . Concernant l'espèce la plus fine ( $H$ ), 8 points sont observés sur la fraction massique, ce qui correspond à une épaisseur de 16  $\mu\text{m}$ .

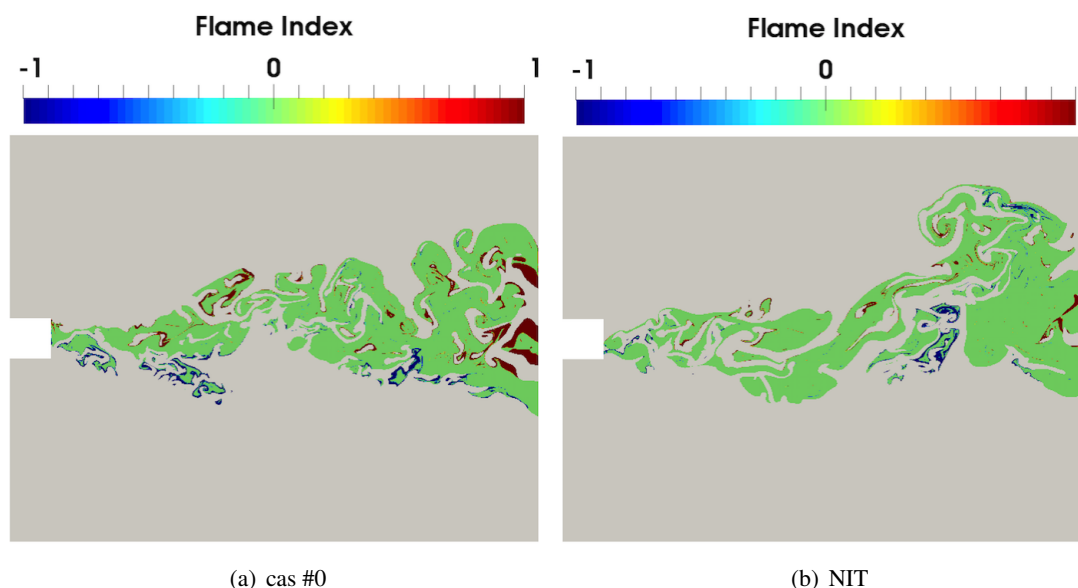
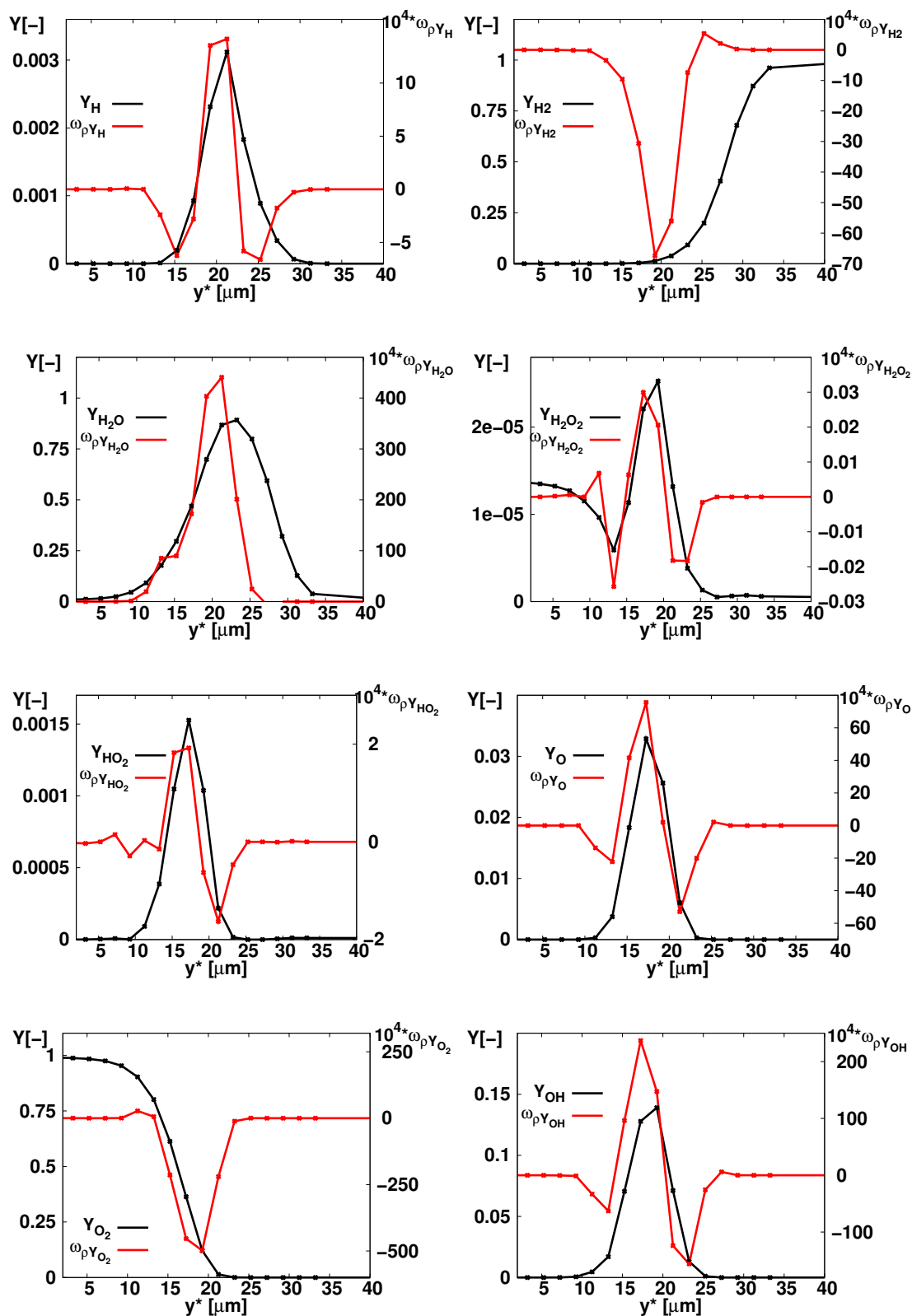
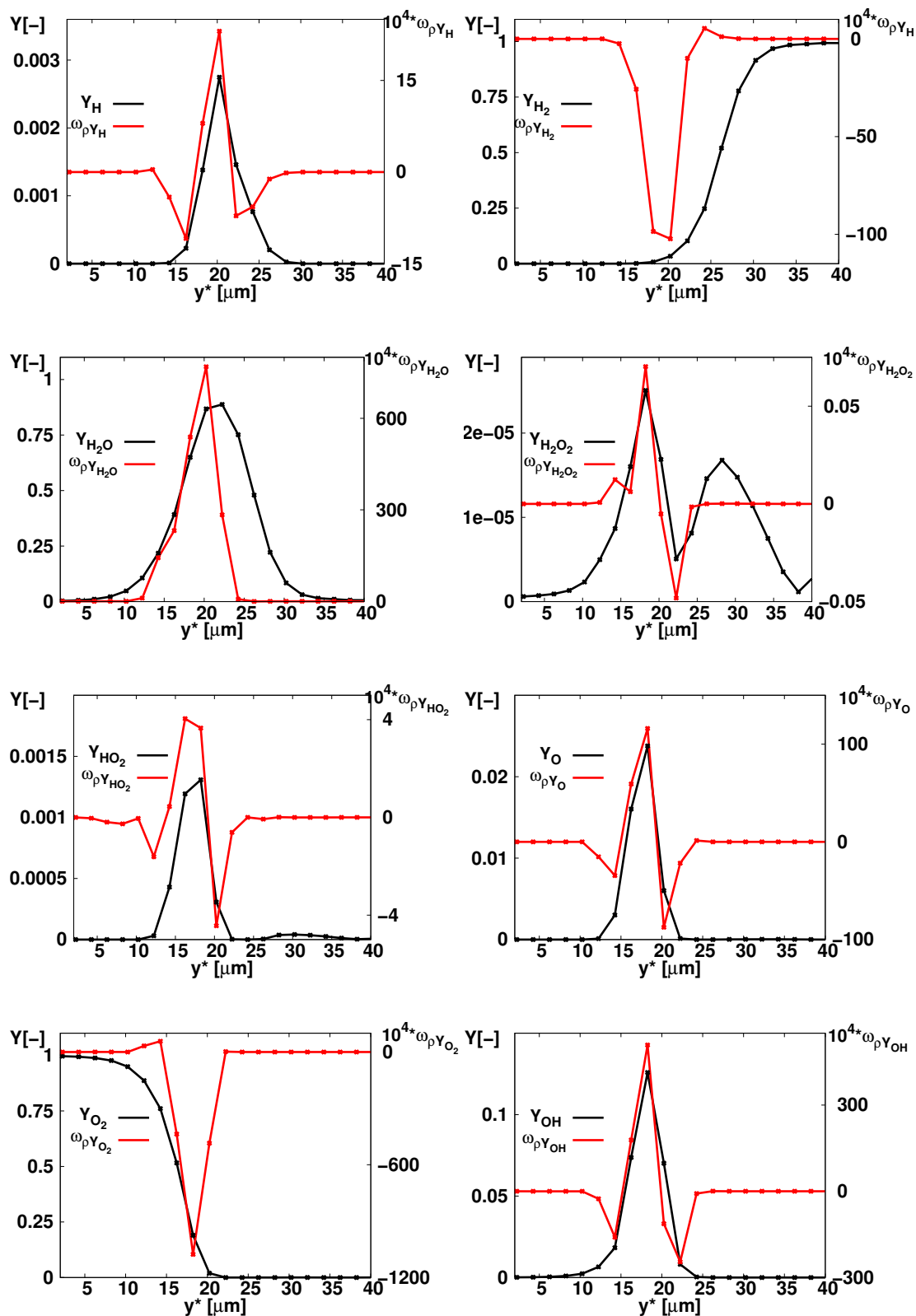


FIGURE 4.33: Champs de l'indice de flamme pour deux modélisations différentes (-1 : flamme prémélangée pauvre, 0 : flamme de diffusion et 1 : flamme prémélangée riche)..

FIGURE 4.34: Courbes des fraction massiques et des productions des espèces en fonction de  $y^*$  (cas #0).

FIGURE 4.35: Courbes des fraction massiques et des productions des espèces en fonction de  $y^*$  (NIT).

**Champs moyens :** Les figures 4.36, 4.38, 4.39 et 4.37 représentent le résultat des champs moyens et de fluctuations de vitesses axiales et longitudinales, de température et des fractions massiques des espèces  $H_2$ ,  $O_2$  et  $H_2O$ , obtenus avec les deux modélisations utilisées.

Pour la vitesse axiale moyenne, on retrouve le même comportement qu'avec le cas non-réactif. Pour les quatre coupes verticales, cette vitesse part de  $y/h = -5$  avec une vitesse égale à 20 m/s, ensuite elle diminue dans le sillage de la lèvre, puis elle augmente pour atteindre 130 m/s. Les résultats obtenus avec ces deux modélisations sont identiques dans la partie de l'oxygène ainsi que dans la zone de mélange, allant de  $y/h = -5$  à 1, ce qui montre que la modélisation "NIT" n'a pas d'influence sur la partie remplie par de l'oxygène dense. Par contre, dans la partie de l'hydrogène, une légère différence est observée entre ces résultats, les vitesses axiales moyennes sont plus grandes avec la modélisation "NIT" et cette tendance s'amplifie le long de l'axe  $x$ , prouvant que les structures turbulentes sont différentes entre ces deux modélisations.

Pour la vitesse transversale moyenne, un comportement similaire avec le cas non-réactif est retrouvé. Une différence non négligeable apparaît néanmoins dans les parties du mélange et de l'hydrogène. L'impact de la modélisation "NIT" est beaucoup plus important sur la vitesse transversale que sur la vitesse axiale. En particulier, dans la zone de recirculation où des vortex contrarotatifs sont observés, les valeurs extrêmes avec la modélisation "NIT" sont plus grandes et cette différence s'amplifie avec l'axe  $x$ .

Concernant la température moyenne, le même comportement a été retrouvé avec ces deux modélisations. Pour les quatre coupes verticales, la température est de  $T = 100$  K en  $y/h = -5$  (condition d'injection de l'oxygène) pour atteindre un maximum dans le sillage de la lèvre de l'injecteur avant de redescendre à  $T = 150$  K (condition d'injection de l'hydrogène). Pour les quatre coupes verticales, les profils de température obtenus sont proches de la loi gaussienne, avec un écart type augmentant avec l'axe  $x$ . Un écart non-négligeable entre les modélisations apparaît à partir de  $y/h = 3$  i.e. dans la zone remplie par de l'hydrogène. La température maximale moyenne est plus faible avec la modélisation "NIT", de l'ordre de 50 K. Les profils de température sont aussi plus diffusifs avec la modélisation "NIT".

Pour les fractions massiques moyennes des espèces, on retrouve le même comportement avec les deux modélisations. Pour les quatre coupes verticales, les concentrations de  $O_2$  et  $H_2$  valent respectivement 1 et 0 pour  $y/h = -5$ . A partir de  $y/h = -1$  à -3 (selon la distance à l'injecteur), et jusqu'à  $y/h = 1$  à 3, ces concentrations évoluent en sens inverse ( $Y_{O_2}$  diminue et  $Y_{H_2}$  augmente) jusqu'à atteindre 0 et 1 respectivement jusqu'à  $y/h = 5$ . Cette zone de transition s'épaissit comme pour la flamme, avec l'axe  $x$ . Pour la fraction massique moyenne de l'eau, elle apparaît sous la forme d'une gaussienne centrée au niveau de la zone de mélange. Elle vaut environ 0,25 avec la première coupe verticale ( $x/h = 1$ ), 0,35 avec la deuxième ( $x/h = 3$ ) puis 0,37 avec les deux dernières ( $x/h = 5$  et 7). La couche de mélange obtenue avec la modélisation "NIT" est aussi plus raide et cette différence qui s'amplifie avec l'axe de l'écoulement ( $x$ ).

Pour les valeurs de fluctuation des différentes variables étudiées la même tendance est observée entre ces deux modélisation, néanmoins dans la zone de mélange pour les 4 coupes verticales, elles sont plus importante avec la modélisation "NIT".

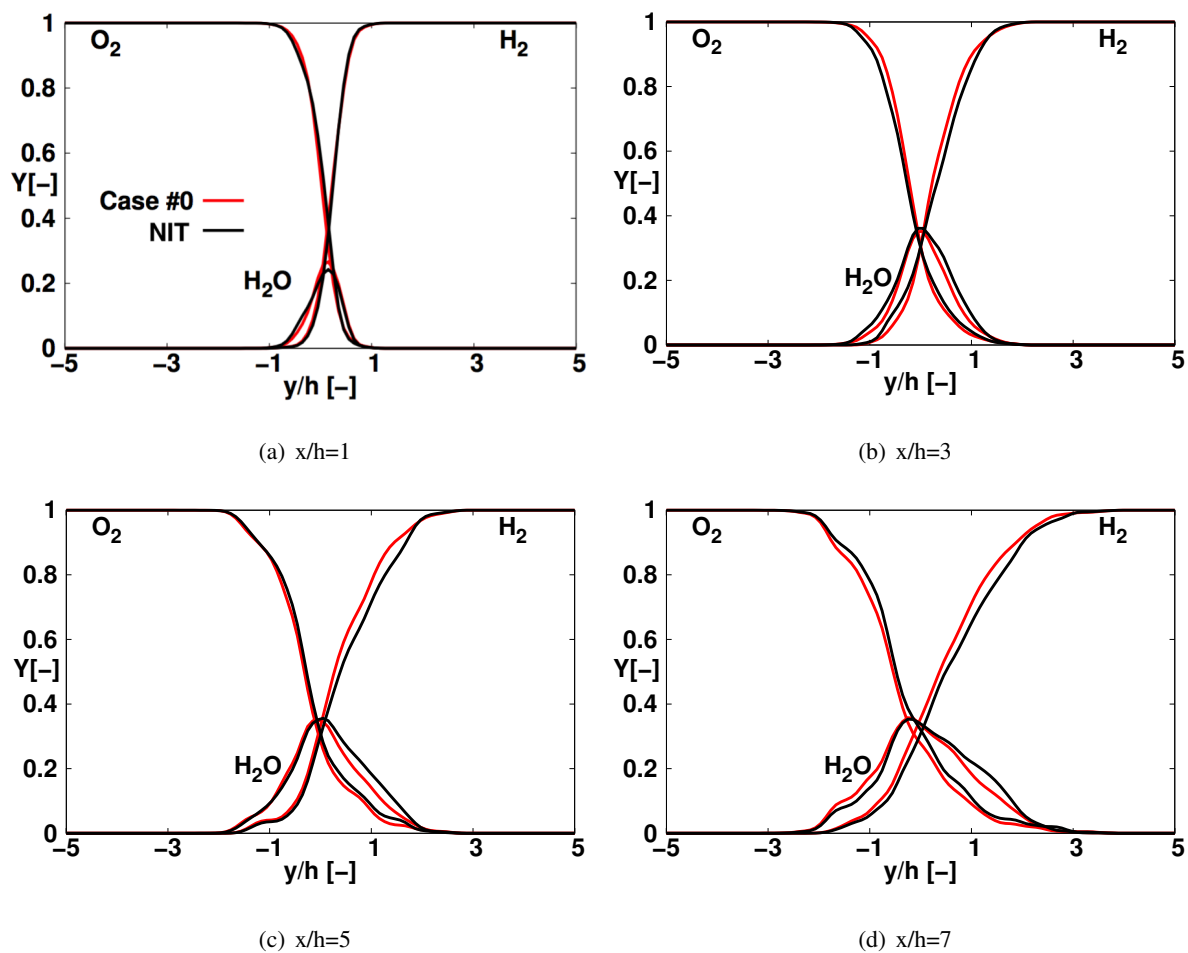


FIGURE 4.36: Champs moyens des fractions massiques des espèces  $H_2$ ,  $O_2$  et  $H_2O$  suivant les 4 coupes verticales.

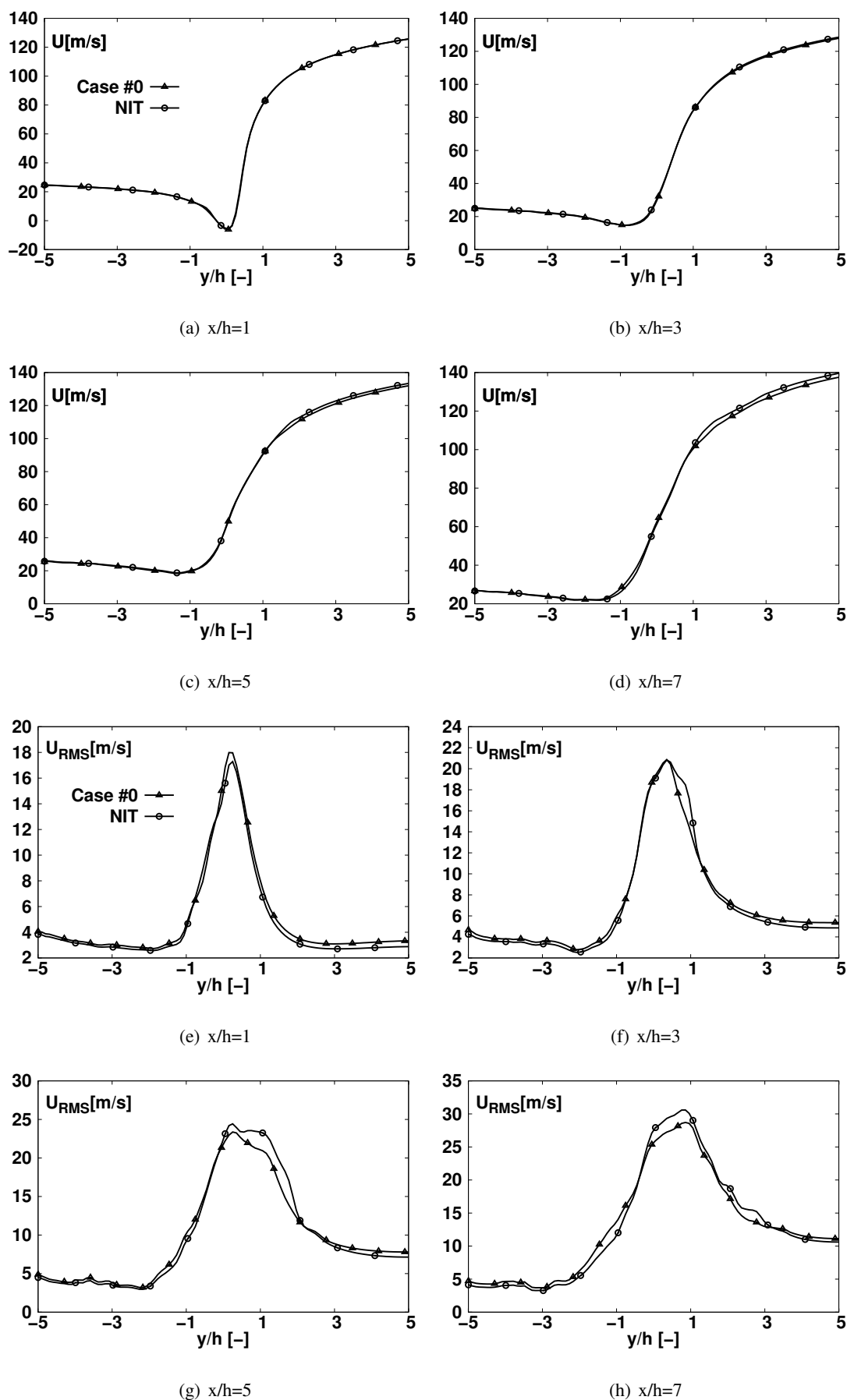


FIGURE 4.37: Champs moyens et fluctuations de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales.

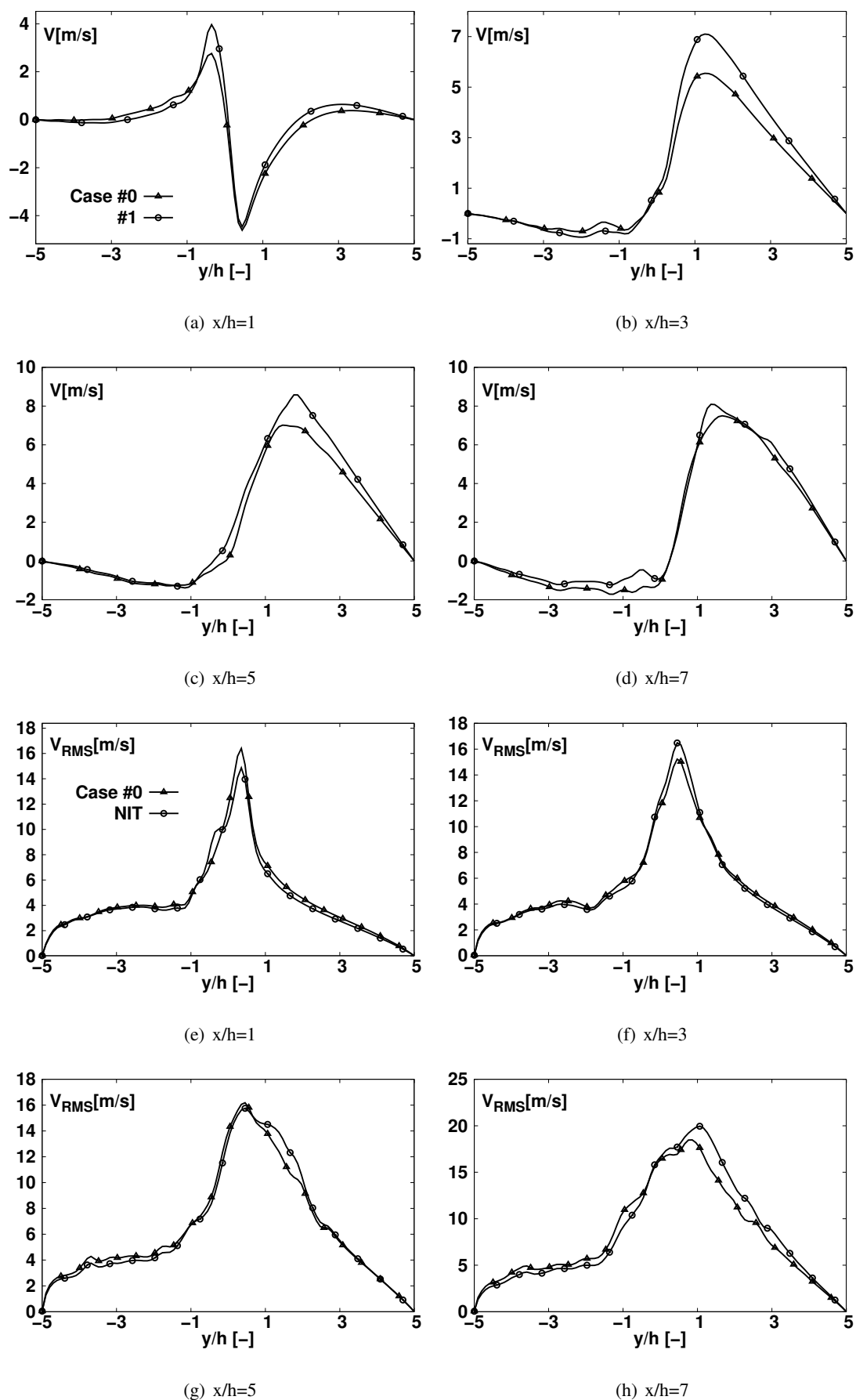


FIGURE 4.38: Champs moyens et fluctuations de la vitesse transverse suivant les 4 coupes verticales.



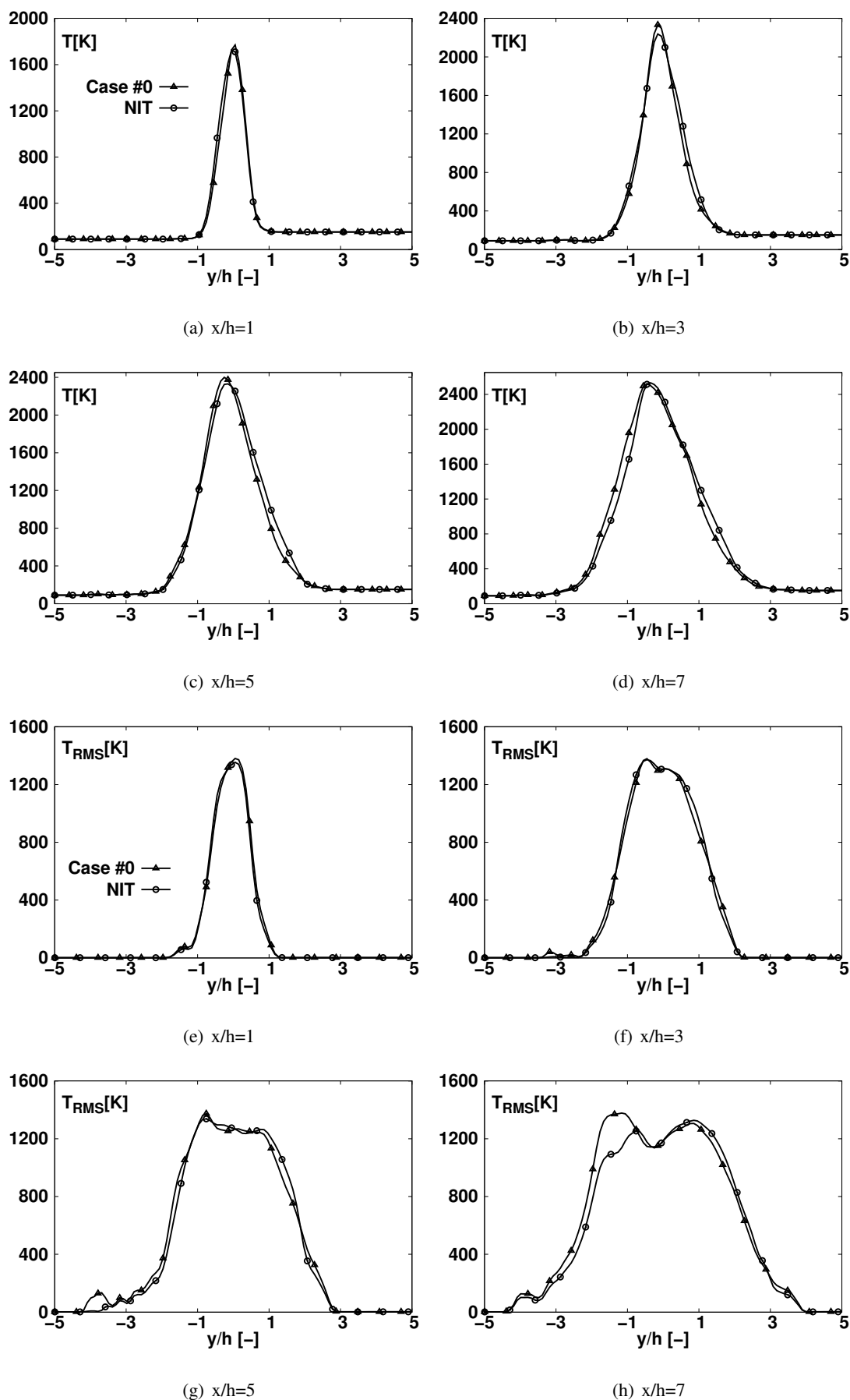


FIGURE 4.39: Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales.

## 4.5 Conclusion

Dans cette étude la couche de mélange non-réactive 2D, étudiée par Ruiz et al. [109] a été simulée avec succès en utilisant le code SiTCom-B. Tout d'abord, elle a été simulée avec une modélisation idéale du flux de diffusion, de façon similaire aux codes de calcul AVBP et RAPTOR. La comparaison des champs instantanés et moyens entre ces trois codes a permis de valider, une fois de plus la capacité de SiTCom-B à simuler de telles configurations supercritiques. Puis, une étude en maillage a été réalisée sur cette configuration, montrant que plus le maillage est raffiné, plus de structures turbulentes sont capturées améliorant le mélange. Car le raffinement du maillage permet de capter de plus petites structures turbulentes, elles apparaissent ainsi en périphérie des plus grandes structures, augmentant significativement la surface d'échange entre les deux fluides et donc leur mélange par diffusion.

Afin de connaître l'impact d'une modélisation non-idéale du flux de diffusion des espèces et de la correction en pression du coefficient de diffusion binaire, plusieurs autres simulations avec différentes modélisations ont été réalisées. Ces simulations ont montré que les effets non-idéaux sur le flux de diffusion ne pouvaient pas être négligés sur cette configuration non-réactive turbulente et supercritique. La différence sur les champs moyens entre les résultats avec une modélisation idéale et non-idéale s'amplifie avec la distance axiale. Une correction en pression doit aussi être prise en compte pour le coefficient de diffusion binaire des espèces.

Cette étude a ensuite été étendue au cas réactif. Tout d'abord plusieurs flammes supercritiques laminaires  $H_2/O_2$  ont été simulées avec différentes modélisations. Il a été montré que, dans le cas laminaire prémélangé les effets non-idéaux du flux de diffusion des espèces ainsi qu'une correction en pression du coefficient de diffusion devraient être absolument pris en compte. L'effet Soret (thermo-diffusif) doit aussi être appliqué, car il joue un rôle important avec les espèces légères comme l'hydrogène. L'étude sur la modélisation de la vitesse de diffusion a montré que la flamme obtenue avec l'approximation de Curtiss et Hirschfelder était différente de celle obtenue avec une modélisation multicomposante. Cependant, une modélisation multicomposante ralentit d'une façon très importante le calcul. Avec seulement 8 espèces transportées le code était ralenti d'un facteur de deux.

La couche de mélange réactive  $H_2/O_2$  a ensuite été simulée à l'aide du schéma cinétique de Boivin. Une flamme supercritique apparaît tout le long du sillage de la lèvres. Sur la ligne iso-stoechiométrique, la température de flamme avoisine 3800 K. L'indice de flamme nous a montré qu'il s'agissait d'une flamme de diffusion. Une des parties les plus fines de cette flamme a été étudiée, montrant qu'avec notre maillage  $h_{250}$  de taille de maille  $2 \mu m$ , la flamme était capturée sur une dizaine de points, prouvant que l'épaisseur de cette flamme est proche des  $20 \mu m$ . Cette simulation a été réalisée avec deux modélisations différentes : la première avec une modélisation non-idéale et la seconde avec une modélisation idéale. Les résultats ont montré qu'ici encore, les effets non-idéaux du flux de diffusion ne pouvaient pas être négligés et nous avons observé que l'écart des résultats entre une modélisation idéale et non-idéale s'accroît avec la distance axiale.

Nous pouvons enfin conclure que, le développement des modèles haute pression pour les LES peut maintenant être atteint grâce à l'analyse de cette base de données.



# Chapitre 5

## Conclusions et perspectives

### Sommaire

---

5.1 Conclusions . . . . .	137
5.2 Perspectives . . . . .	140

---

### 5.1 Conclusions

Au cours des dernières années, on a assisté à une compétition très féroce pour l'accès à l'espace, du fait de l'arrivée de nouveaux acteurs sur le marché comme SpaceX. En effet, celui-ci a réduit d'une manière considérable le prix des lancements grâce notamment à sa fusée Falcon 9, récupérable et réutilisable en partie, ce qui représenta une évolution majeure dans le domaine.

Le choix de conception des futurs lanceurs est donc primordial et l'allumage, plusieurs fois en vol, en est un point clé. Ceci permettra d'effectuer plusieurs missions durant un même vol et par conséquent réduira fortement le prix d'accès à l'espace. L'allumage étant un processus très délicat, il est nécessaire d'utiliser des outils précis et fiables pour aider au développement de cette technologie. Le cycle de mise en route d'un moteur fusée s'avère complexe car il consiste en un couplage de plusieurs phénomènes physiques : modélisation de l'allumeur, traitement des écoulements supersoniques et supercritiques, mélange et dynamique de jet turbulent, modélisation de la cinétique chimique, les effets diphasique à basse pression et les instabilités de combustion. De ce fait, la simulation complète de tout ces processus est de nos jours hors de portée.

Au cours de cette thèse, une première étude a porté sur la modélisation et la simulation aux grandes échelles des premiers instants de l'allumage. Plusieurs simulations ont été réalisées en prenant en compte l'allumeur et la première couronne d'injection de l'hydrogène. Le processus d'allumage d'un tel moteur-fusée a été respecté qualitativement : dans un premier temps, les jets d'hydrogène issus de la couronne extérieure de l'allumeur et de la première couronne d'injection ont été simulés avec des vitesses supersoniques, dans une chambre remplie d'un gaz neutre au repos. Puis, une fois la chambre remplie d'hydrogène et l'écoulement supersonique installé, l'allumage débute par l'injection supersonique des gaz brûlés riche en oxygène issus de l'allumeur. Dans le but de définir une stratégie numérique pour la simulation 3D du processus d'allumage, plusieurs simulations 1D et 2D ont été réalisées. Dans l'optique de valider la capacité de notre solveur à prédire de tels écoulements, plusieurs simulations du tube de

Sod ont été effectuées. Il s'agit d'un long tube 1D, divisé en deux régions égales séparées par un diaphragme, les deux régions ayant des propriétés différentes, la soudaine rupture de ce diaphragme génère une onde de choc. Celle-ci a d'abord été simulée avec un rapport de pression entre les deux régions égales à 10 et avec l'emploi des paramètres de viscosité artificielle recommandés par Ducros et al. [174]. Les résultats obtenus sont en parfait accord avec la solution analytique du problème, validant l'emploi de cette stratégie pour les simulations 2D et 3D. En vue de s'approcher au plus près des conditions d'allumage dans l'espace, la pression initiale de la chambre de combustion au repos a été fixée à 0.1 bar. La pression d'injection de l'allumeur étant de 10 bar, ce qui représente un rapport des pressions égale à 100, lors de la mise en route d'un tel moteur-fusée. La capacité de SiTCom-B à capturer une telle discontinuité a été évaluée sur une configuration de Sod modifiée, où les propriétés de la chambre de combustion au repos ont été employées dans une des deux régions, et ceux de l'injection de l'allumeur dans l'autre. Les résultats obtenus sont aussi en parfait accord avec la solution analytique, validant l'aptitude du code SiTCom-B pour ce type de configuration.

Puis, plusieurs simulations 2D ont été réalisées avec différents schémas cinétiques sur différents maillages. La configuration d'allumage prenant en compte l'allumeur et la première couronne d'injection de l'hydrogène a été simulée avec le schéma cinétique de San Diego à 8 espèces pour 21 réactions élémentaires et avec la réduction proposée par Boivin, comprenant 5 espèces pour 3 réactions globales. Les résultats instantanés obtenus montrent que les mêmes tendances au sein de l'écoulement sont retrouvées dans ces deux simulations. La comparaison des champs moyens ont ensuite permis de valider la réduction de Boivin pour cette configuration, ce schéma étant plus avantageux en coût numérique a été choisi pour la suite de l'étude. Ensuite, cette simulation 2D a été effectuée avec 3 maillages structurés différents, de tailles de maille respectives de  $25 \mu\text{m}$ ,  $50 \mu\text{m}$  et  $75 \mu\text{m}$ . Les résultats ont montré que la même structure d'écoulement est observée avec ces 3 maillages, les résultats sur les champs moyens sont proches avec des différences inférieures à 10%. Cependant, seul le maillage à  $25 \mu\text{m}$  permet un bon accord avec les critères de Duwig pour la combustion turbulente et de Pope pour la LES.

Enfin, les simulations 3D ont été réalisées avec 3 maillages différents, de taille de maille et de nombre total de cellules respectivement de  $75 \mu\text{m}$  pour 17 millions de cellules,  $50 \mu\text{m}$  pour 85 millions de cellules et  $25 \mu\text{m}$  pour 680 millions de cellules. Ici aussi, seul le maillage le plus raffiné avec 680 millions de cellules est en bon accord avec les critères de Duwig et de Pope. Les résultats obtenus avec ce maillage montrent que, aux tout premiers instants de l'injection des gaz brûlés, une combustion a lieu instantanément de manière très irrégulière. En effet, dans les zones où la dissipation scalaire est très élevée, le jet se dilate avec une diminution de la température retardant ainsi la combustion. Une fois l'auto-allumage réalisé, une flamme de diffusion se développe sur la ligne stoechiométrique de la combustion  $\text{H}_2/\text{O}_2$ . Cette flamme reste attachée à la lèvres d'injection et interagit avec la dynamique du jet supersonique de l'hydrogène. Elle est aussi localisée sur une couche de mélange supersonique (voir l'article : 3.3). La structure de cette flamme est semblable à celle d'une flamme non-prémélangée à contre-courant, ce qui signifie que la résolution du maillage est suffisamment fine pour capturer le comportement de cette flamme. Par conséquent, le développement d'un modèle de combustion turbulent basé sur une telle structure de flamme à contre courant pourra être réalisé. La même simulation a aussi été réalisée avec une approche non-réactive, les résultats en comparaison avec le cas réactif ont montré que les mécanismes physiques pilotant l'écoulement sont les effets aérodynamiques. Dans ces deux cas, la vitesse du choc générée par l'injection des gaz brûlés est semblable à celle du choc 1D décrite précédemment.

La seconde partie de cette thèse porte sur les écoulements supercritiques réactifs et non-réactifs  $H_2/O_2$ , dans une configuration proche des injecteurs de moteur-fusée. Plusieurs simulations ont été réalisées afin d'étudier la couche de mélange et la flamme  $H_2/O_2$  à haute pression. Les différentes stratégies de modélisation pour la haute pression ainsi que leurs écarts aux modèles basse pression ont aussi été étudiés en détails.

Tout d'abord, la couche de mélange non-réactive  $H_2/O_2$  bidimensionnelle, étudiée par Ruiz et al. a été simulée avec succès en utilisant le code SiTCom-B. Cette simulation a été réalisée avec une modélisation idéale du flux de diffusion, de façon similaire aux simulations réalisées avec les codes de calcul AVBP et RAPTOR. La comparaison des champs instantanés et moyens obtenus avec ces trois solvers a permis de revalidé la capacité de notre code à simuler de tels configurations supercritiques. Puis, une étude en maillage a été réalisée sur cette configuration, montrant que plus le maillage est raffiné, plus la taille des structures turbulentes capturées est faible, ce qui améliore le mélange.

Afin de connaître l'impact d'une modélisation non-idéale du flux de diffusion des espèces et de la correction en pression du coefficient de diffusion binaire, plusieurs autres simulations avec différentes modélisations ont été réalisées. Ces simulations ont montré que les effets non-idéaux sur le flux de diffusion ne pouvaient pas être négligés sur cette configuration non-réactive turbulente et supercritique. La différence sur les champs moyens entre les résultats avec une modélisation idéale et non-idéale s'amplifie avec la distance axiale. Une correction en pression doit aussi être prise en compte pour le coefficient de diffusion binaire des espèces.

Cette étude a ensuite été étendue au cas réactif. Tout d'abord plusieurs flammes supercritiques laminares  $H_2/O_2$  ont été simulées avec différentes modélisations. Il a été montré que, dans le cas laminaire prémélangé, les effets non-idéaux du flux de diffusion des espèces ainsi qu'une correction en pression du coefficient de diffusion devraient être absolument pris en compte. L'effet Soret (thermo-diffusif) doit aussi être appliqué, car il joue un rôle important avec les espèces légères comme l'hydrogène. L'étude sur la modélisation de la vitesse de diffusion a montré que la flamme obtenue avec l'approximation de Curtiss et Hirschfelder était différente de celle obtenue avec une modélisation multicomposante. Cependant, une modélisation multicomposante ralentit d'une façon très importante le calcul. Avec seulement 8 espèces transportés le code était ralenti d'un facteur de deux.

La couche de mélange réactive  $H_2/O_2$  a ensuite été simulée à l'aide du schéma cinétique de Boivin. Une flamme supercritique se développe tout le long du sillage de la lèvres. Sur la ligne iso-stoechiométrique, la température de flamme avoisine 3800 K. L'indice de flamme nous a montré qu'il s'agissait d'une flamme de diffusion. Une des parties les plus fines de cette flamme a été étudiée, montrant qu'avec notre maillage  $h_{250}$  de taille de maille  $2 \mu m$ , la flamme était capturée sur une dizaine de points, prouvant que l'épaisseur de cette flamme est proches des  $20 \mu m$ . Cette simulation a été réalisée avec deux modélisation différentes : la première avec une modélisation non-idéale et la seconde avec une modélisation idéale. les résultats ont montré qu'ici encore, les effets non-idéaux du flux de diffusion ne pouvaient pas être négligés et nous avons observé que l'écart des résultats entre une modélisation idéale et non-idéale s'accroissent avec la distance axiale.

Nous pouvons enfin conclure que le développement des modèles haute pression pour les LES peut maintenant être atteint grâce à l'analyse de cette base de données.

## 5.2 Perspectives

L'objectif de cette thèse était d'affiner la compréhension des phénomènes liés à la mise en route d'un moteur-fusée de type Vinci, l'étude a été focalisée sur les premiers instants de l'allumage (le début de la combustion dans la chambre) ainsi que sur le régime établie i.e. la combustion supercritique. Ces deux points ont été étudiés indépendamment. Les travaux futurs devront donc être consacrés au transitoire entre ces deux extrémités. La plus grande difficulté pour réaliser cela concerne la modélisation physique de la phase liquide ( $LO_x$ ) qui n'a pas été prise en compte dans cette étude ainsi que sa transition vers un état supercritique.

La représentation des interfaces liquide/vapeur est donc le point clé de futures études. La méthode d'interface diffuse du type second gradient introduite par Van Der Waals [145] et utilisée récemment par P. Gaillard au cours de sa thèse [214], offre de belles perspectives pour des calculs DNS de l'interface  $H_2/O_2$  réactive, lors de la transition subcritique-supercritique. Elle consiste à modifier la forme de l'énergie libre en ajoutant un terme lié aux gradients de masse volumique permettant une description continue et précise des interfaces et dans le cadre des moteurs-fusées elle permet d'avoir un modèle unifié fonctionnant aux pressions subcritique et supercritique. Cependant elle nécessite de représenter la transition dense-dilué de moins d'un micromètre d'épaisseur sur au moins cinq points, ce qui est la plus grande limitation de cette approche. Au cours de la présente thèse, dans un premier temps la méthode d'interface diffuse du type second gradient a été implémentée dans SiTCom-B, puis afin d'épaissir l'interface les équation filtrées de cette méthode adaptées à la LES ont été initiées. Cependant, le manque de temps ne nous a pas permis d'avoir des résultats présentables pour ce manuscrit.

L'autre point important pour la suite à donner à ces travaux concerne la modélisation de la combustion méthane/oxygène. Le méthane va remplacer à l'horizon 2030 l'hydrogène (sur les lanceurs Ariane), car celui-ci est plus facile à stocker et à manipuler. De plus, sa densité et sa température sont proches de celles de l'oxygène, ce qui permettra d'envisager la réalisation de certaines pièces comme les réservoirs et les turbopompes, sur une même architecture [6]. La description de la combustion  $CH_4/LO_x$  nécessitera donc l'emploi de méthodes adaptées au calcul haute-performance soit par réduction chimique [215], soit par chimie hybride [216]. L'impact du transport non-idéal devra aussi être quantifié de la même façon que celle suivie pour  $H_2/LO_x$ . De plus, en régime supercritique et contrairement à la flamme hydrogène/oxygène qui possède uniquement un front de flamme, il a déjà été observé que les flammes de méthane/ $LO_x$  pouvaient avoir deux fronts de flamme d'après les études de Singla et al. [217]. La compréhension de cette flamme devra donc être approfondie, avec, en particulier, un regard sur le transfert de chaleur entre la flamme et la paroi (l'injecteur).





# **Annexe 1 : Real-Gas Effect on Fluid Injection : A Numerical and Experimental Study**

Au cours de cette thèse, une collaboration a été réalisée avec Nathalie VALLEE, doctorante du CO-RIA sur le projet REFINE<sup>1</sup>. Son travail de thèse consistait à mettre en place un banc d'essai expérimental non-réactif d'un jet coaxial dans des conditions supercritiques. Au cours du programme d'été TRR-40<sup>2</sup>, la simulation numérique avec SiTCom-B du banc expérimental REFINE a été initiée. Le rapport de cette étude a été inséré à la suite de cette annexe.

---

1. [http://www.agence-nationale-recherche.fr/projet-anr/?tx\\_lwmsuivibilan\\_pi25%BCODE%5D=ANR-13-BS09-0007](http://www.agence-nationale-recherche.fr/projet-anr/?tx_lwmsuivibilan_pi25%BCODE%5D=ANR-13-BS09-0007)  
2. <http://www.sfbtr40.de/>

# Real-Gas Effect on Fluid Injection: A Numerical and Experimental Study

By **N. Vallée, U. Guven, J.-B. Blaisot AND G. Ribert**

CORIA - CNRS, Normandie Univ., INSA Rouen Normandie, UNIROUEN  
76000 Rouen, France

When the chamber pressure exceeds the critical pressure of working fluids, the supercritical state of matter is reached and the distinction between gas and liquid becomes blurred. For such special conditions, experimental data are scarce and need to be consolidated. In the present study, the results obtained from the experiment REFINE (Real-gas Effect on Fluid Injection: a Numerical and Experimental study) are analyzed and a first attempt to reproduce them by numerical simulation is performed. In REFINE, an injection of Ethane into Nitrogen under sub- and supercritical conditions is performed. The ambient gas pressure can be raised up to 6.0 MPa and warmed up to 323 K to scan sub- and trans-critical injections. The chamber is equipped with two perpendicular optical access for simultaneous diagnostics. Experimental data are collected from shadowgraph and diffused backlight illumination techniques. Quantitative measurements of jet spreading angle and breakup length are compared to results coming from literature.

---

## 1. Introduction

Mixing is one of the most important phenomena in combustion devices because it determines combustion efficiency and stability along with heat transfer characteristics. In addition, most of the current understanding of turbulence and mixing is the result of atmospheric-pressure studies and numerous numerical and experimental databases are available. A similar work has then to be undertaken for sub-, trans- and super-critical flows investigation, i.e. real-gas effects have to be considered. Indeed, this research field lacks of experimental data, useful for the numerical code validation. Even if simulation has made serious progress in the last decade, numerical codes still need well-documented experimental test cases for validation. Indeed, at supercritical state, the fluid is neither a liquid nor a gas, but may have liquid-like density with gas-like properties: beyond the critical point ( $P_c, T_c$ ), there is no distinction between gaseous and liquid phases for pure species. In the case of mixing, depending on the considered species, defining the state of matter becomes much more complicated [1] and modeling turbulence, mixing and combustion is still a challenge [2].

The topic addressed in this project is focused on the current research program REFINE that is held at CORIA Lab and that considers the experimental investigation and numerical simulation of real-fluid injection and mixing processes under sub-, trans- and supercritical conditions. The domain of interest of REFINE is the propulsion with application to the automotive and aerospace science and technology where supercritical fluids may be considered as propellants. Indeed, the need for higher efficiency and lower emission levels leads to increase pressure and temperature levels, i.e. to reach supercritical

properties of fluids. The objective of REFINE is to build a simple well-controlled test-bench able to study a fluid injection under sub-, trans- and super-critical conditions and to associate experimental and numerical diagnostics to deliver the finest information. An ethane injection is then considered in a 5-liter high-pressure experimental chamber.

The reference experiment REFINE is detailed in section 2 and the results obtained with shadowgraph and diffuse backlight illumination techniques are given in section 3. A first attempt to simulate this configuration is given in section 4.

## 2. Reference experiment

The experiment has been designed to study injection and atomization of a non-assisted jet under high pressures conditions. REFINE test bench is equipped with a steel chamber able to withstand pressures up to 10 MPa and moderate temperatures (573 K). Two optical axes through circular silica windows of  $d = 120$  mm are available for simultaneous measurements (see Fig. 1). The chosen working fluids are Ethane ( $C_2H_6$ ,  $T_c = 305.3$  K and  $p_c = 4.87$  MPa) and Propane ( $C_3H_8$ ,  $T_c = 369.8$  K and  $p_c = 4.25$  MPa). Their moderate critical pressure and temperature are within the range of operating conditions achievable in the chamber. A one-liter pump supplies the working fluid at the liquid-gas equilibrium pressure. Before injection, the pump is filled up, and then the fluid contained inside the vessel of the pump is compressed to the target pressure plus 0.05 MPa to prevent the ambient fluid in the main chamber from entering the pump and creating an effervescent jet.

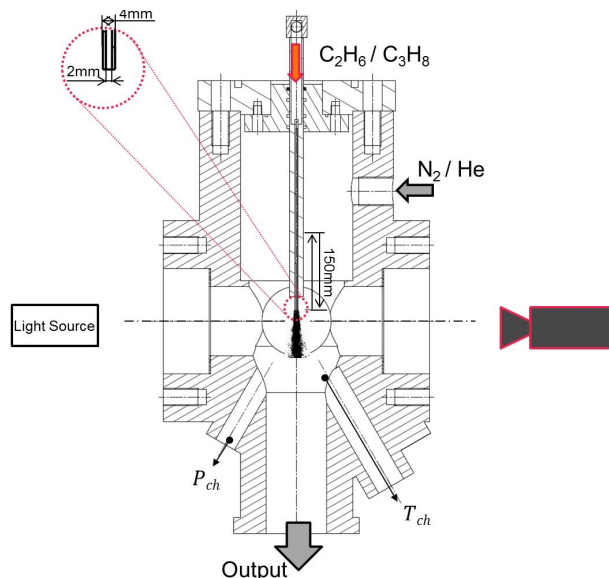


FIGURE 1. REFINE injection chamber.

The injection is performed with a sharp-edged stainless steel tube of 210 mm long, with a 4 mm outer diameter and a 2 mm inner diameter. The injector can be moved vertically over a 150 mm stroke by a motorized system located on the top of the chamber, to explore the jet further downstream. The rig is fully instrumented with thermocouples, pressure gauges and mass flow meters as indicated in Fig. 2. The chamber is filled with Nitrogen and the pressure is controlled with a pressure regulator having a precision

of  $\pm 0.1$  MPa. To warm up the ambient fluid, two Mica heating plates are placed at the bottom of the chamber and a heater (Fig. 2) is inserted just before the feeding of  $N_2$ .

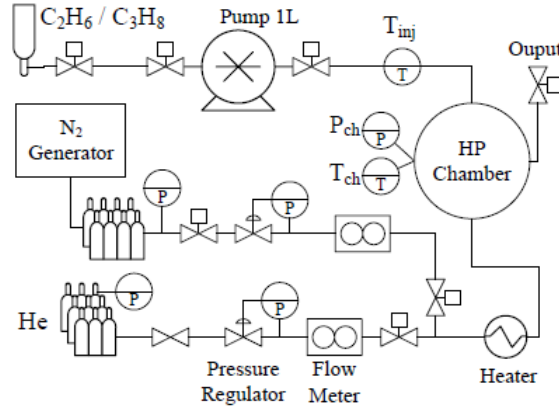


FIGURE 2. Flowchart of REFINE test bench.

Two optical diagnostics, diffused back-light illumination (DBI) and shadowgraphy, are used to quantify the injection and atomization of the working fluids. The main difference between these two techniques lies in the light source arrangement. For shadowgraph, a collimated laser diode (Cavitar) is used whereas a stroboscope flash-lamp (MVS-2601) with a glass diffuser is used for DBI. The DBI allows for detecting the largest density gradients, which are essentially located at the liquid-gas interface contrary to shadowgraph that detects smoother density gradient.

### 3. Post-processing experimental images

A set of images using the shadowgraph and DBI techniques has been recorded for various inlet velocities, temperature ( $T_{ch}$ ) and pressure ( $P$ ) in the chamber. In the present cases,  $P$  varies from 4.0 to 6.0 MPa and  $T_{ch} = 293$  K or  $T_{ch} = 323$  K. The results for injection of ethane into nitrogen are shown in Fig. 3 and 4, for a chamber pressure  $P = 6.0$  MPa.

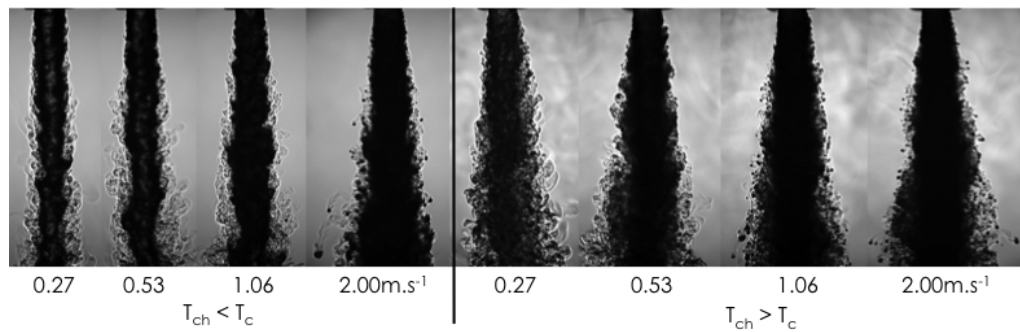
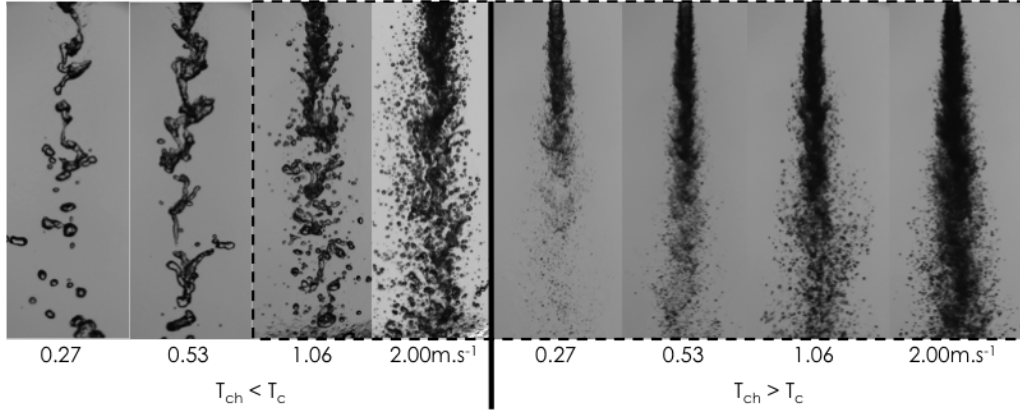
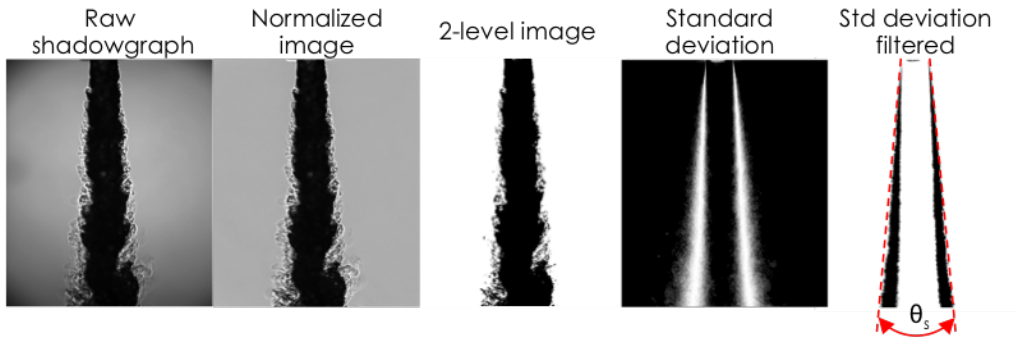


FIGURE 3. Shadowgraphs of ethane into nitrogen at  $P = 6.0$  MPa.

FIGURE 4. DBI of ethane into nitrogen at  $P = 6.0$  MPa.

### 3.1. Spreading Angle

The spreading angle is evaluated from shadowgraphs, based on the localization of the  $C_2H_6/N_2$  mixing layer. As it can be seen on the raw image in Fig. 5, the background illumination is not homogeneous, i.e. darker in the corners and lighter in the center. Raw images are normalized to correct these defects and obtain a uniform background. Then, images are binarized with a threshold level chosen to separate the jet of ethane from the ambient nitrogen. The mixing layer region is determined by calculating the

FIGURE 5. Steps of post processing for the spreading angle,  $\theta_S$ .

standard deviation from 120 binarized images. A second threshold is then applied to get clear boundaries of the mixing layer region. Applying a linear regression on these regions yields the slope indicated by the two lines in Fig. 5, giving the spreading angle, ( $\theta_S$ ). This technique is repeated for all operating conditions and the spreading angles are plotted in Fig. 6 against the density ratio  $\rho_{ch}/\rho_{jet}$ , with  $\rho_{ch}$ , the density of  $N_2$  and  $\rho_{jet}$ , the density of  $C_2H_6$ . Increasing the velocity injection of  $C_2H_6$  or the pressure in the chamber leads to an increase of  $\theta_S, \forall T_{ch}$ . These results are in agreement with the observations of Mayer et al. [4]. Results from Cherhroudi et al. [3] for an injection of liquid  $N_2$  into gaseous  $N_2$  are also plotted in Fig. 6, showing a similar trend.

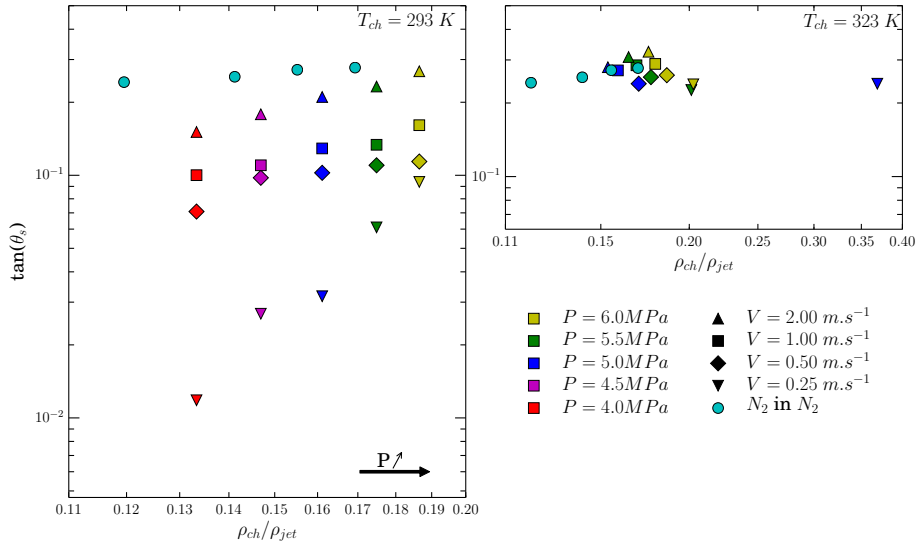


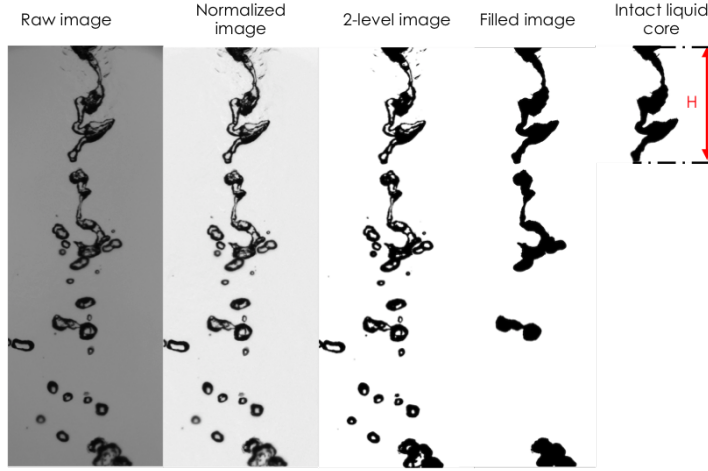
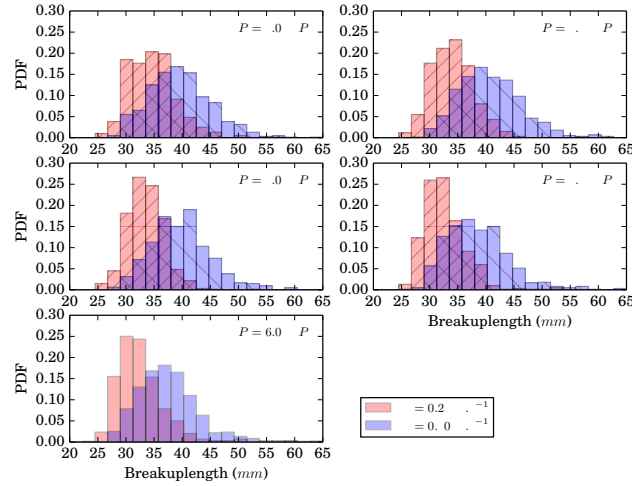
FIGURE 6. Spreading angle versus the chamber to injectant density ratio. For comparison, spreading angle ( $\theta_s$ ) for injection of liquid  $N_2$  into  $N_2$  at ambient temperature from Fig. 8 of Chehrودي's paper [3] are added for comparison.

### 3.2. Dark core length

The dark core length is estimated from DBI technique that highlights the strongest gradients in the flow. In the particular case of a liquid injection, an interface can be clearly determined contrary to supercritical cases where a diffuse mixing layer between the dense and light fluids may occur. As shown in Fig. 4, two types of jet structure are observed. For the two lowest velocities at ambient temperature ( $T_{ch} < T_c$ ), the first discontinuity in the jet can be clearly identified and measured directly on raw images. This measurement will be called breakup length  $L_{Bu}$ . For other conditions, i.e. inside the dashed rectangle in Fig. 4, a cloud of drops does not make possible this direct measurement and a probability approach is used to deliver the dark core length,  $L_{Dc}$ .

Evaluating the breakup length follows the methodology used to evaluate the spreading angle. A threshold is accurately chosen to delineate the interface of the continuous object attached to the injectors lips. This point is highlighted in Fig. 7 for a jet identified in second wind-induced regime [5]. Such a procedure is performed for 600 raw images to obtain probability density function (pdf) of  $L_{Bu}$ . In Fig. 8), the shortest breakup length is found for  $V = 0.25$  m/s and  $L_{Bu}$  increases with the discharge velocity. The pdf of  $L_{Bu}$  are wider for the largest velocity and for  $V = 0.25$  m/s the maximum peak is better defined. Finally, increasing the pressure in the chamber slightly reduced  $L_{Bu}$ .

Considering an atomized jet, i.e. when the liquid injection leads to a cloud of drops, the different steps of post-processing are still the same except that an average of 600 continuous object images is computed (see Fig. 9) for the same injection conditions. Finally, a second threshold is used to define the most probable dark core length ( $L_{Dc}$ ). The dark core length  $L_{Dc}$  is plotted against the inlet velocity in Fig. 10. The breakup length determined for the two lower velocities at ambient temperature are also indicated on the graph, showing the same range of values and thus making the analysis consistent. The dark core length grows with the inlet velocity regardless the pressure in the chamber and the ambient temperature under consideration. When  $L_{Dc}$  reaches

FIGURE 7. Methodology for post processing the breakup length,  $H \equiv L_{Bu}$ .FIGURE 8. Probability density function (pdf) of  $L_{Bu}$  given in mm with  $T_{ch} = 293$  K.

zero, a gaz jet were observed during the injection. As for the calculation of  $L_{Bu}$  when  $V = 0.25$  m/s, increasing the pressure in the chamber slightly decreases the dark core length at  $T_{ch} = 293$  K. A clear conclusion cannot be drawn for the other inlet velocities. Switching the temperature of nitrogen from  $T_{ch} = 293$  K to  $T_{ch} = 323$  K shifts the values of  $L_{Bu}$  about 10 mm. Also, the cases  $P = 5.0$  MPa with  $V = 0.25$  m/s or  $V = 0.50$  m/s have values of  $L_{Bu}$  lower than expected compared to the cases with  $T_{ch} = 293$  K.

#### 4. Numerical simulations

The simulations presented thereafter have been performed using the parallel solver SiTCom-B (<https://www.coria-cfd.fr/index.php/SiTCom-B>) that solves the fully compressible Navier-Stokes equations for multi-species reacting flows. SiTCom-B is based

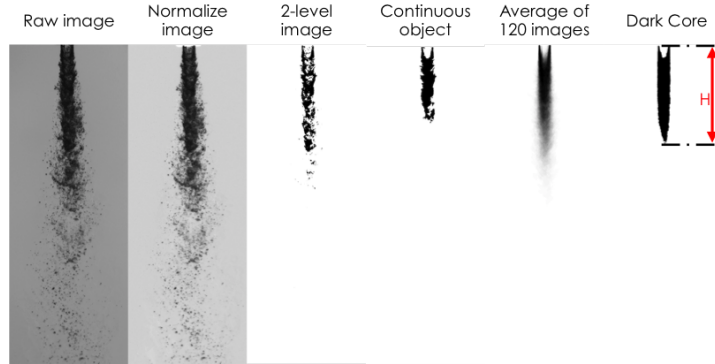


FIGURE 9. Methodology of post processing the dark core length,  $H \equiv L_{Dc}$ .

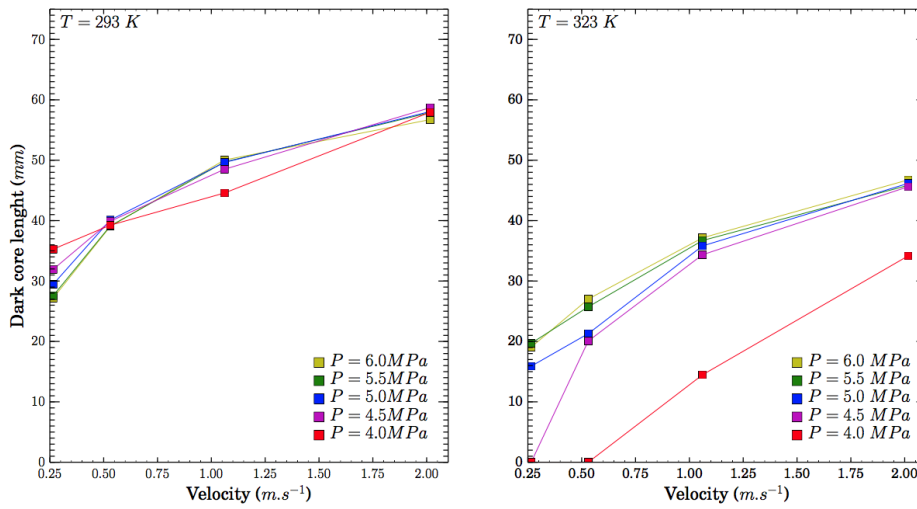


FIGURE 10. Dark core length plotted against the inlet velocity.

on an explicit finite volumes scheme written for cartesian grids. The convective terms are computed resorting to a fourth-order centered skew-symmetric-like scheme [6] and the diffusive terms are computed using a fourth-order centered scheme. Time integration is performed using a fourth order Runge-Kutta method [7, 8]. The spatial discretization scheme is augmented by a blend of second- and fourth-order artificial dissipation terms [9–11]; these terms are added in order to suppress spurious oscillations and damp high-frequency modes. A sensor based on pressure and density gradients insures that the artificial dissipation is applied only to zones of interest, *i.e.* where either strong gradients of density or pressure, which cannot be resolved by the mesh, are detected [12]. The Navier-Stokes characteristic boundary condition formalism developed by Petit et al. [12] in the context of fluids featuring real-gas effects is used.

To simulate supercritical flows, SiTComb-B numerical code features real gas thermodynamic [13, 14]. A cubic equation of state (EoS) replaces the classical ideal gas law,



linking the pressure,  $p$ , temperature,  $T$  and density,  $\rho$ , as

$$p = \frac{\rho R_u T}{W - b\rho} - \frac{\rho^2 a\alpha(T, \omega)}{W^2 + ubW\rho + wb^2\rho^2}, \quad (4.1)$$

where  $R_u$  is the universal gas constant and  $W$  the molecular weight of the fluid mixture,  $W = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} X_k W_k$  with  $X_k$  the mole fraction of species  $k$  (among  $N_{\text{sp}}$  species).  $u$  and  $w$  in Eq. (4.1) are chosen according to the desired model of EoS, i.e. the Peng-Robinson (PR) EoS in this study ( $u = 2$  and  $w = -1$  [15]). The Van der Waals mixing rules are used for mixtures:  $a\alpha = \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} X_i X_j \sqrt{\alpha_i \alpha_j} a_i a_j (1 - \kappa_{ij})$  and  $b = \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} X_i b_i \cdot \kappa_{ij}$  is the binary interaction coefficient. The constants  $a_i$  (attractive forces),  $b_i$  (co-volume of particles) and  $\alpha_i$  are determined from universal relationships [15], involving the critical temperature and partial pressure of species  $k$ ,  $T_{c_k}$  and  $p_{c_k}$ , respectively, as well as the acentric factor, which quantifies the deviation from the spherical symmetry in a molecule.

SiTComb-B numerical code [12, 16, 17] solves the fully coupled conservation equations of momentum, species and energy. In what follows,  $u_i$  is the velocity component in the  $x_i$ -axis (spatial coordinate),  $t$  is the time and  $\rho$  the density.

- Assuming a newtonian fluid and neglecting the volume forces, the equation of momentum is written:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (4.2)$$

with the stress tensor,  $\sigma_{ij}$ , expressed with the viscous tensor,  $\tau_{ij}$ , and pressure,  $p$ :  $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij}$ .  $\delta_{ij}$  is the Kronecker symbol. In Eq. (4.2), the viscous tensor is given by

$$\tau_{ij} = \left( \kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.3)$$

where  $\mu$  denotes the molecular dynamic viscosity and  $\kappa$  the bulk viscosity, which depends on the local properties of the fluid. In this study, the bulk viscosity is neglected and  $\kappa = 0$ .

- The mass conservation equation for species  $k$  in a pool of  $N_{\text{sp}}$  species is written:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho(u_j + V_{k,j})Y_k) = 0, \quad (4.4)$$

where  $Y_k$  is the mass fraction of species  $k$  and  $\rho = \sum_{k=1}^{N_s} \rho Y_k$ .  $V_{k,j}$  is the  $j^{\text{th}}$  component of the diffusion velocity  $\mathbf{V}_k$  of species  $k$ .

- The energy equation is written for the total non chemical energy ( $E$ ), i.e. the sum of sensible energy and kinetic energy, as

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j E) = \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i), \quad (4.5)$$

The heat flux vector required in Eq. (4.5) for a multi-component flow is given by

$$\mathbf{q} = \lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} h_{s,k} Y_k \mathbf{V}_k. \quad (4.6)$$

$\lambda$  is the thermal conductivity of the mixture and  $h_{s,k}$ , the sensible enthalpy of species  $k$ . Classical techniques used to evaluate transport properties (viscosity,  $\mu$ , and thermal conductivity,  $\lambda$ ) are replaced by accurate high-pressure relations proposed by Chung *et*

al. [18], which extends the Chapman-Enskog theory by introducing a dense-fluid correction. Neglecting the baro-diffusion effects, the expression for diffusion velocity of species  $k$  in the mixture, which appears in Eq. (4.4) and (4.6), is written as,

$$\mathbf{V}_k = - \sum_{l=1}^{N_{sp}} D_{kl} \nabla X_l, \quad (4.7)$$

with  $D_{kl}$ , the multi-component diffusion coefficients, and  $X_l$ , the mole fraction of species  $l$ . A high-pressure correction is applied to the evaluation of  $D_{kl}$  [19].

The case under study from the REFINE experiment corresponds to a supercritical injection of ethane into nitrogen at  $V = 1.0$  m/s,  $T_{ch} = 323$  K and  $P = 6.0$  MPa. The modeling of the two-dimensional target configuration is shown in Fig. 11 where ethane is injected from the left to the right. A 1/7th power law for the inlet velocity of ethane is used to mimic the mean velocity profile in a turbulent pipe flow. The computational domain is

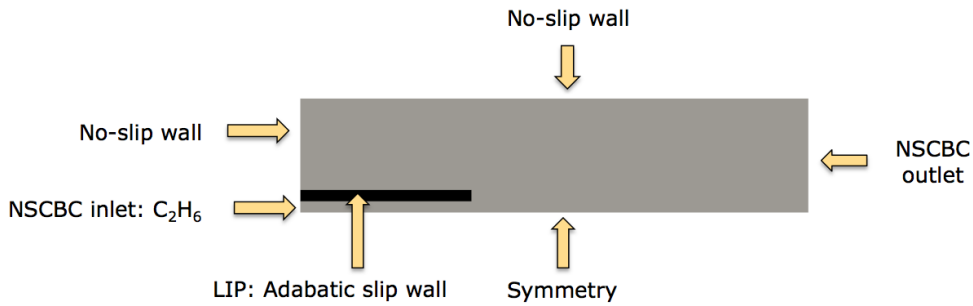


FIGURE 11. Target configuration with boundary conditions.

$45h$  long in the axial direction and extends over  $10h$  in the transverse direction, with  $h$ , the injector lip. A constant mesh size of  $\Delta_x = 50 \mu\text{m}$  is used. And finally simulations are carried out with a mesh which contains 180.000 cells. The instantaneous fields of pressure, velocities and ethane mass fraction are provided in Fig. 12. The background pressure of 6.0 MPa is well recovered by simulations and a mixing layer between the ambient nitrogen and ethane develops naturally. The impact of the boundary condition at the top of the domain of calculation (no-slip wall) has an unexpected impact on the flow development, promoting a backward velocity and artificially thickening the mixing layer. Consequently, the average field of ethane (Fig. 13) exhibits an experimental spreading angle ( $\theta_S^{Exp} \approx 0.11$  rad) wider than in the simulation ( $\theta_S^{Num} \approx 0.09$  rad). Statistics have been recorded for 10 convective times, i.e.  $10T_{conv}$  with  $T_{conv} = 90$  ms.

## 5. Conclusions

A new fully instrumented experimental test-bench has been developed at CORIA lab to study the injection of inert fluids under supercritical conditions. In this study, Ethane is injected into a cold or warm environment of Nitrogen. The knowledge of the behavior of those fluids has been detailed. Results for the breakup length and the spreading angle are in agreement with the literature. It has been shown that the temperature of the ambient fluid played a major role in jet disintegration when pressure exceeds the critical pressure of the injected fluid. In case of an ambient temperature higher than the critical

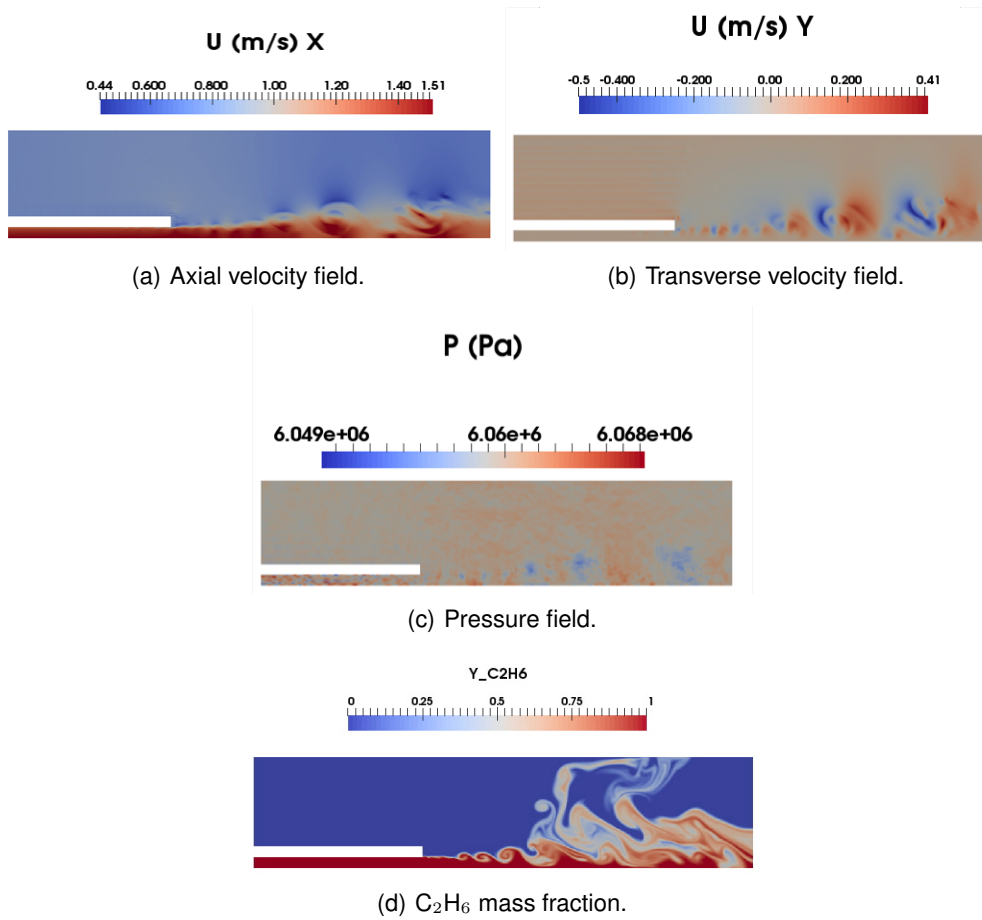
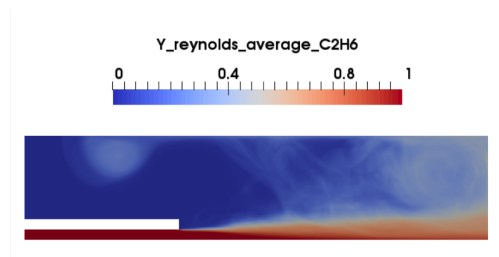
FIGURE 12. Instantaneous fields at  $t = 10T_{conv}$ .

FIGURE 13. Reynolds average field of ethane.

temperature of injected fluids a diffuse mixing process occurs for low discharge velocities. For a higher injection velocities, a process of atomization appears but with a larger spatial distribution of drops. These results were obtained by shadowgraphy and diffused backlight illumination that gave complementary information. The numerical simulation performed for the supercritical case exhibited a shorter spreading angle compared to the value from experiment, certainly because of the modeling of the outlet on side. Also,

a fully three-dimensional geometry with a modeling comprising a multiphase approach should be performed to come closer to the real configuration.

## Acknowledgments

Financial support has been provided by the German Research Foundation (Deutsche Forschungsgemeinschaft – DFG) in the framework of the Sonderforschungsbereich Transregio 40. Computational resources have been provided by the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS).

The research project REFINE (Real-gas Effects on Fluid Injection: a Numerical and Experimental study) is supported by the ANR (Agence Nationale de la Recherche) under the Grant No. ANR-13-BS09-0007.

## References

- [1] VAN KONYNENBURG, P. AND SCOTT, R. (1980). Critical lines and phase equilibria in binary van der waals mixtures. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **298**(1442), 495–540.
- [2] BELLAN, J. (2000). Supercritical (and subcritical) fluid behaviour and modeling : drops, streams, shear, and mixing layers, jets, and sprays. *Prog. Energy Combust. Sci.*, **26**, 329–366.
- [3] CHEHROUDI, B., TALLEY, D., MAYER, W., BRANAM, R. AND SMITH, J. (2003). *Understanding injection into high pressure supercritical environments*. Tech. rep., DTIC Document.
- [4] MAYER, W. AND TELAAR, J. (2002). Investigation of breakup of turbulent cryogenic variable-density jets. *Atomization and Sprays*, **12**(5&6).
- [5] DUMOUCHEL, C. (2008). On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams. *Exp. Fluids*, **45**, 371–422.
- [6] DUCROS, F., FERRAND, V., NICLOUD, F., WEBER, C., DARRACQ, D., GACHERIEU, C. AND POINSOT, T. (1999). Large-eddy simulation of the shock/turbulence interaction. *J. Comput. Phys.*, **152**(2), 517–549.
- [7] JIANG, G. AND SHU, C. (1996). Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comput. Phys.*, **126**, 73–85.
- [8] GOTTLIEB, S. AND SHU, C. (1998). Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Math. Comput.*, **67**(221), 73–85.
- [9] TATSUMI, S., MARTINELLI, L. AND JAMESON, A. (1995). Flux-limited schemes for the compressible Navier-Stokes equations. *AIAA J.*, **33**(2), 252–261.
- [10] SWANSON, R. AND TURKEL, E. (1992). On central-difference and upwind schemes. *J. Comput. Phys.*, **101**(2), 292–306.
- [11] SWANSON, R., RADESPIEL, R. AND TURKEL, E. (1998). On some numerical dissipation schemes. *J. Comput. Phys.*, **147**(2), 518–544.
- [12] PETIT, X., RIBERT, G., DOMINGO, P. AND LARTIGUE, G. (2013). Large-eddy simulation of supercritical fluid injection. *J. Supercritical Fluids*, **84**, 61–73.
- [13] RIBERT, G., TAIEB, D., PETIT, X., LARTIGUE, G. AND DOMINGO, P. (2012). Simulation of supercritical flows in rocket-motor engines: application to cooling channel and injection system. *EUCASS Book Series*, **4**, 205–226.
- [14] RIBERT, G., PETIT, X. AND DOMINGO, P. (2017). High-pressure methane-oxygen flames. Analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state. *J. Supercritical Fluids*, **121**, 78–88.

- [15] POLING, B., PRAUSNITZ, J. AND O'CONNELL, J. (2001). *The properties of gases and liquids*. 5th edn. McGraw Hill.
- [16] BOUHERAOUA, L., DOMINGO, P. AND RIBERT, G. (2017). Large eddy simulation of a supersonic lifted jet flame: Analysis of the turbulent flame base. *Combust. Flame*, **179**, 199–318.
- [17] GUVEN, U. AND RIBERT, G. (2017). Large-eddy simulation of supersonic H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion: application to a rocket-like igniter. *J. Propul. Power* (*in press*).
- [18] CHUNG, T., AJLAN, M., LEE, L. AND STARLING, K. (1988). Generalized multi-parameter corresponding state correlation for polyatomic, polar fluid transport properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **27**, 671–679.
- [19] TAKAHASHI, S. (1974). Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficient of gases at high pressures. *J. Chem. Eng. Jap.*, **7**, 417–420.



# Table des figures

1.1	(a) : Lanceur récupéré de SpaceX en 2016 [Crédit : SpaceX]. (b) : Décollage de la fusée New Shepard de Blue Origin lors d'un vol d'essai en janvier 2017 [Crédit : Blue Origin]. (c) : Fusée Atea-1 de RocketLab avec son fondateur Peter Back [Crédit : RocketLab USA].	10
1.2	(a) : 22 Aout 2014, échec de récupération d'un lanceur Falcon 9 équipé de parachutes [Crédit : KWTX-TV]. (b) : Falcon 9 , les étapes de lancement d'une mission avec réatterrissage du lanceur [Crédit : SpaceX].	11
1.3	Projet X : Starman en route vers Mars [Crédit : SpaceX].	12
1.4	(a) : 1er étage de la fusée Falcon 9 [Crédit : SpaceX]. (b) : Falcon 9 à gauche et Falcon Heavy à droite [Crédit : SpaceX]. (c) : Ariane 5 [Crédit :ESA].	14
1.5	Les différents cycles de fonctionnement d'un moteur-fusée [5].	16
1.6	Le moteur Merlin [Crédit : SpaceX].	17
1.7	(a) : Test d'allumage du moteur Vinci dans une installation du DLR [8]. (b) : Le moteur Vinci [Crédit : ESA].	18
1.8	Injecteur Pintle [17].	20
1.9	Expérience d'un jet sous-détendu supersonique [32].	24
1.10	Premier vol du X-43A en novembre 2004 (Mach=9,8) [50].	25
1.11	Simulation aux grandes échelles du brûleur de Cheng réalisée avec SiTCom-B [63].	26
1.12	Représentation schématique d'un injecteur coaxial [83].	28
1.13	Visualisation du jet central d'azote entouré par de l'hélium à deux pressions différentes [91].	29
1.14	Champ instantané de l'émission du radical OH* dans une flamme supercritique H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> [94].	30
1.15	Représentation schématique d'une flamme jet (a) sous-critique et (b) supercritique [93].	30
1.16	Schéma de l'expérience de Singla [94] (à gauche). Champs du maximum d'émission de OH* (à droite).	31
1.17	Configuration de la simulation du moteur fusée à petite échelle de Urbano et al. [140].	33
1.18	Champs de température de l'étude de Urbano et al. [140].	33
2.1	Spectre d'énergie de la turbulence en fonction de la longueur d'onde $k$ [168].	53
2.2	Principe de l'approche du Smagorinsky dynamique [173].	55
2.3	Schéma récapitulatif pour le calcul de la vitesse de diffusion dans SITCom-B (en vert, les développements réalisés au cours de cette thèse).	57
2.4	Comparaison SITCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à $P = 1$ bar, avec l'approche "LIGHT_SPECIES".	58

2.5	Comparison SITCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à $P = 1$ bar, avec le modèle multicomposante. . . . .	59
2.6	Comparison SITCom-B / REGATH d'une flamme stoechiométrique 1D à $P = 1$ bar, avec le modèle multicomposante et l'approche "LIGHT_SPECIES". . . . .	60
2.7	Rapport des temps de simulation entre les approches "MULTICOMPONENT" et "MIXTURE_AVERAGE" en fonction du nombre d'espèces. . . . .	62
3.1	Modélisation de l'allumeur de VINCI. . . . .	68
4.1	Description du cas test proposé par Ruiz et al. [109]. . . . .	93
4.2	Conditions initiales de la simulation. . . . .	94
4.3	Champs instantanés des vitesses axiales et transversales, de la densité et de la fraction massique de l'oxygène obtenus avec les 3 différents solveurs. . . . .	98
4.4	Champs moyens et fluctuations de la vitesse axiale suivant 4 coupes verticales. . . . .	100
4.5	Champs moyens et fluctuation de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	102
4.6	Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales. . . . .	103
4.7	Champs moyens et fluctuations de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales. . . . .	104
4.8	Champs instantanés de la vitesse axiale sur 4 maillages. . . . .	105
4.9	Champs instantanés de la vitesse transversale sur 4 maillages. . . . .	106
4.10	Champs instantanés de la fraction massique de l'oxygène sur 4 maillages. . . . .	106
4.11	Champs instantanés de la densité sur 4 maillages. . . . .	107
4.12	Champs moyens et fluctuation de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	108
4.13	Champs moyens et fluctuation de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	110
4.14	Champs moyens et fluctuation de la température suivant les 4 coupes verticales. . . . .	111
4.15	Champs moyens et fluctuation de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales. . . . .	112
4.16	Champs moyens et fluctuation de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	114
4.17	Champs moyens et fluctuations de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	115
4.18	Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales. . . . .	116
4.19	Champs moyens et fluctuations de la fraction massique de l'oxygène suivant les 4 coupes verticales. . . . .	117
4.20	Schéma cinétique de Boivin [182] <sup>a</sup> Les unités sont : mol, s, cm <sup>3</sup> , kJ et K. <sup>b</sup> Coefficient de Chaperon H <sub>2</sub> : 2.5, H <sub>2</sub> O : 16.0, 1.0 pour les autres espèces. Troe falloff avec $F_c = 0.5$ . <sup>c</sup> Coefficient de Chaperon H <sub>2</sub> : 2.5, H <sub>2</sub> O : 12.0, 1.0 pour les autres espèces. <sup>d</sup> Coefficient de Chaperon H <sub>2</sub> : 2.5, H <sub>2</sub> O : 6.0, 1.0 pour les autres espèces. Troe falloff avec $F_c = 0.265 \exp(-T/94) + 0.735 \exp(-T/1756) + \exp(-T/5182)$ . . . . .	118
4.21	Etude de l'effet Soret à partir de la modélisation cas #0 pour une flamme 1D prémélangée. . . . .	119
4.22	Impact de la modélisation non-idéale du flux de diffusion pour une flamme 1D prémélangée. . . . .	120
4.23	Impact de la modélisation multicomposante pour une flamme 1D prémélangée. . . . .	121
4.24	Impact de la correction en pression du coefficient de diffusion binaire des espèces pour une flamme 1D prémélangée. . . . .	121
4.25	Impact de la modélisation "NIT" sur une flamme 1D prémélangée. . . . .	122



4.26	Température de flamme en fonction de l'étirement pour différentes pressions [100]. . . . .	123
4.27	Champs de température. (a) : couche de mélange non-réactif avec un patch de température, (b) : flamme H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> supercritique obtenue après deux temps de parcours ( $T_{FT}$ ). . . . .	124
4.28	Champs instantanés du dégagement de chaleur et de la température du cas réactif avec le modèle cas #0 (1/2). . . . .	125
4.29	Champs instantanés des fractions massiques de l'eau et de l'hydrogène moléculaire du cas réactif avec le modèle cas #0 (2/2). . . . .	125
4.30	Champs instantanés du dégagement de chaleur et de la température du cas réactif avec le modèle "NIT" (1/2). . . . .	126
4.31	Champs instantanés des fractions massiques de l'eau et de l'hydrogène moléculaire du cas réactif avec le modèle "NIT" (2/2). . . . .	126
4.32	Evolution spatiale, d'une des parties les plus fines de la flamme. . . . .	127
4.33	Champs de l'indice de flamme pour deux modélisations différentes (-1 : flamme prémélangée pauvre, 0 : flamme de diffusion et 1 : flamme prémélangée riche).. . . . .	127
4.34	Courbes des fraction massiques et des productions des espèces en fonction de $y^*$ (cas #0). . . . .	128
4.35	Courbes des fraction massiques et des productions des espèces en fonction de $y^*$ (NIT). . . . .	129
4.36	Champs moyens des fractions massiques des espèces H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> et H <sub>2</sub> O suivant les 4 coupes verticales. . . . .	131
4.37	Champs moyens et fluctuations de la vitesse axiale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	132
4.38	Champs moyens et fluctuations de la vitesse transversale suivant les 4 coupes verticales. . . . .	133
4.39	Champs moyens et fluctuations de la température suivant les 4 coupes verticales. . . . .	134

# Liste des tableaux

1.1	Récapitulatif des lancements pour l'année 2016. . . . .	9
1.2	Récapitulatif des principaux injecteurs de moteur fusée (1/2). . . . .	21
1.3	Récapitulatif des principaux injecteurs de moteur fusée (2/2). . . . .	22
2.1	Synthèse des différentes définitions d'énergies et d'enthalpies. . . . .	42
2.2	Comparaison statistique des corrections haute pression. . . . .	61
2.3	Comparaison statistique des flux de diffusion, entre les modélisation "MIXTURE_AVERAGE" et "MULTICOMPONENT". . . . .	61
2.4	Comparaison des temps de simulation pour 100 itérations avec $T$ , le temps de simulation sans l'effet thermo-diffusif et $T_{bis}$ avec l'effet thermo-diffusif. . . . .	62
4.1	Les différents maillages et leurs caractéristiques. . . . .	95
4.2	Stratégie de modélisation utilisée dans les différents codes de calcul pour le cas non- réactif. $F_c$ représente la correction en pression du coefficient de diffusion des espèces binaire. . . . .	96



# Bibliographie

- [1] V. Lemigean. Pourquoi ariane 6 reste la meilleure arme face à spacex. *AIAA Papers*, 2000.
- [2] J. Benedicto, S.E. Dinwiddy, G. Gatti, R. Lucas, and M.Lugert. Galileo : Satellite system design and technology developments. *European Space Agency*, November, 2010.
- [3] J.C. Feraud. Guerre des fusées : Ariane satellisée par spacex. *Libération*, Janvier, 2018.
- [4] SpaceX. *WIKIPEDIA*.
- [5] O. Haidn. Advanced rocket engines. In *Advances on propulsion technology for high-speed aircraft*, pages 1–40, 2004. Available from <http://www.rto.nato.int>.
- [6] A. Iannetti, N. Girard, and D. Tchou-kien. Prometheus, a lox/lch4 reusable rocket engine. *7<sup>th</sup> European Conf. for Aero. Sci. (EUCASS)*, 2017.
- [7] G. Sutton and O. Biblarz. *Rocket propulsion elements*. Wiley-Interscience, 7th edition, 2001.
- [8] G. Langel, T. Mattstedt, P. Luger, and S. Ziegenhagen. Test verification of the cryogenic Vinci thrust chamber. In *Paper 2006-4903, 42st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Sacramento, USA, July 2006*. AIAA, 2003.
- [9] C. Hensel, D. Wiedmann, W. Oechslein, and J. Gorgen. Ignition aspects for the Vinci thrust chamber. *38th AIAA JPC, AIAA Paper*, pages No. 2002–4008, 2002.
- [10] G. Frenken, E. Vermeulen, F. Bouquet, and B. Sanders. Development status of the ignition system for Vinci. *38th AIAA JPC, AIAA Paper*, pages No. 2002–4330, 2002.
- [11] W. Oechslein. Status of the Vinci combustion chamber vacuum ignition tests. *40th AIAA JPC, AIAA Paper*, pages No. 2004–3531, 2004.
- [12] V. Yang, M. Habiballah, J. Hulka, and M. Popp. *Liquid Rocket Thrust Chamber : Aspect of Modeling, Analysis and Design*. AIAA, 2004.
- [13] National Aeronautic Space Administration. *Liquid Rocket Engine Injectors*. AIAA, 1976.
- [14] B. Vasques and O. Haidn. Effect of pintle injector element geometry on combustion in a liquid oxygen/liquid methane rocket engine. *7<sup>th</sup> European Conf. for Aero. Sci. (EUCASS)*, 2017.
- [15] K. Sakaki, T. Funahashi, S. Nakaya, M. Tsue, R. Kanai, K. Suzuki, T. Inagawa, and T. Hiraiwa. Longitudinal combustion instability of a pintle injector for a liquid rocket engine combustor. *Combust. Flame*, 194 :115 – 127, 2006.

- [16] A. Jose. Pintle injector. *Pintle Injector Blogspot*, 2016.
- [17] G.A. Dressler and J.M Bauer. Trw pintle engine heritage and performance characteristics. *AIAA Paper*, pages 1–22, 2000.
- [18] D. Fischer. Pintle injector rocket engines. *National Space Society Blog*, 2010.
- [19] P. Alliot, C. Fiorentino, and Edeline. Progress of the Vinci engine system development. *47th Propulsion Joint Specialist Conference, AIAA*, 2011.
- [20] G. Lacaze. *Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques*. PhD thesis, University of Toulouse, France, 2009.
- [21] G. Frenken, E. Veermeulen, and F. Bouquet. Development status of the ignition system for Vinci. *38th Propulsion Joint Specialist Conference, AIAA*, 2002.
- [22] K.R. McManus, F. Aguerre, B. Yip, and S. Candel. Analysis of the ignition sequence of a multiple injector combustor using plif imaging. *Non-intrusive combustion diagnostics*, pages 714–725, 1993.
- [23] D. Ballal and A. Lefebvre. Ignition of liquid fuel sprays at subatmospheric pressures. *Combust. Flame*, 31 :115–126, 1978.
- [24] V. Quintilla, M. Cazelen, R. Lecourt, and G. Lavergne. Experimental and numerical study to predict spray ignition. *Proc. of 17th Annual Conference on liquid Atomization and Spray Systems*, 2001.
- [25] V. Schmidt, D. Klimenko, and M. Oswald. Preliminary results of test case "a" laser ignition tests for coaxial  $gh_2/go_2$ -injection. *Tech. Rep. DLR-RA-TE-RP-004*, 2003.
- [26] E. Larsson. Simulation of flow and combustion in  $h_2/o_2$  rocket thrust chambers using a 2d spray combustion method. *Master's thesis, Chalmers University of Technology. Göteborg.*, 2012.
- [27] M. Masquellet, S. Menon, S. Jin, and R. Friedrich. Simulation of unsteady combustion in a lox- $gh_2$  fueled rocket engine. *Aero Sci. Tech.*, 13 :466–474, 2008.
- [28] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinso, and M. Oswald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame*, 156 :1166–1180, 2009.
- [29] K. Schäfer, C. Böhm, H. Kronmüller, and H. Zimmermann. Development of p4.1 altitude simulation for Vinci engine. *Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress*, pages 1–10, 2005.
- [30] S. Crist, P. Sherman, and D. Glass. Study of the highly underexpanded sonic jet. *AIAA Journal*, 4 :68–71, 1966.
- [31] C. Donaldson and R. Snedeker. A study of free jet impingement. Part 1. Mean properties of free and impinging jets. *J. Fluid Mech.*, 45 :281–319, 1971.
- [32] V. Zapryagaev, V. Kornilov, and A. Lokotko. Spatial structure of flow in the initial section of a super-sonic underexpanded jet. *Academy of Sciences USSR.*, 1988.

- [33] T. Adamson and J. Nicholls. On the structure of jets from highly underexpanded nozzles into still air. *J. Aero. Sci.*, 26 :16–24, 1959.
- [34] C. Lewis and D. Carlson. Normal shock location in under expanded sonic jet. *AIAA J.*, 2 :776–777, 1964.
- [35] V. Zapryagaev, V. Kornilov, and A. Lokotko. Experimental investigation of shock wave structure and streamwise vorticities in supersonic jet. *4th symposium on aerodynamics of space vehicle.*, 2001.
- [36] A. Antsupov. Properties of underexpanded and overexpanded supersonic gas jets. *Sovier Physics : technical Physics* 19, 26 :16–24, 1974.
- [37] S. Dash and D. Wolf. Analysis of turbulent underexpanded jets. i - parabolized navier-stokes model. *AIAA J.*, 23 :776–777, 1985.
- [38] P. Cumber, M. Fairweather, S. Falle, and J. Giddings. Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets. *J. Fluids Eng.*, 117(4) :599–604, 1995.
- [39] T. Cheng and K. Lee. Numerical simulations of underexpanded supersonic jet and free shear layer using weno schemes. *Int.J. Heat Fluid*, 26 :157–173, 2005.
- [40] A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids*, 29 :2152, 1986.
- [41] M. P. Martin, E. M. Taylor, M. Wu, and V. G. Weirs. A bandwidth-optimized WENO scheme for effective direct numerical simulation of compressible turbulence. *J. Comput. Phys.*, 220 :270–289, 2006.
- [42] D. Taieb, G. Ribert, and A. Hadjadj. Shock focusing simulations using an optimized high-order WENO numerical scheme. *AIAA J.*, 48 :1739–1747, 2010.
- [43] D. Taieb and G. Ribert. DNS and LES of supersonic channel flow with isothermal walls. *J. Propul. Power*, 29 :1064–1075, 2013.
- [44] S. Evans, J. Schexnayder, and H. Lee Beach. Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows. *NASA STI/Recon Technical Report*, 78(4) :649–664, 1978.
- [45] S. Burrows and A. Kurlov. Supersonic combustion of hydrogen in a vitiated air stream using stepped wall injection. *7th Propulsion Joint Specialist Conference, AIAA*, 1971.
- [46] T. Cheng, J. Wehrleyer, R. Pitz, O. Jarrett, and G. Northan. Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame. *Combust. Flame*, 99 :157–173, 1994.
- [47] A. Cutler, P. Danehy, and R. Springer. Coherent anti-stokes raman spectroscopic thermometry in a supersonic combustor. *AIAA Paper*, 41 :1127–1138, 2003.
- [48] W. Waidmann, F. Alfff, M. Bôhm, W. Clauss, and M. Oschwald. Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber. *Space Technology*, 15 :421–429, 1995.

- [49] D. Chaitanya, J. Pranatharthikaran, G. Retaureau, and S. Menon. Numerical and experimental studies of flame stability in a cavity stabilized hydrocarbon-fueled scramjet. *AIAA P.*, pages 2265–2287, 2011.
- [50] S. Berry, K. Daryabeigi, and K. Wurster. Boundary-layer transition on x-43a. *J. Spacecraft and Rockets*, 47 :922–934, 2010.
- [51] I. Ebrahimi and R. Kleine. The nozzle fluid concentration fluctuation field in round turbulent free jets and jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 16 :1711, 1977.
- [52] H. Ebrahimi. Cfd validation for scramjet combustor and nozzle flows. *AIAA Paper*, pages 1840–1877, 1993.
- [53] J. Edwards, J. Boles, and R. Baurle. Large-eddy/reynolds-averaged navier–stokes simulation of a supersonic reacting wall jet. *Combust. Flame*, 159 :1127–1138, 2012.
- [54] P. Keistler, R. Gaffney, and HA. Hassan. Turbulence modeling for scramjet applications. *AIAA Paper*, pages 5382–5399, 2005.
- [55] R. Baurle, G. Alexopoulos, G. Hassan, and J. Drummod. An assumed joint- beta pdf approach for supersonic turbulent combustion. *Joint Propulsion Conference and Exhibit, 28th, Nashville*, 1994.
- [56] H. Mobus, P. Gerlinger, and D. Bruggemann. Scalar and joint scalar-velocity-frequency monte carlo pdf simulation of supersonic combustion. *Combust. Flame*, 132, 1994.
- [57] A. Dauplain, B. Cuenot, and T. Poinso. Large eddy simulation of a supersonic hydrogen-air diffusion flame. *Proceedings of Complex effects in Large Eddy Simulation*,, pages 9–20, 2005.
- [58] J. Norris and J. Edwards. Large-eddy simulation of high-speed, turbulent diffusion flames with detailed chemistry. *AIAA Paper*, 1997.
- [59] E. Gonzalez-Juez, A. Kerstein, R. Ranjan, and S. Menon. Advances and challenges in modeling high-speed turbulent combustion in propulsion systems. *Prog. Energy Combust. Sci.s*, 60 :26–67, 2011.
- [60] V. Sabel’Nikov, B. Deshaies, and L.F. Figueira da Silva. Revisited flamelet model for nonpremixed combustion in supersonic turbulent flows. *Combust. Flame*, 114(3) :577–584, 1998.
- [61] W. P. Jones and M. Kakhi. Pdf modeling of finite rate chemistry effects in turbulent nonpremixed jet flames. *Combust. Flame*, 115(1/2) :210–229, 1998.
- [62] J. Xu and B. Pope. Pdf calculations of turbulent non premixed flames with local extinction. *Combust. Flame*, 123 :281–307, 2000.
- [63] L. Bouheraoua, P. Domingo, and G. Ribert. Interactions between shocks and flame structure in a supersonic lifted jet flame. *Combust. Flame*, 2016.
- [64] Arthur H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Taylor and Francis, 1989.
- [65] B.E. Gelfand. Advances and challenges in modeling high-speed turbulent combustion in propulsion systems. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 22 :201–265, 1996.

- [66] H. Hirahara and M. Kawahashi. Experimental investigation of viscous effects upon a breakup of droplets in high-speed air flow. *Exp. Fluids*, 13 :423–428, 1992.
- [67] N.I Kolev. Fragmentation and coalescence dynamics in multiphase flows. *Exp. Thermal Fluid Sci.*, 6 :211–251, 1993.
- [68] G.M. Faeth. Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. *23rd Symposium on Combustion*, pages 1345–1352, 1990.
- [69] A.S. Alkidas. The influence of size-distribution parameters on the evaporation of polydisperse dilute sprays. *National Aerospace Laboratories, India.*, 24 :1913–1923, 1981.
- [70] A. Vié. *Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée*. PhD thesis, University of Toulouse, France, 2010.
- [71] A. Gourara, F. Roger, H.-Y. Wang, and J.-M. Most. Assessment of ignition hazard in turbulent flammable gas mixers combining a lagrangian approach and large-eddy simulation. *Combust. Flame*, 144(3) :592–604, 2006.
- [72] J. Xia, H. Zhao, A. Megaritis, KH. Luo, A. Cairns, and L. Ganippa. Inert-droplet and combustion effects on turbulence in a diluted diffusion flame. *Combust. Flame*, 160(2) :225–231, 2013.
- [73] S. Zhu, D. Roekaerts, and A. Pozarlik. Eulerian-lagrangian rans model simulations of the nist turbulent methanol spray flame. *Combustion Science and Technology*, 187 :1110–1138, 2015.
- [74] J.Y. Chen. A eulerian pdf scheme for les of nonpremixed turbulent combustion with second-order accurate mixture fraction. *Combust. Theory and Modeling*, 11(5) :675–695, 2008.
- [75] L. Guichard, J. Réveillon, and R. Hauguel. Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion : a turbulent injection procedure. *Flow Turbulence and Combustion*, 73(2) :95–116, 2005.
- [76] R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two-phase flows, Lecture series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [77] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :253–281, 2006.
- [78] P. Van Konynenbur and R. Scott. Critical lines and phase equilibria in binary van der waals mixtures. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 298 :495–540, 1980.
- [79] R. Dahms and J. Oefelein. Liquid jet breakup regimes at supercritical pressures. *Combust. Flame*, 162 :3648–3657, 2015.
- [80] V. Yang. Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :925–942, 2000.
- [81] V. Giovangigli and L. Matuszewski. Supercritical fluid thermodynamics from equations of state. *Physica D*, 241 :649–670, 2012.
- [82] G. Lacaze and J. Oefelein. A non-premixed combustion model based on flame structure analysis at supercritical pressures. *Combust. Flame*, 159 :2087–2103, 2012.



- [83] A. Schumaker and F. Driscoll. Coaxial turbulent jet flames : Scaling relations for measured stoichiometric mixing lengths. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :1655–1662, 2009.
- [84] J. Bellan. Direct numerical simulation of a high-pressure turbulent reacting temporal mixing layer. *Combust. Flame*, 176 :245–262, 2017.
- [85] M. Oswald, J J Smith, R Branam, J Hussong, A Schik, B Chehroudi, and D Talley. Injection of fluids into supercritical environments. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :49–100, 2006.
- [86] M. Oswald and M. Micci. Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atom. Sprays*, 12(1-3) :91–106, 2002.
- [87] M. Oswald and A. Schik. Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous raman scattering. *Exp. Fluids*, 27(6) :497–506, 1999.
- [88] W. Mayer, A. Shick, B. Vielle, C. Chauveau, I. Gokalp, D. Talley, and R. Woodward. Atomization and breakup of cryogenic propellants under high-pressure subcritical and supercritical conditions. *J. Propul. Power*, 14(5) :835–842, 1998.
- [89] W. Mayer and H. Tamura. Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *J. Propul. Power*, 12(6) :1137–1147, 1996.
- [90] R. Branam and W. Mayer. Characterization of cryogenic injection at supercritical pressure. *J. Propul. Power*, 19(3) :342–355, 2003.
- [91] W. Mayer, J. Telaar, R. Branam, G. Schneider, and J. Hussong. Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat Mass Transfer*, 39 :709–719, 2003.
- [92] M. Habiballah, L. Vingert, Traineau J., and P. Vuillermoz. A test bench for cryogenic combustion research, 1996. 47th Int. Astro. Cong., Beijing, China.
- [93] S. Candel, M. Juniper, S. Singla, P. Scouffaire, and C. Rolon. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :161–192, 2006.
- [94] G. Singla, P. Scouffaire, C. Rolon, and S. Candel. Planar laser-induced fluorescence of oh in high-pressure cryogenic lox/gh<sub>2</sub> jet flames. *Combust. Flame*, 144(1) :151 – 169, 2006.
- [95] L. Cutrone, M. Ihme, and M. Herrmann. Modeling of high-pressure mixing and combustion in liquid rocket injectors. *Proceedings of the Summer Program*, pages 269–288, 2006.
- [96] L. Cutrone, P. De Palma, G. Pascazio, and M. Napolitano. A rans flamelet–progress-variable method for computing reacting flows of real-gas mixtures. *Comput. Fluids*, 39 :485–498, 2010.
- [97] T. Park. A les and rans simulations of cryogenic liquid nitrogen jets. *J. Supercritical Fluids*, 72 :232–247, 2012.
- [98] T. Schmitt, L. Selle, A. Ruiz, and B. Cuenot. Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets. *AIAA J.*, 48(9) :2133–2144, 2010.
- [99] A. Ern and V. Giovangigli. Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames. *Combust. Theory and Modeling*, 6 :349–378, 2002.

- [100] G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, and S. Candel. Counterflow diffusion flames of general fluids : Oxygen/hydrogen mixtures. *Combust. Flame*, 154 :319–330, 2008.
- [101] V. Giovangigli, L. Matuszewski, and F. Dupoirieux. Detailed modeling of planar transcritical  $H_2$ - $O_2$ - $N_2$  flames. *Combust. Theor. Model.*, 15(2) :141–182, 2011.
- [102] A. Juanos and W. Sirignano. Pressure effects on real-gas laminar counterflow. *Combust. Flame*, 181 :54 – 70, 2017.
- [103] W. Wang, H. Huo, and V. Yang. Counterflow diffusion flame of oxygen and n-alkane hydrocarbons at subcritical and supercritical conditions. *Combust. Sci. and technology*, pages 37–41, 2015.
- [104] R. Miller, K. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen. *J. Fluid Mech.*, 436 :1–39, 2001.
- [105] N. Okong’o, K. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulations of  $O_2/H_2$  temporal mixing layers under supercritical conditions. *AIAA J.*, 40(5) :914–926, 2002.
- [106] J. Oefelein. Thermophysical characteristics of shear-coaxial LOX- $H_2$  flames at supercritical pressure. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2929–2937, 2005.
- [107] E. Taskinoglu and J. Bellan. A posteriori study using a dns database describing fluid disintegration and binary-species mixing under supercritical pressure : heptane and nitrogen. *J. Fluid Mech.*, 645 :211–254, 2010.
- [108] G. Borghesi and J. Bellan. A priori and a posteriori investigations for developing large eddy simulations of multi-species turbulent mixing under high-pressure conditions. *Phys. Fluid*, 27 :0351175, 2015.
- [109] A. Ruiz, G. Lacaze, J. Oefelein, R. Mari, B. Cuenot, L. Selle, and T. Poinso. Numerical benchmark for high-Reynolds-number supercritical flows with large density gradients. *AIAA J.*, 54(5) :1445–1460, 2016.
- [110] J. Oefelein and V. Yang. Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *J. Propul. Power*, 14(5) :843–857, 1998.
- [111] J. Oefelein. Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :229–252, 2006.
- [112] N. Zong and V. Yang. Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. *Phys. Fluids*, 16(12) :4248–4261, 2004.
- [113] N. Zong, H. Meng, S.-Y. Hsieh, and V. Yang. A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :193–227, 2006.
- [114] T. Schmitt, L. Selle, A. Ruiz, and B. Cuenot. Large-eddy simulation of supercritical pressure round jets. *AIAA J.*, 48 :2133–2144, 2010.
- [115] X. Petit, G. Ribert, P. Domingo, and G. Lartigue. Large-eddy simulation of supercritical fluid injection. *J. Supercritical Fluids*, 84 :61–73, 2013.

- [116] X. Petit, G. Ribert, and P. Domingo. Framework for real-gas compressible reacting flows with tabulated thermochemistry. *J. Supercritical Fluids*, 101 :1–16, 2015.
- [117] H. Müller, C. Niedermeier, J. Matheis, M. Pfitzner, and S. Hickel. Large-eddy simulation of nitrogen injection at trans- and supercritical conditions. *Physics of Fluids*, 28, 2016.
- [118] J. Oefelein and V. Yang. Simulation of high-pressure spray field dynamics. recent advances in spray combustion : Spray combustion measurements and model simulation. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 171 :263–304, 1996.
- [119] N. Zong and V. Yang. Near-field flow and flame dynamics of lox/methane shear-coaxial injector under supercritical conditions. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2309–2317, 2007.
- [120] M. Masquelet, S. Menon, Y. Jin, and Friedrich R. Simulation of unsteady combustion in a lox-gh<sub>2</sub> fueled rocket engine. *Aerospace. Sci. Tech.*, 13 :466–474, 2009.
- [121] G. Ribert, P. Domingo, X. Petit, N. Vallée, and JB. Blaisot. Modelling and simulations of high-pressure practical flows. *AIAA book Series.*, 2018.
- [122] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thevenin. Laminar premixed hydrogen / air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :1901–1908, 2000.
- [123] G. Ribert, P. Domingo, and L. Vervisch. Analysis of sub-grid scale modeling of the ideal-gas equation of state in hydrogen–oxygen premixed flames. *Proc. Combust. Inst.*, pages 1–7, 2018.
- [124] G. Ribert, X. Petit, and P. Domingo. High-pressure methane-oxygen flames. Analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state. *J. Supercritical Fluids*, 121 :78–88, 2017.
- [125] C. Sensiau. Simulations numeriques des instabilites thermoacoustiques dans les chambres de combustion annulaires. *PhD Thesis*, 2008.
- [126] F. Cheuret. Instabilités thermo-acoustiques de combustion haute-fréquence dans les moteurs fusées. *PhD Thesis*, 2006.
- [127] T. Lieuwen and V. Yang. Combustion instabilities in gas turbine engines. operational experience, fundamental mechanisms and modeling. *Progres in Astronautics and Aeronautics*, 2005.
- [128] A. Birbaud, D. Durox, D. Ducruix, and S. Candel. Dynamics of free jets submitted to upstream acoustic modulations. *Physics of Fluids*, 19, 2007.
- [129] S. Ducruix, T. Schuller, D. Durox, and S. Candel. Combustion dynamics and instabilities : Elementary coupling and driving mechanisms. *J. Propulsion Power*, 19 :722–743, 2003.
- [130] F. Boudy, D. Durox, T. Schuller, and S. Candel. Nonlinear mode triggering in a multiple flame combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 33 :1121–1128, 2011.
- [131] T. Poinso. Prediction and control of combustion instabilities in real engines. *Proc. Combust. Inst.*, 36 :1–28, 2018.

- [132] M. Bauerheim, JF. Parmentier, P. Salas, F. Nicoud, and T. Poinso. An analytical model for azimuthal thermoacoustic modes in an annular chamber fed by an annular plenum. *Combust. Flame*, 161(5) :1374 – 1389, 2014.
- [133] M. Bauerheim, M. Gonzalens, and T. Poinso. A theoretical study of mean azimuthal flow and asymmetry effects on thermo-acoustic modes in annular combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(3) :3219 – 3227, 2015.
- [134] C. Priere, L. Gicquel, and A. Kaufmann. Large eddy simulation predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows. *J. of Turbulence*, 5 :1–30, 2004.
- [135] C. D. Pierce and P. Moin. Large eddy simulation of a confined coaxial jet with swirl and heat release. In *29th AIAA Fluid Dynamics Conference, AIAA 98-2892*, Albuquerque, NM June 15-18, 1998.
- [136] W.-W. Kim, S. Menon, and H. C. Mongia. Large-eddy simulation of a gas turbine combustor flow. *Combust. Sci. and Tech.*, 143 :25–62, 1999.
- [137] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans, and K. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.*, 570 :17–46, 2007.
- [138] L. Selle, F. Nicoud, and T. Poinso. Actual impedance of nonreflecting boundary conditions : Implications for computation of resonators. *AIAA JOURNAL*, 42 :958–964, 2004.
- [139] G. Staffelbach, L. Gicquel, L. Bourdier, and T. Poinso. Large eddy simulation of self excited azimuthal modes in annular combustors. *Proc. Combust. Instit.*, pages 2909–2916, 2009.
- [140] A. Urbano, L. Selle, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Schmitt, and T. Poinso. Exploration of combustion instability triggering using large eddy simulation of a multiple injector liquid rocket engine. *Combust. Flame*, 169 :129–140, 2016.
- [141] A. Urbano, Q. Douasbin, L. Selle, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Schmitt, and S. Candel. Study of flame response to transverse acoustic modes from the les of a 42-injector rocket engine. *Proc. Combust. Inst.*, 36 :2633–2639, 2016.
- [142] U. Guven and G. Ribert. Large-eddy simulation of supersonic hydrogen/oxygen combustion : Application to a rocketlike igniter. *J. Propulsion Power*, 34(2) :291–307, 2018.
- [143] U. Guven and G. Ribert. Impact of non-ideal transport modeling on supercritical flow simulation. *Proc. Combust. Inst.*, 2018.
- [144] X. Petit. *Etude de l'interaction cinétique chimique/turbulence dans une flamme cryotechnique Lox/CH<sub>4</sub>*. PhD thesis, Coria, 2014.
- [145] Van Der Waals. *The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density*. J. of Statistical Physics, 1979.
- [146] M. Graboski and T. Daubert. A modified soave equation of state for phase equilibrium calculation. *Indust. Eng. Chem. Process Design and Development*, 17 :443–450, 1978.

- [147] V.D. Peng and D. Robinson. A new two-constant equation of state. *J. of Industrial Engineering Chemistry*, 15, 1976.
- [148] J.M Prausnitz R.C Reid. The properties of gases and liquids. *McGraw-Hill.*, 1987.
- [149] T. Poinsoot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R. T. Edwards, Inc., 2005.
- [150] X. Petit. *Annexe A : Etude de l'interaction cinétique chimique/turbulence dans une flamme cryotechnique LOx/CH4*. PhD thesis, Coria, 2014.
- [151] T.H. Chung, M. Ajlan, L.L. Lee, and K.E. Starling. Generalized multiparameter corresponding state correlation for polyatomic, polar fluid transport properties. *Indust. Eng. Chem. Res.*, 27 :671–679, 1988.
- [152] S. Mathur, P.K. Tondon, and S.C. Sexana. Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases. *Molecular Physics*, 12 :569–579, 1967.
- [153] E.N Fuller and J.C Giddings. A comparison of methods for predicting gaseous diffusion coefficients. *Industrial and engineering chemistry*, 3 :222–227, 1965.
- [154] CHEMKIN 4.1. *Chemkin : Theory Manual*. Reaction design, 2006.
- [155] S. Takahashi. Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficients of gases at high pressure. *J. of chemical Engineering of Japan*, 7 :417–420, 1975.
- [156] V.I. Kurochkin S.F. Makarenko and G.A. Tirskii. Transport coefficients and the onsager relations in the kinetic theory of dense gas mixture. *J. of Applied Mechanics and Technical Physics*, 25 :218–225, 1984.
- [157] H. Van Beijeren and M.H. Ernst. The modified enskog equation. *JPhysica*, 68 :437–456, 1973.
- [158] H. Van Beijeren and M.H. Ernst. The modified enskog equation for mixture. *JPhysica*, 70 :225–242, 1973.
- [159] V. Giovangigli L. Matuszewski and F. Dupoirieux. Detailed modeling of planar transcritical h<sub>2</sub>-o<sub>2</sub>-n<sub>2</sub> flames. *Combust. Theory Model.*, 15 :141–182, 2011.
- [160] P. Gaillard V Giovangigli and L.Matuszewski. A diffuse interface LOx/hydrogen transcritical flame model. *Combust. Theory Model.*, 20 :486–520, 2016.
- [161] A. Leahy-Dios and A. Firoozabadi. Unified model for nonideal multicomponent molecular diffusion coefficients. *AIChE journal*, 53 :2932–2939, 2007.
- [162] K. Harvard and J. Bellan. An all-pressure fluid drop model applied to a binary mixture : heptane in nitrogen. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 43 :645–654, 2004.
- [163] G. Dixon-Lewis. Flame structure and flame reaction kinetics.ii. transport phenomena in multi-component systems. *Proceedings of the royal society*, 307 :111–135, 1968.
- [164] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser, 1999.

- [165] R. Hilbert F. Tap H. El-Rabii and D. Thévenin. Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 30 :61–117, 2003.
- [166] C.F. Curtiss and J.O. Hirschfelder. Transport properties of multicomponent gas mixture. *J. of chem. phy.*, 17 :6, 1949.
- [167] L. Mochick and E. Mason. *J. of Chemical Physics*, 1961.
- [168] Charles Hirsch. *Numerical Computation of internal and external flows*. Second edition edition, 2007.
- [169] J. Bousinesq. Theorie de l'écoulement tourbillonnant. *Memoire Pres. Acad. Sci.*, page 23 :46, 1877.
- [170] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. 3rd edition, 2012.
- [171] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Rev.*, 91(3) :99–164, 1963.
- [172] M. Germano. Turbulence : the filtering approach. *J. Fluid Mech.*, 238 :325–336, 1992.
- [173] P. Cocks, W. Dawes, and R. Steward. The influence of turbulence-chemistry interaction modelling for supersonic combustion. *AIAA Paper*, 12 :306–315, 2011.
- [174] F. Ducros, F. Laporte, T. Soulères, V. Guinot, P Moinat, and B. Caruelle. High-order fluxes for conservative skew-symmetric-like schemes in structured meshes : application to compressible flows. *J. Comput. Phys.*, 161 :114–139, 2000.
- [175] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the Euler equations by finite volume method using Runge-Kutta time stepping schemes, 1981. *AIAA P.* 1259 :1281.
- [176] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101 :104–129, 1987.
- [177] L. Bouheraoua. Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersonique. *PhD Thesis*, 2014.
- [178] B. Franzelli, B. Fiorina, and N. Darabiha. A tabulated chemistry method for spray combustion. 34 :1659 – 1666, 12 2013.
- [179] P. Saxena and F. Williams. Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide. *Combust. Flame*, 145(1-2) :316–323, 2006.
- [180] G.A. Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 27(1) :1–31, 1978.
- [181] A. Dullemond and A. Johansen. *Numerical Method and Application-chapter 6 : Riemann solvers*. 2007.
- [182] P. Boivin, C. Jimenez, A. Sanchez, and F. Williams. An explicit reduced mechanism for H<sub>2</sub>-Air combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 33(1) :517–523, 2011.
- [183] P. Boivin, A. Dauplain, C. Jimenez, and B. Cuenot. Simulation of a supersonic hydrogen-air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry. *Combust. Flame*, 159 :1779–1790, 2012.

- [184] H. Meng and V. Yang. A unified treatment of general fluid thermodynamics and its application to a preconditioning scheme. *J. Comput. Phys.*, 189 :277–304, 2003.
- [185] K. Harstad and J. Bellan. High pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applications. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43 :645–654, 2004.
- [186] N. Okong’o and J. Bellan. High pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applications. *J. Fluid Mech.*, 464 :1–34, 2002.
- [187] E. Masi, J. Bellan, K. Harstad, and N. Okong’o. Multi-species turbulent mixing under supercritical-pressure conditions : modelling, direct numerical simulation and analysis revealing species spinodal decomposition. *J. Fluid Mech.*, 721 :578–626, 2013.
- [188] V. Giovangigli and L. Matuszewski. Numerical simulation of transcritical strained laminar flames. *Combust. Flame*, 159(2) :2829–2840, 2012.
- [189] J. Manin, M. Bardi, L. Pickett, R. Dahms, and J. Oefelein. Microscopic investigation of the atomization and mixing processes of diesel sprays injected into high pressure and temperature environments. *Fuel*, 134 :531–543, 2014.
- [190] E. Petersen, D. Kalitan, S. Simmons, G. Bourque, H. Curran, and J. Simmie. Methane/propane oxidation at high pressures : Experimental and detailed chemical kinetic modeling. *Proc. Combust. Inst.*, 31(1) :447–454, 2007.
- [191] G. Singla, P. Scoufflaire, C. Rolon, and S. Candel. Oh planar laser-induced fluorescence and emission imaging in high-pressure lox/methane flames. *J. Propul. Power*, 23(3) :593–602, 2007.
- [192] L. Pons, N. Darabiha, S. Candel, G. Ribert, and V. Yang. Mass transfer and combustion in transcritical non-premixed counterflows. *Combust. Theo. Model.*, 13 :57–81, 2009.
- [193] J. Oefelein and V. Yang. Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *J. Propul. Power*, 14 :843–857, 1998.
- [194] G. Ribert, D. Taieb, and V. Yang. Large-eddy simulation of a supercritical channel flow using a shock capturing numerical scheme. *Comput. Fluids*, 117 :103–113, 2015.
- [195] V. H. Huo and Yang. Supercritical lox/methane combustion of a shear coaxial injector. *AIAA*, pages 326–342, 2011.
- [196] M. Oswald, J.J. Smith, R. Branam, J. Hussong, A. Schick, B. Cheroudi, and D. Talley. Injection of fluids into supercritical environments. *Combust. Sci. Tech.*, 53 :49–100, 2006.
- [197] A. Cessou, O. Wequin, and D. Stepowski. Alteration of the irradiance field when performing laser diagnostics in corrugated liquid or supercritical jet. *ILASS- Europe Proc.*, pages 561–567, 2001.
- [198] G. Ribert, X. Petit, and P. Domingo. Simulation of supercritical fluid flows with tabulated chemistry. *Proc. Combust. Inst.*, 1 :1–1, 2014.
- [199] G. Ribert, D. Taieb, X. Petit, G. Lartigue, and P. Domingo. Simulation of supercritical flows in rocket-motor engines : application to cooling channel and injection system. *EUCASS Book Series*, 4 :205–226, 2012.

- [200] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 26 :27–34, 1996.
- [201] R. Bird and W. Stewart. Transport phenomena. pages 513–542, 1960.
- [202] J. Hirschfelder, C. Curtiss, and R. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. New York : Wiley edition, 1954.
- [203] S. Takahashi. Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficient of gases at high pressures. *J. Chem. Eng. Jap.*, 7 :417–420, 1974.
- [204] V.I. Kurochkin, S.F. Makarenko, and G.A. Tirskaa. Transport coefficients and the onsager relations in the kinetic theory of dense gas mixtures. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 25 :218–225, 1984.
- [205] A. Dadone and B. Grossman. Ghost-cell method for inviscid two-dimensional flows on cartesian grids. *AIAA J.*, 42 :2499–2507, 2004.
- [206] C. Merlin, P. Domingo, and L. Vervisch. Immersed boundaries in large eddy simulation of compressible flows. *Flow Turbul. Combust.*, 90 :29–68, 2013.
- [207] J. Ely and H. Hanley. Prediction of transport properties. 1. Viscosity of fluids and mixtures. *Indust. Eng. Chem. Fundam.*, 20(4) :323–332, 1981.
- [208] J. Ely and H. Hanley. Prediction of transport properties. 2. Thermal conductivity of pure fluids and mixtures. *Indust. Eng. Chem. Fundam.*, 22(1) :90–97, 1983.
- [209] D. Papamoschou and A. Roshko. The compressible turbulent shear layer : An experimental study. *J. Fluid Mech.*, 187 :453–477, 1988.
- [210] L. Raynal. Interface instability of a gaseous/liquid mixing. *PhD Thesis*, 1997.
- [211] M. Juniper. Structure and stabilization of cryogenic spray flames. *PhD Thesis*, 2001.
- [212] S. Menon. Large-eddy simulation of combustion dynamics and pollutant formation near lean blow out in gas turbine combustor. In *41th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 20-23 July, Huntsville*, 2003.
- [213] R. Mari, B. Cuenot, J-P. Rocchi, and L. Selle. Effect of pressure on hydrogen/oxygen coupled flame-wall interaction. *Combust. Flame*, 168(5) :409–419, 2016.
- [214] P. Gaillard. *Interfaces diffuses et flammes transcritiques LOX/H<sub>2</sub>*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2016.
- [215] N. Jaouen. An automated approach to derive and optimise reduced chemical mechanisms for turbulent combustion. *PhD Thesis*, 2017.
- [216] D. Duboc. Modélisation hybride de la chimie pour la simulation numérique de la combustion. *PhD Thesis*, 2017.
- [217] G. Singla, P. Scoufflaire, C. Rolon, and S. Candel. Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2921–2928, 2005.



