

Modélisation et simulation numérique de la combustion dans les moteurs-fusées : étude des flammes LOx/CH4

Florian Monnier

▶ **To cite this version:**

Florian Monnier. Modélisation et simulation numérique de la combustion dans les moteurs-fusées : étude des flammes LOx/CH4. Milieux fluides et réactifs. Normandie Université, 2023. Français. ⟨NNT : 2023NORMIR26⟩. ⟨tel-04427174⟩

HAL Id: tel-04427174

https://theses.hal.science/tel-04427174v1

Submitted on 30 Jan 2024

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.



HAL Authorization

Normandie Université

INSA INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES ROUEN NORMANDIE

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité **MECANIQUE DES FLUIDES, ENERGETIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION, ACOUSTIQUE**

Préparée au sein de l'**INSA Rouen Normandie**

Modélisation et simulation numérique de la combustion dans les moteurs-fusées : étude des flammes LOx/CH4.

Présentée et soutenue par

FLORIAN MONNIER

Thèse soutenue le 16/10/2023

devant le jury composé de :

M. SEBASTIEN DUCRUIX	DIRECTEUR DE RECHERCHE - CentraleSupélec	Rapporteur
M. LAURENT SELLE	DIRECTEUR DE RECHERCHE - IMFT Toulouse	Rapporteur
M. GUILLAUME DAYMA	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - Université d'Orléans	Membre
MME FLORE NABET	MAÎTRE DE CONFÉRENCES - Ecole polytechnique, Palaiseau	Membre
M. FREDERIC GRISCH	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - INSA de Rouen Normandie	Président du jury
M. GUILLAUME RIBERT	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - INSA de Rouen Normandie	Directeur de thèse

Thèse dirigée par **GUILLAUME RIBERT** (COMPLEXE DE RECHERCHE INTERPROFESSIONEL EN AEROTHERMOCHIMIE)

ED 591 PSIME

CORIA UMR 6614

Remerciements

Tout d'abord, je souhaiterais remercier les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux de thèse et le temps qu'ils ont accordé à la lecture de mon manuscrit. En particulier, je voudrais remercier les rapporteurs Sébastien Ducruix et Laurent Selle d'avoir pris le temps d'évaluer mon manuscrit dans le détail et pour leurs remarques pertinentes. Merci également à Frédéric Grisch d'avoir présidé ce jury ainsi qu'à Guillaume Dayma et Flore Nabet pour leurs questions enrichissantes.

Je tiens aussi à remercier la région Normandie pour avoir financé ma thèse, ainsi que l'INSA de Rouen et le laboratoire du CORIA sous la direction d'Armelle Cessou, pour m'avoir permis de réaliser ma thèse dans les meilleurs conditions possibles.

Ensuite, bien évidemment, je souhaite remercier chaleureusement mon directeur de thèse, Guillaume Ribert ! Merci Guillaume de m'avoir soutenu tout au long de cette aventure, qui n'a pas été sans péripéties (COVID-19 pour ne citer que cet exemple). Merci pour tous tes conseils, ta pédagogie, ta patience, mais aussi tes exigences. Merci de m'avoir permis de participer à différentes conférences, évènements riches de partage et d'émotions. En effet, si j'ai pu traverser l'Atlantique pour la première fois de ma vie et avoir l'opportunité de présenter mes travaux de thèse à Vancouver ou encore avoir la chance de perdre temporairement ma valise quelque part entre Rome et Naples, c'est en partie grâce à toi ! Je garderai de très bons souvenirs de nos voyages ensemble et de notre étroite collaboration pendant ces presque quatre années de thèse. Encore merci pour tout !

Je voudrais également remercier Luc Vervisch et Pascale Domingo de m'avoir donné quelques précieux conseils et pour leur disponibilité tout au long de ma thèse, même s'ils ne faisaient pas directement parti de mes encadrants.

Je voudrais aussi remercier tous les autres doctorants que j'ai pu côtoyer de près ou de loin, qu'ils viennent de la "team SiTCom-B", de la "team YALES 2" ou des équipes travaillant sur d'autres codes ou approches expérimentales, qui m'ont permis de passer un agréable moment au CORIA. En particulier, merci à Andréa, Huu-Tri et Camille, la première génération de doctorants avec qui j'ai eu l'occasion de partager beaucoup de très bons moments ! Vient ensuite le tour de la seconde génération, avec Florian K. ou encore Emilie avec qui j'ai eu le plaisir d'aller en Italie ou au Canada. Une pensée ensuite pour la troisième génération avec Quentin, Louis et Yoann, sans oublier les petits derniers que je n'ai pas eu l'occasion de côtoyer longtemps, comme Clément ou encore Ada. Merci à tous pour nos nombreux fous rires et repas bien copieux !

J'en profite aussi pour remercier les anciens doctorants du CORIA avec qui j'ai eu l'occasion d'échanger à diverses reprises durant ma thèse comme Bastien Duboc, Kévin Bioche ou encore Loïc Ruan ! Une pensée pour Pierre Bénard qui vient d'être papa, que je remercie vivement pour nos nombreux échanges autour de la thèse et en dehors !

Une pensée également pour Thibault, meilleur ami depuis maintenant si longtemps qu'on sent qu'on commence à se faire vieux, que j'ai envie de remercier pour tout ce qu'il a fait pour moi et ma famille jusqu'à présent. Merci "vieux", d'être toujours-là, même à distance, et toujours partant pour une partie de jeux-vidéos !

Je souhaiterais ensuite remercier ma famille, notamment mes parents, ma grand-mère, ainsi que mon frère Robin, pour avoir toujours cru en moi et m'avoir donné les moyens de réussir les projets que j'ai toujours entrepris. Malgré la distance qui sépare Rouen de Montpellier (ou Paris pour Robin), vous avez toujours su rester près de moi, merci !

Enfin, un grand merci à ma compagne Coralie pour son soutien sans faille, son amour et son implication dans mes choix de vie depuis que nous sommes ensemble ! Merci encore de m'avoir suivi "dans le nord" pour cette aventure et de ne pas m'avoir laissé seul en tête-à-tête avec ma thèse dès que je rentrais le soir à la maison, en particulier cette dernière année.

No, try not. Do or do not. There is no try.
Star Wars Episode V: The Empire Strikes Back,
Master Yoda to Luke Skywalker,
1980.

Table des matières

1 Introduction **13**

1.1 Contexte industriel . . . 14
1.1.1 Contexte historique et marché spatial . . . 14
1.1.2 Pourquoi le méthane ? . . . 16
1.1.3 Stratégie Européenne . . . 18
1.1.4 Moteurs et injecteurs . . . 22
1.1.4.1 Principe général de fonctionnement . . . 22
1.1.4.2 Les différents cycles . . . 26
1.1.4.3 Injecteurs . . . 27
1.2 Introduction à la simulation numérique de la combustion haute pression . . . 30
1.2.1 Le régime supercritique . . . 30
1.2.1.1 Fluide supercritique . . . 30
1.2.1.2 Injection supercritique transcritique et sous-critique . . . 31
1.2.1.3 Propriété d'un fluide proche du point critique . . . 32
1.2.1.4 Cas d'un mélange . . . 32
1.2.1.5 Difficultés liées à la modélisation d'un fluide supercritique . . . 33
1.2.2 Modélisation de la turbulence . . . 34
1.2.2.1 Introduction à la turbulence . . . 34
1.2.2.2 Les échelles de la turbulence . . . 35
1.2.2.3 RANS, LES, DNS . . . 36
1.2.3 Introduction de la chimie pour la combustion turbulente dans un code de calcul . . . 37
1.2.3.1 Mécanismes chimiques globaux . . . 38
1.2.3.2 Mécanismes chimiques réduits par méthode automatique . . . 39
1.2.3.3 Chimie tabulée . . . 39
1.2.3.4 HTTC (Hybrid Transported-Tabulated Chemistry) . . . 40
1.2.3.5 Intelligence artificielle . . . 41
1.3 État des connaissances sur la combustion haute pression en conditions moteurs-fusées . . . 42
1.3.1 Bancs expérimentaux haute pression . . . 42
1.3.2 Écoulements à haute pression . . . 45
1.3.2.1 Écoulements non réactifs . . . 45
1.3.2.2 Écoulement réactifs . . . 48
1.3.3 L'allumage . . . 54
1.3.4 Instabilités de combustion . . . 58

1.3.5 Stabilisation de flamme . . . 62
1.3.6 Flux de chaleur aux parois . . . 66
1.3.7 Suies . . . 67
1.4 Objectifs de la thèse . . . 70
1.5 Organisation du manuscrit . . . 71
1.6 Publications et conférences . . . 73
1.6.1 Publications . . . 73
1.6.2 Conférences . . . 73

2 Les équations de l'aérothermochimie en régime supercritique 75
2.1 Les équations de l'aérothermochimie . . . 76
2.1.1 Description d'un mélange . . . 76
2.1.2 Équation d'état . . . 76
2.1.2.1 Gaz parfait . . . 77
2.1.2.2 Gaz réel . . . 77
2.1.3 Propriétés thermodynamiques . . . 80
2.1.3.1 Basse pression . . . 80
2.1.3.2 Haute pression . . . 82
2.1.4 Propriétés de transport . . . 83
2.1.4.1 Potentiels de Lennard-Jones . . . 84
2.1.4.2 Viscosité . . . 85
2.1.4.3 Conductivité . . . 86
2.1.4.4 Cas d'un mélange . . . 87
2.1.4.5 Diffusivité des espèces . . . 88
2.1.5 Modèles de transport . . . 88
2.1.5.1 Modèle de Curtiss et Hirschfelder . . . 89
2.1.5.2 Modèle multicomposant . . . 90
2.1.6 Expression du potentiel chimique . . . 90
2.1.6.1 Approche gaz parfait . . . 90
2.1.6.2 Approche gaz réel . . . 91
2.1.7 Les équations bilans . . . 92
2.1.7.1 Équation de conservation de la masse . . . 92
2.1.7.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement . . . 92
2.1.7.3 Équation de conservation des espèces . . . 93
2.1.7.4 Équation de conservation de l'énergie . . . 93
2.2 Modélisation de la combustion turbulente . . . 93
2.2.1 Cinétique chimique . . . 93
2.2.1.1 Terme source de chaque espèce . . . 94
2.2.1.2 Terme source de chaque réaction . . . 94
2.2.1.3 Loi d'Arrhenius . . . 94
2.2.1.4 Constante d'équilibre . . . 94
2.2.2 Régimes de combustion . . . 95
2.2.2.1 Flamme de prémelange . . . 95
2.2.2.2 Flamme de diffusion . . . 97
2.2.2.3 Flamme partiellement prémelangée . . . 98

2.3 Extension des équations au formalisme LES . . . 98
2.3.1 Notion de filtrage en LES . . . 98
2.3.2 Taille de filtre . . . 99
2.3.3 Décomposition de Reynolds . . . 99
2.3.4 Filtrage de Favre . . . 100
2.3.5 Filtrage des equations de Navier-Stokes . . . 100
2.3.5.1 Équation de conservation de la masse filtrée . . . 100
2.3.5.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement filtrée . . . 100
2.3.5.3 Équation de conservation des espèces filtrées . . . 100
2.3.5.4 Équation de conservation de l'énergie filtrée . . . 101
2.3.6 Fermeture des équations de transport filtrées . . . 101
2.3.6.1 Tenseur des contraintes visqueuses . . . 101
2.3.6.2 Tenseur des contraintes de Reynolds . . . 101
2.3.6.3 Modélisation du flux de diffusion filtré . . . 106
2.3.6.4 Modélisation du flux de chaleur filtré . . . 107
2.3.6.5 Termes non résolus dans les équations de conservation des espèces et de l'énergie . . . 107
2.3.7 Modélisation du terme source chimique . . . 108
2.3.7.1 Approche quasi-laminaire . . . 108
2.3.7.2 Modèle d'épaississement de flamme (TFLES) . . . 108
2.3.7.3 Autres approches . . . 115
2.4 Le solveur SiTComB . . . 115
2.4.1 Présentation du code . . . 115
2.4.2 Estimation du pas de temps . . . 116

3 Simulation de la combustion CH_4/O_2 haute pression avec un nouveau mécanisme chimique réduit 117
3.1 Introduction . . . 117
3.1.1 Contexte . . . 117
3.1.2 État de l'art des mécanismes chimiques CH_4/O_2 . . . 118
3.1.3 Objectifs . . . 119
3.2 Mécanisme chimique réduit pour la combustion haute pression du couple CH_4/O_2 119
3.2.1 Réduction de la chimie avec ORCh . . . 119
3.2.1.1 Procédure avec ORCh . . . 119
3.2.1.2 Application de la procédure de réduction . . . 120
3.2.2 Cas-tests de validation . . . 121
3.2.2.1 Temps d'auto-allumage . . . 123
3.2.2.2 Flammes laminaires de prémélange . . . 123
3.2.2.3 Flammes de diffusion à contre-courant . . . 124
3.3 Interaction flamme-turbulence à haute pression . . . 125
3.3.1 Configuration et paramétrage numérique . . . 125
3.3.2 Évolution temporelle . . . 128
3.3.3 Effet de la chimie et de la thermodynamique . . . 130
3.3.4 Un nouvel outil pour détecter et mesurer automatiquement les fronts de flamme . . . 136

3.3.5 Temps de calcul (CPU) . . . 138
3.4 Conclusion . . . 140

4 Simulation numérique de la propagation de flammes CH_4/O_2 après allumage dans des milieux hétérogènes 141
4.1 Introduction . . . 141
4.1.1 Contexte . . . 141
4.1.2 Objectifs . . . 144
4.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation . . . 144
4.2.1 Paramétrage numérique et initialisation . . . 145
4.2.1.1 Première configuration : $U_{conv} = 0$ m · s^{-1} . . . 145
4.2.1.2 Deuxième configuration : $U_{conv} \neq 0$ m · s^{-1} . . . 146
4.2.2 Allumage . . . 146
4.2.2.1 Première configuration : $U_{conv} = 0$ m · s^{-1} . . . 146
4.2.2.2 Deuxième configuration : $U_{conv} \neq 0$ m · s^{-1} . . . 148
4.3 Résultats et discussion . . . 148
4.3.1 Première configuration : $U_{conv} = 0$ m · s^{-1} . . . 148
4.3.1.1 Résultats préliminaires . . . 148
4.3.1.2 Comparaison des mécanismes chimiques . . . 153
4.3.1.3 Régimes de flammes . . . 156
4.3.2 Deuxième configuration : $U_{conv} \neq 0$ m · s^{-1} . . . 160
4.4 Conclusion . . . 162

5 Simulation numérique d'une couche de mélange CH_4/O_2 turbulente à haute pression avec prise en compte d'effets non-idéaux de diffusion 165
5.1 Introduction . . . 166
5.1.1 Contexte . . . 166
5.1.2 Objectifs . . . 166
5.2 Configuration, paramétrage numérique et initialisation . . . 166
5.2.1 Configuration . . . 166
5.2.2 Paramétrage numérique . . . 168
5.2.3 Initialisation . . . 169
5.2.4 Calculs de statistiques . . . 169
5.3 Résultats et discussion . . . 170
5.3.1 Description de l'écoulement . . . 170
5.3.1.1 Évolution temporelle . . . 170
5.3.1.2 Champs instantanés . . . 171
5.3.2 Évaluation des modèles de sous-maille pour la LES . . . 171
5.3.2.1 Comparaison des champs instantanés . . . 171
5.3.2.2 Comparaison des profils moyens . . . 176
5.3.3 Évaluation des effets de diffusion non-idéaux . . . 180
5.3.3.1 Comparaison des champs instantanés . . . 189
5.3.3.2 Comparaison des profils moyens . . . 189
5.3.4 Évaluation des flux de diffusion idéaux et non-idéaux . . . 201
5.3.4.1 Comparaison sur le cas H150 . . . 201

5.3.4.2 Modélisation du flux de diffusion non-idéal par LES 208
5.4 Couche de mélange LOx/GCH$_4$ 208
5.4.1 Configuration et description de l'écoulement 208
5.4.2 Effets de la diffusion non-idéale 214
5.5 Vers l'inclusion des effets de diffusion non-idéale dans les écoulements réactifs . . 215
5.5.1 Présentation du cas 215
5.5.2 Stabilité du mélange CH$_4$/O$_2$ 216
5.5.3 Résultats et discussion 216
5.5.3.1 Comparaison des cas 216
5.5.3.2 Inclusion des effets de diffusion non-idéaux 218
5.5.3.3 Perspectives 221
5.6 Conclusion 222

6 Simulation numérique de la combustion CH$_4$/O$_2$ à haute pression en configuration *splitter-plate* avec un mécanisme chimique réduit 225
6.1 Introduction 225
6.1.1 Contexte 225
6.1.2 Objectifs 226
6.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation 227
6.2.1 Configurations 227
6.2.2 Paramétrage numérique 228
6.2.3 Initialisation et procédure de calcul 228
6.2.3.1 Initialisation 228
6.2.3.2 Procédure de calcul 229
6.3 Résultats et discussion 229
6.3.1 Description de l'écoulement 229
6.3.1.1 Champs instantanés 229
6.3.1.2 Dynamique de l'écoulement 235
6.3.2 Vers la simulation aux grandes échelles 239
6.3.2.1 Comparaison des champs instantanés 239
6.3.2.2 Profils des grandeurs moyennes 247
6.3.2.3 Longueur de flamme 259
6.3.2.4 Régimes de combustion 259
6.4 Conclusion 276

7 Conclusions et perspectives 279
7.1 Conclusions 279
7.2 Perspectives 282

A Expression des potentiels chimiques 287
A.1 Équation d'état avec approche gaz réel 287
A.2 Expression pour l'énergie interne massique e_k de l'espèce k 288
A.2.1 Expression pour l'énergie interne massique e du mélange 288
A.2.2 Expression de e_k 289
A.3 Expression de l'entropie massique s_k de l'espèce k 289

A.3.1 Expression de l'entropie massique s du mélange . . . 289
A.3.2 Calcul de s_k . . . 290
A.4 Expression de l'enthalpie libre de Gibbs g_k . . . 290
A.4.1 Calcul de g_k . . . 290
A.5 Calcul du potentiel chimique molaire adimensionné μ_k . . . 291
A.5.1 Expression de μ_k en fonction du volume massique v' . . . 291
A.5.1.1 Application dans le cas de l'équation d'état SRK . . . 291
A.5.2 Expression de μ_k en fonction de la masse volumique ρ . . . 292
A.5.3 Expression du terme $\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)$ . . . 292
A.5.3.1 Cas où $\kappa_{i,j} = 0$ . . . 292
A.5.3.2 Cas où $\kappa_{i,j} \neq 0$ . . . 293
A.5.4 Expression finale . . . 293
A.5.5 Applications . . . 294
A.5.5.1 Application au cas SRK . . . 294
A.5.5.2 Application au cas PR . . . 294

B Profils additionnels au chapitre 3 **295**
B.1 Trajectoires des simulations stochastiques avec ORCh . . . 295
B.2 Temps d'auto-allumage . . . 296
B.3 Flammes laminaires prémélangées libres de propagation . . . 296
B.4 Flammes de diffusion à contre-courant . . . 297

C Suppléments du chapitre 4 **303**
C.1 Compléments simulations à $P = 10$ MPa . . . 303
C.1.1 Simulation 3D du cas #1.1 . . . 303
C.1.2 Compléments simulations 2D . . . 304
C.2 Simulations à $P = 5.6$ MPa . . . 309
C.2.1 Configuration numérique . . . 309
C.2.2 Résultats . . . 310
C.3 Étude effets de maillage . . . 312
C.3.1 Présentation du cas . . . 312
C.3.2 Résultats et discussions . . . 313
C.3.2.1 Effets de maillage . . . 313
C.3.2.2 Effets du modèle TFLES . . . 316

D Suppléments du chapitre 5 **321**
D.1 Compléments comparaison H150 vs H30 . . . 321
D.1.1 Champs moyens . . . 321
D.1.2 Compléments des profils . . . 321
D.2 Compléments profils IT vs NIT . . . 333

E Suppléments du chapitre 6 **341**
E.1 Compléments de la simulation splitter-plate . . . 341
E.1.1 Champs moyens . . . 341
E.1.2 Profils moyens . . . 341

Bibliographie 359

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1 Contexte industriel 14
1.1.1 Contexte historique et marché spatial 14
1.1.2 Pourquoi le méthane ? 16
1.1.3 Stratégie Européenne 18
1.1.4 Moteurs et injecteurs 22
1.2 Introduction à la simulation numérique de la combustion haute pression 30
1.2.1 Le régime supercritique 30
1.2.2 Modélisation de la turbulence 34
1.2.3 Introduction de la chimie pour la combustion turbulente dans un code de calcul 37
1.3 État des connaissances sur la combustion haute pression en conditions moteurs-fusées 42
1.3.1 Bancs expérimentaux haute pression 42
1.3.2 Écoulements à haute pression 45
1.3.3 L'allumage 54
1.3.4 Instabilités de combustion 58
1.3.5 Stabilisation de flamme 62
1.3.6 Flux de chaleur aux parois 66
1.3.7 Suies 67
1.4 Objectifs de la thèse 70
1.5 Organisation du manuscrit 71
1.6 Publications et conférences 73
1.6.1 Publications 73
1.6.2 Conférences 73

Le marché spatial actuellement en pleine expansion voit son nombre d'acteurs croître constamment dans la sphère publique ou privée. Or, l'accès à l'espace ne peut se faire sans un lanceur (généralement une fusée) qui représente une part très importante du coût d'une opération spatiale. Afin de réduire ce coût, une idée est de récupérer le premier étage du lanceur afin de le réutiliser pour d'autres missions. La technologie rendue possible par Space X avec le moteur

Merlin équipant le lanceur Falcon 9 et fonctionnant avec le couple RP-1 [1]/oxygène, a incité les autres acteurs (Européens, Chinois, Russes) à se lancer dans la voie du moteur-fusée réutilisable. Pour répondre aux exigences du marché et rester compétitif, la prochaine génération de moteurs-fusées à propulsion liquide se doit d'être réutilisable, réallumable en vol et capable d'opérer à différents niveaux de poussées. Afin de répondre à cette demande, la majorité des acteurs du spatial ont fait le choix d'employer le couple méthane/oxygène pour équiper au moins le premier étage de leur lanceur, à l'image des Européens pour leur future génération de fusées après Ariane 6, appelée Ariane Next.

Or l'Europe qui a l'habitude d'utiliser le couple d'ergols hydrogène liquide et oxygène liquide, historiquement sur le moteur Vulcain 2 de la fusée Ariane 5, et maintenant sur le moteur Vulcain 2.1 de la fusée Ariane 6 à venir, doit revoir intégralement la conception d'un moteur fonctionnant au méthane. En effet, si le méthane offre bons nombres d'avantages en terme de stockage et de simplification d'architecture moteur par rapport à l'hydrogène du fait de ses caractéristiques, la maîtrise de la combustion du méthane à haute pression se révèle être un challenge particulièrement difficile à relever. C'est dans cette perspective que s'inscrit cette thèse qui porte sur l'étude par la simulation numérique de la combustion dans les moteurs-fusées avec le couple méthane/oxygène.

1.1 Contexte industriel

1.1.1 Contexte historique et marché spatial

Historiquement, la course à l'espace a été lancée par les deux superpuissances s'opposant lors de la guerre froide : les États-Unis d'Amérique et l'Union Soviétique. Cette rivalité donna naissance à de nombreuses avancées technologiques militaires et civiles (propulsion, aéronautique, télécommunications, GPS, etc.). L'Europe, avec en particulier la France, n'a pas tardé à s'imposer comme une puissance spatiale sur la scène internationale. Peu à peu, d'autres pays se sont lancés à la conquête de l'espace comme le Japon, la Chine, l'Iran, Israël et d'autres encore. La Fig. 1.1 montre par exemple la répartition des lancements orbitaux en 2021 entre les différents pays.

Désormais ce ne sont pas uniquement des États qui financent les programmes spatiaux mais également des acteurs privés qui prennent une part de plus en plus importante sur le marché spatial. L'intérêt pour l'espace grandissant, qu'il s'agisse pour la science (étude et compréhension de l'univers, exploration spatiale, colonisation de Mars et de la Lune), la géopolitique, des questions de sécurité, la stratégie militaire ou des questions économiques (accès aux ressources sur d'autres planètes ou lunes par exemple), le nombre d'acteurs n'en est qu'augmenté et donc le marché en devient de plus en plus compétitif. Le record de lancements orbitaux annuel a notamment été atteint en 2021 avec 146 lancements. Le précédent record remontait à 1967 avec 139 lancements.

Par ailleurs, la miniaturisation des satellites, avec l'apparition des nano-satellites, permet en un seul lancement d'en mettre toute une constellation en orbite, réduisant ainsi les coûts de lancement et ouvrant le marché à de nouveaux acteurs. La Fig. 1.2 montre l'évolution du

1. Le RP-1 (*Rocket Propellant 1* ou *Refined Petroleum 1*) est une forme de kérosène spécialement raffiné en vue d'une utilisation comme combustible liquide stockable pour lanceurs spatiaux.

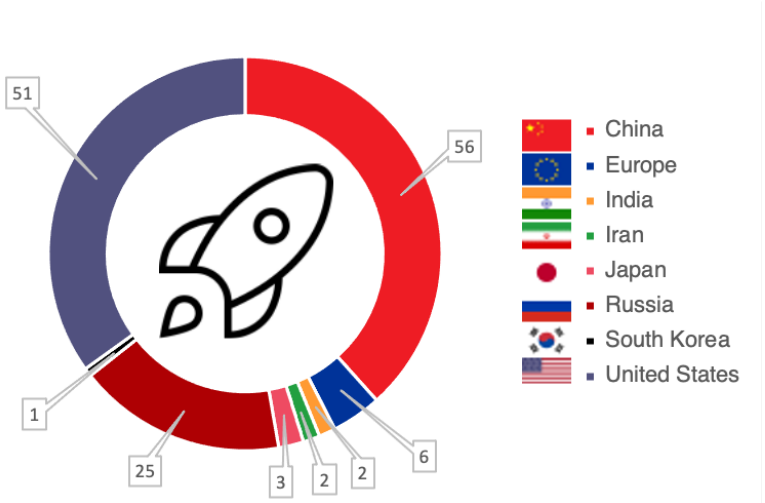


FIGURE 1.1 – Répartition des lancements orbitaux en 2021 entre pays.

nombre d'objets mis en orbite depuis 1957. On voit clairement une augmentation fulgurante de nombres d'objets mis en orbite dans le monde au cours des dernières années.

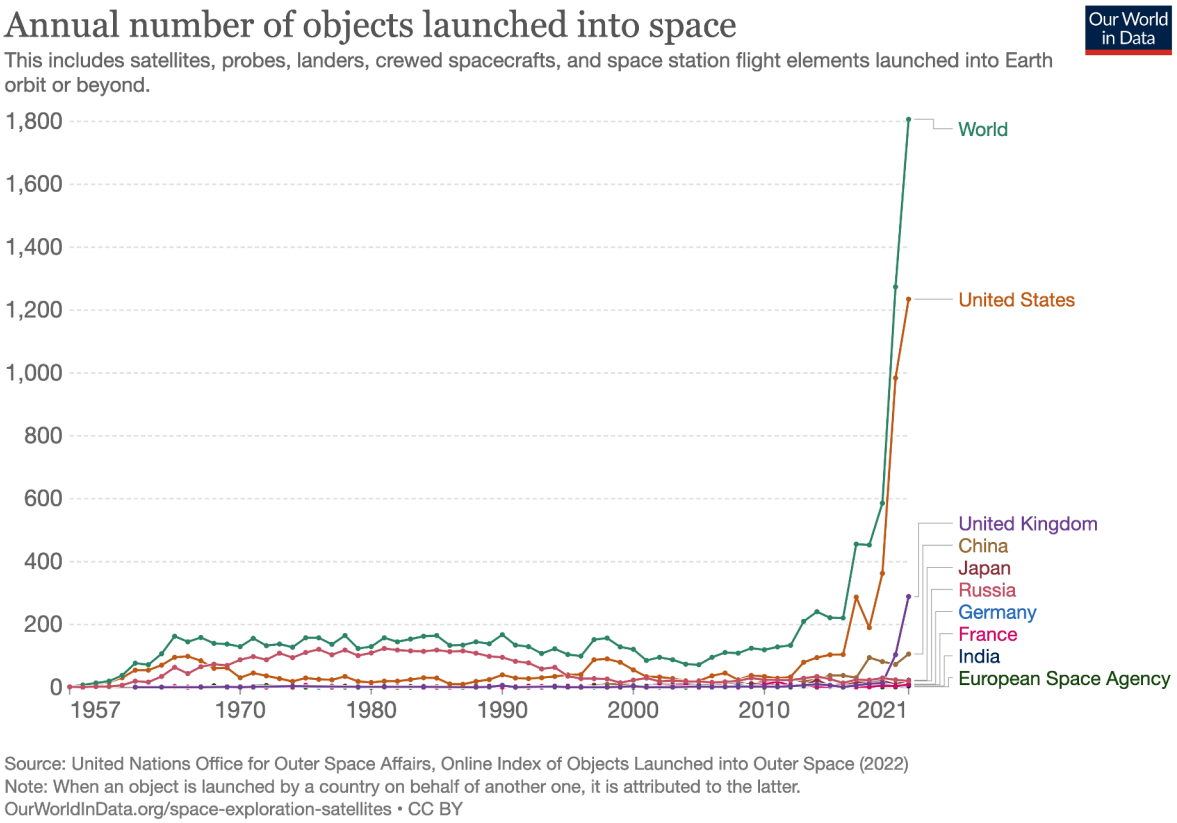


FIGURE 1.2 – Évolution du nombre d'objets envoyés dans l'espace. Source : United Nations Office for Outer Space Affairs.

Or, l'accès à l'espace ne peut se faire que grâce à un moyen d'échapper à la gravité terrestre

en emportant des charges lourdes avec lui : les lanceurs. Une compétition rude entre les différents acteurs du spatial est donc à l'œuvre aujourd'hui pour être celui qui disposera du lanceur le plus performant, rentable et sûr (faible taux d'échec). Une idée est de disposer d'un moteur-fusée réutilisable, afin de réduire considérablement les coûts de fabrication et donc de réduire d'autant le coût d'une opération impliquant un lanceur (mise en orbite d'un satellite par exemple). Cette idée a été initiée par SpaceX et démontrée par sa faisabilité en pratique dès Avril 2016 avec le lanceur Falcon 9 (voir Fig. 1.3).



FIGURE 1.3 – Atterrissage avec succès de la Fusée Falcon 9 de SpaceX le 8 Avril 2016 sur la plateforme offshore 'Of Course I Still Love You' située à environ 300 km de la base de lancement Cap Canaveral en Floride.

D'autres acteurs ont ensuite fait le choix de suivre le mouvement afin de rester compétitif, comme par exemple la société Américaine Blue Origin avec la fusée New Glenn, la Chine avec la fusée Longue Marche 8, l'Europe à travers la société ArianeGroup et l'agence spatiale Européenne (ESA) avec la prochaine génération de fusée Ariane nommée Ariane Next ou encore la Russie avec la fusée Amour. Le point commun à toutes ces fusées de nouvelle génération est d'être propulsée (au moins pour le premier étage) grâce au couple d'ergols LOx/CH_4 (L $\equiv$ Liquide).

1.1.2 Pourquoi le méthane ?

Un bon moyen de comparer les performances de différents couples d'ergols est de comparer leur impulsion spécifique, I_{sp}, définie comme la durée pendant laquelle un kilogramme de propergol produit la poussée nécessaire pour soulever une masse d'un kilogramme dans le champ

gravitationnel terrestre :

$$I_{sp} = \frac{F}{\dot{m}_e g_0} \ , \tag{1.1}$$

où F désigne la poussée du lanceur, $\dot{m}_e$ le débit massique des gaz éjectés par le lanceur et g_0 la constante de gravitation terrestre. Ainsi, plus l'impulsion spécifique est grande, plus un lanceur peut se propulser pour une quantité d'ergols donnée. On peut également définir l'impulsion spécifique dans le vide $I_{vac} = I_{sp} g_0$. Si on compare maintenant la valeur de l'impulsion spécifique dans le vide pour différents couples d'ergols à une pression fixée dans la chambre de combustion comme le fait la Fig. 1.4, on voit bien que le couple LOx/H_2 propose clairement la valeur d'impulsion spécifique dans le vide la plus importante pour une large gamme de rapports de mélange. Le couple LOx/CH_4 arrive toutefois en seconde position.

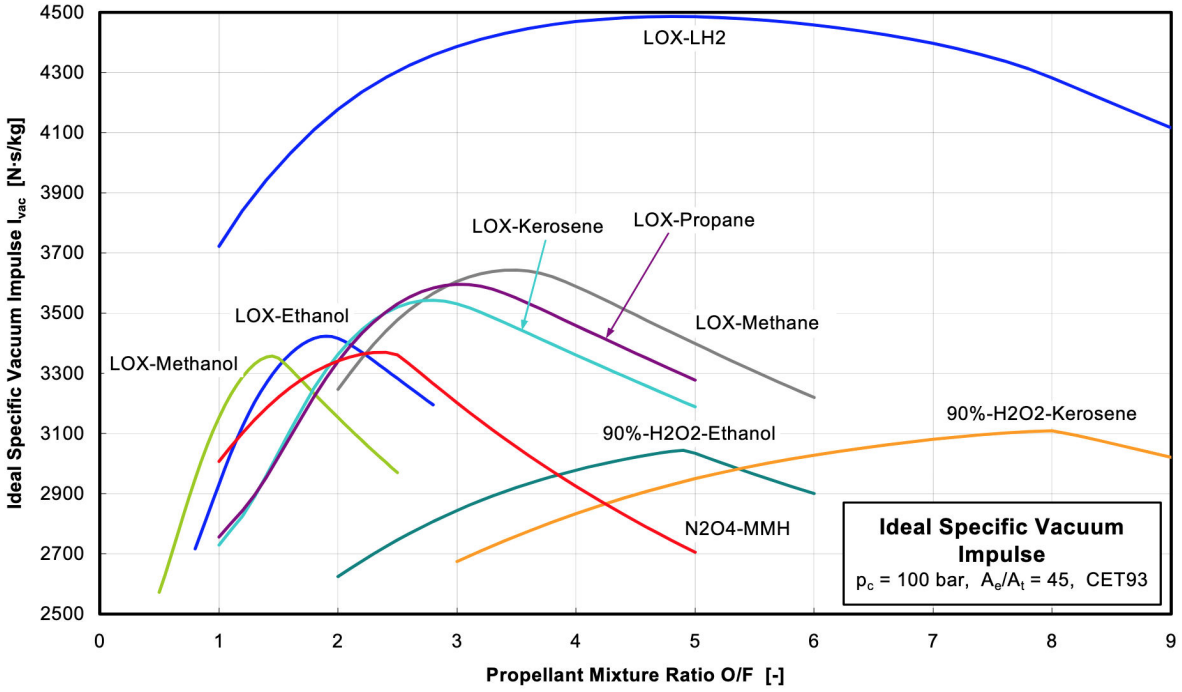


FIGURE 1.4 – Impulsion spécifique dans le vide I_{vac} pour différents couples d'ergols [117].

Ainsi, *a priori*, le couple LOx/H_2 semble être un meilleur choix que le couple LOx/CH_4 puisqu'il va permette de propulser le lanceur pendant plus longtemps pour une même quantité de combustible. C'est d'ailleurs l'une des raisons pour laquelle la fusée Ariane 5 était propulsée à l'hydrogène avec le moteur Vulcain 2. La Fig. 1.5 illustre un essai de la version 2.1 du moteur Vulcain qui va équiper la fusée Ariane 6 actuellement encore en cours de développement.

L'utilisation du méthane plutôt que l'hydrogène peut présenter de nombreux autres avantages [268] :

— le méthane est beaucoup moins coûteux que l'hydrogène ;

— il est plus facile de trouver du méthane à l'état naturel que l'hydrogène qui doit être synthétisé ;

— la manipulation du méthane (liquide à -161 °C) est plus facile que celle de l'hydrogène (liquide à -253 °C) ;



FIGURE 1.5 – Essais du moteur Vulcain 2.1 qui équipera la fusée Ariane 6. Crédits : ©DLR et ©ArianeGroup. Source : https://air-cosmos.com/article/fin-des-essais-de-qualification-du-moteur-vulcain-21-dariane-6-21511.

— le stockage et le transport du méthane sont plus aisés car l'hydrogène diffuse facilement et est hautement inflammable ;

— la simplification de l'architecture des réservoirs de stockage sur le lanceur : l'oxygène est liquide à −183 °C, proche du méthane (liquide à −161 °C), permettant un design unique ;

— le méthane crygoénique est environ six fois plus dense que l'hydrogène, ce qui permet d'utiliser des réservoirs bien plus compacts.

Tous ces avantages font donc du méthane un bon candidat pour remplacer l'hydrogène dans les moteurs-fusées à propulsion liquide.

1.1.3 Stratégie Européenne

Dans l'optique de remplacer le moteur Vulcain fonctionnant à l'hydrogène, l'Europe avec la société ArianeGroup a lancé le projet PROMETHEUS (*Precursor Reusable Oxygen METHane cost Effective propUlsion System*) qui vise à équiper la prochaine génération de lanceurs Ariane Next avec un moteur réutilisable fonctionnant au méthane (voir Fig. 1.6). Ce moteur fonctionnerait avec un cycle à générateur de gaz et fournirait une poussée d'environ 100 tonnes.

L'objectif pour l'Europe est de réduire les coûts de fabrication du moteur Vulcain d'Ariane 5 d'un facteur 10, passant de 10 million d'euros à 1 million d'euros environ seulement [133] grâce à la fabrication additive et à une organisation nouvelle des méthodes de production.

Dans un premier temps, l'idée est, jusqu'en 2030 environ, de continuer à utiliser le moteur

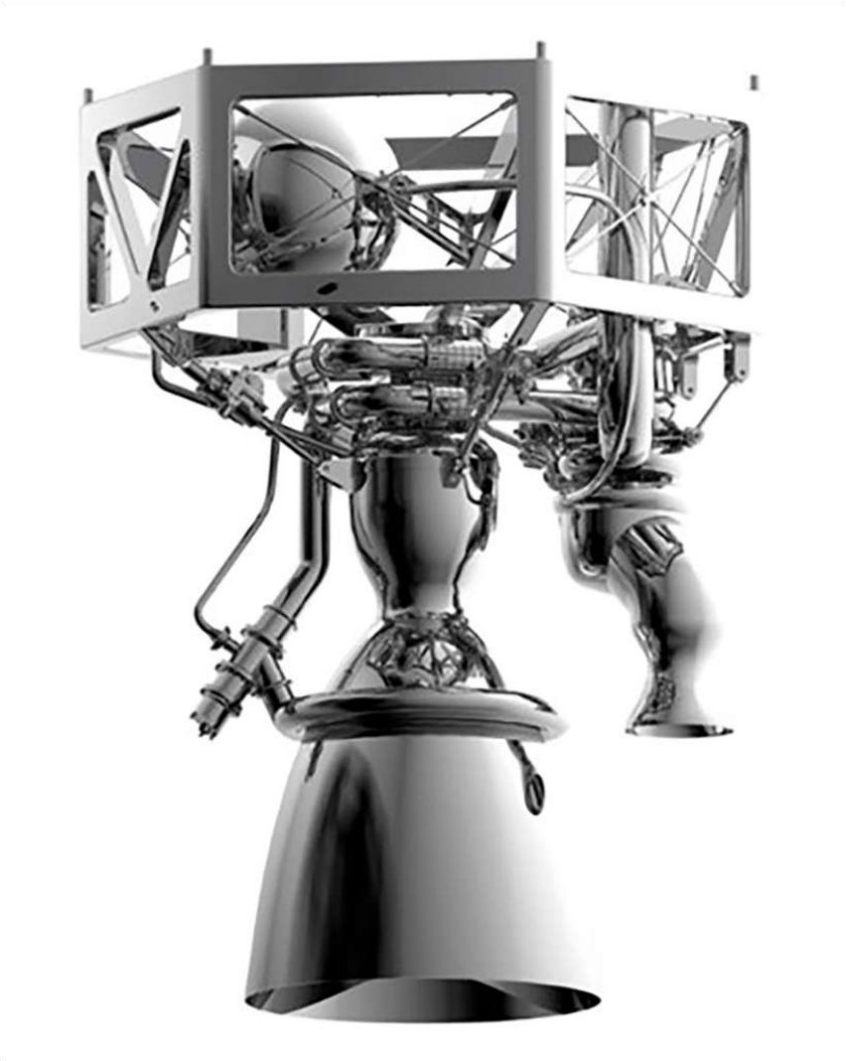


FIGURE 1.6 – Design du moteur Prometheus. Crédits : ©ESA.

Vulcain fonctionnant à l'hydrogène sur la fusée Ariane 6, dans sa version 2.1. Cette nouvelle version du Vulcain dispose d'un générateur de gaz réalisé par fabrication additive, un divergent simplifié, une nouvelle vanne gaz chauds électrique et d'autres améliorations. Ce moteur à propulsion liquide offre une poussée de 135 tonnes dans le vide.

L'Europe mise sur la fiabilité d'Ariane 5 qui n'a pas connu d'échec au lancement entre 2003 et la fin de sa carrière (dernier lancement le 05/07/2023), ainsi que sur la modularité nouvelle d'Ariane 6 pour convaincre les acteurs du marché spatial. En effet, Ariane 6 se déclinera en deux versions. La première version, Ariane 62, équipée de deux boosters, disposera d'une capacité d'emport de charge utile de 4.5 tonnes en GTO et de 7 tonnes en orbite héliosynchrone (SSO). La seconde version, Ariane 64, dotée de quatre boosters, pourra placer jusqu'à 12 tonnes en orbite de transfert géostationnaire (GTO), en lancement double et jusqu'à 20 tonnes en orbite terrestre basse (LEO). La Fig. 1.7 présente les principales caractéristiques des fusées Ariane 62 et Ariane 64 et la Fig. 1.8 illustre les différentes orbites satellites.

L'étage supérieur d'Ariane 6 sera également équipé du nouveau moteur réallumable en vol Vinci, successeur du moteur HM7-B. Ce moteur fonctionne grâce à un cycle expandeur (voir

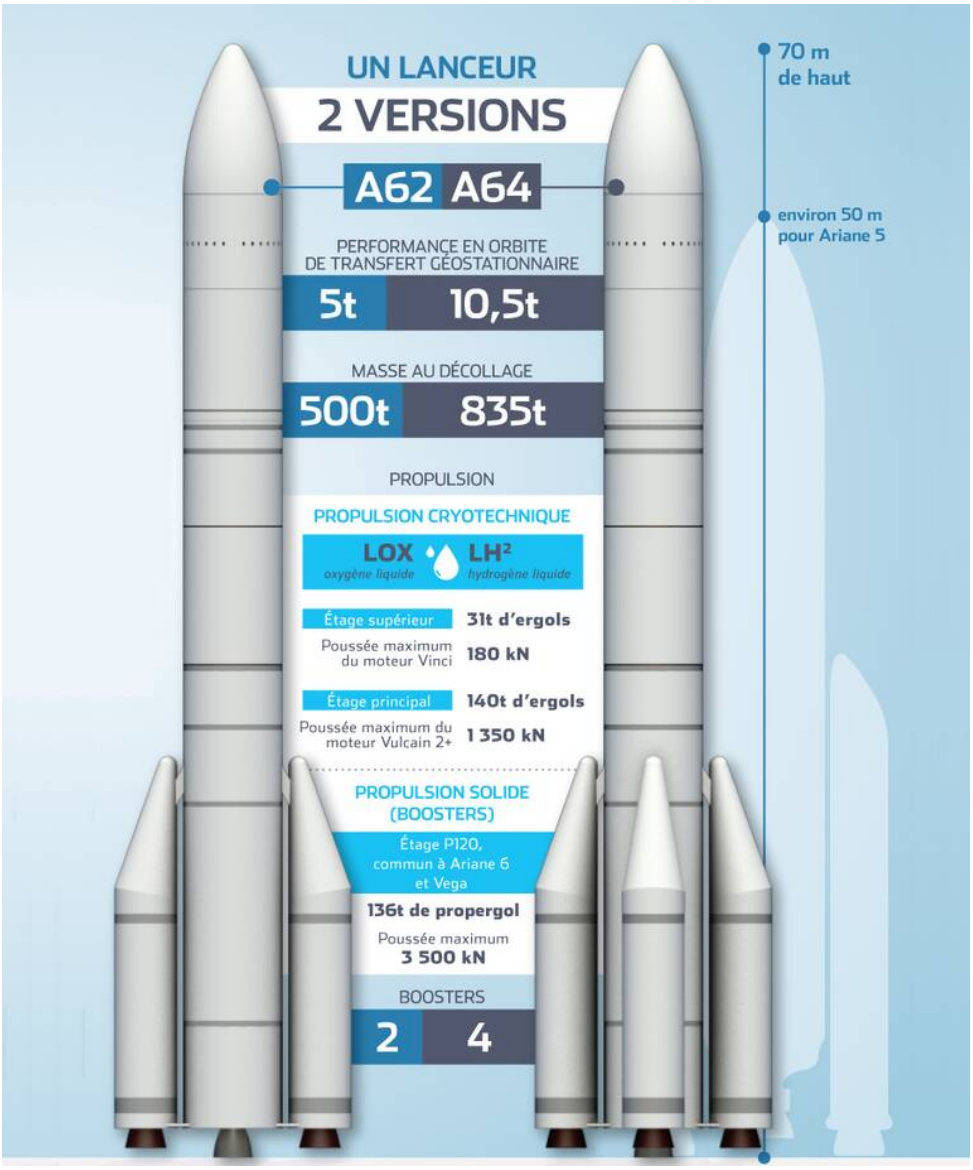


FIGURE 1.7 – Principales caractéristiques techniques des fusées Ariane 62 et Ariane 64. Crédits : ©ArianeGroup.

section 1.1.4.2) et est alimenté en LOx/H_2.

Dans un second temps, l'idée est de remplacer le moteur Vulcain 2.1 par son successeur, le moteur réutilisable Prometheus fonctionnant au méthane, sur la prochaine génération de fusée Ariane Next. Toutefois, une version du moteur Prometheus fonctionnant à l'hydrogène pourrait bien équiper Ariane 6 en avant première.

Par ailleurs, en octobre 2022, ArianeGroup vient également d'annoncer sur son site internet qu'un booster utilisant trois moteurs Prometheus fonctionnant à l'oxygène liquide et au méthane pourrait être conçu afin d'offrir une alternative *plug and play* au P120C afin de réduire les coûts d'exploitation avec une cadence de lancement élevée. L'autre avantage serait d'introduire des technologies de réutilisation dès Ariane 6 afin de préparer la prochaine génération de fusée Ariane Next. Les Fig. 1.9 et 1.10 proposent une vision d'ArianeGroup respectivement sur l'évolution

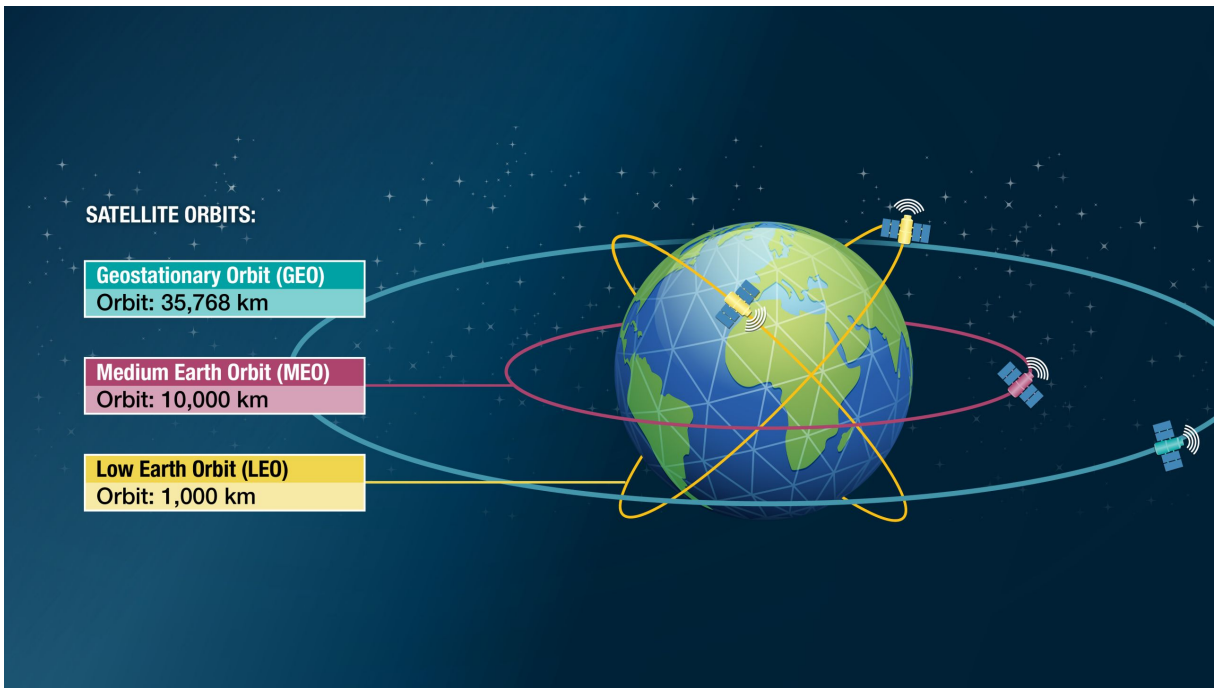


FIGURE 1.8 – Illustration des différentes orbites satellites.

d'Ariane 6 dans les prochaines années et sur la prochaine génération de fusées réutilisables.

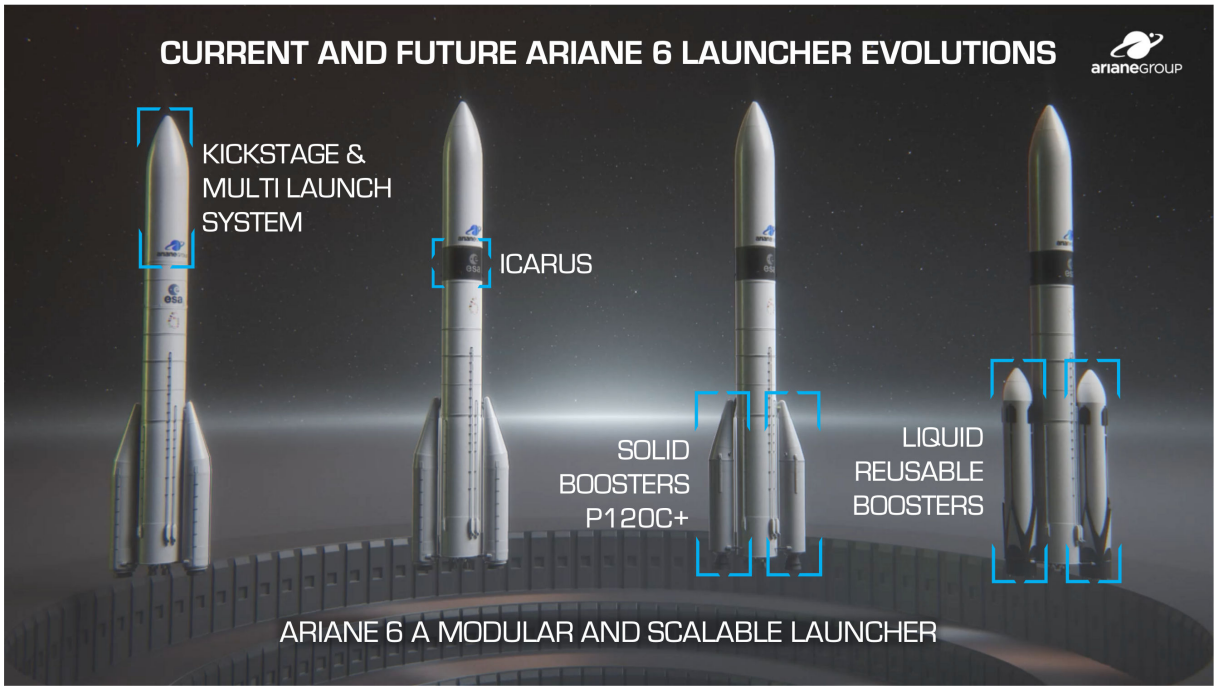


FIGURE 1.9 – Vision d'ArianeGroup sur l'évolution d'Ariane 6. Crédits : ©ArianeGroup. Source : https://www.ariane.group/fr/actualites/ariane-6-un-lanceur-evolutif-par-nature.

De plus, lors du Congrès International d'Astronautique (IAC) 2022, ArianeGroup a annoncé le lancement du programme SUSIE (*Smart Upper Stage for Innovative Exploration*), étage su-

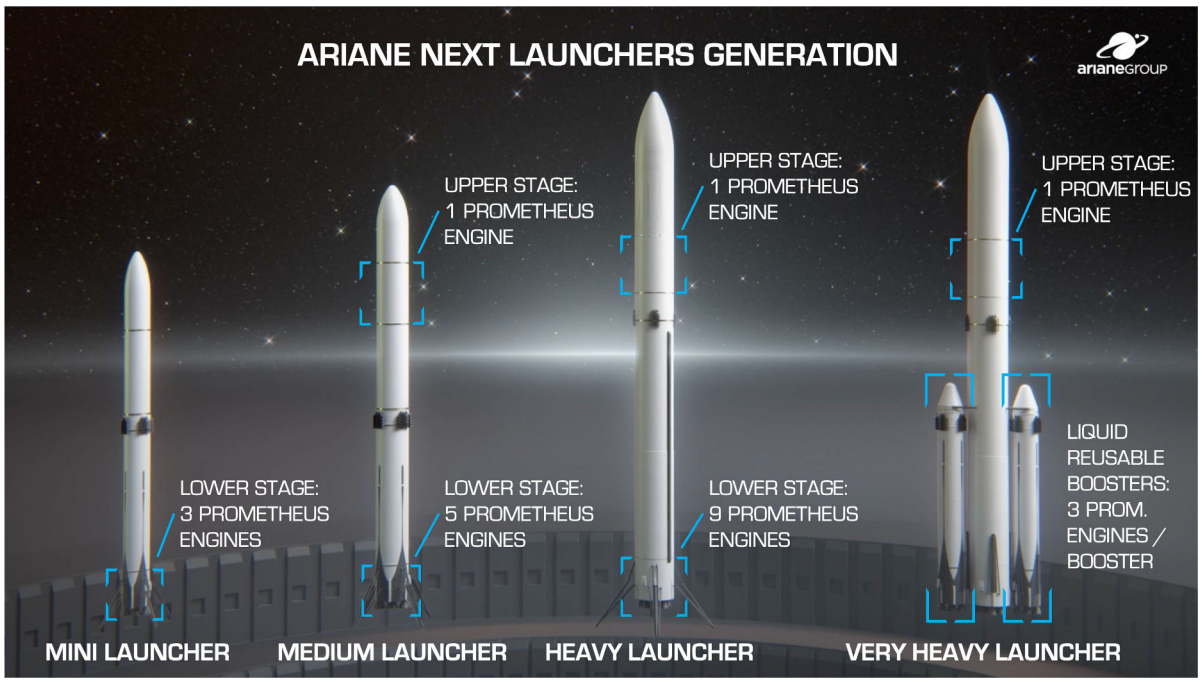


FIGURE 1.10 – Vision d'ArianeGroup sur la prochaine génération de fusées réutilisables. Crédits : ©ArianeGroup. Source : https://www.ariane.group/fr/actualites/une-famille-de-lanceurs-reutilisables-et-ecoresponsables-pour-leurope.

périeur qui pourra être équipé sur la fusée Ariane 64 ou la prochaine génération de fusées réutilisables. Cet étage aurait pour but de réaliser des missions cargo automatiques ainsi que des missions habitées dans l'espace. Il donnerait la possibilité d'embarquer un équipage comportant jusqu'à cinq astronautes, puis de revenir se poser sur Terre en toute sécurité.

Toutefois, l'ambition d'ArianeGroup avec ses projets de fusées réutilisables repose sur la réalisation avec succès du moteur au méthane Prometheus. Or, pour cela, il faut maîtriser parfaitement tout le cycle de fonctionnement du moteur, en particulier la combustion du couple LOx/CH_4 à la fois dans la chambre principale mais également dans la partie générateur de gaz, ce qui motive le travail de cette thèse. La section suivante propose une explication rapide du principe de fonctionnement d'un moteur-fusée avant de présenter les principales technologies d'injecteurs possibles.

1.1.4 Moteurs et injecteurs

1.1.4.1 Principe général de fonctionnement

Le principe de fonctionnement sur lequel repose un moteur de fusée est la troisième loi de Newton, autrement appelée le principe d'action réaction :

$$\overrightarrow{F_{AB}} = -\overrightarrow{F_{BA}} \, , \tag{1.2}$$

c'est-à-dire que la force $\overrightarrow{F_{AB}}$ qu'exerce un objet A sur un objet B est égale à l'opposé de la force $\overrightarrow{F_{BA}}$ qu'applique l'objet B sur l'objet A. Le principe d'un moteur-fusée est donc d'éjecter des gaz à haute vitesse afin de produire une force permettant de propulser le lanceur. Pour ce faire,

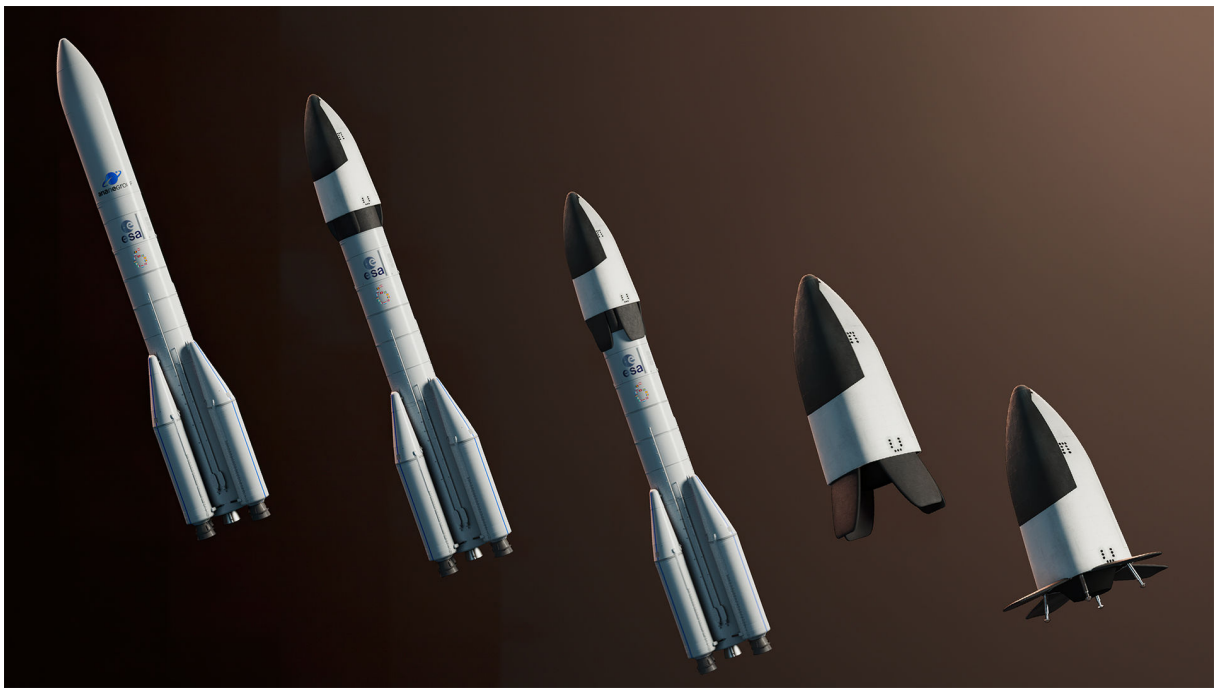


FIGURE 1.11 – Concept du vaisseau SUSIE, pouvant s'équiper comme étage supérieur d'une fusée Ariane 64 ou Ariane Next. Crédits : ©ArianeGroup

les gaz issus de la chambre de combustion sont détendus et accélérés dans un divergent après passage d'un col permettant d'atteindre des vitesses supersoniques $M > 1$, avec M le nombre de Mach, avant d'être éjectés en sortie de tuyère. Les gaz éjectés à haute vitesse produisent alors une force permettant de propulser le lanceur, appelée poussée. La poussée F se calcule comme suit :

$$F = \dot{m}_e V_e + A_e \left(P_e - P_{amb}\right) \ , \tag{1.3}$$

où F désigne la poussée, $\dot{m}_e$ le débit de gaz brulés à la sortie, V_e la vitesse des gaz éjectés à la sortie, A_e la section de sortie, P_e la pression statique à la sortie et P_{amb} la pression ambiante. La Fig. 1.12 présente un schéma illustrant le principe de fonctionnement d'un moteur-fusée.

Au regard de l'Éq. 1.3, on comprend bien que la pression de sortie P_e joue un rôle essentiel dans l'expression de la poussée F. On distingue ainsi différents cas de figure, selon que la pression de sortie est inférieure, égale ou supérieure à la pression ambiante :

— $P_e > P_{amb}$: le jet est sous-détendu ;

— $P_e = P_{amb}$: la tuyère est adaptée ;

— $P_e < P_{amb}$: le jet est sur-détendu.

La Fig. 1.13 illustre ces différentes configurations.

Le meilleur compromis afin de maximiser la poussée est d'avoir une tuyère adaptée. On peut jouer sur la longueur du divergent afin d'ajuster la pression de sortie P_e : plus la tuyère est longue, plus P_e diminue. Par ailleurs, pour un moteur situé sur l'étage principal de la fusée, la pression ambiante variant beaucoup tout au long du vol de la fusée (de 1 atm jusqu'à presque 0 atm, la pression du vide) et généralement la longueur de la tuyère étant fixée, on ne peut disposer d'une tuyère adaptée tout au long du vol. Or comme il vaut mieux avoir la tuyère la plus courte

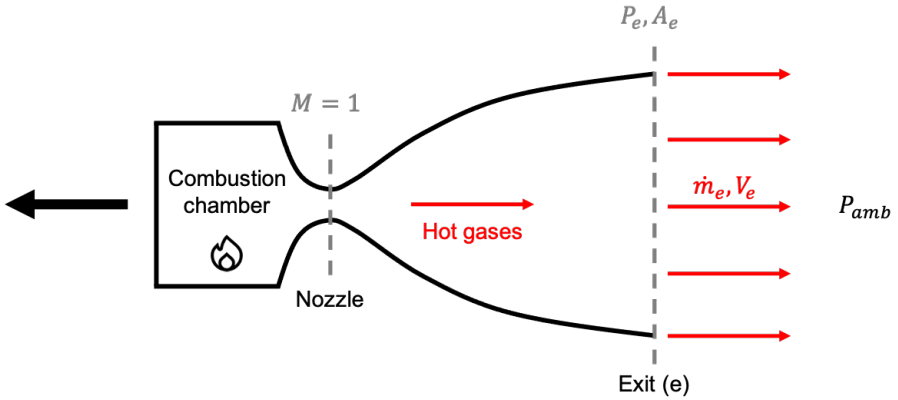


FIGURE 1.12 – Schéma illustrant le principe de fonctionnement d'un moteur-fusée. $\dot{m}_e$ désigne le débit de gaz brulés à la sortie, V_e la vitesse des gaz éjectés à la sortie, A_e la section de sortie, P_e la pression statique à la sortie et P_{amb} la pression ambiante.

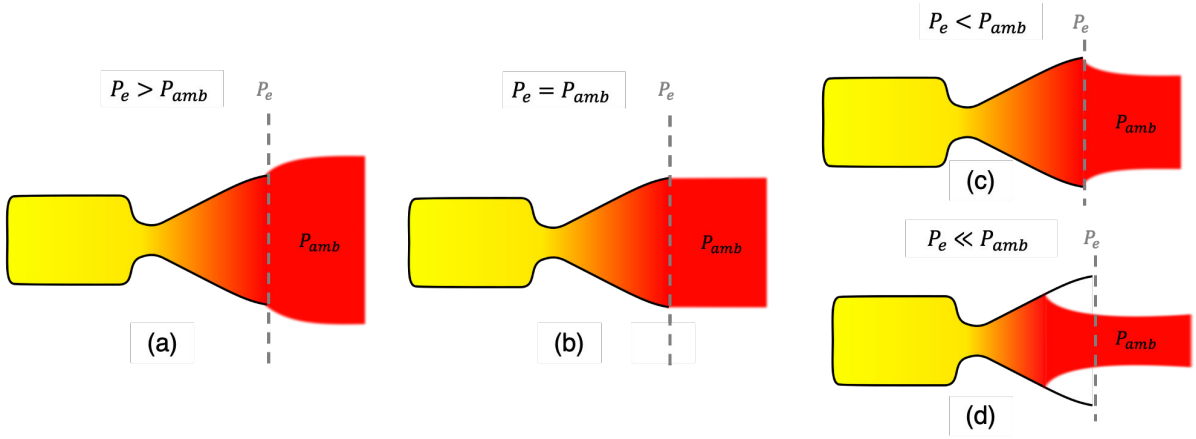


FIGURE 1.13 – Illustration des différentes configurations de jets en fonction de la pression de sortie du jet. (a) Jet sous-détendu, (b) tuyère adaptée, (c) jet sur-détendu, (d) jet fortement sur-détendu. Source : https://fr.wikipedia.org/wiki/Tuyère.

possible afin de diminuer la masse, on préfère ainsi disposer d'une tuyère avec un jet sous-détendu en vue de maximiser la poussée. Cependant, au moment du décollage lors de la phase d'allumage ou lors de la phase d'extinction dans le vide, le jet peut être légèrement sur-détendu, ce qui peut amener à un décollement du jet vers la sortie du divergent (voir Fig. 1.13, image (d)), le rendant instable et pouvant endommager le moteur si la détente est trop importante.

En effet, dans le cas d'un jet sur-détendu, des ondes de chocs obliques se forment dans la tuyère avant la sortie afin de rééquilibrer la pression avec la pression extérieure et un disque de Mach apparaît dans le cas où le jet est fortement sur-détendu, comme le montre la Fig. 1.14.

Notons enfin que dans le cas d'un jet sous-détendu, les ondes de détentes qui apparaissent en sortie de tuyère ont tendance à diminuer trop brutalement la pression, si bien qu'un choc peut apparaître afin de rééquilibrer la pression avec le milieu ambiant et venir également former un disque de Mach dans le cas d'un jet trop fortement sous-détendu, comme le montre la Fig. 1.15.

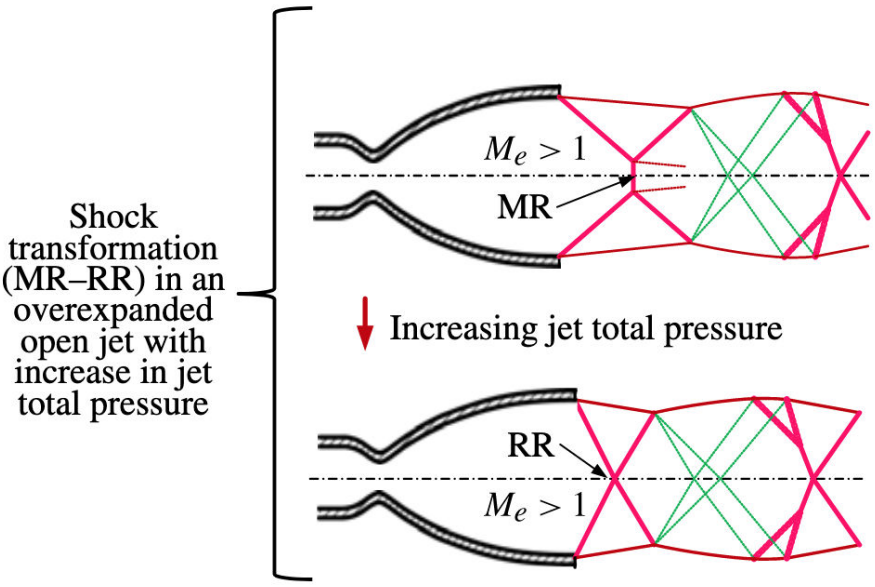


FIGURE 1.14 – Illustration de la structure des ondes de chocs et de détentes formées dans le panache d'un jet supersonique sur-détendu [168]. MR = *Mach Reflexion* (disque de Mach), RR = *Regular Reflexion* et M_e correspond au nombre de Mach de l'écoulement en sortie de tuyère. En vert sont illustrées les ondes de détente et en magenta les ondes de chocs.

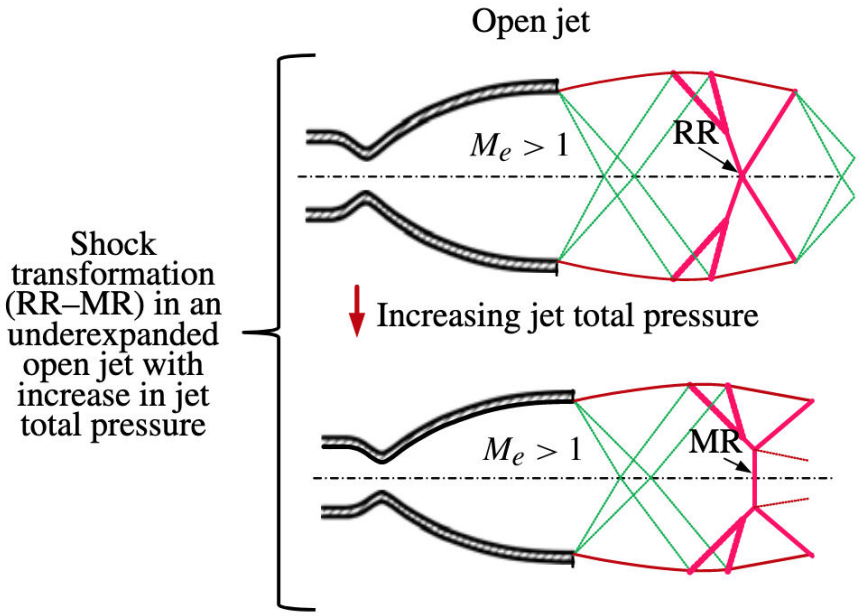


FIGURE 1.15 – Illustration de la structure des ondes de chocs et de détentes formées dans le panache d'un jet supersonique sous-détendu [168]. MR = *Mach Reflexion* (disque de Mach), RR = *Regular Reflexion* et M_e correspond au nombre de Mach de l'écoulement en sortie de tuyère. En vert sont illustrées les ondes de détente et en magenta les ondes de chocs.

1.1.4.2 Les différents cycles

Dans le cadre de moteurs à propulsion liquide, afin d'alimenter la chambre de combustion principale en ergols, on utilise généralement des turbopompes. Il existe différentes technologies pour alimenter les turbopompes, selon le cycle moteur retenu :

— **Le cycle à générateur de gaz** : une partie des ergols destinés à la chambre de combustion principale est détournée dans une chambre de combustion secondaire appelée générateur de gaz, qui fournit l'énergie nécessaire pour faire tourner les turbopompes par l'intermédiaire d'une turbine. Comme les gaz produits dans le générateur de gaz sont éjectés sans contribuer à la propulsion, il s'agit d'un cycle ouvert ;

— **Le cycle à expandeur** (ouvert ou fermé) : c'est la détente de l'ergol cryotechnique circulant dans les parois de la chambre de combustion et de la tuyère (en général le combustible) qui produit l'énergie nécessaire pour alimenter la turbine des turbopompes. Le cycle peut être fermé ou ouvert, selon que les gaz utilisés pour faire tourner les turbopompes sont réinjectés dans la chambre de combustion ou simplement éjectés ;

— **Le cycle à combustion étagée** (et sa version *full flow* = à flux complet) : principe similaire au cycle à générateur de gaz mais cette fois-ci les gaz brulés issus du générateur de gaz sont réinjectés dans la chambre de combustion afin de contribuer à la poussée. Une version plus complexe à flux complet, consiste à disposer d'un générateur de gaz riche en combustible pour la turbopompe combustible et d'un générateur de gaz riche en comburant pour la turbopompe comburant et à faire passer l'intégralité des ergols dans au moins l'une des deux turbines.

La Fig. 1.16 illustre par un schéma le principe de fonctionnement des différents cycles moteurs.

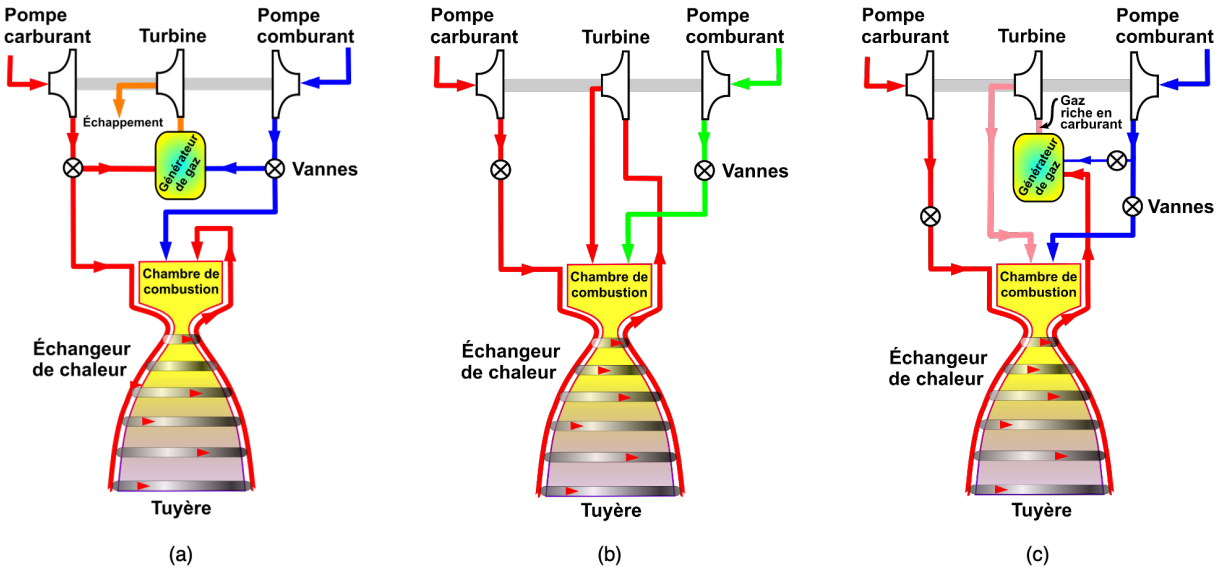


FIGURE 1.16 – Schémas des différents cycles moteurs. (a) Cycle à générateur de gaz, (b) cycle à expandeur fermé et (c) cycle à combustion étagée. Sources : https://fr.wikipedia.org/wiki/Cycle_générateur_de_gaz, https://fr.wikipedia.org/wiki/Cycle_à_expandeur et https://fr.wikipedia.org/wiki/Cycle_à_combustion_étagée.

Le cycle à générateur de gaz est celui retenu pour les moteurs Vulcain ou Prometheus. Il offre certains avantages par rapport à un cycle de combustion étagée. En effet, la conception d'un tel moteur est bien plus simple : la pression en chambre de combustion est bien plus faible (plus facile à maîtriser), on peut noter l'absence de contre-pression de la chambre de combustion dans la turbine du générateur de gaz lors de l'injection des gaz d'échappement et enfin la technologie est moins chère. Mais le cycle à combustion étagée, en particulier dans sa version à flux complet, permet d'optimiser la poussée puisque la totalité des ergols est utilisée pour la propulsion et d'obtenir une impulsion spécifique plus grande. De plus, une pression supérieure dans la chambre de combustion (de l'ordre de 300 bar contre 100 bar seulement dans un cycle à générateur de gaz) permet une détente plus importante des gaz brulés dans le divergent et donc d'avoir un moteur encore plus puissant. À ce jour, dans la catégorie des moteurs à combustion étagée à flux complet, uniquement le moteur Raptor de SpaceX a pu dépasser le stade de banc d'essai et être utilisé en vol. La Fig. 1.17 illustre le principe de fonctionnement du moteur Raptor.

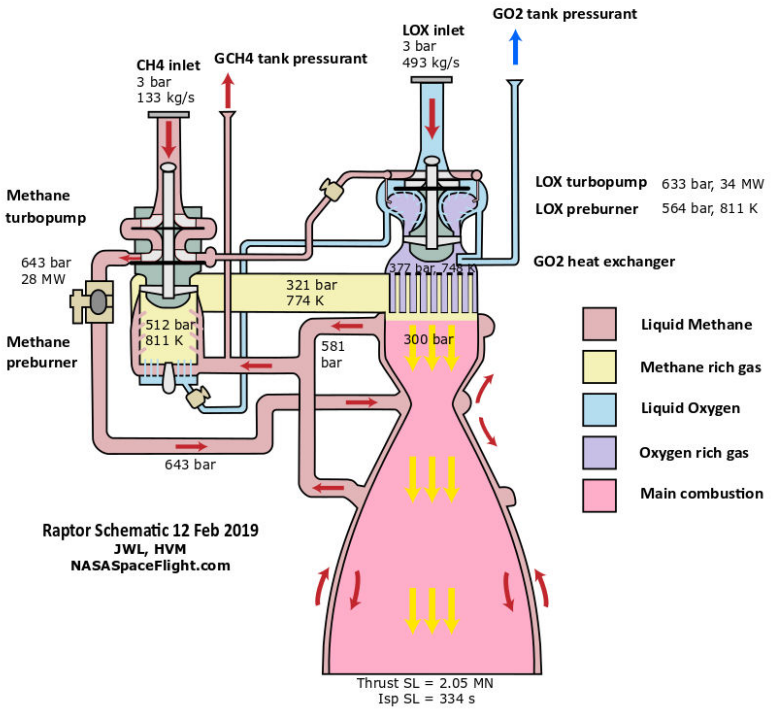


FIGURE 1.17 – Schéma du cycle du moteur Raptor de SpaceX. Source : https://en.wikipedia.org/wiki/SpaceX_Raptor.

Enfin, les moteurs fonctionnant avec un cycle expandeur sont généralement ceux utilisés pour propulser les étages supérieurs du lanceur puisqu'ils offrent une importante impulsion spécifique, mais au détriment d'une faible poussée, de l'ordre de la centaine de kilo-Newtons. Le futur moteur Vinci d'ArianeGroup fonctionne d'ailleurs avec un cycle expandeur.

1.1.4.3 Injecteurs

Différentes technologies d'injecteurs peuvent être utilisées dans les moteurs-fusées. Les avantages et inconvénients de chaque injecteur sont résumés dans la Tab. 1.1. Voici quelques exemples

d'applications de ces injecteurs sur des moteurs de fusées :

— **Coaxial cisaillé** : RS-68, Vulcain, Vinci ;
— **Coaxial swirler** : RL-10, Raptor ;
— **Impinging doublet** : LEM (Lunar Excursion Module) [98] ;
— **Impinging triplet** : Agena, Rocketdyne [98] ;
— **Impinging quadruplet** : Redstone, Jupiter, Thor, Atlas booster [98] ;
— **Impinging quintuplet** : banc expérimental [58, 98] ;
— **Showerhead** : X-15 [98] ;
— **Pintle** : Kestrel, Merlin.

La technologie d'injecteur à l'étude dans cette thèse étant celle de l'injecteur coaxial cisaillé du fait de l'historique Européen sur le moteur Vulcain, et qui pourrait éventuellement être celle retenue sur le moteur Prometheus, il convient de définir quelques grandeurs clés qui seront utilisées au cours de cette thèse. La Fig. 1.18 présente un schéma d'injecteur coaxial et de la couche de mélange se développant proche de l'injecteur afin d'illustrer l'écoulement caractéristique qui se forme alors.

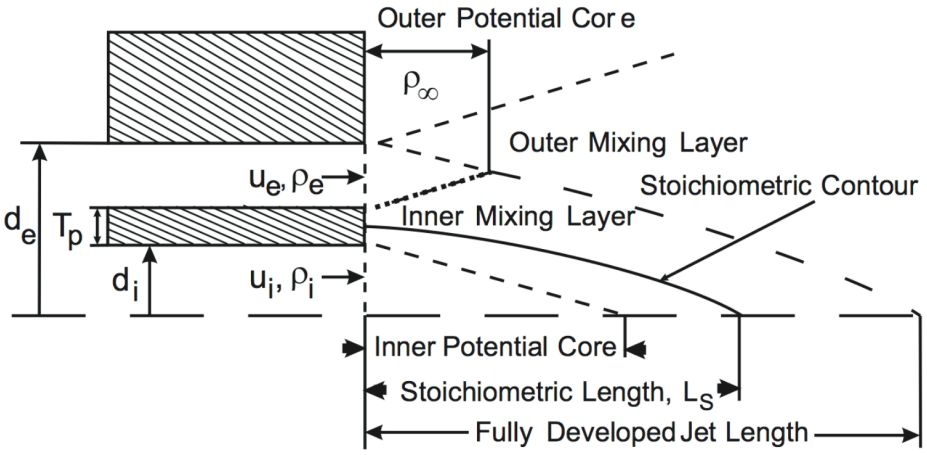


FIGURE 1.18 – Schéma d'un injecteur coaxial et couche de mélange proche injecteur [339].

Des études expérimentales [263,357] ont montré que dans le cas d'un injecteur coaxial cisaillé, le rapport des flux de quantité de mouvement J caractérisait bien la couche de mélange se produisant derrière la lèvre séparant l'écoulement externe de l'écoulement interne. J est défini tel que :

$$J = \frac{\rho_e u_e^2}{\rho_i u_i^2} \ , \tag{1.4}$$

où ρ, est la masse volumique et u la vitesse de l'écoulement.

Les nombres de Reynolds de l'écoulement interne et de l'écoulement externe étant typiquement de l'ordre de 10^5, la couche de mélange transitionne rapidement d'un état laminaire vers un état turbulent.

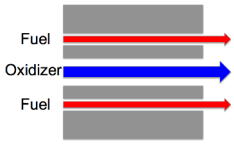
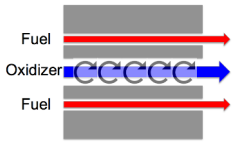
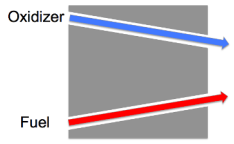
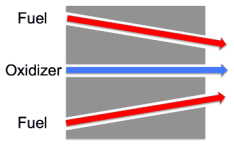
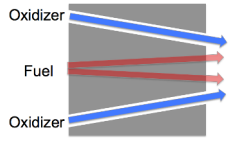
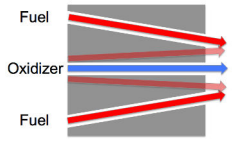
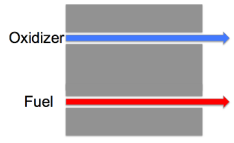
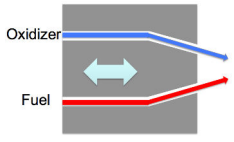
Injecteur	Schéma	Avantages	Inconvénients
Coaxial cisaillé		• Bon rapport de mélange • Bonne flexibilité • Bon environnement thermique à la paroi	• Instabilités de combustion • Difficile à concevoir si le rayon est trop petit
Coaxial swirler		• Très bon rapport de mélange • Bonne flexibilité	• Instabilités de combustion et de thermique à la paroi • Difficile à concevoir
Impinging doublet		• Bon rapport de mélange • Simple à concevoir	• Instabilités thermique et mécanique • Risque d'explosion avec des propergols hypergoliques • Faiblement modulable
Impinging triplet		• Bon rapport de mélange • Simple à concevoir	• Instabilités thermique et mécanique • Faiblement modulable
Impinging quadruplet		• Bon rapport de mélange • Très bonne répartition thermique à la paroi	• Faiblement modulable
Impinging quintuplet		• Bon rapport de mélange • Applicable pour de large gradient de masse volumique	• Instabilités thermique et mécanique • Difficile à concevoir
Showerhead		• Rarement des problèmes d'instabilités • Très simple à concevoir	• Mauvais rapport de mélange • Mauvaise efficacité de combustion
Pintle		• Très bon rapport de mélange • Modulable • Jamais de problèmes d'instabilités	• Manque de corrélation sur le spray

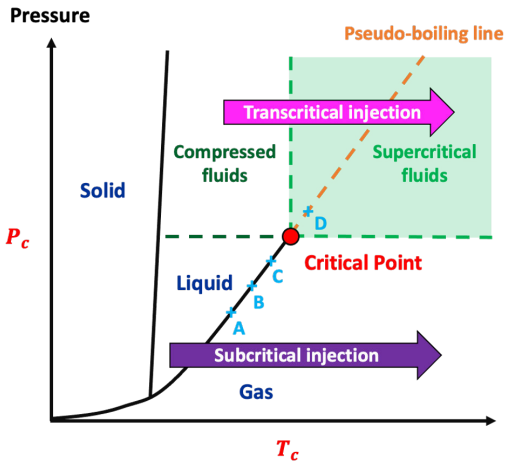
TABLE 1.1 – Récapitulatif des principaux injecteurs de moteur-fusée. Tableau repris de Guven [111].

1.2 Introduction à la simulation numérique de la combustion haute pression

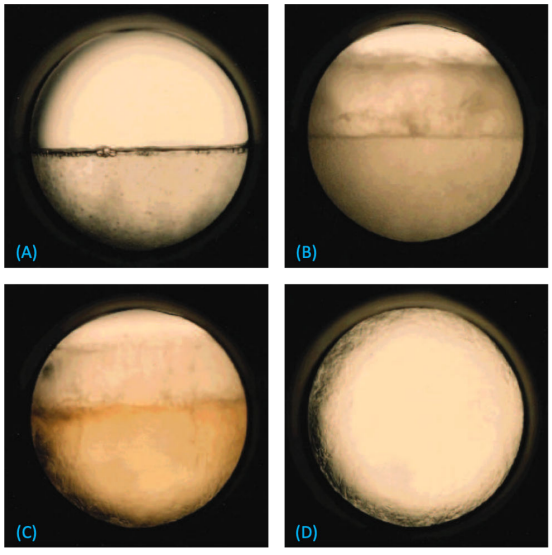
1.2.1 Le régime supercritique

1.2.1.1 Fluide supercritique

Dans le cas d'un corps pur, le point critique est le point où s'arrête la courbe d'équilibre liquide-gaz dans un diagramme pression-température (voir Fig. 1.19(a)). En effet, au-delà de ce point caractérisé par un volume V_c, une température T_c et une pression P_c, on n'observe plus une interface clairement identifiable marquant la séparation des phases liquide et gazeuse. Dans le cas où la pression est supérieure à la pression critique mais la température est inférieure à la température critique, on parle de "fluide compressé". Dans le cas où la pression est supérieure à la pression critique et que la température est également supérieure à la température critique, on parle de "fluide supercritique". Pour une pression supérieure à la pression critique, le prolongement de la courbe d'équilibre liquide-gaz dans un diagramme pression-température est appelé *pseudo-boiling line* ou *widom line* [5]. Notons également que parfois est considéré comme un fluide supercritique, un fluide dont la pression est supérieure à sa pression critique, quelle que soit sa température.



(a) Diagramme de phase d'un corps pur



(b) Changement de phase du CO_2

FIGURE 1.19 – Diagramme de phase d'un corps pur et évolution de l'interface entre deux phases du CO_2 lorsque la pression et la température augmentent et jusqu'à dépasser le point critique (crédit : Université de Leeds, Leeds Cleaner Synthesis Group).

Comme le montre la Fig. 1.19(b), lorsque la pression et la température sont inférieures à leur valeur critique, deux phases liquide et gazeuse sont clairement identifiables. Mais une fois le point critique atteint, il n'y a plus d'interface identifiable entre un supposé état liquide et un supposé état gazeux, mais une phase unique dont les propriétés thermodynamiques sont à la fois celles d'un gaz et celle d'un liquide. Les fluides compressés et les fluides supercritiques ont des comportements qui peuvent fortement diverger de ceux des gaz parfaits, notamment à

basse température et près du point critique, comme le montre la Fig. 1.20. Une équation d'état adaptée à une modélisation du comportement de type "gaz réel" est alors nécessaire. Toutefois, comme le montre également la Fig. 1.20, pour $P >> P_c$, une ligne isobare dans un diagramme $\rho - T$ tend vers celle obtenue via une loi d'état de gaz parfait dès lors que $T >> T_c$. C'est-à-dire, *a priori* pour $P >> P_c$ et $T >> T_c$, une loi d'état de gaz parfait est suffisante pour bien prédire le comportement d'un fluide.

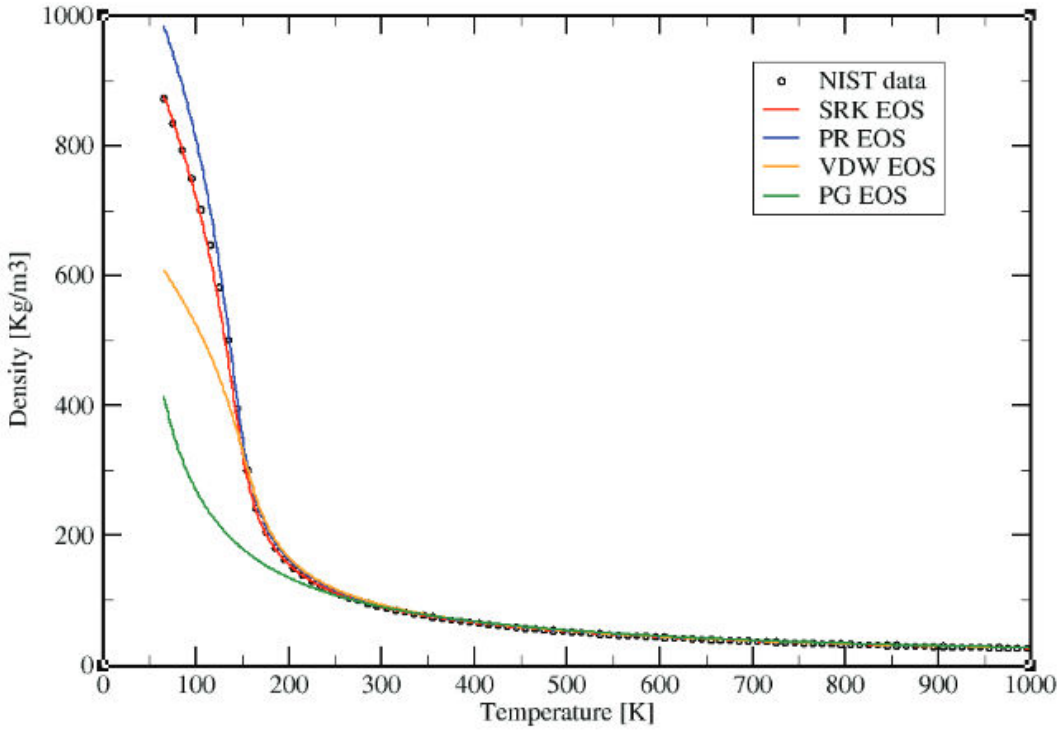


FIGURE 1.20 – Évolution de la masse volumique de N_2 en fonction de la température à $P = 80$ bar pour différentes équations d'états et comparaison avec les données NIST ($T_c = 126.2$ K et $P_c = 34.0$ bar). Image tirée de la thèse de Petit [280].

1.2.1.2 Injection supercritique transcritique et sous-critique

On parle d'une injection supercritique lorsque le fluide est injecté à une pression supérieure à sa pression critique (que l'on qualifie de pression supercritique) et à une température supérieure à sa température critique (température supercritique).

On parle d'une injection transcritique (voir Fig. 1.19(a)) lorsque le fluide est injecté à pression supercritique avec une température sous-critique [41], mais dont sa température va s'élever au-delà de sa température critique par des transferts de chaleurs éventuellement liés à la combustion, échanges avec les parois, rayonnement, etc. Dans ce cas, le fluide est donc injecté dans l'état de fluide compressé et va transiter vers l'état de fluide supercritique dans l'écoulement.

Enfin, on parle d'une injection sous-critique lorsque le fluide est injecté à une pression inférieure à sa pression critique.

1.2.1.3 Propriété d'un fluide proche du point critique

Proche du point critique, une petite variation de pression ou de température produit une forte variation de volume (ou masse volumique), comme le montre la Fig. 1.21. Tout se passe comme si le fluide était infiniment compressible et infiniment dilatable. Pour des pressions sous-

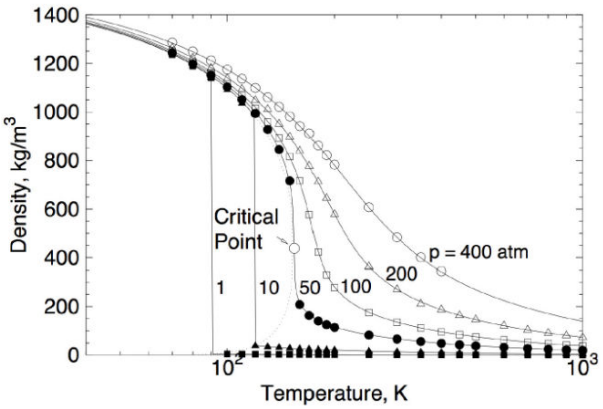


FIGURE 1.21 – Masse volumique de l'O_2 comme fonction de la température pour différentes pressions [257].

critiques, on observe une discontinuité de masse volumique lorsque la température est égale à la température de vaporisation, à l'origine de l'interface visible entre les phases liquide et gazeuse. Toutefois, lorsque la pression d'un fluide dépasse sa pression critique, la discontinuité de masse volumique n'est plus et la transition se fait plus progressivement. Par ailleurs, plus la pression est élevée, plus la région relative à cette transition (proche de la *pseudo-boiling line*) est grande. Autrement dit, plus la pression est élevée et loin du point critique et plus la transition de l'état de fluide compressé à celui de fluide supercritique se fait de manière progressive et continue, comme l'illustre également la Fig. 1.21.

1.2.1.4 Cas d'un mélange

Dans le cas d'un mélange d'espèces, on ne dispose plus d'une relation unique reliant la pression à la température et la masse volumique. En effet, les fractions molaires (ou massiques) intervenant dans la description du mélange, nous disposons d'un degré de liberté supplémentaire que nous devons prendre en compte pour décrire l'état thermodynamique du mélange. En conséquence, la pression et température critique d'un mélange dépendent de la composition et des fractions molaires de celui-ci. Dans le cas d'un mélange binaire par exemple, il n'y a pas qu'un seul point critique, mais un ensemble de points critiques correspondant à des compositions de mélange différentes, comme le montre la Fig. 1.22. De fait, dans le cas d'un mélange de N_{sp} espèces et plus particulièrement lorsque de la combustion est impliquée (forte variation de température), il devient particulièrement difficile de prédire à l'avance l'état dans lequel peuvent se trouver certaines espèces à certains endroits du domaine. Il en résulte qu'une modélisation adéquate de la physique, de tous les changements d'états possibles pour chaque espèce ou encore de la caractérisation précise du mélange en tout point du domaine est hautement non triviale.

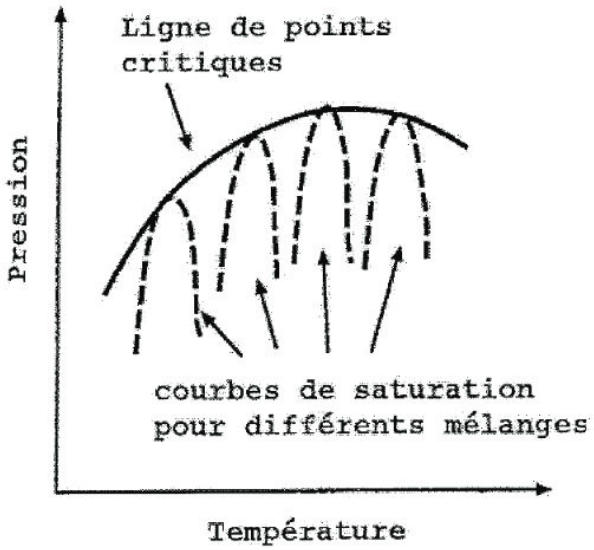


FIGURE 1.22 – Locus des points critiques. Image tirée de [375].

1.2.1.5 Difficultés liées à la modélisation d'un fluide supercritique

La modélisation d'un fluide supercritique nécessite au préalable de disposer d'une bonne prédiction des écoulements à basse pression ainsi qu'une attention toute particulière aux problèmes posés par l'introduction de phénomènes non-idéaux liés à la haute pression [413]. En effet, une équation d'état de gaz réel adaptée à l'écoulement simulé, l'inclusion de termes correctifs relatifs à la haute pression dans les propriétés thermodynamiques (énergie, enthalpie, entropie), la modélisation des flux de transports non-idéaux et les propriétés de transport des fluides considérés (conductivité thermique, viscosité et coefficients de diffusion) sont nécessaires pour simuler le plus fidèlement possible un écoulement réactif supercritique [100, 122, 225].

Par ailleurs, dans le cas d'un mélange d'espèces, on peut avoir certaines espèces avec $P > P_c$, également $T > T_c$ mais d'autres avec $P < P_c$ ou $T < T_c$. Notons également que dans le cas d'une injection transcritique, l'espèce injectée passe d'une température sous-critique à une température supercritique dans l'écoulement. Il faut être capable de prendre en compte ces phénomènes physiques et connaitre les limites des modèles utilisés.

En outre, bien souvent pour simplifier dans le cas de simulations en écoulement supercritique, on se contente d'utiliser une équation d'état gaz réel et de la thermodynamique associée, tout en restant dans une description de l'écoulement 100 % monophasique, c'est-à-dire sans prendre en considération les éventuels changements d'états pouvant intervenir pour certaines espèces à des pressions $P < P_c$ (liquéfaction, condensation, etc.). L'introduction de modèles dits *d'interfaces diffuses* [89, 146] permettraient néanmoins de prendre en compte certains de ces phénomènes physiques, en proposant une modélisation de l'interface liquide/gaz depuis des pressions sous-critiques vers des pressions supercritiques.

Toutefois, dans le cas d'applications sur des moteurs-fusées, l'inclusion de modèles d'interfaces diffuses est relativement récente et les applications réalisées jusqu'à lors portent généralement sur des configurations académiques. Par exemple, Gaillard a pu simuler une couche de mélange 2D avec deux espèces non réactives [90] ou encore des flammes 1D de prémélange [89]. Boyd et Jarrahbashi [27] ont également implémenté une méthode d'interfaces diffuses permet-

tant de réduire les oscillations numériques relatives à la pression spécifiquement rencontrée lors de la modélisation de fluides injectés en conditions transcritiques. Nayigizente *et al.* [243] ont quant à eux simulé (DNS 2D) avec succès un jet de N_2 liquide dans sa propre vapeur grâce à un modèle d'épaississement de l'interface appelée *Thickened Interface Method* (TIM) couplé à une méthode de second gradient [388]. Enfin, Jofre et Urzay [146] ont récemment dressé une revue assez complète des différentes méthodes d'interfaces diffuses connues à ce jour dans laquelle ils concluent que l'un des challenges qui reste aujourd'hui encore à relever est celui du coût numérique lié à l'emploi de tels modèles dans des simulations CFD de systèmes complexes.

En revanche, dans le cas d'applications sur des moteurs diesel on peut trouver des exemples de simulations LES d'injection diesel transcritique et d'auto-allumage avec des méthodes d'interfaces diffuses par Ma *et al.* [199, 200] ou encore une simulation LES d'un spray diesel dans une chambre soumis à une pression supercritique par Chung *et al.* [54].

1.2.2 Modélisation de la turbulence

1.2.2.1 Introduction à la turbulence

En 1883, Reynolds [307] fut le premier à caractériser deux états possibles d'un écoulement : laminaire ou turbulent. L'écoulement est dit laminaire lorsque les couches de fluide glissent les unes par rapport aux autres sans échange de particule. Dans ces écoulements caractérisés par de faibles vitesses, les petites perturbations sont immédiatement amorties par la viscosité moléculaire qui préserve le caractère ordonné du fluide. À l'inverse, dans un écoulement turbulent, la viscosité n'est plus suffisante pour dissiper les perturbations générées par une augmentation de vitesse. Ces perturbations sont amplifiées par divers mécanismes comme les instabilités de Kelvin-Helmholtz qui se produisent à l'interface de fluides se déplaçant à des vitesses différentes (voir Fig. 1.23) ou encore les instabilités de Rayleigh-Taylor qui s'observent à l'interface de fluides de masses volumiques différentes (voir Fig. 1.24). L'écoulement passe alors d'un état laminaire à un état turbulent.



FIGURE 1.23 – Instabilités de Kelvin-Helmholtz dans les nuages.

Reynolds a alors proposé un nombre sans dimension qui permet de comparer les forces visqueuses du fluide s'opposant à son mouvement et aux forces d'inertie. Ainsi ce nombre de Reynolds permet de quantifier le caractère turbulent d'un écoulement :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \ , \tag{1.5}$$

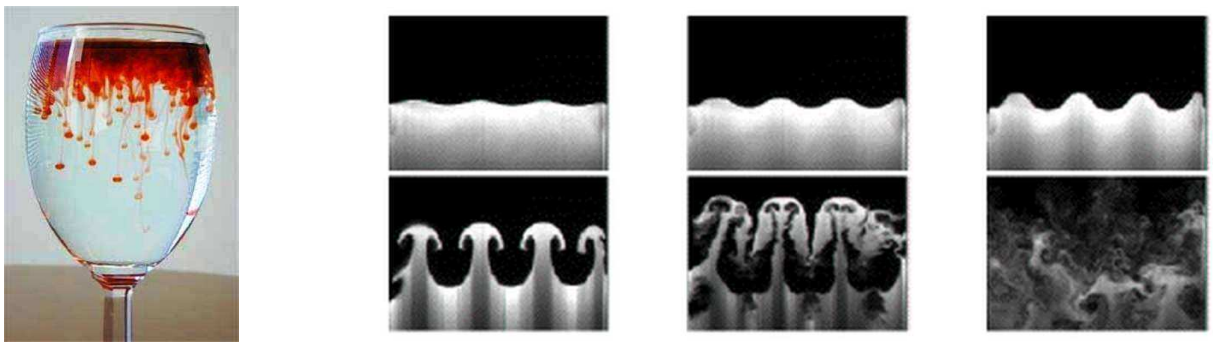


FIGURE 1.24 – Instabilités de Rayleigh-Taylor.

où U est la vitesse, L est une dimension caractéristique de l'écoulement et ν la viscosité cinématique du fluide. Pour rappel, la viscosité cinématique est le rapport entre la viscosité dynamique du fluide et sa masse volumique, i.e. $\nu = \mu/\rho$.

1.2.2.2 Les échelles de la turbulence

Les écoulements turbulents font intervenir différentes échelles qui peuvent se caractériser par leur état énergétique [298] :

— **L'échelle intégrale** (ou échelle macroscopique) est celle qui correspond aux grandes structures tourbillonnaires de l'écoulement. Les directions suivies par ces grandes structures dépendent de la géométrie étudiée. Ces grandes échelles sont celles qui contiennent les tourbillons les plus énergétiques. On peut alors définir un nombre de Reynolds turbulent Re_t basé sur l'échelle intégrale l_t et la vitesse de fluctuation u'_t associée :

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{\nu} \; ; \tag{1.6}$$

— **L'échelle de Taylor**, notée λ_T, contient des structures tourbillonnaires plus petites qui assurent le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites échelles par le phénomène de cascade énergétique (voir Fig. 1.25) décrit dans la théorie de Kolmogorov [162] ;

— **L'échelle de Kolmogorov** est la plus petite échelle des tourbillons et est notée η_k. Toute l'énergie cinétique turbulente est dissipée à cette échelle sous forme de chaleur. En général, la plupart des modèles supposent que ces petites structures sont isotropiques, l'anisotropie initiale des grandes échelles ayant été détruite par la cascade énergétique. On peut aussi définir un nombre de Reynolds associé à cette échelle :

$$Re_\eta = \frac{u'_\eta \eta_k}{\nu} \simeq 1 \; . \tag{1.7}$$

On peut alors montrer qu'il existe une relation entre l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov :

$$\frac{l_t}{\eta_k} \simeq (Re_t)^{3/4} \; . \tag{1.8}$$

Ainsi, plus le nombre de Reynolds est grand et plus il faudra diminuer la taille des cellules du maillage si l'on veut résoudre l'ensemble du spectre de la turbulence. En considérant un domaine fluide cubique de côté L que l'on discrétise en N points dans chaque direction de l'espace, alors la taille des cellules est de L/N dans chaque direction. Or, dans le cas d'une turbulence homogène

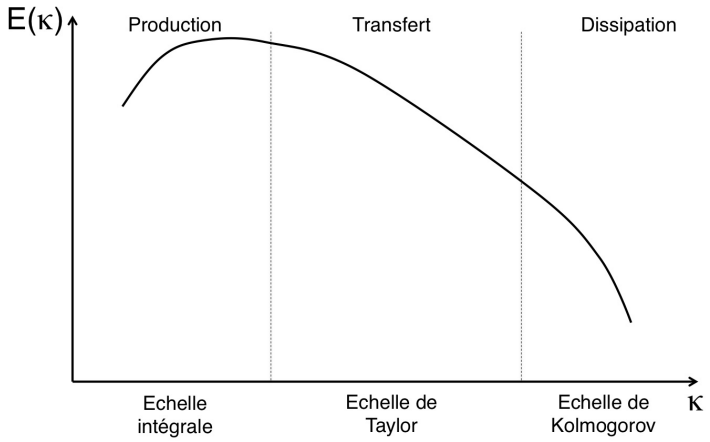


FIGURE 1.25 – Spectre d'énergie cinétique turbulente $E(\kappa)$.

isotrope, pour capter l'ensemble de la turbulence, la taille de la plus petite cellule doit être de l'ordre de celle de l'échelle de Kolmogorov, i.e. :

$$N \simeq \frac{l_t}{\eta_k} \ . \tag{1.9}$$

Ceci nous conduit alors à :

$$N^3 \simeq Re_t^{9/4} \ . \tag{1.10}$$

Dans la plupart des applications aéronautiques, le nombre de Reynolds de la turbulence est de l'ordre du millier à quelques dizaines de milliers, conduisant ainsi à des maillages de l'ordre de 10^9 éléments si l'on veut résoudre l'ensemble de la turbulence, ce qui est considérable. Même si les ordinateurs voient leur puissance de calcul grandir de jour en jour, une telle demande de ressources reste encore inenvisageable dans le monde de l'industrie à l'heure actuelle. Notons également que le coût énergétique lié à la consommation électrique des supercalculateurs pour de telles simulations pouvant être très important, la résolution directe des équations de Navier-Stokes n'est pas toujours le choix à privilégier, même dans des cas académiques [70]. On se contentera donc généralement dans les applications industrielles de ne résoudre qu'une partie du spectre de la turbulence, via des approches RANS voire LES, présentées ci-après.

1.2.2.3 RANS, LES, DNS

La DNS (*Direct Numerical Simulation*), aussi parfois qualifiée d'Expérience Numérique repose sur la résolution directe des équations de Navier-Stokes. Tout le spectre de la turbulence est résolu et il a été montré dans la section précédente que le coût de calcul d'une telle simulation était prohibitif dans le cas d'écoulements à hauts Reynolds. Là encore, nous ne prenions en compte que la résolution de la turbulence (aérodynamique pure), sans même parler du coût que représenterait la résolution de la partie réactive (combustion), ni même de celui d'une éventuelle atomisation (diphasique) ou description des changements de phases, ni celui de la thermodynamique gaz réel si nécessaire, qui ne feraient qu'augmenter considérablement le coût de calcul total d'une telle simulation. En définitive, la DNS n'est aujourd'hui réservée qu'à des applications académiques et appartient encore exclusivement ou presque au domaine de la recherche. Toutefois, la DNS reste un outil haute fidélité permettant de mieux comprendre et d'appréhender

certains phénomènes physiques. Elle permet également de valider ou d'initier certaines théories ou modèles. Ainsi la DNS peut constituer une approche intéressante pour la recherche afin de mettre en place des simulations numériques de références servant comme base de données pour comparer l'effet de différents modèles et valider des approches numériques moins précises mais moins coûteuses comme les approches RANS ou LES.

Pour surmonter les contraintes de maillage liées au nombre de Reynolds, l'approche RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) peut être utilisée. Cette méthode consiste à moyenner temporellement, d'un point de vue statistique, les équations de Navier-Stokes. Toutes les échelles de la turbulence sont modélisées (Fig. 1.26) et seulement un écoulement moyen est calculé. Par sa nature, cette approche ne permet pas de calculer des effets instationnaires comme par exemple l'allumage ou encore les instabilités de combustion. Néanmoins, un maillage assez grossier (par rapport à un maillage LES ou DNS) et son coût CPU abordable en font une méthode très attractive pour le monde de l'industrie.

Enfin, une méthode intermédiaire entre l'approche RANS et la DNS, introduite en 1963 par Smagorinsky [352], propose de résoudre les grandes échelles de la turbulence et de modéliser uniquement les plus petites, sensées avoir un comportement universel. Cette méthode, appelée SGE (Simulation aux Grandes Échelles) ou encore LES (*Large-Eddy Simulation*) en anglais, permet de mieux représenter le caractère dissipatif des petites structures. Elle consiste à appliquer un opérateur de filtrage spatial (généralement c'est le maillage qui se comporte comme un filtre implicite) aux équations de Navier-Stokes afin de ne résoudre que les grandes échelles de l'écoulement. Un champ instantané est donc résolu, au lieu d'un champ moyen comme c'est le cas lors d'une simulation RANS. Le coût de calcul d'une telle méthode, plus important qu'une approche RANS (voir Fig. 1.26) mais bien moindre par rapport à celui d'une approche DNS, rend la LES accessible aux industriels pour de nombreuses applications.

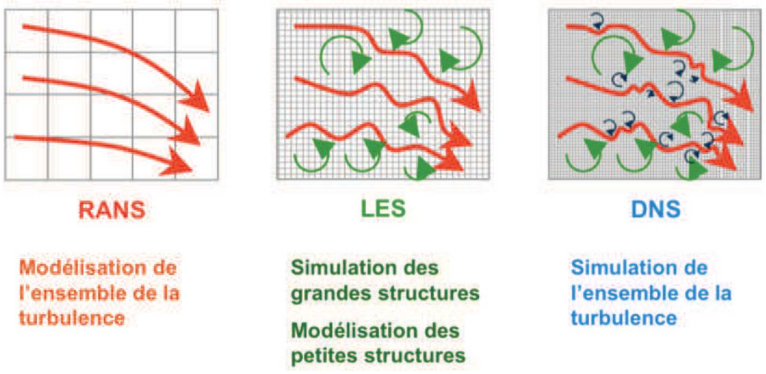


FIGURE 1.26 – Illustration des trois méthodes de résolutions des équations de Navier-Stokes : RANS, LES et DNS. Schéma repris de la thèse de Pecquery [270].

La Fig. 1.27 illustre bien les trois approches DNS, LES et RANS présentées ci-dessus.

1.2.3 Introduction de la chimie pour la combustion turbulente dans un code de calcul

La description complète des réactions chimiques intervenant lors de la combustion peut impliquer des centaines d'espèces [194], voire même des milliers pour certains hydrocarbures [178]

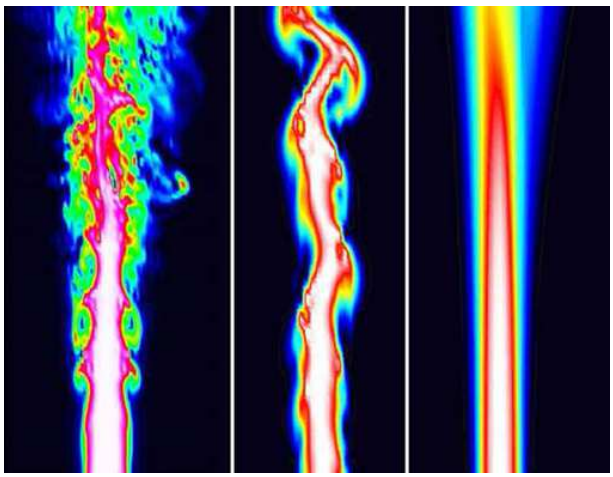


FIGURE 1.27 – Illustration de simulations DNS (à gauche), LES (au centre) et RANS (à droite) d'un jet turbulent [209].

et des milliers de réactions. La première approche, dite "chimie transportée" nécessite la résolution d'une équation de transport supplémentaire par espèce. Or, les termes sources chimiques et les coefficients de transports des espèces sont des fonctions complexes des fractions massiques et de la température. Ainsi, augmenter le nombre d'espèces chimiques augmente dramatiquement le temps de calcul [291]. Afin de réduire le temps de calculs, différentes approches sont possibles et sont brièvement introduites ci-dessous.

1.2.3.1 Mécanismes chimiques globaux

Une approche afin de réduire conséquemment le temps de calcul d'une chimie transportée est de construire un schéma global qui ne comporte que quelques espèces et réactions majoritaires. Le développement de ces schémas repose généralement sur l'hypothèse que certaines espèces intermédiaires ou radicaux sont supposées avoir atteint un état d'équilibre, ce que l'on qualifie d'espèces QSS (*Quasi-Steady-State*). Ces espèces n'évoluent plus, leur fraction massique est constante et leur taux de réaction global est négligeable (équilibre entre les taux de production et de consommation). Une autre hypothèse généralement effectuée dans ce cadre est celle d'équilibre partiel, c'est-à-dire que certaines réactions élémentaires du schéma sont supposées avoir atteint l'équilibre chimique. On peut trouver de tels schémas dans la littérature pour la chimie du méthane [276] par exemple ou celles des hydrocarbures C_nH_{2n+2} [147] pour $n \in [\![1, 4]\!]$.

L'inconvénient de ce type d'approche, est l'identification des réactions clés, ainsi que des espèces QSS et des réactions chimiques à l'équilibre dans un mécanisme chimique détaillé, ce qui demande une certaine expertise en chimie [394]. Par ailleurs, une réduction importante du nombre d'espèces et de réactions entraine généralement des taux de réactions avec des expressions plus complexes et raides, pouvant limiter le gain en temps de calcul. Ces taux de réactions peuvent aussi conduire à des fractions molaires ou massiques négatives, entraînant parfois des difficultés pratiques, en particulier lors de l'initialisation d'une solution [394]. Afin de surmonter ces difficultés, on peut également envisager une approche de réduction de la chimie par une méthode automatique.

1.2.3.2 Mécanismes chimiques réduits par méthode automatique

Afin de réduire le coût de calcul de l'approche directe par "chimie transportée" avec un schéma de cinétique chimique qui peut nécessiter le transport de centaines d'espèces chimiques, il est possible d'effectuer au préalable une étape de réduction du schéma de cinétique chimique. En effet, par exemple avec la méthode *Directed Relation Graph with Error Propagation* (DRGEP) [193, 272] il est possible de sélectionner automatiquement les espèces et réactions les plus pertinentes pour reproduire le plus fidèlement possible le comportement de la chimie complète sur un cas de simulation donnée. Une fois l'étape de réduction terminée, on dispose alors d'un nouveau mécanisme chimique dit "réduit".

Une fois le nombre d'espèces et de réactions réduit, les taux de réactions chimiques des espèces transportées peuvent dévier de ceux du mécanisme chimique détaillé de référence, puisque les paramètres d'Arrhenius sont toujours ceux du schéma détaillé, ce qui peut ne pas être optimal lors de l'utilisation d'un jeu réduit de réactions [394]. Il est également possible d'optimiser la chimie grâce à un algorithme génétique [17, 18, 20, 77, 142, 294, 304].

On peut alors considérer une approche par "chimie transportée" avec ce mécanisme chimique réduit ou par exemple se tourner vers une autre approche comme la "chimie tabulée", introduite ci-dessous.

1.2.3.3 Chimie tabulée

L'approche par chimie tabulée consiste à ne pas résoudre une équation de transport pour chaque espèce mais à se donner un ensemble réduit de variables caractéristiques de l'écoulement (fraction de mélange ou variable de progrès par exemple).

En général dans une telle approche, une base de données caractéristiques (flammes laminaires 1D prémélangées ou de diffusions par exemple) est créée au préalable. Elle doit être suffisamment pertinente pour décrire l'ensemble des réactions chimiques intervenant dans l'écoulement que l'on veut simuler. L'idée est de pouvoir facilement décrire un écoulement grâce à un ensemble réduit de variables (souvent qualifié de *Manifold*) capable de rendre compte de l'espace de composition du mélange et/ou de l'avancement des réactions chimiques ainsi que d'une éventuelle prise en compte d'effets d'étirements sur la flamme ou des pertes thermiques. C'est par exemple le cas dans les méthodes *Low-Dimensional Manifold* (ILDM) [201], *Flame propagation of ILDM* (FPI) [97], *Flamelet Generated Manifold* (FGM) [389] ou encore la méthode *Flamelet/Progress Variable Approach* (FPVA) [286].

Un des inconvénients de l'approche en chimie tabulée est qu'elle nécessite d'identifier clairement au préalable le mode de combustion (parfaitement prémélangé, diffusion ou les deux) et le régime de flamme associé (temps et échelles caractéristiques, chimie infiniment rapide ou non, etc.). De plus, *a priori* la tabulation de la chimie sur un archétype de flamme donné (diffusion, prémélange, auto-allumage) ne garantit pas son extension à un autre type de flamme dans une simulation donnée. Certains auteurs ont toutefois étudié cet aspect-là. C'est par exemple le cas de Fiorina *et al.* [80] qui ont tenté de simuler des flammes partiellement prémélangées et des flammes de diffusion à contre courant avec FPI. Pour ce faire, ils ont modifié les termes sources de façon à pouvoir prendre comptes des effets de diffusion tout en utilisant un index de flamme pour identifier le régime de combustion. Une approche similaire a également été tenté dans plusieurs études avec le modèle FGM [390, 400]. Dans le cas de la flamme Cabra [38] où tous les régimes de combustion peuvent être rencontrés, Domingo *et al.* [71] ont utilisé une table construite à

partir de flammes prémélangées couplée à une table basée sur de l'auto-allumage. D'autres approches avec notamment des flammes multi-dimensionnelles faisant intervenir une fraction de mélange, une variable d'avancement et différents taux de dissipation scalaires à l'image des travaux de Nguyen *et al.* [247] ont également été tentées en vue de simuler des flammes aussi bien de diffusion que de prémélange ou encore partiellement prémélangées.

De plus, les modèles de flammelettes sont limités dans le cas où des régimes de flammes turbulentes non-prémélangées et prémélangées sont rencontrés simultanément, à cause d'extinctions locales ou de la turbulence qui peut significativement rompre l'équilibre réaction-diffusion des structures de flammelettes [297, 363].

Par ailleurs, l'introduction d'équations de transports pour une variable de contrôle (fraction de mélange, variable de progrès ou autre), nécessite également l'emploi de modèles de fermetures [30–32, 296, 298] qui reposent souvent sur un grand nombre d'hypothèses parfois difficiles à vérifier en pratique : chimie infiniment rapide, modèles de flammelettes, séparation d'échelles, présomption sur la PDF (*Probability Density Function*), calcul de la PDF jointe, etc.

En outre, dans le cas spécifique d'écoulements à haute pression, l'utilisation du formalisme tabulé nécessite un effort supplémentaire de modélisation [280–282, 308, 310, 395]. En effet, les perturbations acoustiques dues aux effets compressibles ne sont pas pris en compte lors de la génération de la table chimique, ce qui induit une différence entre la masse volumique et l'énergie interne transportées par rapport à leur valeur tabulée et donc par extension la température ne peut pas être lue directement dans la table mais doit être calculée avec une méthode dédiée [280, 282, 395]. De plus, la tabulation de l'équation d'état peut engendrer des différences importantes selon la méthode employée, notamment sur le calcul des dérivées partielles par rapport aux variables transportées ou encore pour la prédiction de la vitesse du son [280, 282].

Au final, une approche en chimie tabulée peut permettre d'inclure des effets de chimie détaillée pour des faibles temps de calculs puisque la combustion est alors décrite par un ensemble réduit de variables et de paramètres qui décrit la structure de la flamme aux petites échelles. Toutefois, comme la structure de la flamme dépend fortement du mode de combustion, la chimie tabulée ne peut être appliquée que dans un cadre précis et pour des applications spécifiques. Enfin, pour avoir une description précise de la chimie et de son interaction avec la turbulence en tout point et en tout instant, notamment dans le cadre d'une simulation DNS, ce type d'approche n'est pas la plus adaptée.

1.2.3.4 HTTC (Hybrid Transported-Tabulated Chemistry)

Avec l'approche HTTC, les espèces majoritaires sont transportées alors que les espèces intermédiaires et radicalaires uniquement présentes dans le front de flamme sont tabulées. La méthode a été originellement proposée par Ribert *et al.* [311]. L'idée est d'une part réduire le nombre d'équations de transports à résoudre et d'autre part de diminuer la sévérité du critère de stabilité chimique requis pour l'évaluation du terme source, ce qui se traduit par une augmentation globale du pas de temps chimique et donc une réduction importante du coût de calcul, en particulier dans le cas où l'avancement en temps de la simulation est conditionné par le pas de temps chimique et non pas par le critère de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [61, 62] ou le critère de Fourier (critère de stabilité provenant de l'analyse de stabilité de Von Neumann [47]).

La version originale du modèle HTTC [311] a été validée sur des flammes de prémélange puis étendue à des flammes partiellement prémélangées (y compris flamme triple) par Duboc [74, 75]

en prolongeant la table pour les espèces radicalaires en dehors de leur limite de flammabilité. Les résultats obtenus avec la méthode HTTC dans ce cadre concordent bien avec ceux obtenus via une approche par chimie détaillée entièrement transportée tout en réduisant le temps de calcul par un facteur cinq environ.

Toutefois si l'approche HTTC développée par Duboc dans sa thèse [73] et implémentée dans le code SiTCom-B a été validée en DNS sur des flammes méthane air à pression ambiante, son extension à des simulations LES (filtrage de la table) et à des simulations haute pression (prise en compte de la thermodynamique gaz réel) reste encore à faire.

1.2.3.5 Intelligence artificielle

Une autre alternative, relativement récente, ayant recours à de l'intelligence artificielle (IA) est également possible. En effet, les réseaux de neurones artificiels (ANNs) ont démontrés leur précision et leur relative efficacité en terme de CPU et de mémoire [51, 82]. De la même façon, les réseaux de neurones convolutifs (CNNs) originellement développés pour analyser des représentations visuelles (images par exemple) [181] ont également été utilisés dans la modélisation de la combustion turbulente pour la déconvolution de la variable de progrès filtrée [251], la modélisation du plissement de la flamme [172] ou encore pour la reconstruction de termes sources et de flux non résolus à partir des grandeurs résolus à l'échelle du filtre LES [344]. D'autres applications des réseaux de neurones afin de reconstruire les termes sources des espèces chimiques à partir des fractions massiques des espèces transportées et de la température ont également vue le jour [246], par exemple avec la modélisation d'une couche de mélange réactive d'un gas de synthèse [401, 402], la simulation LES d'une lance d'injection [7] ou encore la modélisation d'un cas de combustion sans flamme [245]. Sur ces cas d'applications, l'entrainement des réseaux de neurones (voir Fig. 1.28) est réalisé avant les simulations CFD, en créant une base de données de référence grâce au mécanisme chimique détaillé et un modèle de micro mélange turbulent non-adiabatique basé sur un problème canonique représentatif du cas d'étude. Le réseau de neurones une fois entrainé peut alors s'utiliser comme une table permettant de reconstruire le terme source chimique, à la manière de la chimie tabulée.

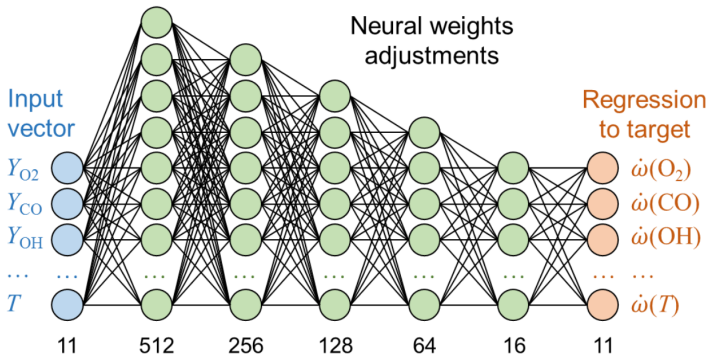


FIGURE 1.28 – Illustration de la structure de réseau d'un réseau de neurones (ANN) entrainé pour reproduire les termes sources chimiques d'une chime détaillée [7].

Les inconvénients d'une telle approche par *machine learning* sont d'une part, la nécessité de disposer d'une base de données représentative des conditions rencontrées dans l'écoulement en

tout point, et d'autre part, rien ne garantit *a priori* que le réseau de neurones sera capable de prédire la bonne physique dès que l'on s'éloigne des bornes dans lesquelles il a été entrainé.

1.3 État des connaissances sur la combustion haute pression en conditions moteurs-fusées

1.3.1 Bancs expérimentaux haute pression

Plusieurs bancs expérimentaux ont été montés conjointement en France et en Allemagne dans les années 90 afin d'étudier la combustion haute pression en conditions moteurs-fusées. On peut nommer parmi eux le banc MASCOTTE (Montage Autonome Simplifié pour la Cryocombustion dans l'Oxygène et Toutes Techniques Expérimentales) [41,115,349,397] mis en place à l'ONERA (voir Fig. 1.29), le banc M3 [163, 269] (voir Fig. 1.30) ou encore le banc P8 [163, 197] (voir Fig. 1.31) mis en place au DLR. Ces bancs expérimentaux étudient un très large spectre de la physique rencontrée dans les moteurs-fusées, à savoir la nature des écoulements en régime sous-critique et supercritique à basse et haute pression ainsi que la combustion des couples H_2/O_2 et CH_4/O_2, l'allumage, les instabilités acoustiques, la stabilisation de la flamme près de l'injecteur ou encore la mesure des flux de chaleur aux parois.

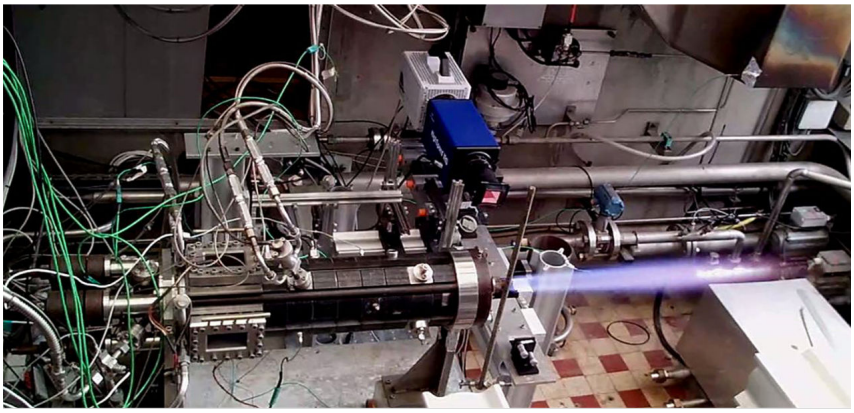


FIGURE 1.29 – Banc MASCOTTE. Illustration tirée de la thèse de Iannetti [132].

Le banc M3 se focalise davantage sur les écoulements à "basse" pression jusqu'à environ 2.0 MPa, le banc MASCOTTE sur des écoulements à "moyenne" pression jusqu'à 10.0 MPa environ (applications générateur de gaz) et le banc P8 sur des applications haute pression jusqu'à près de 36.0 MPa (applications chambre principale du moteur Vulcain). La Fig. 1.32 compare la plage de fonctionnement des bancs expérimentaux M3, MASCOTTE et du P8.

D'autres bancs expérimentaux Allemands comme le BKD [109, 110] (voir Fig. 1.33) qui se concentre principalement sur l'étude multi-injecteurs de flammes LOx/GH_2 ou encore le banc mono injecteur LOx/GCH_4 [398] de TUM (Technische Universität München) (voir Fig. 1.34) sont également destinés à l'étude de la combustion haute pression pour des applications moteurs-fusées. Il semblerait également qu'une version multi-injecteurs (sept injecteurs coaxiaux) du banc de TUM, appelée BKSD, soit également en préparation [398].

En France, on compte également désormais le banc REFINE (*Real-gas Effect on Fluid Injection: a Numerical and Experimental study*) au CORIA [384,386,387] qui étudie des mélanges

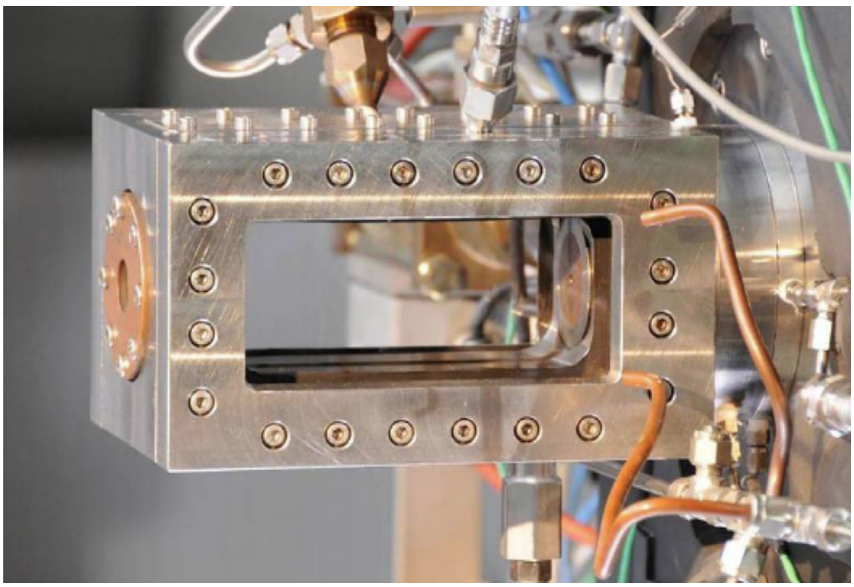


FIGURE 1.30 – Chambre de combustion du banc M3 [269]. Image tirée de [91].

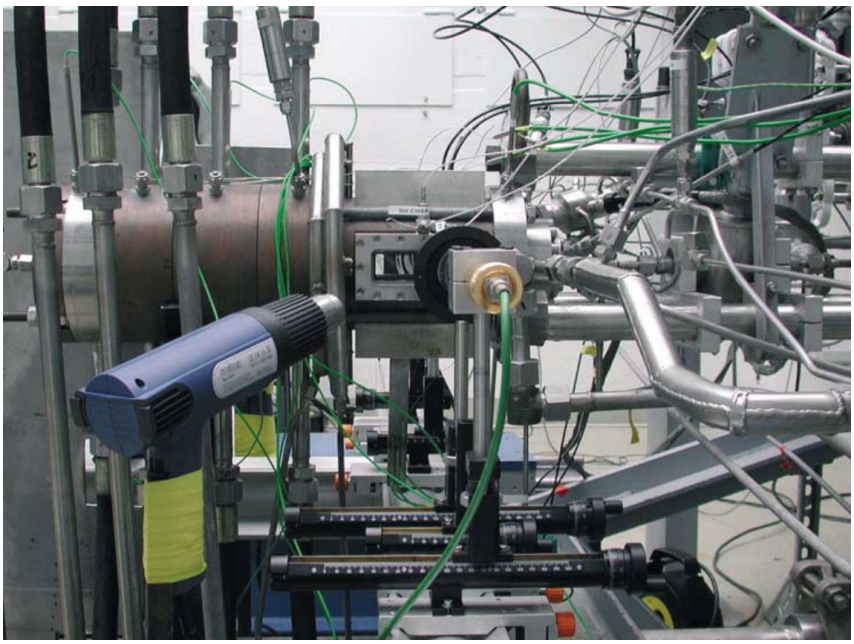


FIGURE 1.31 – Chambre de combustion du banc P8. Image tirée de [115].

C_3H_8/N_2 ou He et C_2H_6/N_2 ou He.

En outre, hors France et Allemagne, d'autres bancs expérimentaux destinés à l'étude d'écoulements haute pression en conditions moteurs-fusées ont également vu le jour ailleurs dans le monde. C'est notamment le cas aux États-Unis, avec le banc de l'AFRL (Air Force Research Lab) [50, 184, 314, 315, 405] en Floride qui étudie des écoulements non réactifs N_2/N_2 ou He et réactifs LOx/GH_2 ou encore avec le banc du CCL (Cryogenic Combustion Laboratory) de l'Université de Penn-State [190, 191, 210, 211, 328] qui étudie principalement les écoulements non réactifs LOx/GO_2 et réactifs GOx/H_2 ou encore LOx/CH_4. On trouve également d'autres bancs expérimentaux aux États-Unis dédiés à l'étude des écoulements hautes pressions, notam-

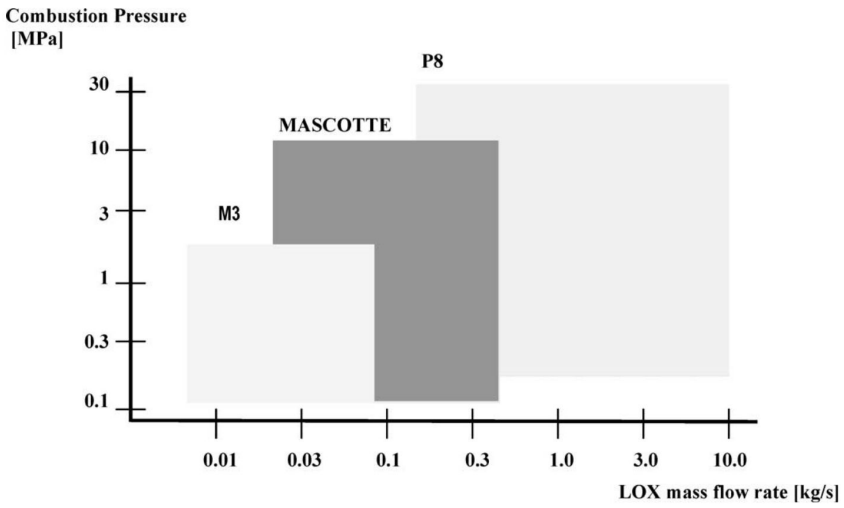


FIGURE 1.32 – Plage de fonctionnement M3, MASCOTTE et P8 [115].

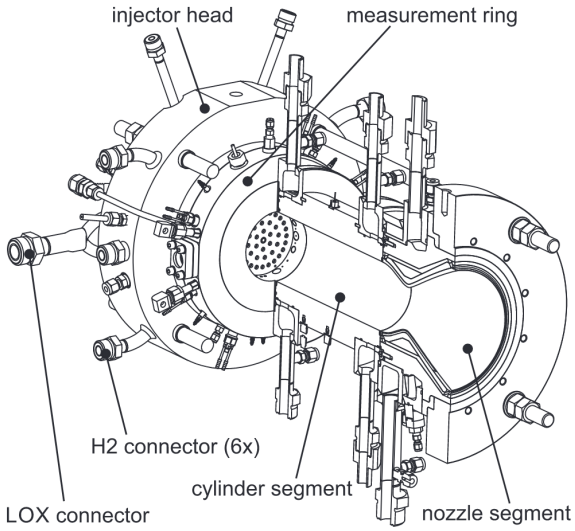


FIGURE 1.33 – Schéma de la chambre de combustion du banc BKD. Image tirée de [2].

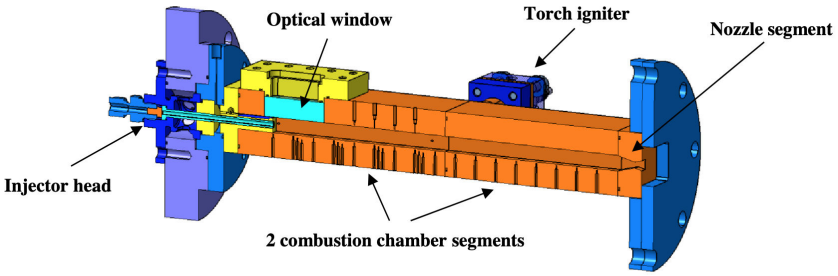


FIGURE 1.34 – Illustration de la chambre de combustion du banc TUM mono injecteur. Image tirée de [398].

ment avec un mélange $C_6F_{12}O/N_2$ [68, 316–318, 340]. En Inde, le banc de l'APLD (Advanced Propulsion and Laser Diagnostics laboratory) étudie également la transition sous-critique à su-

percritique d'un mélange $C_6F_{12}O/N_2$ [241, 242]. Au Japon on peut aussi mentionner le banc de la JAXA (*Japan Aerospace eXploration Agency*) [368, 369] qui étudie un jet coaxial de N_2 en conditions sous-critiques, supercritiques et transcritiques. Enfin, le récent démonstrateur Italien HYPROB [8] se focalise quant à lui sur l'étude d'écoulements réactifs LOx/CH_4.

1.3.2 Écoulements à haute pression

1.3.2.1 Écoulements non réactifs

Études expérimentales

L'étude des écoulements supercritiques a commencé dans les années 70 avec Newman et Brzustowski [244], où un jet sous-critique de CO_2 était injecté dans l'azote sous-critique ou supercritique. Cependant les résultats étaient assez limités par les moyens de l'époque. Il faudra attendre la fin des années 90 et le début des années 2000 avec les expériences d'Oschwald *et al.* [264] et plus particulièrement de Mayer *et al.* [28, 220–222] pour avoir un diagnostic plus poussé. Ces expériences ont été menées dans le but d'étudier l'injection et le mélange de fluides à haute pression dans des conditions proches de celles rencontrées dans les moteurs-fusées. Il a ainsi été montré que le comportement des fluides supercritiques différait de celui des fluides sous-critiques dans la mesure où l'interface séparant la phase liquide de la phase gazeuse était remplacée par une interface diffuse séparant la phase légère de la phase dense en régime supercritique. Pratiquement en même temps, en 2002, Chehroudi *et al.* [48–50] arrivent aux mêmes conclusions, avant d'étudier plus tard des effets d'acoustiques [67]. La Fig. 1.35 montre un exemple d'une ombroscopie réalisée sur un jet d'azote cryogénique dans une chambre contenant de l'azote gazeux.

De nombreuses autres études afin de caractériser un jet (angle d'ouverture, longueur de jet, transition sous-critique - supercrtique, etc.) ont également été réalisées depuis [68, 184, 241, 242, 315–318, 368, 369, 387, 405], généralement avec un gaz inerte comme N_2 ou He.

Pour ne parler que d'une étude relativement récente, Vallée *et al.* [387] ont étudié un jet de C_2H_6 dans du N_2 pour des conditions sous-critiques à supercritiques, sur le banc REFINE du CORIA. Plusieurs points de fonctionnements en terme de pression, température et vitesse d'injection ont été étudiés, comme l'illustre la Fig. 1.36. Les auteurs de l'article ont montré que la température du fluide ambiant jouait un rôle important dans la désintégration du jet lorsque la pression excédait la pression critique du fluide injecté. Dans le cas d'une température ambiante plus élevée que la température critique du fluide injecté, un processus de mélange par diffusion se met en place pour des vitesses d'injections faibles. Pour des vitesses d'injection plus élevées, un processus d'atomisation apparaît mais avec une plus large distribution de goutes.

Études numériques

En parallèle des études expérimentales, des méthodes pour la simulation numérique d'écoulements haute pression se sont développées. On peut par exemple mentionner les travaux de Yang *et al.* [257, 413] ou encore les nombreuses études DNS qui ont été réalisées par Bellan et ses collègues : Miller *et al.* [229, 230], Harstad *et al.* [120, 121], Okong *et al.* [258–260].

Bellan *et al.* [11, 258] ont par exemple montré que dans le cas de simulations d'écoulements supercritiques turbulents, l'évaluation des flux de diffusion (massique et thermique) était de premier ordre devant celle des flux de quantité de mouvement contrairement aux cas d'applications

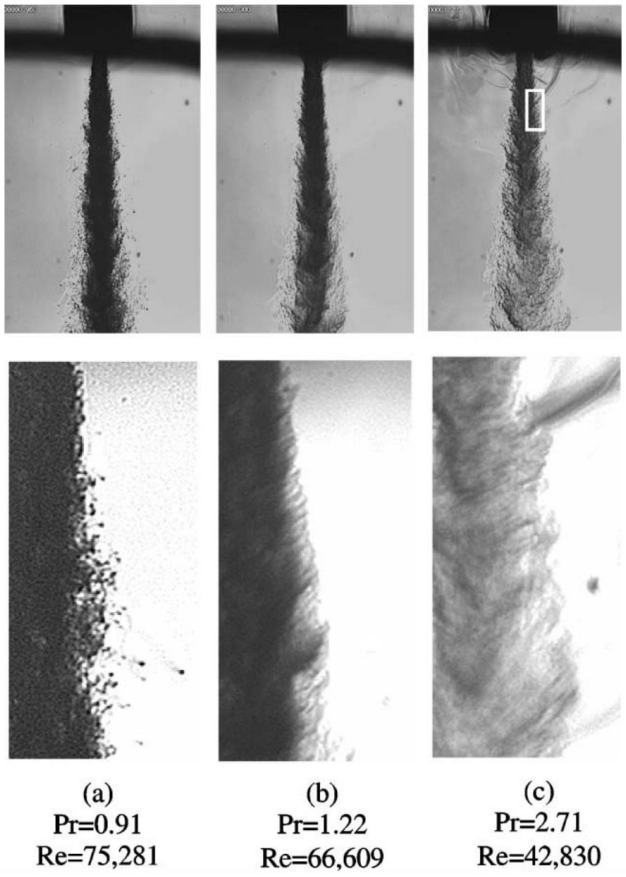


FIGURE 1.35 – Ombroscopie d'un jet d'azote cryogénique dans une chambre contenant de l'azote gazeux à 300 K à différentes pressions [48].

à basse pression. En effet, l'évaluation du taux de dissipation de la turbulence à travers ses trois contributions : visqueuse, chaleur et diffusion massique de chaque espèce a montré que la diffusion des espèces était celle dont le rôle était le plus important et la dissipation visqueuse avait la plus faible contribution [212]. Toutefois, il est aussi mentionné dans leur travaux que l'importance de la précision sur la prédictibilité des flux de diffusion dépend fortement du système d'espèce pris en compte.

De nombreuses simulations LES sur des jets non réactifs ont également été réalisées [29, 48, 144, 282, 283, 334, 337, 385, 424]. Dans la plupart des cas, les modèles de sous-maille utilisés sont ceux développés pour des conditions basses pressions [334, 424], ce qui n'empêche pas d'obtenir des résultats convenables. En effet, on peut prendre l'exemple d'une simulation LES du jet de Mayer [220] réalisée par Schmitt [337]. Dans la Fig. 1.37 qui compare les résultats numériques de Schmitt à ceux expérimentaux de Mayer, on voit que l'on retrouve bien la structure et les caractéristiques principales du jet.

De plus, Petit *et al.* [282, 283] qui ont également simulé le jet de Mayer par LES, ont montré que les informations fournies sur la masse volumique du jet n'étaient pas assez précises surtout dans la zone proche de l'injecteur, où les valeurs expérimentales de la masse volumique du jet, en proche injection, sont assez dispersées. Une meilleure description de la masse volumique est également obtenue avec l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) [358] plutôt qu'avec l'équation d'état de Peng-Robinson (PR) [271].

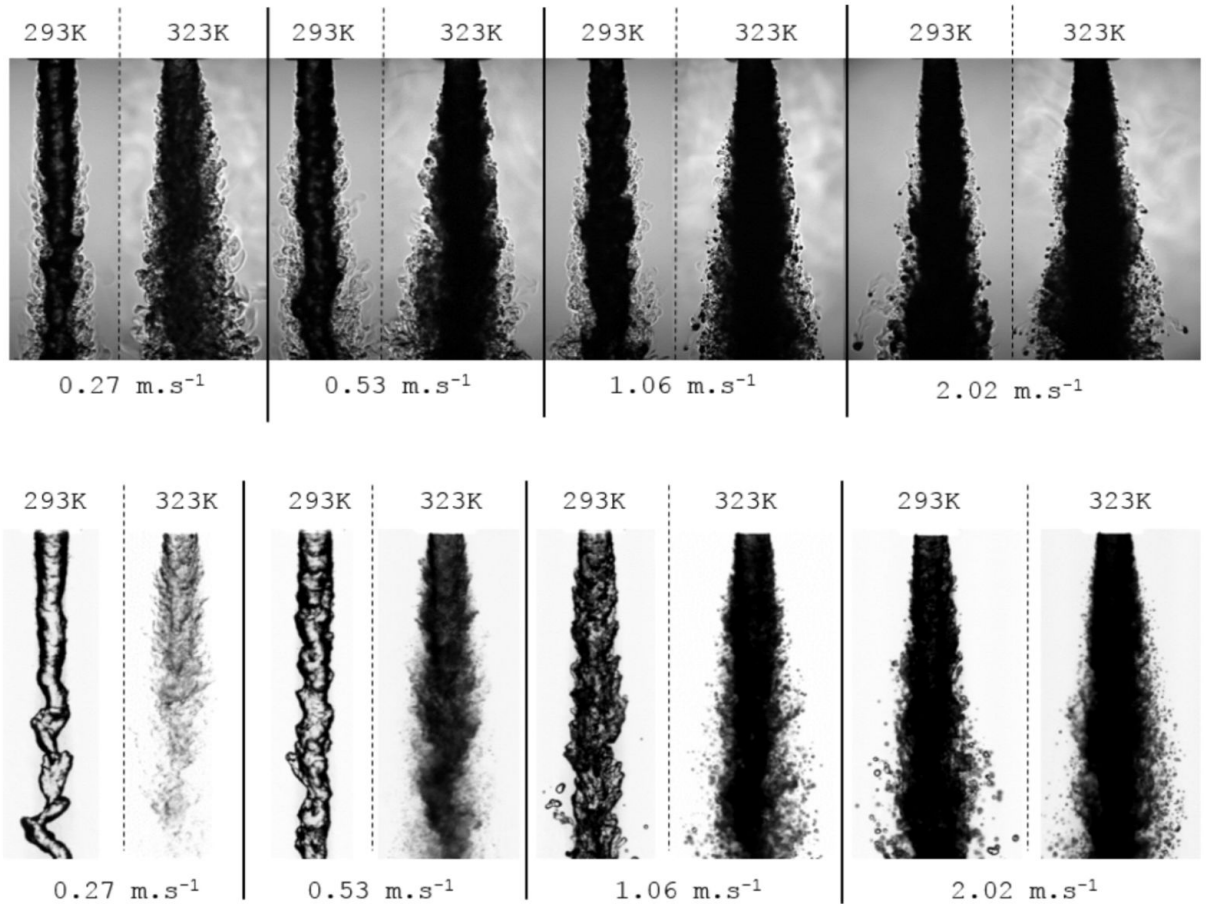


FIGURE 1.36 – Jet de C_2H_6 dans du N_2 à $P = 6$ MPa étudié par ombroscopie (haut) et par DBI (bas). $T_{inj} = 293$ K, $V_{inj} = 0.27, 0.53, 1.06$ et 2.02 m $\cdot$ s^{-1} et $T_{ch} = 293$ K ou 323 K. Images reprises de Vallée [387].

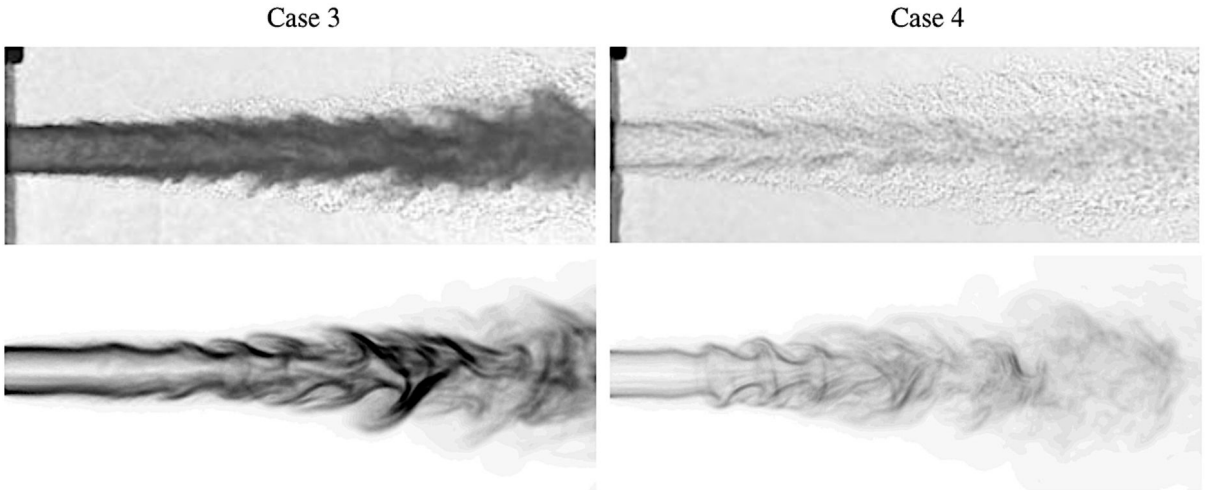


FIGURE 1.37 – Simulation LES du jet de Mayer [220] par Schmitt [337]. Résultats expérimentaux (haut) et simulation LES (bas).

Enfin, on compte également de nombreuses simulations RANS sur l'étude d'écoulements supercritiques non réactifs [65, 66, 159, 266]. Park [266] a notamment comparé des résultats issus de simulations RANS et LES d'un jet cryogènique d'azote afin de montrer que la LES prédisait mieux l'angle d'ouverture des jets haute pression.

1.3.2.2 Écoulement réactifs

Flammes H_2/O_2

En parallèle des expériences menées sur le cas de jets non réactifs, Mayer *et al.* [218, 219] ont également étudié la combustion d'un mélange LOx/H_2 avec un injecteur coaxial. Ils ont montré que la flamme était accrochée à la lèvre du LOx du fait de la faible intensité des zones de recirculations en aval de celle-ci et que l'interface entre l'hydrogène et l'oxygène était toujours séparée par une zone de gaz chauds réactifs, amenant à la conclusion qu'il s'agissait d'une flamme de diffusion. Dans la même période, Ivancic *et al.* [138] ont également étudié expérimentalement

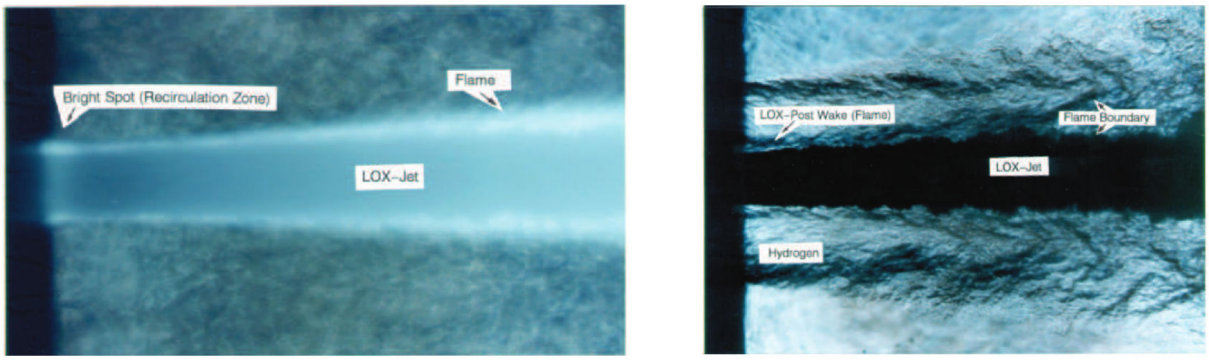


FIGURE 1.38 – Mise en évidence d'une flamme LOx/H_2. Image tirée de [218].

et par simulation numérique RANS la combustion haute pression du couple H_2/O_2. De bonnes concordances entre l'échelle intégrale estimée à partir des résultats expérimentaux et obtenue par simulation ont été trouvées. La simulation RANS basée sur les données expérimentales a également permis d'estimer la taille de l'échelle de Kolmogorov, trouvée plus petite d'un facteur 100 environ par rapport à l'échelle intégrale.

Sur le banc MASCOTTE, la combustion du couple H_2/O_2 a largement été étudié [41, 114, 152, 155]. Candel *et al.* [41] ont par exemple étudié le changement de la structure d'une flamme H_2/O_2 lors du passage sous-critique au régime supercritique. La Fig. 1.39 montre en effet qu'à haute pression, la tension de surface du liquide injecté disparait et par conséquent, l'atomisation primaire et secondaire ainsi que la formation d'un spray et sa vaporisation lors de la combustion n'ont plus lieu d'être.

Habiballah *et al.* [114] ont quant à eux étudié les effets de la pression sur le jet et la structure de flamme H_2/O_2 (voir Fig. 1.40) grâce à des techniques d'imagerie rapide, ombroscopie, rétroéclairage ou encore spectroscopie de diffusion Raman anti-Stokes cohérente (mesure de température avec une haute précision). Ils ont également pu mettre en évidence l'absence de ligaments et de gouttes autour du jet LOx à des pressions supercritiques.

Sur le plan de la simulation numérique, on compte de nombreuses simulations DNS ou quasi-DNS [13, 113, 254, 260, 324, 325, 413] d'une couche de mélange réactive LOx/H_2. On compte

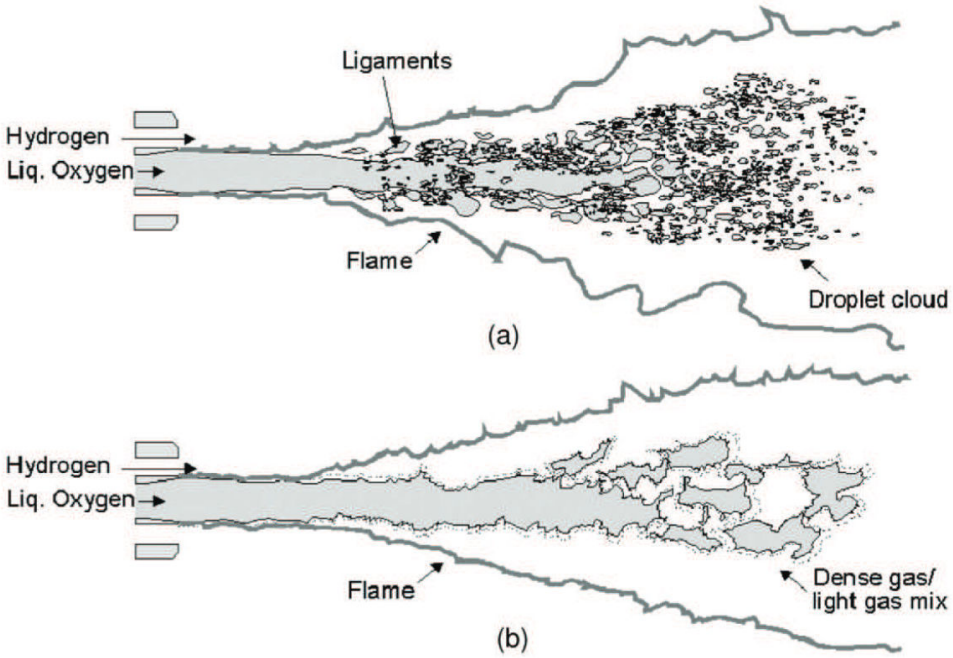


FIGURE 1.39 – Schéma d'une flamme H_2/O_2 avec un injecteur coaxial. (a) Flamme sous-critique et (b) flamme supercritique. Image issue de [41].

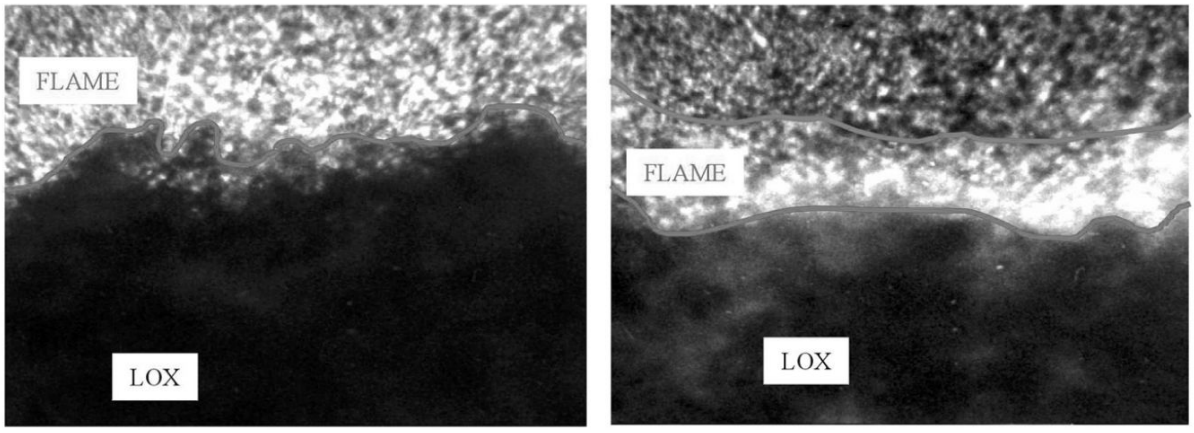


FIGURE 1.40 – Visualisation de l'écoulement par ombroscopie [114]. (a) $P = 3.0$ MPa, (b) $P = 6.0$ MPa.

également des simulations LES [216, 336, 338] sur le banc MASCOTTE ou encore sur le brûleur BKD [107, 108] du banc P8. On peut également trouver des simulations RANS [14, 289] du banc MASCOTTE.

Pour ne parler que des récentes simulations quasi-DNS d'une couche de mélange réactive en configuration *splitter-plate*, en 2016 Ruiz *et al.* [325] ont proposé un benchmark complet pour l'évaluation des modèles haute pression. Sur ce même cas, Guven et Ribert [111, 113] ont simulé

une flamme LOx/H_2 (voir Fig. 1.41) avec une approche par chimie transportée afin d'étudier l'impact d'une modélisation non-idéale des flux de diffusion [99, 101, 102]. Ils ont notamment montré que la prise en compte des effets gaz réel sur les flux de diffusion avait un impact non négligeable sur la vitesse transverse de la couche de mélange.

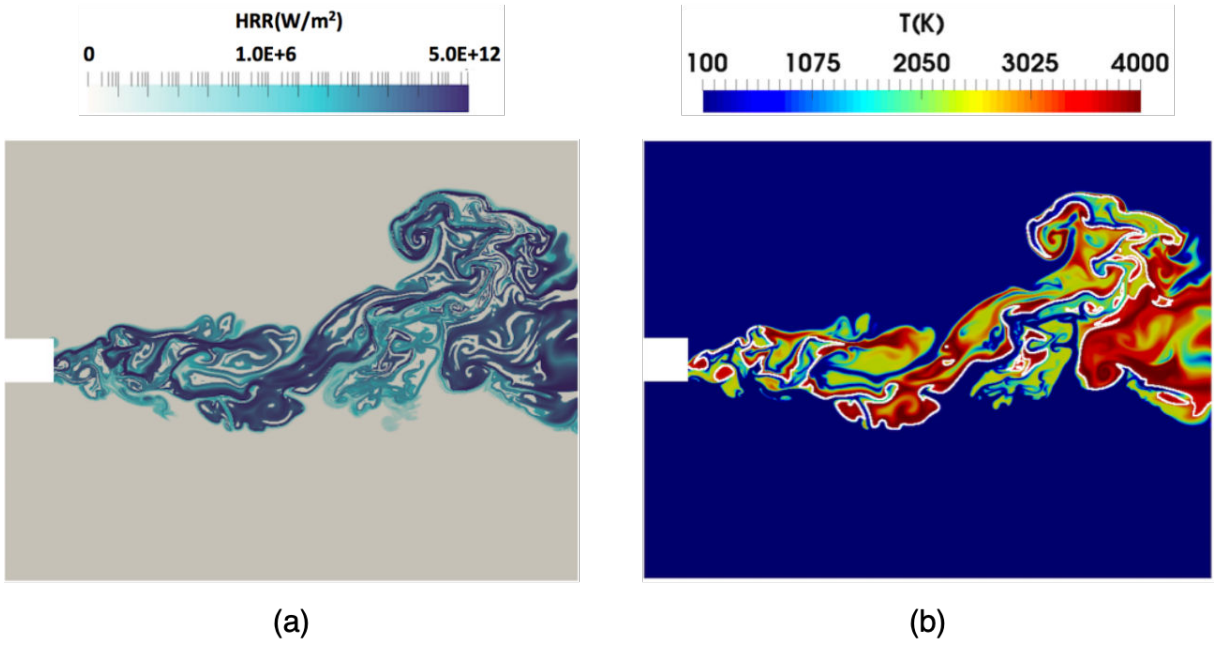


FIGURE 1.41 – DNS (2D) d'une flamme LOx/H_2 en configuration *splitter-plate* avec prise en compte d'une modélisation non-idéale des flux de diffusion [111]. (a) Champ du taux de dégagement de chaleur (HRR) et (b) champ de température.

Flammes CH_4/O_2

Un certain nombre d'expériences sur l'étude de flammes CH_4/O_2 dans des conditions de moteurs-fusées ont été réalisées [195, 196, 263, 327, 347, 348, 350, 411, 428]. L'une des expériences les plus notables est celle de Singla *et al.* [347] qui a permis de mettre en avant un comportement différent de la flamme dans le cas d'une injection doublement transcritique LOx/LCH_4. En effet, si dans le cas d'une injection transcritique simple, la flamme LOx/GCH_4 présente des caractéristiques similaires à celle d'une flamme LOx/GH_2, la flamme doublement transcritique LOx/LCH_4 observée présente un double front de flamme, comme le montre la Fig. 1.42. Les auteurs de l'article envisagent alors deux scénarios possibles afin d'expliquer l'observation effectuée. La première possibilité est que la seconde zone de réaction observée serait due à une diffusion de la lumière émise par la surface interne du flux de méthane transcritique. Cette hypothèse a été écartée ensuite par comparaison avec l'étude d'autres écoulements à froid dans laquelle cette source lumineuse diffusée par le fluide transcritique était négligeable par rapport à la source d'émission de la lumière [347]. Le deuxième scénario envisagé repose sur une interprétation physique de l'observation. Dans cette perspective, la région conique externe serait alimenté par du méthane gazeux et un peu d'oxygène résiduel n'ayant pas brûlé ou que partiellement dans la première zone de réaction, détourné du jet central et entrainé par le méthane transcritique à

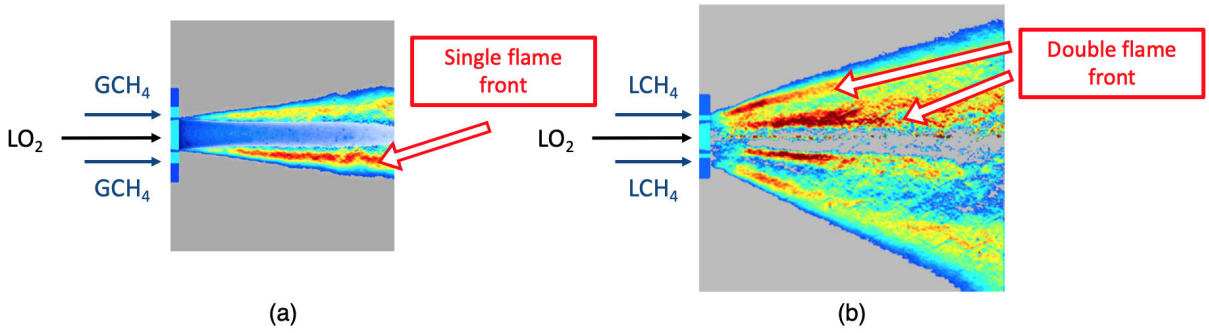


FIGURE 1.42 – Radical CH^* obtenus sur les flammes G2 et T1 par Singla *et al.* [347]. (a) Cas G2 et (b) cas T1.

haute vitesse. La Fig. 1.43 propose une illustration idéaliste du scénario proposé par Singla *et al.* [347].

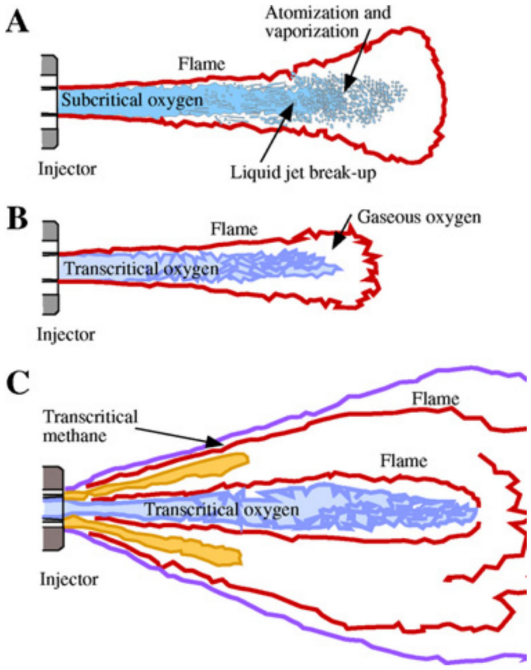


FIGURE 1.43 – Représentation schématique des différentes flammes obtenues dans l'article de Singla *et al.* [347]. (A) Oxygène sous-critique et méthane gazeux. (B) Oxygène transcritique et méthane gazeux. (C) Oxygène transcritique et méthane transcritique.

Côté simulations numériques, la Tab. 1.2 réfère l'ensemble des simulations réactives CH_4/O_2 haute pression réalisées en LES ou DNS, en configuration *splitter-plate* (SP) ou sur le banc MASCOTTE. Bien que cette table se veuille la plus exhaustive possible, il se peut que des cas de simulations n'y soient pas présents. On voit que le banc MASCOTTE, en particulier le cas LOx/GCH_4 a beaucoup été simulé en LES [240, 280, 308, 330, 333, 374], généralement avec une approche en chimie tabulée avec un modèle de flammelettes de diffusion ou une hypothèse de chimie infiniment rapide, à l'exception près de Petit [280] et Ribert *et al.* [308] avec le modèle

Référence	Contexte	Cas test	Modèle turbulence	Interaction chimie-turb.	Commentaires
Unnikrishnan *et al.* [378, 381] (2021-2022)	• DNS (2D) • LES (2D)	SP LOx/GCH$_4$ [130]	• ∅ (DNS) • SM (LES) [352]	∅	• $P = 10.0$ MPa • Flammelettes [275]
Laurent *et al.* [177] (2021)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/LCH$_4$ [347]	σ-model [250]	∅	• $P = 7.5$ MPa • Schéma 9S 82R 7QSS [176] • Acoustique-flamme
Schmitt [330] (2020)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/GCH$_4$ [347]	WALE [249]	β-PDF	• $P = 5.6$ MPa • Chimie Éq.
Laurent *et al.* [176] (2019)	DNS (2D)	SP LOx/LCH$_4$ (MASCOTTE)	∅	∅	• $P = 7.5$ MPa • Schéma 9S 82R 7QSS • Thermique lèvre
Traxinger *et al.* [374] (2019)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/GCH$_4$ [347]	Vreman [399]	β-PDF	• $P = 5.6$ MPa • Flammelettes [422] • VLE [372, 373] • Tab. : [354]
Müller et Pfitzner [240] (2015)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/GCH$_4$ [347]	Vreman [399]	β-PDF	• $P = 5.6$ MPa • Flammelettes [275] • Tab. : [84] ou [186]
Petit *et al.* [280, 281] (2013-2014)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/GCH$_4$ [347]	• SM [352] • SMD [93, 185]	β-PDF	• $P = 5.6$ MPa • PCM-FPI [103, 393] • Tab. : [278] ou [186]
Huo et Yang [130] (2013)	• DNS (2D) • LES (2D)	SP LOx/GCH$_4$	• Grad. [55] • SM [352]	• ∅ (DNS) • PDF (LES)	• $P = 10.0$ MPa • Flammelettes [275] ou FPV [277]
Schmitt *et al.* [333] (2011)	LES (3D)	MASCOTTE LOx/GCH$_4$ [347]	WALE [249]	β-PDF	• $P = 5.6$ MPa • IFCM [393] • Schéma 1 étape
Zong et Yang [427] (2007)	LES (2D)	SP LOx/GCH$_4$	Erlebacher *et al.* [78]	∅	• $P = 10.0$ MPa • Schéma 1 étape [407] • Double lèvre
Ierardo *et al.* [134] (2004)	LES (2D)	SP GOx/GCH$_4$ et LOx/GCH$_4$	FM [95, 96]	EDC	• $P = 15.0$ MPa • Schéma 1 étape

TABLE 1.2 – Résumé des simulations réactives CH_4/O_2 haute pression en LES ou DNS en configuration *splitter-plate* (SP) ou MASCOTTE. FPV = Flamelet-Progress-Variable. SM = Smagorinsky. FM = Fractal Model. SGS = SubGrid-Scales. Grad. = Gradient. IFCM = Infinitely Fast Chemistry Model. Chimie Éq. = Chimie à l'équilibre. Tab. = Tabulation.

PCM-FPI [103, 393] qui tabule la chimie avec des flammes de prémélanges. La Fig. 1.44 montre une comparaison entre les résultats obtenus par Schmitt *et al.* [330] par une simulation LES et les résultats expérimentaux du banc MASCOTTE de Singla *et al.* [347]. On voit sur cette figure que la forme globale de la flamme, identifiée par le radical OH^* est bien reproduite par la simulation.

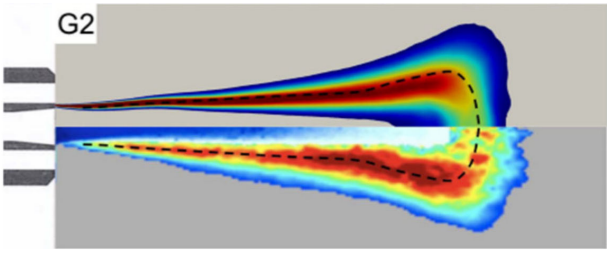


FIGURE 1.44 – Champ du radical OH^* issu d'une LES du cas G2 du banc MASCOTTE réalisée par Schmitt *et al.* [330] (haut). Comparaison avec les résultats expérimentaux de Singla *et al.* [347] (bas).

Traxinger *et al.* [374] ont quant à eux inclus un modèle VLE (Vapor-liquid equilibrium) [372, 373] dans leurs simulations, c'est-à-dire un modèle capable de prédire les changements de phase liquide-vapeur. L'inclusion d'un tel modèle permet de mettre en évidence la formation d'eau liquide en faible quantité de part et d'autre du front de flamme de diffusion, en particulier côté LOx, entrainant une déviation de 40 K sur la température dans le cas d'une simulation 1D. Toutefois, sur le cas G2 du banc MASCOTTE [347], si la prise en compte du modèle VLE dans la simulation LES montre que de l'eau liquide est bel est bien formée principalement autour du jet central (LOx), la fraction massique de liquide créée n'excède pas 3 % et n'affecte que peu les résultats en comparaison avec une approche simplement mono-phasique avec prise en compte des effets de thermodynamique de type gaz réel. Selon les auteurs, cette absence de différence significative est principalement due au fait que la zone physiquement interdite (instable) du domaine VLE n'est pas traversée.

D'autres études LES par comparaison avec une DNS 2D sur une couche de mélange pour l'évaluation de modèles de sous-mailles LES ont également récemment été menées par Unnikrishnan *et al.* [378–381]. Ces études ont par exemple montré que la modélisation des termes de sous-maille avec l'approche de Smagorinsky Dynamique [93, 185] donnait des bons résultats pour une taille de filtre LES proche de la résolution DNS mais devenait de moins en moins pertinente dès lors que la taille du filtre LES était grande par rapport au maillage DNS. Il a aussi été montré l'importance de rajouter un terme de sous-maille pour modéliser le filtrage de la masse volumique, ce qui va dans le même sens que les observations effectuées par Ribert *et al.* [310] sur les déviations induites par le filtrage de l'équation d'état.

De nombreuses simulations RANS sont également disponibles dans la littérature [65, 66, 273, 302, 406], voire hybride RANS/LES [231], mais généralement avec une approche en chimie tabulée et un modèle de flammelettes ou une chimie infiniment rapide. Ces simulations montrent la capacité des modèles actuels à pouvoir prédire un champ de température raisonnable, en particulier en proche paroi, là ou les modèles LES voient généralement leurs limites, mais ne permettent pas d'étudier les effets d'auto-allumage et d'extinction, ni les instabilités de combustion.

Par ailleurs, Ribert *et al.* [310] ont montré que l'emploi d'un modèle de flammelettes devait

être employé avec précaution dès lors que la taille de maille devenait grande devant l'épaisseur de la flamme de prémélange (par exemple un facteur 10) du fait d'une déviation induite par le filtrage de l'équation d'état, en particulier dans le cas d'une oxy-combustion transcritique.

En outre, si l'on se réfère de nouveau à la Tab. 1.2, on voit bien que c'est généralement un cas d'injection simplement transcritique LOx/GCH$_4$ qui est simulé. Si ces conditions d'injections sont représentatives de celles rencontrées dans la chambre de combustion principale d'un moteur-fusée tel que le futur Prometheus, *a priori* dans le générateur de gaz, une injection doublement transcritique LOx/LCH$_4$ est le plus probable [359]. Or uniquement Laurent *et al.* [176] ont simulé par DNS une couche de mélange réactive LOx/LCH$_4$, puis par LES en conditions proches du cas T1 de MASCOTTE [347]. Ce sont d'ailleurs les seuls à avoir employé une chimie réduite pour leur simulation, en faisant toutefois une hypothèse de Lewis constant pour chaque espèce au niveau de la modélisation des flux de diffusion. Le mécanisme chimique employé contenant 9 espèces, 82 réactions et 7 QSS est obtenu par réduction du mécanisme chimique GRI3.0 [354], mais sans réelle preuve de sa capacité à reproduire le comportement du mécanisme détaillé.

Enfin, au vue des données présentées dans la Tab. 1.2, on voit bien que l'on dispose de peu de références en matière de simulation numérique haute fidélité sur un cas de combustion avec une injection doublement transcritique LOx/LCH$_4$ et que les hypothèses de flammelettes ou de chimie infiniment rapide sont rarement remises en questions. Un des objectifs de cette thèse est donc d'apporter un complément d'information sur le sujet, par l'études des structures de flammes haute pression LOx/GCH$_4$ et LOx/GCH$_4$ avec une approche en chimie détaillée de taille modérée.

1.3.3 L'allumage

L'allumage d'un moteur-fusée est une phase critique qu'il faut parfaitement maîtriser. En effet, un décalage à l'allumage de quelques millisecondes par exemple peut engendrer des instabilités de combustion ainsi que des fortes ondes acoustiques pouvant venir détruire certaines pièces du moteur voire même entrainer sa destruction comme par exemple lors du vol 18 d'Ariane en 1986 [92].

L'allumage dans un moteur-fusée peut être déclenché de différentes manières [364] :

- utilisation d'une charge pyrotechnique ;
- utilisation d'une torche plasma ;
- allumage par étincelle électrique (comme une bougie dans un moteur de voiture) ;
- utilisation d'un catalyseur qui initie la réaction chimique entre le combustible et l'oxydant ;
- recourt à une chambre d'allumage qui communique avec la chambre de combustion principale ;
- introduction d'un produit hypergolique[2] (hydrazine, triéthylborane ou triéthylaluminium par exemple) qui s'enflamme spontanément et qui par propagation de la flamme met le feu aux ergols.

Afin d'étudier qualitativement la phase d'allumage, de nombreuses études ont été menées au sein du DLR, en particulier sur le banc M3 [116]. Mayer *et al.* ont notamment reporté que durant

2. État d'un mélange formé par un combustible et un comburant liquides dont la combustion se produit spontanément lorsqu'ils sont en présence.

leurs tests, de petites fluctuations de température au niveau du système d'allumage (un brûleur pilote H_2/O_2) pouvait entrainer un fort décalage à l'allumage [221]. Également sur le banc M3, Sender *et al.* [345] ont étudié la phase d'allumage à basse pression d'un mélange GCH_4/GO_2 et ont identifié trois modes d'allumage, qu'ils qualifient de *smooth ignition* (voir Fig. 1.45) ou de *strong ignition* (voir Fig. 1.46) ou simplement *flame blown out* qui correspond à une extinction de flamme, selon le délais d'allumage. La quantité de gaz frais accumulés dans la chambre de combustion au moment de l'allumage semble avoir un fort impact sur la partie transitoire de l'allumage.

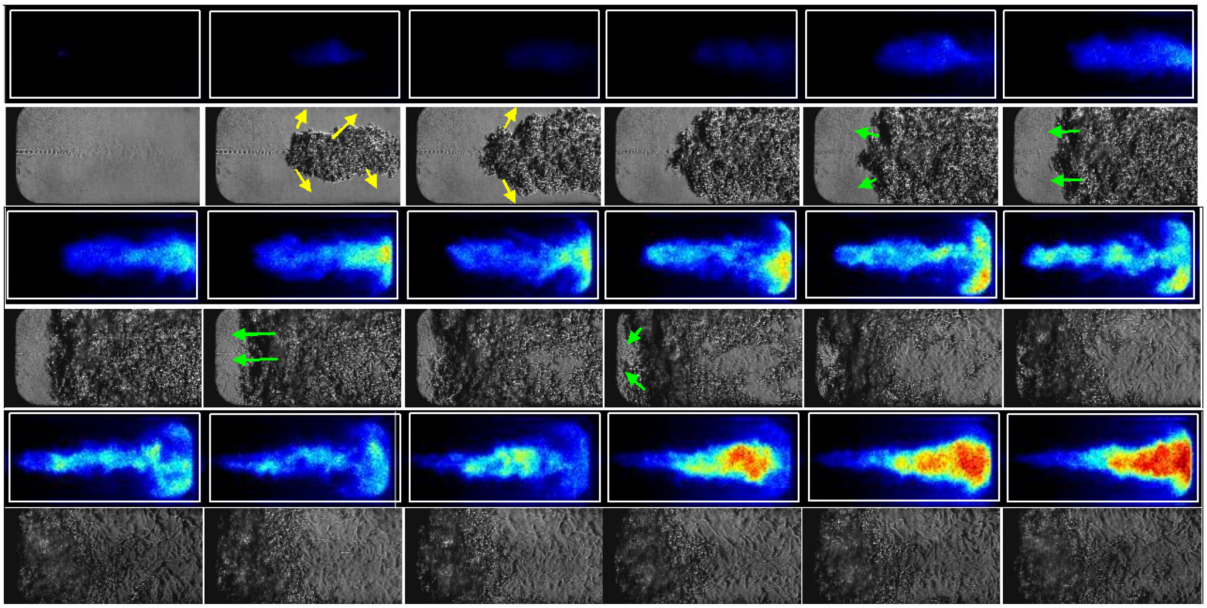


FIGURE 1.45 – Schlieren et radical OH lors d'un allumage *smooth* sur le banc M3 [345] pour un mélange GCH_4/GO_2 et 1.5 bar $< P <$ 3.6 bar.

D'autre part, si classiquement une torche est utilisée pour allumer le mélange dans les bancs expérimentaux comme le banc MASCOTTE [347] ou le M3 [221], de nombreuses études par allumage laser (voir Fig. 1.47) ont également été menées [165, 187, 207, 262, 288, 345, 360]. En effet, si l'allumage laser est potentiellement moins représentatif d'un allumage réel dans un moteur-fusée que par l'utilisation d'une torche, on maîtrise mieux les conditions initiales et aux limites d'un tel allumage. Connaitre précisément la position spatiale de l'allumage, la quantité d'énergie précise libérée ainsi que le temps exact d'allumage sont autant de données cruciales et pertinentes pour étudier avec soin la phase d'allumage par la simulation numérique.

En simulation numérique, les études de la phase d'allumage sont assez rares. Quelques tentatives en simulation RANS ont pu être réalisées [127, 139, 252], mais la nature intrinsèque des simulations RANS (écoulement stationnaire) rend assez limitante l'étude qualitative de la séquence d'allumage qui par nature est un phénomène transitoire. En général dans ces études RANS est plutôt étudié le comportement du système d'allumage (torche/chambre de précombustion) en régime établie, ou bien alors, les phases d'allumage sont étudiées en différentes étapes.

Lacaze *et al.* [170] ont toutefois réalisé une étude LES de la séquence d'allumage laser complète dans une chambre de combustion alimentée en H_2/O_2. La comparaison des résultats obtenus

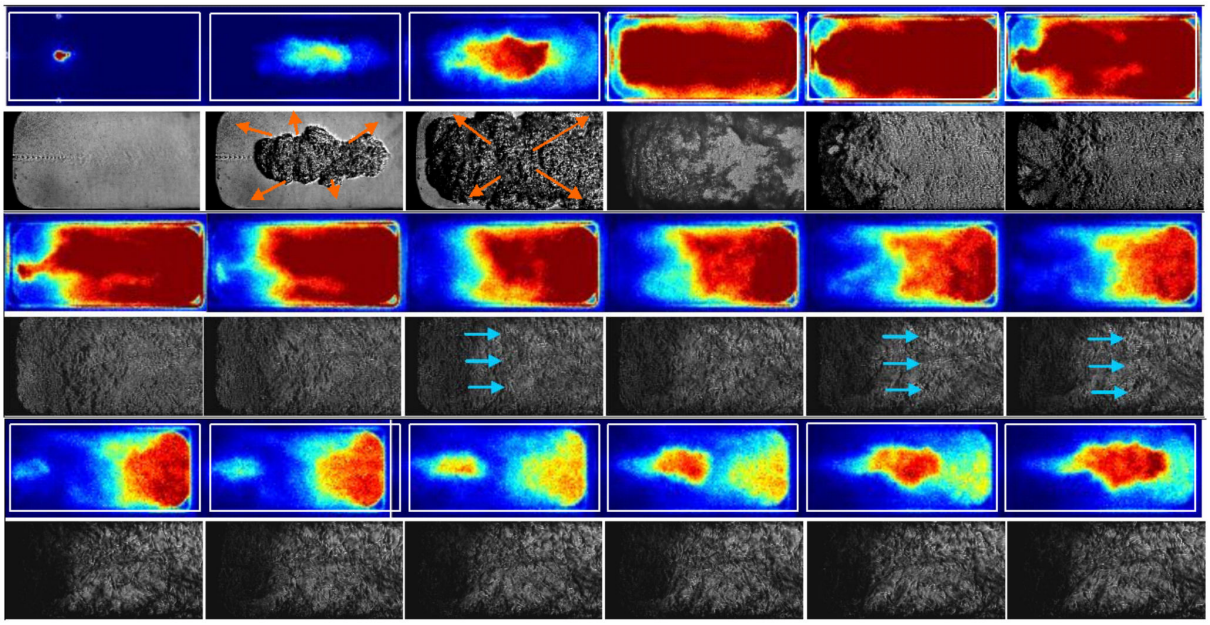


FIGURE 1.46 – Schlieren et radical OH lors d'un allumage *strong* sur le banc M3 [345] pour un mélange GCH_4/GO_2 et 1.5 bar $< P <$ 3.6 bar.

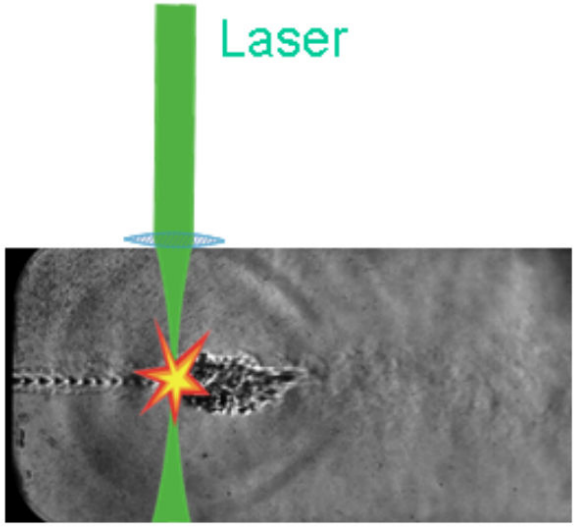


FIGURE 1.47 – Allumage laser dans une chambre de combustion [345].

par la simulation numérique avec les résultats expérimentaux montre une bonne concordance des résultats (voir Fig. 1.48), en particulier la prédiction de l'évolution de la pression dans la chambre de combustion comme le montre la Fig. 1.49.

Dans le cas d'un allumage avec une préchambre de combustion (torche) comme dans le cas du moteur Vinci [85], Buttay *et al.* [35] ont récemment réalisé une simulation numérique haute fidélité de la combustion d'un jet coaxial sous-détendu établie (voir Fig. 1.50). Guven [112] a quant à lui réalisé une étude LES de la combustion supersonique H_2/O_2 dans un allumeur de moteur-fusée (injecteur coaxial). L'étude se passe en deux phases. La Fig. 1.51 illustre la première phase qui simule le remplissage de la chambre de combustion par de l'hydrogène initialement

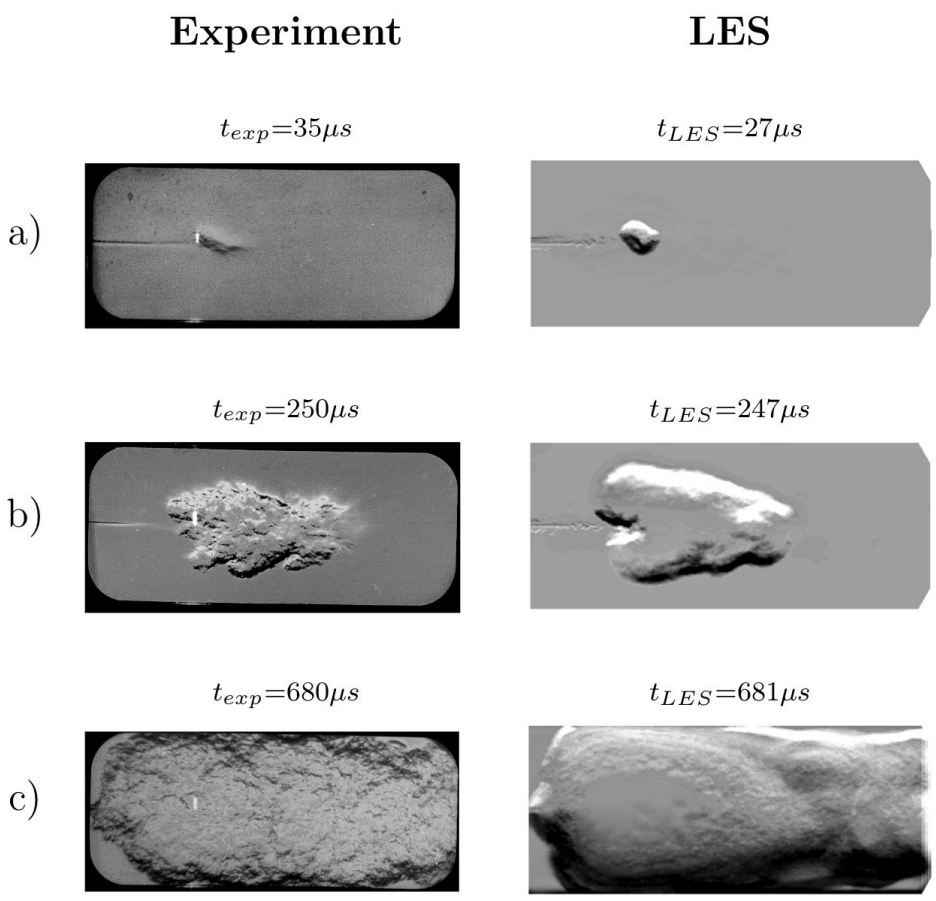


FIGURE 1.48 – Comparaison des champs de Schlieren durant la séquence d'allumage entre résultats expérimentaux [329] et la simulation LES [170].

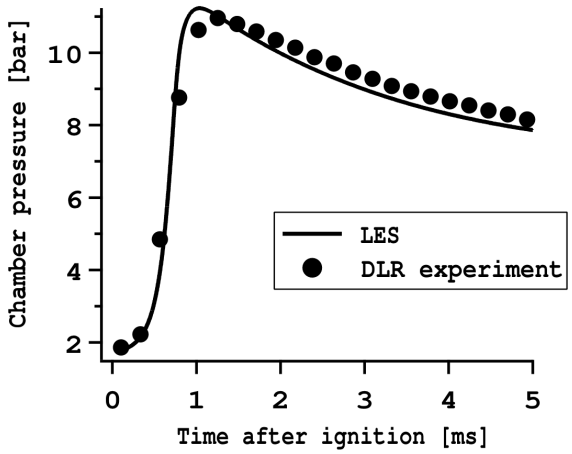


FIGURE 1.49 – Évolution de la pression dans la chambre de combustion [170].

pré-remplie par un gaz inerte alors que la Fig. 1.52 illustre la deuxième phase qui porte sur l'injection de gaz brulés (dont O_2 et H_2O) dans la chambre de combustion remplie d'hydrogène. Contrairement à l'étude de Buttay [35] qui s'intéresse au régime établi, celle de Guven [112]

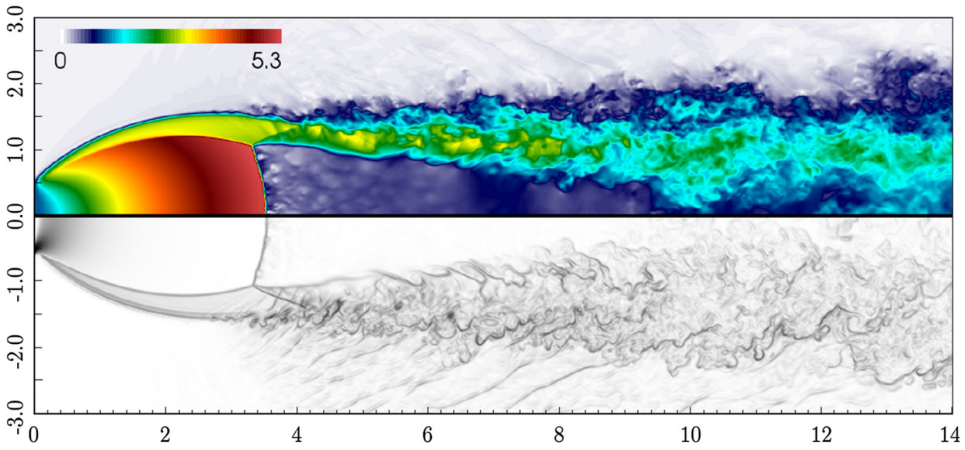


FIGURE 1.50 – Structure d'un jet fortement sous-détendu : champs instantané du nombre de Mach (haut) et Schlieren (bas) [35].

s'intéresse au régime transitoire. Enfin, aucune simulation haute fidélité qualitative (LES ou

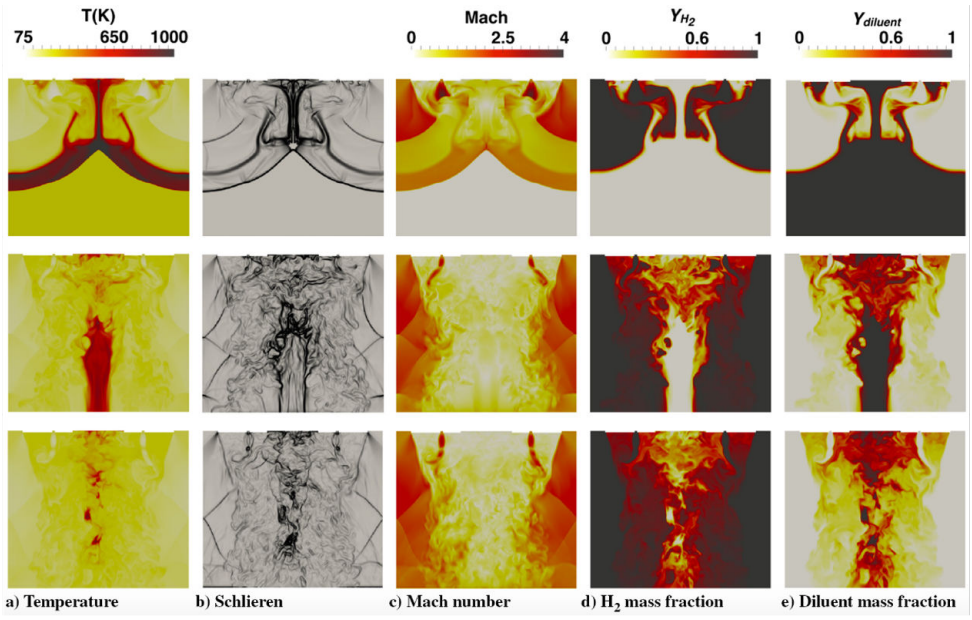


FIGURE 1.51 – Coupes 2D de champs instantané 3D à différents instants durant la phase d'injection de l'hydrogène [112].

DNS) de la séquence d'allumage en conditions moteurs-fusées d'un mélange CH_4/O_2 n'a, encore, *a priori*, été réalisée à ce jour, ce qui est probablement lié au manque de connaissances et de données expérimentales fiables sur le sujet.

1.3.4 Instabilités de combustion

Les instabilités de combustion ont été découvertes dans les moteurs-fusées à propulsion liquide ou solide vers la fin des années 1930 environ. Depuis, dans pratiquement toutes les phases de développement des moteurs, des instabilités ont été constatées [412]. La Fig. 1.53 présente

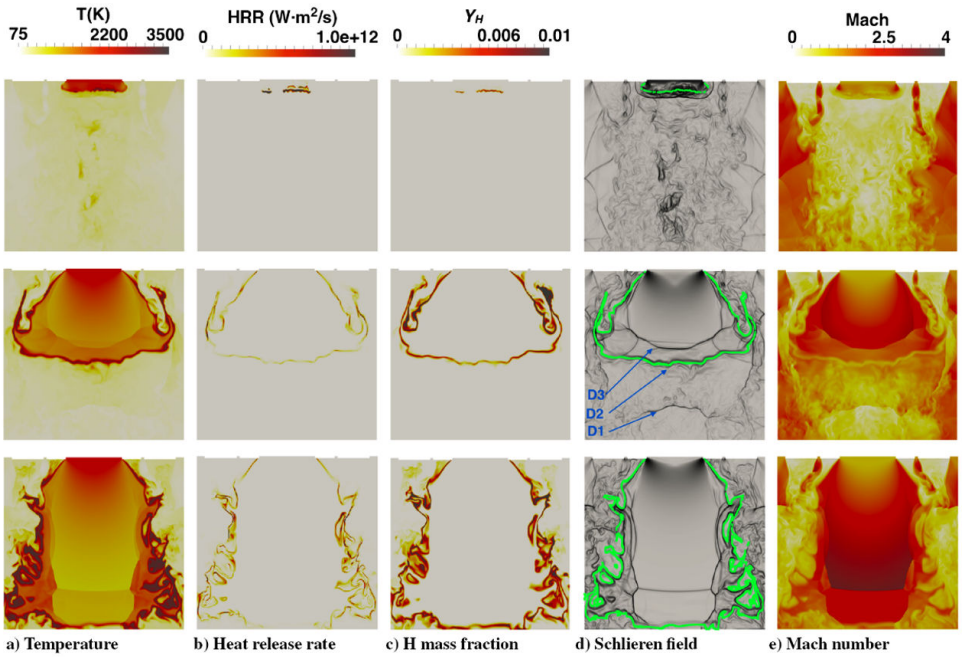


FIGURE 1.52 – Coupes 2D de champs instantané 3D à différents instants durant la phase d'injection des gaz brulées [112].

une chronologie des évènements majeurs liés aux instabilités de combustion dans les moteurs-fusées. L'incident certainement le plus connu est celui du moteur F-1 propulsant la fusée Saturn

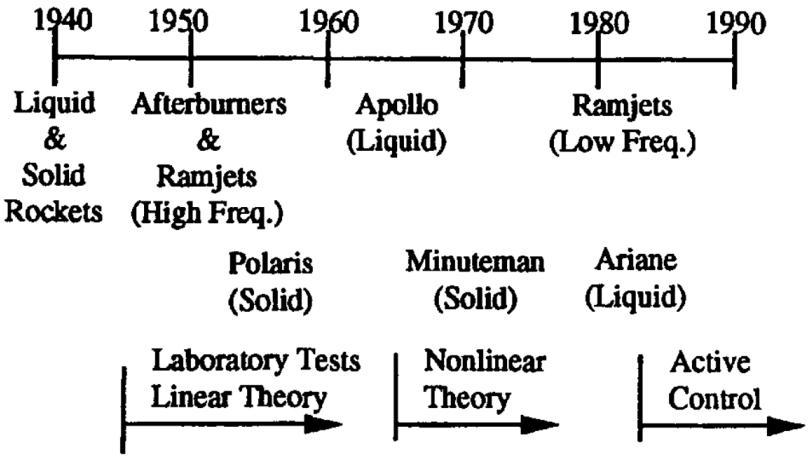


FIGURE 1.53 – Chronologie des instabilités de combustion entre 1940 et 1990 environ [64].

V lors des missions Apollo durant les années 60 et 70. La Fig. 1.54 montre d'ailleurs un exemple d'un moteur de fusée Américain détruit par des instabilités de combustion durant sa phase de développement dans les années 60. Les recherches pour trouver des solutions afin de limiter ses instabilités ont coûté des milliards de dollars de développement [256].

Peu de communications scientifiques sur le sujet furent partagées par les industriels dans ces années-là et encore jusqu'à aujourd'hui [290]. Il faudra attendre le début des années 2000 pour voir apparaître les premières études expérimentales qualitatives dédiées aux instabilités

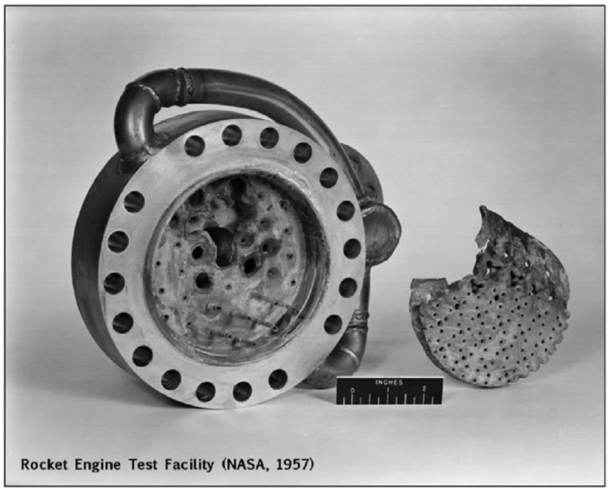


FIGURE 1.54 – Moteur de fusée détruit par des instabilités de combustion durant sa phase de développement dans les années 60. Image tirée de [290].

de combustion dans les moteurs-fusées. Par exemple en 2006, Richecœur *et al.* [312, 313] ont étudié sur un banc expérimental multi-injecteur le couplage entre une flamme LOx/GCH_4 et des ondes acoustiques transverses hautes fréquences. Plus tard en 2013, Méry *et al.* [228] ont également étudié l'effet de perturbations acoustiques sur la dynamique d'un ensemble de cinq flammes issues de jets LOx/GCH_4 coaxiaux (voir Fig. 1.55), cette fois-ci sur une version multi injecteur du banc MASCOTTE, également appelée MIC.

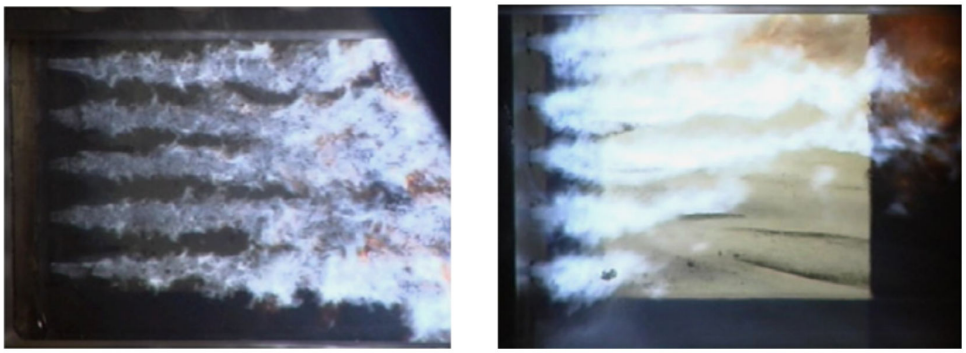


FIGURE 1.55 – Vue de cinq flammes issues de jets coaxiaux LOx/GCH_4 à $P = 2.6$ MPa soumises à une perturbation acoustique transverse (b) ou non (a) [228].

Hakim *et al.* [119] ont quant à eux montré que la flamme pouvait osciller selon deux modes différents qui dépendent de la fréquence de la perturbation acoustique imposée. En effet, le cœur dense de la flamme est raccourci et aplani à haute fréquence (bien supérieure à la fréquence d'oscillation du cœur dense), laissant apparaître des oscillations verticales. À basse fréquence, la flamme oscille à la manière d'un drapeau qui flotte au vent, comme le montre la Fig. 1.56. Des conclusions similaires ont été obtenues dans le cas de simulations LES [118, 332] du cas [228].

En 2014, Selle *et al.* [341] passent en revue différents résultats obtenus par des simulations LES ou par des solvers acoustiques. Il en ressort que dans l'ensemble, les simulations issues de codes différents mettent en évidence les mêmes mécanismes de stabilisation de flamme et

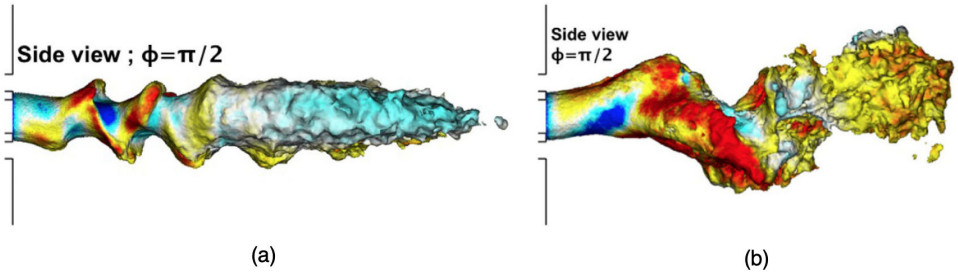
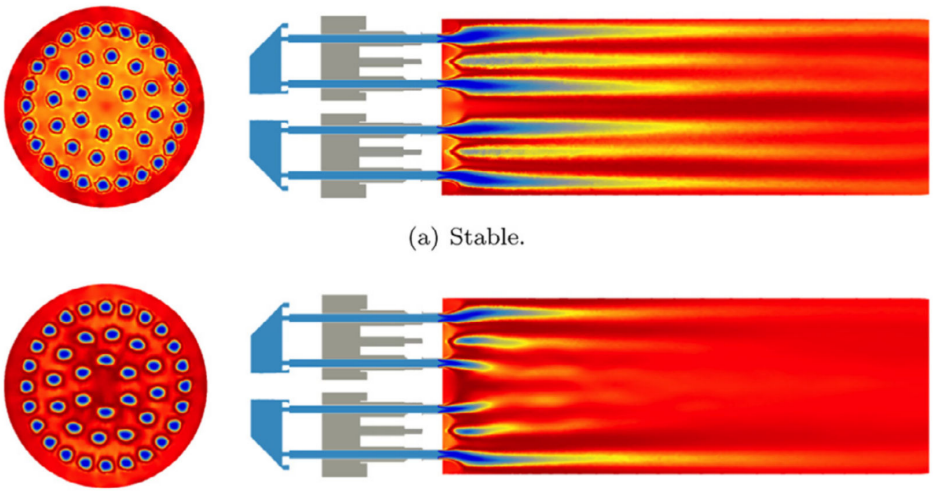


FIGURE 1.56 – Réponse de la flamme à une perturbation acoustique [119] : iso-surface de température 1500 K colorée par la vitesse axiale (rouge : 90 $m \cdot s^{-1}$ et bleu : -10 $m \cdot s^{-1}$). (a) Perturbation acoustique haute fréquence et (b) perturbation acoustique basse fréquence.

d'instabilités.

Différentes études LES pour étudier le mécanisme de déclenchement des instabilités de combustion ainsi que la réponse dynamique d'une flamme LOx/GH_2 à des perturbations acoustiques ont également été menées sur le banc expérimental BKD [108] entre 2016 et 2017. Urbano [382,383] a notamment montré que la vitesse du son avait un impact notable sur la fréquence et la forme des modes acoustiques, comme le montre la Fig. 1.57 qui présente les champs de vitesse du son moyennés dans le temps correspondant aux cas stables et instables de la configuration étudiée. L'influence de la température d'injection du combustible sur les modes d'instabilités



(a) Stable.

(b) Unstable.

FIGURE 1.57 – Champs moyens de la vitesse du son utilisés comme donnée d'entrée dans le solver AVSP issus d'une simulation LES [383]. Comparaison des conditions stable (a) et instable (b). Les données vont de 239 $m \cdot s^{-1}$ (bleu clair) à 1997 $m \cdot s^{-1}$ (rouge foncé).

de combustion ont également été étudié par Gröning *et al.* [107] de manière expérimentale dans le cas d'une flamme hydrogène et par Schmitt *et al.* [338] en LES.

En 2017, Poinsot [290] a également réalisé une revue très complète sur les avancées et les challenges en cours sur la compréhension et la prédiction des instabilités de combustion dans les moteurs réels (aéronautique, spatial, automobile, etc.).

Enfin, très récemment, Laurent [173] et Bahde [3] ont développé un réseau acoustique bas

ordre qui couplé à un code de CFD, permet l'étude d'instabilités de combustion dans des géométries complexes [174,175]. Laurent [177] a notamment pu étudier en LES la réponse d'une flamme LOx/LCH$_4$ à une perturbation acoustique dans le cas d'une injection doublement transcritique du banc MASCOTTE, ce qui a permis de montrer que la répartition spatiale et l'intensité du dégagement de chaleur produit par la flamme dépendaient fortement de la fréquence de la perturbation acoustique. La Fig. 1.58 illustre la différence de comportement de la flamme en fonction de la fréquence de la perturbation acoustique.

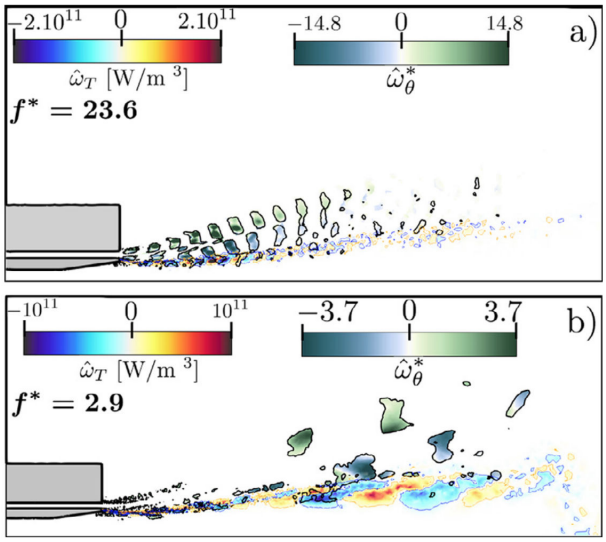


FIGURE 1.58 – Réponse de la flamme à des perturbations acoustiques de fréquences différentes [177]. (a) Perturbation acoustique haute fréquence et (b) perturbation acoustique basse fréquence.

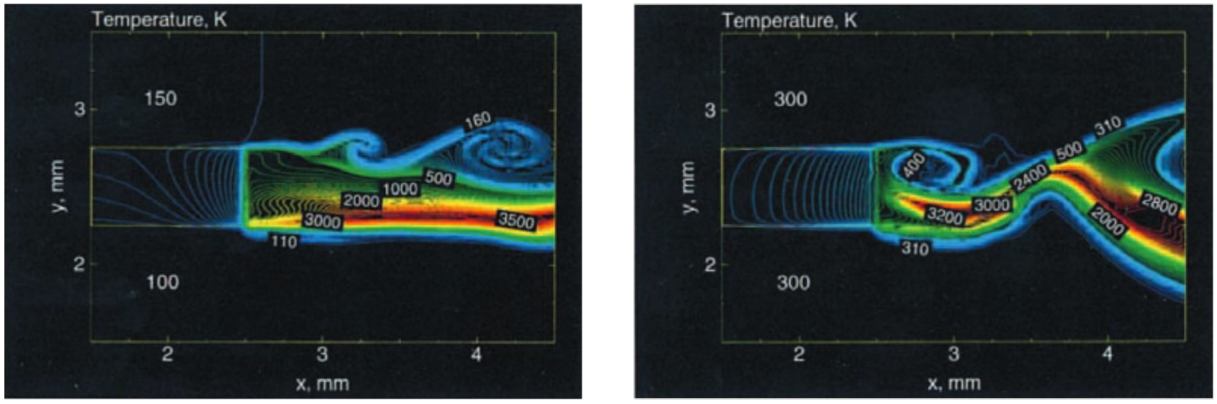
1.3.5 Stabilisation de flamme

De nombreuses études sur la stabilisation des flammes LOx/H$_2$ et LOx/CH$_4$ ont pu être menées au cours des dernières années.

En 1997 déjà Oefelein [253] étudiait pendant sa thèse la stabilisation de flammes LOx/H$_2$. Il a notamment pu comparer les effets d'une injection transcritique (pour l'O$_2$) par rapport à une injection supercritique, comme le montre la Fig. 1.59. En effet, Oefelein observe que les structures tourbillonnaires dans le sillage de la lèvre sont bien plus importantes dans le cas d'une injection supercritique pure que dans le cas d'une injection transcritique en O$_2$. Lorsque l'oxygène est injecté à faible température (cryogénique), il se diffuse moins et est moins impacté par la turbulence générée par la lèvre que lorsqu'il est injecté à plus haute température (supercritique).

Juniper *et al.* [151] ont étudié expérimentalement la structure d'une flamme LOx/H$_2$ et les effets du taux d'étirement sur son extinction (voir Fig. 1.60). Juniper [150] a également pu montrer que le ratio $\Psi = h/\delta_f$ renseignait sur la condition de stabilité de flamme, avec h la hauteur de la lèvre et δ_f l'épaisseur de la flamme. En effet, si $\Psi > 1$ alors la lèvre est plus épaisse que la flamme et donc la flamme peut se stabiliser derrière la lèvre. Dans le cas où la flamme est plus grosse que la lèvre alors la flamme devient instable.

Plus tard en 2005, Oefelein [254] a quant à lui étudié le mécanisme de stabilisation d'une



(a) (b)

FIGURE 1.59 – DNS (2D) d'une couche de mélange LOx/H_2 réactive [253]. (a) Injection transcritique et (b) injection supercritique.

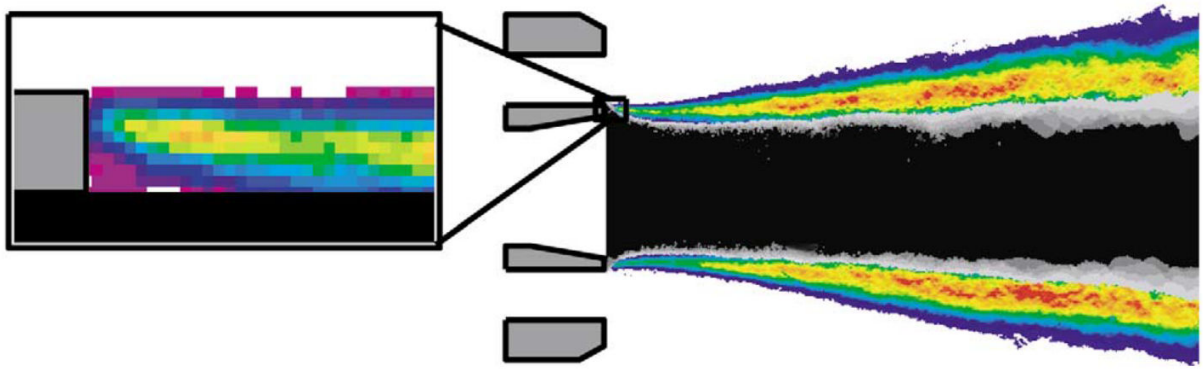
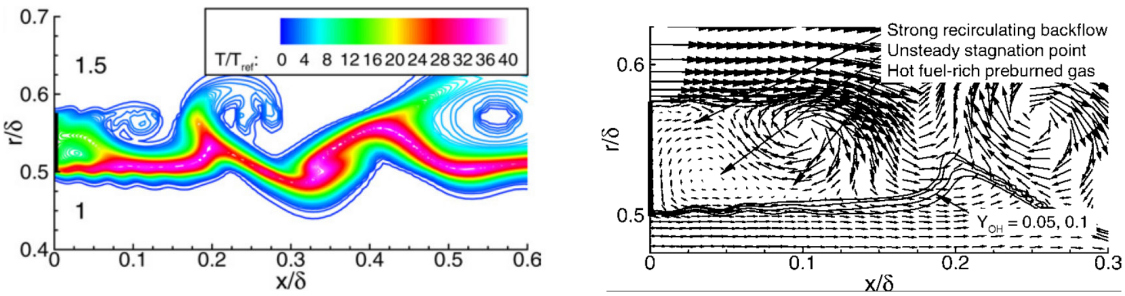


FIGURE 1.60 – Image de l'intensité d'émission du front de flamme LOx/H_2 et zoom sur la zone proche injecteur (gauche) [151].

flamme LOx/H_2, cette fois-ci pour des conditions proches de celle du banc P8, avec P = 10.1 MPa. Il a montré que dans son cas, la flamme s'accrochait au bas de la lèvre à cause d'une forte zone de recirculation derrière celle-ci, avec la présence d'un point de stagnation mobile dans le temps. La Fig. 1.61(b) illustre le mécanisme de stabilisation. D'autres études [255, 424]



(a) Champ de température (b) Mécanisme de stabilisation de flamme

FIGURE 1.61 – Flamme LOx/H_2 à P = 10.1 MPa [254].

notamment sur du méthane [425] iront dans le même sens.

En 2007, Singla *et al.* [348] ont étudié expérimentalement la stabilisation de flammes LOx/GH_2 et LOx/GCH_4 avec une méthode PLIF (*Planar laser induced fluorescence*) sur l'OH. Ils ont montré que le critère de stabilité Ψ de Juniper [151] semblait effectivement bien s'appliquer dans leur cas. En effet, sur une flamme LOx/GH_2 à $P = 6.3$ MPa l'épaisseur de flamme était plus petite ou du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la flamme, assurant un point d'ancrage de la flamme relativement stable derrière la lèvre. Alors que dans le cas d'une flamme LOx/GCH_4 à $P = 2.0$ MPa, l'épaisseur de flamme étant supérieure à l'épaisseur de la lèvre, la flamme était stabilisée plus loin derrière la lèvre et était bien plus sensible aux fluctuations de l'écoulement amont. La Fig. 1.62 présente un schéma qui illustre la stabilisation de la flamme et la Fig. 1.63 montre des images de la PLIF sur l'OH proche de la lèvre de l'injecteur à différents instants.

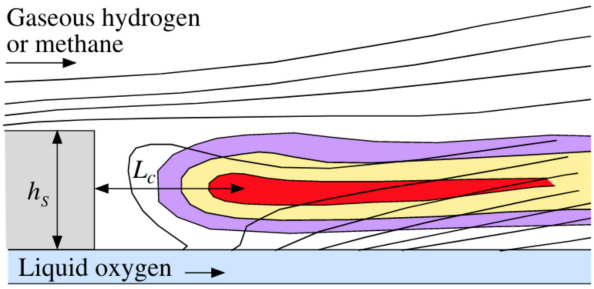


FIGURE 1.62 – Schéma stabilisation de flamme [348] derrière la lèvre de l'injecteur séparant le LOx du fuel utilisé (H_2 ou CH_4).

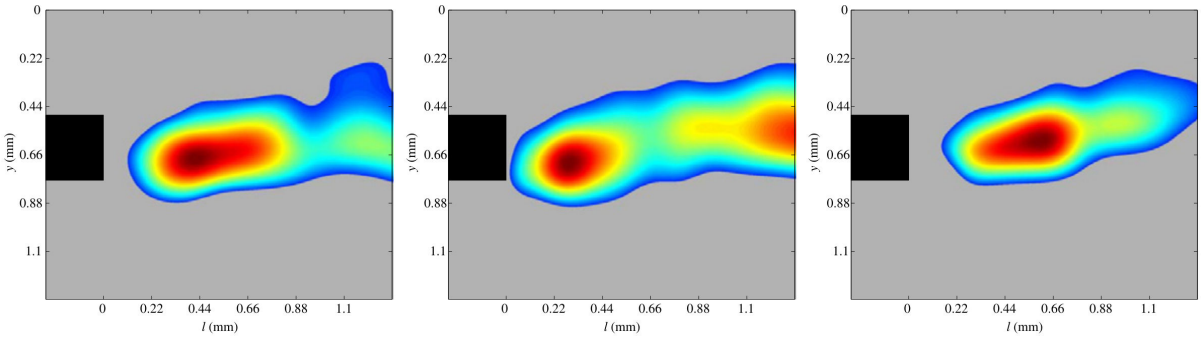


FIGURE 1.63 – OH-PLIF images d'une flamme LOx/H_2 [348].

En 2009, Lux et Haidn [196] ont également étudié la stabilisation d'une flamme LOx/CH_4 sur le banc P8. Ils ont montré que dans l'ensemble le comportement de la flamme LOx/CH_4 ne différait pas beaucoup de celui d'une flamme LOx/H_2. Dans tous les cas, la flamme s'accroche dans le sillage de la lèvre qui sépare le LOx du CH_4. Ils ont également pu étudier l'effet du renfoncement (*recess*) de la lèvre séparant le LOx du CH_4 dans un autre article [195]. Ils ont ainsi pu montrer que le renfoncement de la lèvre du LOx augmentait l'expansion de la flamme juste après l'allumage, mais cet effet diminuait à mesure que le ratio de quantité de mouvement J augmentait. Ils ont également observé des instabilités hydrodynamiques lors de l'emploi de la lèvre avec renfoncement, contrairement au cas standard.

En 2011, Ruiz *et al.* [324] ont réalisé une simulation DNS (2D) d'une flamme LOx/H_2 afin d'étudier la stabilisation de la flamme derrière une plaque séparatrice (communément appelée *splitter-plate*). Ils ont observé que la flamme s'accrochait à la lèvre, les gaz brulés étant directement en contact avec celle-ci. Les auteurs ont conclu que l'observation était logique vis-à-vis de la condition de paroi adiabatique employée.

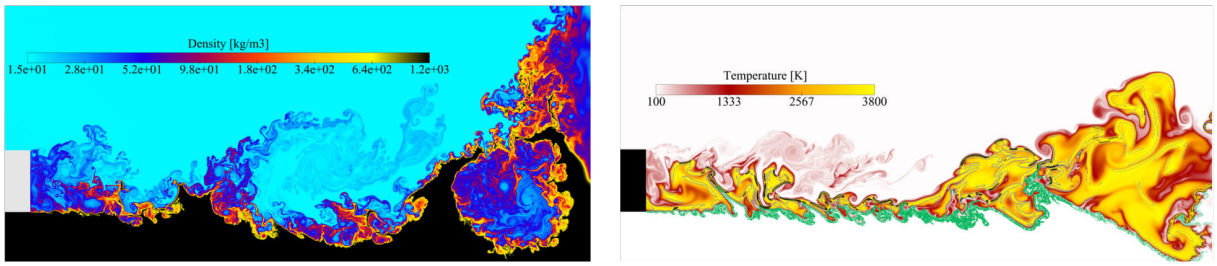


FIGURE 1.64 – Simulation DNS (2D) d'une couche de mélange LOx/H_2 réactive, Ruiz *et al.* [324]. (a) Champ de masse volumique (écoulement à froid) et (b) champ de température pour (écoulement réactif).

Mari a durant sa thèse [208] en 2015, mis en place un couplage solide/fluide dans le solveur AVBP permettant la résolution de la thermique dans le solide. Ainsi, il a pu étudier sur une couche de mélange réactive l'effet de la thermique de la lèvre séparant le LOx de l'H_2 sur la flamme et réciproquement l'effet la flamme sur la lèvre. Il a montré la présence d'un fort gradient de température dans le fluide proche de la paroi contrairement au cas adiabatique et l'impact que cela pouvait avoir sur la répartition des espèces radicalaires derrière la lèvre (voir Fig. 1.65). La flamme semble se stabiliser juste derrière la lèvre de l'injecteur vers le bas de celle-ci, alors qu'elle est directement accrochée à la lèvre dans le cas adiabatique.

Très récemment, Laurent *et al.* [176] ont étudié le mécanisme de stabilisation d'une flamme LOx/LCH_4 dans le cadre d'une injection doublement transcritique sur des conditions proches de celle du cas T1 dans le cas MASCOTTE [347] avec une pression modifiée de 7.5 MPa. Les auteurs de l'article ont montré une différence de comportement sur le mécanisme de stabilisation de la flamme selon que la lèvre de l'injecteur était supposée adiabatique ou que la thermique de cette dernière était résolue. En effet, dans le cas adiabatique, la stabilisation de la flamme semble fortement influencée par une poche de gaz chaud se formant dans une seconde zone de réaction côté LOx et venant interagir avec la couche de mélange se formant derrière la lèvre. Alors que dans le cas où la thermique est résolue, cette poche de gaz chauds n'est pas présente du fait du refroidissement de la lèvre côté LOx et donc une seule zone de réaction primaire est observée comme le montre la Fig. 1.66.

Toutefois, dans ce cas, la flamme oscille à la manière du battement d'un drapeau, derrière la lèvre de l'injecteur où deux zones de recirculations sont mises en évidences. La position d'accroche de la flamme oscille entre deux positions dont l'une est située dans le coin inférieur de la lèvre (côté LOx) et l'autre est située plus haut du côté LCH_4. Autrement dit, il y a un décalage entre la position de la flamme derrière l'injecteur et la position du point chaud sur la lèvre et l'écoulement tourbillonnaire dans le sillage de la lèvre fait office de perturbation périodique pour l'oscillateur. La flamme oscille alors entre deux positions L_{up} et L_{low} sans jamais atteindre un équilibre stable, comme le montre la Fig. 1.67.

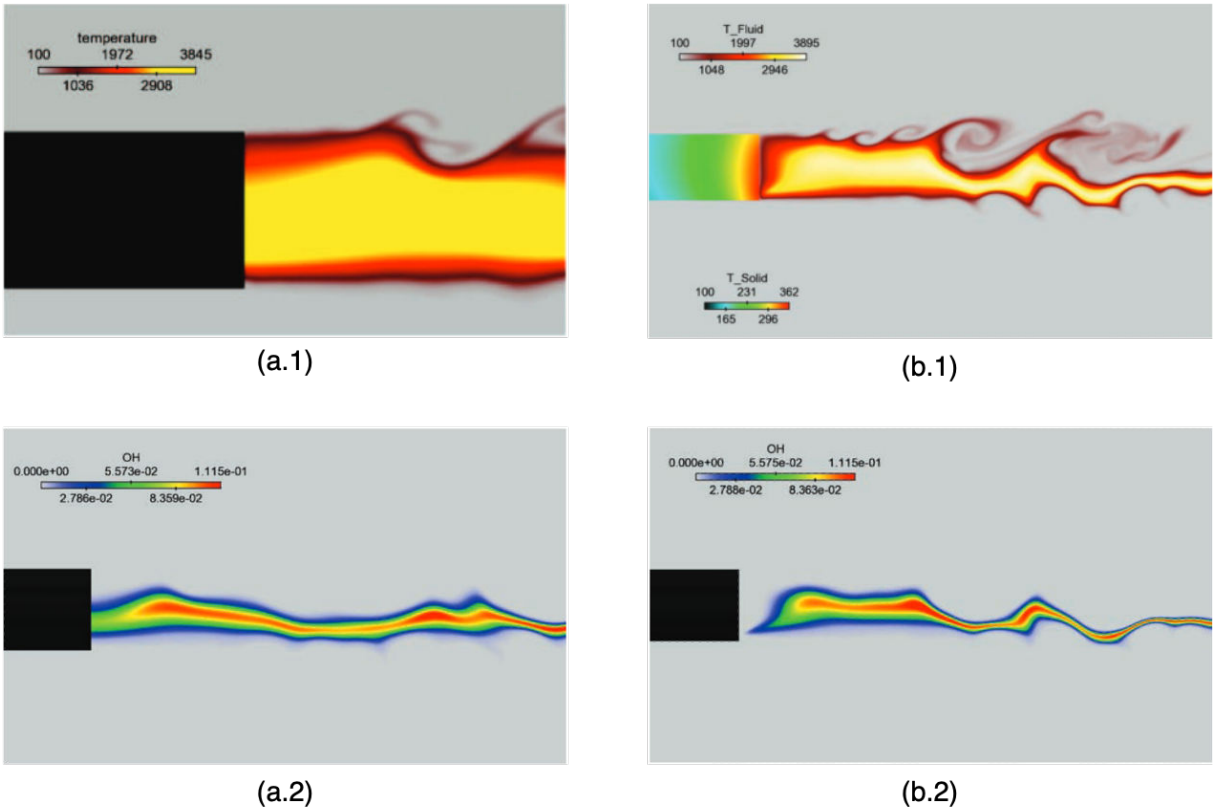


FIGURE 1.65 – Étude de l'effet de la thermique du solide dans une configuration de type *splitter-plate* sur une flamme LOx/H_2. (a.1) Champ de température avec solide adiabatique, (b.1) champ de température avec couplage fluide/solide, (a.2) champ de fraction massique de OH avec solide adiabatique et (b.2) champ de fraction massique de OH avec couplage fluide/solide. Images tirées de la thèse de Mari [208].

1.3.6 Flux de chaleur aux parois

Une bonne prédiction des flux de chaleur aux parois d'une chambre de combustion de moteur-fusée est nécessaire afin d'éviter que certaines parties du moteur ne fondent, pouvant entrainer une dégradation du moteur voire sa destruction. Afin d'éviter ce genre de problèmes, différentes mesures de flux de chaleur à la paroi sur des flammes GOx/GCH_2 [210], des flammes LOx/GH_2 [106,285], des flammes GOx/GCH_4 [129] et plus récemment encore sur des flammes LOx/CH_4 par Lechner *et al.* [180] ont pu être menées avec une nouvelle technique de mesure par thermométrie phosphore [179] (voir Fig. 1.68).

Coté simulations, différentes études RANS ou LES ont été réalisées au cours des dernières années afin de prédire les flux sur les parois d'une chambre de combustion d'un moteur-fusée.

Sur le brûleur de Penn-State par exemple, Huo et Yang [131] ont utilisé une méthode hybride RANS/LES appelée IDDES (*Improved Delayed Detached Eddy Simulation*) [346], Tucker *et al.* [376] ont résolu l'écoulement en proche paroi et Masquelet et Menon [213] ont utilisé une approche LES avec un modèle en proche paroi.

D'autres études RANS [214] et LES de Zips *et al.* [423], de Maestro *et al.* [202,203] ou encore d'Indelicato *et al.* [136, 137] qui ont étudié et comparé différentes approches afin de prédire le

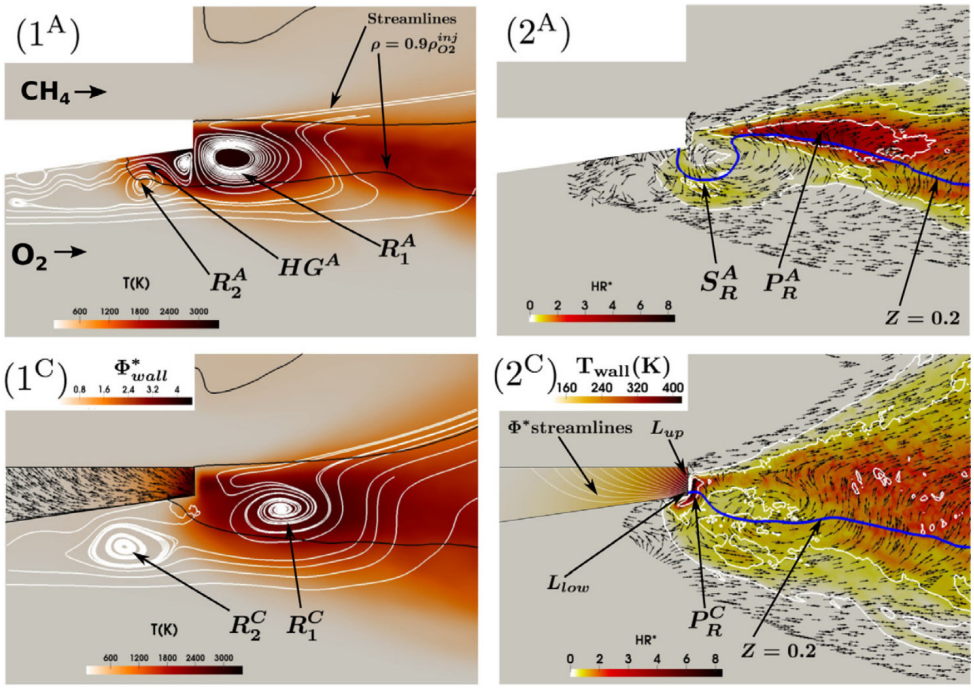


FIGURE 1.66 – Comparaison du mécanisme de stabilisation de la flamme dans le cas où la lèvre est adiabatique (exposant A) et dans le cas où la thermique de celle-ci est résolue (exposant C) [176]. (1) Représente le champ de température et (2) le champ de taux de dégagement de chaleur réduit. R_1 et R_2 dénotent les zones de recirculations. P_R signifie zone de réaction principale et S_R zone de réaction secondaire.

mieux possible l'écoulement et les flux de chaleur au niveau de la paroi. Enfin, très récemment, Potier *et al.* [300] ont aussi proposé une approche couplant à la fois une résolution de la thermique dans le solide et une simulation LES pour la partie fluide afin de prédire au mieux les transferts de chaleurs aux parois.

1.3.7 Suies

La compréhension des processus de formation des suies est cruciale pour comprendre les effets globaux du rayonnement. Phénoménologiquement, ce processus comprend tout d'abord la nucléation puis la croissance de la surface des particules, ensuite l'oxydation des suies et enfin un processus d'agglomération [124]. Dans cette section n'est présenté qu'un bref aperçu des avancées sur la prédiction des suies et leur rôle dans les moteurs-fusées.

En 1974, Jensen [145] a proposé un modèle théorique fondamental capable d'évaluer le taux de production des suies pour la combustion d'hydrocarbures et a appliqué ce modèle au cas d'une chambre de combustion d'un moteur-fusée utilisant du nitrate d'isopropyle (IPN). Il a notamment montré qu'une étape clé dans la formation des suies était la réaction chimique en phase gazeuse $CH_4 \longrightarrow CH_3 + H$ et que l'espèce directement responsable de la croissance des particules de suies était l'espèce C_2H_2.

Nickerson et Johnson [248] ont étudié la formation de suies sur un générateur de gaz complet à l'aide d'un code 1D pour différents mélanges d'hydrocarbures. Dans le cas particulier de la combustion LOx-méthane ils n'ont pas pas trouvé de formation de suies contrairement au cas

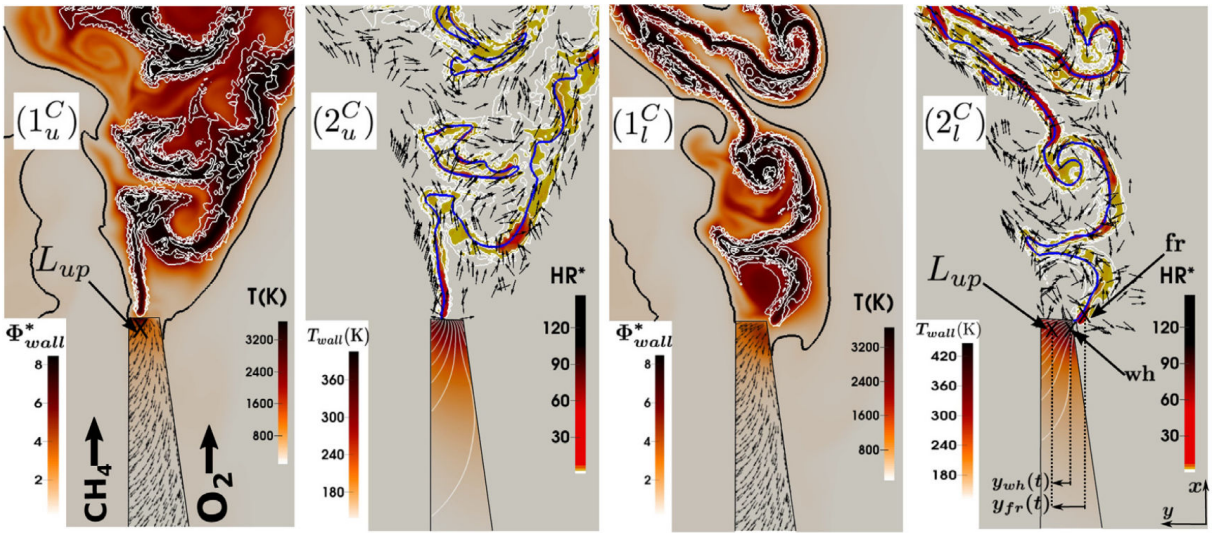


FIGURE 1.67 – Mise en évidence du battement de la flamme entre les positions L_{up} et L_{low} [176]. L'indice u est pour le cas où la flamme est positionnée au niveau du point L_{up} et l'indice l est pour le cas où la flamme est positionnée au niveau du point L_{low}. (1) Champ de température + flux de chaleur dans le solide et (2) champ de taux de dégagement de chaleur + température dans le solide. L'isoligne bleue représente la stoechiométrie $Z = 0.2$ où Z est la fraction de mélange et l'isoligne noire représente $\rho = 0.9\rho^{inj}_{O_2}$.

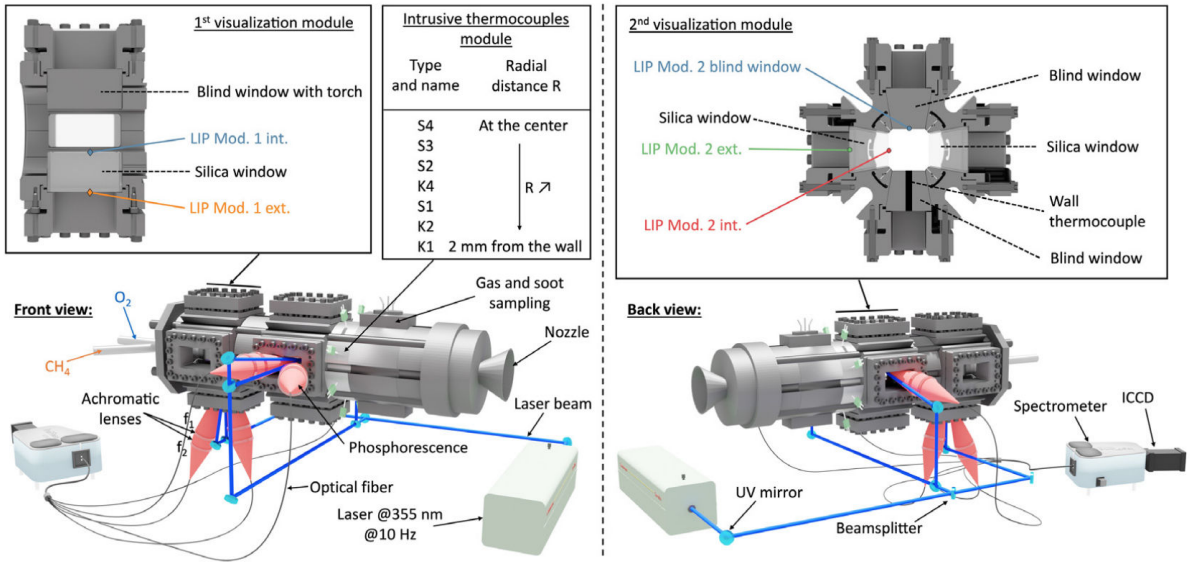


FIGURE 1.68 – Chambre de combustion BHP, mesures par thermométrie phosphore [179] et positions des points de mesures LIP. Image tirée de [180].

de mélanges LOx-propane et LOx-kérosène.

Au début des années 90, Makel et Kennedy [206] ont étudié la formation des suies sur des flammes laminaires de diffusion à contre courant. Quelques années après, Kennedy [156] a effectué une revue complète et détaillée des différents modèles de suies alors disponibles dans la littérature. En parallèle durant cette même période, l'effet de la pression sur les suies a été

largement étudié dans des flammes de prémélange et de diffusion [81, 416].

En 2007, Byun et Baek [36] ont quant à eux utilisé le modèle de rayonnement WSGGM [59, 356] (*Weighted Sum of Gray Gases*) couplé à un modèle de suies dans le but d'étudier l'impact du rayonnement et de la formation de suies sur la prédiction du flux de chaleur des parois de la chambre de combustion et de la tuyère d'un moteur-fusée kérosène-oxygène. Ils ont montré d'une part que le flux de rayonnement à la paroi pouvait ne pas être négligeable par rapport au flux convectif. D'autre part, ils ont montré que les suies auraient un effet significatif sur le flux de rayonnement et donc un modèle de prédiction de suies précis est nécessaire pour la bonne prédiction de ce dernier.

Joo et Gülder [149] ont étudié expérimentalement en 2010 la formation de suies dans des flammes laminaires de diffusion méthane-oxygène (injecteur coaxial) pour des pressions allant de 10 à 100 atm. Entre 10 à 40 atm, la quantité de suies produite augmente avec la pression alors qu'à partir de 40 atm celle-ci diminue à mesure que la pression augmente. Un autre phénomène notable a été remarqué lors de ces expériences. En effet, deux zones de flammes distinctes ont pu être clairement identifiées. Une première zone lumineuse jaune/orange classiquement observée dans les cas de flammes de diffusion méthane-air et une seconde zone lumineuse principalement bleue, comme le montre la Fig. 1.69. La partie bleue de la flamme est interprétée par Joo comme

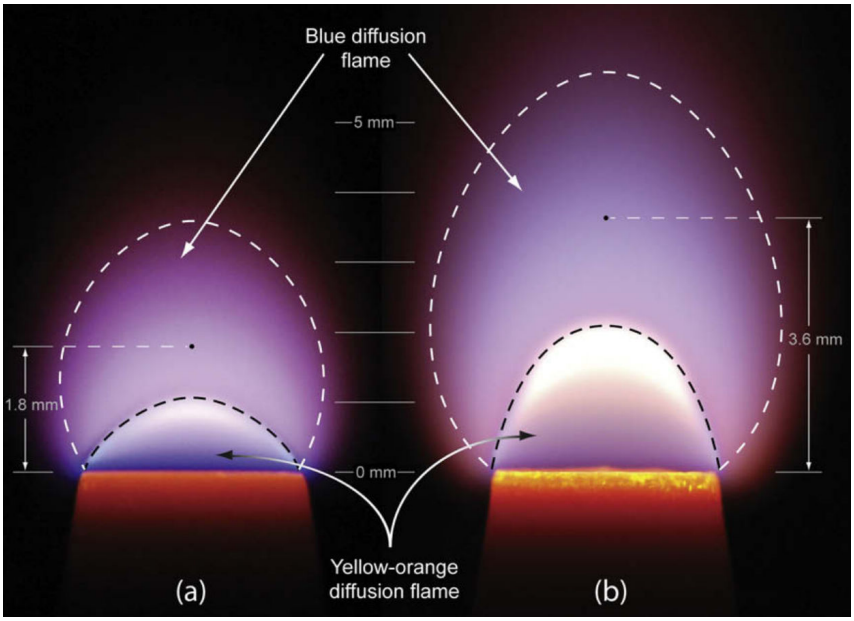


FIGURE 1.69 – Flamme de diffusion méthane-oxygène. (a) $\dot{m}_{CH_4} = 0.55\ \text{mg} \cdot \text{s}^{-1}$ et (b) $\dot{m}_{CH_4} = 1.1\ \text{mg} \cdot \text{s}^{-1}$

étant une flamme de diffusion au démarrage de son interface avec la partie jaune/orange de la flamme, mais qui devient une flamme plutôt de type partiellement prémélangée (combustion stratifiée) avec la hauteur du fait de la forte diffusion de l'oxygène dans la zone de réaction.

En 2012, Karatacs et Gülder [153] ont étudié la formation de suies dans des flammes de diffusion à haute pression, notamment méthane-air (voir Fig. 1.70). L'état de l'art sur la formation de suies qu'ils effectuent dans cet article les conduisent à dire qu'*a priori* il n'existe pas de relation simple permettant d'extrapoler les modèles de prédiction de suies obtenues en basse pression vers la haute pression. Or le manque de données fiables, en particulier dans des configurations

réelles types turbines à gaz par exemple rend la tâche particulièrement difficile. Selon eux au moment de la parution de l'article, le manque de données expérimentales, notamment sur la cinétique chimique intervenant à haute pression rend quasi impossible l'établissement de modèles prédictifs capables d'estimer précisément la formation de suies pour des flammes hydrocarbures haute pression.

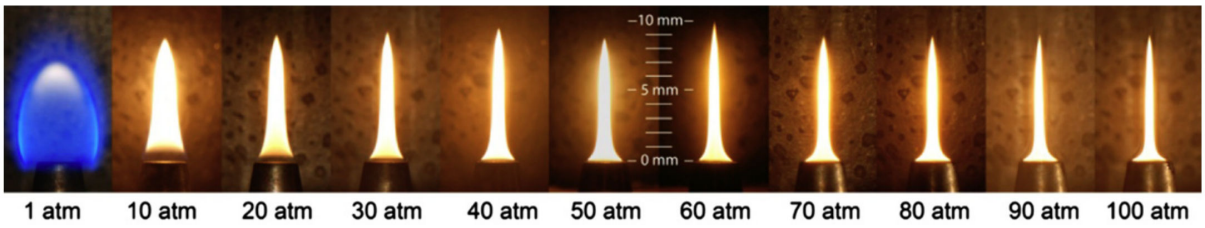


FIGURE 1.70 – Flamme de diffusion méthane-air de $P = 1$ atm jusqu'à $P = 100$ atm [153]. Le débit de méthane est constant avec $\dot{m}_{CH_4} = 0.55$ mg $\cdot$ s^{-1}.

Plus récemment, Vingert *et al.* [396] ont pu réaliser une première caractérisation précise des suies issues de la combustion CH_4/O_2 pour des pressions allant de 2.5 à 6.0 MPa sur le banc MASCOTTE. Kulakhmetov et Pourpoint [167] ont quant à eux mis en place un code 1D permettant de prédire la formation de suies et le dépôt de carbone pour des applications moteurs-fusées ou aéronautiques dans le cadre d'une combustion riche.

Enfin, dernièrement au sein du laboratoire CORIA, Bouaniche *et al.* [21] ont proposé une nouvelle méthode pour résoudre la PBE (*Population Balance Equation*), une équation permettant de modéliser le taux d'accroissement/réduction des particules de suies, caractérisées par une distribution en fonction de leur taille. Cette méthode hybride stochastique/section-fixe pour la prédiction des suies a ensuite été appliquée avec succès [22] dans le cadre de la flamme éthylène de Zao [417]. Seltz *et al.* [343] ont ensuite utilisé cette méthode pour générer une base de données de suies 0D qui après entrainement d'un réseau de neurones (ANN) dessus a permis de prédire les suies de cette même flamme. Une fois la méthode validée, cette dernière a été étendue au cas de flammes kérosène-air caractéristiques de la combustion aéronautiques puis testée sur une simulation CFD 3D d'une chambre de combustion aéronautique [342]. Ces travaux ouvrent donc la porte à de nouvelles méthodes de prédiction de suies bas coût de calculs et susceptibles d'être utilisées dans des codes de CFD complexes pour des simulations 2D ou 3D et pourquoi pas appliquées au cas de la combustion dans les moteurs-fusées.

1.4 Objectifs de la thèse

Cette thèse s'inscrit dans la volonté de l'Europe de réaliser un moteur-fusée réutilisable à propulsion liquide LOx/CH_4. Or comme la réalisation d'une simulation numérique haute fidélité complète d'un tel moteur est encore aujourd'hui impossible, cette thèse se focalise sur l'étude et la compréhension de l'un des phénomènes multi-physique les plus complexes, à savoir la combustion haute pression du couple LOx/CH_4 en conditions moteur-fusée.

L'objectif principal de cette thèse est donc de proposer une étude complète des flammes LOx/CH_4 dans des conditions extrêmes de température et de pression rencontrées dans un moteur-fusée, depuis des cas académiques simples 0D/1D vers cas plus complexes 2D/3D et proches de configurations semi-industrielles du type banc MASCOTTE.

Comme vu précédemment, peu d'études prennent en compte une chimie détaillée et des modèles de transports complets pour simuler la combustion du méthane à haute pression. Or le comportement de la combustion du méthane en conditions moteur-fusée semble bien différer de celui de l'hydrogène, en particulier dans le cas d'une injection doublement transcritique à l'image des résultats mis en avant sur le banc MASCOTTE. Cette thèse vise donc à étudier précisément la structure et la propagation de telles flammes afin d'en comprendre la physique, dans l'optique final de pouvoir proposer une modélisation adaptée pour la LES, applicable dans l'industrie. Cet objectif se décline en une série d'objectifs intermédiaires :

— étude bibliographique et sélection du mécanisme chimique détaillé le plus adapté pour modéliser la combustion supercritique LOx/CH_4 ;

— réduction du mécanisme chimique détaillé et validation de la cinétique chimique sur des flammes canoniques (temps d'auto-allumage, flammes de prémélange 1D, flammes de diffusion 1D) pour différentes températures, pressions et richesses ;

— validation et étude de la chimie du méthane sur des configurations de flammes turbulentes 2D et 3D (prémélangées et de diffusion) ;

— étude de l'allumage d'une couche de mélange LOx/CH_4 dans une configuration de type *splitter-plate* ;

— étude des effets de diffusion non-idéaux (diffusion gaz réel) ;

— étude de la stabilisation de la flamme derrière le *splitter-plate* ;

— étude des différents régimes de combustion ;

— étude d'un modèle d'interaction flamme-turbulence en LES sur cette même configuration.

1.5 Organisation du manuscrit

L'organisation du manuscrit est la suivante :

- **Chapitre 1** Introduction.
- **Chapitre 2** Ce chapitre introduit les équations de Navier-Stokes en écoulement compressible et réactif ainsi que les différents modèles nécessaires à la réalisation de simulations numériques. La modélisation de la thermodynamique gaz réel est introduite tout comme les différents modèles de sous-maille nécessaires pour la simulation aux grandes échelles.
- **Chapitre 3** Dans ce chapitre est présenté ORCh, le code de réduction de schéma de cinétique chimique du laboratoire CORIA utilisé dans cette thèse afin de réduire le mécanisme chimique détaillé retenu pour la simulation de la combustion LOx/CH_4 à haute pression. Le schéma réduit à partir du RAMEC, avec ORCh, est ensuite comparé à sa version originale sur différentes configurations canoniques : temps d'auto-allumage, flammes de prémélange 1D et flammes de diffusion 1D. Des simulations 2D puis 3D sur une flamme de prémélange turbulente sont ensuite réalisées avec les deux mécanismes chimiques afin d'évaluer la capacité du schéma réduit à reproduire le comportement de la version complète. Des résultats très satisfaisants ayant été obtenus, ce chapitre a fait l'objet d'une publication dans le journal *Combustion and Flame* [236].
- **Chapitre 4** Ce chapitre s'intéresse à l'allumage puis à la propagation d'une flamme dans deux configurations distinctes : une distribution hétérogène en méthane dans un milieu

rempli d'oxygène et une couche de mélange LOx/LCH_4 réactive en conditions proches du cas T1 de l'expérience du banc MASCOTTE [347]. Les simulations sont réalisées avec le mécanisme chimique réduit obtenu précédemment et sur certains cas comparées avec le mécanisme chimique détaillé RAMEC, démontrant une fois de plus la capacité du schéma réduit à reproduire assez fidèlement le comportement de la chimie détaillée du mécanisme original. Des flammes triples sont alors observées au cours de ces simulations et il est démontré que même dans une supposée configuration de flamme de diffusion, on peut observer des flammes de prémélange, ainsi que dans le cas de la couche de mélange. Ces résultats ont fait l'objet d'une publication dans le journal *Proceedings of the Combustion Institute* [237].

- **Chapitre 5** Ce chapitre s'intéresse principalement à la simulation haute fidélité d'une couche de mélange LOx/LCH_4 non réactive à haute pression en configuration *splitter-plate*, afin d'étudier la structure de l'écoulement ainsi que les effets de diffusion non-idéale et leur implémentation dans une formulation adaptée pour la LES. Dans un premier temps, différents modèles de sous-maille (SGS) pour la LES sont évalués en comparaison avec une approche par résolution numérique directe, sans prendre en compte les effets de diffusion non-idéale. Ensuite, la diffusion non-idéale est incluse dans les simulations afin d'évaluer ses effets et voir s'ils sont bien représentés en LES. Il en résulte que la prise en compte de ces effets a un impact mineur sur la structure de l'écoulement mais qu'ils sont globalement bien reproduits par la modélisation LES. Il est toutefois montré que la diffusion non-idéale pourrait disposer d'un rôle bien plus important dans le cas d'une couche de mélange LOx/GCH_4 où des gradients de masse volumique plus importants sont en jeu. Enfin, un cas de flamme laminaire prémélangé 1D est également simulé afin de voir comment se comporte la structure de la flamme dès-lors que la modélisation non-idéale des flux de diffusion est prise en compte.

- **Chapitre 6** Ce chapitre porte sur la simulation d'une couche de mélange LOx/LCH_4 réactive dans une configuration de type *splitter-plate*, représentative de conditions possibles dans un générateur de gaz. L'étude de la structure de la flamme et de sa stabilisation derrière la lèvre sont étudiées. La mise en évidence de structures de flammes triples et de l'importance démontrée du rôle des flammes de prémélange sur cette configuration mettent en avant les limites des modèles de chimie infiniment rapide ou de flammelettes de diffusion classiquement employés dans la littérature pour simuler la combustion LOx/CH_4 dans ces mêmes conditions. La prise en compte d'une chimie détaillée avec une modélisation adaptée des flux de diffusion tend à montrer la complexité de la combustion du méthane dans ces conditions.

- **Chapitre 7** Ce chapitre permet d'apporter une conclusion générale aux travaux effectués dans cette thèse et amène quelques réflexions supplémentaires permettant d'ouvrir le débat sur les challenges scientifiques et techniques à relever dans les prochaines années afin de maîtriser au mieux la combustion du couple LOx/CH_4 dans des conditions de moteur-fusée.

1.6 Publications et conférences

1.6.1 Publications

Différentes publications ont été réalisées au cours de cette thèse :

- Florian Monnier and Guillaume Ribert, Simulation of high-pressure methane-oxygen combustion with a new reduced chemical mechanism, Combustion and Flame, 2022 [236].
- Florian Monnier and Guillaume Ribert, Numerical simulations of supercritical CH_4/O_2 flame propagation in inhomogeneous mixtures following ignition, Proceedings of the Combustion Institute, 2023 [237].

1.6.2 Conférences

Différentes conférences pu être réalisées au cours de cette thèse :

- **10th European Combustion Meeting (ECM) - Naples (Italie) - distanciel - 2021**
  A reduced chemistry for the simulation of CH4/O2 supercritical flames.
- **15th International Conference liquid Atomization & Spray Systems (ICLASS) - Edinburgh (Ecosse) - distanciel - 2021**
  Numerical simulation of supercritical CH_4/O_2 combustion [235].
- **28th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS) - Naples (Italie) - 2022**
  Numerical Simulation of LOX/CH_4 Supercritical Combustion in a non-Homogenous Mixture.
- **39th International Symposium on Combustion - Vancouver (Canada) - 2022**
  Numerical simulations of supercritical CH_4/O_2 flame propagation in inhomogeneous mixtures following ignition [237].
- **11th European Combustion Meeting (ECM) - Rouen (France) - 2023**
  Large-Eddy Simulation of LOx-CH4 supercritical flames.
- **22th IACM Computational Fluids Conference (CFC) - Cannes (France) - 2023**
  Numerical simulation of LOx-CH4 reacting flows under supercritical conditions.

Chapitre 2

Les équations de l'aérothermochimie en régime supercritique

Sommaire

2.1 Les équations de l'aérothermochimie 76
2.1.1 Description d'un mélange 76
2.1.2 Équation d'état 76
2.1.3 Propriétés thermodynamiques 80
2.1.4 Propriétés de transport 83
2.1.5 Modèles de transport 88
2.1.6 Expression du potentiel chimique 90
2.1.7 Les équations bilans 92
2.2 Modélisation de la combustion turbulente 93
2.2.1 Cinétique chimique 93
2.2.2 Régimes de combustion 95
2.3 Extension des équations au formalisme LES 98
2.3.1 Notion de filtrage en LES 98
2.3.2 Taille de filtre 99
2.3.3 Décomposition de Reynolds 99
2.3.4 Filtrage de Favre 100
2.3.5 Filtrage des equations de Navier-Stokes 100
2.3.6 Fermeture des équations de transport filtrées 101
2.3.7 Modélisation du terme source chimique 108
2.4 Le solveur SiTComB 115
2.4.1 Présentation du code 115
2.4.2 Estimation du pas de temps 116

2.1 Les équations de l'aérothermochimie

2.1.1 Description d'un mélange

On peut définir la masse volumique ρ d'un mélange contenant N_{sp} espèces ($N_{sp} \geq 1$) à partir de la masse m contenue dans un volume de contrôle V simplement par :

$$\rho = \frac{m}{V} \ . \tag{2.1}$$

La masse molaire moyenne W d'un mélange est alors définie comme le rapport entre sa masse m et quantité de matière totale n présente dans le volume de contrôle V :

$$W = \frac{m}{n} \ . \tag{2.2}$$

On peut ensuite définir les fractions molaires X_k ou massiques Y_k de chaque espèce du mélange telles que :

$$X_k = \frac{n_k}{n} \qquad \text{et} \qquad Y_k = \frac{m_k}{m} \ , \qquad \forall \ \ k \in [\![1, N_{sp}]\!] \ , \tag{2.3}$$

où n_k et m_k sont respectivement le nombre de moles et la masse de l'espèce k dans le volume de contrôle V. Il vient alors que :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k = 1 \qquad \text{et} \qquad \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1 \ . \tag{2.4}$$

Le passage des fractions molaires aux fractions massiques s'écrit :

$$Y_k = \frac{W_k}{W} X_k \ , \tag{2.5}$$

où W_k est la masse molaire de l'espèce k. La masse molaire moyenne W d'un mélange peut enfin être calculée :

$$W = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k W_k \qquad \text{ou} \qquad W = \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \ . \tag{2.6}$$

On peut également définir la concentration molaire $[X_k]$:

$$[X_k] = \frac{n_k}{V} \ , \tag{2.7}$$

ou encore :

$$[X_k] = \rho \frac{Y_k}{W_k} = \rho \frac{X_k}{W} \ . \tag{2.8}$$

2.1.2 Équation d'état

En thermodynamique, une équation d'état est une équation caractérisant l'état de la matière et qui relie des variables d'état dans un ensemble donné de conditions physiques. Les variables d'état sont des grandeurs physiques accessibles à l'échelle macroscopique directement ou indirectement grâce à des instruments de mesures, comme la pression P, la température T, le volume V ou encore la quantité de matière n.

2.1.2.1 Gaz parfait

Un gaz parfait est défini comme un gaz dans lequel toutes les collisions entre atomes ou molécules sont parfaitement élastiques et dans lequel il n'existe aucune force attractive intermoléculaire. Dans la nature il n'existe donc pas véritablement de gaz parfait. Toutefois à basse pression, les molécules sont suffisamment éloignées les unes des autres pour ne pas interagir entre elles et généralement on fait l'hypothèse que les gaz se comportent comme des gaz parfaits. Dans ce cas-là, on peut alors écrire la loi des gaz parfaits :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{W} T = \rho r T \ , \tag{2.9}$$

où $\mathcal{R} = 8.314\ \mathrm{J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}}$ est la constante des gaz parfaits et $r = \mathcal{R}/W$ est la contante réduite des gaz parfaits. On dispose alors d'une loi simple reliant les variables d'états principales qui caractérisent un gaz : température, pression et masse volumique. Cependant, à très basse température ou haute pression, cette loi ne suffit pas pour prédire avec précision le comportement d'un gaz. On doit alors considérer une autre approche, que l'on qualifie souvent de loi des "gaz réels".

2.1.2.2 Gaz réel

Cas d'un corps pur

Afin de modéliser le comportement d'un gaz réel, il existe différents modèles disponibles dans la littérature. Toutefois, ici ne seront présentées que les équations d'état cubique puisqu'elles sont plutôt "simples" à utiliser, relativement précises et ne nécessitent pas de résolution itérative. Elles offrent donc encore à ce jour le meilleur compromis entre précision et coût de calcul dont nous disposons [280]. On dit de ces équations qu'elles sont cubiques, car si elles sont explicites en pression, elle sont du troisième ordre en masse volumique ou en volume molaire $v = W/\rho$. Ces équations sont de la forme :

$$P = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W - b\rho} - \frac{\rho^2 a \alpha(\omega, T)}{W^2 + ubW\rho + wb^2\rho^2} \ , \tag{2.10}$$

où a modélise les forces attractives intermoléculaires, b le covolume et $\alpha(\omega, T)$ est un facteur de correction permettant de prendre en compte la non sphéricité des molécules composant le fluide étudié. Ce dernier dépend de la température T et du facteur accentrique ω. Les termes u et w sont quant à eux des constantes qui dépendent de l'équation d'état cubique retenue.

Les équations d'état cubiques les plus utilisées pour la simulation numérique de la combustion sont généralement les équations de Van Der Waals (VDW) [388], de Soave-Redlich-Kwong (SRK) [358] ou encore de Peng-Robinson (PR) [271]. Les constantes u et w valent alors respectivement 1 pour et 0 pour SRK, 2 et -1 pour PR et sont nulles pour VDW. Il est aussi possible d'écrire l'Éq. (2.10) sous la forme :

$$P = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W - b\rho} - \frac{\rho^2 a \alpha(\omega, T)}{(W + \delta_1 b\rho)(W + \delta_2 b\rho)} \ , \tag{2.11}$$

avec :

$$\delta_1 = \frac{u}{2} + \sqrt{\frac{u^2}{4} - w} \qquad \text{et} \qquad \delta_2 = \frac{u}{2} - \sqrt{\frac{u^2}{4} - w} \ . \tag{2.12}$$

Dans ce cas, les constantes δ_1 et δ_2 valent respectivement 1 et 0 pour SRK, $1+\sqrt{2}$ et $1-\sqrt{2}$ pour PR et sont nulles pour VDW. La Tab. 2.1 récapitule les valeurs des différentes constantes u et w ainsi que δ_1 et δ_2 en fonction de l'équation d'état cubique retenue.

Coefficient	VDW	SRK	PR
u	0	1	2
w	0	0	-1
δ_1	0	1	$1+\sqrt{2}$
δ_2	0	0	$1-\sqrt{2}$

TABLE 2.1 – Coefficients intervenants dans les équations d'état cubique.

Les termes a et b de l'Éq. (2.10) dépendent des conditions critiques et sont définis de sorte qu'au point critique :

$$\frac{\partial P}{\partial v}(T_c) = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial P^2}{\partial v^2}(T_c) = 0 \ , \tag{2.13}$$

où T_c et P_c sont respectivement la température critique et la pression critique du fluide considéré. En pratique, a et b sont calculés ainsi :

$$a = k_a \frac{(\mathcal{R}T_c)^2}{P_c} \qquad \text{et} \qquad b = k_b \frac{\mathcal{R}T_c}{P_c} \ , \tag{2.14}$$

avec k_a et k_b des constantes qui dépendent de l'équation d'état choisie (cf. Tab. 2.2). Le calcul de $\alpha(T,\ \omega)$ se fait comme suit :

$$\alpha(T,\ \omega) = \left[1 + Si(\omega)\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right]^2 \ . \tag{2.15}$$

Dans le cas où l'espèce considérée est H_2, une autre loi est proposée par Graboski [105] et recommandée par Yang [225] :

$$\alpha_{H_2}(T,\ \omega) = 1.202 e^{-0.30228\frac{T}{T_c}} \ . \tag{2.16}$$

Le problème de la formulation SRK pour le terme $\alpha(T,\ \omega)$ vient du fait qu'elle introduit de petits sauts dans la dérivée en température du terme $\sqrt{(\alpha_i)}$ et donc dans les dérivées du terme de mélange α (voir Éq. (2.22)) aux températures de croisement $T_{c,i}\left(1+1/Si\right)/2$ [102]. C'est la formulation de Gaillard [88], proposant une transition $\mathcal{C}^2$ entre les deux plages de température qui a été retenue et implémentée dans SiTCom-B pour pallier à ce problème :

$$\begin{cases} \alpha(T,\ \omega) &= \left[1 + Si(\omega)\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right]^2 \quad \text{si} \quad T \leq T_c \\ \alpha(T,\ \omega) &= \left[1 + \tanh\left(Si(\omega)\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right)\right]^2 \quad \text{si} \quad T > T_c \end{cases} \ . \tag{2.17}$$

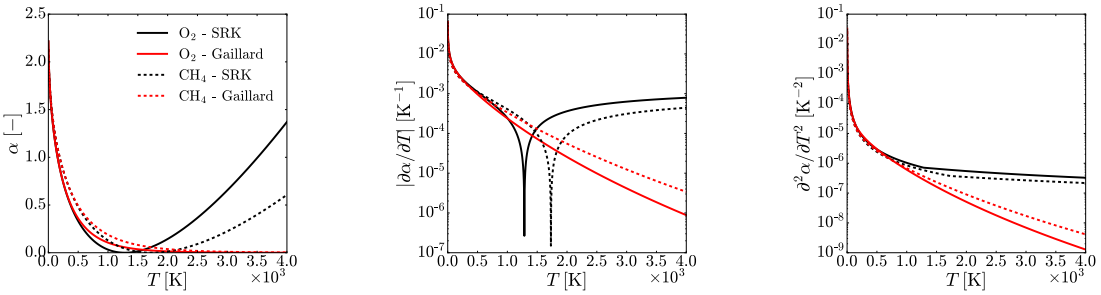
Il est alors possible d'évaluer la dérivée première $\alpha\left(\omega, T\right)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha(T,\ \omega)}{\partial T} &= -Si(\omega)\sqrt{\dfrac{\alpha}{TT_c}} \quad \text{si} \quad T \leq T_c \\ \dfrac{\partial \alpha(T,\ \omega)}{\partial T} &= -\left(2\sqrt{\alpha} - \alpha\right) Si(\omega)\sqrt{\dfrac{\alpha}{TT_c}} \quad \text{si} \quad T > T_c \end{cases} \ , \tag{2.18}$$

ainsi que sa dérivée seconde :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 \alpha(T,\ \omega)}{\partial T^2} &= -\dfrac{1}{2T}\left(\dfrac{Si(\omega)^2}{Tc} - \dfrac{\partial \alpha(T,\ \omega)}{\partial T}\right) \quad \text{si} \quad T \leq T_c \\ \dfrac{\partial^2 \alpha(T,\ \omega)}{\partial T^2} &= -\dfrac{\partial \alpha(T,\ \omega)}{\partial T}\left[\dfrac{1}{2T} + \left(2 - \dfrac{3}{2}\sqrt{\alpha}\right) Si(\omega)\sqrt{\dfrac{1}{TT_c}}\right] \quad \text{si} \quad T > T_c \end{cases} . \tag{2.19}$$

La Fig. 2.1 illustre alors les différences entre l'approche traditionnelle SRK [358] et celle de Gaillard [88]. On voit bien la discontinuité induite par l'approche SRK sur la prédiction de la dérivée première du terme $\alpha\,(\omega, T)$ comme décrite par Giovangigli [102], mais qui est corrigée avec la méthode de Gaillard [88]. L'autre avantage de l'approche de Gaillard sur l'évaluation du terme $\alpha\,(\omega, T)$ est que celui-ci tends vers 0 à forte température. On retrouve alors le comportement idéal du gaz (gaz parfait) comme attendu, au lieu d'induire une correction dans l'équation d'état gaz réel qui n'est pas physique avec l'approche originale SRK.



(a) (b) (c)

FIGURE 2.1 – Évaluation des termes α, $|\partial \alpha\,(\omega, T)\,/\partial T|$ (valeur absolue pour l'échelle log) et $\partial^2 \alpha\,(\omega, T)\,/\partial T^2$ pour l'oxygène et le méthane à différentes températures avec l'approche classique SRK [358] et celle de Gaillard [88].

La fonction $Si(\omega)$ est quant à elle de la forme :

$$Si(\omega) = \mathrm{C}_1 + \mathrm{C}_2\omega + \mathrm{C}_3\omega^2 \ , \tag{2.20}$$

où C_1, C_2 et C_3 sont des constantes données dans la Tab. 2.2.

Coefficient	SRK	PR
k_a	0.42748	0.45724
k_b	0.08664	0.07780
C_1	0.48508	0.37464
C_2	1.5517	1.54226
C_3	−0.15613	−0.26992

TABLE 2.2 – Coefficients intervenants dans le calcul des équations d'état cubique [271, 358].

Une alternative pour calculer le coefficient $\alpha(T,\ \omega)$ sur la base d'exponentielle a été également proposée par Twu *et al.* [377]. Toutefois, plus tard Cañas-Marín *et al.* [40] ont montré qu'en dépit

de sa simplicité et des limites théoriques du modèle de Soave (Éq. (2.15)), celui-ci donnait des prédictions similaires sinon meilleures que celui de Twu par comparaison avec des données issues de simulations de référence réalisées avec la méthode de Monte Carlo.

Cas d'un mélange

Dans le cas d'un mélange de fluides contenant N_{sp} espèces, on peut utiliser les règles de mélange proposées de Van Der Waals et conseillées par Reid *et al.* [305]. Cela revient à calculer les termes $a\alpha$ et b de l'Éq. (2.10) à partir des coefficients $(a\alpha)_k = a_k\alpha_k$ et b_k de chaque espèce présente dans le mélange de la façon suivante :

$$b = \sum_{k=1}^{N} X_k b_k \tag{2.21}$$

et :

$$a\alpha = \sum_{i=1}^{N_{sp}} \sum_{j=1}^{N_{sp}} X_i X_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j}(1 - \kappa_{i,j}) \ , \tag{2.22}$$

où $\kappa_{i,j}$ est un coefficient d'interaction binaire qui permet de tenir compte des interactions entre espèces tel que $\kappa_{i,j} = \kappa_{j,i}$ et lorsque $i = j$, $\kappa_{i,i} = 1$.

2.1.3 Propriétés thermodynamiques

2.1.3.1 Basse pression

On considère un fluide constitué d'un mélange de N_{sp} espèces. Si E_k est l'énergie interne de l'espèce k, on peut alors définir l'enthalpie H_k de l'espèce k par :

$$H_k(T, P) = E_k(T, P) + PV \ . \tag{2.23}$$

En notant E_k^m l'énergie interne molaire de l'espèce k, ainsi que son enthalpie molaire H_k^m, et en appliquant la loi des gaz parfaits en considérant une pression standard $P^\circ = 1$ atm, on peut alors écrire :

$$H_k^m(T, P^\circ) = E_k^m(T, P^\circ) + \mathcal{R}T \ . \tag{2.24}$$

De plus, on peut décomposer l'enthalpie molaire de l'espèce k en une somme de deux termes :

$$H_k^m(T, P^\circ) = H_{s,k}^m(T, P^\circ) + \Delta_f H_k^{\circ,m} \ , \tag{2.25}$$

avec $H_{s,k}^m(T, P^\circ)$, l'enthalpie molaire sensible de l'espèce k et $\Delta_f H_k^{\circ,m}$, l'enthalpie standard molaire de formation de l'espèce k à la température standard (généralement, $T^\circ = 298.15$ K). L'enthalpie sensible représente la quantité de chaleur qui est échangée lors d'un transfert thermique sans changement de phase entre les différentes espèces d'un système isolé. Elle peut alors se calculer comme :

$$H_{s,k}^m(T, P^\circ) = \int_{T^\circ}^{T} C_{p,k}^m(\theta, P^\circ) d\theta \ , \tag{2.26}$$

où $C_{p,k}^m$ désigne la capacité calorifique molaire de l'espèce k à pression constante.

Par ailleurs, sous l'hypothèse des gaz parfaits, on suppose que la capacité calorifique molaire à pression constante ne dépend que de la température. À l'aide des tables de JANAF, il est alors

possible d'estimer sa valeur par l'intermédiaire des polynômes de la NASA faisant intervenir les coefficients $a_{i,k},\ \forall\ \ (i,k) \in [\![1,7]\!] \times [\![1,N_{sp}]\!]$:

$$\frac{C^m_{p,k}(T,P^\circ)}{\mathcal{R}} = \frac{C^m_{p,k}(T)}{\mathcal{R}} \simeq a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4 \ . \tag{2.27}$$

Or d'après l'Éq. (2.26), il suffit d'intégrer l'Éq. (2.27) pour en déduire H_k :

$$\frac{H^m_k(T,P^\circ)}{\mathcal{R}T} = \frac{H^m_k(T)}{\mathcal{R}T} \simeq a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4 + \frac{a_{6,k}}{T} \ , \tag{2.28}$$

où $a_{6,k}\mathcal{R}$ est une constante d'intégration telle que $a_{6,k}\mathcal{R} = \Delta_{\rm f}H^{\circ,m}_k$. En partant de l'identité thermodynamique $dH = TdS + VdP + \mu dn$, avec μ le potentiel chimique molaire, et en appliquant la loi des gaz parfaits, on peut montrer que l'entropie molaire échangée par l'espèce k au cours d'une transformation physique sans changement d'état peut s'écrire :

$$S^m_k(T,P,X_k) = S^m_k(T,P^\circ) - \mathcal{R}\ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) - \mathcal{R}\ln(X_k) \ , \tag{2.29}$$

avec $S^m_k(T,P^\circ)$, l'entropie molaire échangée par l'espèce k au cours d'une transformation isobare (à $P = P^\circ$) sans changement d'état :

$$S^m_k(T,P^\circ) = \int_{T^\circ}^{T} \frac{C^m_{p,k}(\theta,P^\circ)}{\theta} d\theta \ . \tag{2.30}$$

Après intégration, on obtient :

$$\frac{S^m_k(T,P^\circ)}{\mathcal{R}} \simeq \frac{S^m_k(T)}{\mathcal{R}} = a_{1,k}\ln(T) + a_{2,k}T + \frac{a_{3,k}}{2}T^2 + \frac{a_{4,k}}{3}T^3 + \frac{a_{5,k}}{4}T^4 + a_{7,k} \ . \tag{2.31}$$

Pour calculer les propriétés thermodynamiques du mélange à partir des propriétés de chaque espèce, on peut alors utiliser les lois de mélange suivantes :

$$C^m_p(T) = \sum_{k=1}^{N_{\rm sp}} X_k C^m_{p,k}(T) \ ; \tag{2.32}$$

$$H^m(T) = \sum_{k=1}^{N_{\rm sp}} X_k H^m_k(T) \ ; \tag{2.33}$$

$$S^m(T,P) = \sum_{k=1}^{N_{\rm sp}} X_k \left[S^m_k(T) - \mathcal{R}\ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) - \mathcal{R}\ln\left(X_k\right) \right] \ . \tag{2.34}$$

Or en simulation numérique de la combustion, il est d'usage de travailler avec les grandeurs massiques plutôt que molaires. On peut toutefois passer des grandeurs molaires aux grandeurs massiques simplement en divisant par la masse molaire du mélange (ou la masse molaire de chaque espèce) :

$$c_p = \frac{C^m_p}{W} \quad \text{et} \quad c_{p,k} = \frac{C^m_{p,k}}{W_k} \ ; \tag{2.35}$$

$$h = \frac{H^m}{W} \quad \text{et} \quad h_k = \frac{H^m_k}{W_k} \ ; \tag{2.36}$$

$$s = \frac{S^m}{W} \quad \text{et} \quad s_k = \frac{S^m_k}{W_k} \ ; \tag{2.37}$$

où c_p est la capacité calorifique massique à pression constante, h est l'enthalpie massique et s est l'entropie massique. Au final on obtient :

$$c_p(T) = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k c_{p,k}(T) \; ; \tag{2.38}$$

$$h(T) = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k h_k(T) \; ; \tag{2.39}$$

$$s(T,P) = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k \left[s_k(T) - \mathcal{R} \ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) - \mathcal{R} \ln\left(Y_k \frac{W}{W_k}\right) \right] \; . \tag{2.40}$$

En notant $c_{v,k}$ la capacité calorifique massique à volume constant de l'espèce k et sous l'hypothèse des gaz parfaits, on peut utiliser la relation de Mayer :

$$c_{v,k}(T) = c_{p,k}(T) - \frac{\mathcal{R}}{W_k} \; . \tag{2.41}$$

De la même façon que dans l'Éq. (2.25), on peut décomposer l'énergie interne massique e_k de l'espèce k en une somme d'un terme d'énergie sensible massique $e_{s,k}$ et d'un terme lié à l'enthalpie massique de formation $\Delta_{\text{f}} h_k^\circ$ de l'espèce k :

$$e_k(T,P^\circ) = e_{s,k}(T) + \Delta_{\text{f}} h_k^\circ \; ; \tag{2.42}$$

$$= \int_{T^\circ}^{T} c_{p,k}(\theta) d\theta - \frac{\mathcal{R}T}{W_k} + \Delta_{\text{f}} h_k^\circ \; ; \tag{2.43}$$

$$= \int_{T^\circ}^{T} c_{v,k}(\theta) d\theta - \frac{\mathcal{R}T^\circ}{W_k} + \Delta_{\text{f}} h_k^\circ \; . \tag{2.44}$$

On a alors également :

$$c_v(T) = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k c_{v,k}(T) \; ; \tag{2.45}$$

$$e(T) = \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k e_k(T) \; . \tag{2.46}$$

On peut enfin définir l'énergie totale non chimique massique E comme la somme de l'énergie cinétique massique $e_c = \frac{1}{2} u_i^2$ et de l'énergie sensible massique e_s ou encore l'énergie totale massique e_t comme la somme de l'énergie cinétique massique et l'énergie interne massique e. La Tab. 2.3 synthétise les définitions de l'énergie et l'enthalpie [291].

2.1.3.2 Haute pression

À haute pression, une description de la thermodynamique sous l'hypothèse des gaz parfaits n'est pas satisfaisante. Il convient ainsi non seulement d'utiliser une équation d'état adaptée (VDW, SRK ou PR), mais aussi d'ajouter des termes correctifs tenant compte des variations de pression ou de masse volumique lors de l'évaluation de certaines grandeurs comme l'énergie interne, l'enthalpie, l'entropie ou encore les capacité calorifiques à pression et volume constants.

Forme	Énergie	Enthalpie
Sensible	$e_s = \int_{T^\circ}^{T} c_{v,k}(\theta)d\theta - \frac{\mathcal{R}T^\circ}{W_k}$	$h_s = \int_{T^\circ}^{T} c_{p,k}(\theta)d\theta$
Sensible + Chimique	$e = e_s + \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k \Delta_{\text{f}} h_k^\circ$	$h = h_s + \sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} Y_k \Delta_{\text{f}} h_k^\circ$
Totale chimique	$e_t = e + \frac{1}{2}u_i^2$	$h_t = h + \frac{1}{2}u_i^2$
Totale non chimique	$\mathsf{E} = e_s + \frac{1}{2}u_i^2$	$\mathsf{H} = h_s + \frac{1}{2}u_i^2$

TABLE 2.3 – Différentes formes d'énergie et d'enthalpie utilisées dans les équations de conservation [291].

On peut montrer [305] qu'une grandeur thermodynamique à haute pression Φ^{RG} (RG pour *Real Gas*) peut alors être évaluée à partir de sa valeur à basse pression Φ^{IG} (IG pour *Ideal Gas*) ainsi que d'une fonction d'écart $\Delta\Phi$:

$$\Phi = \Phi^{\text{RG}} = \Phi^{\text{IG}} + \Delta\Phi \ . \tag{2.47}$$

On peut alors montrer que :

$$e(T,\rho) = e^{\text{IG}}(T) + \int_{\rho^\circ}^{\rho} \left[\frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \right]_T d\rho \ ; \tag{2.48}$$

$$h(T,P) = h^{\text{IG}}(T) + \int_{P^\circ}^{P} \left[\frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_P \right]_T dP \ ; \tag{2.49}$$

$$s(T,\rho) = s^{\text{IG}}(T,\rho) - \int_{\rho^\circ}^{\rho} \left[\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \right]_T d\rho \ ; \tag{2.50}$$

$$c_v(T,\rho) = c_v^{\text{IG}}(T) - \int_{\rho^\circ}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_\rho \right]_T d\rho \ ; \tag{2.51}$$

$$c_p(T,\rho) = c_v^{\text{IG}}(T) - \int_{\rho^\circ}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_\rho \right]_T d\rho + \frac{T}{\rho^2}\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho^2}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T} \ . \tag{2.52}$$

Ces équations sont valables dans le cas d'un fluide pur tout comme dans le cas d'un mélange. Les dérivées partielles utilisées pour calculer l'écart entre l'approche RG et l'approche IG sont directement évaluées à partir de la fonction d'état retenue. Le calcul de ces dérivées partielles est disponible dans la thèse de Petit [280].

2.1.4 Propriétés de transport

Afin d'évaluer les propriétés du fluide qui interviennent dans les équations de transport de Navier-Stokes, il est nécessaire d'utiliser un modèle adapté à l'écoulement simulé. En effet, les propriétés de transport comme la viscosité, la conductivité ou encore les coefficients de diffusion de chaque espèce doivent être évaluées avec précision. Toutefois, les modèles de transport classiquement utilisés pour modéliser une approche gaz parfait ne sont pas suffisant pour simuler un écoulement à haute pression, particulièrement lorsque le facteur de compressibilité $Z = Pv/\mathcal{R}T$ avec v est le volume molaire, est loin de l'unité. Une correction adaptée à une approche gaz réel est donc requise.

2.1.4.1 Potentiels de Lennard-Jones

Tout d'abord, il est nécessaire d'introduire quelques grandeurs issues de la théorie de la cinétique des gaz. Le potentiel de Lennard-Jones est un modèle mathématique simple qui permet de modéliser l'interaction entre des atomes ou des molécules apolaires. On peut exprimer ce potentiel V_{L-J} par [305] :

$$V_{\mathrm{L-J}}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right] , \tag{2.53}$$

où ε est la profondeur du puit de potentiel, σ est la distance à laquelle le potentiel d'interaction entre les particules est nulle et r est la distance entre les particules. La Fig. 2.2 représente l'évolution de $V_{\mathrm{L-J}}$ en fonction de r. Pour l'exemple, supposons deux atomes séparés d'une

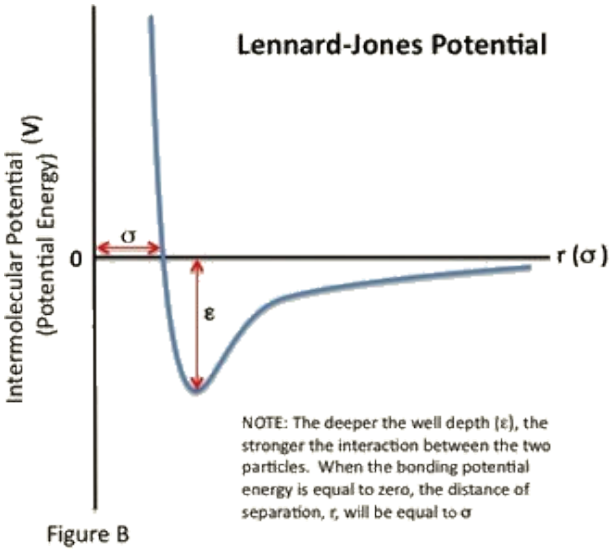


FIGURE 2.2 – Potentiel de Lennard-Jones.

distance r. Dans ce cas, si $r > \sigma$ alors les deux atomes s'attirent entre eux. Si à l'inverse $r < \sigma$, alors les deux atomes se repoussent. Dans le cas où $r = \sigma$, le potentiel de Lennard-Jones est nul, c'est-à-dire que les deux atomes sont dans une position d'équilibre.

À partir de ce modèle, il est possible d'estimer les propriétés d'un fluide comme sa température critique T_c, sa pression critique P_c ou encore sa masse volumique (molaire) critique ρ_c. On a alors :

$$T_c = T_c^* \frac{\varepsilon}{\mathcal{K}_{\mathrm{B}}} \quad [\mathrm{K}] \tag{2.54}$$

$$P_c = P_c^* \frac{\varepsilon}{\sigma^3} \quad [\mathrm{Pa}] \tag{2.55}$$

$$\rho_c = \frac{\rho_c^*}{\mathcal{N}_A \sigma^3} \quad \left[\mathrm{mol \cdot m^{-3}}\right] \tag{2.56}$$

où $\mathcal{K}_{\mathrm{B}}$ est la constante de Boltzmann, $\mathcal{N}_A$ est le nombre d'Avogadro et T_c^*, P_c^* et ρ_c^* sont des grandeurs réduites évaluées au point critique de manière empirique. Les valeurs retenues pour ces constantes sont $T_c^* = 1.316 \pm 0.006$, $P_c^* = 0.13 \pm 0.01$ et $\rho_c^* = 0.304 \pm 0.06$ [353], également recommandées par Panagiotopoulos [265], Koutras [164], ou encore Cañas-Marín [39]. Dans les

Éq. (2.54), (2.55) et (2.56), $\varepsilon/\mathcal{K}_\mathrm{B}$ est en Kelvin et σ est en mètre, même s'il est souvent donné en Angstrom dans les fichiers au format Chemkin.

Si les propriétés d'un fluide au point critique sont connues et validées expérimentalement, il n'est pas nécessaire d'utiliser les Éq. (2.54), (2.55) et (2.56) puisque l'on connait déjà les valeurs de T_c, P_c et ρ_c (ou de manière équivalente V_c, le volume critique). Toutefois, on connait rarement ces valeurs pour des espèces radicalaires comme CH_3O ou encore CH_3O_2 et dans ce cas, le modèle simple des potentiels de Lennard-Jones nous permet d'avoir une estimation de ces grandeurs qui sont indispensables pour l'évaluation des propriétés de transport à haute pression.

2.1.4.2 Viscosité

Pour calculer la viscosité à basse pression $\eta_k^{\mathrm{IG}^*}$ d'un gaz simple comme le méthane ou l'argon, Chapman et Enskog [44] proposent le modèle suivant :

$$\eta_k^{\mathrm{IG}^*} = \left(26.69 \times 10^{-5}\right) \frac{\sqrt{W_k T}}{\sigma_k^2 \Omega_k^{(2,2)^*}} \quad [\mathrm{Pa \cdot s}] \ , \tag{2.57}$$

où σ_k $[\text{Å}]$ est la distance intermoléculaire définie par le potentiel de Lennard-Jones dans l'Éq. (2.53) et W_k en $\left[\mathrm{g \cdot mol^{-1}}\right]$. Le terme $\Omega_k^{(2,2)^*}$ $[-]$ est quant à lui l'intégrale de collision et dérive du potentiel d'interaction :

$$\Omega_k^{(2,2)^*} = AT_k^{*-B} + C\,\mathrm{e}^{-DT_k^*} + E\,\mathrm{e}^{-FT_k^*} + GT_k^{*B}\sin\left(ST_k^{*W} - H\right) \ , \tag{2.58}$$

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 $W = -0.76830$.

Toutefois, afin de tenir compte de la structure moléculaire et des effets de polarité, l'Éq. (2.57) peut être multipliée par un facteur F_c, comme le propose Chung [53] :

$$\eta_k^{\mathrm{IG}} = \eta_k^{\mathrm{IG}^*} F_{c,k} \ , \tag{2.59}$$

avec $F_{c,k}$ défini tel que :

$$F_{c,k} = 1 - 0.2756\omega_k + 0.059035\mu_{r,k}^4 + \kappa_k \quad [-] \ , \tag{2.60}$$

où ω_k est le facteur accentrique de l'espèce k, κ_k est une constante empirique permettant de mieux corréler le modèle pour la viscosité (également la conductivité, voir ci-après) aux valeurs expérimentales et $\mu_{r,k}$ le moment dipolaire adimensionné de l'espèce k. La valeur de κ_k est donnée pour quelques alcools et l'eau dans [305]. Le calcul de $\mu_{r,k}$ se fait comme suit :

$$\mu_{r,k} = 0.1313 \frac{\mu_k}{\sqrt{v_{c,k} T_{c,k}}} \quad [-] \ , \tag{2.61}$$

avec μ_k [D] le moment dipolaire de l'espèce k, $v_{c,k} = 1/\rho_{c,k}$ $\left[\mathrm{m^3 \cdot mol^{-1}}\right]$ est le volume molaire critique de l'espèce k et $T_{c,k}$ [K] est la température critique de l'espèce k.

Dans le cas de fluide dense, l'Éq. (2.59) est étendue afin de prendre en compte une correction pour la haute pression. On obtient alors la viscosité $\eta_k = \eta_k^{\mathrm{RG}}$ de l'espèce k :

$$\eta_k = \eta_k^{\mathrm{IG}} \left(\frac{1}{G_{2,k}} + A_{6,k} Y \right) + \eta_{p,k} \quad [\mathrm{Pa \cdot s}] \ , \tag{2.62}$$

avec :

$$\eta_{p,k} = 10 \left(\frac{36.344.10^{-6} - (W_k T_{c,k})^{1/2}}{{v_{c,k}}^{2/3}} \right) A_{7,k} Y^2 G_{2,k} \, \mathrm{e}^{\left(A_{8,k} + \frac{A_{9,k}}{T_k^*} + \frac{A_{10,k}}{T_k^{*2}} \right)} \ , \tag{2.63}$$

et :

$$G_{2,k} = \frac{\frac{A_{1,k}\left(1 - \mathrm{e}^{-A_{4,k} y_k}\right)}{y_k} + A_{2,k} G_{1,k} \, \mathrm{e}^{A_{5,k} y_k} + A_{3,k} G_{1,k}}{A_{1,k} A_{4,k} + A_{2,k} + A_{3,k}} \ ; \tag{2.64}$$

$$G_{1,k} = \frac{1 - 0.5 y_k}{(1 - y_k)^3} \ ; \tag{2.65}$$

$$y_k = \frac{v_{c,k}}{6v} \ ; \tag{2.66}$$

où v $\left[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{mol}^{-1}\right]$ est le volume molaire du fluide. Enfin, les fonctions $A_{i,k}$, sont des fonctions linéaires de ω_k, $\mu_{r,k}^4$ et κ_k telles que :

$$A_{i,k} = a_0(i) + a_1(i)\omega_k + a_2(i)\mu_{r,k}^4 + a_3(i)\kappa_k \ , \quad \forall \ (i,k) \in [\![1,10]\!] \times [\![1, N_{sp}]\!] \ , \tag{2.67}$$

où les $a_j(i)$, $\forall \ (i,j) \in [\![1,10]\!] \times [\![0,3]\!]$, sont des coefficients donnés par Chung [53].

2.1.4.3 Conductivité

On peut estimer la conductivité d'un gaz parfait λ_k^{IG} à partir de sa viscosité :

$$\lambda_k^{\mathrm{IG}} = \frac{3.75 \mathcal{R} \eta_k^{\mathrm{IG}}}{W_k} \Psi_k \quad \left[\mathrm{W} \cdot \mathrm{m}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}\right] \ , \tag{2.68}$$

avec η_k^{IG} la viscosité définie par l'Éq. (2.59), W_k en $\left[\mathrm{kg} \cdot \mathrm{mol}^{-1}\right]$ et Ψ_k la fonction définie par :

$$\Psi_k = 1 + \alpha_k \frac{0.215 + 0.28288\alpha_k - 1.061\beta_k + 0.26665 Z_{\mathrm{coll},k}}{0.6366 + \beta_k Z_{\mathrm{coll},k} + 1.061\alpha_k\beta_k} \ , \tag{2.69}$$

où $Z_{\mathrm{coll},k}$, α_k et β_k sont calculés comme suit :

$$Z_{\mathrm{coll},k} = 2 + 10.5 T_{r,k}^2 \ , \quad \alpha_k = \frac{C_{v,k}^m}{\mathcal{R}} - \frac{3}{2} \quad \text{et} \quad \beta_k = 0.7862 - 0.7109\omega_k + 1.3168\omega_k^2 \ , \tag{2.70}$$

avec $T_{r,k} = T_{c,k}/T$, la température réduite de l'espèce k et ω_k, le facteur accentrique de l'espèce k.

De la même manière que l'on calcule la viscosité à haute pression, on peut estimer la conductivité à haute pression λ_k à partir de la connaissance de sa valeur à basse pression λ^{IG} :

$$\lambda_k = \lambda_k^{\mathrm{IG}} \left(\frac{1}{H_{2,k}} + B_{6,k} y_k \right) + \lambda_{p,k} \quad \left[\mathrm{W} \cdot \mathrm{m}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}\right] \ , \tag{2.71}$$

où le terme $\lambda_{p,k}$ est un terme correctif calculé comme suit :

$$\lambda_{p,k} = 3.586.10^{-3} \left(\frac{T_{c,k}}{W_k} \right)^{1/2} \frac{1}{v_{c,k}^{2/3}} \sqrt{T_{r,k}} B_{7,k} y_k^2 H_{2,k} \ , \tag{2.72}$$

avec $H_{2,k}$, la fonction définie telle que :

$$H_{2,k} = \frac{\frac{B_{1,k}\left(1-\mathrm{e}^{-B_{4,k}y_k}\right)}{y_k} + B_{2,k}G_{1,k}\,\mathrm{e}^{B_{5,k}y_k} + B_{3,k}G_{1,k}}{B_{1,k}B_{4,k} + B_{2,k} + B_{3,k}} \; ; \tag{2.73}$$

$$G_{1,k} = \frac{1-0.5y_k}{(1-y_k)^3} \; ; \tag{2.74}$$

$$y_k = \frac{v_{c,k}}{6v} \; . \tag{2.75}$$

Enfin, les fonctions $B_{i,k}$, sont des fonctions linéaires de ω_k, $\mu_{r,k}^4$ et κ_k telles que :

$$B_{i,k} = b_0(i) + b_1(i)\omega_k + b_2(i)\mu_{r,k}^4 + b_3(i)\kappa_k \; , \quad \forall \; (i,k) \in [\![1,7]\!] \times [\![1,N_{sp}]\!] \; , \tag{2.76}$$

où les $b_j(i)$, $\forall \; (i,j) \in [\![1,7]\!] \times [\![0,3]\!]$, sont des coefficients donnés par Chung [53].

2.1.4.4 Cas d'un mélange

Dans le cas d'un mélange, il suffit d'évaluer dans un premier temps les propriétés de mélange binaire pour deux espèces k et l :

$$\sigma_{kl} = \xi_{kl}\sqrt{\sigma_k\sigma_l} \; ; \tag{2.77}$$

$$\frac{\varepsilon_{kl}}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} = \zeta_{kl}\sqrt{\frac{\varepsilon_k}{\mathcal{K}_\mathrm{B}}\frac{\varepsilon_l}{\mathcal{K}_\mathrm{B}}} \; ; \tag{2.78}$$

$$\omega_{kl} = \frac{\omega_k + \omega_l}{2} \; ; \tag{2.79}$$

$$W_{kl} = \frac{2W_kW_l}{W_k + W_l} \; ; \tag{2.80}$$

$$\mu_{kl} = \sqrt{\mu_k\mu_l} \; ; \tag{2.81}$$

$$\kappa_{kl} = \sqrt{\kappa_k\kappa_l} \; ; \tag{2.82}$$

où ξ_{kl} et ζ_{kl} sont des coefficients d'interaction binaire qui valent généralement 1 sauf pour des systèmes contenant des molécules polaires ou des substances avec des liaisons hydrogène. En pratique, ces coefficients sont toujours pris égaux à 1 par soucis de simplicité, mais cela ne constitue pas un biais majeur quant à la prédiction de la viscosité et de la conductivité d'un mélange puisque la déviation introduite par cette hypothèse reste minime. En effet selon Chung [53], celle-ci n'excède généralement pas plus de 4 % pour les fluides à basse pression et entre 5 % et 9 % pour les fluides denses à haute pression.

Une fois les propriétés de mélange binaire évaluées, il suffit alors de considérer les moyennes pondérées suivantes afin d'évaluer les propriétés de mélange du fluide complet :

$$\sigma = \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_kX_l{\sigma_{kl}}^3\right)^{1/3} \; ; \tag{2.83}$$

$$\frac{\varepsilon}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} = \frac{1}{\sigma^3}\sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_kX_l{\sigma_{kl}}^3\frac{\varepsilon_{kl}}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} \; ; \tag{2.84}$$

$$\omega = \frac{1}{\sigma^3}\sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_k X_l {\sigma_{kl}}^3 \omega_{kl} \ ; \tag{2.85}$$

$$W = \left(\frac{\mathcal{K}_\mathrm{B}}{\varepsilon\sigma^2}\sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_k X_l \frac{\varepsilon_{kl}}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} {\sigma_{kl}}^2 \sqrt{W_{kl}}\right)^2 \ ; \tag{2.86}$$

$$\mu = \left(\frac{\mathcal{K}_\mathrm{B}}{\varepsilon\sigma^3}\sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_k X_l \frac{\varepsilon_{kl}}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} {\sigma_{kl}}^3 {\mu_{kl}}^4\right)^{1/4} \ ; \tag{2.87}$$

$$\kappa = \sum_{k=1}^{N_{sp}}\sum_{l=1}^{N_{sp}} X_k X_l \kappa_{kl} \ ; \tag{2.88}$$

$$v_c = \left(\frac{\sigma}{0.809}\right)^3 \ ; \tag{2.89}$$

$$T_c = 1.2593\frac{\varepsilon}{\mathcal{K}_\mathrm{B}} \ ; \tag{2.90}$$

$$\mu_r = 0.1313\frac{\mu}{\sqrt{v_c T_c}} \ . \tag{2.91}$$

2.1.4.5 Diffusivité des espèces

Avec la corrélation de Fuller [87], il est possible d'évaluer les coefficients de diffusion binaire à basse pression ${D_{kl}^{bin}}^+$ entre deux espèces k et l :

$${D_{kl}^{bin}}^+ = 1.43\times10^{-3}\frac{T^{1.75}}{P\sqrt{W_{kl}}\left[{\Sigma_{v,k}}^{1/3}{\Sigma_{v,l}}^{1/3}\right]^2} \quad \left[\mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}\right] \ , \tag{2.92}$$

où W_{kl} $\left[\mathrm{g}\cdot\mathrm{mol}^{-1}\right]$ est défini par l'Éq. (2.86) et $\Sigma_{v,k}$ est le volume de diffusion de l'espèce k.

Afin d'évaluer les coefficients de diffusion binaire D_{kl}^{bin} à haute pression, la méthode retenue dans SiTCom-B est la méthode de Takahashi [367], recommandée par Reid *et al.* [305]. Cette méthode repose sur le principe des états correspondants :

$$D_{kl}^{bin}P = f(T_r, P_r)({D_{kl}^{bin}}^+ P) \ , \tag{2.93}$$

où $f(T_r, P_r)$ est une fonction tabulée qui dépend de la température réduite T_r et de la pression réduite P_r. La Fig. 2.3 illustre l'évolution de cette fonction.

2.1.5 Modèles de transport

Dans l'Éq. (2.120) de conservation de l'espèce Y_k ou encore dans l'équation (2.122) de conservation de l'énergie totale non chimique est présent le vecteur vitesse de diffusion de l'espèce V_k. Ce dernier peut se décomposer comme suit :

$$V_k = \mathcal{V}_k + {\mathcal{W}_k}^T + {\mathcal{W}_k}^P + V_c \ , \tag{2.94}$$

avec $\mathcal{V}_k$ le vecteur vitesse de diffusion ordinaire de l'espèce k, ${\mathcal{W}_k}^T$ la vitesse de diffusion thermique (effet Soret, i.e. l'effet d'un gradient de température sur la diffusion des espèces) et ${\mathcal{W}_k}^P$ la vitesse de diffusion associée à l'effet baro-diffusif (i.e. l'effet d'un gradient de pression sur la

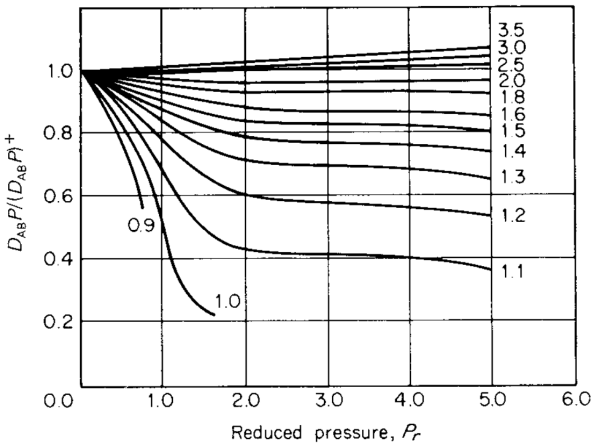


FIGURE 2.3 – Correction de Takahashi pour le facteur de correction $f(T_r, P_r)$ en fonction de la pression et de la température.

diffusion des espèces). V_c est quant à elle une vitesse de correction qui n'est rajoutée que dans le cas où le modèle de diffusion retenu ne permet pas d'assurer la conservation de la masse, sinon celle-ci est nulle [79]. En pratique les termes ${\mathcal{W}_k}^T$ et ${\mathcal{W}_k}^P$ ont été négligés pour l'ensemble des simulations réalisées avec SiTCom-B durant cette thèse, de même que l'effet Dufour qui est l'effet d'un gradient de masse sur la température (réciproque de l'effet Soret). Ainsi, le détail des expressions de ces termes ne sera pas donné ici, mais peut être retrouvé dans la thèse de Guven [111]. On a alors simplement :

$$V_k = \mathcal{V}_k + V_c \ . \tag{2.95}$$

2.1.5.1 Modèle de Curtiss et Hirschfelder

Dans le cadre de l'approche proposée par Curtiss, Hirschfelder *et al.* [128], aussi appelé modèle de diffusion *mixture average*, le terme $\mathcal{V}_k$ peut s'écrire :

$$\mathcal{V}_k = -\frac{\mathcal{D}_k}{X_k}\mathbf{d}_k \ , \tag{2.96}$$

où $\mathbf{d}_k$ est la force pilotant la diffusion de l'espèce k dans le mélange :

$$\mathbf{d}_k = X_k \nabla_T(\mu_k) \ , \tag{2.97}$$

avec μ_k, le potentiel chimique molaire adimensionné de l'espèce k et ∇_T le gradient à température constante. L'expression de μ_k est détaillée dans la section 2.1.6.

Le terme $\mathcal{D}_k$ est quant à lui le coefficient de diffusion moyen de l'espèce k dans le mélange. Ce dernier est donné en termes de coefficients de diffusion binaire D_{kl}^{bin} par :

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{l=1, l\neq k}^{N_{sp}} X_l / D_{kl}^{bin}} \ . \tag{2.98}$$

Toutefois, à cause de l'approximation à l'ordre zéro de l'approche *mixture average*, on a :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} (Y_k V_{k,i}) \neq 0 \ . \tag{2.99}$$

Il est ainsi nécessaire d'introduire la vitesse de correction V_c dans l'Éq. (2.95) comme recommandé par Coffee et Heimerl [56] :

$$V_c = -\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \mathcal{V}_k \ . \tag{2.100}$$

2.1.5.2 Modèle multicomposant

Une autre approche pour représenter le vecteur V_k est le modèle "multicomposant" proposé par Dixon-Lewis, Kee *et al.* [154], qui découle directement des équations de diffusion de Stefan-Maxwell. Dans ce cas, l'expression de la vitesse $\mathcal{V}_k$ est donnée par :

$$\mathcal{V}_k = \frac{1}{X_k} \sum_{l \neq k}^{N_{sp}} D_{lk} \mathbf{d}_l \ . \tag{2.101}$$

L'évaluation des coefficients de diffusion D_{lk} nécessite l'inversion d'une matrice de taille $N_{sp} \times N_{sp}$, opération très coûteuse en temps CPU (*Central Processing Unit*) [79]. Ce modèle ne nécessite pas de vitesse de correction V_c.

Ce modèle, plus complet, est plus représentatif des phénomènes de diffusion multi-espèces que le modèle de Curtiss et Hirschfelder [79]. Toutefois, le manque de données expérimentales à haute pression pour la combustion du méthane avec de l'oxygène pur rend difficile la quantification de l'erreur commise sur la prédiction des calculs des flux de diffusion avec l'approche de Curtiss et Hirschfelder. Enfin, il n'est simplement pas envisageable d'employer le modèle de diffusion multicomposant pour des simulations de type DNS ou LES avec chimie détaillée telles que celles réalisées au cours de cette thèse, à cause du surcoût CPU engendré. L'approche de Curtiss et Hirschfelder est donc naturellement celle retenue pour toutes les simulations numériques effectuées dans cette thèse avec SiTCom-B.

2.1.6 Expression du potentiel chimique

D'une manière générale, on peut écrire le potentiel chimique molaire adimensionné μ_k sous la forme [100, 101] :

$$\mu_k = \frac{g_k W_k}{\mathcal{R} T} \ , \tag{2.102}$$

où g_k est l'enthalpie massique de Gibbs de l'espèce k définie telle que :

$$g_k = \left.\frac{\partial e}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}} - T \left.\frac{\partial s}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}} \ , \tag{2.103}$$

avec e l'énergie interne massique et s l'entropie massique.

2.1.6.1 Approche gaz parfait

Sous l'hypothèse des gaz parfaits, on peut écrire le potentiel chimique réduit de l'espèce k comme suit [100] :

$${\mu_k}^{\mathrm{IG}} = \ln\left(X_k\right) + \frac{W_k g_k^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R} T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R} T}{P^\circ}\right) \ , \tag{2.104}$$

où $g_k^{\mathrm{IG}^\circ}$ est l'enthalpie de Gibbs de l'espèce k calculée avec l'hypothèse des gaz parfaits et à faible pression (en général, l'état standard). L'Éq. (2.97) devient alors :

$$\mathbf{d}_k = X_k \nabla_T \left[\ln\left(X_k\right) + \frac{W_k g_k^{\mathrm{IG}^\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \right] = X_k \nabla \left[\ln\left(X_k\right) \right] \ , \tag{2.105}$$

avec ∇_T le gradient à température constante. C'est-à-dire, plus simplement :

$$\mathbf{d}_k = \nabla X_k \ . \tag{2.106}$$

On retrouve alors la formulation classique de l'expression du terme $\mathbf{d}_k$. Sauf mention du contraire, c'est généralement cette approche qui est retenue pour l'ensemble des simulations, même lorsqu'une équation d'état gaz réel est utilisée.

2.1.6.2 Approche gaz réel

Dans l'approche de diffusion non-idéale, une des difficultés réside dans l'évaluation du gradient du potentiel chimique à température fixé, i.e. $\nabla_T\left(\mu_k\right)$. Or il peut être évalué comme suit [102] :

$$\nabla_T\left(\mu_k\right) = \nabla\left(\mu_k\right) + \frac{W_k h_k}{\mathcal{R}T^2}\nabla T \ , \tag{2.107}$$

avec h_k l'enthalpie de l'espèce k à pression et température fixée, i.e. $h_k = \frac{\partial h}{\partial Y_k}\Big)_{P,T,Y_{j\neq k}}$, que l'on peut calculer selon les recommandations de Meng et Yang [225]. De plus, en suivant également les recommandations de [102], il est possible de séparer le terme μ_k en une somme d'un terme *smooth* μ_k^{sm} et du terme $\ln\left(X_k\right)$ (voir annexe A) :

$$\mu_k = \ln\left(X_k\right) + \mu_k^{\mathrm{sm}} \ , \tag{2.108}$$

ce nous donne finalement la décomposition :

$$\mathbf{d}_k = X_k \nabla_T\left(\mu_k\right) = \nabla X_k + X_k \nabla \mu_k^{\mathrm{sm}} + X_k \frac{W_k h_k}{\mathcal{R}T^2}\nabla T \ . \tag{2.109}$$

Le terme μ_k^{sm} dépend alors de l'équation d'état choisie. On a dans le cas SRK :

$$\begin{aligned}\mu_k^{\mathrm{sm,\ SRK}} = &\ln\left(\frac{\rho}{W-b\rho}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k \rho}{\mathcal{R}Tb(W+b\rho)} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\left(1-\kappa_{l,k}\right)\right] \\ &\times \ln\left(1+\frac{b\rho}{W}\right) + \frac{W_k g_k^{\mathrm{IG}^\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \ ,\end{aligned} \tag{2.110}$$

et dans le cas PR :

$$\begin{aligned}\mu_k^{\mathrm{sm,\ PR}} = &\ln\left(\frac{\rho}{W-b\rho}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\left(1+\sqrt{2}\right)b\rho)(W+\left(1-\sqrt{2}\right)b\rho)} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2 2\sqrt{2}}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\left(1-\kappa_{l,k}\right)\right] \\ &\times \ln\left(\frac{W+\left(1+\sqrt{2}\right)b\rho}{W+\left(1-\sqrt{2}\right)b\rho}\right) + \frac{W_k g_k^{\mathrm{IG}^\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \ .\end{aligned} \tag{2.111}$$

Remarque : dans le cas particulier où $\forall\ (i,j) \in [\![1, N_{sp}]\!]^2,\ \kappa_{i,j} = 0$, on a :

$$\sum_{l=1}^{N_{sp}} \frac{Y_l}{W_l} \sqrt{(a\alpha)_l}\,(1 - \kappa_{l,k}) = \frac{\sqrt{(a\alpha)}}{W} \ , \tag{2.112}$$

d'où :

$$2bW\sqrt{(a\alpha)_k} \sum_{l=1}^{N_{sp}} \frac{Y_l}{W_l} \sqrt{(a\alpha)_l}\,(1 - \kappa_{l,k}) = 2b\sqrt{(a\alpha)_k}\sqrt{(a\alpha)} \ . \tag{2.113}$$

2.1.7 Les équations bilans

2.1.7.1 Équation de conservation de la masse

L'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial\,(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \ , \tag{2.114}$$

avec u_i la vitesse dans la direction i.

2.1.7.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la direction j s'écrit :

$$\frac{\partial\,(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial\,(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \ , \tag{2.115}$$

où τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses. Ce dernier s'exprime dans le cadre d'un fluide Newtonien, homogène et isotrope :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\eta \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \eta\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \ , \tag{2.116}$$

avec η la viscosité du mélange et δ_{ij} le tenseur Kronecker tel que :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad i = j \\ 0 & \text{si} \quad i \neq j \end{cases} \ . \tag{2.117}$$

En posant $S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$ qui est le tenseur des déformations, on peut aussi écrire :

$$\tau_{ij} = 2\eta\left[S_{ij} - \frac{1}{3}S_{kk}\delta_{ij}\right] \ , \tag{2.118}$$

Enfin, on peut également introduire le tenseur des contraintes σ_{ij} :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P\delta_{ij} \ . \tag{2.119}$$

2.1.7.3 Équation de conservation des espèces

L'équation de conservation des espèces peut s'écrire pour chaque espèce k :

$$\frac{\partial \left(\rho Y_k\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_i Y_k\right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho Y_k V_{k,i}\right) + \rho\dot{\omega}_k \ , \tag{2.120}$$

où $V_{k,i}$ est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i introduite dans la section 2.1.5 et $\dot{\omega}_k$ $\left[\mathrm{s}^{-1}\right]$ est le taux de production ou de destruction (terme source) de l'espèce k, (voir section 2.2.1). Afin de respecter les équations (2.4) et (2.114), on a de plus :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \left(Y_k V_{k,i}\right) = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0 \ . \tag{2.121}$$

2.1.7.4 Équation de conservation de l'énergie

On peut écrire l'équation de conservation de l'énergie totale non chimique :

$$\frac{\partial \rho \mathsf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_i \mathsf{E}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sigma_{ij} u_j\right) + \rho\dot{\omega}_{\mathsf{E}} \ , \tag{2.122}$$

où $\dot{\omega}_{\mathsf{E}}$ $\left[\mathrm{W}\cdot\mathrm{kg}^{-1}\right]$ est le terme source d'énergie[1] calculé comme suit :

$$\dot{\omega}_{\mathsf{E}} = -\sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta_{\mathrm{f}} h_k^{\circ} \dot{\omega}_k \ . \tag{2.123}$$

Dans l'équation (2.122), le terme q_i représente le flux de diffusion de chaleur dans la direction i. Si l'on néglige les flux radiatifs, l'effet Soret ou encore l'effet Dufour, ce dernier peut être calculé comme suit :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} Y_k V_{k,i} \ , \tag{2.124}$$

avec λ la conductivité du mélange.

2.2 Modélisation de la combustion turbulente

2.2.1 Cinétique chimique

En considérant une réaction i réversible ou irréversible impliquant N_{sp} espèces, nous pouvons utiliser la représentation suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{k_i} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{k_i} \chi_k \ , \tag{2.125}$$

où les coefficients stœchiométriques ν'_{k_i} et ν''_{k_i} sont des nombres entiers et χ_k est le symbole chimique de l'espèce k. Les ν_{k_i} sont liés par la relation : $\nu_{k_i} = \nu''_{k_i} - \nu'_{k_i}$.

1. En pratique, on utilisera également dans cette thèse le taux de dégagement de chaleur HRR $\left[\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-3}\right]$ (*Heat Release Rate*), défini ici comme la partie positive du terme source $\rho\dot{\omega}_{\mathsf{E}}$.

2.2.1.1 Terme source de chaque espèce

Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k peut aussi être écrit comme une somme des taux de réaction de l'espèce k produits par les N_r réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^{N_r} \nu_{k_i} \dot{\omega}_{r_i} \ , \qquad \forall \ k \in [\![1, N_{sp}]\!] \ , \tag{2.126}$$

où $\dot{\omega}_{r_i}$ est le taux de production de la réaction i.

2.2.1.2 Terme source de chaque réaction

Le terme source de chaque réaction $\dot{\omega}_{r_i}$ est donné par la relation entre les constantes de réactions directe (*forward*) K_{f_i} et indirecte (*reverse*) K_{r_i} de la réaction i :

$$\dot{\omega}_{r_i} = K_{f_i} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\nu'_{k_i}} - K_{r_i} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\nu''_{k_i}} \ , \qquad \forall \ i \in [\![1, N_r]\!] \ . \tag{2.127}$$

2.2.1.3 Loi d'Arrhenius

On suppose généralement que la constante de réaction directe K_{f_i} suit la loi d'Arrhenius :

$$K_{f_i} = \mathrm{A}_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_i}{\mathcal{R}T}\right) \ , \qquad \forall \ i \in [\![1, N_r]\!] \ , \tag{2.128}$$

où A_i est le facteur pré-exponentiel, β_i l'exposant de température et E_i l'énergie d'activation de la réaction i.

2.2.1.4 Constante d'équilibre

Par ailleurs, les constantes de réaction directe K_{f_i} et indirecte K_{r_i} sont évaluées à partir d'une hypothèse d'équilibre :

$$K_{r_i} = \frac{K_{f_i}}{K_{\mathrm{eq}_i}} \ , \qquad \forall \ i \in [\![1, N_r]\!] \ , \tag{2.129}$$

avec :

$$K_{\mathrm{eq}_i} = \left(\frac{P^\circ}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{k_i}} \exp\left(\frac{\Delta_\mathrm{r} S_i^{\circ,m}}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta_\mathrm{r} H_i^{\circ,m}}{\mathcal{R}T}\right) \ , \qquad \forall \ i \in [\![1, N_r]\!] \ , \tag{2.130}$$

où P° est la pression à l'état de référence. Les quantités $\Delta_\mathrm{r} S_i^{\circ,m}/\mathcal{R}$ et $\Delta_\mathrm{r} H_i^{\circ,m}/\mathcal{R}T$ sont telles que :

$$\frac{\Delta_\mathrm{r} S_i^{\circ,m}}{\mathcal{R}} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{k_i} \frac{\Delta_\mathrm{f} S_k^{\circ,m}}{\mathcal{R}} \quad \text{et} \quad \frac{\Delta_\mathrm{r} H_i^{\circ,m}}{\mathcal{R}T} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{k_i} \frac{\Delta_\mathrm{f} H_k^{\circ,m}}{\mathcal{R}T} \ , \qquad \forall \ i \in [\![1, N_r]\!] \ , \tag{2.131}$$

avec $\Delta_\mathrm{f} S_k^{\circ,m}$ et $\Delta_\mathrm{f} H_k^{\circ,m}$ l'entropie molaire de formation et respectivement l'enthalpie molaire de formation de l'espèce k.

2.2.2 Régimes de combustion

Dans l'étude de la combustion, on distingue généralement deux types de régimes canoniques, à savoir celui des flammes prémélangées et celui des flammes de diffusion [291]. Selon la nature du régime de combustion, les grandeurs qui permettent de caractériser la flamme ne sont pas les mêmes. La flamme de prémélange est en effet caractérisée par une vitesse de propagation de flamme fondamentale et une épaisseur bien définie alors que la flamme de diffusion est pilotée par des mécanismes de diffusion et de mélange.

Pour ce qui suit, on considérera la réaction globale de combustion suivante :

$$\nu_F F + \nu_{Ox} Ox \rightarrow \nu_P P \ , \tag{2.132}$$

où F désigne le combustible, Ox l'oxydant et P les produits de la combustion, tandis que ν_F , ν_{Ox} et ν_P désignent les coefficients stœchiométriques de la réaction globale.

2.2.2.1 Flamme de prémelange

Dans une flamme de prémélange, le front de flamme sépare les gaz frais et les gaz brûlés, comme l'illustre la Fig. 2.4.

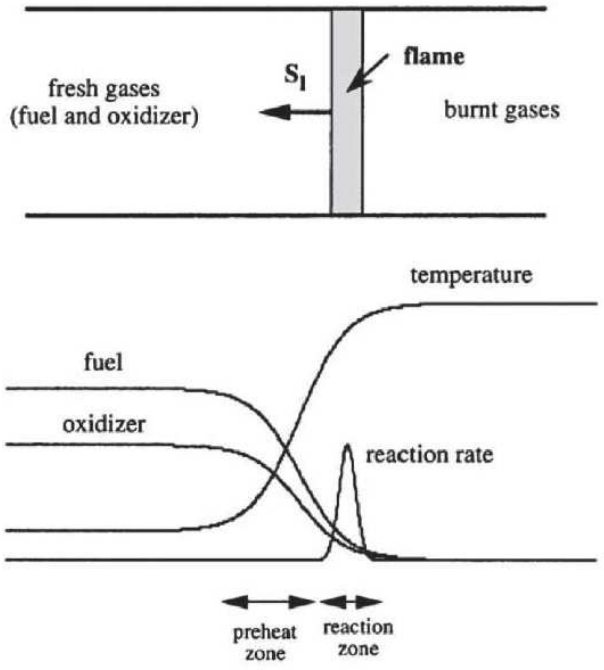


FIGURE 2.4 – Représentation schématique de la flamme de prémélange laminaire 1D [393].

Dans les gaz frais se trouve un prémélange d'oxydant et de combustible qui viennent alimenter la combustion. On utilisera la notation u (*unburnt*) pour désigner les gaz frais tandis que la notation b (*burnt*) sera utilisée pour désigner les gaz brûlés. Les flammes de prémélange sont en général caractérisées par la richesse Φ, une variable de progrès c, une vitesse de flamme laminaire S_L et enfin par l'épaisseur de leur front de flamme δ_L.

Richesse

La richesse Φ d'un mélange permet de caractériser le rapport entre la quantité de combustible et celle d'oxydant par rapport à la stœchiométrie. Ainsi l'expression de la richesse est telle que :

$$\Phi = \frac{Y_\mathrm{F}/Y_{Ox}}{Y_\mathrm{F}/Y_{Ox})_\mathrm{st}} \ . \tag{2.133}$$

La richesse est unitaire lorsque l'oxydant et le combustible sont en proportions stœchiométriques. Quand elle est supérieure à l'unité, on dit que le mélange est riche en combustible, i.e. qu'il est en excès dans le mélange. À l'inverse, quand celle-ci est inférieure à l'unité, on dit que le mélange est pauvre en combustible et c'est donc l'oxydant qui est en excès. On peut sinon définir un rapport d'équivalence ϕ tel que :

$$\phi = s\frac{Y^u_{F,F}}{Y^u_{Ox,Ox}} \ , \quad \text{avec} \quad s = \frac{\nu_{Ox}W_{Ox}}{\nu_F W_F} \ , \tag{2.134}$$

où s désigne ce que l'on appelle le rapport stœchiométrique. On a alors la relation :

$$\Phi = \phi\frac{Y_\mathrm{F}}{Y_{Ox}} \ . \tag{2.135}$$

Variable de progrès

Dans le cadre de la combustion du méthane avec de l'oxygène, on peut définir une variable de progrès Y_c, traduisant l'état d'avancement des réactions chimiques à partir des produits de combustion [135] :

$$Y_c = Y_{\mathrm{CO_2}} + Y_{\mathrm{H_2O}} + Y_{\mathrm{CO}} + Y_{\mathrm{H_2}} \ . \tag{2.136}$$

En normalisant par la valeur de Y_c à l'équilibre, on obtient une définition possible de la variable de progrès normalisée c :

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^\mathrm{eq}} \ . \tag{2.137}$$

Vitesse de flamme laminaire S_L

La vitesse de flamme laminaire S_L désigne quant à elle la vitesse à laquelle se propage une flamme laminaire non étirée 1D et libre de propagation par rapport à un repère fixe. C'est une propriété fondamentale qui ne dépend donc pas de la façon dont elle est mesurée.

Épaisseur de flamme

L'épaisseur du front de flamme laminaire peut être estimée de différentes façons :

$$\delta_{f,th} = \frac{T^b - T^u}{|\nabla T|_\mathrm{max}} \ ; \tag{2.138}$$

$$\delta_{f,c} = \frac{1}{|\nabla c|_\mathrm{max}} \ ; \tag{2.139}$$

$$\delta_{f,\dot\omega_\mathsf{E}} = \frac{\dot\omega_{\mathsf{E},\mathrm{max}}}{k_\mathsf{E}|\nabla\dot\omega_\mathsf{E}|_\mathrm{max}} \ ; \tag{2.140}$$

où k_E est une constante multiplicative qui permet de ne prendre en compte qu'un certain pourcentage de la valeur max du terme source $\dot\omega_\mathsf{E}$. Autrement dit, dans l'Éq. (2.138) on regarde l'épaisseur dans laquelle le terme source dispose d'une valeur minimale.

2.2.2.2 Flamme de diffusion

Dans une flamme de diffusion, le combustible et l'oxydant sont injectés séparément, comme le montre la Fig. 2.5.

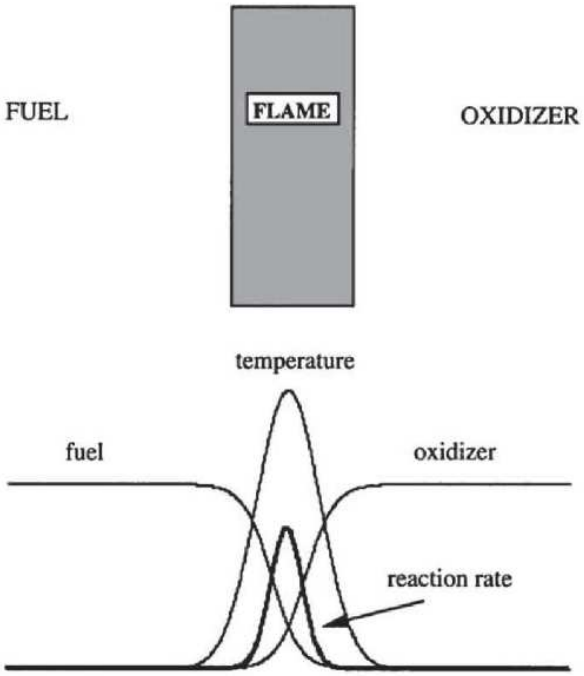


FIGURE 2.5 – Représentation schématique de la flamme de diffusion laminaire 1D [393].

Fraction de mélange

La flamme est essentiellement pilotée par le mélange et se stabilise autour d'une zone de réaction stœchiométrique. La grandeur qui permet de caractériser au mieux la flamme de diffusion est la fraction de mélange Z, que l'on peut définir simplement dans le cas une chimie à une étape (une seule réaction), avec l'hypothèse de nombre de Lewis unitaire comme suit :

$$Z = \frac{\phi \dfrac{Y_{\mathrm{F}}}{Y_{\mathrm{F}}^{\infty}} - \dfrac{Y_{\mathrm{Ox}}}{Y_{\mathrm{Ox}}^{\infty}} + 1}{\phi + 1} \,, \tag{2.141}$$

Y_{F}^{∞} et Y_{Ox}^{∞} désignent les fractions massiques de combustible et respectivement d'oxydant définies par les conditions initiales. La fraction de mélange Z est un scalaire passif qui traduit le niveau de mélange du combustible et de l'oxydant. Celle-ci vaut 1 dans le combustible pur et 0 dans l'oxydant pur.

Fraction de mélange (Bilger)

Une autre manière de définir la fraction de mélange a été proposée par Bilger [15] :

$$Z = \frac{(Y_{\mathrm{C}} - Y_{\mathrm{C,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{C}} W_{\mathrm{C}}) + (Y_{\mathrm{H}} - Y_{\mathrm{H,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{H}} W_{\mathrm{H}}) - (Y_{\mathrm{O}} - Y_{\mathrm{O,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{O}} W_{\mathrm{O}})}{(Y_{\mathrm{C,F}}^{\infty} - Y_{\mathrm{C,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{C}} W_{\mathrm{C}}) + (Y_{\mathrm{H,F}}^{\infty} - Y_{\mathrm{H,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{H}} W_{\mathrm{H}}) - (Y_{\mathrm{O,F}}^{\infty} - Y_{\mathrm{O,Ox}}^{\infty})/(\nu_{\mathrm{O}} W_{\mathrm{O}})} \,, \tag{2.142}$$

avec ν_H et ν_C, les nombres d'atomes de carbone et d'hydrogène contenus initialement dans le combustible, ν_O le nombre d'atomes d'oxygène initialement contenu dans l'oxydant et Y_C, Y_H et Y_O les fractions massiques des atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène.

2.2.2.3 Flamme partiellement prémelangée

Introduit par Peters [277], le concept de flamme partiellement prémélangée étend les caractéristiques propres des flammes de prémélange et de diffusion qui sont trop restrictives pour s'appliquer aux flammes réelles. Il s'agit donc d'un régime intermédiaire entre les deux régimes canoniques de flammes de prémélange et de diffusion.

Indice de Takeno

Dans une configuration de flamme partiellement prémélangée, l'indice de Takeno $\mathcal{T}$, défini par Yamashita *et al.* [410], permet d'identifier la nature du régime de combustion :

$$\mathcal{T} = \frac{\nabla Y_F . \nabla Y_{Ox}}{|\nabla Y_F . \nabla Y_{Ox}|} \ . \tag{2.143}$$

L'indice de Takeno vaut alors 1 dans les zones où la combustion s'effectue en régime de prémélange et -1 en régime de diffusion.

Index de flamme

À l'aide de l'index de flamme F.I. [189] il est également possible de différencier une flamme de prémélange riche (F.I. $= 1$), d'une flamme de prémélange pauvre (F.I. $= -1$) et d'une flamme de diffusion (F.I. $= 0$) :

$$\text{F.I.} = \frac{1}{2} \frac{Z - Z_{st}}{|Z - Z_{st}|} (1 + \mathcal{T}) \ . \tag{2.144}$$

2.3 Extension des équations au formalisme LES

2.3.1 Notion de filtrage en LES

Le principe de la simulation aux grandes échelles (LES) déjà introduit dans la section 1.2.2.3, repose sur le fait de résoudre les grandes échelles de la turbulence et de modéliser uniquement les plus petites. Un filtrage spatial est appliqué aux équations de Navier-Stokes afin de ne résoudre que les grandes échelles de l'écoulement. Ce filtrage agit comme un filtre passe bas en fréquence sur la turbulence. Pour une variable quelconque φ, on peut lui appliquer un opérateur de filtrage spatial F de taille Δ comme suit :

$$\overline{\varphi}(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi\left(\mathbf{x}'\right) F\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}'\right) d\mathbf{x}' \ , \tag{2.145}$$

où $\overline{\varphi}$ représente alors la variable filtrée φ et $\mathbf{x}$ le jeu de données (vecteur) dont dépend cette même variable. Le filtrage LES F appliqué à la variable φ revient en fait à effectuer un produit de convolution entre eux :

$$(\varphi * F)(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi\left(\mathbf{x}'\right) F\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}'\right) d\mathbf{x}' \ . \tag{2.146}$$

Le produit de convolution est une application bilinéaire, commutative et associative. En considérant que λ est un scalaire réel (ou complexe) et φ, ψ et ξ des applications réelles (ou complexes) intégrables, il vient alors :

$$\varphi * (\psi + \lambda\xi) = \varphi * \psi + \lambda\,(\varphi * \xi) \qquad \text{(bilinéarité)} \; ; \tag{2.147}$$

$$(\varphi * \psi) * \xi = \varphi * (\psi * \xi) \qquad \text{(associativité)} \; ; \tag{2.148}$$

$$\varphi * \psi = \psi * \varphi \qquad \text{(commutativité)} \; . \tag{2.149}$$

En pratique, on a donc par linéarité :

$$\overline{\varphi + \psi} = \overline{\varphi} + \overline{\psi} \; . \tag{2.150}$$

Au niveau de la différenciation, nous avons également les propriétés suivantes :

$$\overline{\frac{\partial \varphi}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \overline{\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial x_i} \; . \tag{2.151}$$

La différenciation spatiale n'est en revanche pas vérifiée si le filtre n'est pas homogène, en particulier dans le cas où un maillage non-uniforme est utilisé, notamment proche des parois. Toutefois, dans la communauté LES, cette propriété est en général supposée vraie. Il est cependant bon de noter qu'au cours de cette thèse toutes les simulations LES étant effectuées avec un maillage uniforme dans l'ensemble du domaine, cette propriété est bien vérifiée. La différenciation sur un filtrage temporel peut également être fausse dans le cas où un maillage mobile évoluant dans le temps est utilisé, ce qui sort du cadre de cette thèse. Enfin, le filtre est normalisé :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \; . \tag{2.152}$$

2.3.2 Taille de filtre

Il est également important de mentionner que dans la plupart des simulations LES, le filtre est implicite et dépend de la taille de maille. En fait c'est le maillage en lui-même qui fait office de filtre de taille Δ. En général Δ est tel que :

$$\Delta = (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)^{1/3} \; , \tag{2.153}$$

où 1, 2 et 3 représente les trois directions de l'espace. Dans le cas particulier où le maillage est cartésien, structuré et uniforme, on a simplement en tout point de l'espace :

$$\Delta = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z \; . \tag{2.154}$$

2.3.3 Décomposition de Reynolds

Il est également possible de décomposer une grandeur en une somme de sa grandeur filtrée et d'une grandeur non résolue (terme de sous maille) :

$$\varphi = \overline{\varphi} + \varphi' \; . \tag{2.155}$$

La Fig. 2.6 illustre la différence entre une grandeur non filtrée f (DNS) et sa valeur filtrée $\overline{f}$ (LES). La différence entre les deux est le terme de sous maille f'.

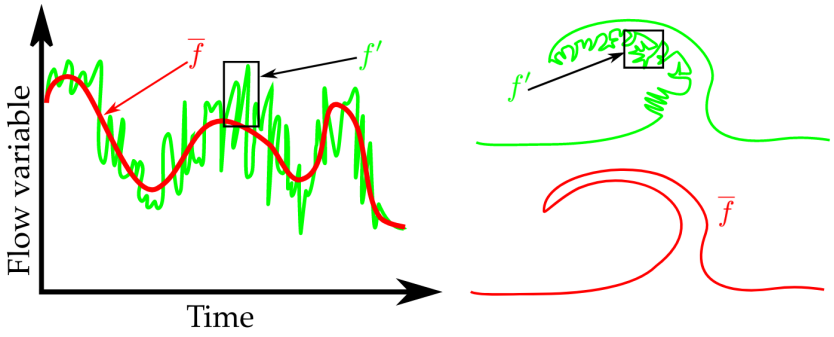


FIGURE 2.6 – Comparaison d'une grandeur filtrée $\overline{f}$ (LES) et non filtrée f (DNS).

2.3.4 Filtrage de Favre

Pour les écoulements à masse volumique variable (ce qui est le cas dans les simulation réalisées au cours de cette thèse), on peut introduire le filtrage au sens de Favre, i.e. pondéré par la masse volumique :

$$\widetilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho\varphi\left(\mathbf{x}'\right) F\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right) d\mathbf{x}' \ . \tag{2.156}$$

On peut également décomposer une grandeur selon une somme de cette même grandeur filtrée au sens de Favre et du terme non résolu :

$$\varphi = \widetilde{\varphi} + \varphi'' \ . \tag{2.157}$$

2.3.5 Filtrage des equations de Navier-Stokes

2.3.5.1 Équation de conservation de la masse filtrée

L'équation de conservation de la masse peut s'écrire après application du filtre :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u}_i\right)}{\partial x_i} = 0 \ . \tag{2.158}$$

2.3.5.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement filtrée

On peut écrire l'équation de conservation de la quantité de mouvement filtrée :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u}_j\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right)\right] \ . \tag{2.159}$$

Le tenseur des contraintes visqueuse $\bar{\tau}_{ij}$ et les contraintes de Reynolds non résolues $\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right)$ nécessitent alors d'être modélisés.

2.3.5.3 Équation de conservation des espèces filtrées

L'équation de conservation de l'espèce k après filtrage peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{Y}_k\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\widetilde{Y_k V_{k,i}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)\right] + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_k \ . \tag{2.160}$$

Le flux de diffusion $\bar{\rho}\widetilde{Y_k V_{k,i}}$, le flux non résolu $\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)$ ou encore le terme source $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_k$ nécessitent alors d'être modélisés.

2.3.5.4 Équation de conservation de l'énergie filtrée

On peut écrire l'équation de conservation de l'énergie filtrée :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{\mathsf{E}}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{\mathsf{E}}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\sigma_{ij}u_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i\mathsf{E}} - \widetilde{u}_i\widetilde{\mathsf{E}}\right)\right] + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{\mathsf{E}} \ . \tag{2.161}$$

Le flux de chaleur $\bar{q}_i$, le terme relatif au tenseur des contraintes $\overline{\sigma_{ij}u_j}$, le flux non résolu $\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i\mathsf{E}} - \widetilde{u}_i\widetilde{\mathsf{E}}\right)$ ou encore le terme source $\widetilde{\dot{\omega}}_{\mathsf{E}}$ nécessitent alors d'être modélisés.

2.3.6 Fermeture des équations de transport filtrées

2.3.6.1 Tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes visqueuses filtré peut s'exprimer :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\eta}\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{kk}\right) \ , \tag{2.162}$$

avec $\widetilde{S}_{ij}$ le tenseur des déformations filtré :

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \ . \tag{2.163}$$

Le tenseur des contraintes pouvant également s'écrire :

$$\overline{\sigma_{ij}u_i} = \widetilde{u}_i\left(\bar{\tau}_{ij} - \overline{P}\delta_{ij}\right) \ . \tag{2.164}$$

2.3.6.2 Tenseur des contraintes de Reynolds

La contrainte de Reynolds $\mathcal{T}_{ij} = \bar{\rho}\left(\widetilde{u_iu_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right)$ joue un rôle essentiel dans la modélisation de la turbulence LES. Bien des modèles existent dans la littérature, mais ne seront présentés ici que les modèles utilisés au cours de cette thèse, à savoir ceux de Smagorinsky [352], Smagorinsky dynamique [93, 185] et WALE [249]. Ces approches reposent sur l'approximation de Boussinesq [26] qui suppose que l'effet des petites structures non résolues est similaire à une augmentation de viscosité, aussi appelée viscosité turbulente. La principale difficulté réside dans l'estimation de cette viscosité supplémentaire.

Modèle de Smagorinsky

Dans l'approche de Smagorinsky [352], le tenseur $\mathcal{T}_{ij}$ peut se décomposer comme une somme de sa partie déviatorique $\mathcal{T}_{ij}^D$ et de sa partie isotrope $\mathcal{T}_{ij}^I$:

$$\mathcal{T}_{ij} = \mathcal{T}_{ij}^D + \mathcal{T}_{ij}^I \ , \tag{2.165}$$

avec :

$$\mathcal{T}_{ij}^D = \mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{T}_{kk} \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_{ij}^I = \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{T}_{kk} \ . \tag{2.166}$$

Il est alors possible d'exprimer la partie déviatorique du tenseur $\mathcal{T}_{ij}$ comme suit :

$$\mathcal{T}_{ij}^D = -2\bar{\rho}\nu_t\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\widetilde{S}_{kk}\right) \ , \tag{2.167}$$

où ν_t est la viscosité (cinématique) turbulente. L'introduction de cette viscosité numérique permet la modélisation du terme de sous maille. Ce terme de viscosité est alors estimé de la façon suivante :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \left|\widetilde{S}\right| , \tag{2.168}$$

où C_S est la constante de Smagorinsky qui dépend de l'écoulement considéré (par exemple, $C_S = 0.18$ dans un cas de turbulence homogène isotrope [185] et $C_S = 0.1$ pour un écoulement dans une conduite [233]). Δ est la largeur caractéristique du filtre (en l'occurence ici, la taille de maille) et $|\widetilde{S}|$ défini comme :

$$\left|\widetilde{S}\right| = 2\sqrt{\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} . \tag{2.169}$$

Enfin, la partie isotrope du tenseur $\mathcal{T}_{ij}$ est généralement négligée, en particulier dans le cas d'écoulements incompressibles. Dans le cas d'écoulements compressibles, Yoshizawa [415] propose toutefois d'évaluer le terme $\mathcal{T}_{kk}$ directement impliqué dans le calcul de $\mathcal{T}_{ij}^I$ de la manière suivante :

$$\mathcal{T}_{kk} = 2C_I \bar{\rho} \Delta^2 |\widetilde{S}|^2 , \tag{2.170}$$

où C_I est une constante et Δ la taille du filtre.

Le principal inconvénient de ce modèle est qu'une valeur unique de la constante C_S ne peut être satisfaisante pour tous les écoulements. Le modèle de Smagorinsky en l'état est donc très dissipatif, en particulier en proche paroi [183] où l'écoulement se comporte très différemment des zones plus éloignées des parois. L'idée d'un modèle dynamique permettant d'ajuster la constante C_S a donc émergé.

Modèle Smagorinsky dynamique

Initialement proposé par Germano *et al.* [93] pour les écoulements incompressibles, le modèle de Smagorinsky dans sa version dynamique a ensuite été étendu par Moin *et al.* [234] en proposant également une modification dynamique de la constante C_I puis enfin amélioré par Lilly *et al.* [185]. L'idée derrière ce modèle basé sur le modèle original de Smagorinsky [352] est de rajouter un filtrage explicite généralement de taille $\widehat{\Delta} = 2\Delta$ qui sert de test pour déterminer à quel point les petites échelles de la turbulence sont résolues ou non, afin d'ajuster localement la constante C_S du modèle de Smagorinsky classique et donc *a fortiori* la viscosité turbulente ν_t.

On peut appliquer le filtre test sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement déjà filtrée au sens de Favre :

$$\frac{\partial \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}}\right) = -\frac{\partial \widehat{\bar{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\widehat{\bar{\tau}}_{ij} - \left(\widehat{\bar{\rho}u_i u_j} - \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j}\right) - \left(\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}}\right)\right] , \tag{2.171}$$

ce qui donne après simplification :

$$\frac{\partial \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}}\right) = -\frac{\partial \widehat{\bar{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\widehat{\bar{\tau}}_{ij} - \left(\widehat{\bar{\rho}u_i u_j} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}}\right)\right] , \tag{2.172}$$

et amène à de nouvelles contraintes de Reynolds non résolues au niveau du filtre test :

$$T_{ij} = \widehat{\bar{\rho}u_i u_j} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}} . \tag{2.173}$$

En notant également $\widehat{\mathcal{T}_{ij}}$, les contraintes de Reynolds non résolues au niveau du filtre de Favre mais après application du filtre test, on a :

$$\widehat{\mathcal{T}_{ij}} = \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j}} - \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\widetilde{u}_j} \ . \tag{2.174}$$

En posant $\mathcal{L}_{ij}$, le tenseur de Leonard, on obtient ainsi l'identité de Germano :

$$\mathcal{L}_{ij} = T_{ij} - \widehat{\mathcal{T}_{ij}} = \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_i}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_j}}{\widehat{\bar{\rho}}} \ . \tag{2.175}$$

Le tenseur $\mathcal{L}_{ij}$ peut alors être entièrement déterminé puisque les termes de vitesses $\bar{\rho}\widetilde{u}_j$ sont résolues et donc leur valeur ensuite filtrée explicitement sont également connues, comme l'illustre la Fig. 2.7.

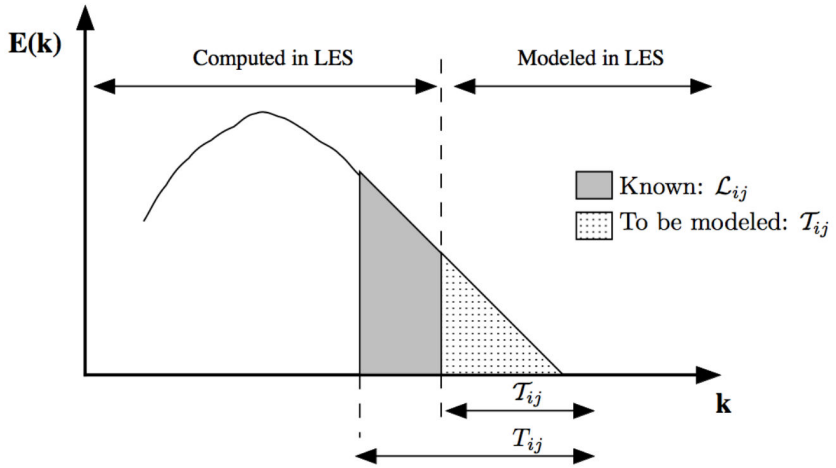


FIGURE 2.7 – Représentation graphique de l'identité de Germano dans le spectre d'énergie. $\mathcal{T}_{ij}$ et T_{ij} sont respectivement les contraintes de Reynolds du filtrage LES et du filtrage de test. $\mathcal{L}_{ij}$ est le tenseur de Leonard qui représente la partie résolue du tenseur T_{ij} par LES [291].

On peut alors appliquer le modèle de Smagorinsky aux tenseurs $\mathcal{T}_{ij}$ et T_{ij} :

$$\mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{T}_{kk} = -2\bar{\rho}C\Delta^2|\widetilde{S}|\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{kk}\right) = -2C\alpha_{ij} \ ; \tag{2.176}$$

$$T_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} = -2\widehat{\bar{\rho}}C\widehat{\Delta}^2|\widehat{\widetilde{S}}|\left(\widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widehat{\widetilde{S}}_{kk}\right) = -2C\beta_{ij} \ ; \tag{2.177}$$

où $C = {C_S}^2$ et α_{ij} et β_{ij} sont introduits uniquement pour simplifier les notations. On peut alors réécrire l'identité de Germano :

$$\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk} = 2\left(\widehat{C\alpha_{ij}} - C\beta_{ij}\right) \ . \tag{2.178}$$

En général, le terme $\widehat{C\alpha_{ij}}$ est approximé par $C\widehat{\alpha}_{ij}$, comme effectué dans ce qui suit. En multipliant de part et d'autre l'équation (2.178) par le tenseur des déformations filtré au sens de Favre $\widetilde{S}_{ij}$, il vient :

$$C = \frac{1}{2}\frac{\left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}\right)\widetilde{S}_{ij}}{\widehat{\alpha}_{ij}\widetilde{S}_{ij} - \beta_{ij}\widetilde{S}_{ij}} \ . \tag{2.179}$$

Le problème de cette approche est que le dénominateur peut devenir négatif ou égal à zéro. Si la constante C devient négative, la cascade d'énergie de Kolmogorov est inversée [42], ce qui transfère l'énergie des petites structures vers les grandes structures. Ce phénomène peut être évité en proche paroi, en moyennant les termes impliqués dans l'Éq. (2.179) sur un plan parallèle aux murs [93] :

$$C = \frac{1}{2} \frac{< \left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}\right) \widetilde{S}_{ij} >}{< \widehat{\alpha}_{ij}\widetilde{S}_{ij} > - < \beta_{ij}\widetilde{S}_{ij} >} , \tag{2.180}$$

où $< . >$ désigne l'opérateur de moyenne.

Lily *et al.* [185] ont alors proposé une modification du modèle de Germano via une optimisation par une approche des moindres carrés. En posant $M_{ij} = \widehat{\alpha}_{ij} - \beta_{ij}$, l'Éq. (2.178) devient :

$$\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk} = 2CM_{ij} . \tag{2.181}$$

On peut alors définir Q comme le carré de l'erreur :

$$Q = \left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk} - 2CM_{ij}\right)^2 . \tag{2.182}$$

Si on cherche la valeur de C qui minimise l'erreur Q, il suffit de résoudre $\frac{\partial Q}{\partial C} = 0$, ce qui nous donne la condition :

$$C = \frac{1}{2} \frac{\left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}\right) M_{ij}}{{M_{ij}}^2} . \tag{2.183}$$

Enfin, si on regarde le signe de la dérivée seconde de Q par rapport à C :

$$\frac{\partial Q}{\partial C} = 8{M_{i_j}}^2 \geq 0 , \tag{2.184}$$

ce qui assure bien l'existence d'un minimum C pour l'erreur Q en toute circonstance, sauf dans le cas où $M_{ij} = 0$. Mais dans ce cas alors, le numérateur est également égal à zéro. Ainsi, le cas où le dénominateur est égal à zéro lors de l'évaluation de la constante C est réduit au cas unique $M_{ij} = 0$ avec l'approche de Lilly, contrairement au modèle initial de Germano. Toutefois, le numérateur de l'Éq. (2.183) peut aussi localement être négatif. C'est pourquoi Ghosal *et al.* [94] et Piomelli *et al.* [287] ont introduit une variante de ce modèle, appelée *Dynamic Localisation Model* (DLM), qui consiste à rajouter une opération de filtrage $< . >_{\mathrm{DLM}}$ sur la constante C afin de lisser la valeur de cette dernière :

$$C = \frac{1}{2} \frac{< \left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}\right) M_{ij} >_{\mathrm{DLM}}}{< {M_{ij}}^2 >_{\mathrm{DLM}}} . \tag{2.185}$$

En pratique, la constante C est filtrée plusieurs fois (généralement trois) à la même échelle $\widehat{\Delta}$ que le filtre explicite, et la condition $C \geq 0$ est imposée de façon à éviter tout phénomène de rétro-diffusion et de renversement de la cascade d'énergie.

De façon similaire à C_S, il est possible d'évaluer la constante C_I qui intervient dans le modèle de Yoshizawa [415] avec une approche dynamique. En effet, Moin *et al.* [234] se sont inspirés du modèle de Germano pour écrire une version dynamique du calcul de la constante C_I. Dans cette perspective, le tenseur T_{kk} peut s'exprimer :

$$T_{kk} = 2C_I\widehat{\Delta}^2\widehat{\overline{\rho}}|\widehat{\widetilde{S}}|^2 , \tag{2.186}$$

et le tenseur $\widehat{\mathcal{T}_{kk}}$ peut quant à lui s'exprimer :

$$\widehat{\mathcal{T}_{kk}} = \widehat{2C_I\Delta^2\bar{\rho}|\widetilde{S}|^2} \simeq 2C_I\Delta^2\widehat{\bar{\rho}|\widetilde{S}|^2} \ . \tag{2.187}$$

Sachant que $\mathcal{L}_{kk}$ est défini comme :

$$\mathcal{L}_{kk} = T_{kk} - \widehat{\mathcal{T}_{kk}} \ , \tag{2.188}$$

il vient que :

$$\mathcal{L}_{kk} = 2C_I\left(\widehat{\Delta}^2\widehat{\bar{\rho}}|\widehat{\widetilde{S}}|^2 - \Delta^2\widehat{\bar{\rho}|\widetilde{S}|^2}\right) \ . \tag{2.189}$$

Or, on a également :

$$\mathcal{L}_{kk} = \widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{u}_k} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k}}{\widehat{\bar{\rho}}} \ . \tag{2.190}$$

Ainsi, en combinant l'Éq. (2.189) avec l'Éq. (2.190) et en inversant l'équation obtenue afin de disposer d'une expression pour C_I, on obtient :

$$C_I = \frac{1}{2}\frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{u}_k} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k}\widehat{\bar{\rho}\widetilde{u}_k}}{\widehat{\bar{\rho}}}}{\widehat{\Delta}^2\widehat{\bar{\rho}}|\widehat{\widetilde{S}}|^2 - \Delta^2\widehat{\bar{\rho}|\widetilde{S}|^2}} \ . \tag{2.191}$$

Dans cette expression, la constante C_I peut être nulle ou négative. Suivant la même idée que pour le calcul de la constante C, C_I est ainsi filtrée plusieurs fois (trois fois) et la condition $C_I \geq 0$ est imposée. Toutefois, Ruan [320] a montré durant sa thèse que pour des maillages relativement fins, la contribution du terme isotropique était négligeable devant la partie déviatorique et pouvait donc être négligée dans ces cas-là.

Ainsi on dispose d'un modèle auto-suffisant capable d'ajuster localement la couche de modélisation nécessaire pour la bonne prise en compte de la turbulence sans correction *a posteriori* et ce, peu importe les configurations d'écoulements. Au sein d'un même écoulement, ce modèle fonctionne en théorie aussi bien proche des parois que loin de celles-ci. Toutefois, l'emploi de ce modèle nécessite l'utilisation d'un filtrage explicite, pouvant parfois être difficile à mettre en place, notamment avec des géométries complexes [140] et pouvant être relativement coûteux en temps de calcul. Afin de pallier à ces défauts, l'idée d'un modèle sans filtrage explicite mais pouvant rendre aussi bien compte de l'écoulement en proche paroi que loin des murs est apparu quelques années après : le modèle WALE [249].

Modèle WALE

Dans le modèle WALE (*Wall-Adaptating Eddy-Viscosity*) de Nicoud *et al.* [249], la viscosité turbulente est évaluée comme suit :

$$\nu_t = \left(C_w^2\Delta\right)^2 \frac{\left(s_{ij}^d s_{ij}^d\right)^{3/2}}{\left(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}\right)^{5/2} + \left(s_{ij}^d s_{ij}^d\right)^{5/2}} \ , \tag{2.192}$$

où s_{ij}^d est calculé comme suit :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}\left(\widetilde{g_{ij}}^2 + \widetilde{g_{ji}}^2\right) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{g_{kk}}^2 \ , \quad \text{avec} \quad \widetilde{g_{ij}}^2 = \widetilde{g_{ik}}\widetilde{g_{kj}} \quad \text{et} \quad \widetilde{g_{ij}} = \frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j} \ , \tag{2.193}$$

et C_w une constante généralement telle que $C_w = 0.5$. L'avantage du modèle WALE est d'être prédictif en proche paroi ainsi que de prédire efficacement la transition entre le régime laminaire et turbulent.

2.3.6.3 Modélisation du flux de diffusion filtré

Dans l'Éq. (2.160), le terme $\bar{\rho}\widetilde{Y_k V_{k,i}}$ nécessite d'être modélisé. On fait en général l'approximation :

$$\widetilde{Y_k V_{k,i}} \simeq \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_{k,i} \ , \tag{2.194}$$

où $\widetilde{V}_{k,i}$ est tel que :

$$\widetilde{V}_{k,i} = \widetilde{\mathcal{V}_{k,i}} + V_{c,i} \ , \tag{2.195}$$

où $V_{c,i}$ est la vitesse de correction dans la direction i permettant d'assurer la conservation de la masse, si nécessaire. Avec l'approximation de Curtiss et Hirschfelder [128], on a de plus :

$$\widetilde{\mathcal{V}_{k,i}} = -\frac{\widetilde{\mathcal{D}_k}}{X_k}\widetilde{\mathbf{d}_{k,i}} \ , \tag{2.196}$$

que l'on approxime en général comme suit :

$$\widetilde{\mathcal{V}_{k,i}} \simeq -\frac{\widetilde{\mathcal{D}}_k}{\widetilde{X}_k}\widetilde{\mathbf{d}}_{k,i} \ . \tag{2.197}$$

Il reste maintenant à modéliser le terme $\widetilde{\mathbf{d}}_{k,i}$, sachant que dans le cas général :

$$\mathbf{d}_{k,i} = \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + X_k \left.\frac{\partial\left(\Delta\mu_k\right)}{\partial x_i}\right|_T \ . \tag{2.198}$$

Modélisation idéale du flux de diffusion

Dans la plupart des applications, on suppose simplement que $\mathbf{d}_k = \nabla X_k$. Il vient alors :

$$\widetilde{\mathcal{V}_{k,i}} \simeq -\frac{\widetilde{\mathcal{D}}_k}{\widetilde{X}_k}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \ . \tag{2.199}$$

En supposant de plus :

$$\widetilde{Y}_k = \frac{\widetilde{W}_k}{\widetilde{W}}\widetilde{X}_k \ , \tag{2.200}$$

on obtient finalement la modélisation classique du flux de diffusion filtré avec l'approche de Curtiss et Hirschfelder :

$$\bar{\rho}\widetilde{Y_k V_{k,i}} \simeq -\bar{\rho}\frac{\widetilde{W}_k}{\widetilde{W}}\widetilde{\mathcal{D}}_k\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + F_c \ , \tag{2.201}$$

où F_c est le flux correctif basé sur la vitesse de correction V_c.

Modélisation non-idéale du flux de diffusion

Dans ce cas, nous avons (voir Éq. (2.109)) :

$$\mathbf{d}_k = \nabla X_k + X_k \nabla \mu_k^{\mathrm{sm}} + X_k \mu_k^T \nabla T \ , \quad \text{avec} \quad \mu_k^T = \frac{W_k h_k}{\mathcal{R} T^2} \ . \tag{2.202}$$

On peut alors approximer le terme $\widetilde{\mathbf{d}}_k$ comme suit :

$$\widetilde{\mathbf{d}}_k \simeq \widetilde{X}_k + \widetilde{X}_k \nabla \left(\widetilde{\mu_k^{\mathrm{sm}}} \right) + \widetilde{X}_k \widetilde{\mu_k^T} \nabla \widetilde{T} \ . \tag{2.203}$$

Une approche pour estimer le terme $\widetilde{\mu_k^{\mathrm{sm}}}$ de façon simple est de faire l'approximation :

$$\widetilde{\mu_k^{\mathrm{sm}}} \simeq \mu_k^{\mathrm{sm}} \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y_1}, \widetilde{Y_2}, ..., \widetilde{Y}_k, ..., \widetilde{Y_{N_{sp}}} \right) \ . \tag{2.204}$$

De la même façon, on peut approcher simplement le terme $\widetilde{\mu_k^T}$ comme suit :

$$\widetilde{\mu_k^T} \simeq \mu_k^T \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y_1}, \widetilde{Y_2}, ..., \widetilde{Y}_k, ..., \widetilde{Y_{N_{sp}}} \right) \ . \tag{2.205}$$

Ainsi, l'approche retenue dans cette thèse pour la modélisation du terme $\widetilde{\mathbf{d}_{k,i}}$ dans le cas de la prise en compte des effets non-idéaux de diffusion est la suivante :

$$\widetilde{\mathbf{d}_{k,i}} \simeq \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \widetilde{X}_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu_k^{\mathrm{sm}} \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y}_k \right) \right] + \widetilde{X}_k \mu_k^T \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y}_k \right) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} \ , \tag{2.206}$$

ce qui nous donne finalement pour l'expression du flux de diffusion filtré :

$$\bar{\rho} \widetilde{Y_k V_{k,i}} \simeq -\bar{\rho} \frac{\widetilde{W_k}}{\widetilde{W}} \widetilde{\mathcal{D}}_k \left[\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \widetilde{X}_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu_k^{\mathrm{sm}} \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y}_k \right) \right] + \widetilde{X}_k \mu_k^T \left(\bar{\rho}, \widetilde{T}, \widetilde{Y}_k \right) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} \right] + F_c \ . \tag{2.207}$$

2.3.6.4 Modélisation du flux de chaleur filtré

Dans l'Éq. (2.161), le terme $\bar{q}_i$ nécessite d'être modélisé. On fait en général l'approximation :

$$\overline{\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} Y_k V_{k,i}} \simeq \bar{\rho} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \widetilde{h}_{s,k} \widetilde{Y_k V_{k,i}} \ , \tag{2.208}$$

ce qui nous donne :

$$\bar{q}_i = -\bar{\lambda} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \widetilde{h}_{s,k} \widetilde{Y_k V_{k,i}} \ , \tag{2.209}$$

où le terme $\bar{\rho} \widetilde{Y_k V_{k,i}}$ est calculé comme dans la section précédente (voir section 2.3.6.3).

2.3.6.5 Termes non résolus dans les équations de conservation des espèces et de l'énergie

Comme vu dans les Éq. (2.160) et (2.161), les termes $\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k \right)$ et $\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i \mathsf{E}} - \widetilde{u}_i \widetilde{\mathsf{E}} \right)$ nécessitent eux aussi d'être modélisés. La modélisation retenue pour ces termes-là suit l'approximation de Boussinesq, c'est-à-dire que le transfert d'énergie entre les échelles résolues et les échelles modélisées est similaire à un mécanisme de diffusion. Ainsi, on utilise le gradient des termes résolus en introduisant un nombre de Schmidt et de Prandtl turbulent :

— modélisation du flux turbulent non résolu dans l'équation de conservation des espèces filtrée :

$$\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k\right) = -\frac{\eta_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} \ , \quad \text{avec} \quad Sc_{t,k} = \frac{\eta_t}{\mathcal{D}_k} \quad \text{et} \quad \eta_t = \bar{\rho}\nu_t \ ; \tag{2.210}$$

— modélisation du flux turbulent non résolu dans l'équation de conservation de l'énergie filtrée :

$$\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i \mathsf{E}} - \widetilde{u}_i \widetilde{\mathsf{E}}\right) = -\frac{\eta_t}{\mathrm{Pr}_t} \frac{\partial \widetilde{\mathsf{E}}}{\partial x_i} \ , \quad \text{avec} \quad \mathrm{Pr}_t = \frac{c_p \eta_t}{\lambda} \ . \tag{2.211}$$

En pratique, dans les LES présentées dans cette thèse, $Sc_t = Pr_t = 0.7$ pour toutes les espèces, comme effectué par Zong *et al.* [424] et Schmitt [330].

2.3.7 Modélisation du terme source chimique

2.3.7.1 Approche quasi-laminaire

L'approche directe ou "sans modèle" consiste à ne pas appliquer de modèle pour calculer le terme source moyen $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_k$, ni sa version dans l'équation de l'énergie $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{\mathsf{E}}$. Cela revient à supposer [291] :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_k = \dot{\omega}_k\left(\widetilde{T}, \widetilde{Y_1}, \widetilde{Y_2}, ..., \widetilde{Y}_k, ..., \widetilde{Y_{N_{sp}}}\right) \ . \tag{2.212}$$

On peut alors calculer le terme source de l'équation d'énergie filtrée $\widetilde{\dot{\omega}}_{\mathsf{E}}$ comme suit :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{\mathsf{E}} = -\sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta_{\mathrm{f}} h_k^{\circ} \widetilde{\dot{\omega}}_k \ . \tag{2.213}$$

2.3.7.2 Modèle d'épaississement de flamme (TFLES)

Principe de base

Une autre façon de modéliser le terme source chimique est d'épaissir virtuellement le front de flamme avec un facteur d'épaississement $\mathcal{F}$ de façon à avoir assez de mailles dans l'épaisseur du front de flamme. Le concept introduit initialement pour des flammes de prémélange par Butler [34] et O'Rourke [261] est de résoudre suffisamment le front de flamme épaissi tout en conservant certaines propriétés essentielles comme la vitesse de flamme par exemple. En effet, on peut montrer [169, 408] que la vitesse de flamme laminaire de prémélange non étirée S_L^0 et le front de flamme associé δ_L^0 sont tels que :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}\dot{\omega}} \quad \text{et} \quad \delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{\dot{\omega}}} \ , \tag{2.214}$$

avec $D_{th} = \lambda/\rho c_p$ est le coefficient de diffusion thermique. Ainsi, si on divise d'un facteur $\mathcal{F}$ le terme source $\dot{\omega}$, il faut également multiplier D_{th} par ce même facteur $\mathcal{F}$ afin de préserver la vitesse de flamme laminaire S_L^0. C'est pourquoi Colin *et al.* [57] proposent la transformation algébrique suivante :

$$\begin{cases} \dot{\omega} & \longmapsto & \dfrac{\dot{\omega}}{\mathcal{F}} \\ D_{th} & \longmapsto & \mathcal{F} D_{th} \end{cases} . \tag{2.215}$$

En appliquant cette transformation à l'équation de conservation des espèces filtrée (Éq. (2.160)), on obtient :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{Y_k}\right)}{\partial t}+\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}\right)}{\partial x_i}=-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\mathcal{F}\widetilde{Y_k V_{k,i}}\right)-\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k}-\widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}\right)\right]+\bar{\rho}\frac{\widetilde{\dot{\omega}}_k}{\mathcal{F}}\ . \tag{2.216}$$

Dimensionnement du facteur d'épaississement $\mathcal{F}$

Le facteur d'épaississement $\mathcal{F}$ est choisi de façon à décrire le front de flamme pour un nombre de points n fixé avec le maillage LES de taille Δ_{LES} :

$$n=\frac{\delta_L^0}{\Delta_{\text{DNS}}}=\frac{\mathcal{F}\delta_L^0}{\Delta_{\text{LES}}}\ . \tag{2.217}$$

D'où :

$$\mathcal{F}=\frac{\Delta_{\text{LES}}}{\Delta_{\text{DNS}}}=n\frac{\Delta_{\text{LES}}}{\delta_L^0}\ . \tag{2.218}$$

En pratique, on peut éventuellement ne pas vouloir préserver le ratio entre le nombre de points présents dans le front de flamme en DNS et celui présent dans le front de flamme LES pour des raisons de temps de calcul. On se contente alors de choisir $\mathcal{F}$ tel que $\mathcal{F}=\Delta_{\text{LES}}/\delta_L^0$ (mais dans ce cas $\mathcal{F}\neq\Delta_{\text{LES}}/\Delta_{\text{DNS}}$).

Interaction chimie-turbulence

Toutefois, l'épaississement de la flamme d'un facteur $\mathcal{F}$ entraine aussi une modification de l'interaction chimie-turbulence [1,57], comme le montre la Fig. 2.8 où la flamme artificiellement épaissie est nettement moins plissée par la turbulence.

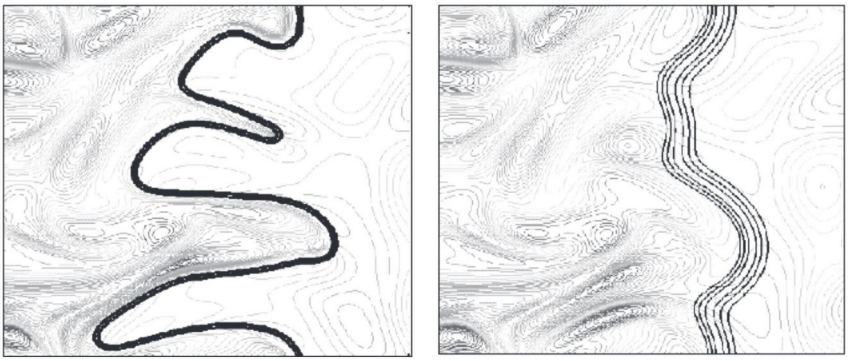


FIGURE 2.8 – Interaction flamme-turbulence : DNS d'une flamme non épaissie (gauche) et d'une flamme épaissie avec un facteur $\mathcal{F}=5$ (droite). Images issues de [291].

En effet, si on regarde le nombre de Damköhler épaissi $Da^{\mathcal{F}}$:

$$Da=\frac{\tau_t}{\tau_c}=\frac{\Lambda}{u'_\Lambda}\frac{S_L^0}{\delta_L^0}\quad\Longrightarrow\quad Da^{\mathcal{F}}=\frac{\Lambda}{u'_\Lambda}\frac{\mathcal{F}S_L^0}{\delta_L^0}=\frac{Da}{\mathcal{F}}\ , \tag{2.219}$$

ce qui entraine une modification de l'interaction chimie-turbulence puisque la capacité d'un tourbillon à plisser la flamme ou la pénétrer dépend de son épaisseur [224, 292].

C'est pourquoi, la fonction d'efficacité $\mathcal{E}$ a été introduite par Colin *et al.* [57] afin d'augmenter la vitesse de flamme turbulente pour compenser la perte de surface de la flamme. Cette dernière

correspond au rapport des facteurs de plissement de la flamme laminaire $\Xi(\delta_L^0)$ et de plissement la flamme laminaire épaissie $\Xi(\mathcal{F}\delta_L^0)$:

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi\left(\delta_L^0\right)}{\Xi\left(\mathcal{F}\delta_L^0\right)} \ , \tag{2.220}$$

où le facteur de plissement est défini comme le rapport avec la vitesse de flamme turbulente S_T et la vitesse de flamme laminaire S_L^0 :

$$\Xi\left(\delta_L^0\right) = \frac{S_T}{S_L^0} = \frac{A_L}{A_T} \ , \tag{2.221}$$

où A_T est la surface de flamme turbulente et A_L la surface de flamme laminaire.

Autrement dit, la fonction d'efficacité compare le facteur de plissement de la flamme non épaissie à celui de la flamme épaissie. Comme la flamme épaissie a une surface plus faible que celle non épaissie, le dégagement de chaleur total produit par la flamme diminue. Pour compenser cet effet, l'idée est d'augmenter la vitesse de flamme turbulente afin de garder le même dégagement de chaleur total.

Une fois le terme $\mathcal{E}$ estimé, il suffit alors de multiplier les flux de diffusion et le terme source chimique par $\mathcal{E}$:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dot{\omega} & \longmapsto & \dfrac{\mathcal{E}\dot{\omega}}{\mathcal{F}} \\ D_{th} & \longmapsto & \mathcal{E}\mathcal{F}D_{th} \end{array} \right. , \tag{2.222}$$

Après application de cette transformation dans l'Éq. (2.160), on obtient ainsi :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{Y}_k\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\mathcal{E}\mathcal{F}\widetilde{Y_k V_{k,i}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)\right] + \bar{\rho}\frac{\mathcal{E}\widetilde{\dot{\omega}}_k}{\mathcal{F}} \ . \tag{2.223}$$

En pratique, la fonction d'efficacité peut être calculée [57] :

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi\left(\dfrac{\Delta_e}{\delta_L^0}\right)}{\Xi\left(\dfrac{\Delta_e}{\mathcal{F}\delta_L^0}\right)} = \frac{1 + \alpha\Gamma_1\left(\dfrac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \dfrac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right)\dfrac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha\Gamma_1\left(\dfrac{\Delta_e}{\mathcal{F}\delta_L^0}, \dfrac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right)\dfrac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \ , \tag{2.224}$$

où $\Xi(\Delta_e/\delta_L^0)$ est le facteur de plissement de la flamme et $\Xi(\Delta_e/(\mathcal{F}\delta_L^0))$ le plissement de la flamme épaissie. Les fonctions α et Γ_1 sont calculées comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \beta\dfrac{2\ln(2)}{3c_{ms}\left[Re_{t,\Delta_e}^{1/2} - 1\right]} \\ \Gamma_1\left(\dfrac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \dfrac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) = 0.75\exp\left[-\dfrac{1.2}{\left(u'_{\Delta_e}/S_L^0\right)^{0.3}}\right]\left(\dfrac{\Delta_e}{\delta_L^0}\right)^{2/3} \end{array} \right. , \tag{2.225}$$

où $\beta = 1.0$ et $c_{ms} = 0.28$ sont des constantes, u'_{Δ_e} est la vitesse de fluctuation à l'échelle Δ_e et Re_{t,Δ_e} le nombre de Reynolds turbulent à l'échelle associée. Colin *et al.* [57] précisent dans leur article que Δ_e n'est pas l'échelle du filtre LES, i.e. $\Delta_e \neq \Delta$. L'échelle Δ_e correspond à la taille du filtre nécessaire afin d'extraire l'information de l'échelle de sous maille relative au calcul de

la fonction $\mathcal{E}$. Ils recommandent par exemple de prendre $\Delta_e \simeq 10\Delta$ (ce qui doit être de l'ordre de grandeur de la flamme épaissie $\mathcal{F}\delta_L^0$).

Une façon d'évaluer le terme u'_{Δ_e} est la suivante [57] :

$$u'_{\Delta_e} = \frac{\nu_t}{C_s\Delta_e} = C_s\Delta_e\sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} \ . \tag{2.226}$$

Une version améliorée proposée par Charlette *et al.* [45, 46] permet également de calculer la fonction d'éfficacité $\mathcal{E}$ directement à partir du facteur de plissement $\Xi(\Delta/\delta_L^0)$ à l'échelle de la taille de filtre Δ :

$$\mathcal{E} = \Xi\left(\Delta/\delta_L^0\right) = \left(1 + \min\left[\frac{\Delta}{\delta_L^0} - 1, \Gamma_2 \frac{u'_\Delta}{S_L^0}\right]\right)^\beta \ , \tag{2.227}$$

où $\Gamma_{2,\Delta}$ est un paramètre similaire à Γ_1 mais calculé de manière différente :

$$\Gamma_{2,\Delta} = \Gamma_{2,\Delta}\left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}, \frac{u'_\Delta}{S_L^0}, Re_{t,\Delta}\right) = \left[\left(\left(f_u^{-a} + f_\Delta^{-a}\right)^{-1/a}\right)^{-b} + f_{Re_{t,\Delta}}^{-b}\right]^{-1/b} \ , \tag{2.228}$$

et les paramètres f_u, f_Δ, f_{Re} sont tels que :

$$f_u = 4\left(\frac{27C_k}{110}\right)^{1/2}\left(\frac{18C_k}{55}\right)\left(\frac{u'_\Delta}{S_L^0}\right)^2 \ ; \tag{2.229}$$

$$f_\Delta = \left[\frac{27C_k\pi^{4/3}}{110} \times \left(\left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}\right)^{4/3} - 1\right)\right]^{1/2} \ ; \tag{2.230}$$

$$f_{Re_{t,\Delta}} = \left[\frac{9}{55}\exp\left(-\frac{3}{2}C_k\pi^{4/3}Re_{t,\Delta}^{-1}\right)\right]^{1/2} \times Re_{t,\Delta}^{1/2} \ . \tag{2.231}$$

Les paramètres a et b sont quant à eux calculés comme suit :

$$a = 0.60 + 0.20\exp\left(-0.1\frac{u'_\Delta}{S_L^0}\right) - 0.20\exp\left(-0.01\frac{\Delta}{\delta_L^0}\right) \quad \text{et} \quad b = 1.4 \ . \tag{2.232}$$

$C_k \simeq 1.5$ est la constante de Kolmogorov et comme $Re_{\delta_L^0} = \delta_L^0 S_L^0/\nu \simeq 4$ [45, 57, 391], on peut estimer le nombre de Reynolds turbulent $Re_{t,\Delta}$ à l'échelle du filtre Δ :

$$Re_{t,\Delta} = 4\frac{\Delta}{\delta_L^0}\frac{u'}{S_L^0} \ . \tag{2.233}$$

L'avantage de cette méthode est qu'elle repose sur le calcul de la vitesse de fluctuation u'_Δ à l'échelle Δ (taille du filtre LES) au lieu de l'échelle Δ_e. Un autre avantage de cette méthode est la non dépendance du modèle à une estimation *a priori* du nombre de Reynolds turbulent Re_t. Cette fois-ci $\beta = 0.5$. Mais on peut trouver également $\beta = [0.2{-}0.35]$ dans la littérature [335,392], $\beta = 0.51$ [391] ou encore d'autres méthodes pour calculer localement β [335, 392, 404] avec une méthode à la manière de Germano [93] en utilisant un filtre test explicite. De la même façon, plusieurs approches pour exprimer la vitesse u'_Δ existent dans la littérature [226]. Mercier *et al.* [226] étudient notamment l'impact du choix des méthodes de calcul des termes u'_Δ et β sur les résultats. Il est montré dans cet article que l'emploi d'une constante β unique ne permet pas de prédire l'ensemble des plissements de flammes possible et qu'une approche dynamique est préférable. Les auteurs montrent également que l'approche de Charlette [45, 46] permet

de bien modéliser la transition entre le régime de flamme turbulente et le régime de flamme laminaire mais est très sensible à la vitesse de fluctuation u'_Δ. Un autre avantage du modèle de Charlette [57] par rapport à celui de Colin est de ne pas dépendre du paramètre α, qui n'est pas adapté pour une procédure dynamique (voir section suivante) puisqu'il peut localement prendre des valeurs négatives qui n'ont pas de sens physique [391].

Toutefois, Veynante et Moureau [391] ont montré par la comparaison de simulations LES et quasi-DNS sur un bruleur aéronautique type PRECCINSTA [223], que le modèle de Charlette [45, 46] était parfaitement adapté pour reproduire fidèlement les données expérimentales sans rencontrer de difficultés numériques particulières. L'implémentation est relativement simple comparé aux autres modèles et donne des résultats très satisfaisants pour un coût CPU réduit (pas besoin de calculer le paramètre β de manière dynamique par exemple). Les auteurs de l'article [391] montrent également que la supposée difficulté du modèle de Charlette liée à la dépendance du facteur de plissement par rapport à la vitesse de fluctuation de sous maille u'_Δ disparait en pratique grâce à la saturation du modèle.

Ainsi, l'implémentation du modèle de Charlette [45, 46] pour estimer la fonction d'efficacité semble tout indiquée. Toutefois ce modèle repose sur le calcul du facteur de plissement des flammes épaissies et non épaissies. Or le facteur de plissement dépend directement de la vitesse de flamme laminaire non étirée S_L^0. En général cela ne pose pas de problème particulier dans le cas d'une configuration en flamme prémélangée pure, puisque d'une part S_L^0 peut facilement être estimée à partir d'une simulation 1D avec un code comme Chemkin ou Cantera, et d'autre part les conditions initiales (température, pression et richesse) qui permettent d'estimer S_L^0 varient peu.

Toutefois, dans le cas d'une flamme partiellement prémélangée ou d'une flamme majoritairement de diffusion qui voit localement des poches de prémélange se former avant de brûler, le choix d'une valeur de S_L^0 *a priori* peut être plus délicat. En effet, comme il est difficile voire impossible de prédire à l'avance quelles vont êtres les conditions thermodynamiques et de mélange localement rencontrées par la flamme de prémélange en amont dans les gaz frais, la prescription de S_L^0 *a priori* peut s'avérer erronée. La variation de S_L^0 en fonction de la température initiale dans les gaz frais est d'autant plus marquée à haute pression. Par exemple, la vitesse de flamme laminaire chute d'un facteur 10 environ dans le cas d'une flamme laminaire de prémélange d'un prémélange CH_4/O_2 à la stœchiométrie, pour une pression $P = 10.0$ MPa, lorsque la température initiale passe de $T_i = 300$ K à $T_i = 100$ K (voir section 5.5.3.1).

De plus, à la connaissance de l'auteur, aucune étude de sensibilité sur le paramètre S_L^0 avec le modèle de Charlette n'a vraiment été effectuée. Ainsi la pertinence de l'intérêt de la prise en compte de la fonction d'efficacité $\mathcal{E}$ avec le modèle de Charlette en l'état, dans ce cas précis d'application, reste à discuter vu les biais sur le choix de S_L^0 ou encore l'estimation de la vitesse de fluctuation à l'échelle de sous maille u'_Δ, d'autant plus lorsque le facteur d'épaississement $\mathcal{F}$ reste faible. Un mauvais paramétrage pourrait par exemple conduire à une augmentation trop importante de la vitesse de flamme turbulente.

Modèle dynamique

Le modèle d'épaississement de flamme en tant que tel fonctionne bien pour des flammes parfaitement prémélangées. Toutefois dans un mélange turbulent, il se peut que des inhomogénéités soient présentes dans mélange. Il est également non désirable de multiplier les flux de diffusion

par un facteur $\mathcal{F}$ constant dans tout le domaine. L'idée d'un modèle TFLES dynamique a donc été proposé par Légier *et al.* [182] afin de n'appliquer le facteur d'épaississement que dans la zone de réaction de la flamme. Il suffit pour cela de définir un capteur de flamme $\mathcal{S}$ et de calculer le facteur d'épaississement $\mathcal{F}$ comme suit :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{\max} - 1)\mathcal{S} \ , \tag{2.234}$$

où $\mathcal{F}_{\max}$ est la valeur maximale du facteur d'épaississement désirée. Il en va de même pour la fonction d'efficacité $\mathcal{E}$:

$$\mathcal{E} = 1 + (\mathcal{E}_{\max} - 1)\mathcal{S} \ . \tag{2.235}$$

Le capteur de flamme peut également servir à couper le flux de diffusion turbulent à l'échelle de sous maille lorsque le modèle TFLES est activé dans la zone de la flamme [37] :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{Y_k}\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}\right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\mathcal{E}\mathcal{F}\widetilde{Y_k V_{k,i}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[(1-\mathcal{S})\,\bar{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}\right)\right] + \bar{\rho}\frac{\mathcal{E}\widetilde{\dot{\omega}}_k}{\mathcal{F}} \ . \tag{2.236}$$

Évaluation du capteur de flamme

Différentes approches sont disponibles dans la littérature afin d'évaluer le capteur de flamme $\mathcal{S}$ [166, 182]. Toutefois ces méthodes sont généralement pensées pour une approche en chimie tabulée (avec transport de la variable de progrès Y_c ou sa version réduite c). La définition d'un capteur de flamme pertinent en chimie détaillée s'avère être une tâche difficile. En effet, comme chaque espèce réagit différemment dans l'espace et dans le temps, il est difficile de disposer d'un capteur de flamme, ni trop raide, qui ne recouvrirait pas l'intégralité de la flamme, ni trop étendu, afin de ne pas épaissir virtuellement une zone dans laquelle il n'y a pas de combustion. On cherche donc à définir un capteur de flamme tel que :

$$\begin{cases} \mathcal{S} = 0 & \text{dans la zone de réaction raide} \\ \\ \mathcal{S} = 1 & \text{en dehors de la zone de réaction raide} \end{cases} . \tag{2.237}$$

En chimie détaillée, différentes méthodes ont été proposées dans la littérature [23, 37, 83, 143]. L'approche retenue est celle de Franzelli [83], également reprise par Bénard [37] et légèrement modifiée.

L'approche de Franzelli consiste tout d'abord à définir le taux de production d'une variable de progrès $\dot{\omega}_c = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$ puis à calculer le capteur de flamme $\mathcal{S}$ comme suit :

$$\mathcal{S} = \min\left(\frac{|\dot{\omega}_c|}{|\dot{\omega}_c^0|}, 1\right) \ , \tag{2.238}$$

où $\dot{\omega}_c^0$ est le taux de production de la variable de progrès maximal obtenu dans une flamme laminaire de prémélange 1D pour des conditions opératoires équivalentes. Ensuite, le capteur de flamme subit un seuillage : si $\mathcal{S} > 0.1$ alors $\mathcal{S} = 1$, avant d'être filtré cinq fois.

Dans notre cas, $\dot{\omega}_c = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO} + \dot{\omega}_{H_2O} + \dot{\omega}_{H2}$ et $\dot{\omega}_c^0$ correspond à un pourcentage de la valeur maximale de $\dot{\omega}_c$ possible dans le calcul (par exemple 10 %), comme dans l'approche de Bénard [37]. La valeur de $\dot{\omega}_c^0$ peut être ajustée en cours de calcul en regardant le max de $\dot{\omega}_c$ dans l'ensemble du domaine de simulation ou bien estimée et fixée à l'avance (l'avantage dans ce cas

est d'être moins coûteux en temps de calcul). Une variante possible est de calculer le capteur de flamme non pas à partir du taux de production de la variable de progrès, mais à partir du taux de dégagement de chaleur :

$$\mathcal{S} = \min\left(\frac{|\dot{\omega}_{\mathrm{HRR}}|}{|\dot{\omega}^0_{\mathrm{HRR}}|}, 1\right) , \tag{2.239}$$

où $\dot{\omega}^0_{\mathrm{HRR}}$ est également un pourcentage de la valeur maximale du taux de dégagement de chaleur. Une opération de filtrage inspirée de celle de Bénard [37] (voir Fig. 2.9) est alors mise en place :

1. Calcul de $\mathcal{S}$ suivant l'Éq. (2.238) ou l'Éq. (2.239) ;
2. Filtrage de $\mathcal{S}$;
3. Prise du maximum entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{S}$ filtré.

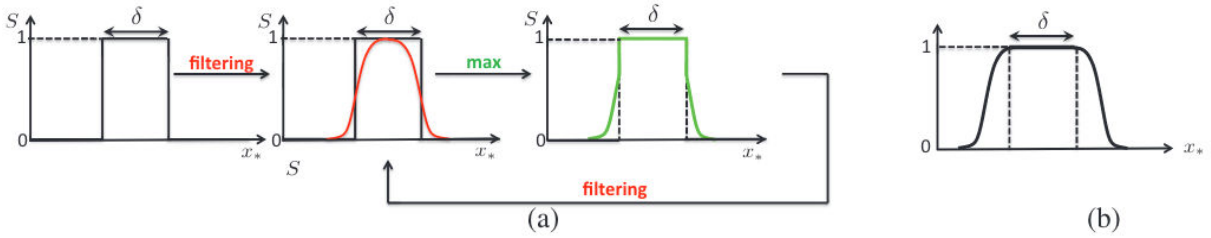


FIGURE 2.9 – Procédure de filtrage du capteur de flamme. (a) Filtrage puis prise du maximum entre le profil initial et le profil filtré. (b) Capteur de flamme final obtenu. Image tirée de la thèse de Bénard [37].

L'opération est ensuite répétée n fois. En pratique on pourra prendre $n = 3$ ou $n = 5$. Lors du premier tour de la boucle, on peut également rajouter l'opération suivante : si $\mathcal{S} > 0.1$ alors $\mathcal{S} = 1$ après l'étape numéro 1 afin d'étaler la zone d'épaississement maximal de la flamme, à la manière de Franzelli [83].

Extension aux flammes de diffusion

Le modèle TFLES a été initialement pensé pour des flammes de prémélange mais son extension aux flammes de diffusion est encore un sujet d'actualité. En effet, contrairement aux flammes de prémélange qui sont caractérisées par des propriétés intrinsèques comme une épaisseur de flamme ou une vitesse de propagation, les flammes de diffusion sont plus difficiles à contrôler. Dans un récent article, Cuenot *et al.* [63] ont étudié l'effet de différents paramètres sur des flammes de diffusion CH_4/O_2 à haute pression ($P = 5.4$ MPa) en vue de proposer un modèle permettant d'épaissir une flamme de diffusion. Au final, ils ont montré que pour un nombre de Damköhler élevé et pour un taux d'étirement donné, la seul paramètre contrôlant une flamme de diffusion était le coefficient de diffusion. Or comme le flux de diffusion s'adapte facilement au maillage, la flamme de diffusion s'adapte également au maillage et ne nécessite pas d'épaississement virtuel afin de rester stable. Ils ont montré également que la vitesse de consommation des gaz frais de la flamme de diffusion était conservée à mesure que le maillage était dégradé, à moins de disposer d'une résolution vraiment très faible.

Toutefois, dans le cadre de cette thèse, les flammes de diffusion rencontrées sont résolues avec au moins 5 points dans l'épaisseur de la flamme. Étant donné la résolution employée et les conclusions apportées par l'article de Cuenot [63], il n'est donc pas nécessaire de chercher à

épaissir la flamme de diffusion dans ces cas-là. Toutefois, si localement une flamme de prémélange est rencontrée, alors le modèle TFLES dans sa version classique décrit plus haut peut être employé. Pour cela, il suffit de conditionner l'emploi du modèle TFLES à l'indice de Takeno (voir Éq. (2.143)) qui permet d'identifier le régime de combustion, afin de n'épaissir que les flammes supposées être de prémélange.

2.3.7.3 Autres approches

Il existe d'autres approches permettant de modéliser le terme source chimique. Les plus notables sont certainement celles de Spalding avec son modèle *Eddy-Breakup* (EB) [361] ou encore le modèle *Eddy-Dissipation* (ED) de Magnussen [205]. Dans ces modèles, le taux de production chimique est gouverné par une échelle de temps caractéristique de la turbulence comme le temps de retournement des structures tourbillonnaires $\tau = k/\varepsilon$ (où k représente l'énergie cinétique de turbulence et ε le taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence [148]) par exemple.

Toutefois les modèles ED et EB supposent que l'écoulement est entièrement déterminé par la turbulence et ignorent les effets des différentes échelles de temps chimique. En particulier, dans le cas du modèle ED, la combustion a lieu là où la turbulence est présente ($k/\varepsilon > 0$), ce qui est en général acceptable pour les flammes non-prémélangées, mais pour les flammes prémélangées, les réactifs brûleront dès lors qu'ils entreront dans le domaine de calcul, avant que la flamme ne se stabilise.

De plus ces modèles reposent sur l'utilisation d'une cinétique chimique à une seule étape seulement. Le modèle ED a par la suite été étendu au modèle *Eddy Dissipation Concept* (EDC) [204] pour prendre en compte une chimie détaillée à plus qu'une seule étape. Ce modèle suppose que les réactions se produisent au sein des petites structures, de la taille de l'échelle de Kolmogorov. Les termes sources sont alors modélisés à partir de grandeurs calculées dans le mélange moyen à l'échelle intégrale et dans les petites structures à l'échelle de Kolmogorov. Ainsi l'approche EDC consiste à diviser l'écoulement en deux zones d'échelles caractéristiques différences : les petites structures (zone de la flamme) et les grosses structure (zone caractérisant les grandes structures tourbillonnaires et entourant la flamme). La zone réactive est alors censée se comporter comme un réacteur parfaitement mélangé, *Perfectly Stirred Reactor* (PSR) alors que pratiquement aucune réaction chimique ne se produit dans la zone environnante.

Une alternative au modèle EDC est le modèle *Partially Stirred Reactor* (PaSR) initialement introduite par Correa [60] puis modifiée par Sabel'nikov et Figueira da Silva [326]. Cette approche repose sur le même principe que le modèle EDC mais avec un temps de mélange différent.

2.4 Le solveur SiTComB

2.4.1 Présentation du code

SiTCom-B (Simulation of Turbulent Combustion with Billion of points) est un code CFD compressible massivement parallèle qui permet de faire des simulations de type DNS [16–18, 74, 75, 113, 414] ou LES [25, 112, 283, 321, 322]. Les équations de Navier-Stokes sont résolues dans leur forme entièrement compressible sur des maillages structurés avec une approche volume finie. Les flux convectifs sont évalués avec le schéma de Ducros [76], les flux visqueux et de diffusion avec un schéma centré à l'ordre quatre. Une viscosité artificielle [365, 366, 370] avec des termes

d'ordre deux et quatre est rajoutée afin limiter les oscillations numériques [283]. Le temps est avancé avec une méthode de Runge-Kutta à l'ordre quatre. Les conditions aux limites sont gérées avec la méthode *Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions* (NSCBC) de Poinsot et Lele [293] étendue aux écoulements 3D par Lodato *et al.* [192] et au formalisme gaz réel par Petit [283]. L'ajout d'un solide dans le domaine fluide se fait par la méthode des frontières immergées (IBM) [24, 227, 274, 320]. Enfin, l'implémentation de la thermodynamique gaz réel afin de résoudre des écoulements réactifs superctitiques est faite selon les recommandations de Meng [225] et Bellan [10]. Pour l'ensemble de cette thèse, l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) [358] a été utilisée avec l'évaluation des propriétés de transport selon les méthodes de Chung [53] et Takahashi [367].

2.4.2 Estimation du pas de temps

Trois pas de temps (convectif, diffusif et chimique) sont calculés lors d'une simulation numérique avec SiTCom-B. Le pas de temps est alors le minimum des trois. Le pas de temps convectif est basé sur le critère de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [61, 62] :

$$\Delta t^C = CFL \times \min_i \left(\frac{\Delta x_i}{|u_i| + c} \right) \ . \tag{2.240}$$

De son côté, le pas de temps diffusif est basé sur le critère de Fourier provenant de l'analyse de stabilité de Von Neumann [47] :

$$\Delta t^D_\Phi = Fo \times \min_i \left(\frac{\Delta x_i^2}{D_\Phi} \right) \ , \tag{2.241}$$

où Φ est un scalaire transporté quelconque et D_Φ le coefficient de diffusion associé.

Le pas de temps chimique est quant à lui calculé comme suit :

$$\Delta t^{chem} = \min_k \left(\frac{a_{tol} + r_{tol} \rho Y_k}{|\dot{\omega}_k|} \right) \ , \tag{2.242}$$

où a_{tol} et r_{tol} sont des paramètres pris (sauf mention du contraire) tels que $a_{tol} = 1 \times 10^{-4}$ et $r_{tol} = 1 \times 10^{-1}$ dans les simulations numériques réalisées au cours de cette thèse.

Enfin, le pas de temps est le minimum entre le pas de temps convectif, le pas de temps diffusif et le pas de temps chimique :

$$\Delta t = \min \left(\Delta t^C, \Delta t^D, \Delta t^{chem} \right) \ . \tag{2.243}$$

Chapitre 3

Simulation de la combustion CH_4/O_2 haute pression avec un nouveau mécanisme chimique réduit

Sommaire

3.1 Introduction 117
3.1.1 Contexte 117
3.1.2 État de l'art des mécanismes chimiques CH_4/O_2 118
3.1.3 Objectifs 119
3.2 Mécanisme chimique réduit pour la combustion haute pression du couple CH_4/O_2 119
3.2.1 Réduction de la chimie avec ORCh 119
3.2.2 Cas-tests de validation 121
3.3 Interaction flamme-turbulence à haute pression 125
3.3.1 Configuration et paramétrage numérique 125
3.3.2 Évolution temporelle 128
3.3.3 Effet de la chimie et de la thermodynamique 130
3.3.4 Un nouvel outil pour détecter et mesurer automatiquement les fronts de flamme 136
3.3.5 Temps de calcul (CPU) 138
3.4 Conclusion 140

3.1 Introduction

3.1.1 Contexte

Comme vu précédemment dans la section 1.1, l'utilisation du méthane à la place de l'hydrogène permettrait de réduire les coûts de fabrication et d'entretien du moteur équipant la

prochaine génération de fusées Européenne Ariane Next [268]. C'est pourquoi il est nécessaire d'étudier toute la phase d'allumage, de l'injection partiellement prémélangée basse pression [112] jusqu'à l'établissement d'une flamme haute pression supercritique, *a priori* de diffusion [6,160,308,333,427]. Étant donné le faible nombre d'études expérimentales sur la combustion supercritique LOx/LCH_4, la simulation numérique est un outil indispensable dans le processus de design du future lanceur Européen [176]. Toutefois, il est nécessaire de disposer au préalable d'un mécanisme chimique adapté à l'étude de la combustion haute pression du couple CH_4/O_2, validé pour différentes conditions thermodynamiques et hydrodynamiques comme celles rencontrées dans une chambre de combustion d'un moteur-fusée.

3.1.2 État de l'art des mécanismes chimiques CH_4/O_2

Différents mécanismes chimiques pour l'étude de la combustion CH_4/O_2 sont disponibles dans la littérature [4, 84, 86, 157, 186, 278, 279, 303, 319, 351, 354, 355, 418–421] mais peu ont été pensés pour des conditions moteur-fusée, i.e. à haute pression, sans dilution (oxygène pur) et pour des températures d'injection cryogéniques. Par exemple, le mécanisme GRI3.0 [354] n'est valable que pour une température $T \in [1000, 2500]$ K, une pression $P \in [0.001, 10]$ bar et une richesse $\Phi \in [0.1, 5]$. De plus, on sait de [278,419,420] que les réactions chimiques impliquant les espèces CH_3O_2, CH_3O, HO_2 et H_2O_2 jouent un rôle majeur dans la décomposition du méthane à haute pression et doivent donc être préservées, comme c'est le cas dans le mécanisme chimique RAMEC [278] ou dans celui développé par Zhukov et Kong [419]. Il a par ailleurs été montré par ces auteurs que les espèces oxydantes C_4 et C_3 ainsi que les espèces C_2 n'étaient pas pertinentes dans la prédiction de la combustion CH_4/O_2 en conditions moteur-fusée, à l'exception près des espèces C_2H_6 et C_2H_3. De plus, des espèces comme C, CH_3O_2H, CH_3OH et CH_2OH semblent ne pas avoir d'impact sur la prédiction du temps d'auto-allumage ou encore le profil de température dans des flammes à contre-courant 1D. Les mêmes auteurs [419] ont également développé un mécanisme chimique réduit contenant 23 espèces et 51 réactions qui prédit bien le profil de température d'une flamme CH_4/O_2 à contre-courant pour une pression $P = 60$ bar, ainsi que le temps d'auto-allumage par comparaison avec le mécanisme détaillé. En revanche, le mécanisme réduit REDRAM [279] du RAMEC [278] n'arrive pas à reproduire le comportement d'une flamme laminaire de diffusion à contre-courant haute pression [419].

L'intégration directe de ces mécanismes chimiques détaillés ou squelettiques est un problème récurrent [74, 297] rencontré lors de l'étude de configurations réelles, en particulier dans le cas d'écoulements réactifs supercritiques [171, 282, 309, 310]. Le coût de calcul devient prohibitif à cause du nombre d'espèces chimiques impliquées et une étape de réduction doit donc être réalisée. Par exemple, dans l'article [176], en partant du mécanisme chimique GRI3.0 [354], un schéma réduit contenant 9 espèces (+ 7 QSS [1]) et 87 réactions a été obtenu pour la combustion CH_4/O_2 en utilisant l'algorithme proposé dans [272]. Il est d'ailleurs mentionné dans cet article que le mécanisme réduit obtenu a été validé sur des cas de flammes de diffusion à contre-courant 1D pour différentes pressions, taux d'étirement (κ) et richesse globale (Φ). La seule comparaison disponible ($P = 75$ bar, $\kappa = 1000$ s^{-1} et $\Phi = 4$) donne un bon accord avec le mécanisme détaillé. La réduction de la chimie permet également d'offrir une forte réduction du pas de temps chimique, qui peut être un point bloquant pour les solveurs entièrement explicites comme SiTCom-B, ainsi qu'une éventuelle diminution de la taille de maille minimale requise, critères

1. QSS (*Quasi-Steady-State*) : état quasi-stationnaire.

particulièrement difficiles à satisfaire lors de l'étude de flammes haute pression.

Enfin, on notera l'étude expérimentale très récente (2022) de Mouze-Mornettas *et al.* [238] qui porte sur la mesure des vitesses de flammes laminaires (S_L) dans le cadre de flammes CH_4/O_2 sphériques isochores en expansion, pour différentes valeurs de richesse ($\Phi \in [1, 2.5]$), de pression ($P \in [0.3, 18]$ bar) et de température dans les gaz frais ($T \in [298, 603]$ K). La comparaison avec les simulations numériques de flammes de prémélange 1D a donné de meilleurs résultats dans l'ensemble avec le mécanisme chimique POLIMI C1-C3 [4], les autres mécanismes testés sous-prédisant S_L. Une version réduite de celui-ci a été proposé dans [239] pour la combustion haute pression du couple CH_4/O_2. Il contient 30 espèces et 128 réactions, ce qui semble encore trop élevé à l'heure actuelle pour réaliser des simulations DNS ou LES avec une approche en chimie transportée.

3.1.3 Objectifs

L'objectif de cette étude est double. Dans un premier temps, un mécanisme chimique réduit (17 espèces et 44 réactions) pour la combustion CH_4/O_2 est développé à partir du mécanisme détaillé RAMEC (38 espèces et 190 réactions) grâce au code ORCh [141, 142]. Les autres mécanismes chimiques ont été écartés soit parce qu'ils contenaient trop d'espèces, soit parce que leur plage de validité était trop limitée ou pas adaptée à la combustion haute pression du méthane, comme pour le mécanisme chimique GRI3.0 [419]. Dans un second temps, les performances du mécanisme chimique sont examinées d'abord à travers différentes configurations canoniques (flamme laminaire de prémélange et de diffusion, auto-allumage) en vue d'établir une plage de validité puis à travers des simulations DNS 2D et 3D de flammes de prémélangées turbulentes. Le cas particulier $P = 56$ bar est étudié avec soin puisqu'il correspond à la pression de fonctionnement des expériences de Singla *et al.* [347] dans le cas de flammes LOx/CH_4.

3.2 Mécanisme chimique réduit pour la combustion haute pression du couple CH_4/O_2

3.2.1 Réduction de la chimie avec ORCh

3.2.1.1 Procédure avec ORCh

La réduction de la chimie a été réalisée avec le code ORCh (Optimized and Reduced Chemistry) [141, 142], utilisé avec succès pour la modélisation de la réduction non catalytique sélective [188], modélisation de la combustion méso-échelle [17], la prédiction d'émissions de potassium lors de la combustion de la biomasse [403], la modélisation de l'oxy-combustion d'un gaz de synthèse d'une flamme turbulente [402], l'intégration de la chimie complexe par intelligence artificielle [246], ou encore la modélisation d'un cas de combustion sans flamme [245]. Dans cette étude, une méthode stochastique est utilisée pour générer des trajectoires dans l'espace des compositions [142], adaptées pour la simulation de la combustion du couple CH_4/O_2 à haute pression, à l'aide du solveur de cinétique chimique Cantera [104]. Le problème est modélisé par un réacteur turbulent non-prémélangé à l'aide d'un modèle de micro-mélange [362], qui sert de référence pour la réduction du mécanisme chimique détaillé retenu. Dans ORCh, les entrées (combustible et oxydant) sont modélisées par un ensemble de particules stochastiques

transportant les propriétés thermochimiques (fractions massiques, température, etc.) de l'écoulement propre à ces entrées. Les variables thermochimiques $\phi_k^p(t)$ de la particule p évoluent temporellement en résolvant l'équation stochastique :

$$\frac{\partial \phi_k^p(t)}{\partial t} = \mathrm{MIX}^p\left(\tau_\mathrm{T}\right) + \dot{\omega}_{\phi_k}^p \ , \tag{3.1}$$

où $\dot{\omega}_{\phi_k}^p$ est le terme source stochastique et le terme MIX est modélisé par le modèle de micro-mélange *Euclidean Minimum Spanning Tree* (EMST) [362], caractérisé par un temps de mélange τ_T. Par ailleurs, le nombre de particules présentes dans chaque entrée étant proportionnel au débit d'injection choisi, il peut être directement paramétré par la richesse ou une concentration relative entre les différentes entrées.

Il est également possible de compresser l'ensemble des informations données par les N_p particules et leur trajectoire dans un ensemble réduit de N_i trajectoires déterministes, où N_i correspond au nombre d'entrées modélisées. Les variables ϕ_k^D des trajectoires déterministes sont calculées en résolvant les équations couplées avec une méthode de relaxation linéaire [72] pour un ensemble moyen de N_p particules stochastiques :

$$\frac{\partial \phi_k^\mathrm{D}(t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_\mathrm{T}} \left(\frac{\sum_{p=1}^{N_p} \phi_k^p(t)}{N_p} - \phi_k^\mathrm{D}(t) \right) + \dot{\omega}_{\phi_k^\mathrm{D}} \ , \tag{3.2}$$

où $\dot{\omega}_{\phi_k^\mathrm{D}}$ représente le terme source chimique de la trajectoire déterministe. Une fois les trajectoires calculées avec le mécanisme chimique détaillé, une étape de réduction de la chimie est réalisée par la méthode *Directed Relation Graph with Error Propagation* (DRGEP) [193, 272] afin de retirer l'espèce chimique (et les réactions associées) jugée la moins pertinente. Une fois cette espèce retirée du mécanisme chimique détaillé, les trajectoires déterministes (Éq. (3.2)) d'un ensemble d'espèces cibles et de la température doivent être retrouvées par la chimie réduite. Cet ensemble d'espèces cibles correspond généralement aux espèces majoritaires, mais peut également dépendre d'espèces particulières selon le problème considéré. Si la chimie réduite présente des trajectoires déterministes suffisamment proches des trajectoires de référence, alors on peut réduire à nouveau la chimie en retirant une espèce non-cible supplémentaire. Cette procédure itérative est réalisée jusqu'à trouver le schéma réduit comprenant le moins d'espèces possible tout en permettant de conserver une bonne prédiction des trajectoires déterministes des espèces cibles et de la température. Une fonction de finesse est évaluée à chaque étape de la réduction afin de quantifier l'écart entre les trajectoires déterministes de la chimie réduite et celles de la chimie détaillée, au cours de cette étape.

Par ailleurs, le travail réalisé au cours de cette thèse a été de rajouter une étape supplémentaire de tests croisés à chaque étape de la réduction avec un lot additionnel de simulations de flammes canoniques réalisées avec Cantera, comme des flammes laminaires de prémélange, des flammes de diffusion à contre-courant ou encore des calculs de temps d'auto-allumage. Cette étape supplémentaire a en effet permis de s'assurer de la capacité du mécanisme chimique réduit à reproduire le comportement physique du mécanisme détaillé sur chacun de ces cas canoniques et qu'il ne produisait pas d'artefact numérique.

3.2.1.2 Application de la procédure de réduction

Le problème de micro-mélange étudié est celui de la combustion stœchiométrique du couple CH_4/O_2 à 56 bar et 300 K. Suivant la procédure [142], trois entrées sont définies afin de balayer

l'ensemble des mélanges possibles ($Z \in [0,1]$, où Z est la fraction de mélange) : une entrée d'oxygène pur, une entrée de méthane pur et une entrée de gaz brulés à haute température issus de la combustion CH_4/O_2 à la stœchiométrie afin d'assurer l'allumage. Cette dernière entrée représente moins de 5 % du débit massique total, qui correspond à un ensemble de 575 particules. Le temps de micro-mélange est tel que $\tau_T = 0.05$ ms. Le mécanisme chimique détaillé RAMEC contenant 38 espèces (38S) et 190 réactions (190) est réduit jusqu'à obtenir un mécanisme chimique contenant 17S et 44R (voir Tab. 3.1), que l'on nommera RAMEC 17S 44R. Dans ce mécanisme chimique, une seule réaction implique l'espèce C_2H_6,

$$2CH_3\ (+M) <=> C_2H_6\ (+M),$$

car l'espèce C_2H_5 a été enlevée du mécanisme chimique détaillé durant la procédure de réduction, ainsi que les réactions élémentaires associées :

$$\begin{aligned}
O + C_2H_6 &<=> OH + C_2H_5 \\
H + C_2H_5\ (+M) &<=> C_2H_6\ (+M) \\
H + C_2H_6 &<=> C_2H_5 + H_2 \\
OH + C_2H_6 &<=> C_2H_5 + H_2O \\
CH_2(S) + C_2H_6 &<=> CH_3 + C_2H_5 \\
CH_3 + C_2H_6 &<=> C_2H_5 + CH_4\ .
\end{aligned}$$

En conséquence, cette situation pourrait amener à une sur-prédiction de la fraction massique C_2H_6 puisqu'il n'y a pas d'autre mécanisme d'oxydation possible. Ce problème spécifique est discuté dans la section suivante, où l'espèce C_2H_6 est retirée du schéma réduit RAMEC 17S 44R ou lorsque l'espèce C_2H_5 est rajouté dans le schéma RAMEC 17S 44R avec les réactions chimiques ci-dessus, exceptée celle impliquant l'espèce $CH_2(S)$, afin de ne pas pénaliser le temps de calcul.

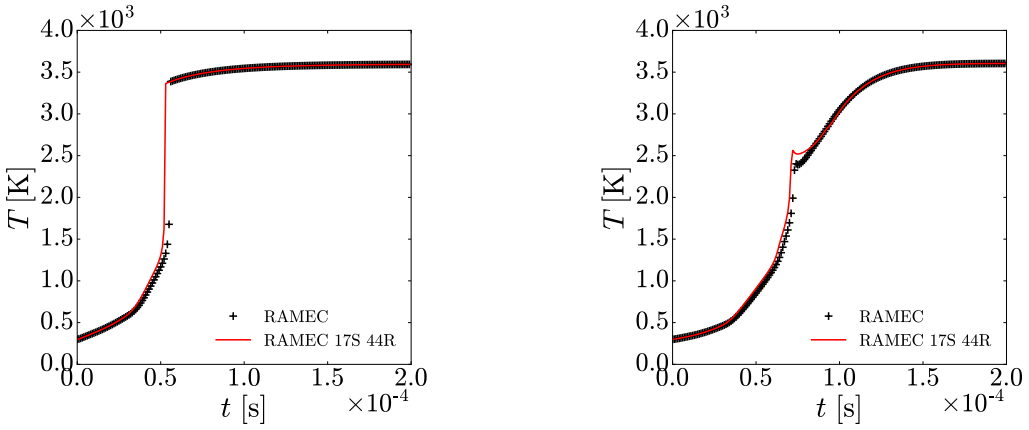
Sur la Fig. 3.1, la trajectoire de référence pour la température est bien reproduite par le mécanisme chimique réduit. Des résultats similaires sont obtenus pour les espèces majeures CH_4, O_2, CO_2, H_2O, H_2 et CO (annexe B.1). Enfin, la Fig. 3.2 montre un nuage de points de la température pour l'ensemble des particules. Ce graphe contient l'ensemble des particules affiché à chaque instant au cours de la simulation. On peut voir que les particules couvrent une large gamme de richesse et de température. Il est bon de noter que l'opération de réduction de la chimie pourrait être poursuivie, mais au détriment de la plage de validité, en particulier en terme de richesse, ce qui n'est pas l'objectif de cette étude.

3.2.2 Cas-tests de validation

Dans un premier temps, un ensemble de validations est réalisé avec le solveur Cantera [104] sur des cas canoniques tels que la prédiction du temps d'auto-allumage, la simulation de flamme laminaire prémélangée 1D libre de propagation et de flamme laminaire de diffusion à contre-courant. Ces simulations sont réalisées avec le mécanisme chimique détaillé et sa version réduite, pour la combustion haute pression du couple CH_4/O_2. Par ailleurs, il est bon de noter que la configuration de flamme de diffusion est le mode de combustion privilégié dans l'étude de la combustion des moteurs-fusées liquides [12, 299].

Number	Reactions	A	β	E_a
1	$O + H_2 \leftrightharpoons H + OH$	5.00×10^4	2.67	6290
2	$O + HO_2 \leftrightharpoons OH + O_2$	2.00×10^{13}	0	0
3	$O + CH_3 \leftrightharpoons H + CH_2O$	8.43×10^{13}	0	0
4	$O + CH_4 \leftrightharpoons OH + CH_3$	1.02×10^9	1.5	8600
5	$O + CO + M \leftrightharpoons CO_2 + M$	6.02×10^{14}	0	3000
6	$O + CH_2O \leftrightharpoons OH + HCO$	3.90×10^{13}	0	3540
7	$H + CH_3(+M) \leftrightharpoons CH_4(+M)$	1.27×10^{16}	-0.63	383
8	$O_2 + CH_2O \leftrightharpoons HO_2 + HCO$	1.00×10^{14}	0	40000
9	$H + O_2 + M \leftrightharpoons HO_2 + M$	2.80×10^{18}	-0.86	0
10	$H + 2\ O_2 \leftrightharpoons HO_2 + O_2$	3.00×10^{20}	-1.72	0
11	$H + O_2 + H_2O \leftrightharpoons HO_2 + H_2O$	9.38×10^{18}	-0.76	0
12	$H + O_2 \leftrightharpoons O + OH$	8.30×10^{13}	0	14413
13	$H + HO_2 \leftrightharpoons O + H_2O$	3.97×10^{12}	0	671
14	$H + H_2O_2 \leftrightharpoons HO_2 + H_2$	1.21×10^7	2	5200
15	$H + CH_4 \leftrightharpoons CH_3 + H_2$	6.60×10^8	1.62	10840
16	$H + CH_2O(+M) \leftrightharpoons CH_3O(+M)$	5.40×10^{11}	0.45	2600
17	$H + CH_2O \leftrightharpoons HCO + H_2$	2.30×10^{10}	1.05	3275
18	$OH + H_2 \leftrightharpoons H + H_2O$	2.16×10^8	1.51	3430
19	$2\ OH\ (+M) \leftrightharpoons H_2O_2(+M)$	7.40×10^{13}	-0.37	0
20	$OH + HO_2 \leftrightharpoons O_2 + H_2O$	2.90×10^{13}	0	-500
21	$OH + H_2O_2 \leftrightharpoons HO_2 + H_2O$	1.75×10^{12}	0	320
22	$OH + H_2O_2 \leftrightharpoons HO_2 + H_2O$	5.80×10^{14}	0	9560
23	$OH + CH_4 \leftrightharpoons CH_3 + H_2O$	1.00×10^8	1.6	3120
24	$OH + CO \leftrightharpoons H + CO_2$	4.76×10^7	1.23	70
25	$OH + CH_2O \leftrightharpoons HCO + H_2O$	3.43×10^9	1.18	-447
26	$2\ HO_2 \leftrightharpoons O_2 + H_2O_2$	1.30×10^{11}	0	-1630
27	$2\ HO_2 \leftrightharpoons O_2 + H_2O_2$	4.20×10^{14}	0	12000
28	$HO_2 + CH_3 \leftrightharpoons O_2 + CH_4$	1.00×10^{12}	0	0
29	$HO_2 + CH_3 \leftrightharpoons OH + CH_3O$	2.00×10^{13}	0	0
30	$HO_2 + CO \leftrightharpoons OH + CO_2$	1.50×10^{14}	0	23600
31	$HO_2 + CH_2O \leftrightharpoons HCO + H_2O_2$	1.00×10^{12}	0	8000
32	$CH_3 + O_2 \leftrightharpoons O + CH_3O$	2.68×10^{13}	0	28800
33	$CH_3 + O_2 \leftrightharpoons OH + CH_2O$	3.60×10^{10}	0	8940
34	$CH_3 + O_2 \leftrightharpoons CH_3O_2$	1.7×10^{60}	-15.1	18785
35	$CH_3 + OH \leftrightharpoons CH_2O + H_2$	8.00×10^{12}	0	0
36	$CH_3 + H_2O_2 \leftrightharpoons HO_2 + CH_4$	2.45×10^4	2.47	5180
37	$2\ CH_3(+M) \leftrightharpoons C_2H_6(+M)$	2.12×10^{16}	-0.97	620
38	$CH_3 + CH_2O \leftrightharpoons HCO + CH_4$	3.32×10^3	2.81	5860
39	$HCO + H_2O \leftrightharpoons H + CO + H_2O$	2.24×10^{18}	-1	17000
40	$HCO + M \leftrightharpoons H + CO + M$	1.87×10^{17}	-1	17000
41	$HCO + O_2 \leftrightharpoons HO_2 + CO$	7.60×10^{12}	0	400
42	$CH_3O + O_2 \leftrightharpoons HO_2 + CH_2O$	4.28×10^{-13}	7.6	-3530
43	$CH_3O + HO_2 \leftrightharpoons CH_2O + H_2O_2$	1.20×10^{13}	0	0
44	$CH_3O_2 + CH_3 \leftrightharpoons CH_3O + CH_3O$	3.00×10^{13}	0	-1200

TABLE 3.1 – Mécanisme chimique CH_4/O_2 réduit pour la combustion haute pression. Les unités sont en mol, s, cm^3, et K. Les espèces sont H_2, H, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_3O, C_2H_6, CH_3O_2. Les efficacités de Chaperon sont préservées du mécanisme chimique RAMEC pour les reactions *three-body* et *fall-off*.



(a) Trajectoire de l'oxydant

(b) Trajectoire du combustible

FIGURE 3.1 – Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). Évolution temporelle des trajectoires déterministes en température, issues des entrées (a) oxydant et (b) combustible.

3.2.2.1 Temps d'auto-allumage

Un réacteur CH_4/O_2 à pression constante est simulé pour $\Phi \in [0.2, 14]$ et $P \in [1, 200]$ bar. La température initiale est de 1200 K. Le temps d'auto-allumage τ_{ign} est défini comme le temps requis pour la température d'augmenter de 300 K, i.e. jusqu'à atteindre ici 1500 K. τ_{ign} est bien capturé par le mécanisme chimique réduit pour toute la gamme de richesse Φ, avec $P = 56$ bar (Fig. 3.3) ou encore $P = 1, 10, 100$ et 200 bar comme illustré dans l'annexe B.2. On notera que garder l'espèce C_2H_5 dans le mécanisme réduit (RAMEC 18S 51R) ne change pratiquement pas les résultats, alors que retirer C_2H_6 (RAMEC 16S 43R) a un impact dramatique sur l'évolution du temps d'auto-allumage.

3.2.2.2 Flammes laminaires de prémélange

Des flammes laminaires de prémélange CH_4/O_2 sont simulées à l'aide du modèle de transport multicomposant [154] et en incluant l'effet Soret, pour $\Phi \in [0.2, 14]$ et $P \in [1, 100]$ bar. La température du mélange dans les gaz frais est de 300 K. Les simulations à $P = 56$ bar montrent à la fois que la vitesse de flamme laminaire S_L (Fig. 3.4(b)) et la température des gaz brûlés T^{bg} (Fig. 3.4(a)) sont parfaitement capturées par le mécanisme réduit pour $\Phi \in [0.2, 14]$, excepté autour de $\Phi = 9$ pour T^{bg}.

La structure de la flamme à $P = 56$ bar est également bien décrite (Fig. 3.4 et B.3). La performance du mécanisme réduit est également retrouvée pour $P = 20$ et 100 bar, mais avec moins de précision que pour $P = 56$ bar (voir annexe B.3). L'addition de C_2H_5 (RAMEC 18S 51R) ou le retrait de C_2H_6 (RAMEC 16S 43R) du mécanisme RAMEC 17S 44R n'affecte pas de manière significative les profils de S_L et T^{bg} ni la structure de la flamme.

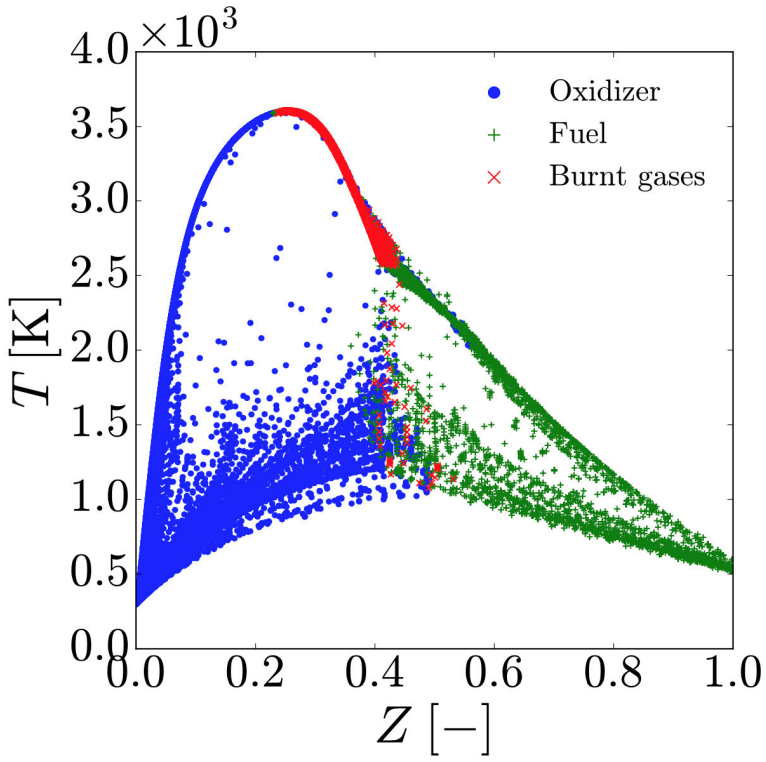


FIGURE 3.2 – Nuage de points de la température des particules à chaque instant depuis chaque entrée (oxydant, combustible et gaz brûlés) comme fonction de la fraction de mélange (Z), obtenue avec le mécanisme chimique réduit (RAMEC 17S 44R).

3.2.2.3 Flammes de diffusion à contre-courant

Des flammes de diffusion à contre-courant CH_4/O_2 sont simulées pour différents niveaux de pression (1, 20, 56 et 100 bar), et pour un taux d'étirement global κ, qui augmente jusqu'à capturer l'extinction de la flamme. La longueur du domaine simulé est $L = 0.02$ m, avec du méthane pur injecté à la position $x = 0$ m et opposé à l'oxygène pur, injecté à la position $x = 0.02$ m. La température d'injection des deux entrées est de $T = 300$ K. Les simulations sont réalisées pour une richesse globale à la stœchiométrie, avec le transport multicomposant et l'effet Soret inclus. À faible taux d'étirement et pour $P = 56$ bar, les principaux composants de la structure de la flamme, i.e. les espèces majoritaires et la température, sont très bien capturés par le schéma réduit (voir Fig. 3.6). Les espèces minoritaires, montrées dans B.4, sont également bien prédites dans l'ensemble malgré de forts écarts pour trois d'entre elles. Sur la Fig. 3.7, le maximum de température (T_{max}) des gaz brûlés est tracé en fonction de κ jusqu'à extinction de la flamme. La limite d'extinction est plutôt bien retrouvée par le mécanisme chimique réduit, avec une erreur sur T_{max} de moins de 30 K. Un comportement similaire est observé pour $P = 100$ bar ou $P = 20$ bar et des résultats raisonnables sont également obtenus pour $P = 1$ bar, où un décalage d'environ 100 K est observé pour T_{max} (voir B.4). Ici encore, ajouter l'espèce C_2H_5 (RAMEC 18S 51R) ou retirer l'espèce C_2H_6 (RAMEC 16S 43R) du schéma RAMEC 17S 44R ne semble pas affecter la structure de la flamme de diffusion de manière significative. L'ensemble de ces résultats montre que le mécanisme détaillé RAMEC [278] et le mécanisme réduit proposé dans cette étude ont les mêmes performances en terme de physique.

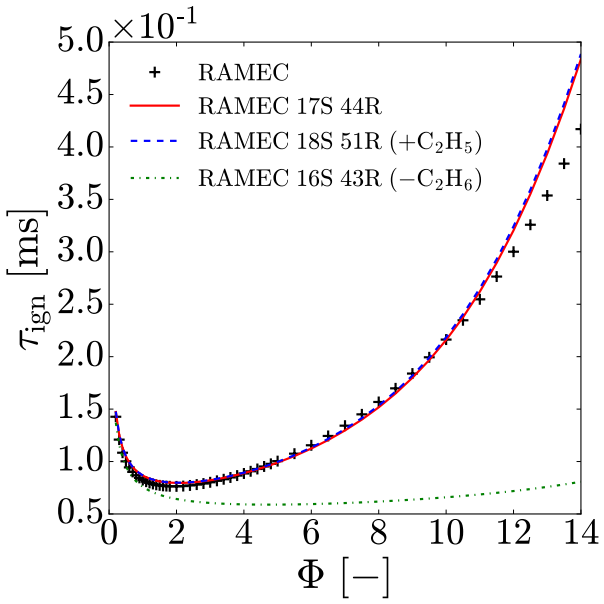


FIGURE 3.3 – Temps d'auto-allumage (τ_{ign}) en fonction de la richesse (Φ). Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). $P = 56$ bar. Température initiale du mélange : 1200 K. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

3.3 Interaction flamme-turbulence à haute pression

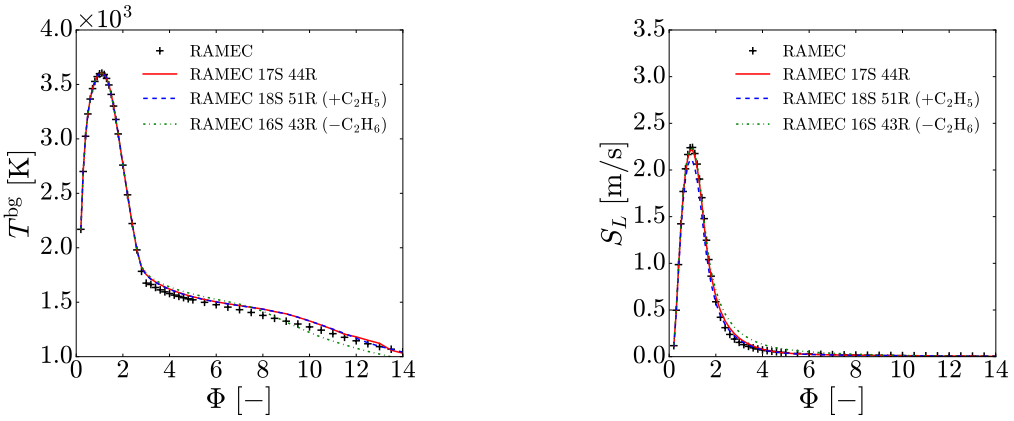
3.3.1 Configuration et paramétrage numérique

Afin d'évaluer l'efficacité du mécanisme chimique réduit à décrire la combustion du couple CH_4/O_2 à haute pression, une flamme évoluant dans un environnement turbulent est simulée. La configuration étudiée correspond à la superposition d'un mélange homogène stœchiométrique CH_4/O_2 à 300 K et d'une Turbulence Homogène Isotrope (THI) générée à l'aide d'un spectre de Passot-Pouquet [267]. Les caractéristiques de la THI sont données dans la Tab. 3.2 et imposent environ 7 échelles intégrales pour un cube de 0.1 mm de côté.

c_0 [m.s^{-1}]	ν [m^2.s^{-1}]	U_p [m.s^{-1}]	L_e[m]
356.3	2.983×10^{-7}	3.5	1.0×10^{-5}

TABLE 3.2 – Caractéristiques du spectre de Passot-Pouquet pour la génération de la THI. Les valeurs de référence sont pour la vitesse du son (c_0), la viscosité cinématique (ν), la vitesse turbulente (U_p) et la longueur caractéristique des échelles les plus énergétiques (L_e).

Un maillage uniforme et structuré, discrétisé avec 400 cellules dans chaque direction est utilisé. Avec une taille de maille de 0.25 μm de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov pour ce niveau



(a) Température des gaz brûlés

(b) Vitesse de flamme laminaire

FIGURE 3.4 – Comparaison entre les simulations d'une flamme laminaire prémélangée libre de propagation à $P = 56$ bar avec le mécanisme chimique RAMEC et sa version réduite avec 17 espèces et 44 réactions. La vitesse laminaire de flamme et la température des gaz brûlés sont affichées en fonction de la richesse Φ. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

de turbulence, l'épaisseur de flamme ($\simeq 2 \times 10^{-6}$ m) est décrite avec environ $8 - 10$ cellules.

Le mélange est allumé avec un point chaud défini par une tangente hyperbolique et localisé au centre du domaine, pour $\psi(r) = \{T, Y_k\}$:

$$\psi : \begin{cases} (\psi_{\max} - \psi_{\min}) \frac{\tanh(r - r_{\text{ign}})}{\tanh(-r_{\text{ign}})} + \psi_{\min} & \text{si } r \leq r_{\text{ign}} \\ \psi_{\min} & \text{sinon.} \end{cases}$$

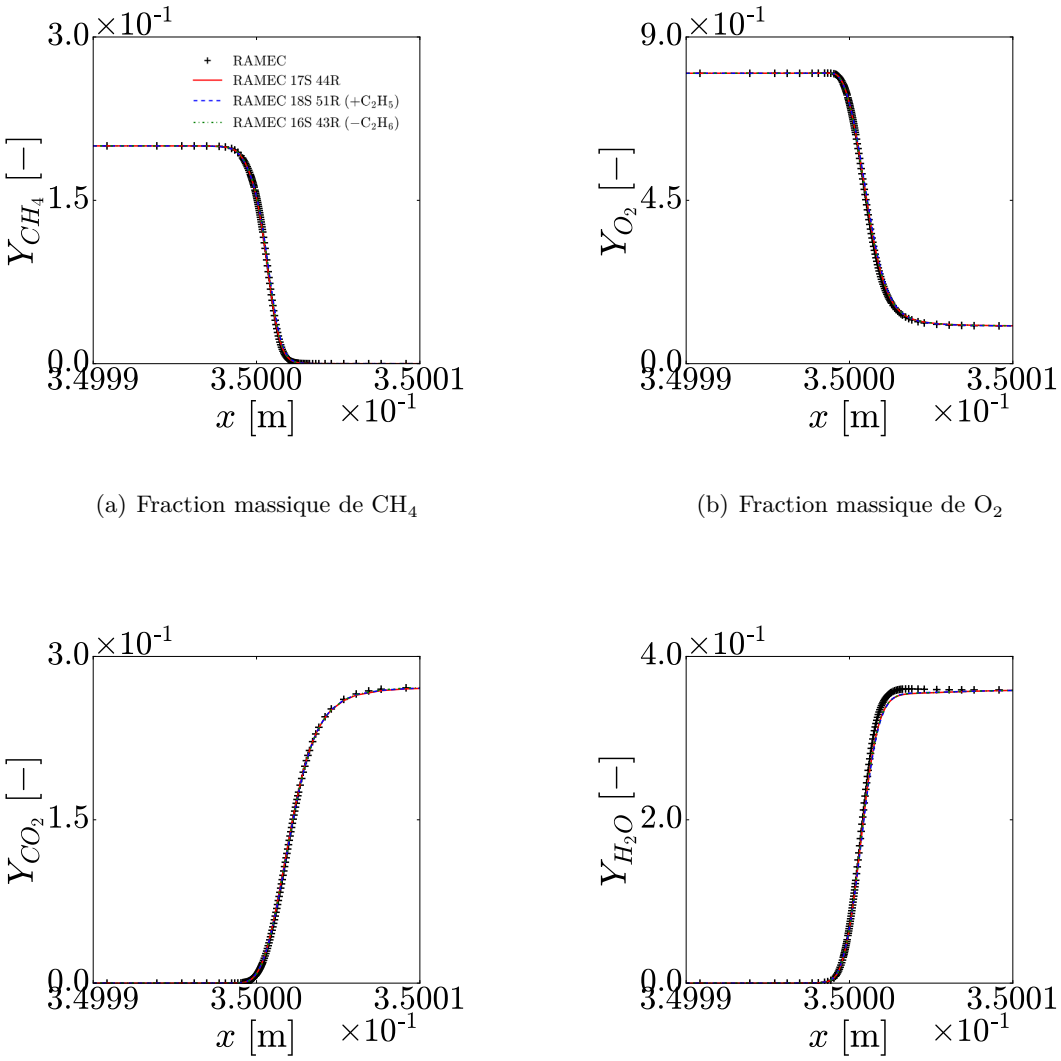
Maximum ($\psi_{\max}$) et minimum ($\psi_{\min}$) sont $T_{\max} = 2500$ K et $T_{\min} = 300$ K pour la température, et données dans la Tab. 3.3 pour les fractions massiques des espèces (Y_k).

r	Y_{H_2}	Y_H	Y_O	Y_{OH}	Y_{H_2O}	Y_{CO}	Y_{CO_2}	Y_{O_2}	Y_{CH_4}
0	0.0048	0.001	0.0161	0.0698	0.359	0.1731	0.2718	0.1039	$1 - \sum_k Y_k$
$\geq r_{\text{ign}}$	0	0	0	0	0	0	0	0.8	0.2

TABLE 3.3 – Fractions massiques des espèces utilisées lors de la procédure d'allumage.

On prendra enfin une pression constante initialisée à $P = 56$ bar comme dans [347]. Le rayon d'allumage de la sphère est $r_{\text{ign}} = 1 \times 10^{-5}$ m comme montré dans Fig. 3.8 et Fig. 3.9 pour les initialisations 2D et respectivement 3D.

Les simulations sont réalisées par approche numérique directe (DNS) avec le solveur SiTCom-B introduit dans la section 2.4. Les propriétés critiques des espèces radicalaires comme CH_3O ou CH_3O_2 sont évaluées avec application de la théorie des potentiels de Lennard-Jones introduit dans la section 2.1.4.1. Deux cas sont considérés pour évaluer la thermodynamique haute



(a) Fraction massique de CH_4

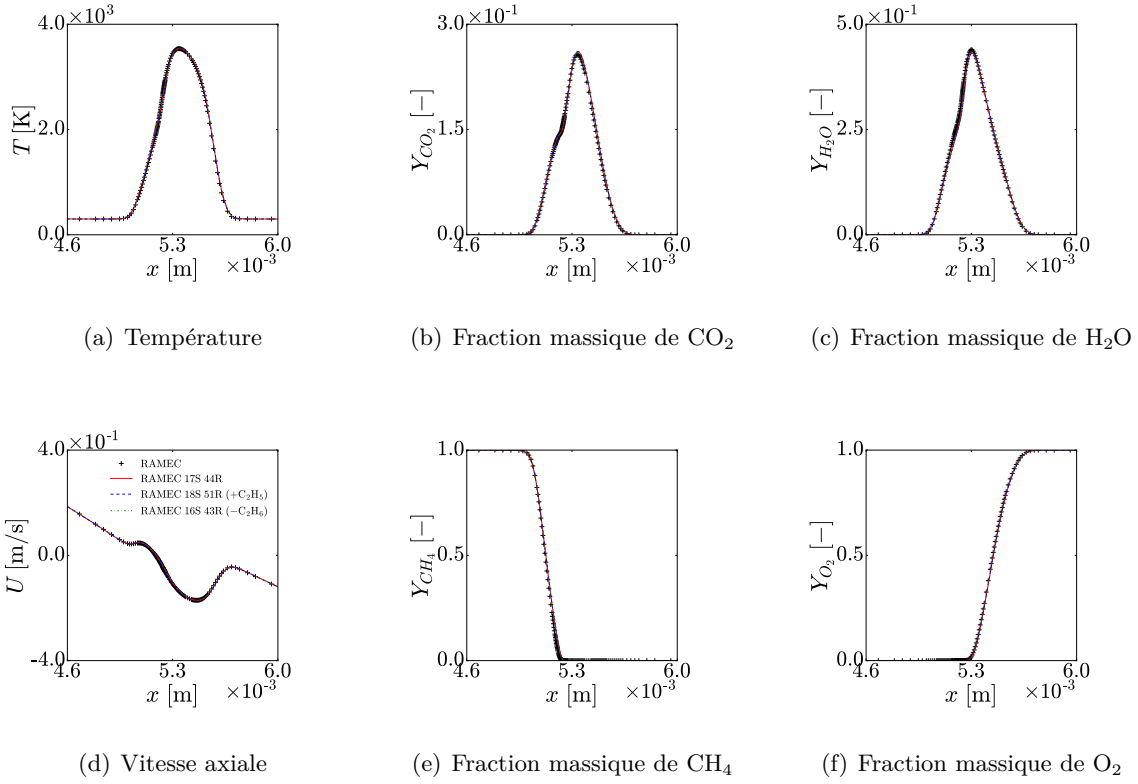
(b) Fraction massique de O_2

(c) Fraction massique de CO_2

(d) Fraction massique de H_2O

FIGURE 3.5 – Comparaison entre les simulations d'une flamme laminaire prémélangée libre de propagation à $P = 56$ bar et $\Phi = 1.0$ avec le mécanisme chimique RAMEC et sa version réduite avec 17 espèces et 44 réactions. Les profils de fractions massiques sont affichés en fonction de l'espace physique. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

pression. Dans le premier cas, une simple approche sous l'hypothèse de gaz parfait est réalisée. Dans le second cas, l'équation d'état Soave-Redlich-Kwong [358] couplée avec les modèles de Chung [53] et de Takahashi [367] pour l'évaluation des propriétés de transport est considérée. Les écarts entre ces deux approches sont quantifiés dans ce qui suit.



(a) Température (b) Fraction massique de CO_2 (c) Fraction massique de H_2O

(d) Vitesse axiale (e) Fraction massique de CH_4 (f) Fraction massique de O_2

FIGURE 3.6 – Simulation d'une flamme laminaire de diffusion à contre-courant à $P = 56$ bar, $\Phi = 1$ et pour un taux d'étirement global ($\kappa = 370$ s^{-1}) avec le mécanisme chimique détaillé RAMEC et sa version réduite comprenant 17 espèces et 44 réactions. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

3.3.2 Évolution temporelle

L'évolution temporelle du point chaud initial se développant dans une THI 2D est montrée sur la Fig. 3.10 pour le taux de dégagement de chaleur (HRR), la température, la norme du vecteur vitesse, la vorticité et la fraction massique de CH_4. Cette simulation a été réalisée avec le mécanisme chimique réduit (RAMEC-17S-44R) et la loi d'état des gaz parfaits. La flamme se propage dans le prémélange et interagit avec la turbulence qui vient déformer le noyau circulaire initial de la flamme. Le front de flamme devient plissé et déformé et la turbulence s'atténue fortement dans les gaz brûlés du fait de l'augmentation de la viscosité. Pour $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s, la composition des espèces et de la température à la position $r = 0$ sont proches des valeurs trouvées dans une flamme laminaire de prémélange 1D (Fig. 3.4(a)).

Un comportement similaire est observé dans les cas de simulations 3D (Fig. 3.11), mais avec une expansion du front de flamme qui est moins développée qu'en 2D, puisque la dynamique de la turbulence est très différente [371]. En effet, en 2D, les plus petites cascades turbulentes ne suivent pas la classique cascade d'énergie de Kolmogorov comme expliqué dans [123], car le mécanisme d'étirement des structures tourbillonnaires n'est plus possible. Un comportement inverse (cascade d'énergie inversée) est même possible comme montré par le champ de vorticité sur la Fig. 3.10. Notons que dans le cas 3D, la turbulence homogène isotrope est assurée lorsque

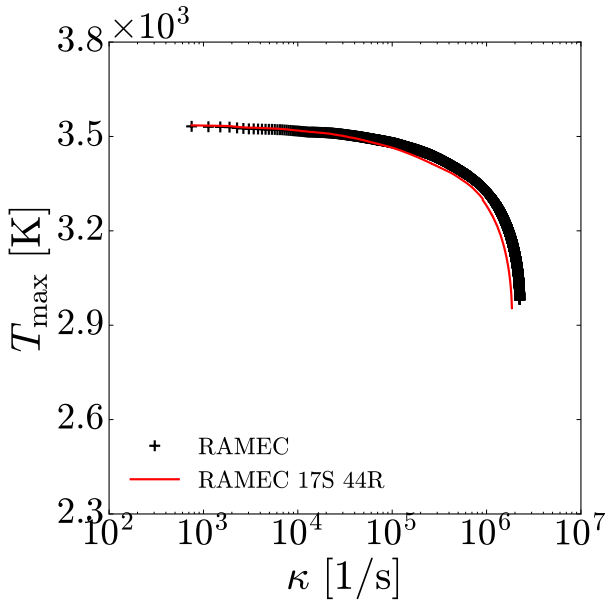


FIGURE 3.7 – Flammes de diffusion à contre-courant. Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). Maximum de la température des gaz brûlés en fonction du taux d'étirement (κ). $P = 56$ bar.

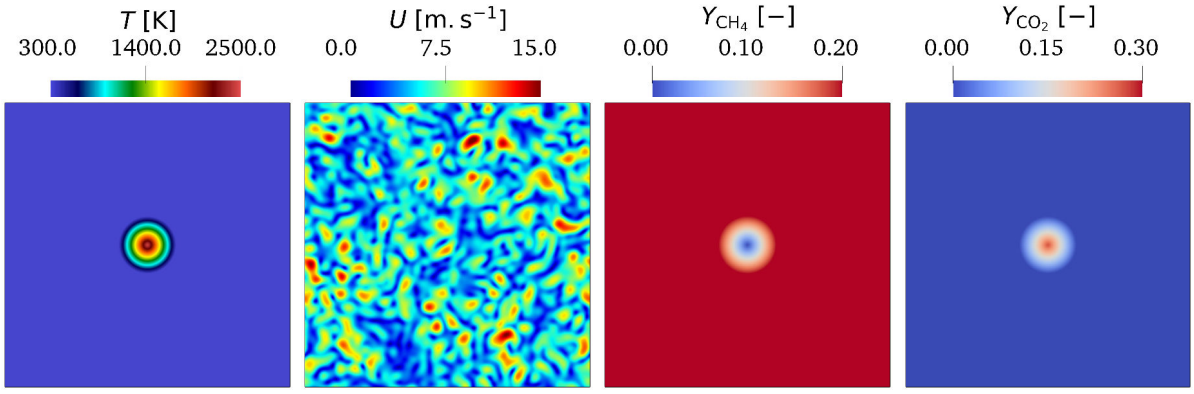


FIGURE 3.8 – Initialisation de la THI. Champs de température (T), norme du vecteur vitesse U et des fractions massiques pour CH_4 (Y_{CH_4}) et CO_2 (Y_{CO_2}), donnés dans le plan médian de normale z. $P = 56$ bar, $\Phi = 1$, $T = 300$ K dans les gaz frais.

le cube entier est simulé, mais n'est pas nécessairement respectée dans un plan donné, comme montré par le champ de vorticité sur la Fig. 3.11, pour le dernier instant. Ceci s'applique en particulier dans le cas des simulations 2D.

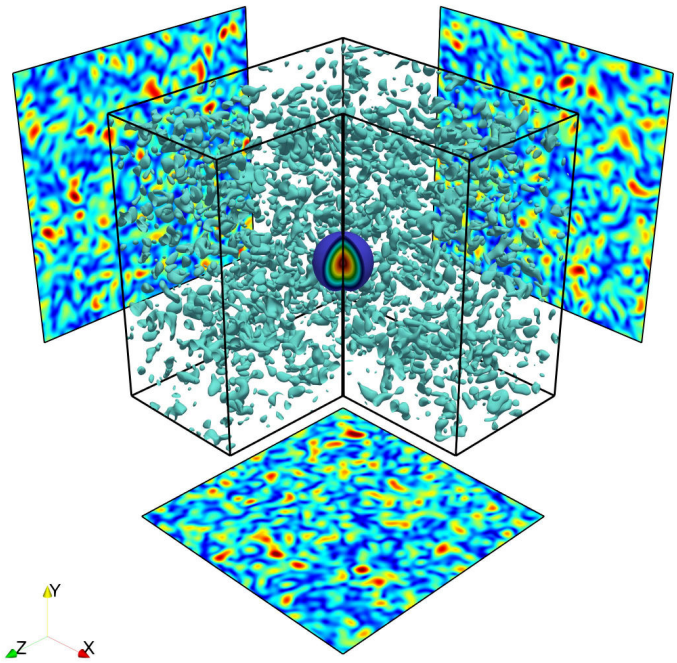


FIGURE 3.9 – Visualisation 3D de l'initialisation de la THI réactive, avec un clip en température colorisé par la température au centre du domaine, un iso-contour 3D de vorticité afin de mettre en évidence les structures tourbillonnaires 3D ainsi que les champs 2D de vitesse, issus des plans médians de normales x, y et z, en arrière plan.

3.3.3 Effet de la chimie et de la thermodynamique

Afin de valider la réduction de la chimie réalisée avec ORCh, les résultats obtenus avec la chimie réduite sont maintenant comparés à ceux obtenus avec la chimie détaillée de référence, en utilisant soit l'équation d'état (EoS) gaz parfait, soit l'EoS gaz réel, et en configuration 2D ou 3D. Sur la Fig. 3.12, la flamme en expansion est mise en évidence grâce au champ du taux de dégagement de chaleur à l'instant $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s. Pour les cas 2D (Fig. 3.12(a-d)), l'impact de l'EoS est négligeable car la position de la flamme est pratiquement inchangée pour tout instant. Avec une température de 300 K, le facteur de compressibilité $Z = PW/\rho\mathcal{R}T$ est proche de l'unité, réduisant par conséquent la contribution des termes correctifs haute pression. Ce comportement est observé peu importe le schéma cinétique utilisé, ce qui signifie que les simulations 3D utilisant une EoS gaz réel ainsi que le mécanisme chimie détaillé de référence, qui sont très coûteuses en temps CPU, ne sont pas pertinentes pour les analyses qui suivent. Pour un modèle de thermodynamique donné, la forme du front de flamme est la même peu importe le mécanisme chimique utilisé. La différence de position entre les deux fronts de flamme s'explique par les petites différences observées lors des simulations 0D de calcul de temps d'auto-allumage et 1D de flamme laminaire prémélangée. En effet, la simulation d'une flamme en régime transitoire, comme dans le cas d'un allumage, nécessite une chimie capable de reproduire correctement le temps d'auto-allumage aussi bien que la vitesse de propagation de la flamme laminaire.

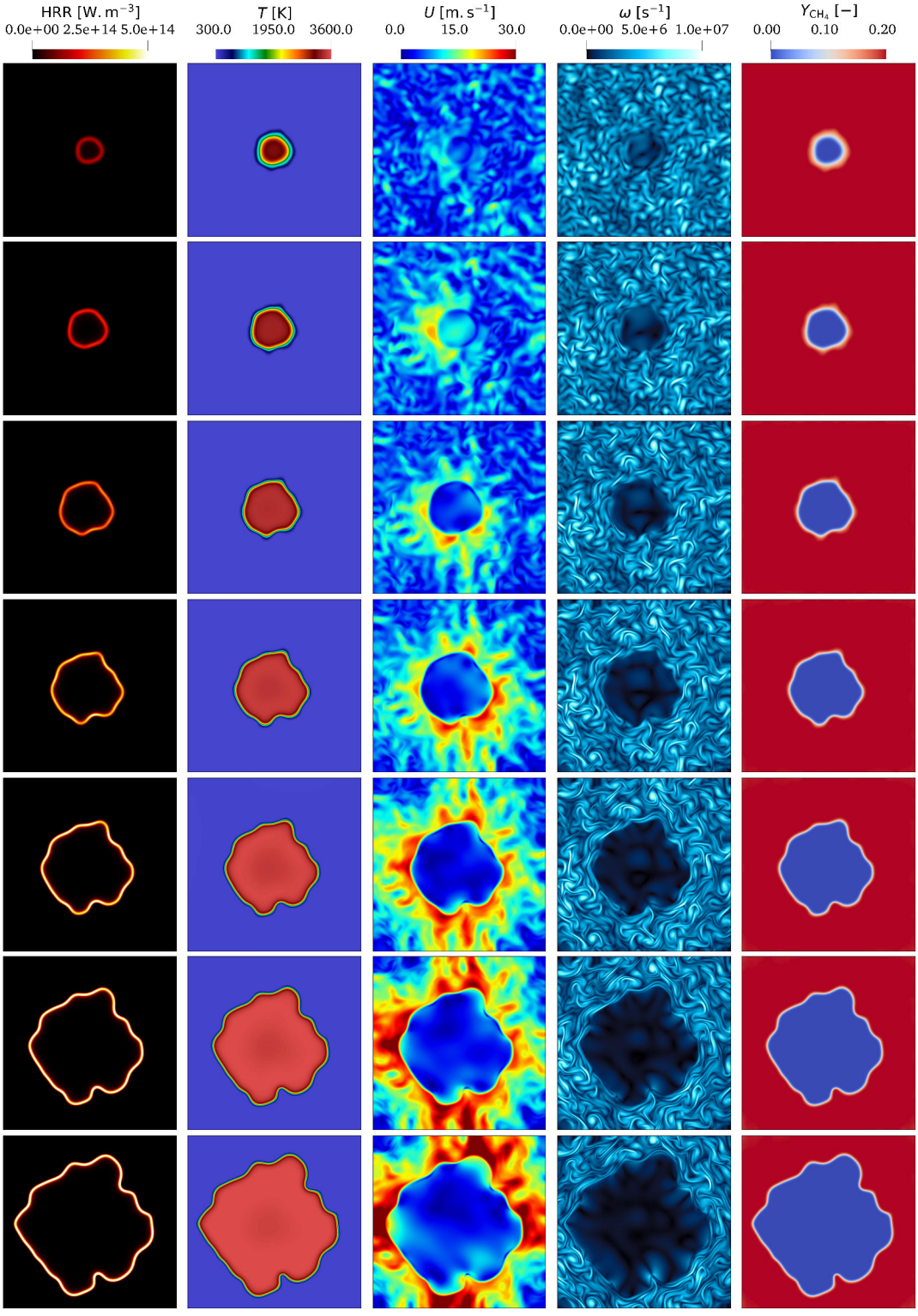


FIGURE 3.10 – Simulations 2D - champs du taux de dégagement de chaleur (HRR), température (T), norme du vecteur vitesse U, vorticité (ω) et fraction massique de CH_4 (Y_{CH_4}) donnés depuis $t = 2 \times 10^{-7}$ s (haut) jusqu'à $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s (bas), tous les $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ s. $P = 56$ bar, $\Phi = 1$ et $T = 300$ K dans le mélange de gaz frais.

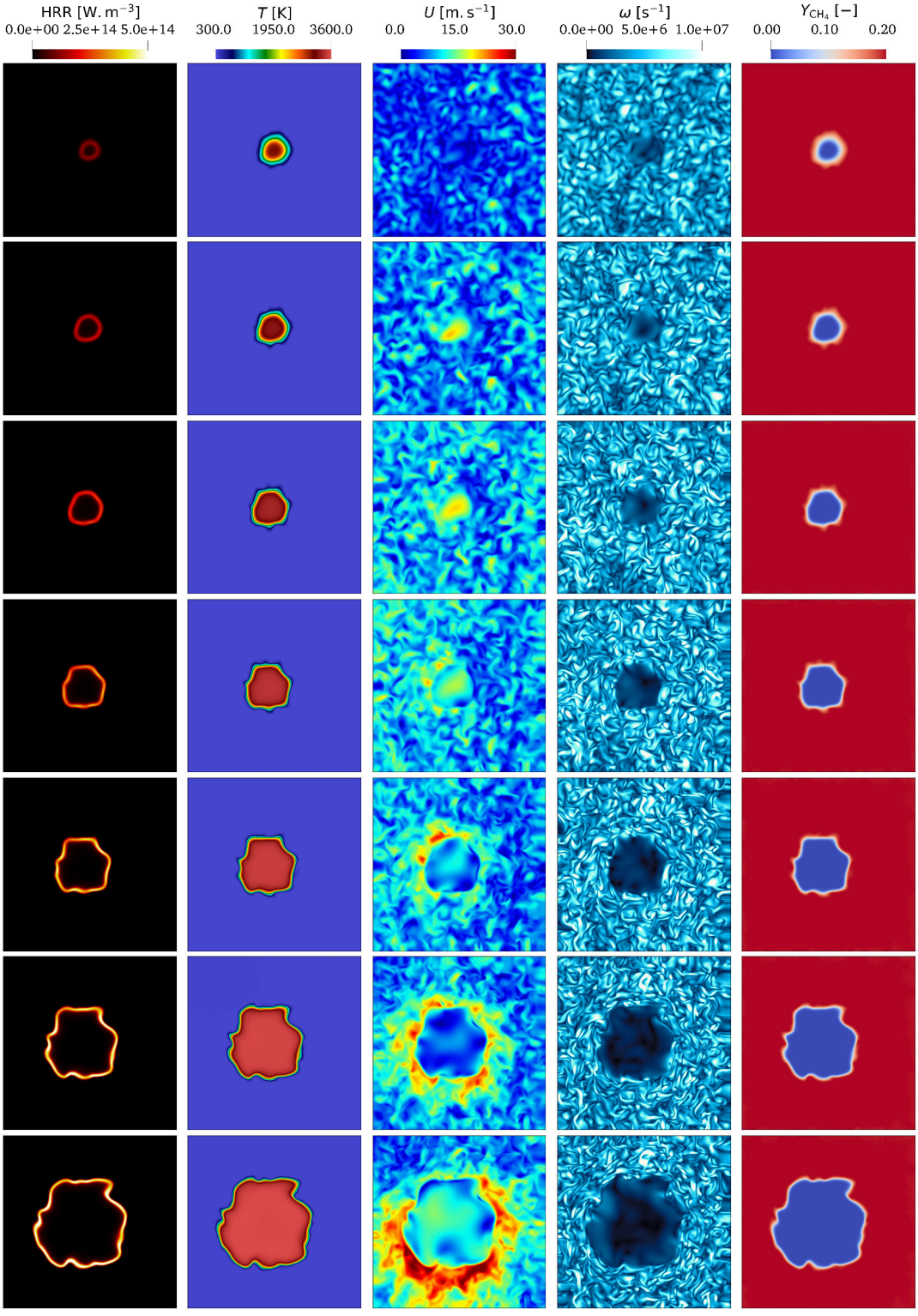
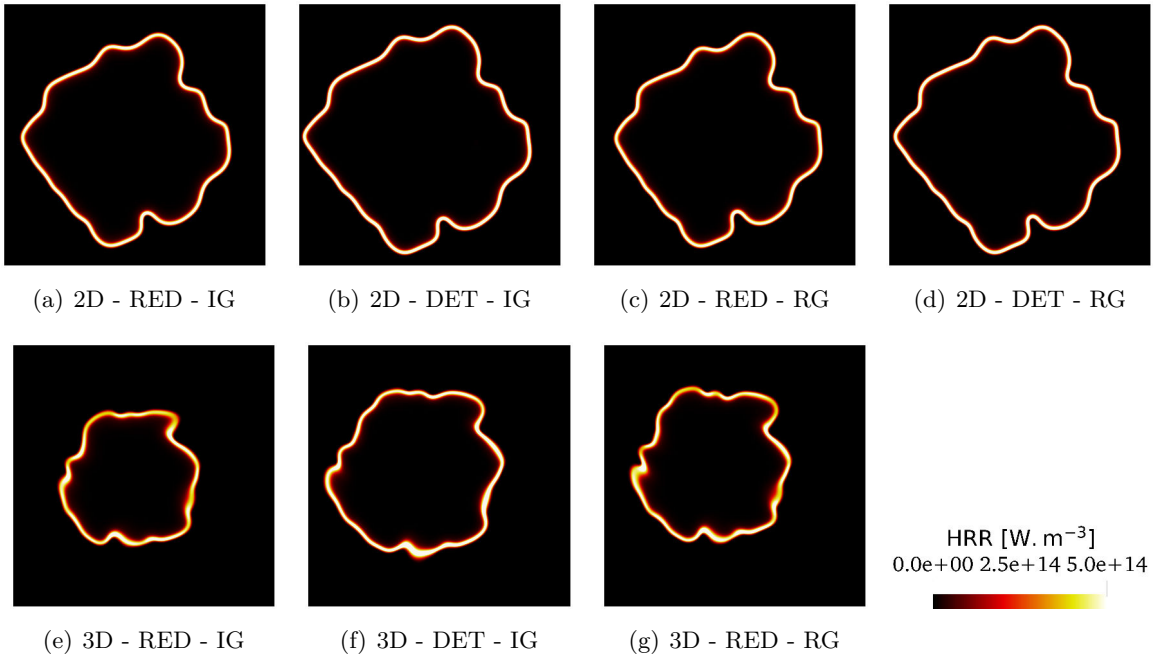


FIGURE 3.11 – Simulations 3D - champs du taux de dégagement de chaleur (HRR), température (T), norme du vecteur vitesse U, vorticité (ω) et fraction massique de CH_4 (Y_{CH_4}) donnés depuis $t = 2 \times 10^{-7}$ s (haut) jusqu'à $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s (bas), tous les $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ s. $P = 56$ bar, $\Phi = 1$ et $T = 300$ K dans le mélange de gaz frais.

Avec la chimie réduite, on a environ 5 % d'erreur sur τ_{ign} et 1.5 % d'erreur sur S_L par comparaison avec la chimie détaillée RAMEC. Cependant, ces différences ne devraient pas jouer un rôle majeur dans le cas d'une flamme en régime établie comme dans [113].



(a) 2D - RED - IG (b) 2D - DET - IG (c) 2D - RED - RG (d) 2D - DET - RG

(e) 3D - RED - IG (f) 3D - DET - IG (g) 3D - RED - RG

FIGURE 3.12 – Effet de la chimie et de la thermodynamique sur des simulations 2D (a-d) et 3D (e-g). Taux de dégagement de chaleur (HRR) donné à $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s. DET : mécanisme chimique RAMEC. RED : mécanisme chimique RAMEC 17S 44R. IG : *ideal gas* (gaz parfait). RG : *real gas* (gaz réel).

Pour les cas 3D (Fig. 3.12(e-g) et Fig. 3.13), les interactions 3D entre la flamme et la turbulence affectent fortement la forme du front de flamme, mais les écarts observés entre les deux mécanismes chimiques restent similaires à ceux observés lors des simulations 2D.

Enfin, l'utilisation d'une thermodynamique gaz réel et des corrections haute pression entraine des petites différences par rapport à l'approche sous l'hypothèse de gaz parfait, qui sont pratiquement imperceptibles dans les cas 2D. Afin de quantifier ces écarts, le maximum de la température ($T_{\max}$) est enregistré à chaque pas de temps pour tous les cas de simulations (Fig. 3.14(a)). La température maximale démarre avec une valeur de 2500 K (température du point chaud initial) puis atteint rapidement une valeur comprise entre 2800 K et 3000 K avant de voir sa courbe fléchir pour tendre vers la valeur obtenue dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée ($T_F = 3598$ K). $T_{\max}$ est donc bien retrouvée par le schéma réduit, et la modélisation de type gaz réel a un impact limité sur la température pour les simulations 2D et 3D. L'erreur relative entre ces simulations est montrée dans la Fig. 3.14(b), mais uniquement dans les cas où un seul paramètre varie à la fois, i.e. la dimension (2D ou 3D), le mécanisme chimique ou encore l'équation d'état. Les références sont considérées comme étant la chimie détaillée et la modélisation gaz réel. Une erreur maximale de 3.5 % est observée entre le mécanisme chimique réduit et le détaillé et tous les écarts diminuent au cours du temps jusqu'à moins de 1 % à $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s.

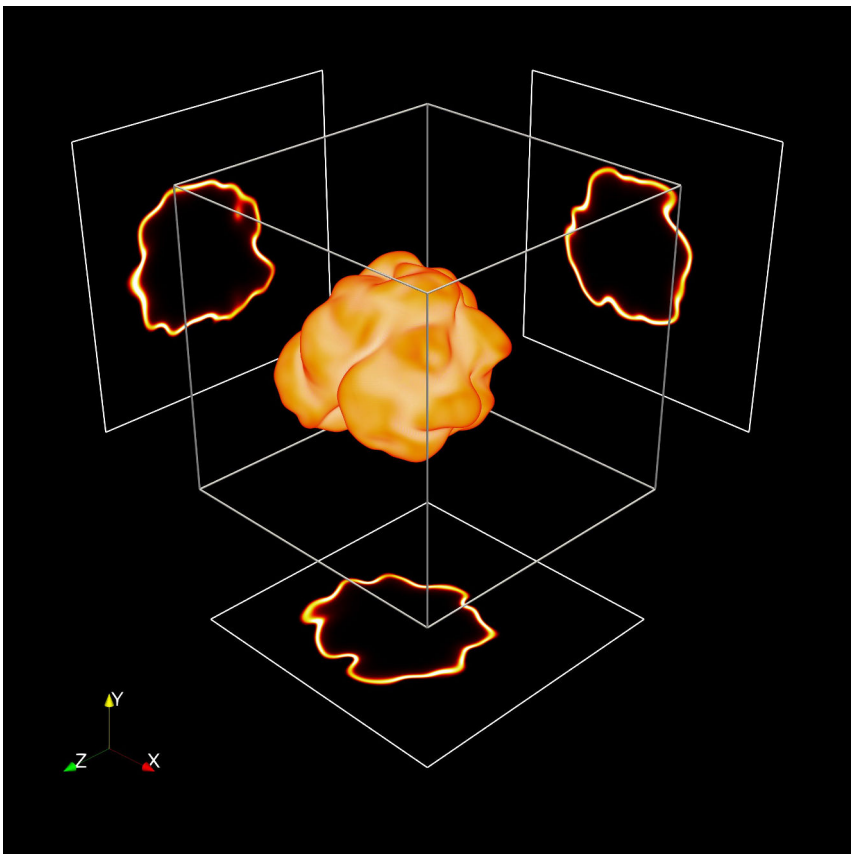


FIGURE 3.13 – Flamme de prémélange stœchiométrique CH_4/O_2 se développant dans une THI-3D. Le taux de dégagement de chaleur est mis en évidence grâce à la méthode de *volume rendering* de Paraview. Une coupe 2D des plans médians de normales x, y et z est montrée en arrière-plan.

Une étude similaire est réalisée avec le taux de dégagement de chaleur (HRR), comme montré sur les Fig. 3.14(c) et Fig. 3.14(d). Le maximum de HRR augmente presque linéairement de $t = 0.6 \times 10^{-6}$ s jusqu'à $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s avec des pentes parallèles, selon la modélisation retenue. Ce comportement est en accord avec l'évolution de $T_{\max}$ sur la Fig. 3.14(a). Cependant, une différence nette apparait entre le mécanisme chimique réduit et celui de référence sur $\mathrm{HRR}_{\max}$, contrairement à $T_{\max}$, comme montré sur la Fig. 3.14(d). En effet, l'écart relatif instantané peut atteindre jusqu'à 35 %, mais une fois l'instant $t = 0.6 \times 10^{-6}$ s atteint, les différences réduisent constamment dans le temps (environ 15 % à l'instant $t = 1.4 \times 10^{-6}$ s). Enfin, passer d'une formulation gaz parfait à une formulation gaz réel augmente systématiquement $\mathrm{HRR}_{\max}$.

Tous ces résultats montrent que la topologie de la flamme reste la même (Fig. 3.12) mais est décalée dans le temps. En décalant les profils de façon à obtenir une quasi-superposition, ce décalage temporel correspond à environ 0.2×10^{-6} s selon l'évolution temporelle de la courbe de $\mathrm{HRR}_{\max}$. Avec la procédure d'allumage utilisée, un décalage entre les deux chimies est donc observé dès le début de l'allumage et n'est jamais compensé. Cette observation est confirmée en réalisant une simulation de calcul de temps d'auto-allumage (voir section 3.2.2.1) avec une température initiale de 1400 K, ce qui correspond à une température moyenne entre les gaz brûlés 2500 K et les gaz frais 300 K, où un décalage de 0.216×10^{-6} s est en effet trouvé entre les

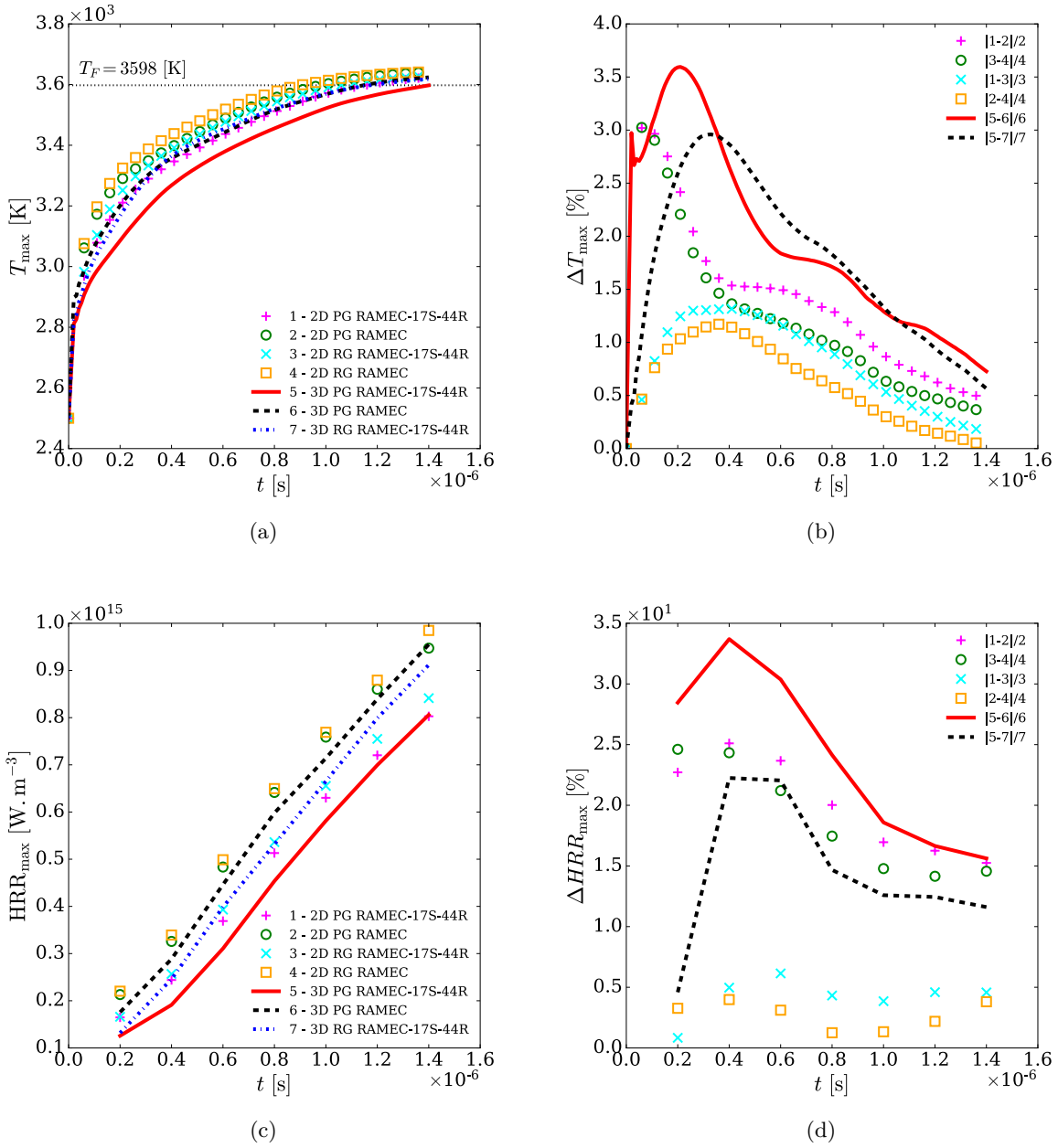


FIGURE 3.14 – Évolution temporelle du maximum de température (a) et HRR (c), avec les écarts relatifs pour la température (b) et HRR (d) entre les simulations. Dans (b) et (d), les nombres en haut à droite correspondent aux différents cas reportés en bas à droite en (a) et (c).

deux mécanismes. Ces observations montrent que la procédure d'allumage a un impact évident sur la développement initial de la flamme méthane-oxygène, mais cela ne devrait pas avoir d'effet significatif lors d'une simulation de flamme établie.

3.3.4 Un nouvel outil pour détecter et mesurer automatiquement les fronts de flamme

Basé sur les travaux de Chang *et al.* [43], un nouvel algorithme de détection de front de flamme par une méthode automatique de *Contour Tracing Labeling* (CTL) a été implémentée dans le solveur SiTCom-B. Habituellement utilisée dans les domaines de reconnaissance d'image automatique [126], i.e. pour des configurations 2D, une telle stratégie a été transposée ici, dans le but d'obtenir une méthode automatique, reproductive et consistante permettant de détecter des fronts de flamme et d'en calculer le périmètre. Les principales étapes de l'algorithme sont :

1. définition du champ scalaire ϕ à étudier (ϕ = HRR ici), afin de mesurer le périmètre du contour de la flamme ;
2. import d'un plan contenant $N_x \times N_y$ cellules de maillage, directement issu d'une simulation 2D ou d'un plan d'une simulation 3D ;
3. initialisation d'une variable L (label) à zéro en tout point ;
4. opération de seuillage du scalaire (binarisation) :

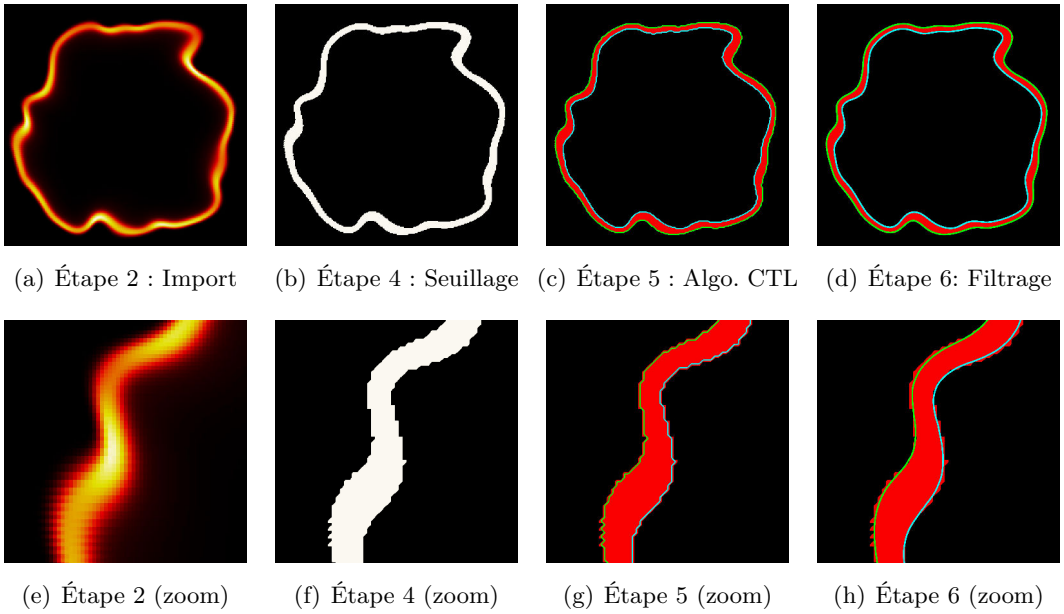
$$\forall\ (i,j) \in [1, N_x] \times [1, N_y],\ \text{si}\ \phi(i,j) > \phi_{\max}/C,\ \text{alors}\ L(i,j) = 1\ ,$$

   où C est une constante donnée par l'utilisateur ($C = 2.5$ ici) ;
5. application de l'algorithme CTL [43] qui consiste à scanner le champ scalaire (ou l'image) de gauche à droite et de haut en bas puis à réaliser un tracé complet du contour quand $L(i,j) = 1$ est rencontré. Les positions des points définissant la frontière entre $L(i,j) = 1$ et $L(i,j) = 0$ et correspondant au contour du champ scalaire désiré sont alors enregistrées ;
6. filtrage (moyenne mobile) du contour afin de minimiser l'impact de la résolution de la grille de maillage ;
7. calcul du périmètre du contour en additionnant les distances entre les points considérés comme appartenant au contour [125].

Les étapes majeures de cette procédure sont illustrées sur la Fig. 3.15. Le rendu final est mis en évidence sur la Fig. 3.16. Dans cette étude, un seul front de flamme est présent dans le domaine. Deux contours sont donc détectés : un contour qui correspond au contour externe du front de flamme (côté gaz brûles) et un contour interne (côté gaz frais) (Fig. 3.16).

Toutefois, cet algorithme est capable de détecter autant de contours, ouverts ou fermés que nécessaire dans un champ scalaire 2D. Il peut aussi bien fonctionner avec des images qu'avec des données, comme réalisé ici (Fig. 3.15). Ainsi, en changeant le scalaire étudié (étape 1) et la valeur de la constante C (étape 4), cet algorithme pourrait très bien servir à évaluer n'importe quel objet (gouttes, poches de gaz, vortex, etc.) dans un champ scalaire donné. Il s'agit donc d'un outil de post-traitement automatique avancé pouvant servir à la fois sur des données expérimentales ou numériques.

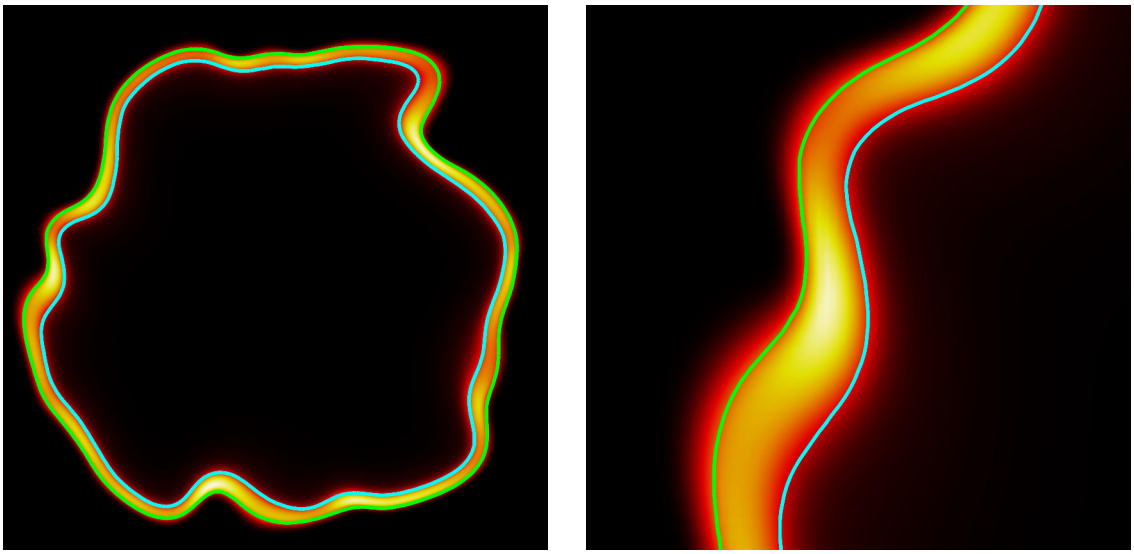
Bien que cet algorithme de détection de contour ne soit pas le plus rapide dans sa catégorie, il permet de calculer aisément le périmètre de l'ensemble des contours enregistrés [125, 126]. En effet, dès qu'un contour est évalué, les cellules de maillage identifiées comme appartenant au contour sont parcourues une par une jusqu'à revenir au point de départ. Le chemin parcouru par l'algorithme est mémorisé et correspond dans notre cas au front de flamme.



(a) Étape 2 : Import (b) Étape 4 : Seuillage (c) Étape 5 : Algo. CTL (d) Étape 6: Filtrage

(e) Étape 2 (zoom) (f) Étape 4 (zoom) (g) Étape 5 (zoom) (h) Étape 6 (zoom)

FIGURE 3.15 – Aperçu des différentes étapes de détection du front de flamme et du calcul de périmètre avec l'algorithme CTL. (a-d) Principales étapes ; (e-h) zoom sur les images du dessus.

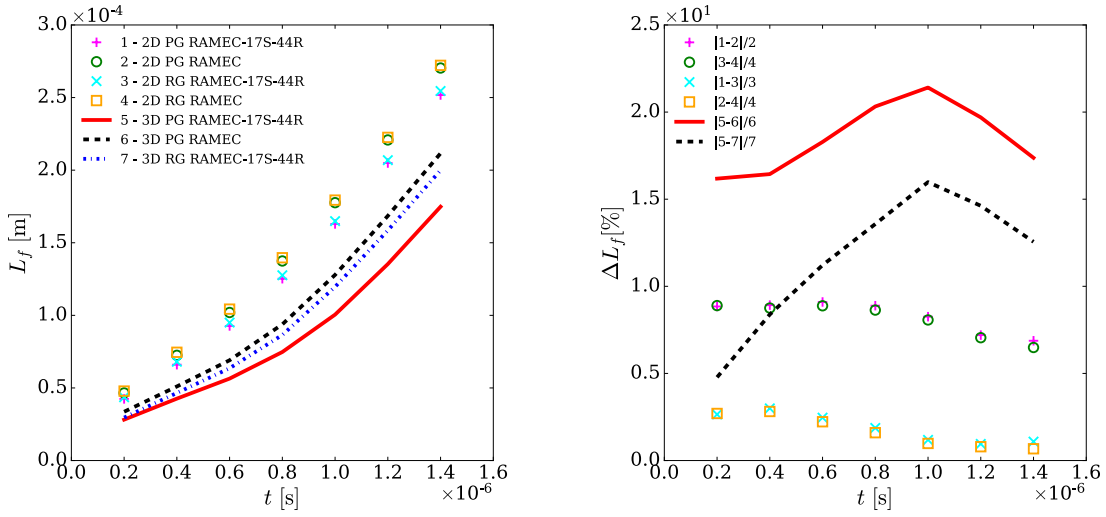


(a) (b)

FIGURE 3.16 – Contours interne (cyan) et externe (vert) de la position de la flamme projetée sur le champ de HRR. Le champ de HRR est interpolé au niveau des nœuds des cellules, contrairement dans le cas de la Fig. 3.15 où il est présenté au centre des cellules.

Cet algorithme est donc utilisé pour mesurer l'évolution du périmètre de la flamme au cours du temps, pour les différents cas étudiés (2D ou 3D, RG ou IG, pour la chimie réduite ou détaillée). Les deux contours de flammes (externe et interne) sont donc calculés et la longueur de flamme retenue (L_f) est simplement définie comme la moyenne du périmètre de ces deux contours. Notons que pour les simulations 3D, uniquement les plans médians de normale z sont

considérés. La tendance observée pour L_f (Fig. 3.17), et ses écarts relatifs, est similaire à celle



(a) (b)

FIGURE 3.17 – Calcul de (a) la longueur de flamme dans un plan de coupe médian (de normale z) pour les cas 3D, avec (b) l'écart relatif entre ces simulations. Dans (b), les nombres en haut à gauche correspondant aux différents cas reportés en haut à gauche dans (a).

observée pour HRR_{max} (Fig. 3.14). Sur la Fig. 3.17(a), L_f est toujours plus petite pour les simulations 3D que 2D. Toutefois, un seul plan issu des simulations 3D a été analysé et il n'est pas impossible qu'un autre plan aurait donné des résultats différents. Le profil de L_f pour les simulations avec la chimie réduite a toujours été trouvé en dessous des profils de L_f pour les simulations avec la chimie détaillée, ce qui va dans le même sens que pour le décalage temporel déjà observé entre les deux mécanismes chimiques. Sur la Fig. 3.17(b), l'impact du choix de la thermodynamique est négligeable ici et l'écart relatif en pourcentages pour L_f est moins prononcé qu'il ne l'était pour HRR_{max}, puisque le renseignement de ce dernier nous informe localement, alors que l'analyse de l'évolution de L_f propose un critère global. Finalement, la différence entre les deux mécanismes chimiques tend à réduire au cours du temps, signifiant qu'une flamme établie pourrait être bien capturée par le schéma réduit puisque les erreurs sont maximisées ici, car calculées pour des variables comparées à chaque instant.

3.3.5 Temps de calcul (CPU)

Le solveur numérique parallèle SiTCom-B introduit dans la section 2.4 est utilisé dans cette étude avec un nombre de $CFL = 0.8$ et un nombre de Fourier $Fo = 0.2$. Le pas de temps chimique $\Delta t_{\text{Chem}} = \min\left[(a_{tol} + r_{tol} \times \rho Y_k) \;/\; |\dot{\omega}_k|\right]$ est évalué ici avec $a_{tol} = 1.0 \times 10^{-6}$ et $r_{tol} = 0.8$, où $\dot{\omega}_k$ est le terme source chimique. Les caractéristiques numériques des simulations sont données dans la Tab. 3.4 pour les cas 2D et dans la Tab. 3.5 pour les cas 3D. Chaque cas simulé dans cette étude est identifié par un numéro d'identification (ID) dans la colonne de gauche. En retirant les espèces radicalaires ou minoritaires du mécanisme détaillé original, la raideur du mécanisme chimique réduit s'en voit diminuée et donc le pas de temps chimique Δt_{Chem} a augmenté, mais

il reste néanmoins le temps caractéristique le plus pénalisant parmi ceux basés sur le CFL, le Fourier et la chimie. En conséquence, le nombre d'itérations requis, N_{It}, pour simuler un temps physique donné $t_f = 1.4 \times 10^{-6}$ s est également réduit. Dans les Tab. 3.4 et 3.5, le premier gain est exprimé par R_{It} qui correspond au ratio d'itérations N_{It} entre les deux mécanismes, pour un cas donné (ID dans les tables). Par exemple, $R_{It} = N_{It,\ ID=1.2}/N_{It,\ ID=1.1} = 3.5$. En outre,

ID	Dim	EoS	Chem. Mechanism	N_{It}	R_{It}	t_{CPU} [h]	RE [ns]	R_{Ns}	G
1.1	2D	IG	RAMEC_17S_44R	16658	1.0	1.09	14719	1.0	–
1.2	2D	IG	RAMEC	57511	3.5	12.76	49935	3.4	11.9
2.1	2D	RG	RAMEC_17S_44R	20365	1.0	18.17	200710	1.0	–
2.2	2D	RG	RAMEC	59839	2.9	151.99	571499	2.8	8.1

TABLE 3.4 – Coût numérique pour réaliser une simulation 2D sur $N_{CPU} = 40$ processeurs, identifiés par leur numéro ID (colonne de gauche), sur le supercalculateur Jean Zay (HPE SGI 8600) de l'IDRIS. t_{CPU} représente le temps de calcul CPU. N_{It} est le nombre d'itérations pour simuler $t_f = 1.4 \times 10^{-6}$ s de temps physique. RE est l'efficacité réduite définie par l'Éq. (3.3). $R_{It} = N_{It,\ ID=x.2}/N_{It,\ ID=x.1}$, $R_{Ns} = RE_{ID=x.2}/RE_{ID=x.1}$ avec x étant l'ID#. Le gain total est $G = R_{It} \times R_{Ns}$.

puisque certaines espèces ont été retirées du mécanisme détaillé, le nombre d'espèces impliqué dans les équations de transport à résoudre a diminué, amenant par conséquent une autre source de gain de temps de calcul. Un tel gain est estimé grâce au calcul de l'efficacité réduite, RE, définie comme :

$$RE = \frac{t_{CPU}}{N_{\text{cell}} \times N_{RK} \times N_{It}}. \tag{3.3}$$

Dans l'Éq. (3.3), t_{CPU} est le temps CPU en secondes et N_{cell}, le nombre de cellules de maillage traité par processeur (N_{cell} = Nombre total de celulles / Nombre total de processeurs (N_{CPU})). Ce second gain est exprimé par R_{Ns} qui est le ratio de RE entre deux cas où la seule différence

ID	Dim	EoS	Chem. Mechanism	N_{It}	R_{It}	t_{CPU} [h]	RE [ns]	R_{Ns}	G
3.1	3D	IG	RAMEC_17S_44R	18383	1.0	6.79	20770	1.0	–
3.2	3D	IG	RAMEC	55932	3.0	55.97	56290	2.7	8.1
4.1	3D	RG	RAMEC_17S_44R	23572	1.0	107.78	257193	1.0	–

TABLE 3.5 – Coût numérique pour réaliser une simulation 3D sur $N_{CPU} = 4000$ processeurs, identifiés par leur numéro ID (colonne de gauche), sur le supercalculateur Jean Zay (HPE SGI 8600) de l'IDRIS. t_{CPU} représente le temps de calcul CPU. N_{It} est le nombre d'itérations pour simuler $t_f = 1.4 \times 10^{-6}$ s de temps physique. RE est l'efficacité réduite définie par l'Éq. (3.3). $R_{It} = N_{It,\ ID=x.2}/N_{It,\ ID=x.1}$, $R_{Ns} = RE_{ID=x.2}/RE_{ID=x.1}$ avec x étant l'ID#. Le gain total est $G = R_{It} \times R_{Ns}$.

repose sur le choix du mécanisme chimique. Par exemple, $R_{Ns} = RE_{ID=1.2}/RE_{ID=1.1} = 3.4$. Le gain total est alors $G = R_{It} \times R_{Ns}$ et est d'au moins un facteur 8 basé sur les simulations ici présentes.

Ainsi, avec de telles performances physiques et numériques, la simulation d'une chimie entièrement transportée pour des flammes haute pression CH_4/O_2 devient plus accessible.

3.4 Conclusion

Un nouveau mécanisme chimique réduit pour la combustion CH_4/O_2 a été développé afin de réduire le temps de calcul CPU des simulations numériques, tout en préservant un haut niveau de précision sur une large gamme de pression et de richesse. Le mécanisme chimique RAMEC contenant initialement 38 espèces et 190 réactions a donc été réduit avec la méthode ORCh jusqu'à 17 espèces et 44 réactions. La validation sur des cas tests 1D a montré de très bons accords entre la chimie réduite et la chimie de référence.

Pour l'interaction de flamme-turbulence, ces deux mécanismes chimiques ont mis en évidence la même topologie de flamme, mais décalée dans le temps à cause d'un léger écart dans le temps d'auto-allumage. Le maximum de température dans la flamme est bien retrouvé par le mécanisme chimique réduit et les différences observées sur d'autres grandeurs caractérisant la flamme, comme la longueur de flamme ou encore le taux de dégagement de chaleur, disparaissent avec le temps, signifiant que le mécanisme chimique réduit peut être utilisé pour simuler une flamme établie. En retirant certaines espèces du mécanisme chimique détaillé, les propriétés de transport peuvent également être affectées par la thermodynamique. L'impact de ces écarts n'a pas été discuté en profondeur dans cette étude et seulement une conclusion partielle est adressée ici, où les conséquences sont limitées, certainement à cause des paramètres thermodynamiques retenus comme la pression ou la température initiale du mélange. Une étude paramétrique pourrait être considérée par la suite afin de déterminer si une telle observation peut être généralisée ou non, en particulier dans le cas où le facteur de compressibilité est faible.

Notons par ailleurs que dans cette étude, les espèces retirées n'existent que dans l'épaisseur du front de flamme et donc là où le facteur de compressibilité est proche de l'unité. Davantage réduire le nombre d'espèces du mécanisme réduit pourrait rapidement dégrader les résultats sur la gamme de pression et de richesse retenue, comme montré avec l'espèce C_2H_6. L'utilisation d'un algorithme génétique afin d'optimiser les paramètres des taux de réactions de la chimie réduite sur un point de fonctionnement en particulier pourrait être envisagé, mais au détriment d'une perte en prédictibilité sur d'autres points de fonctionnement. En outre, inclure davantage d'espèces dans le mécanisme chimique réduit améliorerait certainement les résultats, en particulier dans les cas de simulations à 1 bar, mais augmenterait également le coût numérique des simulations.

Finalement, le temps CPU est réduit d'un facteur au moins 8 avec la nouvelle chimie réduite et pourra être utilisée à l'avenir pour simuler des configurations académiques représentatives de la combustion dans les moteurs-fusées à propulsion liquide.

Chapitre 4

Simulation numérique de la propagation de flammes CH_4/O_2 après allumage dans des milieux hétérogènes

Sommaire

4.1 Introduction 141
4.1.1 Contexte 141
4.1.2 Objectifs 144
4.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation 144
4.2.1 Paramétrage numérique et initialisation 145
4.2.2 Allumage 146
4.3 Résultats et discussion 148
4.3.1 Première configuration : $U_{conv} = 0\ m \cdot s^{-1}$ 148
4.3.2 Deuxième configuration : $U_{conv} \neq 0\ m \cdot s^{-1}$ 160
4.4 Conclusion 162

4.1 Introduction

4.1.1 Contexte

Les structures de flammes triples sont rencontrées dans les systèmes de combustion ayant de larges inhomogénéités en fraction de mélange [284]. Elles sont composées d'une branche de prémélange pauvre et d'une branche de prémélange riche, suivies d'une flamme de diffusion, toutes trois s'étendant depuis un seul et même point [52], appelé point triple. La flamme triple est un cas particulier d'*edge flame* [33], pour laquelle un front de flamme généralement en forme de tête de flèche se propageant dans un écoulement à contre-courant, dont les différentes arrêtes qui constituent cette flamme sont plus ou moins visibles. Dans le cas d'une *edge flame*, si la

gamme de richesse vue par la flamme correspond à son domaine d'inflammabilité, alors il s'agit de combustion stratifiée [215]. La Fig. 4.1 met en évidence les différentes formes d'une *edge flame*, selon qu'elle contient une, deux ou trois branches.

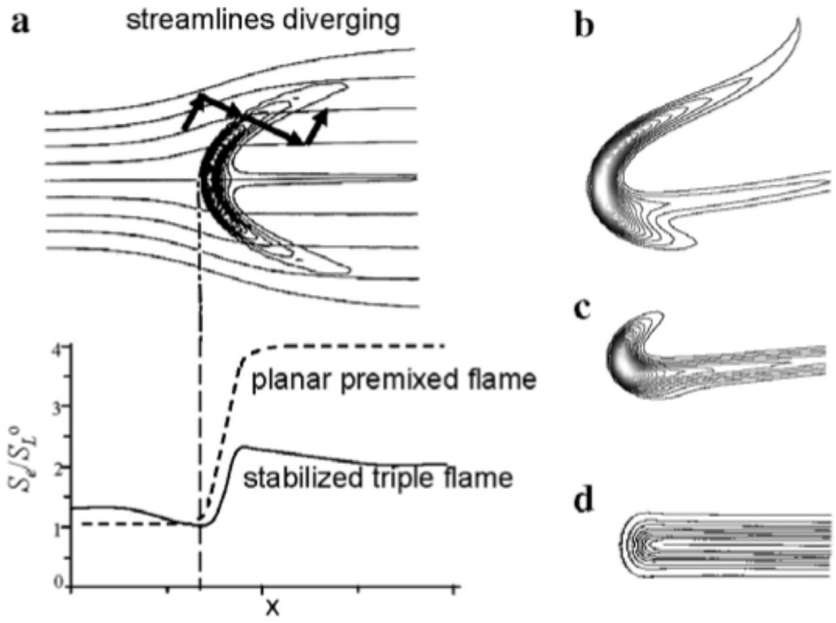


FIGURE 4.1 – Formes des fronts de flamme en fonction du taux de réaction. (a) Structure de flame triple [323], (b) flamme tribachiale asymétrique, (c) flamme bibrachiale [409] et (d) flamme monobrachiale [161]. Figure tirée de [52].

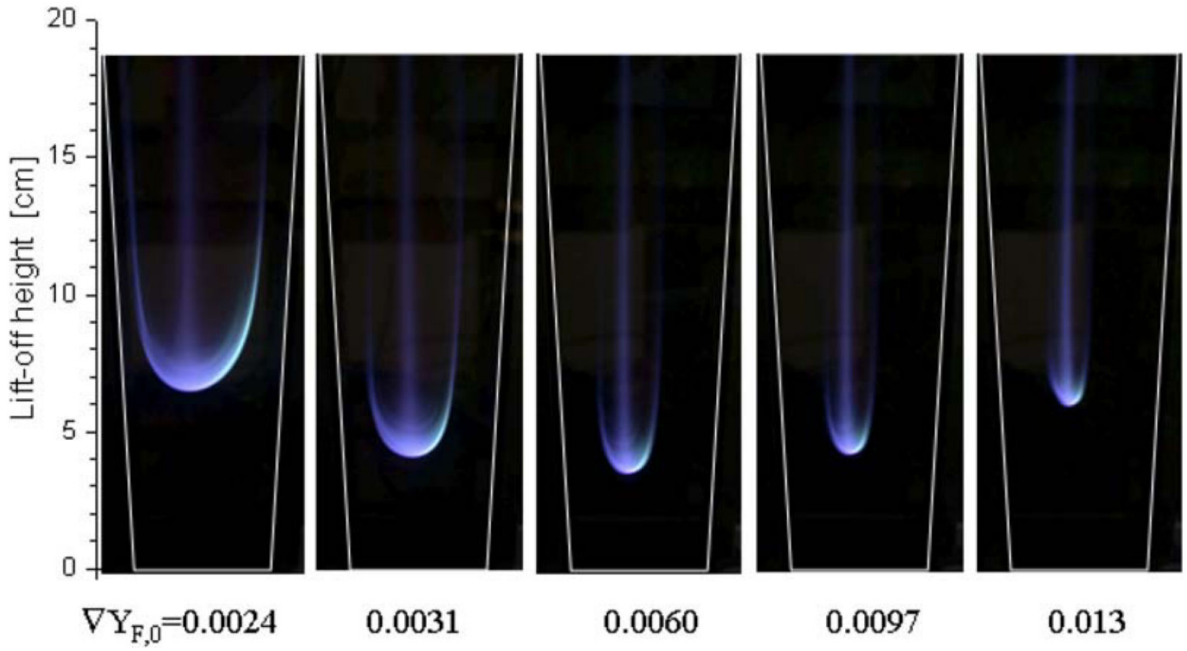


FIGURE 4.2 – Mise en évidence de la structure d'une flamme triple CH_4/air, pour différents gradients de fraction massique de CH_4. Image tirée de [158].

Une telle structure de flamme triple peut apparaître lors du processus d'allumage [69] quand le dépôt d'énergie est ajouté au mélange réactif. Un noyau chaud de gaz brûlés se développe et la flamme se propage dans toutes les directions afin d'enflammer l'ensemble du mélange. Si les conditions le permettent, la flamme peut remonter jusqu'à l'injecteur afin de se stabiliser ou alors se stabiliser à une certaine position de l'injecteur (*lift-off flame*) si la vitesse d'injection moyenne est proche de la vitesse de propagation de la flamme triple [158]. La Fig. 4.2 montre la structure d'une flamme triple CH_4/air stabilisée à une certaine position de l'injecteur.

Pour les flammes de diffusion turbulentes non attachées ("liftées"), Lyons [198] relie le mécanisme de stabilisation à la propagation d'une *edge flame* en expansion après allumage d'un mélange hétérogène. De même, Juniper et Candel [150] montrent qu'une *edge flame* de diffusion se stabilise derrière une marche au-dessus d'un liquide réactif.

Dans le contexte de la combustion dans les moteurs-fusées liquides, derrière la lèvre oxygène d'un injecteur coaxial se développe une couche de mélange entre l'oxydant et le combustible et par conséquent le mélange n'est localement pas homogène. On peut donc s'interroger sur la nature des flammes se développant derrière la lèvre séparant (*splitter-plate*) le combustible de l'oxydant. S'agit-il d'*edge flames* mono, bi-ou tri-brachiales ? On peut également se demander quel est le régime de combustion privilégié dans ces conditions, à savoir de prémélange ou de diffusion. La Fig. 4.3 montre par ailleurs que des poches de méthane peuvent se détacher de la couche de mélange et venir se propager isolément dans de l'oxygène liquide. En quoi un tel phénomène peut-il affecter la combustion ? Ainsi, avant d'étudier directement la combustion d'une couche de mélange réactive CH_4/O_2 en conditions moteurs-fusées, il convient dans un premier lieu d'étudier et de comprendre les mécanismes d'auto-allumage et de propagation de flammes dans des milieux hétérogènes en combustible.

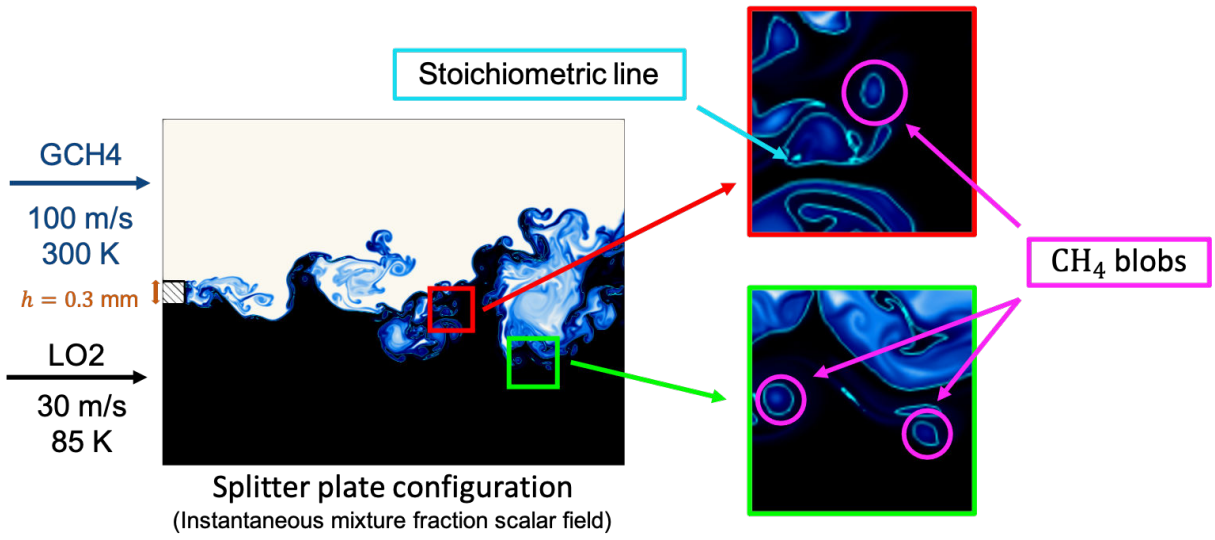


FIGURE 4.3 – Couche de mélange CH_4/O_2 non réactive derrière une plaque séparatrice (*splitter-plate*) et zoom sur les poches de CH_4 se détachant de la couche de mélange principale. La pression est de $P = 10.0$ MPa.

4.1.2 Objectifs

L'objectif de cette étude est double. Le premier est l'étude de la propagation de flammes dans des milieux hétérogènes en CH_4/O_2, juste après allumage pour différentes conditions thermodynamiques (pression et température) caractéristiques des moteurs-fusées. Le second objectif est d'évaluer la performance du mécanisme chimique RAMEC-17S-44R introduit dans le chapitre 3 par rapport au mécanisme chimique détaillé RAMEC.

4.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation

Afin d'étudier le mécanisme de propagation de flammes CH_4/O_2 haute pression après allumage, deux configurations sont étudiées. Pour la première, la vitesse moyenne de l'écoulement est nulle, i.e. la vitesse convective $U_{\text{conv}} = 0\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ et une ou plusieurs poches de méthane sont allumées dans une environnement rempli d'oxygène (Fig 4.4). Dans le second cas, une configuration de type *splitter-plate* [113, 257, 325, 425] est à l'étude, i.e. $U_{\text{conv}} \neq 0\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ (Fig. 4.5).

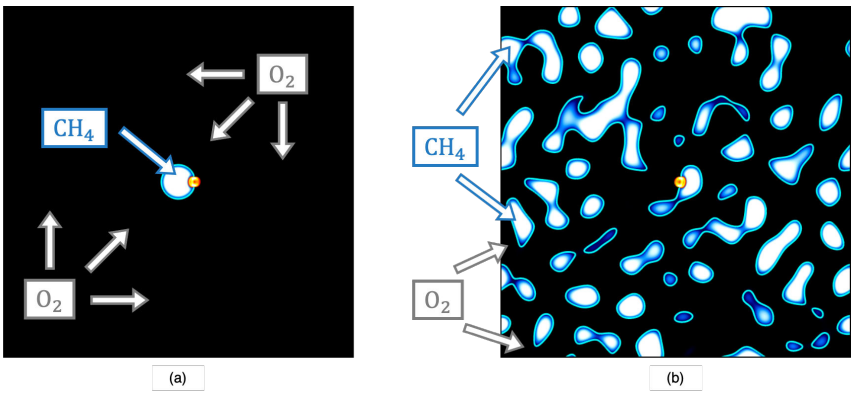


FIGURE 4.4 – Illustration de la première configuration $U_{\text{conv}} = 0\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. (a) Cas d'une poche unique de méthane et (b) plusieurs poches de méthane.

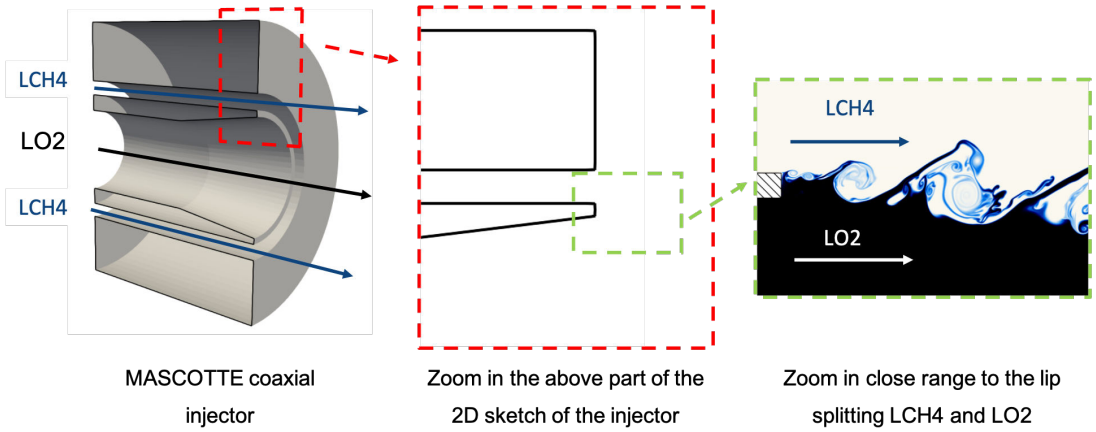


FIGURE 4.5 – Illustration de la configuration *splitter-plate* et localisation au niveau de l'injecteur MASCOTTE [397].

Le détail des paramètres nécessaires pour la réalisation de ces deux études est donné ci-après. Les simulations 2D sont réalisées avec le solveur SiTCom-B. La combustion du CH_4 avec de l'O_2 est réalisée avec le mécanisme chimique RAMEC-17S-44R (17 espèces et 44 réactions) [236] introduit dans le chapitre 3 ou avec le mécanisme chimique détaillé RAMEC (38 espèces et 190 réactions) [278] si spécifié. Notons que dans tout ce qui suit, la fraction de mélange est calculée en suivant la définition proposée dans l'Éq. (2.141).

4.2.1 Paramétrage numérique et initialisation

4.2.1.1 Première configuration : $U_{\text{conv}} = 0\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

L'étude porte sur l'allumage d'une ou plusieurs poches de méthane dans un environnement rempli d'oxygène, en considérant différentes températures initiales. Selon la température initiale considérée, $T_i = 300$ K pour les deux réactifs, une simple modélisation gaz parfait est retenue (effets de compressibilités relativement faibles dans ce cas, comme démontré dans le chapitre 3) alors que si $T_i < 300$ K pour au moins l'un des deux réactifs, alors une modélisation avec l'EoS SRK [358], et les propriétés de transport haute pression évaluées avec les méthodes Chung [53] et Takahashi [367] est considérée. De la Turbulence Homogène Isotrope (THI) peut être superposée à l'écoulement initial comme dans le chapitre 3 (Tab. 3.2). La configuration géométrique est une boite carrée de côté $L_{\text{box}} = 1.5 \times 10^{-4}$ m. Le maillage structuré et cartésien contient 600 cellules dans chaque direction. La même résolution de maillage est utilisée dans tous les cas, $\Delta x_i = 0.25$ μm et des sorties NSCBC sont considérées au lieu de conditions périodiques (voir annexe C) afin de maintenir la pression proche de la pression cible initiale $P_{ch} = 10$ MPa. Notons que dans le chapitre 3, une comparaison entre les simulations 2D et 3D a été réalisée dans le cas d'une flamme turbulente prémélangée à haute pression, et par exemple, une erreur maximale de 1 % a été observée sur la prédiction de la température maximale.

Dans le cas où une seule poche de méthane est considérée, la fraction massique de CH_4 initiale est définie par la fonction suivante :

$$Y_{\text{CH}_4}(r) = \frac{Y_{\text{CH}_4}^{\max} - Y_{\text{CH}_4}^{\min}}{2}\left[1 - \tanh\left(r - \frac{r_{\text{CH}_4}^{\max} - r_{\text{CH}_4}^{\min}}{\delta_{\text{CH}_4}}\right)\right] + Y_{\text{CH}_4}^{\min}\ , \tag{4.1}$$

avec

$$r = \sqrt{(x - x_{\text{CH}_4})^2 + (y - y_{\text{CH}_4})^2 + (z - z_{\text{CH}_4})^2}\ , \tag{4.2}$$

ainsi que $x_{\text{CH}_4} = y_{\text{CH}_4} = z_{\text{CH}_4} = 0$ m et

$$\delta_{\text{CH}_4} = \frac{r_{\text{CH}_4}^{\max} - r_{\text{CH}_4}^{\min}}{10}\ , \quad r_{\text{CH}_4}^{\min} = 0\ \text{m} \quad \text{et} \quad r_{\text{CH}_4}^{\max} = \frac{2L_{\text{box}}}{45}\ . \tag{4.3}$$

Il suffit alors de remplacer $Y_{\text{CH}_4}^{\max}$ par T_{CH_4} et $Y_{\text{CH}_4}^{\min}$ par T_{O_2} et l'on obtient le profil initial de température comme fonction du rayon, les températures T_{CH_4} et T_{O_2} étant données dans la Tab. 4.1.

Lorsque plusieurs poches de méthane sont générées de manière aléatoire, celles-ci ont des tailles différentes. Afin d'obtenir une distribution aléatoire et homogène, la méthode de génération scalaire décrite dans [306] a été implémentée au cours de cette thèse. Une échelle de longueur moyenne, $L_{\text{blobs}} = L_{\text{box}}/10$, et une fonction de densité de probabilité (PDF) afin de limiter le scalaire entre $[0, 1]$ est utilisée. La distribution est paramétrée par une fonction Gaussienne avec

$\langle Y_{CH_4} \rangle = 0.2$ pour la valeur moyenne et $\sigma_{Y_{CH_4}} = 0.12$ pour l'écart type. Le choix de $\langle Y_{CH_4} \rangle = 0.2$ correspond à celui de la stœchiométrie. Toutefois cela ne signifie pas que la richesse globale est unitaire, mais que l'intégrale sur le volume complet de la fraction massique de méthane est bien égale à 0.2. La Tab. 4.1 résume les différentes conditions en terme de température, configuration de poche de méthane, turbulence et de richesse globale.

Cas	Blob #	THI	T_{CH_4}	T_{O_2}	Φ
#1.1	1	N	300	300	0.013
#1.2	1	O	300	300	0.013
#1.3	R	N	300	300	0.554
#1.4	R	O	300	300	0.554
#2.1	1	N	300	85	0.003
#2.2	1	O	300	85	0.003
#2.3	R	N	300	85	0.173
#2.4	R	O	300	85	0.173
#3.4	R	O	120	85	0.431

TABLE 4.1 – Blob # : simple (1) ou random (R). THI : oui (O) ou non (N). Richesse globale, Φ. Les températures (T_{CH_4} et T_{O_2}) sont données en Kelvin. $P_{ch} = 10$ MPa.

4.2.1.2 Deuxième configuration : $U_{conv} \neq 0$ m · s^{-1}

Pour la deuxième configuration à l'étude, une couche de mélange réactive CH_4/O_2 est simulée en configuration *splitter-plate*. La lèvre séparant le méthane de l'oxygène a une épaisseur $h = 0.3$ mm. Le méthane est injecté avec une température $T_{CH_4} = 120$ K et l'oxygène avec une température $T_{O_2} = 85$ K, la pression est de $P = 5.4$ MPa comme dans le cas d'injection doublement transcritique (T1) de l'expérience de Singla *et al.* [347]. Comme dans [325], la vitesse convective $U_{conv} = 8.7$ m · s^{-1} est calculée comme suit :

$$U_{conv} = \frac{U_{O_2} + (\rho_{CH_4}/\rho_{O_2})^{1/2} U_{CH_4}}{1 + (\rho_{CH_4}/\rho_{O_2})^{1/2}} . \tag{4.4}$$

Les profils de vitesses sont donnés dans la Fig. 4.6. Un maillage uniforme avec une résolution $\Delta_{x_i} = 2$ μm est utilisé. L'EoS SRK [358] est utilisée. Les propriétés de transport haute pression sont évaluées avec les méthodes de Chung [53] et Takahashi [367].

4.2.2 Allumage

4.2.2.1 Première configuration : $U_{conv} = 0$ m · s^{-1}

Contrairement au chapitre 3 où des gaz brûlés étaient mis conjointement avec un point chaud ("hs" pour *hot spot*) en température, ici n'est considéré qu'un point chaud en température. Le profil de température imposé suit une tangente hyperbolique fonction du rayon r :

$$T(r) = \frac{T^{hs} - T_{O_2}}{2} \left[1 - \tanh \left(r - \frac{r^{hs}_{max} - r^{hs}_{min}}{\delta^{hs}} \right) \right] + T_{O_2} , \tag{4.5}$$

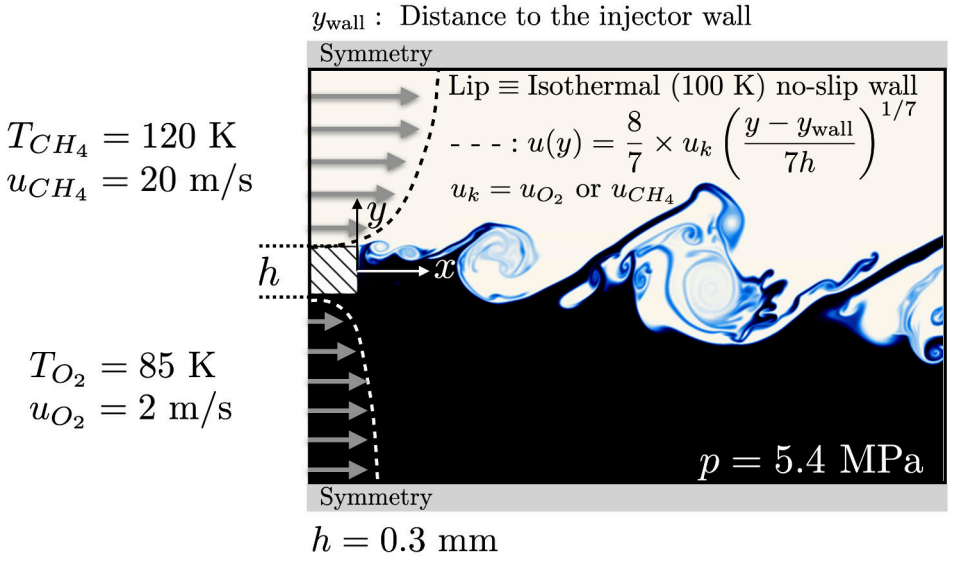


FIGURE 4.6 – Conditions aux limites de la configuration *splitter-plate* étudiée. Le champ de fraction de mélange (blanc-bleu pour CH_4 et noir pour O_2) obtenu avec SiTCom-B est également affiché. Le domaine de calcul est de $15h$ dans la direction y et de $20h$ dans la direction x.

avec

$$r = \sqrt{(x - x^{\text{hs}})^2 + (y - y^{\text{hs}})^2 + (z - z^{\text{hs}})^2} \ , \tag{4.6}$$

ainsi que $T_{O_2} = 85$ ou 300 K, selon la température initiale de l'oxygène, $T^{\text{hs}} = 3000$ K et

$$\delta^{\text{hs}} = \frac{r^{\text{hs}}_{\text{max}} - r^{\text{hs}}_{\text{min}}}{5} \ , \quad r^{\text{hs}}_{\text{min}} = 0 \text{ m} \quad \text{et} \quad r^{\text{hs}}_{\text{max}} = \frac{L_{\text{box}}}{90} \ . \tag{4.7}$$

La position du point chaud est paramétrée grâce aux termes x^{hs}, y^{hs} et z^{hs}. Le point chaud est localisé légèrement sur le côté droit de la poche de méthane lorsque celle-ci est unique ou quasiment en plein centre du domaine lorsque plusieurs poches de méthane sont considérées. La Fig. 4.7 illustre la procédure d'allumage dans les différents cas.

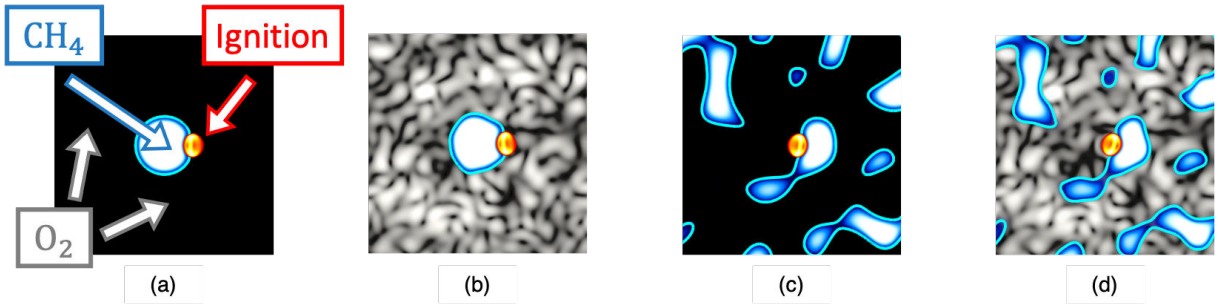


FIGURE 4.7 – Illustration de la procédure d'allumage dans les différents cas. Taux de dégagement de chaleur superposé avec le champ de fraction de mélange et de vorticité quand de la THI est également ajoutée dans le domaine. En bleu cyan est représentée la ligne stœchiométrique. (a) Une seule poche de méthane sans THI, (b) une seule poche de méthane avec THI, (c) plusieurs poches de méthane sans THI et (d) plusieurs poches de méthane avec THI.

4.2.2.2 Deuxième configuration : $U_{\text{conv}} \neq 0$ m · s^{-1}

Afin d'allumer le mélange CH_4/O_2, un point chaud est ajouté après environ 2 temps de passage d'écoulement à froid, à une position de $2h$ de la lèvre de l'injecteur. Le même profil de température que dans l'Éq. (4.5) est utilisé, mais cette fois-ci la largeur du point chaud est d'environ $1h$. La Fig. 4.8 met en évidence la position du point chaud utilisé pour l'allumage de la configuration *splitter-plate*. Notons que la couche de mélange à froid n'est à ce moment-là probablement pas parfaitement établie et que le champ instantané pourrait très probablement évoluer, en particulier derrière la lèvre de l'injecteur. Néanmoins, cette étude portant uniquement sur la propagation de flammes quelques instants après l'allumage sur une configuration *splitter-plate* et non sur une couche de mélange réactive parfaitement établie, l'importance du champ initial utilisé pour l'allumage est moindre.

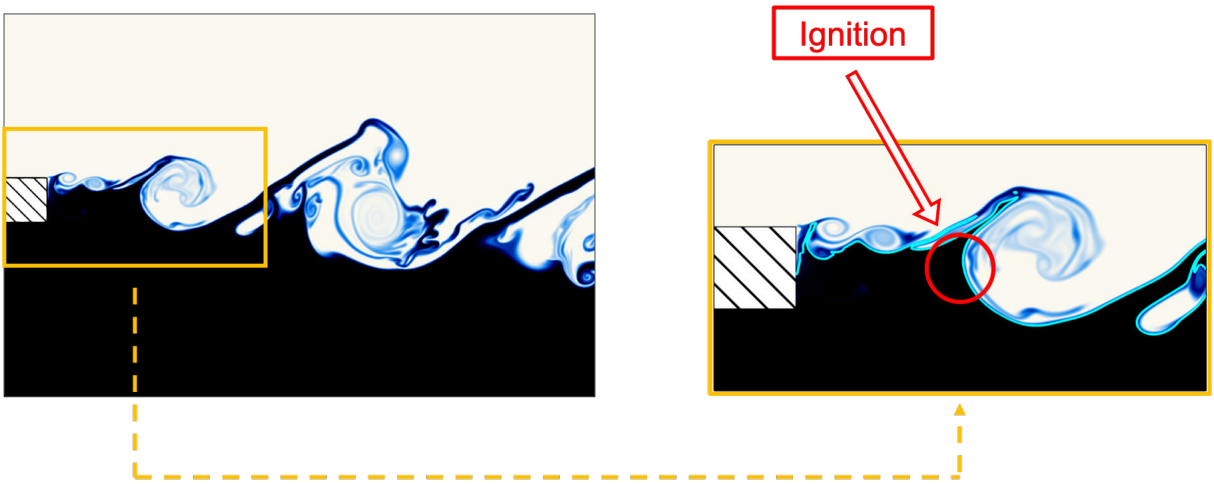


FIGURE 4.8 – Position du point chaud dans la configuration *splitter-plate*.

4.3 Résultats et discussion

4.3.1 Première configuration : $U_{\text{conv}} = 0$ m · s^{-1}

4.3.1.1 Résultats préliminaires

Cas d'un blob de CH_4 et sans THI

L'absence de vitesse convective dans l'écoulement permet l'analyse détaillée des structures et des modes de propagation des flammes supercritiques comme le montre la Fig. 4.9 pour chaque cas de la Tab. 4.1.

Dans le cas #1.1, une fois que le mélange réactif est allumé, une flamme jumelle triple se propage le long de la poche de méthane. La flamme triple est constituée d'une branche de diffusion localisée le long de la stœchiométrie, une branche de prémélange riche côté méthane et une branche de prémélange pauvre côté oxygène, comme le montre en détail la Fig. 4.10 à l'instant $t = 3.0$ μs. Les deux flammes triples sont parfaitement symétriques et suivent la ligne stœchiométrique le long de la courbure de la poche de méthane. Quand les deux flammes se

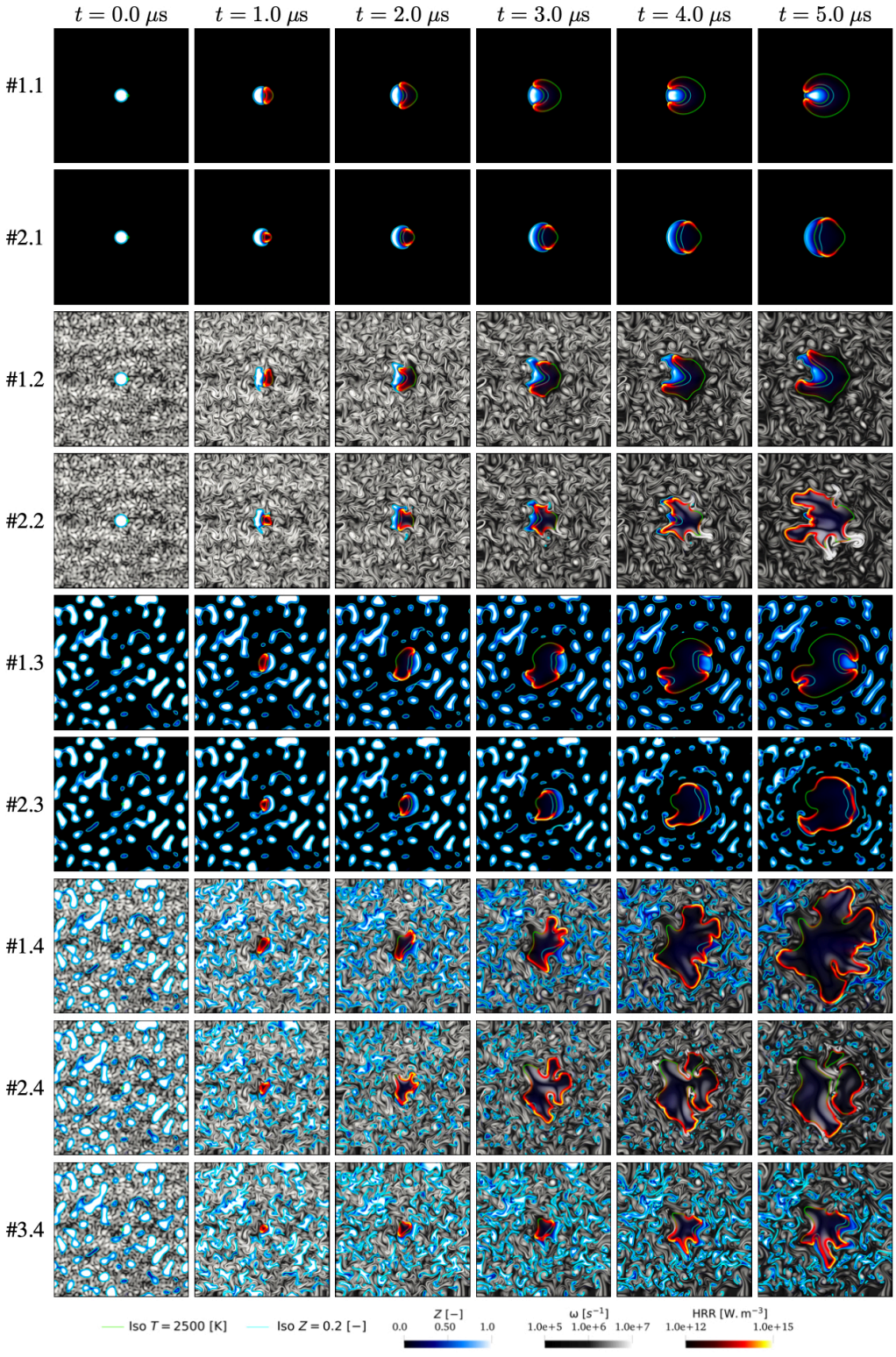


FIGURE 4.9 – Évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur (HRR) superposé avec la vorticité (ω) et la fraction de mélange (Z). Iso-lignes : Z_{st} en bleu cyan, $T = 2500$ K en vert. L'intégralité du domaine de simulation est montrée.

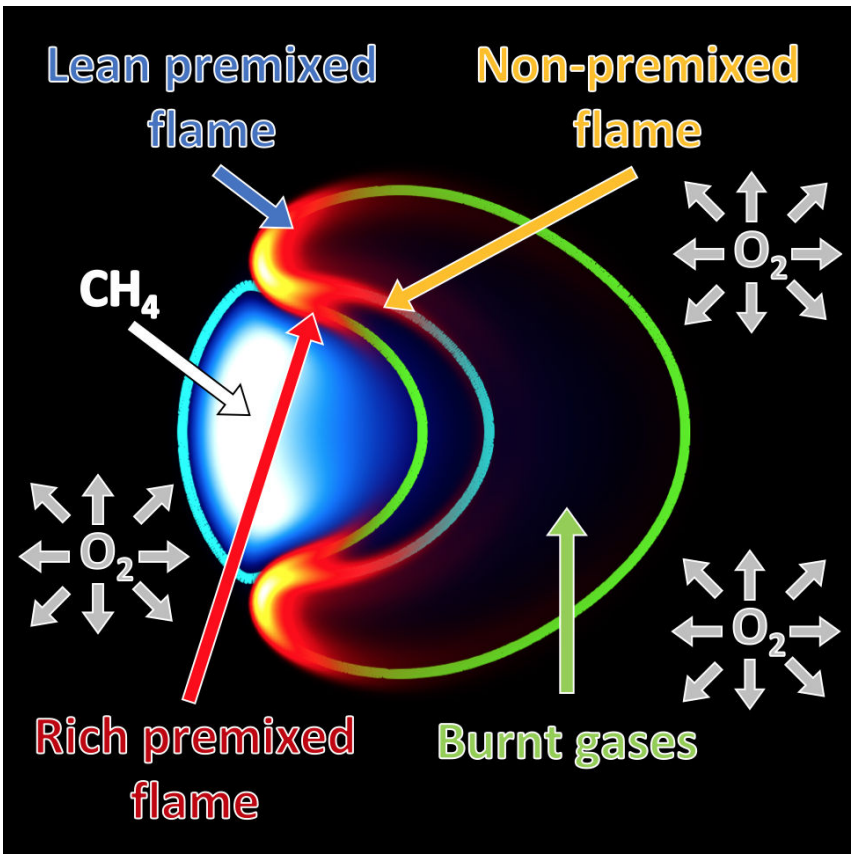


FIGURE 4.10 – Propagation de flame triple dans le cas #1.1, illustrée par les champs de HRR (jaune-rouge) et de fraction de mélange Z (bleu-blanc) ($t = 3.0$ μs). Iso-lignes : stœchiométrie en cyan et $T = 2500$ K en vert.

rejoignent, une extinction se produit puisque la poche de méthane se retrouve alors isolée de l'oxygène par une couche de gaz brûlés (Fig. 4.11, première ligne).

En descendant la température de l'oxygène de 300 K à 85 K, la topologie de flamme change, puisque la masse volumique de l'O_2 passe d'environ 130 kg $\cdot$ m^{-3} à 1230 kg $\cdot$ m^{-3}, la masse volumique du méthane restant inchangée avec $\rho_{CH_4} = 75$ kg $\cdot$ m^{-3}. Ainsi, les gaz brûlés qui pouvaient s'échapper de chaque côté dans le cas #1.1 ($\rho_{O_2} \simeq 1.7\rho_{CH_4}$ à $T = 300$ K), sont maintenant contraints par la haute masse volumique du LOx, et donc ils vont naturellement vers la poche de méthane ($\rho_{O_2} \simeq 16\rho_{CH_4}$). Néanmoins, une flamme triple se développe toujours, mais la branche de prémélange riche joint rapidement la flamme de diffusion et la structure de flamme semble plus compacte que dans le cas #1.1. La poche de méthane prend la forme d'un croissant de lune avec une flamme jumelle à ses deux extrémités. Ces deux flammes s'éloignent l'une de l'autre de manière quasi parfaitement symétrique. Les gaz brûlés produits se retrouvent alors dans une configuration à contre-courant, poussant et déformant la poche de méthane. A l'instant $t = 5.0$ μs, les flammes commencent à se pencher vers ce qui reste du méthane et le scénario du cas #1.1 est retrouvé. Evidemment, un tel comportement a des répercutions sur la vitesse de déplacement de la flamme qui est plus grande dans le cas #1.1 ($S_d \simeq 7$ m $\cdot$ s^{-1}) que dans le cas #2.1 ($S_d \simeq 5$ m $\cdot$ s^{-1}), sachant que la vitesse laminaire de flamme prémélangée stœchiométrique à la même pression et pour une température initiale de 300 K est environ

($S_L \simeq 2.2\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$) [236, 310].

Un cas additionnel avec $T_{CH_4} = 120$ K et $T_{O_2} = 85$ K a également été simulé (appelé cas #3.1). Dans ce cas, la masse volumique du méthane monte jusqu'à environ 420 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ ($\rho_{O_2} \simeq 2.9\rho_{CH_4}$). La Fig. 4.11 illustre bien la différence de comportements entre les cas #1.1, #2.1 et #3.1. Dans le dernier cas, le méthane est de nouveau contraint par le LOx très dense et les gaz brûlés ont tendance à pousser et venir concentrer le méthane sur le côté gauche, à l'opposé de la formation des gaz brûlés. Toutefois contrairement au cas #2.1, la masse volumique du méthane étant bien plus importante dans le cas #3.1, ce phénomène est moins marqué. Par ailleurs, la masse volumique du méthane étant plus importante, la quantité de méthane disponible l'est également, d'où le fait qu'au même instant ($t = 7.0$ μs), la quantité de méthane restante dans le cas #3.1 est d'autant plus importante.

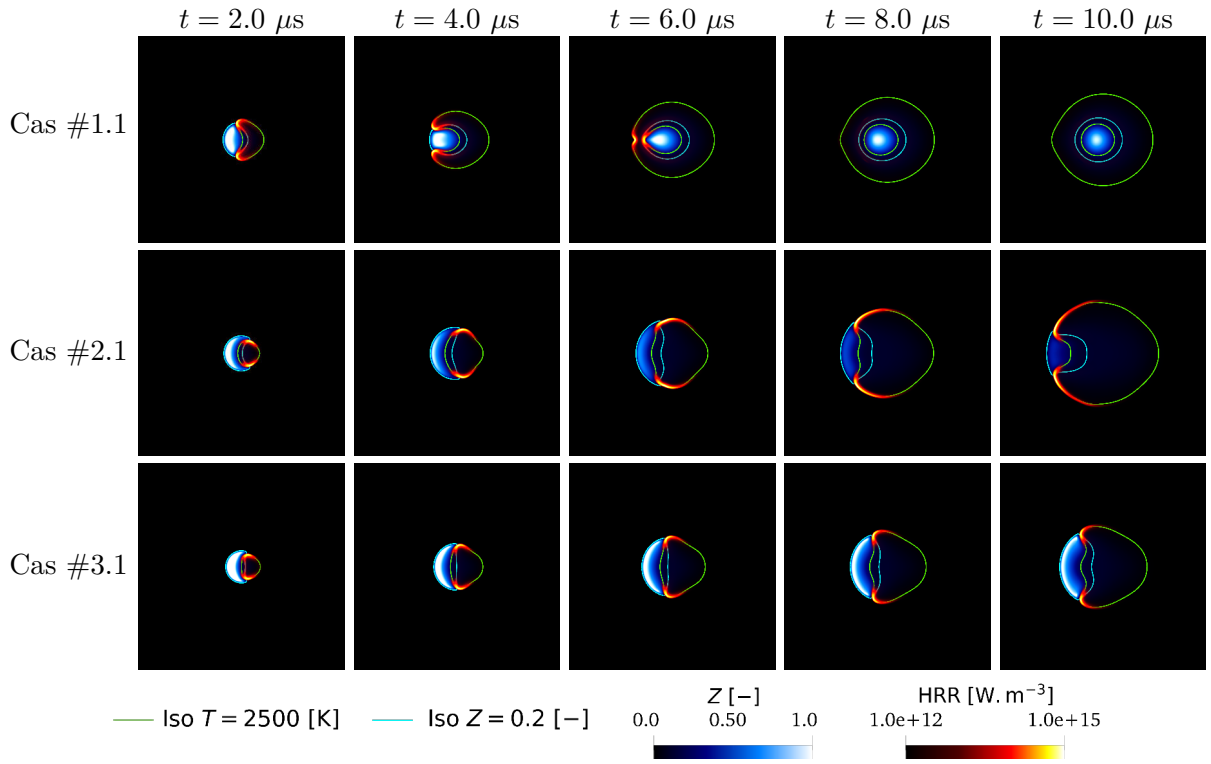


FIGURE 4.11 – Évolution du champ de taux de dégagement de chaleur (HRR) superposé avec le champ de fraction de mélange pour les cas #1.1, #2.1 et #3.1. En cyan est représentée la ligne stœchiométrique $Z = 0.2$. En vert est représentée l'iso-ligne $T = 2500$ K.

Si l'on compare maintenant la structure de flamme grâce à la Fig. 4.11, la présence de la branche de diffusion semble beaucoup moins évidente dans les cas #2.1 et #3.1 que dans le cas #3.1.

En effet, dans le cas #1.1 le méthane et l'oxygène ont des faibles masses volumiques. La poche de méthane reste assez concentrée sur elle même du début à la fin de la simulation. Dans le cas #2.1, le méthane a une masse volumique relativement faible par rapport à l'oxygène. La tête de la flamme triple dévie une partie du méthane qui vient diffuser et se mélanger à l'oxygène afin d'alimenter la branche supérieure de la flamme du haut (respectivement la branche inférieure de la flamme du bas), qui correspond à une branche de prémélange pauvre. À mesure que la flamme progresse, le méthane se diffuse et se mélange dans l'oxygène, favorisant le régime de

combustion prémélangé. L'étalement de la poche de CH_4 se traduit également par une diminution du gradient de CH_4 en amont de la flamme, ce qui tend à intensifier les branches de prémélanges au détriment des branches de diffusion et à augmenter l'ouverture de la flamme triple, à l'image des résultats de Kim *et al.* [158] présentés dans la Fig. 4.2.

On remarque également que les branches de prémélanges, en particulier côté pauvre, semblent bien plus longues dans le cas #2.1. Toutefois, il est bon de noter que pour la réalisation de la Fig. 4.11, afin d'afficher simultanément les champs de HRR et de fraction de mélange, ces deux champs sont affichés avec une certaine opacité qui décroit fortement vers les valeurs minimales des variables considérées, cachant de fait une partie des champs et pouvant introduire un biais dans l'interprétation de la forme de la flamme. C'est pourquoi nous pouvons nous intéresser à la Fig. 4.12 qui affiche uniquement le taux de dégagement de chaleur dans son intégralité, sans opacité. Il devient alors évident que dans les trois cas, des structures de flammes triples sont toujours bien présentes et qu'une branche de diffusion est toujours présente. Cependant, on remarque également que l'intensité du taux de dégagement de chaleur des branches de prémélange est plus forte, en particulier dans le cas #2.1.

Enfin, la différence observée entre les Fig. 4.11 et 4.12 sur la structure de la flamme montre qu'en fonction du post-traitement réalisé, on peut facilement passer à côté d'une partie de la flamme. Il est ainsi évident qu'expérimentalement, suivant le niveau de précision des méthodes employées et du seuillage effectué, on pourrait ne voir qu'un front de flamme unique et relativement diffus (capteur saturé) ou à l'inverse ne pas voir une partie de la flamme au vue des disparités sur le taux dégagement de chaleur qui varie très rapidement de plusieurs ordres de grandeurs (de 1×10^{12} à 1×10^{15} $\mathrm{W \cdot m^{-3}}$ par exemple). Réussir à identifier expérimentalement de telles structures de flammes triples sur de si petites tailles de domaines, en particulier dans le cas d'écoulements turbulents est donc un challenge difficile à relever, éventuellement accessible par la simulation numérique directe (DNS) avec un traitement adapté.

Autres cas

Un comportement similaire est observé quand une distribution aléatoire de méthane est utilisée comme champ initial (cas #1.3 et #2.3). Selon la position du point chaud, la procédure d'allumage génère une ou plusieurs flammes triples qui peuvent s'éteindre ou s'étendre à d'autres poches de méthane. Ajouter de la turbulence au cas d'une seule poche de méthane (cas #1.2 et #2.2) amène à un scénario très proche : une flamme jumelle triple se développe et consomme le méthane. La poche de méthane ainsi que les gaz brulés produits par la combustion sont fortement affectés par la turbulence, ce qui permet à la flamme de consommer davantage, voir même l'intégralité du combustible. Ce phénomène est particulièrement visible dans le cas #2.2 avec $T_{O_2} = 85$ K où après environ 5 μs, le méthane a presque disparu grâce à l'ajout de turbulence, contrairement au cas #2.1 sans turbulence. L'ajout de THI dans le cas d'une distribution aléatoire de méthane (cas #1.4 et #2.4) met en évidence des structures de flammes triples, mais également de flammes prémélangées turbulentes, puisque la turbulence a tendance à mélanger le combustible et l'oxydant. Des extinctions locales sont plus nombreuses dans le cas où la température du LOx est de $T_{O_2} = 85$ K (cas #2.4), puisque la richesse globale (Φ) est moins importante que dans le cas où $T_{O_2} = 300$ K (cas #1.4), la quantité totale de méthane disponible dans le volume du domaine simulé étant plus faible. En outre, le cas #3.4 semble relativement proche du cas #2.4, sauf que les flammes se développent plus lentement à

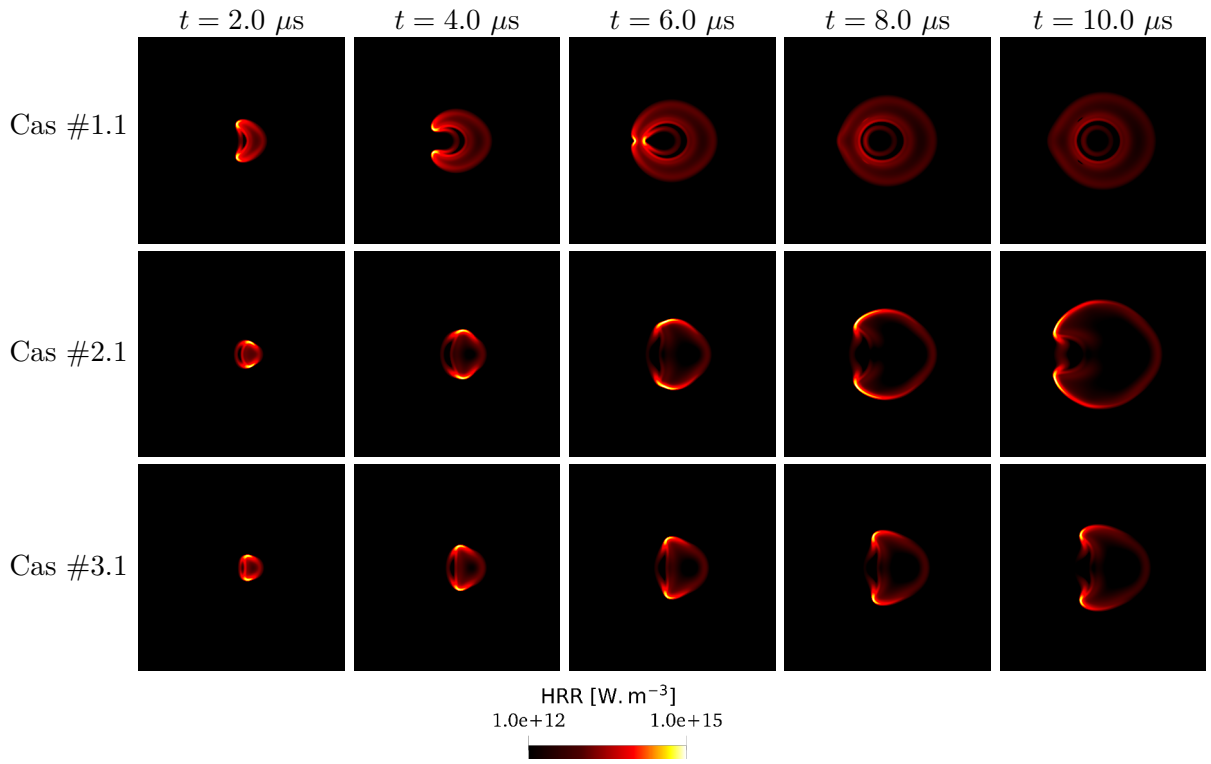


FIGURE 4.12 – Évolution du champ de taux de dégagement de chaleur (HRR) pour les cas #1.1, #2.1 et #3.1.

cause de la forte masse volumique du méthane. Toutefois, le cas #3.4 semble mettre davantage en évidence des structures de flammes triples tout au long de la simulation, là où dans le cas #2.4 les flammes triples semblent rapidement voir leur branches fusionner et transiter vers des structures de flammes prémélangées turbulentes essentiellement pauvres.

4.3.1.2 Comparaison des mécanismes chimiques

La performance du mécanisme chimique réduit est montré en détail dans la Fig. 4.13 par comparaison avec le mécanisme chimique détaillé RAMEC dans le cas #1.2. Partant des mêmes conditions, les flammes résultantes sont très similaires, excepté que tout se passe comme si le mécanisme chimique réduit avait un léger temps de retard. Ces observations sont consistantes avec les conclusions du chapitre 3, où les flammes prémélangées turbulentes obtenues avec le mécanisme chimique réduit était décalées dans le temps à cause d'une légère différence au niveau du temps d'auto-allumage. On retrouve ce phénomène dans tous les cas simulés avec la chimie détaillée, i.e. #1.1, #1.2, #1.3, #1.4 et #2.2, en témoigne la Fig. 4.14.

La comparaison entre les deux mécanismes est également étudiée à travers l'évaluation de la longueur de flamme $L_f = \int_S |\nabla c| \, dS$ (inspiré de [331]), où c est la variable de progrès normalisée. $c = Y_c / Y_c^{\max}$ avec $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2}$, et $Y_c^{\max}$ est la valeur maximale de Y_c dans l'ensemble du domaine simulé et pour tout instant. L'évolution temporelle de L_f est montrée dans la Fig. 4.15 pour les cas #1.1 à #1.4 et #2.2. Bien qu'il y ait un léger décalage temporel déjà mentionné dans le chapitre 3 de cette thèse, l'évolution de la longueur de flamme est très similaire entre les deux schémas cinétiques.

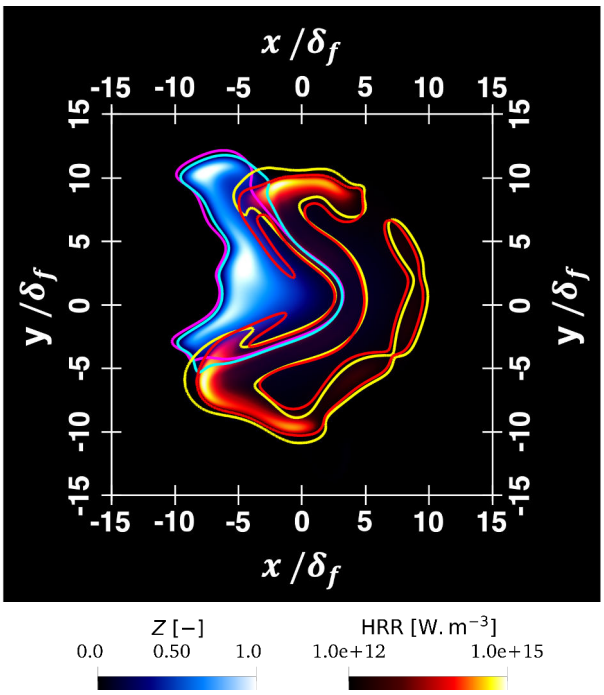


FIGURE 4.13 – Mécanisme chimique réduit vs. mécanisme chimique détaillé dans le cas #1.2 à $t = 3.0$ μs. Iso-ligne HRR $= 1.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} pour RAMEC-17S-44R (rouge) et RAMEC (jaune). Ligne stœchiométrique pour RAMEC-17S-44R (cyan) et RAMEC (magenta). Zoom sur la structure de flamme avec $\delta_f = 2$ μm, l'épaisseur de flamme laminaire prémélangée à 10 MPa.

L'écart relatif moyen sur L_f entre les deux mécanismes a été évalué et il n'excède jamais plus de 10 % sur l'ensemble des cas étudiés (voir Fig. 4.15). De la même façon, le maximum de température est très proche entre les deux schémas (< 1 %), la différence sur le dégagement de chaleur n'excède pas 10 % et la différence sur la quantité de CH_4 restante à l'instant $t = 5.0$ μs est inférieure à 8 % (voir Tab. 4.2).

Case	$\Delta\overline{T_{max}}^t$ [%]	$\Delta\overline{\text{HR}}^t$ [%]	$\Delta\overline{L_f}^t$ [%]	$\Delta m_{\text{CH}_4}^{t_f}$ [%]
#1.1	0.37	8.65	8.71	7.32
#1.2	0.49	7.30	6.87	6.49
#1.3	0.37	9.28	9.63	3.45
#1.4	0.43	7.69	7.43	7.22
#2.2	0.52	4.63	4.69	2.28

TABLE 4.2 – Résumé des écarts relatifs moyens obtenus entre les deux mécanismes chimiques pour le maximum de température (seconde colonne), la partie positive du dégagement de chaleur (troisième colonne), la longueur de flamme (quatrième colonne) et la quantité de CH_4 restante à l'instant $t = 5.0$ μs (cinquième colonne).

La Tab. 4.3 montre que le gain CPU offert par la réduction de la chimie est de presque un facteur 8, résultat similaire à ce qui avait été trouvé dans le chapitre 3.

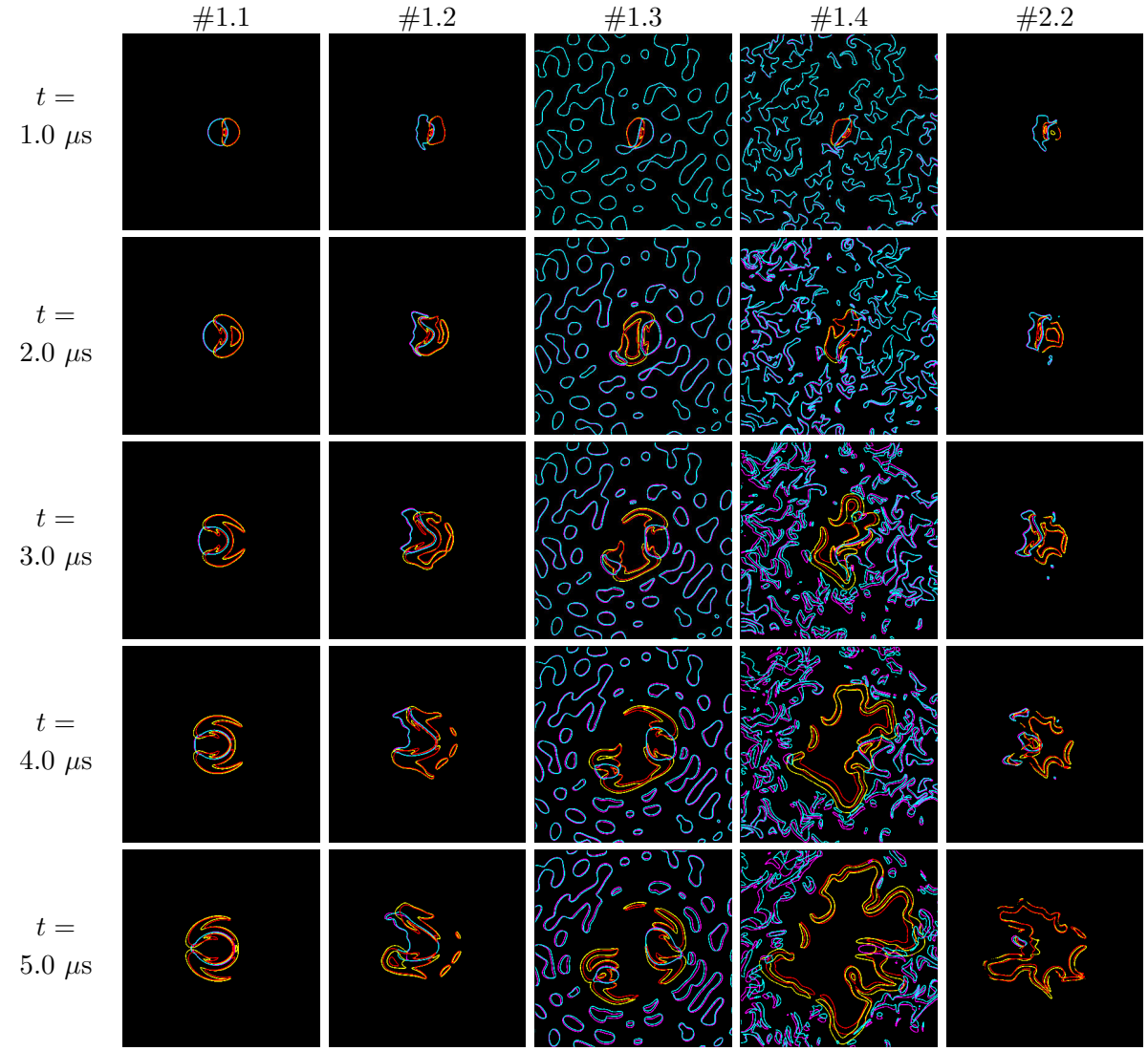


FIGURE 4.14 – Mécanisme chimique réduit vs. mécanisme chimique détaillé à différents instants. Iso-ligne HRR $= 1.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} pour RAMEC-17S-44R (rouge) et RAMEC (jaune). Ligne stœchiométrique pour RAMEC-17S-44R (cyan) et RAMEC (magenta).

Case	R_{it}	$R_{CPU/it}$	R_{CPU}
#1.1	4.12	1.89	7.79
#1.2	4.25	1.79	7.61
#1.3	4.42	1.75	7.74
#1.4	4.32	1.78	7.69
#2.2	4.12	1.94	7.99

TABLE 4.3 – Ratio des temps CPU sur le nombre d'itérations (N_{it}), le temps CPU (t_{CPU}, pour le mécanisme chimique détaillé (det) et réduit (red). $R_{it} = N_{it}^{det}/N_{it}^{red}$, $R_{CPU/it} = (t_{CPU}/N_{it})^{det} / (t_{CPU}/N_{it})^{red}$ et $R_{CPU} = t_{CPU}^{det}/t_{CPU}^{red} = R_{it} \times R_{CPU/it}$.

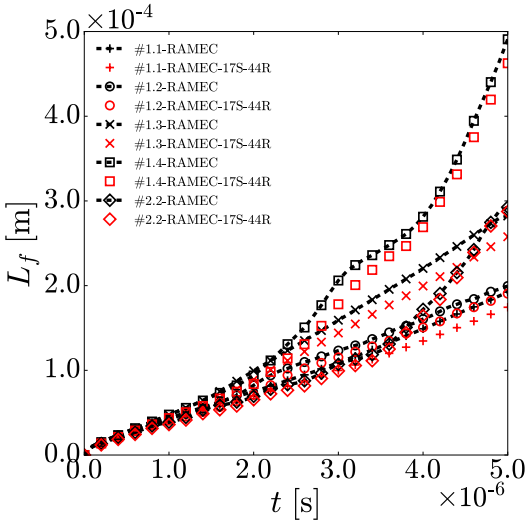


FIGURE 4.15 – Évolution temporelle de la longueur de flamme entre le mécanisme chimique réduit et le mécanisme chimique détaillé.

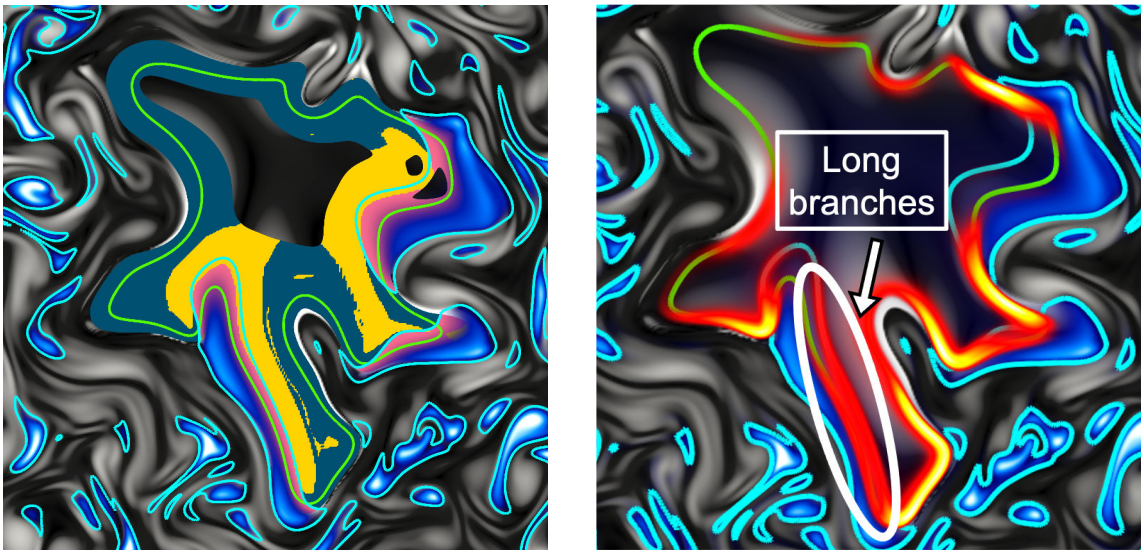
4.3.1.3 Régimes de flammes

Lors de l'allumage du mélange hétérogène de méthane et d'oxygène, une flamme triple se développe, se propage, peut s'éteindre ou bien devenir un simple front de flamme prémélangé (Fig. 4.9), et il devient alors nécessaire de distinguer la contribution de chaque régime de combustion. On peut alors recourir à l'index de flamme F.I., introduit par l'Éq. (2.144) et rappelé ici dans l'Éq. (4.8), qui permet de différencier une flamme prémélangée pauvre (F.I. $= -1.0$), riche (F.I. $= 1$) et une flamme de diffusion (F.I. $= 0$) [189],

$$\text{F.I.} = \frac{1}{2}\frac{Z - Z_{\text{st}}}{|Z - Z_{\text{st}}|}\left(1 + \frac{\nabla Y_{\text{CH}_4}.\nabla Y_{\text{O}_2}}{|\nabla Y_{\text{CH}_4}.\nabla Y_{\text{O}_2}|}\right) . \tag{4.8}$$

La Fig. 4.16(a) met alors en évidence la distribution de chaque régime de combustion dans le cas #3.4 au niveau des zones de combustion, à l'instant $t = 5.0$ μs. On voit que les trois régimes de combustion sont présents, mais que c'est le régime de combustion prémélangé pauvre qui occupe le plus d'espace à cet instant.

Par ailleurs, les branches des flammes triples peuvent être plus ou moins longues. En effet, on peut notamment constater dans le cas #3.4 la présence de branches de diffusion et de prémélange particulièrement longues et très proches les unes des autres comme le montre la Fig. 4.16(b), phénomène que l'on observe pas forcément dans les autres cas. Ce phénomène est probablement lié au fait qu'à la fois un fort gradient de CH_4 est localement présent en amont de la flamme, mais également que le gradient de masse volumique est élevé. En effet, sur une courte distance la quantité de méthane et d'oxygène disponible étant alors très importante, cela permet à deux fronts de flammes de natures différentes mais très proches l'un de l'autre, de coexister. Tout le méthane n'a pas le temps de brûler au travers du front de flamme prémélangé riche, se diffuse à travers l'oxygène disponible derrière ce premier front et vient brûler sous la forme d'une flamme de diffusion juste après. Une branche de prémélange pauvre est également présente avec une



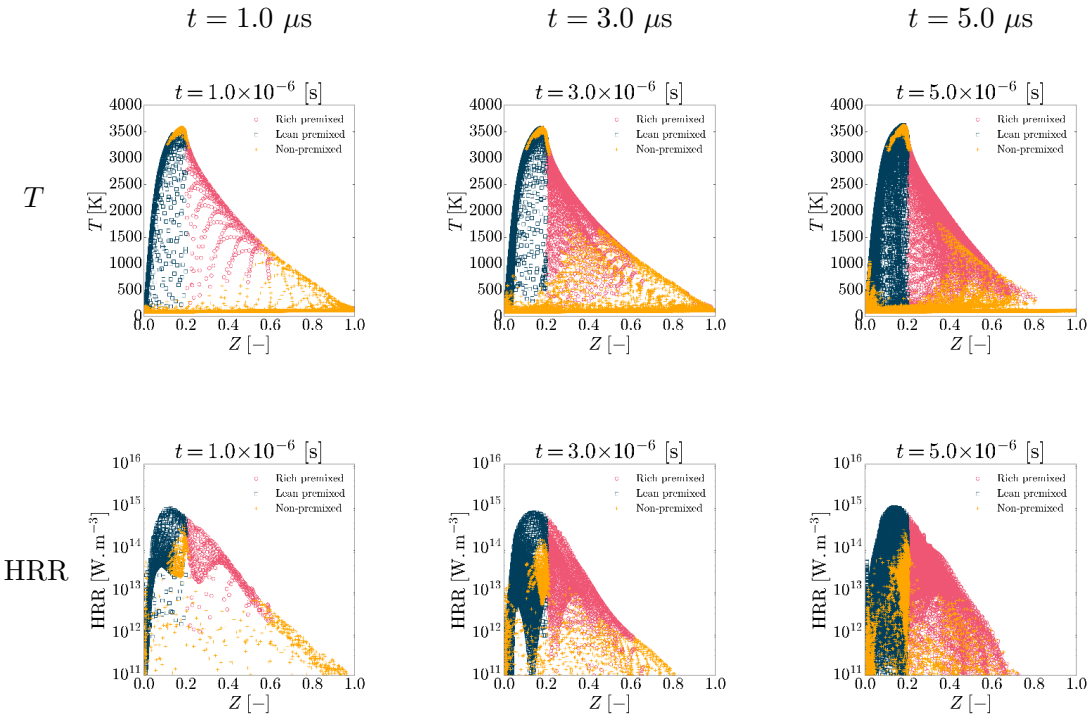
(a) Index de flamme (b) Structure de flamme

FIGURE 4.16 – Champs d'index de flamme (F.I.) et mise en évidence des structures de flammes et des différentes longueurs des branches qui les constituent pour le cas #3.4 à l'instant $t = 5.0$ μs. (a) En bleu est représentée le régime de combustion prémélangée pauvre, en rose celui de combustion prémélangée riche et en jaune celui de combustion non-prémélangée (voir également la Fig. 4.9). (b) Superposition des champs de HRR (jaune-rouge), de fraction de mélange Z (blanc-bleu) et de vorticité (noir-blanc). Iso-lignes : stœchiométrie en cyan et $T = 2500$ K en vert.

forte intensité en terme de dégagement de chaleur et fait le lien avec le reste de la flamme dans le domaine de calcul. On obtient alors une flamme triple très étirée, d'une nature relativement complexe. C'est peut-être ce genre de phénomène qui expliquerait pourquoi un double front de flamme est observé dans les experiences de Singla *et al.* [347].

Comme montré dans la Fig. 4.17 pour le cas #3.4 (voir pour les autres cas) : l'espace de composition en fraction de mélange (Z) est entièrement impacté par le développement de la flamme avec un maximum de température et un maximum du taux de dégagement de chaleur proches de la stœchiométrie ($Z_{st} \simeq 0.2$). On voit également sur cette figure qu'à l'instant $t = 1.0$ μs, pour $Z \in [0.05,\ 0.4]$ environ, HRR $\in [1 \times 10^{13},\ 1 \times 10^{15}]$ W$\cdot$m^{-3} alors qu'à l'instant $t = 1.0$ μs sur la même plage de Z, le HRR est bien plus étalé et couvre des valeurs de 1×10^{11} W$\cdot$m^{-3} (voir même plus bas) à 1×10^{15} W$\cdot$m^{-3}. On peut expliquer ce phénomène par le fait qu'au début, une structure de flamme triple avec trois branches et produisant un fort taux de dégagement de chaleur est bien identifiée, alors qu'au cours du temps la turbulence et le mouvement de la flamme viennent diluer le méthane dans l'oxygène et mélanger une partie des gaz brûlés avec les gaz frais, complexifiant l'écoulement et la structure de la flamme en autorisant un plus large spectre de flammes. On a alors une multitude de régimes de combustion possibles.

Afin de mieux traquer la contribution de chaque régime de flamme, le taux de dégagement de chaleur (HRR) conditionné à l'index de flamme est intégré sur l'intégralité du domaine de calcul, afin d'obtenir le dégagement de chaleur (HR) de chaque régime de flamme. Seulement les



Cas #3.4

FIGURE 4.17 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #3.4. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.

valeurs plus élevées que 1 % du maximum de HRR pour chaque flammes sont considérées pour le calcul de HR. La surface de chaque régime de flamme (Σ_{HR}) est également évaluée. L'évolution temporelle de HR et de Σ_{HR} est tracée dans la Fig. 4.18 pour le cas #3.4.

Dans ce cas, le régime de combustion prémélangé pauvre domine les deux autres, ce qui n'est finalement pas si surprenant, puisque la richesse globale est représentative d'une condition prémélangée pauvre ($\Phi = 0.431$). Toutefois, même si les régimes de combustion prémélangé riche et non-prémélangé représentent une part moins importante du dégagement de chaleur total produit au cours de la simulation, ils ne sont pas négligeables et en représentent tout de même 30 %. De plus, si l'on regarde la surface occupée par les trois types de flammes (Σ_{HR}), la combustion prémélangée pauvre représente un peu moins de la moitié de la surface totale de la flamme, la combustion prémélangée riche et non-prémélangée se partageant le reste de la surface de manière équitable.

Finalement, la Fig. 4.19 montre le dégagement de chaleur temporel moyen ($\overline{\overline{HR}}^t$) pour chaque régime de combustion et pour tous les cas de la Tab. 4.1. Le régime de combustion prémélangé pauvre est le régime privilégié, en particulier quand la THI est activée (cas #1.4, 2.2, 2.4 et 3.4). En effet, le mélange ayant des conditions globales pauvres pour tous les cas (voir Φ dans la Tab. 4.1), la turbulence, qui favorise le mélange entre le combustible et l'oxydant, vient fortement diluer les poches de méthane dans l'oxygène. Ce comportement est exacerbé quand la température du LOx est égale à 85 K (cas #2.2 et #2.4). Par exemple, le dégagement de chaleur du cas #2.4 est d'environ 1.5 fois le dégagement de chaleur du cas #2.3, mais presque uniquement le régime de combustion prémélangé pauvre semble être affecté. Finalement, la quantité de HR

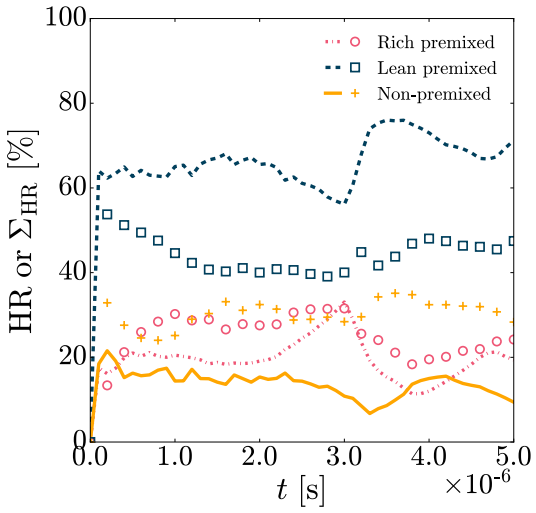


FIGURE 4.18 – Évolution temporelle du dégagement de chaleur (HR, lignes) et de la couverture spatiale (surface) de chaque régime de flamme (Σ_{HR}, symboles) pour les trois régimes de combustion (cas #3.4) en %.

produite par les flammes de diffusion est relativement la même dans presque tous les cas ayant les mêmes conditions thermodynamiques initiales (i.e. cas de #1.1 à #1.4 et de #2.1 à #2.4). L'effet de la turbulence ou de la richesse globale Φ sur les flammes non-prémélangées est ainsi limité, contrairement à l'effet de la température initiale (i.e. masse volumique) du méthane et de l'oxygène.

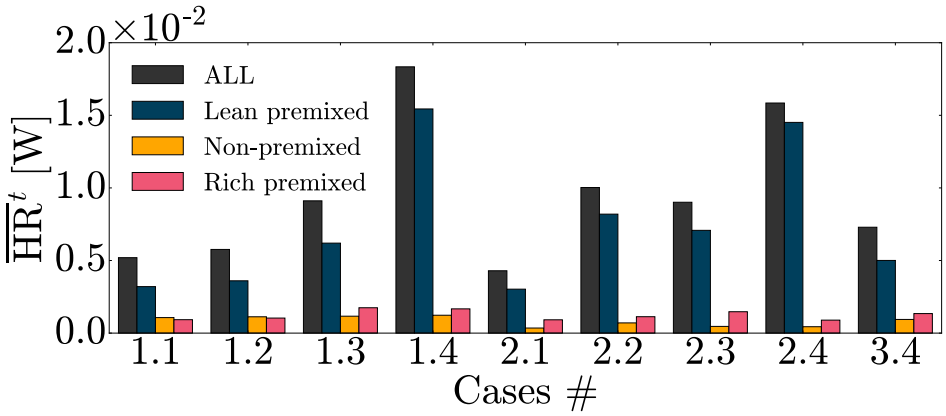


FIGURE 4.19 – Histogramme montrant le dégagement de chaleur moyen ($\overline{HR}^t$) pour chaque régime de combustion et pour chaque cas présent dans la Tab. 4.1. ALL correspond au dégagement de chaleur total $\overline{HR}^t$ (somme du HR sur les trois régimes de combustion).

4.3.2 Deuxième configuration : $U_{\text{conv}} \neq 0$ m · s^{-1}

Comme attendu (Fig. 4.20) après l'étude de la première configuration, des flammes triples se développent dans toutes les directions, consommant le mélange de méthane et d'oxygène. Un scénario similaire aurait certainement été trouvé si l'allumage avait été positionné plus en aval de l'écoulement. Une structure en forme de doigts (FLS = *Finger-Like Structure*) est visible juste derrière la lèvre de l'injecteur rempli de gaz brulés. À la fin de la FLS, deux fronts de flammes prémélangés entrent en collision, formant une poche de gaz brulés qui continue de brûler (*diffusion flame islands* [232]). De même, une partie de la flamme est arrachée de la flamme stable près de la lèvre de l'injecteur en raison d'un cisaillement excessif. Sur la partie supérieure de la flamme, la couleur bleue indique qu'il reste encore de l'oxygène côté méthane, ce qui signifie qu'un front de prémélange riche est actif. Une telle situation perdurera tant que l'on injectera de l'oxygène côté méthane en amont de la tête de la flamme. Si celle-ci se stabilise très près de la lèvre de l'injecteur, c'est-à-dire dans la zone de recirculation du fluide, ce front de flamme riche disparaîtra certainement. Sinon, il persistera sur une distance qui dépendra de la quantité de O_2 s'échappant du côté CH_4.

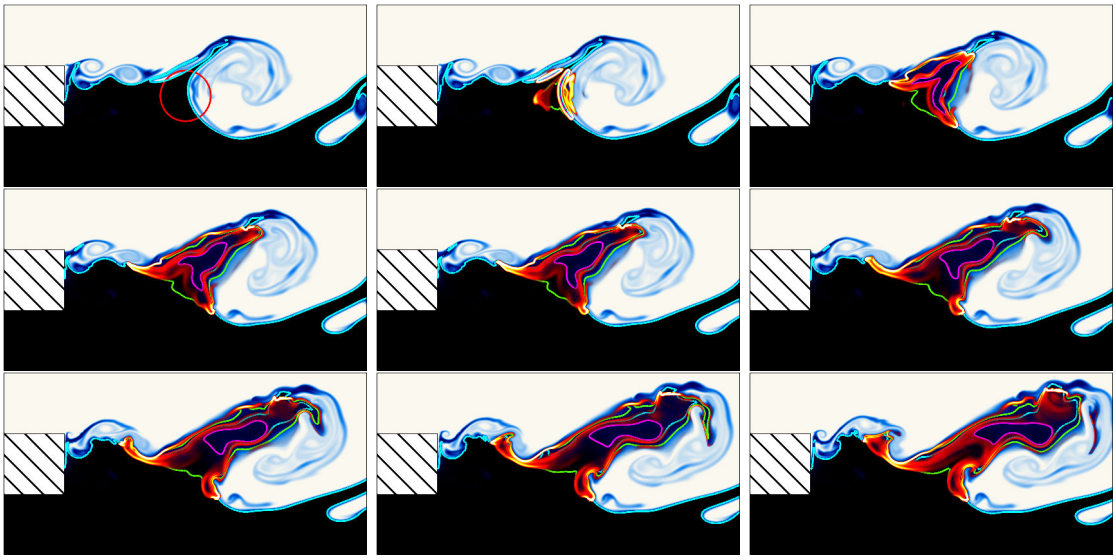


FIGURE 4.20 – Évolution temporel du noyau d'allumage de l'instant $t = 0.0$ ms (en haut à gauche) à l'instant $t = 0.0305$ ms (en bas à droite) dans un processus de mélange du CH_4 (blanc) et du O_2 (noir). Les images sont des zoom de la Fig. 4.6 ($3h \times 5h$). La ligne stœchiométrique est en cyan, l'iso-ligne $T = 2500$ K en vert et l'iso-ligne $T = 3800$ K en magenta.

Le front de flamme riche est suivi par une branche de diffusion localisée le long de la stœchiométrie. Le front de flamme de prémélange pauvre est moins visible, à cause de la forte masse volumique de l'oxygène. Il est repoussé contre la flamme de diffusion, i.e. vers le méthane, comme dans le cas #2.1 de la Fig. 4.9. Ces observations sont confirmées par le champ d'index de flamme sur la Fig. 4.21.

Il est également possible de tracer l'évolution du dégagement de chaleur et de sa surface au cours du temps, en le conditionnant par le régime de flamme comme le montre la Fig. 4.22. On voit alors que régime de combustion produit environ la même quantité de chaleur ($\simeq 30-40$ %), mais que si l'on regarde la surface occupée par les différents types de flammes, alors la combustion

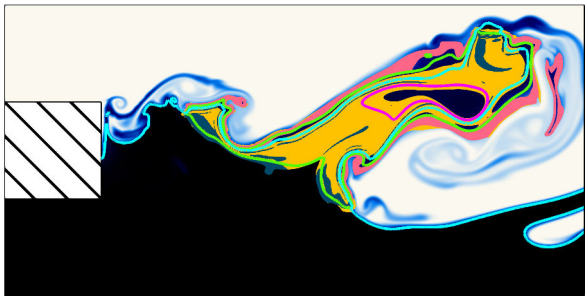


FIGURE 4.21 – Champ d'index de flamme (F.I.) dans le cas du *splitter-plate*. Même couleurs que dans les Fig. 4.16(a) et 4.19. Zoom : $3h \times 5h$.

de type non-prémélangée occupe environ 60 % de la surface, contre 15-20 % pour la combustion de type prémélangée pauvre et 20-25 % pour la combustion de type prémélangée riche. En fait, spatialement le mode de combustion privilégié est la combustion non-prémélangée, mais la combustion prémélangée produisant plus de chaleur (dégagement de chaleur plus intense), en quantité de chaleur totale, on a une équipartition entre les trois types de flammes.

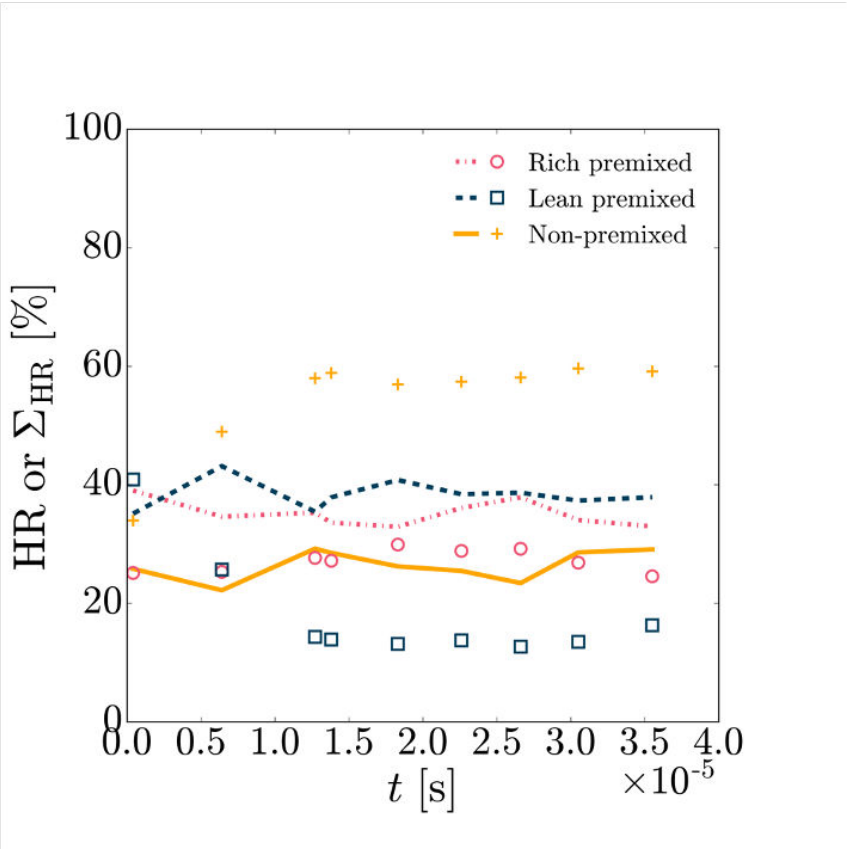


FIGURE 4.22 – Évolution temporelle du dégagement de chaleur (HR, lignes) et de la couverture spatiale (surface) de chaque régime de flamme (Σ_{HR}, symboles) pour les trois régimes de combustion (configuration *splitter-plate*) en %.

Pour la séquence temporelle présentée sur la Fig. 4.20, la vitesse absolue de la tête de la flamme tend vers zéro lorsqu'elle approche la lèvre de l'injecteur, signifiant que la vitesse de

déplacement de la flamme triple est proche de la vitesse locale de l'écoulement, i.e. autour de $5\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$ à l'instant $t = 0.0305$ ms. Cette valeur est du même ordre de grandeur que celle trouvée dans le cas #2.1 de la Tab. 4.1. La flamme se développe du côté méthane, où l'écoulement est le plus rapide, augmentant l'épaisseur de flamme (δ_f). Dans le cas présent ($t = 0.0305$ ms), le LOx occupe environ 80 % de la hauteur h de la lèvre, ce qui signifie que la tête de la flamme se déplace sur une très petite hauteur, coincée entre un fluide très dense (LOx) et un écoulement rapide (CH_4). En calculant localement la hauteur adimensionnée $\Psi \equiv h/\delta_f$ [150], i.e. $\Psi = (1-0.8)h/\delta_f$, cette dernière pourrait être inférieure à l'unité plus rapidement que prévue ($\equiv$ flamme instable).

Notons qu'allumer l'écoulement après un temps de simulation à froid plus long aurait probablement présenté un arrangement différent des espèces, i.e. des espèces proche de la lèvre de l'injecteur, avec certainement une plus faible quantité d'oxygène derrière la lèvre. Toutefois, le scénario de stabilisation envisagé ici pourrait être trouvé dans le cas où des fluctuations hydrodynamiques ou thermodynamiques apparaissent dans la ligne d'injection.

La simulation est ainsi stoppée lorsque la tête de la flamme est localisée à une distance de moins d'un h derrière la lèvre de l'injecteur. En effet, premièrement, il serait sans doute pertinent de vérifier l'arrangement des espèces derrière la lèvre, en laissant la simulation à froid s'établir bien plus longtemps. Deuxièmement, la thermique de la lèvre de l'injecteur pourrait jouer un rôle important dans la stabilisation de la flamme [176], nécessitant une étude complémentaire. Troisièmement, le temps CPU pour réaliser une telle simulation est assez conséquent, en partie à cause des faibles vitesses de méthane ($U_{CH_4} = 20\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$) et de l'oxygène ($U_{O_2} = 2\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$), qui amène à un temps de passage sur une longueur de $10h$ relativement important ($\tau_{\mathrm{conv}} = 0.35$ ms) et donc le temps nécessaire à simuler pour atteindre un régime établi (environ 10 à 15 τ_{conv}) d'autant plus grand. Par ailleurs, le pas de temps limitant étant celui de la chimie ($\Delta t_{\mathrm{chem}} \sim 1 \times 10^{-11}$ s), du fait de la raideur imposée par la haute pression sur la chimie du méthane, le temps CPU en est d'autant décuplé. En outre, cette étude ne porte pas ici spécifiquement sur le mécanisme de stabilisation de la flamme derrière la lèvre de l'injecteur, mais davantage sur l'allumage et l'analyse des modes de propagation de flammes après allumage en configuration *splitter-plate*.

Finalement, les simulations 2D ont également d'importantes limitations puisque des structures turbulentes 3D pourraient exhiber un comportement très différent et jouer un rôle non-négligeable dans le processus de stabilisation de flamme. Ces simulations de type DNS avec chimie détaillée sont évidemment hors de portée actuellement d'un point de vue temps de calcul.

4.4 Conclusion

Des simulations numériques haute fidélité de flammes turbulentes supercritiques naissantes dans des mélanges hétérogènes de CH_4/O_2 ont été réalisées sur des domaines de calcul bi-dimensionnels afin d'économiser du temps de calcul. La validité de la chimie réduite utilisée dans cette étude, et déjà employée avec succès pour simuler des flammes turbulentes à haute pression entièrement prémélangées dans le chapitre 3 , a été étendue à la simulation de flammes de diffusion à travers des configurations de flammes triples. Après l'ajout d'un point chaud à un mélange hétérogène de CH_4/O_2, sous diverses conditions thermodynamiques, des flammes triples émergent et progressent le long de la ligne stœchiométrique en développant deux ailes de flammes

prémélangées suivies d'une flamme de diffusion. Le mode de combustion prémélangé pauvre est toujours favorisé par rapport au mode de combustion riche ou non-prémélangé. Lorsque la différence de masse volumique est importante, la flamme tend naturellement vers le fluide ayant la plus faible masse volumique. Par exemple, l'utilisation d'oxygène liquide à $T_{O_2} = 85$ K favorise le déplacement de la flamme vers la poche de méthane. Un comportement similaire est retrouvé en étudiant le développement de la flamme supercritique en configuration *splitter-plate*. La flamme évolue dans les structures se développant à l'intérieur de la couche de mélange. Les trois régimes de combustion sont retrouvés, chacun produisant à peu près la même quantité de chaleur (25-35 %), mais le régime non-prémélangé couvre près de 60 % de la surface de la flamme, contre 20-25 % pour la combustion prémélangée riche et 15-20 % pour la combustion prémélangée pauvre. On observe également que les fronts des flammes de prémélange riche et de diffusion sont plus marqués et intenses dans le cas du *splitter-plate*, ce qui fait écho aux observations expérimentales de Singla et al. [347] pour le même point de fonctionnement thermodynamique. Néanmoins, la taille de maille nécessaire pour capturer ces différents régimes (~ 2 μm) n'est certainement pas accessible expérimentalement et des phénomènes à plus grande échelle doivent entrer en jeu. Des investigations complémentaires sont donc nécessaires afin de statuer sur la stabilité de la flamme et l'existence, à long terme, de ce double front de flamme (voir Fig. 1.42).

Chapitre 5

Simulation numérique d'une couche de mélange CH_4/O_2 turbulente à haute pression avec prise en compte d'effets non-idéaux de diffusion

Sommaire

5.1 Introduction 166
5.1.1 Contexte 166
5.1.2 Objectifs 166
5.2 Configuration, paramétrage numérique et initialisation 166
5.2.1 Configuration 166
5.2.2 Paramétrage numérique 168
5.2.3 Initialisation 169
5.2.4 Calculs de statistiques 169
5.3 Résultats et discussion 170
5.3.1 Description de l'écoulement 170
5.3.2 Évaluation des modèles de sous-maille pour la LES 171
5.3.3 Évaluation des effets de diffusion non-idéaux 180
5.3.4 Évaluation des flux de diffusion idéaux et non-idéaux 201
5.4 Couche de mélange LOx/GCH_4 208
5.4.1 Configuration et description de l'écoulement 208
5.4.2 Effets de la diffusion non-idéale 214
5.5 Vers l'inclusion des effets de diffusion non-idéale dans les écoulements réactifs 215
5.5.1 Présentation du cas 215
5.5.2 Stabilité du mélange CH_4/O_2 216
5.5.3 Résultats et discussion 216
5.6 Conclusion 222

5.1 Introduction

5.1.1 Contexte

Une prédiction adaptée des flux de diffusion est indispensable pour simuler avec précision des écoulements haute pression transcritiques ou supercritiques [11, 258]. Or généralement, des modèles de diffusion simplifiés issus des modèles à basse pression sont utilisés. C'est par exemple le cas du terme $\mathbf{d}_k$ qui intervient dans l'expression des flux de diffusion et qui est généralement modélisé comme le gradient de la fraction molaire de l'espèce k (voir section 2.1.6). Gaillard [88] a cependant montré que dans le cas d'une couche de mélange laminaire où les effets de compressibilité sont non négligeables, une modélisation haute pression de ce terme de diffusion, que l'on qualifiera de "non-idéale" par la suite, était nécessaire. Guven [113] a quant à lui déjà étudié l'impact de la diffusion non-idéale dans le cas d'une couche de mélange réactive, mais dans le cas d'un mélange H_2/O_2 et avec l'équation d'état de Peng-Robinson [271].

Ensuite, s'il s'avère effectivement que la prise en compte de ces effets de diffusion non-idéaux est de premier ordre pour la simulation d'écoulements supercritiques, il est nécessaire de voir comment modéliser ces effets-là par une approche de simulation aux grandes échelles (LES).

5.1.2 Objectifs

Les objectifs de ce chapitre sont multiples :

1. analyse d'une couche de mélange turbulente non réactive CH_4/O_2, en configuration *splitter-plate* à haute pression ;
2. évaluation des modèles de sous-maille pour la turbulence ;
3. validation de l'implémentation du modèle de diffusion non-idéale avec l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong [358] réalisé au cours de cette thèse ;
4. comparaison des effets des diffusion non-idéale et poids des différents termes qui composent le terme $\mathbf{d}_k$;
5. comparaison de la modélisation non-idéale sur deux maillages différents ;
6. comparaison des effets de diffusion non-idéale sur différents cas tests ;
7. étudier si l'implémentation des flux de diffusion non-idéaux permet également de simuler un cas simple d'écoulement réactif et en quoi cela peut en affecter sa structure.

5.2 Configuration, paramétrage numérique et initialisation

5.2.1 Configuration

La configuration principale étudiée dans ce chapitre est similaire à celle présentée dans le chapitre 4, mais cette fois-ci sans combustion et pour des conditions thermodynamiques différentes. En effet, de l'oxygène et du méthane cryogénique sont injectés de part et d'autre de la lèvre qui les sépare, à une pression de 10.0 MPa. Ces conditions en température et pression sont supposées être représentatives de celles que l'on peut rencontrer dans un générateur de gaz. La Fig. 5.1 illustre le point de fonctionnement et les conditions aux limites imposées.

Les simulations sont effectuées en 2D car trop coûteuses en 3D. Le rapport de quantité de mouvement J vaut environ 8.8. La vitesse convective U_{conv} calculée avec l'équation (4.4) est

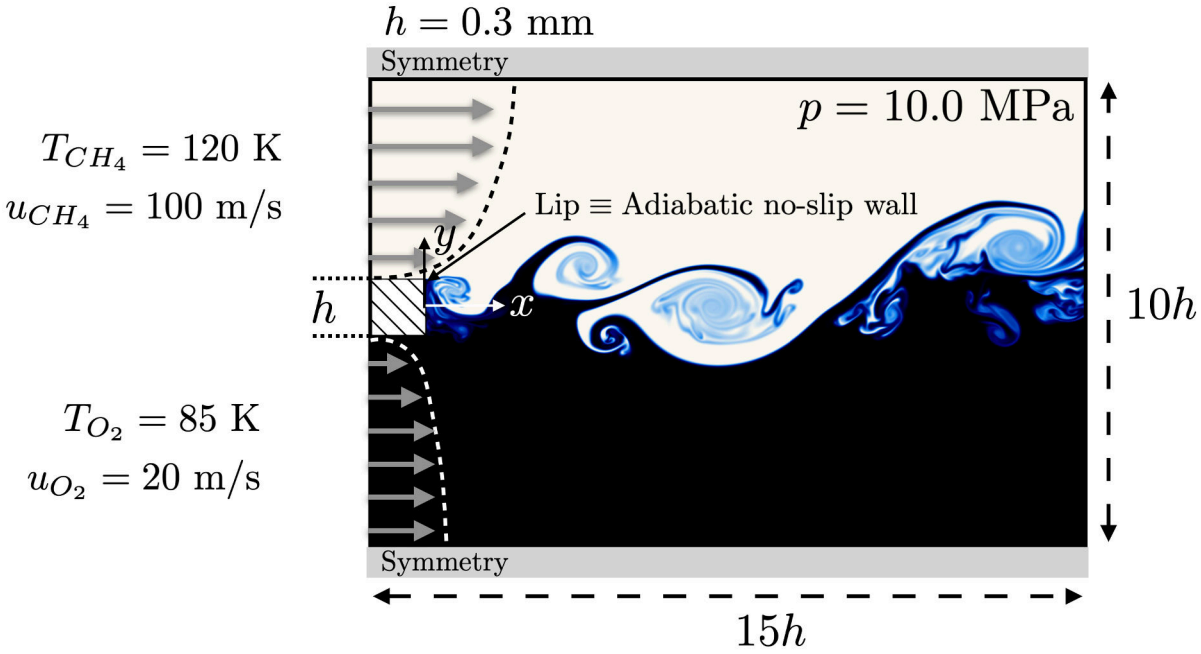
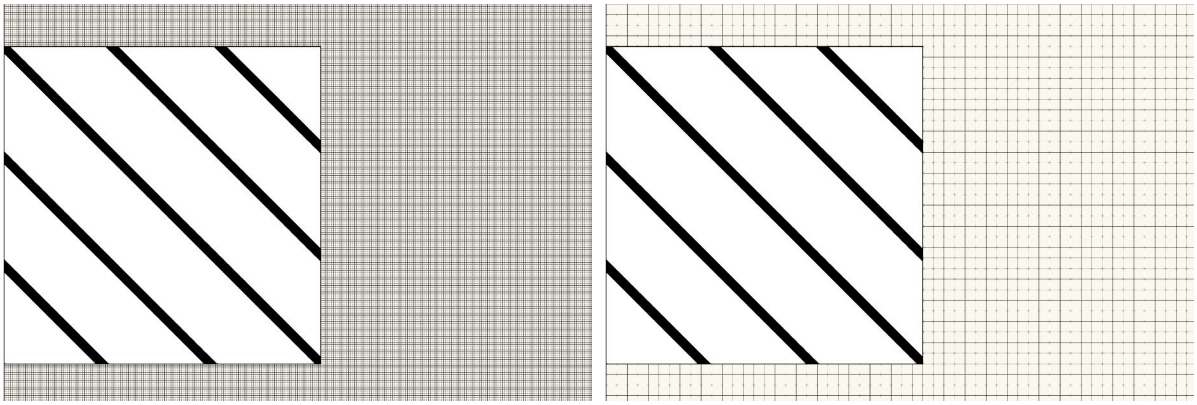


FIGURE 5.1 – Point de fonctionnement et conditions aux limites. Le champ affiché est celui de la fraction massique de CH_4.

d'environ $\simeq 50\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$. Cela se traduit par un temps de passage $\tau = 6 \times 10^{-5}$ s, sur une longueur de $10h$ (zone convective d'intérêt, suffisamment loin de la condition de sortie).

Deux maillages sont étudiés, tous deux cartésiens, réguliers et structurés. Le premier, contient 150 mailles dans l'épaisseur de la lèvre d'une hauteur $h = 0.3$ mm, référencé sous le nom "H150", et le deuxième maillage contient 30 mailles dans l'épaisseur de la lèvre, quant à lui référencé sous le nom "H30" dans ce qui suit. Pour le maillage H150, la taille de maille est donc $\Delta_{\mathrm{H150}} = 2.0 \times 10^{-6}$ m alors qu'elle est de $\Delta_{\mathrm{H30}} = 1.0 \times 10^{-5}$ m pour le maillage H30. La Fig. 5.2 met en évidence la différence de taille de maille entre les deux configurations, H150 et H30.



(a) Maillage H150 (b) Maillage H30

FIGURE 5.2 – Mise en évidence de la taille de maille proche de la lèvre pour les deux différents maillages utilisés.

Notons également que si étude de convergence en maillage n'est pas présentée ici, les précé-

dents travaux de Guven [111] sur une couche de mélange LOx/H_2 en configuration *splitter-plate* dans des conditions similaires de température, de pression et vitesse ont montré qu'une taille de maille de 2.0×10^{-6} m (équivalent à notre cas H150) était suffisante pour bien capter la physique de l'écoulement et sans perte significative de précision. Même si la physique du mélange LOx/H_2 de Guven [111] n'est pas tout à fait la même que celle du mélange LOx/CH_4 à l'étude ici, on peut supposer que le maillage H150 offre un bon compromis entre précision (quasi-DNS) et temps de calcul.

5.2.2 Paramétrage numérique

Les simulations sont réalisées avec SiTCom-B. L'EoS SRK [358] est utilisée. Les propriétés de transport haute pression sont évaluées avec les méthodes de Chung [53] et Takahashi [367].

Le solide (la lèvre) est traité avec la méthode des frontières immergées (IBM) [24, 227, 274, 320].

Deux modélisations différentes des flux de diffusion sont utilisées, à savoir celle considérée comme diffusion idéale, référencée par "IT" (*Ideal Transport*) et présentée dans la section 2.1.6.1, et celle considérée comme non-idéale, référencée par "NIT" (*Non-Ideal Transport*) dans ce qui suit et présentée dans la section 2.1.6.2.

De plus, deux approches pour la modélisation des termes de sous-maille ont été envisagées. La première, consiste à ne pas appliquer de modèle de sous-maille (SGS) pour la modélisation de la turbulence (absence de viscosité turbulente) comme c'est le cas en DNS, contrairement à la seconde approche où un modèle SGS pour la turbulence est considéré, mais uniquement dans le cas du maillage H30 (approche classiquement employée en LES). Différents modèles de sous-maille ont été employés afin de comparer leurs effets. La table suivante résume l'ensemble des simulations effectuées et les modèles employés :

Nom	Taille de maille	SGS	Transport
H150 - IT	$\Delta = 2.0 \times 10^{-6}$ m	[-]	Idéal
H30 - IT	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	[-]	Idéal
H30 - WALE - IT	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	[249]	Idéal
H30 - SM - IT	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	[352]	Idéal
H30 - SMD - IT	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	[93, 185]	Idéal
H150 - NIT	$\Delta = 2.0 \times 10^{-6}$ m	[-]	Non-idéal
H30 - SMD - IT	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	[93, 185]	Non-idéal

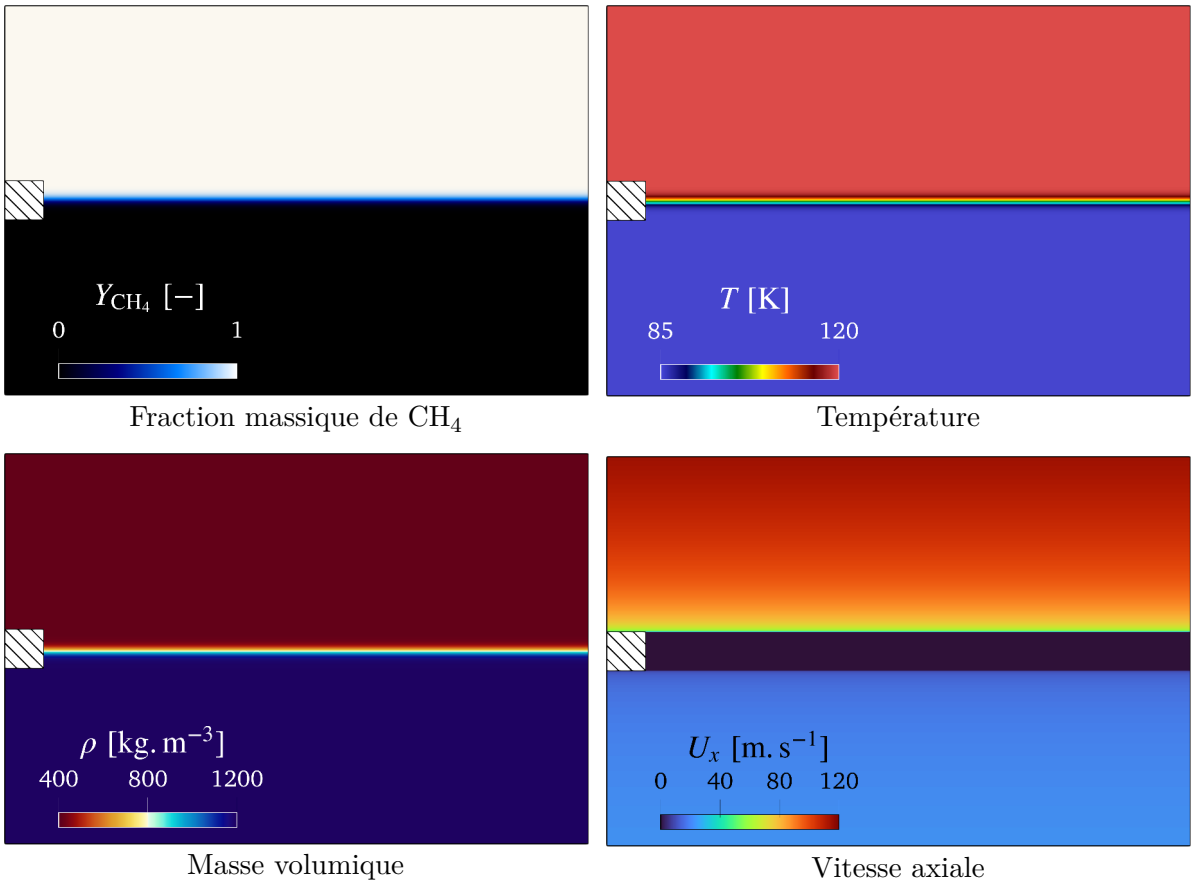
TABLE 5.1 – Présentation de l'ensemble des simulations réalisées et des différents modèles employés.

Notons par ailleurs que dans ce qui suit, pour simplifier les notations, la simulation H150 sans modèle de sous-maille pour la turbulence sera appelée "DNS" (même si le maillage associé n'est pas nécessairement suffisant pour résoudre jusqu'à l'échelle de Kolmogorov) et sera considérée comme cas de référence, tandis que les simulations H30 seront appelées "LES".

Enfin, le nombre de CFL et de Fourier sont fixés à 0.8 pour l'ensemble des simulations.

5.2.3 Initialisation

L'initialisation est réalisée en imposant les conditions aux limites présentées dans la Fig. 5.1 et en les étendant de l'entrée vers la sortie, comme le montre la Fig. 5.3. Une tangente hyperbolique permet alors de faire la transition entre la partie supérieure de la couche de mélange et la partie inférieure, sauf pour la vitesse axiale qui se voit imposée à zéro dans toute l'épaisseur de la lèvre, pour toute valeur de x.



Fraction massique de CH_4 | Température

Masse volumique | Vitesse axiale

FIGURE 5.3 – Champs initiaux des principales variables.

5.2.4 Calculs de statistiques

Dans ce qui suit, des statistiques sont cumulées sur une certaine période de temps afin de comparer au mieux les différentes simulations. Une variable quelconque Φ de l'écoulement peut en effet être moyennée sur un intervalle de temps Δt au sens de Reynolds (RA = *Reynolds Average*) :

$$\overline{\Phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \Phi\left(x, y, z, t\right) \mathrm{d}t \ , \tag{5.1}$$

ou au sens de Favre (FA = *Favre Average*) :

$$\widetilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\overline{\rho}} \ , \tag{5.2}$$

avec $\overline{\rho}$, la masse volumique moyenne.

Il convient bien évidemment de ne pas confondre ces grandeurs moyennées temporellement avec les grandeurs filtrées spatialement pour la simulation aux grandes échelles. Il est également intéressant de calculer la variance d'une grandeur moyenne, ou encore son écart-type. En effet, ces grandeurs quantifient la déviation, autrement dit la dispersion, d'une variable par rapport à sa valeur moyenne.

Dans cette thèse, le choix a été fait de plutôt présenter des résultats mettant en évidence l'écart-type, également appelé RMSD pour *Root Mean Square Deviation*, plutôt que la variance. L'écart-type σ d'une grandeur Φ au sens de la moyenne de Reynolds est alors calculé comme suit :

$$\sigma_{\overline{\Phi}} = \sqrt{\overline{\Phi^2} - \overline{\Phi}^2} \, , \tag{5.3}$$

et au sens de Favre :

$$\sigma_{\widetilde{\Phi}} = \sqrt{\widetilde{\Phi^2} - \widetilde{\Phi}^2} \, . \tag{5.4}$$

5.3 Résultats et discussion

L'ensemble des simulations a été réalisé en deux temps. En effet, pour chaque simulation, une phase de convergence est tout d'abord réalisée pendant au moins 1.2×10^{-4} s de temps physique, ce qui correspond à environ 20 temps de passage, avant que des statistiques ne soient cumulés pendant 4.8×10^{-3} s, ce qui correspond à environ 80 temps de passage.

Dans ce qui suit, comme les champs instantanés présentés sont obtenus en dehors de la phase de convergence, ils sont supposés suffisamment représentatifs de la structure de l'écoulement à un instant donné pour chaque simulation.

5.3.1 Description de l'écoulement

5.3.1.1 Évolution temporelle

Dans un premier temps, on peut s'intéresser à la dynamique de l'écoulement. La Fig. 5.4 montre en effet comment des ligaments d'oxygène cryogénique pénètrent dans le méthane, lui aussi cryogénique, et viennent parfois arracher des structures de méthane en forme de "blob" similaires à celles simulées dans le chapitre précédent. Des structures tourbillonnaires sont générées en aval de la lèvre qui sépare le méthane de l'oxygène. La lèvre génère donc une forte zone de recirculation, où un mélange d'oxygène et de méthane se forme derrière elle, majoritairement occupé par le LOx. La vitesse suffisamment importante du LOx dans ce cas présent, produit également des structures tourbillonnaires au niveau du coin en bas à droite de la lèvre, mais clairement moins visible et probablement moins intenses que celles au niveau du coin supérieur droit de la lèvre, côté méthane.

La couche de mélange turbulente semble s'amorcer au niveau du coin supérieur droit de la lèvre avant de s'amplifier à mesure que l'on s'éloigne de celle-ci. On voit que le mélange a du mal à se faire malgré la présence de forte turbulence, probablement à cause des fortes masses volumiques en jeu et du faible rapport de quantité de mouvement J (pénétration moins forte d'une espèce dans l'autre). En effet, les ergols étant injectés cryogéniques, leur forte masse volumique d'environ 420 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ pour le méthane et 1190 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ pour l'oxygène tend à rendre l'homogénéisation du mélange plus difficile, les deux ergols se comportant un peu comme des

"murs visqueux" qui s'entrechoquent entre eux plutôt que comme des gaz qui se diffusent et se mélangent facilement.

5.3.1.2 Champs instantanés

Il est également intéressant de comparer à un instant fixé les différents champs instantanés obtenus pour différentes variables. Si le champ de température est en adéquation avec celui de la masse volumique ou encore celui de la fraction massique de CH_4, on voit bien la présence des structures tourbillonnaires grâce aux champs de vitesse transverse, de vorticité ou encore de gradient de pression comme le montre la Fig. 5.5. Le Schlieren permet également de mettre en évidence les forts gradients de masse volumique. Celui-ci est calculé comme suit :

$$\text{Schlieren} = \exp(C_0 S) \quad \text{avec} \quad S = \frac{|\nabla\rho| - C_1|\nabla\rho|_{\max}}{|\,(C_2 - C_1)\,\nabla\rho|_{\max}}\,, \tag{5.5}$$

où C_0, C_1 et C_2 sont des constantes utilisateurs permettant d'accentuer plus ou moins le contraste au niveau des gradients de masse volumique.

Des zones de forte dépression étant présentes au centre des tourbillons, un fort gradient de pression est observé proche de ceux-ci. Notons par ailleurs que la turbulence 2D n'étant pas vraiment physique, ces zones de dépression sont fortement accentuées et donc les gradients de pression également, ce qui rend les simulations d'autant plus complexes à mener. Par ailleurs, la turbulence 2D étant également à l'origine de cascade d'énergie inversée [123], les structures tourbillonnaires se dissipent aux grandes échelles. Ce phénomène favorise alors l'agglomération de tourbillons et tend à faire dégénérer la couche de mélange.

Toutefois, malgré ces inconvénients, la couche de mélange est simulée avec succès sur ce point de fonctionnement, sans recourir à un clip en pression ni utiliser de *sponge layer*[1] en sortie. Les forts gradients de masse volumique et de pression sont endurés par le code sans faire diverger les simulations ni produire des résultats que l'on pourrait juger non physiques. La limitation à deux dimensions impose certes des contraintes supplémentaires et la turbulence produite n'est peut-être pas parfaitement représentative d'une turbulence 3D, mais le gain en temps de calcul étant beaucoup trop important, on ne peut que se satisfaire pour l'instant de simulations 2D pour un tel maillage et une durée de temps physique simulée aussi importante.

5.3.2 Évaluation des modèles de sous-maille pour la LES

5.3.2.1 Comparaison des champs instantanés

Les Fig. 5.6 et 5.7 comparent les champs instantanés entre la simulation H150 - IT et celle H30 - SMD - IT. On voit que la structure de l'écoulement est globalement bien reproduite par la LES (cas H30). Toutefois, comme on pouvait s'y attendre, les gradients sont bien plus lisses et les plus petites échelles de la turbulence ne sont plus apparentes, principalement du fait de l'augmentation de la taille du filtre. On observe également que l'écoulement juste derrière la lèvre est un peu différent, plus homogène et diffus avec la LES.

Il est également intéressant de comparer le comportement des différents modèles LES. La Fig. 5.8 illustre ces différences sur les champs de masse volumique et de fraction massique de

1. Zone tampon dans laquelle on vient généralement augmenter artificiellement la diffusion afin de lisser les gradients.

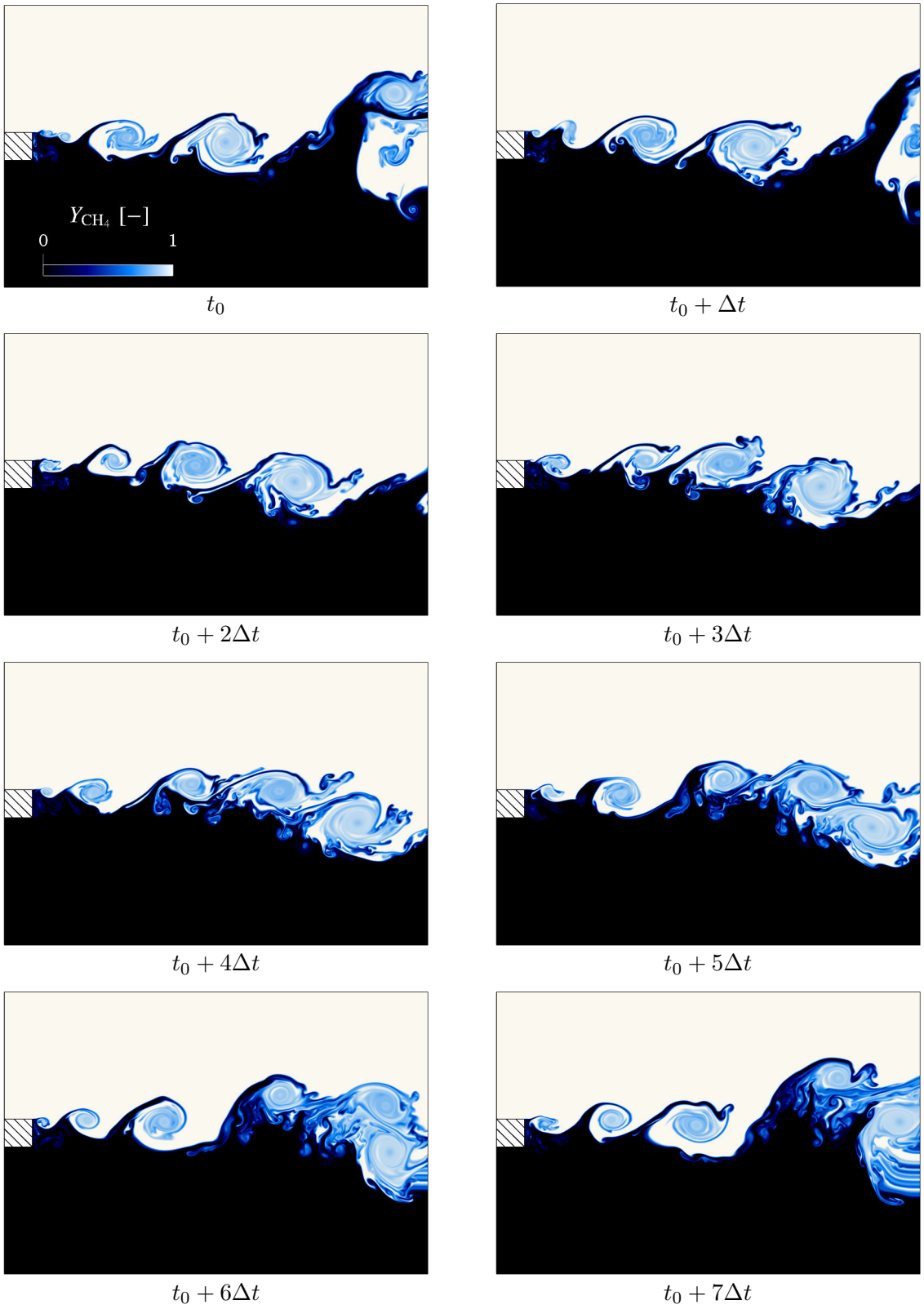
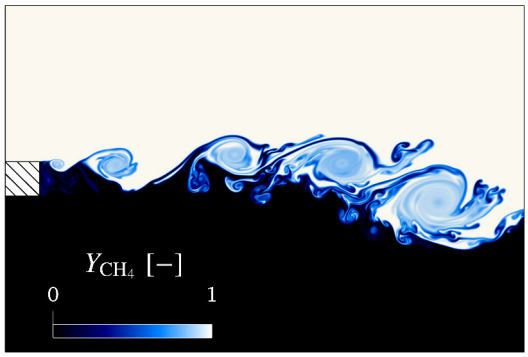
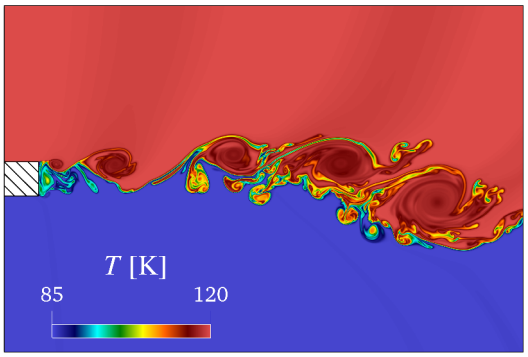


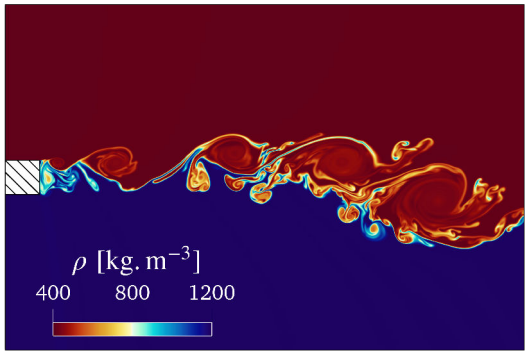
FIGURE 5.4 – Évolution de la fraction massique de CH_4 à différents instants pour le cas H150 - IT. t_0 arbitraire et $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ s (intervalle entre les images).



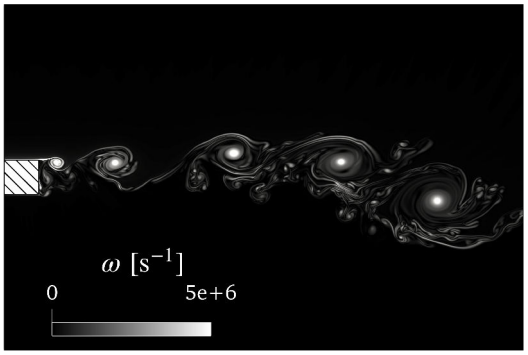
(a) Fraction massique de CH_4



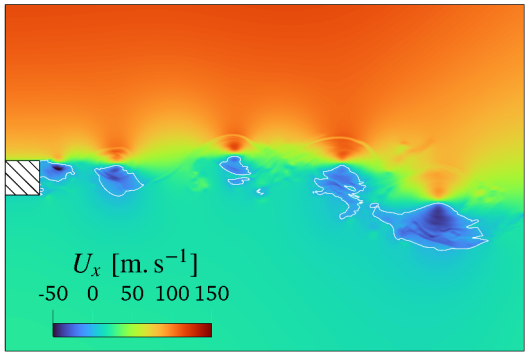
(b) Température



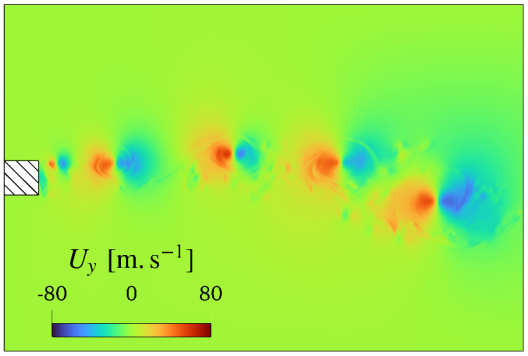
(c) Masse volumique



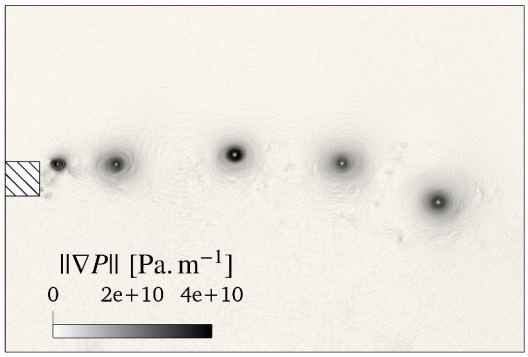
(d) Vorticité



(e) Vitesse axiale et iso-vitesse axiale nulle.



(f) Vitesse transverse

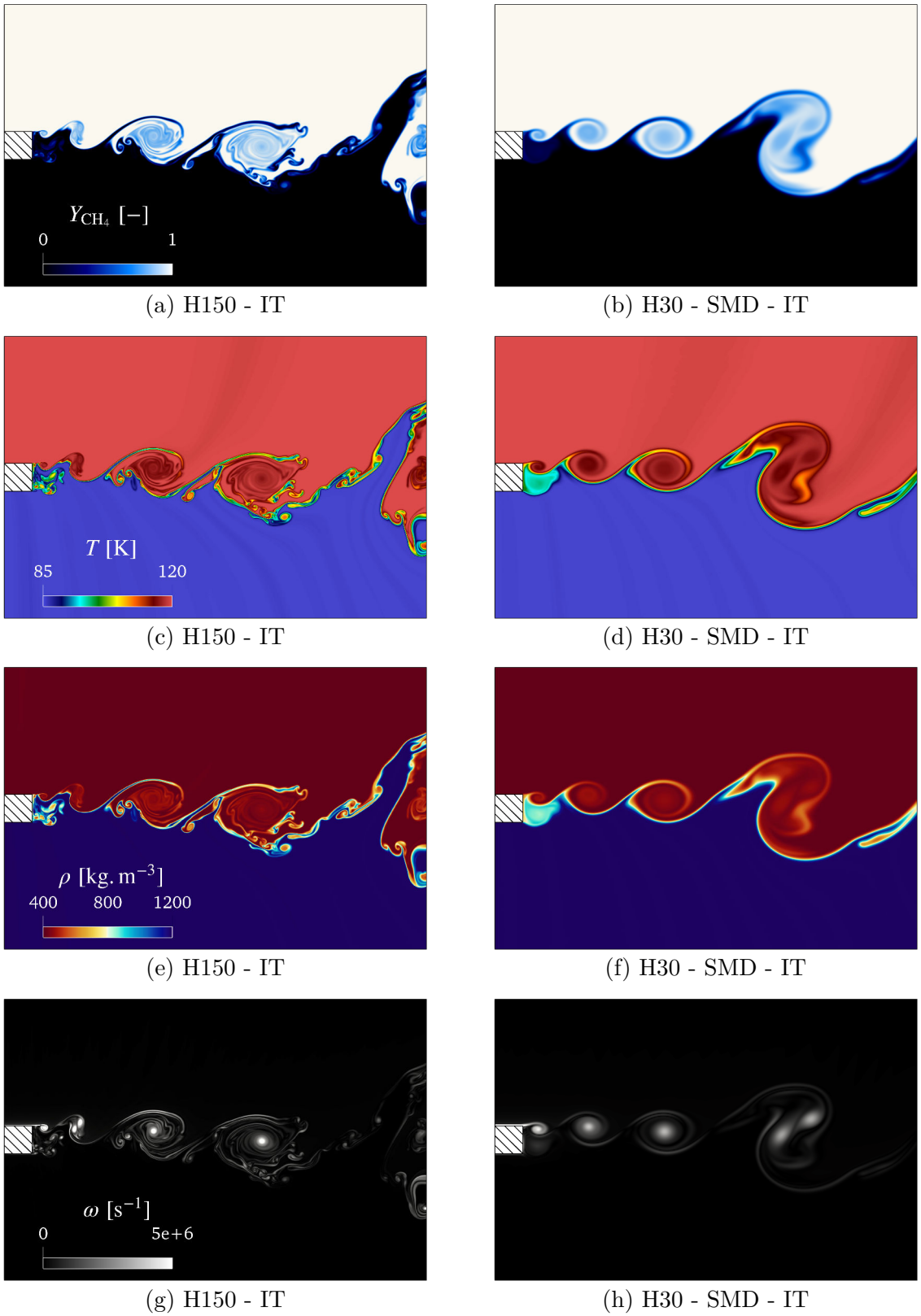


(g) Norme du gradient de pression



(h) Schlieren

FIGURE 5.5 – Champs instantanés pris au même instant pour le cas H150 - IT.



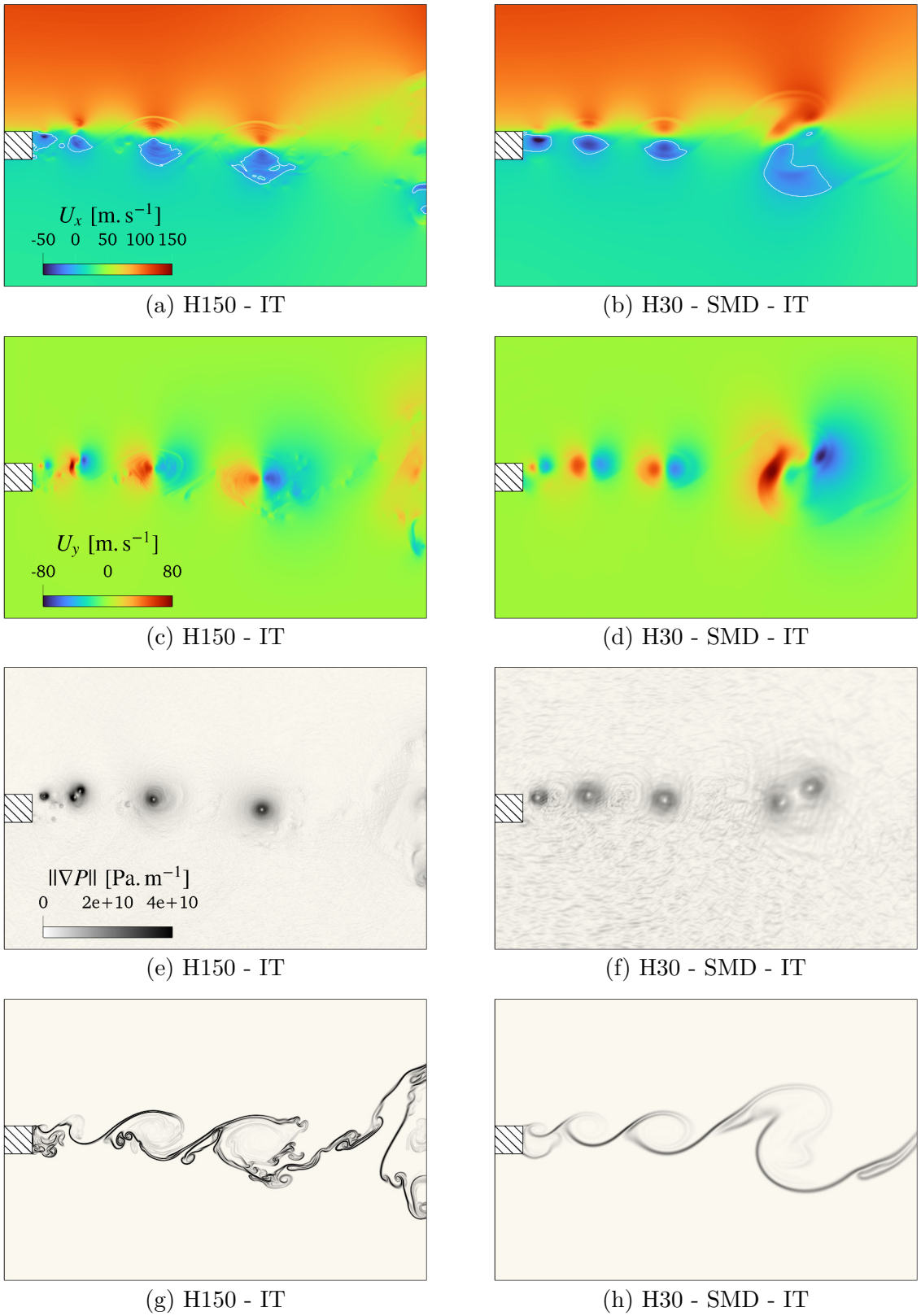
(a) H150 - IT (b) H30 - SMD - IT

(c) H150 - IT (d) H30 - SMD - IT

(e) H150 - IT (f) H30 - SMD - IT

(g) H150 - IT (h) H30 - SMD - IT

FIGURE 5.6 – Comparaison des champs instantanés de fraction massique de méthane (a-b), de température (c-d), de masse volumique (e-f) et de vorticité (g-h), entre les cas H150 - IT (colonne de gauche) et H30 - SMD - IT (colonne de droite), pour les mêmes échelles de valeurs.



(a) H150 - IT (b) H30 - SMD - IT

(c) H150 - IT (d) H30 - SMD - IT

(e) H150 - IT (f) H30 - SMD - IT

(g) H150 - IT (h) H30 - SMD - IT

FIGURE 5.7 – Comparaison des champs instantanés de vitesse axiale (a-b), de vitesse transverse (c-d), de la norme du gradient de pression (e-f) et de Schileren (g-h), entre les cas H150 - IT (colonne de gauche) et H30 - SMD - IT (colonne de droite), pour les mêmes échelles de valeurs.

CH_4. Dans l'ensemble, la couche de mélange semble reproduite de manière similaire par tous les modèles. La différence la plus significative d'un modèle à un autre est certainement l'écoulement prédit derrière la lèvre.

En effet, les simulations H30 sans modèle SGS et avec le modèle WALE produisent des résultats similaires derrière la lèvre, où une zone de recirculation plutôt dense en oxygène est présente. À l'inverse, le modèle SM prédit une zone de recirculation bien plus diffuse et moins dense car contenant plus de méthane. Quant à lui, le modèle SMD semble donner un résultat intermédiaire entre ceux obtenus avec les modèles WALE et SM.

Ces différences s'expliquent simplement par la différence de traitement de la viscosité turbulente en proche paroi. En effet, comme expliqué dans la section 2.3.6.2, il est connu que le modèle SM a tendance à sur-prédire la viscosité turbulente en proche paroi, là où le modèle WALE a justement été pensé pour pallier à ce défaut, en ajustant la viscosité turbulente en proche paroi. La simulation sans modèle SGS n'ayant pas recourt à la viscosité turbulente, il est normal d'observer des similitudes entre le cas WALE et le cas H30 sans modèle SGS proche de la lèvre. Le modèle SMD est censé lui aussi s'adapter localement grâce à une constante dynamique et donc se rapproche du modèle WALE en proche paroi, sans pour autant être aussi efficace très proche de la paroi. Par contre le modèle SMD est censé pouvoir mieux adapter localement l'application de la viscosité turbulente que le modèle WALE en fonction des conditions de l'écoulement, grâce à sa constante dynamique.

Cependant, des champs pris à des instants différents pouvant produire des résultats différents, il est difficile de conclure uniquement avec des champs instantanés sur la pertinence des modèles LES à reproduire le cas H150. Pour cette raison, il est nécessaire de comparer des champs moyens (voir annexe D) ou des profils de champs moyens.

5.3.2.2 Comparaison des profils moyens

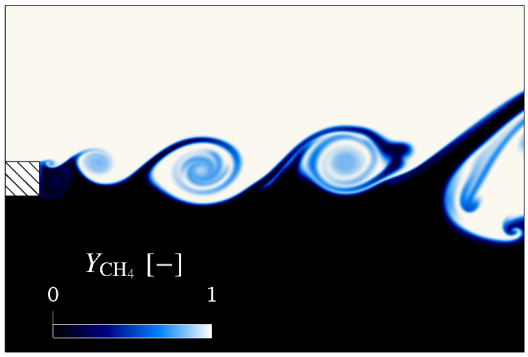
Les Fig. 5.9 et 5.10 comparent les profils de masse volumique moyenne et de son écart type, obtenus via les différentes simulations avec une modélisation idéale des flux de diffusion.

Il est intéressant de remarquer que les observations effectuées sur les champs instantanés au niveau de la zone de recirculation derrière la lèvre se répercutent directement sur ces profils. En effet, on remarque qu'en proche paroi (profil à distance 1h de l'injecteur), la simulation H30 sans modèle SGS donne les résultats les plus proches du cas H150, suivie de près par celle ayant recourt au modèle WALE. Vient ensuite les résultats obtenus avec le modèle SMD et enfin avec des différences relativement notables, ceux avec le modèle SM.

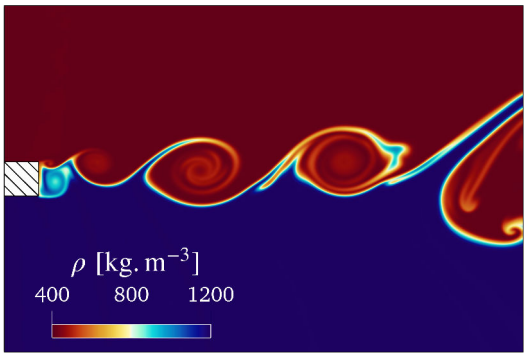
À mesure que l'on s'éloigne de la lèvre de l'injecteur, jusqu'à 5h, les différences entre les modèles s'amenuisent. Toutefois, à partir de 7h, on voit que le modèle SM est celui qui est le plus prédictif. L'absence de modèle SGS et le modèle WALE donnent des résultats très similaires. Le modèle SMD semble être légèrement meilleur que WALE loin de la paroi.

D'une manière générale, on voit que tous les modèles avec un maillage H30 peinent à reproduire la pente de la masse volumique moyenne, en particulier côté LOx, où celle-ci s'amorce pour des valeurs de y plus grandes. Cela signifie que l'angle d'ouverture de la couche de mélange est plus faible avec un maillage H30. Suffisamment loin de la lèvre ($x > 7h$), le modèle SM est celui qui reproduit le plus fidèlement le profil du cas H150.

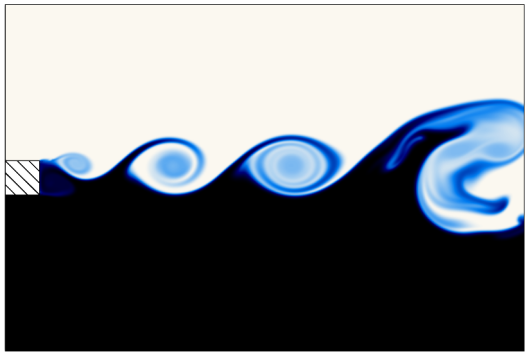
Le même type de comportement peut être observé sur les profils de température moyenne (Fig. 5.11 et Fig. 5.12) et de fraction massique de méthane (Fig. 5.13 et Fig. 5.14). La vitesse



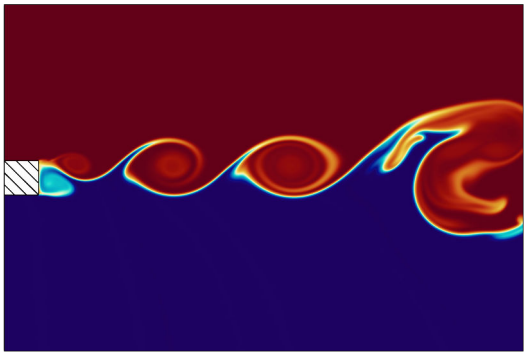
(a) H30 - IT



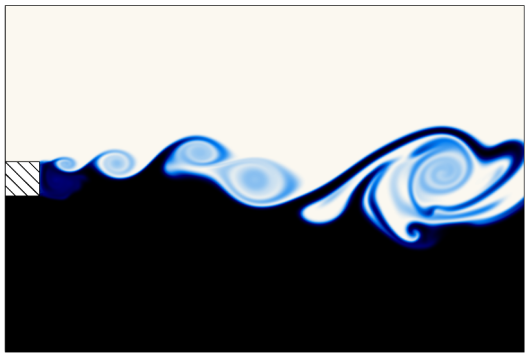
(b) H30 - IT



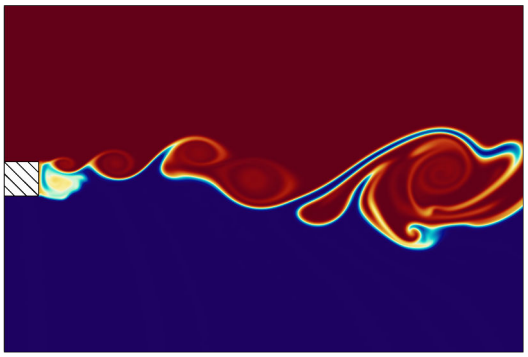
(c) H30 - WALE - IT



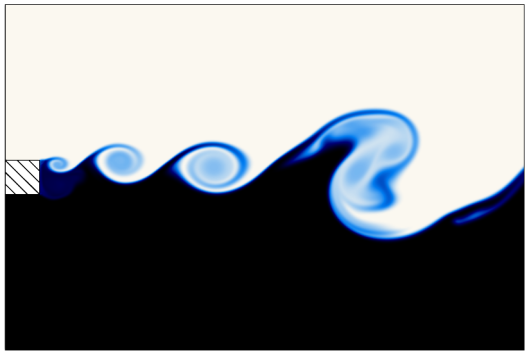
(d) H30 - WALE - IT



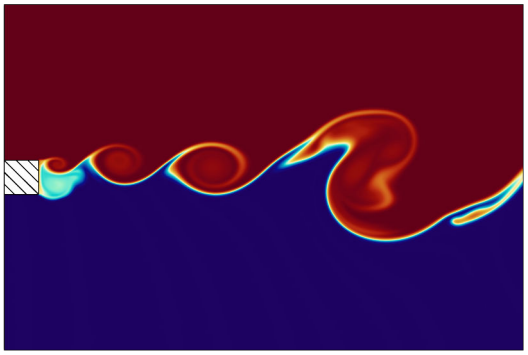
(e) H30 - SM - IT



(f) H30 - SM - IT

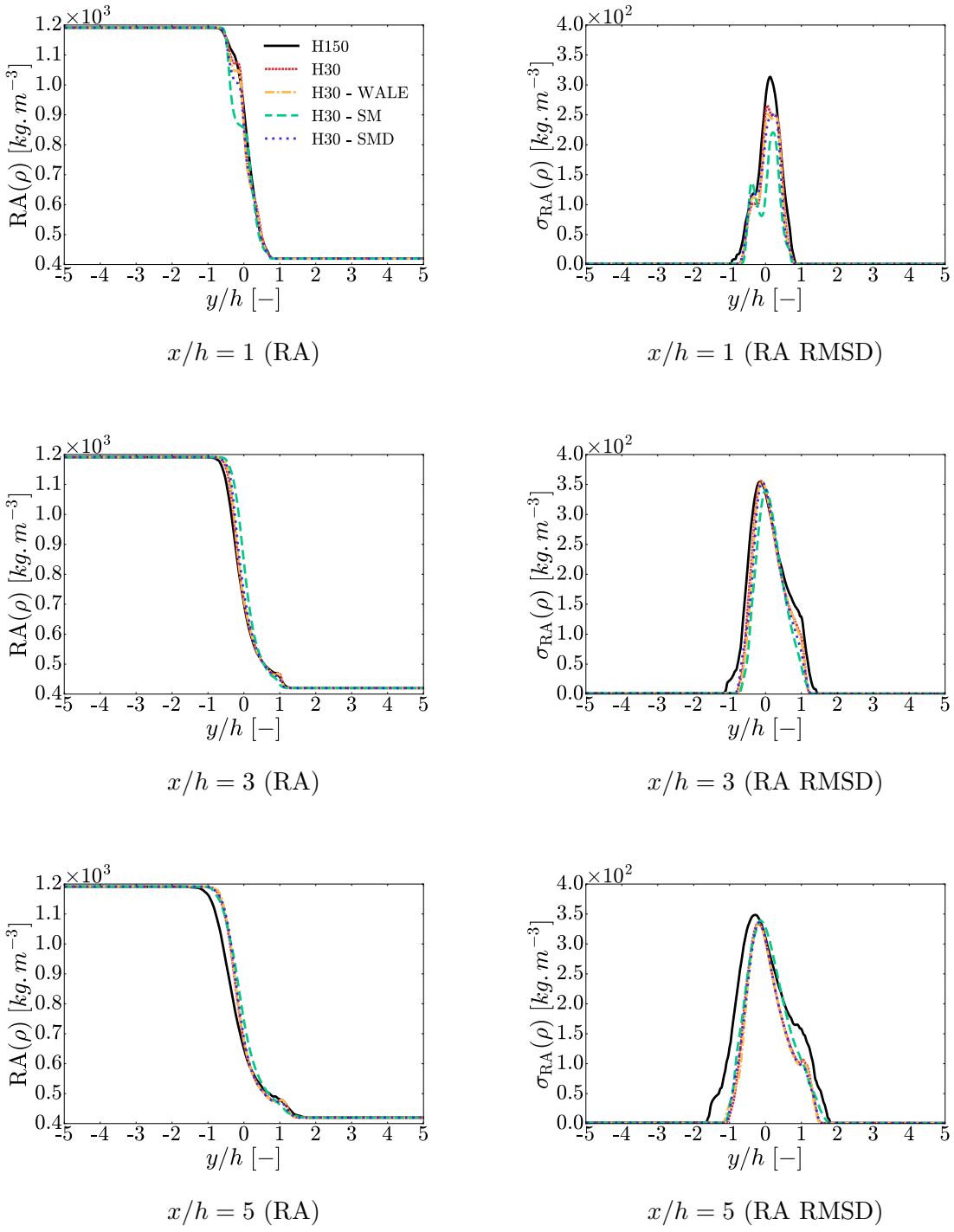


(g) H30 - SMD - IT



(h) H30 - SMD - IT

FIGURE 5.8 – Comparaison des champs instantanés de fraction massique de CH_4 (colonne de gauche) et de masse volumique (colonne de droite) pour les simulations avec un maillage H30 et une diffusion idéale de transport, pour différents modèles SGS (NO SGS, WALE, SM et SMD).

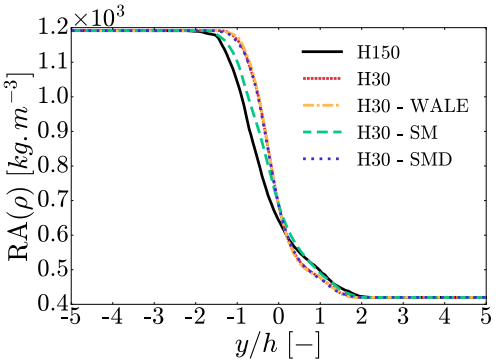


$x/h = 1$ (RA) $x/h = 1$ (RA RMSD)

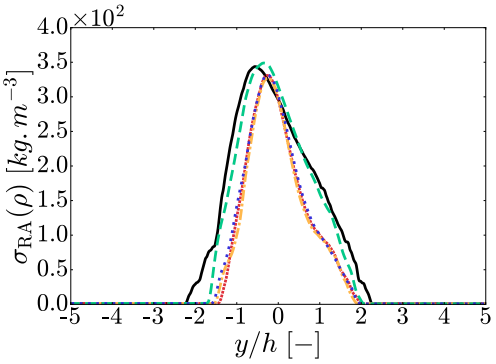
$x/h = 3$ (RA) $x/h = 3$ (RA RMSD)

$x/h = 5$ (RA) $x/h = 5$ (RA RMSD)

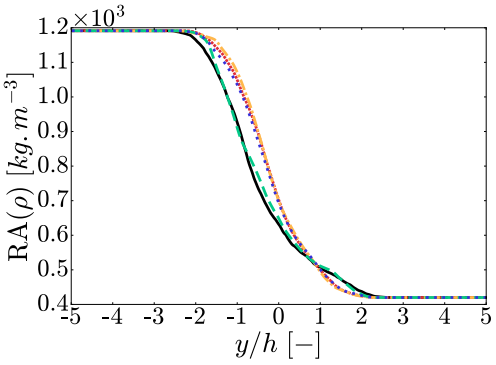
FIGURE 5.9 – Profils de **masse volumique moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



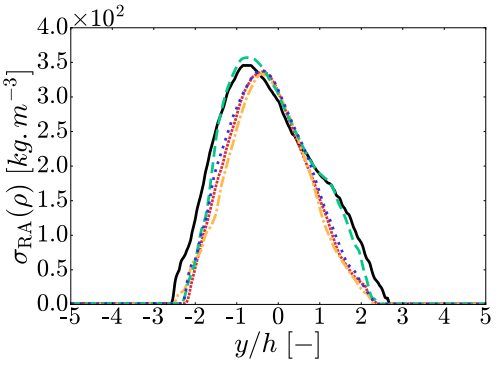
$x/h = 7$ (RA)



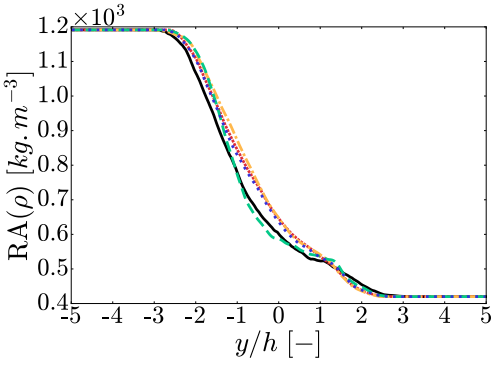
$x/h = 7$ (RA RMSD)



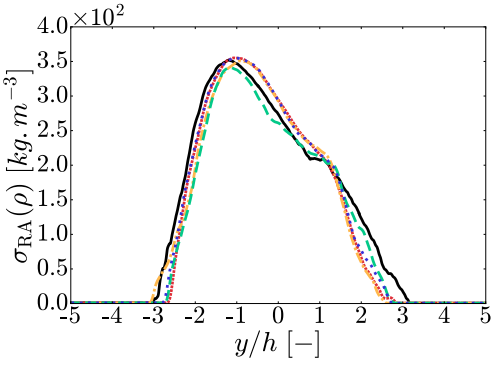
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)



$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 5.10 – Suite de la Fig. 5.10.

axiale (Fig. 5.15 et Fig. 5.16) est également mieux prédite en proche paroi par le modèle WALE que par le modèle SM, SMD produisant des résultats intermédiaires. En revanche, pour ce qui est de la vitesse transverse U_y (Fig. 5.17 et Fig. 5.18), tous les modèles peinent à bien la prédire, le modèle SM étant certainement le moins pire. Toutefois, la composante de la vitesse transverse étant nettement inférieure à celle axiale, les répercussions de cette difficulté de modélisation de la vitesse transverse restent faibles ou modérées sur le comportement global de la couche de mélange.

Des champs moyens et d'autres profils (notamment en moyenne de Favre) sont également disponibles dans l'Annexe D.

D'après ces observations, il est difficile de conclure si un modèle est vraiment meilleur qu'un autre, car suivant la zone d'intérêt (loin ou proche de la lèvre), certains sont plus prédictifs que d'autres. On remarque également que des résultats relativement proches de ceux obtenus par la simulation H150 sont obtenus avec le maillage H30 sans modèle SGS, qui permet de mettre en évidence l'effet de la taille de filtre seul. Toutefois, il est fort probable qu'en dégradant davantage le maillage (par exemple H5), ce ne soit plus le cas. De la même façon, dans le cas d'une simulation sur un domaine plus grand où la turbulence aurait davantage le temps de s'établir, on pourrait s'attendre à des différences plus importantes dans le cas où l'on négligerait complètement les termes de sous-maille avec une approche directe comme en DNS, mais avec un maillage trop grossier.

Par ailleurs, le modèle de turbulence pour la LES le plus prédictif en proche paroi semble être le modèle WALE, suivi de près par le modèle SMD. En revanche, suffisamment loin de la lèvre de l'injecteur, le modèle SM semble être bien plus prédictif que les autres. Le modèle SMD est un peu moins bon que WALE en proche paroi et un peu moins bon que SM loin de la lèvre. Il est semble être un bon compromis pour rester prédictif en proche paroi et plus éloigné de celle-ci.

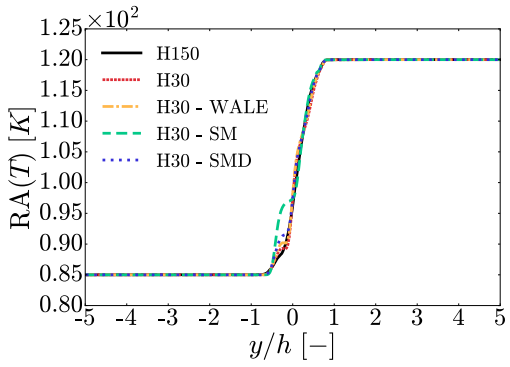
Ainsi, dans ce cas précis, le meilleur modèle serait certainement une modification du modèle SM où l'on viendrait manuellement couper la viscosité turbulente en proche paroi. Ce serait également le modèle le moins coûteux en CPU, mais on n'aurait pas un modèle SGS générique facilement extensible à d'autres cas de simulations. On pourrait toutefois imaginer un critère qui calcule automatiquement la distance à la paroi et vienne progressivement diminuer la viscosité turbulente jusqu'à atteindre la paroi...

Enfin, il serait également intéressant de voir si ces observations sont confirmées dans le cas où un maillage plus grossier serait employé. De la même façon, simuler une couche de mélange similaire en trois dimensions pourrait également donner des résultats différents, les modèles SGS pour la LES étant calibrés et pensés pour prédire la turbulence 3D et non 2D.

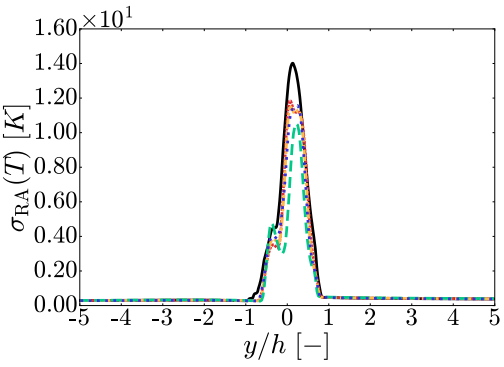
5.3.3 Évaluation des effets de diffusion non-idéaux

Dans cette section, on se propose de comparer les effets de l'inclusion d'une modélisation non-idéale des flux de diffusion décrits dans la section 2.1.6.2 sur la couche de mélange à l'étude. Pour rappel, l'écriture de la force ordinaire de diffusion de l'espèce k peut s'écrire comme suit, d'après l'Éq. (2.109) :

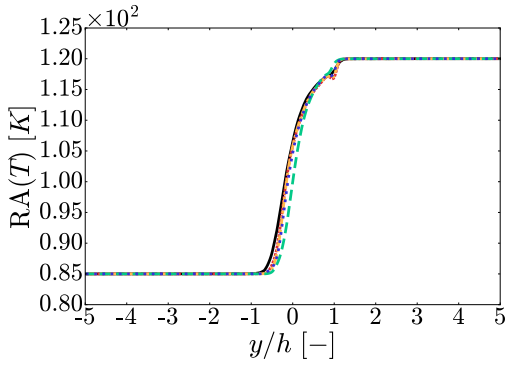
$$\mathbf{d}_k = X_k \nabla_T \left(\mu_k\right) = \nabla X_k + X_k \nabla \mu_k^{\mathrm{sm}} + X_k \frac{W_k h_k}{\mathcal{R} T^2} \nabla T \ . \tag{5.6}$$



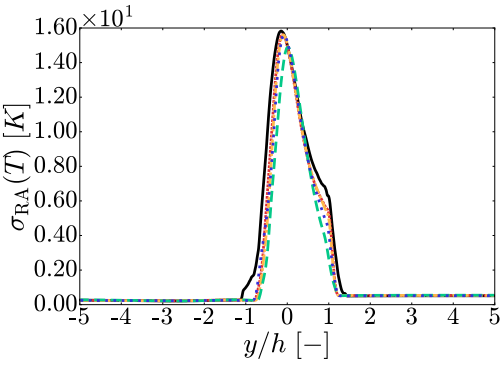
$x/h = 1$ (RA)



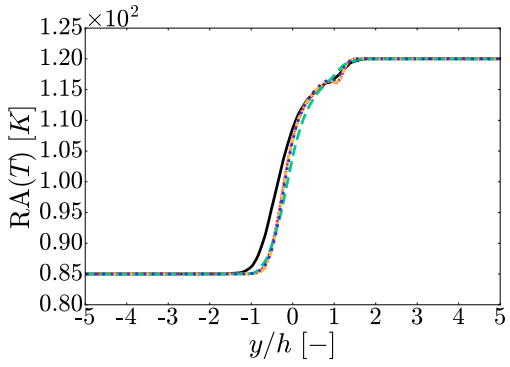
$x/h = 1$ (RA RMSD)



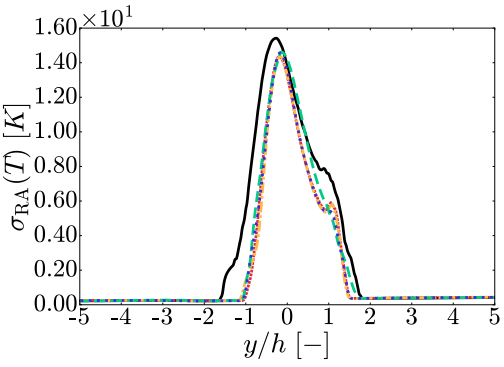
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

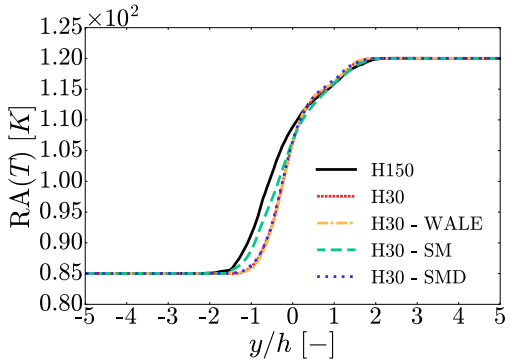


$x/h = 5$ (RA)

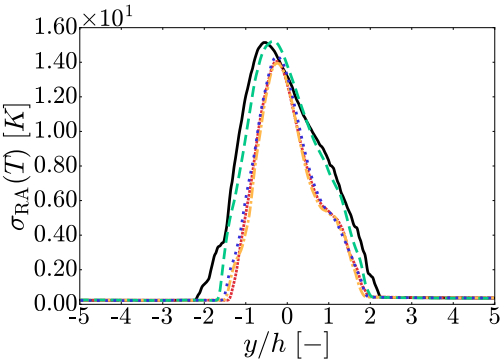


$x/h = 5$ (RA RMSD)

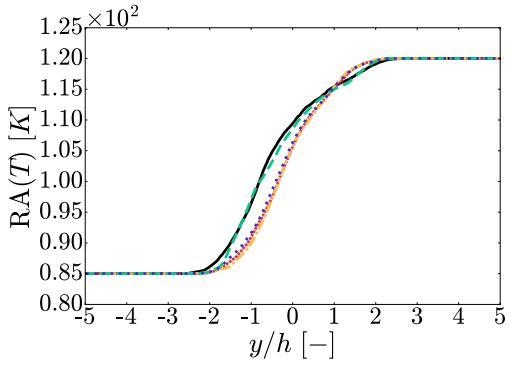
FIGURE 5.11 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



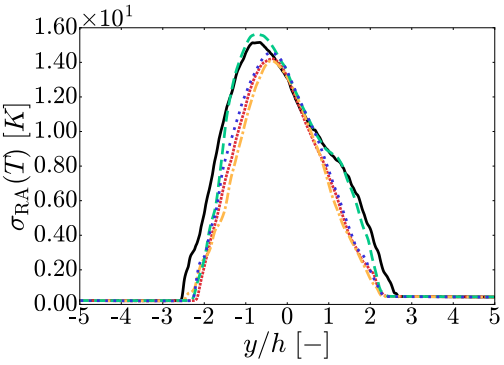
$x/h = 7$ (RA)



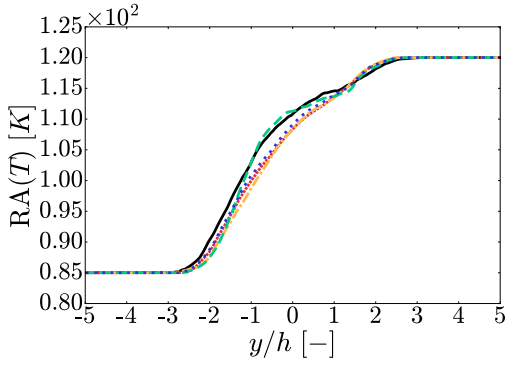
$x/h = 7$ (RA RMSD)



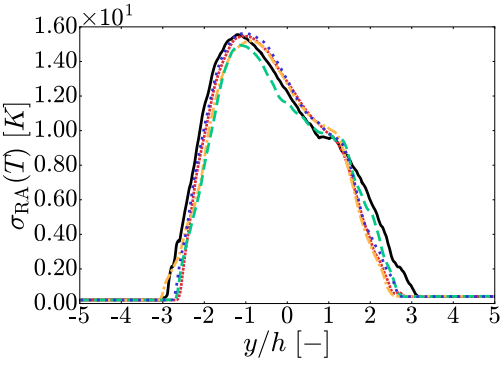
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

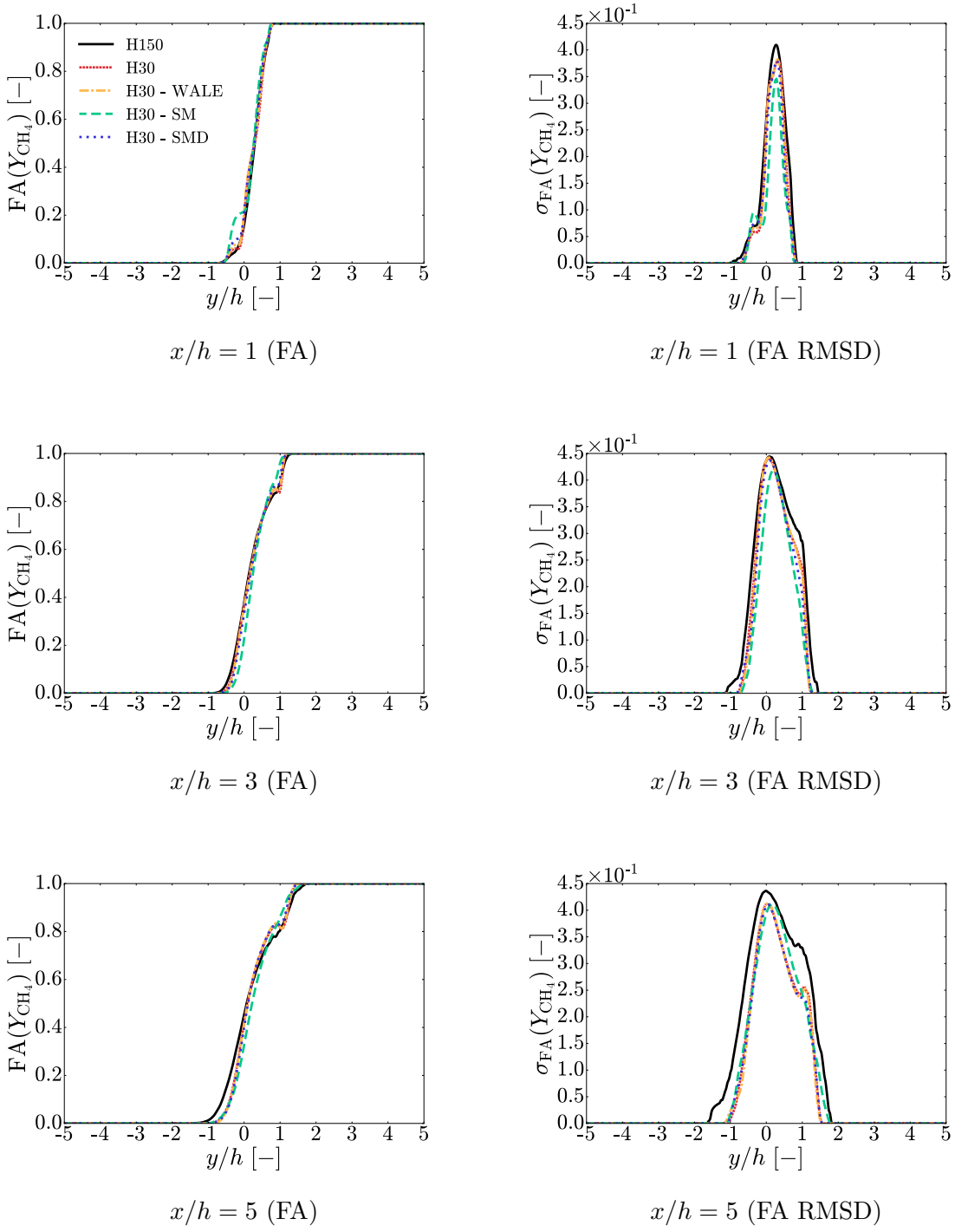


$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 5.12 – Suite de la Fig. 5.11.

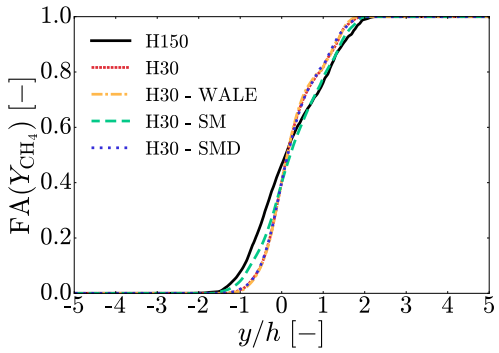


$x/h = 1$ (FA) $x/h = 1$ (FA RMSD)

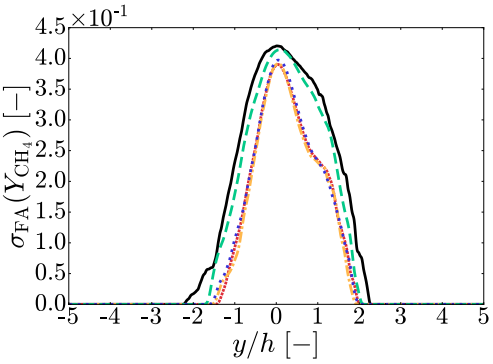
$x/h = 3$ (FA) $x/h = 3$ (FA RMSD)

$x/h = 5$ (FA) $x/h = 5$ (FA RMSD)

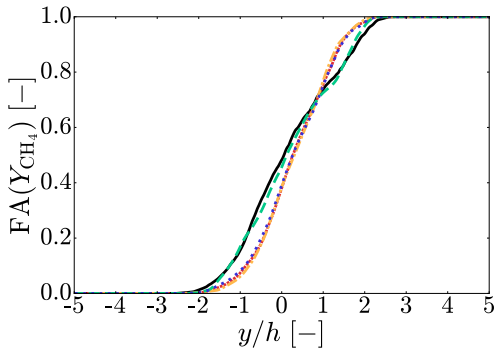
FIGURE 5.13 – Profils de **fraction massique moyenne de CH_4** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



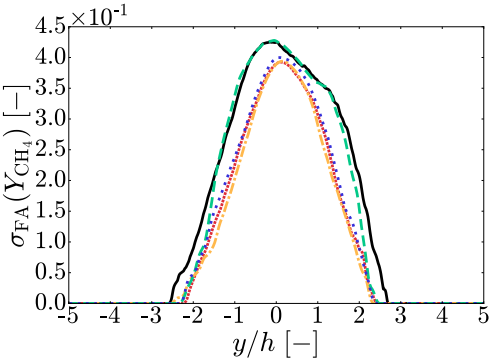
$x/h = 7$ (FA)



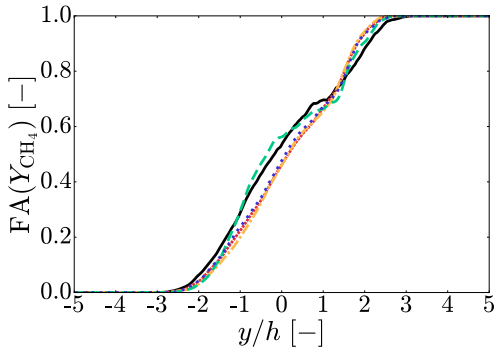
$x/h = 7$ (FA RMSD)



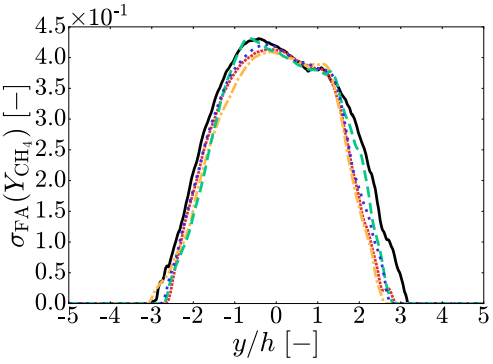
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

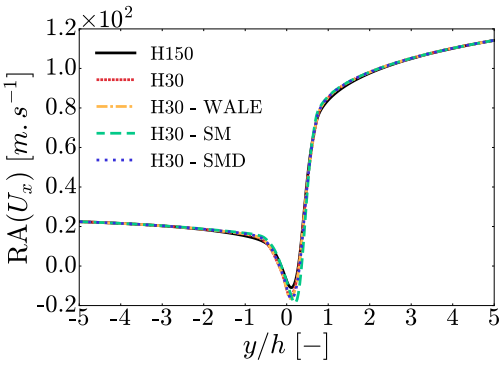


$x/h = 11$ (FA)

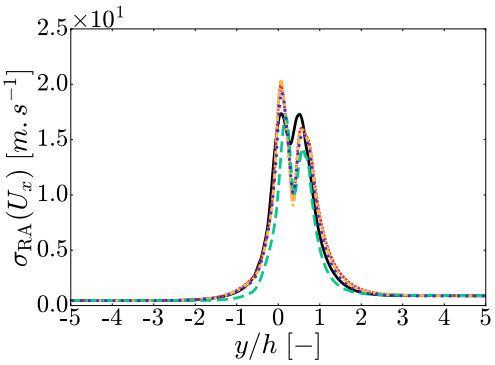


$x/h = 11$ (FA RMSD)

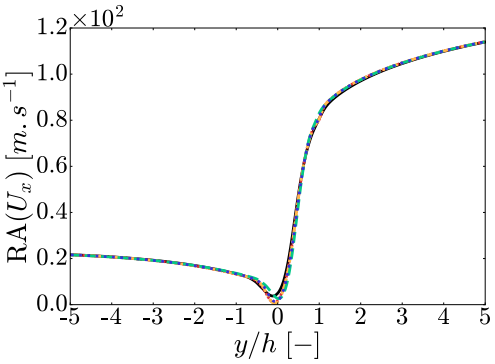
FIGURE 5.14 – Suite de la Fig. 5.13.



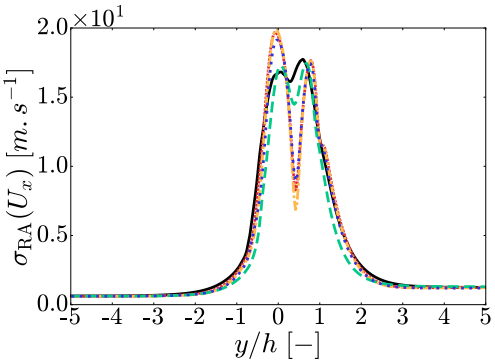
$x/h = 1$ (RA)



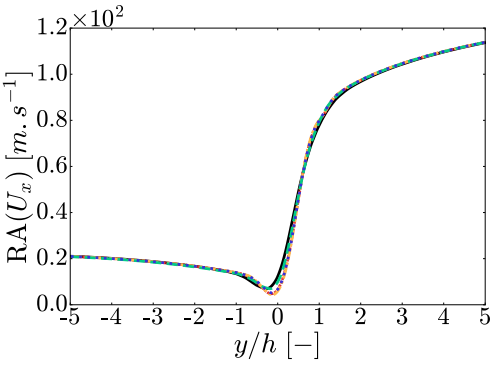
$x/h = 1$ (RA RMSD)



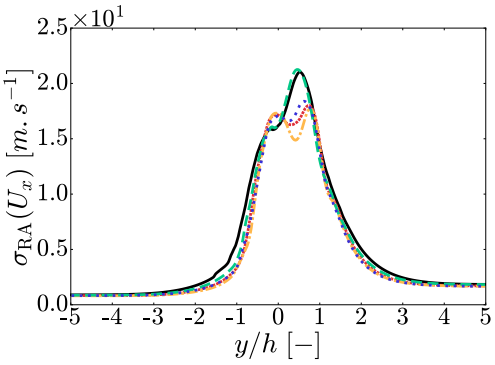
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

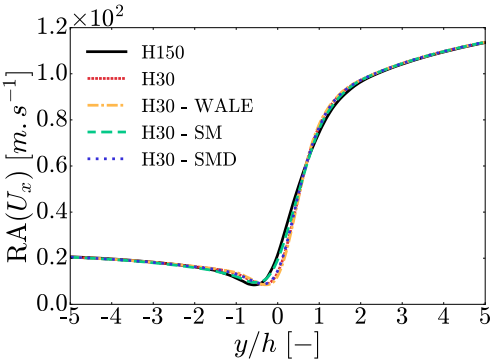


$x/h = 5$ (RA)

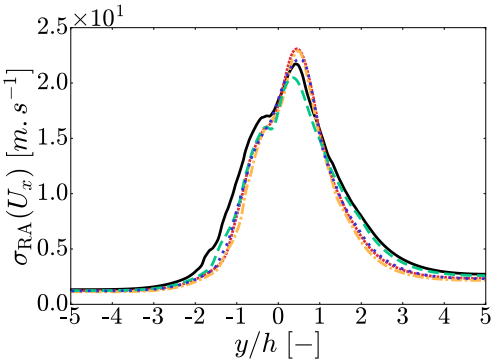


$x/h = 5$ (RA RMSD)

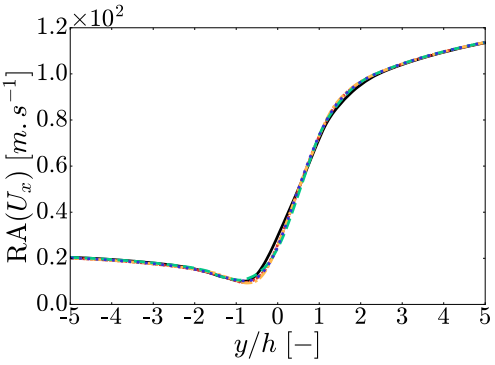
FIGURE 5.15 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



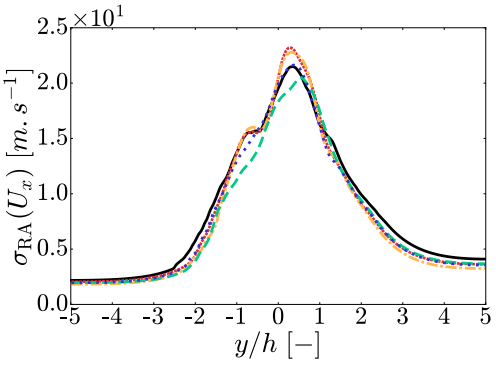
$x/h = 7$ (RA)



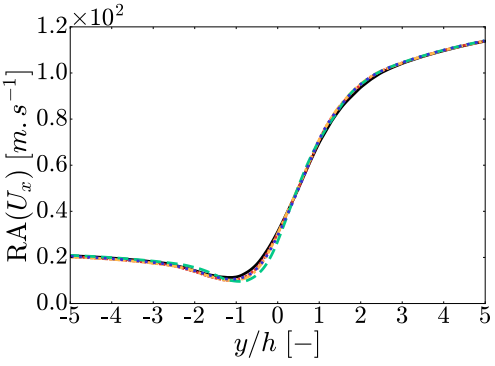
$x/h = 7$ (RA RMSD)



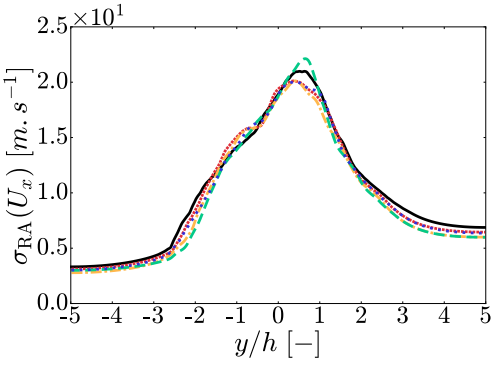
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

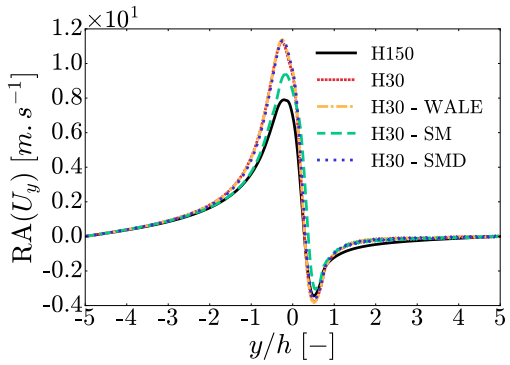


$x/h = 11$ (RA)

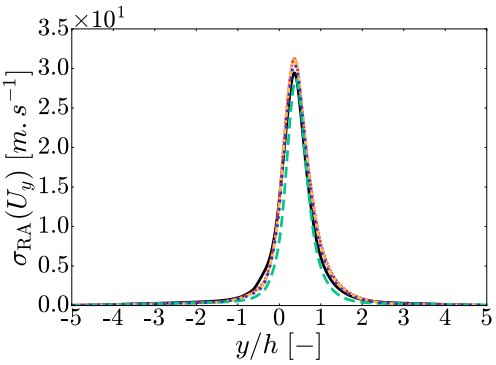


$x/h = 11$ (RA RMSD)

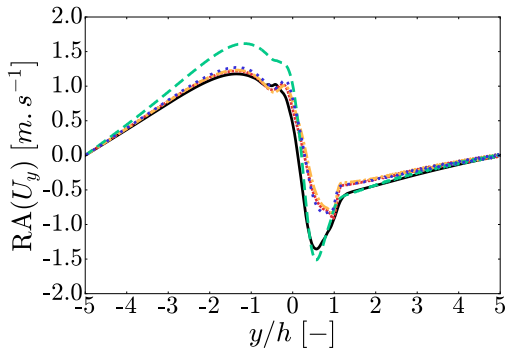
FIGURE 5.16 – Suite de la Fig. 5.15.



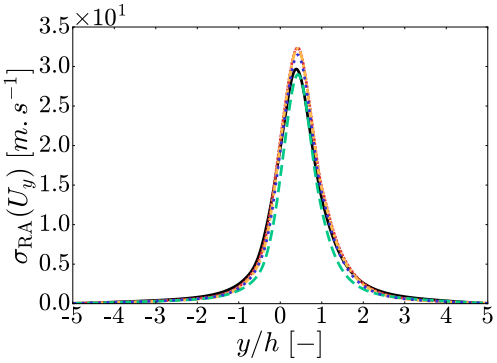
$x/h = 1$ (RA)



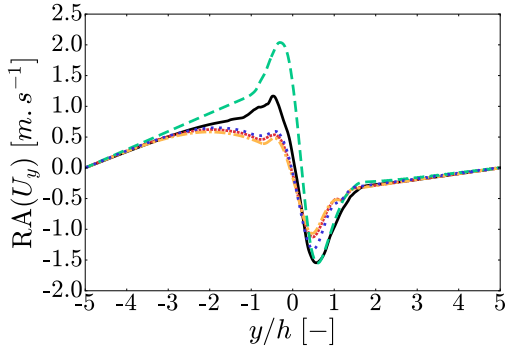
$x/h = 1$ (RA RMSD)



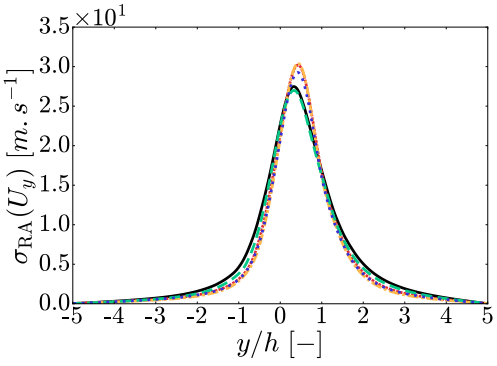
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

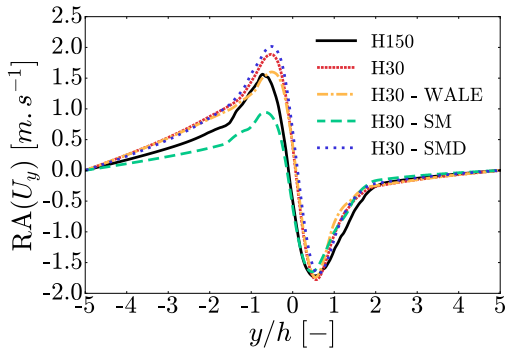


$x/h = 5$ (RA)

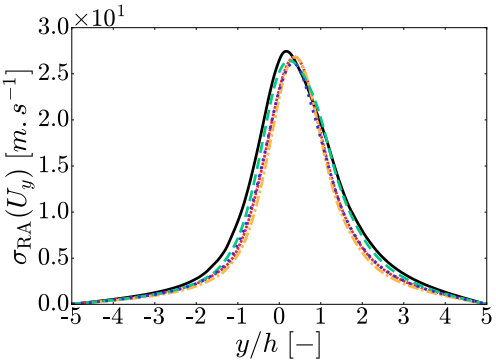


$x/h = 5$ (RA RMSD)

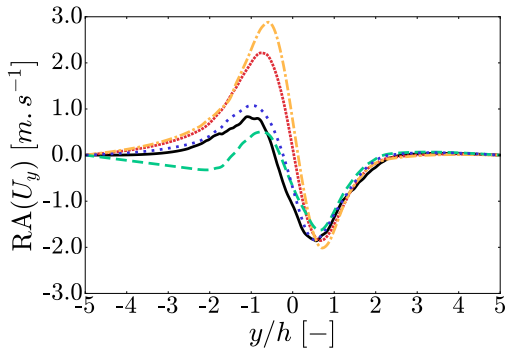
FIGURE 5.17 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



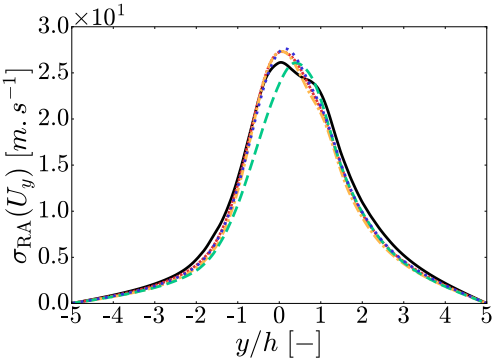
$x/h = 7$ (RA)



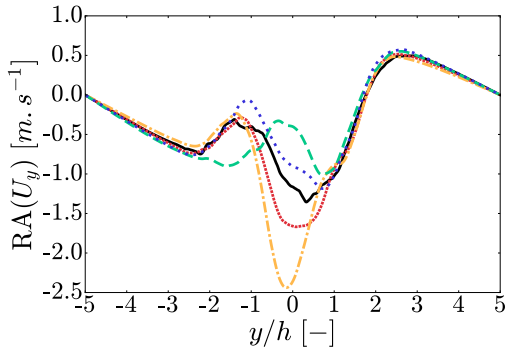
$x/h = 7$ (RA RMSD)



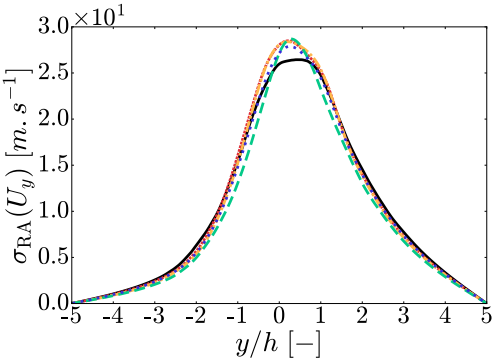
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)



$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 5.18 – Suite de la Fig. 5.17.

Pour la suite, on pose :

$$\mathbf{d}_k = \mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}} + \mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}} \ , \tag{5.7}$$

avec :

$$\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}} = \nabla X_k \quad \text{et} \quad \mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}} = \mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,sm}} + \mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,T}} = X_k \nabla \mu_k^{\mathrm{sm}} + X_k \frac{W_k h_k}{\mathcal{R} T^2} \nabla T \ . \tag{5.8}$$

5.3.3.1 Comparaison des champs instantanés

La Fig. 5.19 compare sur des champs instantanés, les champs de fraction massique de CH_4 et de masse volumique. Globalement, on voit une structure d'écoulement très similaire. Même si les tourbillons semblent légèrement différents, la comparaison reste délicate puisque des champs à des instants différents pourraient amener à des conclusions différentes. Ainsi, il est vain de comparer qualitativement ces champs qui restent relativement similaires avec les deux modélisations des flux de diffusion.

5.3.3.2 Comparaison des profils moyens

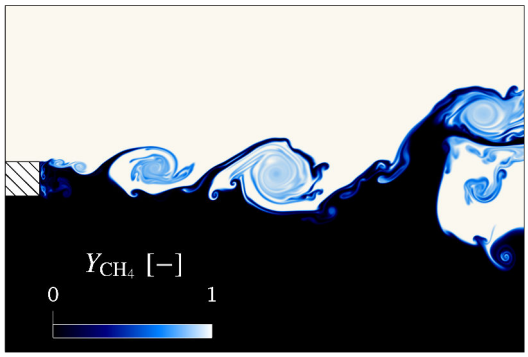
Comme les différences entre les champs instantanés obtenus avec des modélisations différentes des flux de diffusion restent délicates à commenter, il est préférable de comparer directement sur des profils de champs moyens. Les Fig. 5.20 et Fig. 5.21 comparent les effets d'une modélisation non-idéale des flux de diffusion sur le maillage H150 et sur le maillage H30 avec le modèle SMD, avec la masse volumique moyenne. Si on ne compare les profils que deux à deux, i.e. H150 - IT contre H150 - NIT et H30 - IT contre H30 - NIT, on voit alors que la prise en compte des effets non-idéaux de diffusion ne modifie pas de manière significative la structure de l'écoulement dans ce cas, puisque les profils de masse volumique restent quasiment inchangés. On commence à observer une légère différence à partir d'une distance de $7h$ de l'injecteur et de manière plus marquée sur le profil à $9h$ de l'injecteur, où le profil de masse volumique H150 - NIT est légèrement plus pentu que celui H150 - IT, ce qui se traduit par une couche de mélange légèrement moins diffusive. Il est également intéressant de remarquer que le comportement NIT est bien modélisé par LES, puisque les écarts entre IT et NIT observés avec le cas H150 (approche DNS) sont répercutés de la même façon sur le cas H30 modélisé avec SMD (approche LES).

Des résultats similaires peuvent être observés sur les profils de température (Fig. 5.22 et Fig. 5.22) et de fraction massique de CH_4 (Fig. 5.24 et Fig. 5.25).

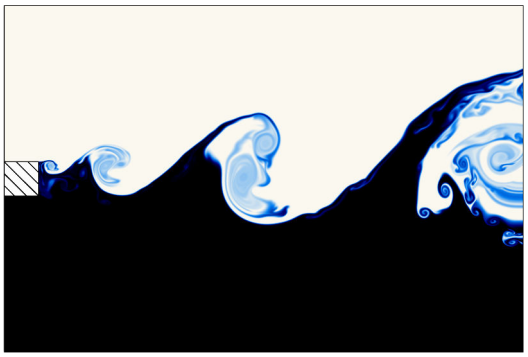
On ne relève en revanche quasiment aucune différence sur la vitesse axiale moyenne lorsqu'on prend en compte une modélisation non-idéale des flux de diffusion, comme le montre les Fig. 5.26 et Fig. 5.27.

Par contre ces différences sont davantage prononcées concernant la vitesse transverse moyenne, comme l'illustre les Fig. 5.28 et Fig. 5.29. Toutefois, dans ce cas-là, la vitesse transverse étant bien plus faible que la vitesse axiale (d'environ un facteur 10 à 100 suivant où l'on regarde), une légère différence dans la prédiction de celle-ci n'affecte finalement que peu la structure globale de l'écoulement.

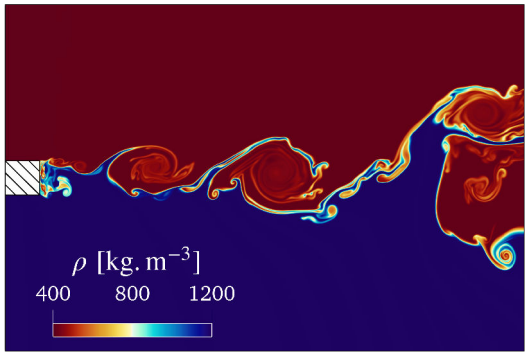
Ainsi, il semblerait que la prise en compte des effets de diffusion non-idéale n'affecte que peu la structure de l'écoulement de la configuration étudiée, même si de légères différences peuvent être néanmoins observées. En effet, la couche de mélange est très légèrement moins ouverte car moins diffuse et les minima et maxima de la vitesse transverse sont légèrement amplifiés lorsque les flux de diffusion non-idéaux sont pris en compte.



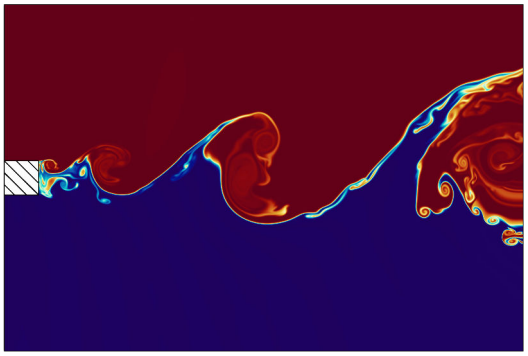
(a) H150 - IT



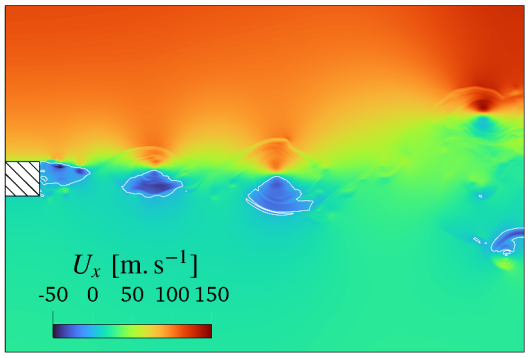
(b) H150 - NIT



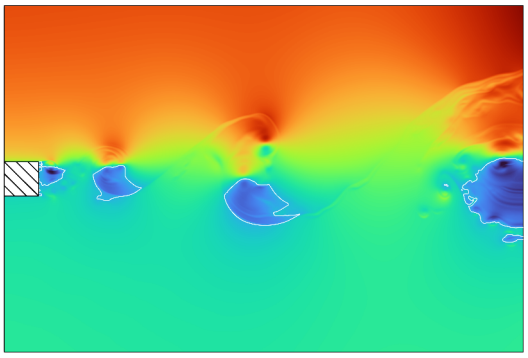
(c) H150 - IT



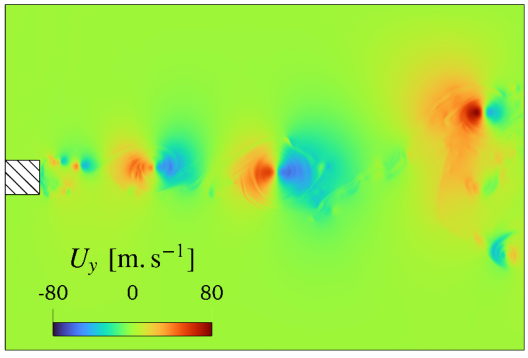
(d) H150 - NIT



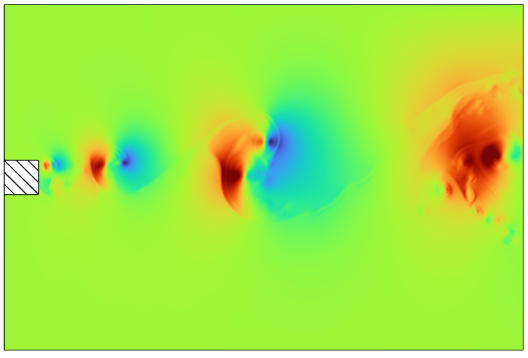
(e) H150 - IT



(f) H150 - NIT

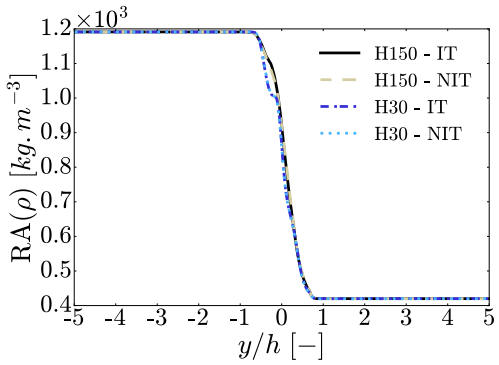


(g) H150 - IT

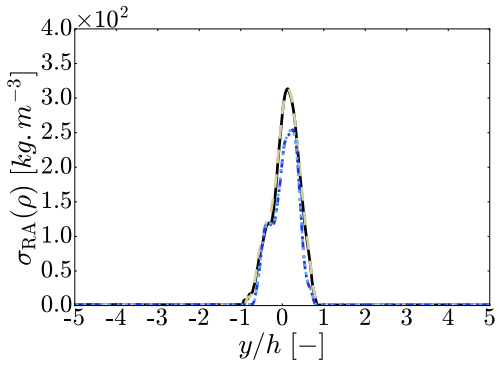


(h) H150 - NIT

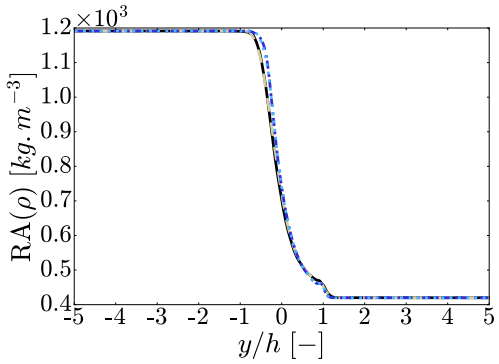
FIGURE 5.19 – Comparaison des champs instantanés de fraction massique de méthane (a-b), de masse volumique (c-d), de vitesse axiale (e-f) et de vitesse transverse (g-h), avec diffusion idéale (colonne de gauche) et non-idéale (colonne de droite), pour un maillage H150.



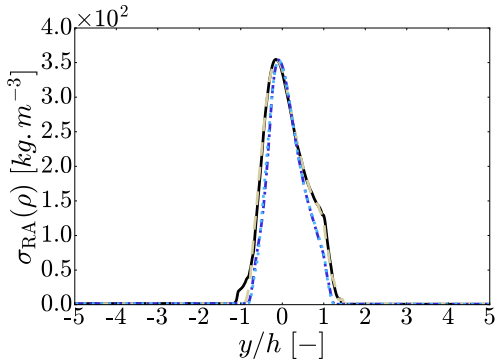
$x/h = 1$ (RA)



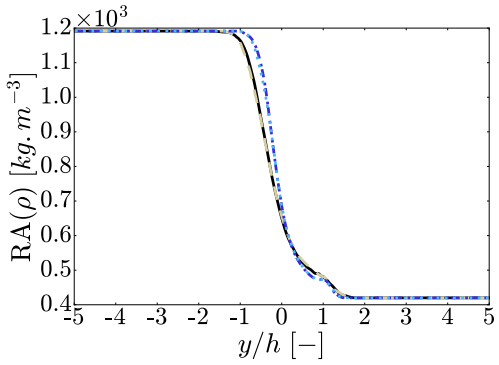
$x/h = 1$ (RA RMSD)



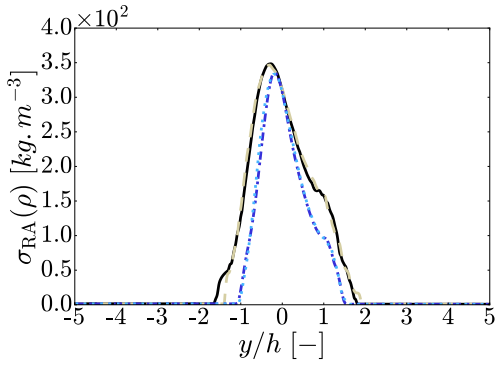
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

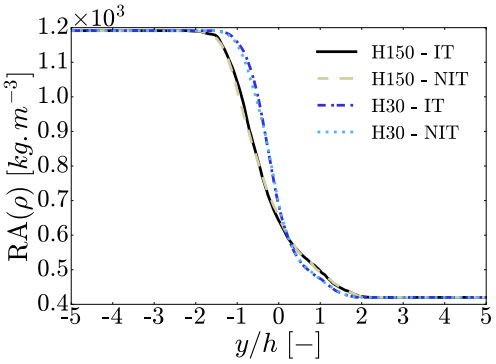


$x/h = 5$ (RA)

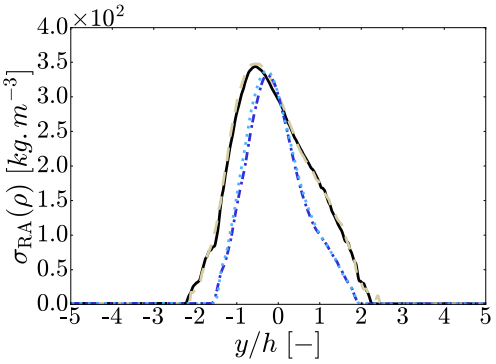


$x/h = 5$ (RA RMSD)

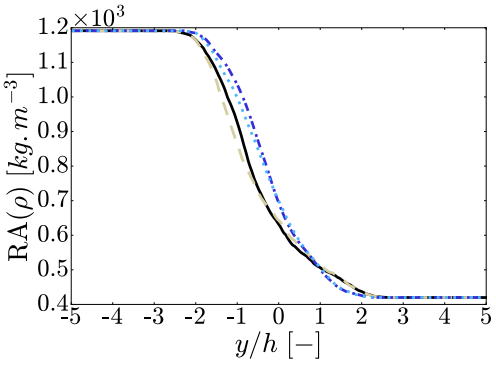
FIGURE 5.20 – Profils de **masse volumique moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



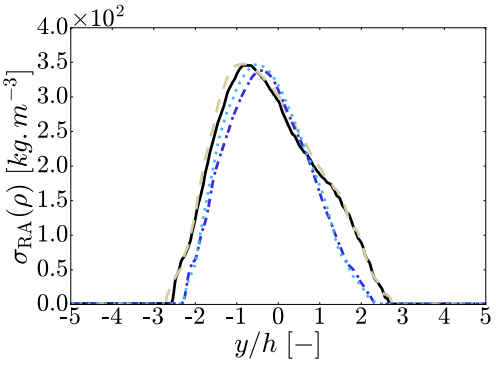
$x/h = 7$ (RA)



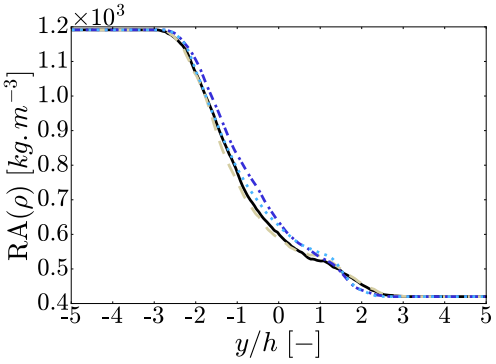
$x/h = 7$ (RA RMSD)



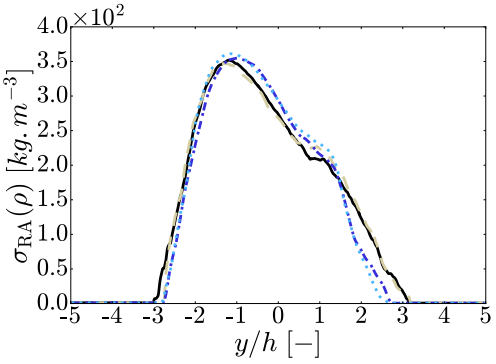
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

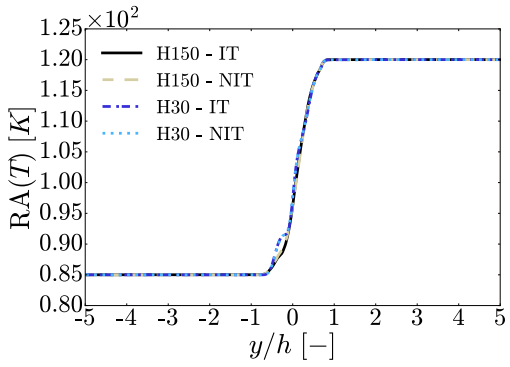


$x/h = 11$ (RA)

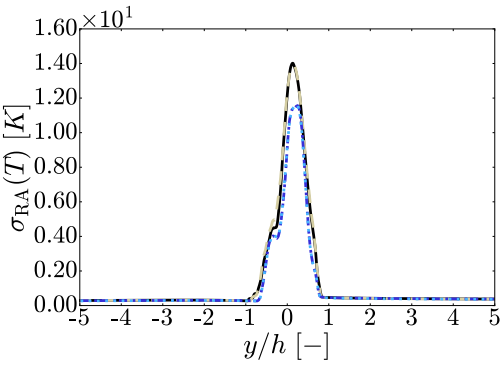


$x/h = 11$ (RA RMSD)

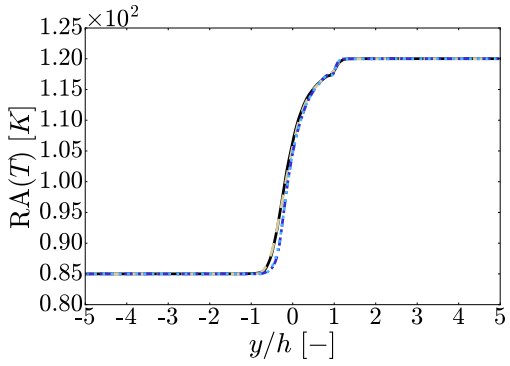
FIGURE 5.21 – Suite de la Fig. 5.20.



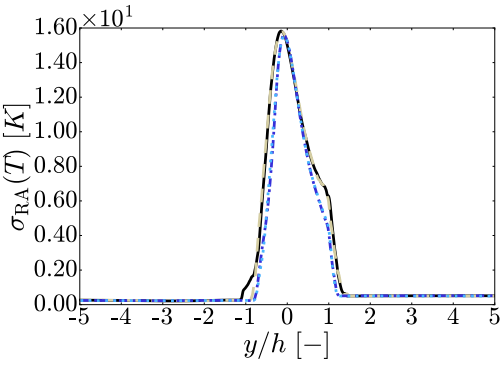
$x/h = 1$ (RA)



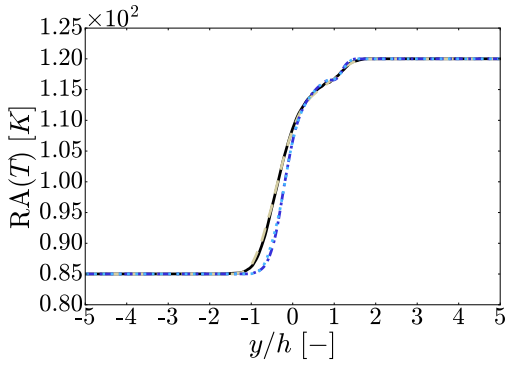
$x/h = 1$ (RA RMSD)



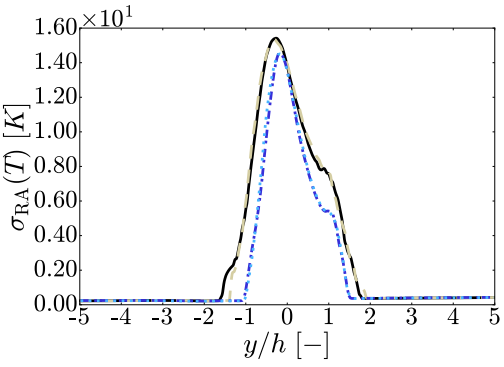
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

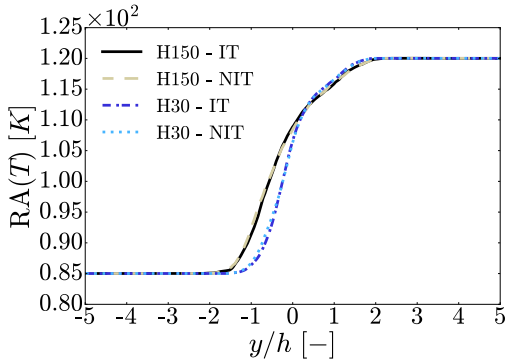


$x/h = 5$ (RA)

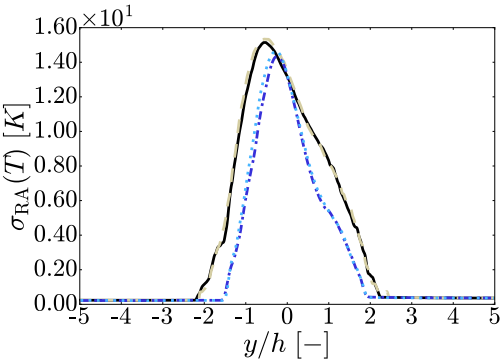


$x/h = 5$ (RA RMSD)

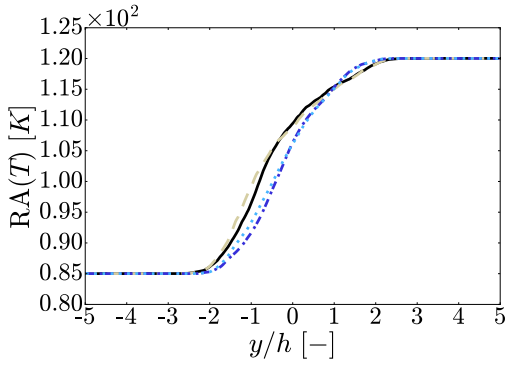
FIGURE 5.22 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



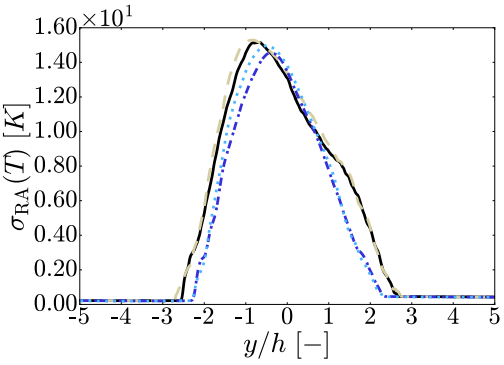
$x/h = 7$ (RA)



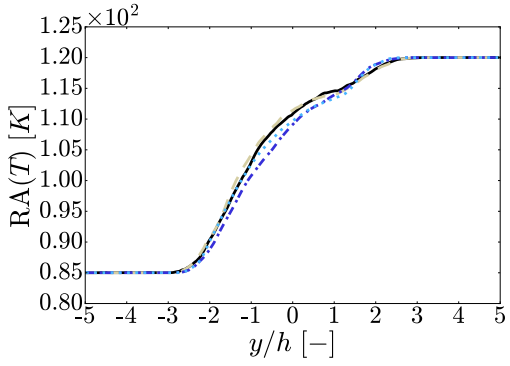
$x/h = 7$ (RA RMSD)



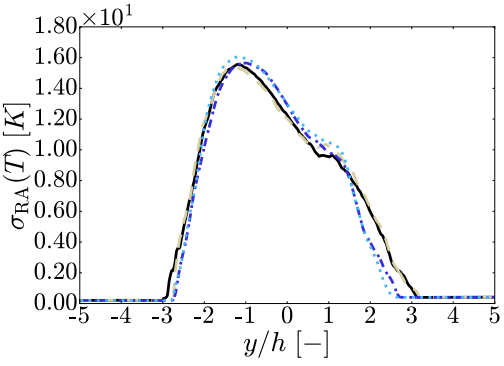
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

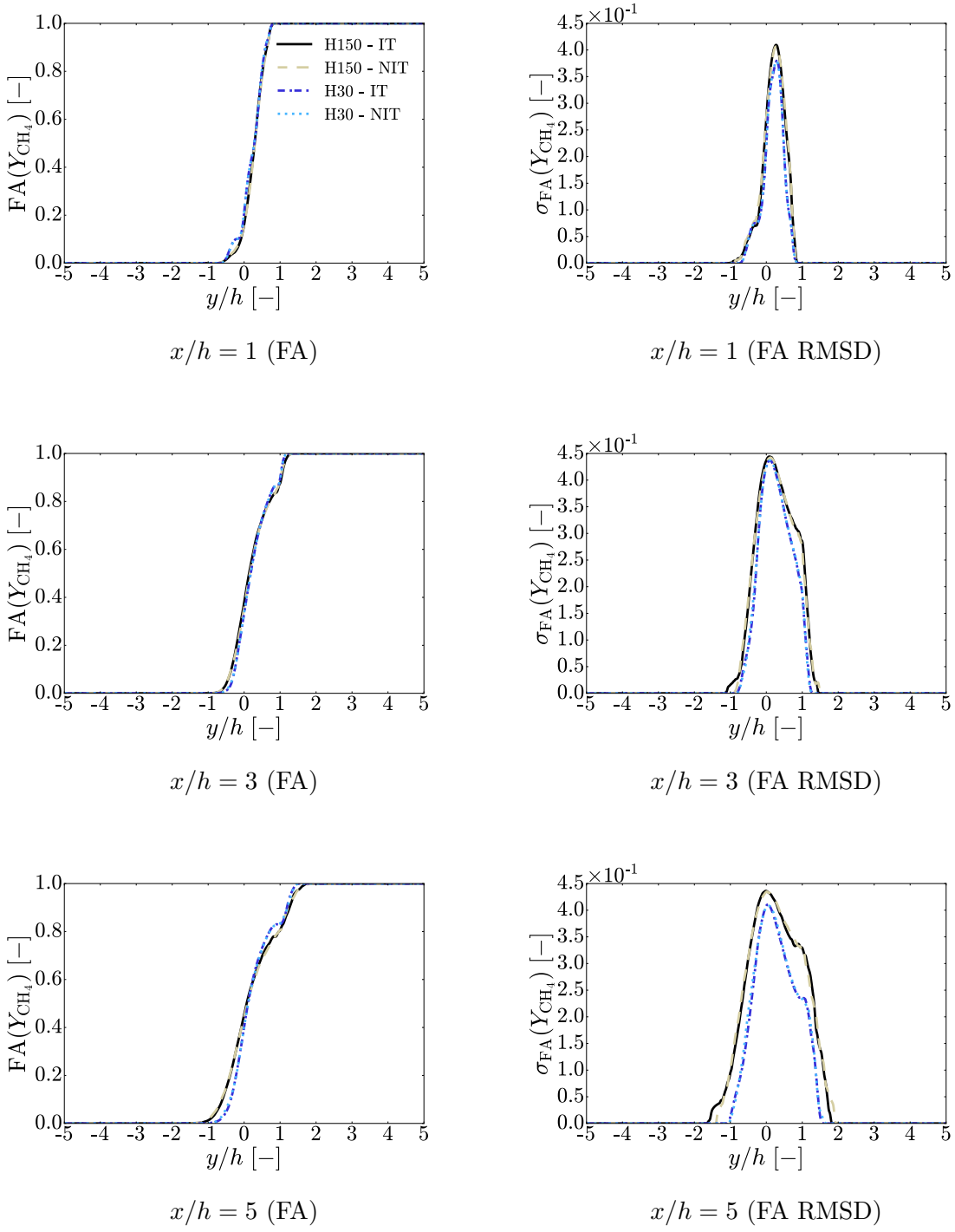


$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 5.23 – Suite de la Fig. 5.22.

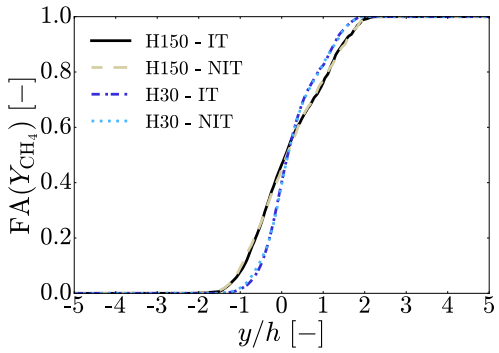


$x/h = 1$ (FA) $x/h = 1$ (FA RMSD)

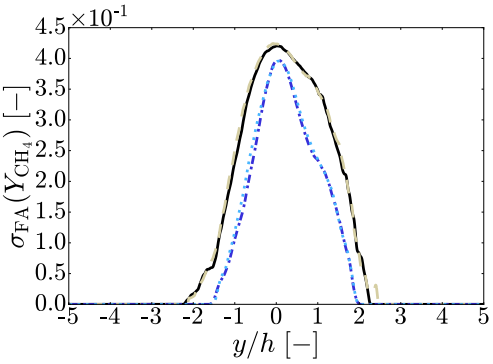
$x/h = 3$ (FA) $x/h = 3$ (FA RMSD)

$x/h = 5$ (FA) $x/h = 5$ (FA RMSD)

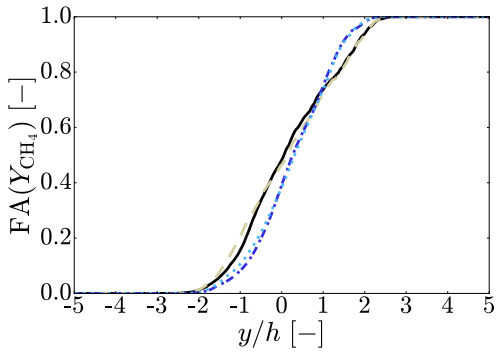
FIGURE 5.24 – Profils de **fraction massique moyenne de CH_4** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



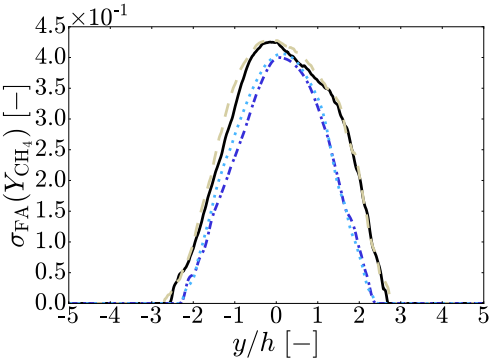
$x/h = 7$ (FA)



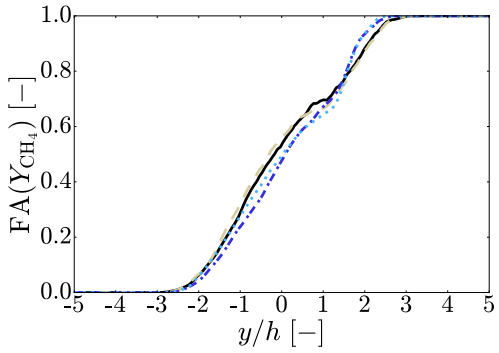
$x/h = 7$ (FA RMSD)



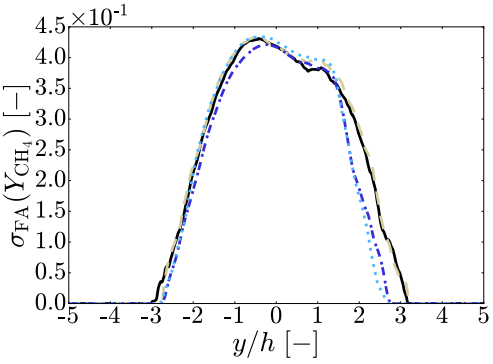
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

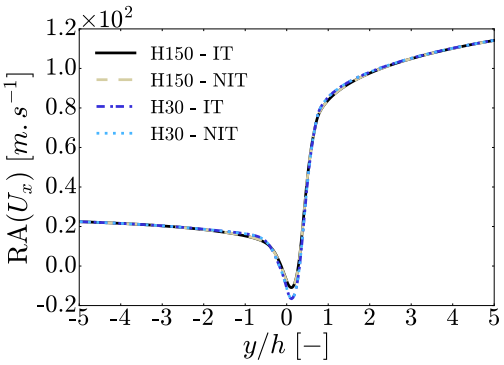


$x/h = 11$ (FA)

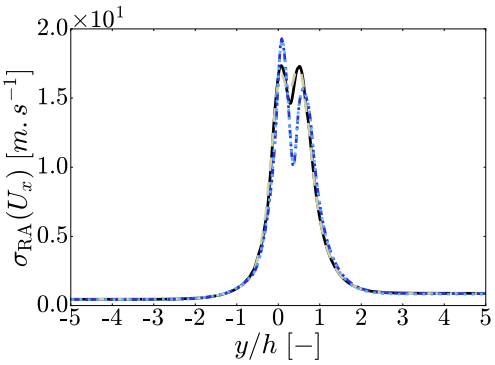


$x/h = 11$ (FA RMSD)

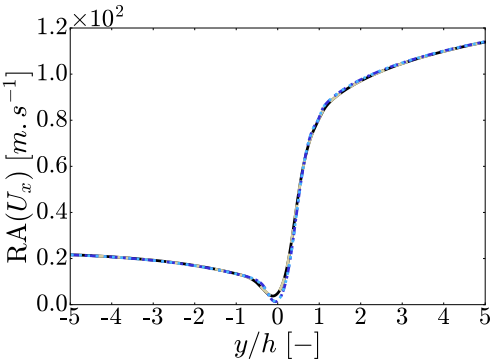
FIGURE 5.25 – Suite de la Fig. 5.24.



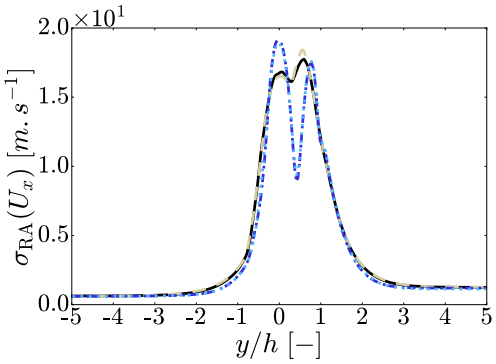
$x/h = 1$ (RA)



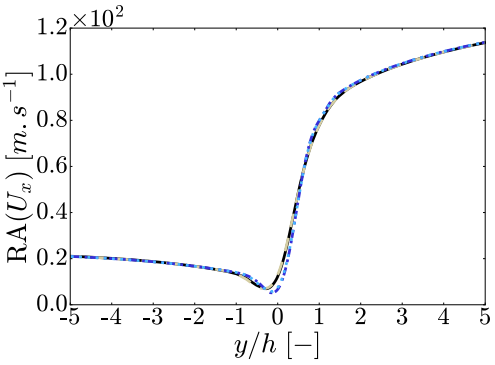
$x/h = 1$ (RA RMSD)



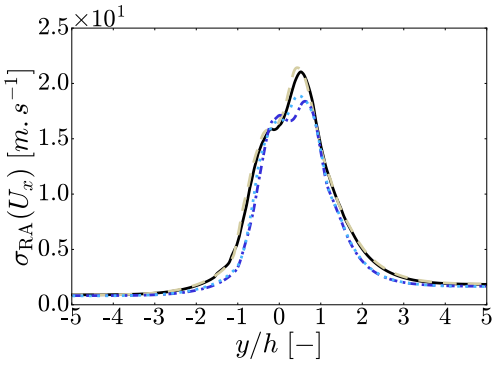
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

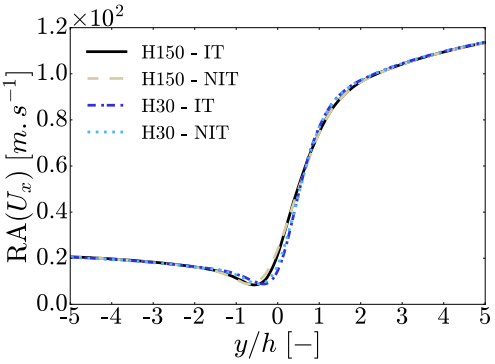


$x/h = 5$ (RA)

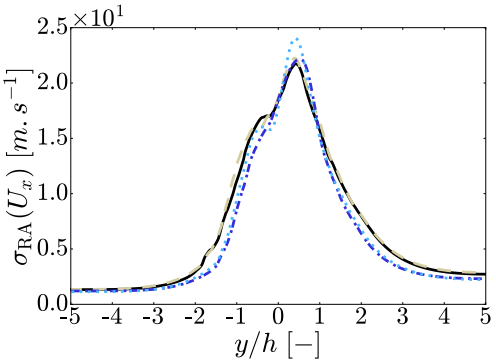


$x/h = 5$ (RA RMSD)

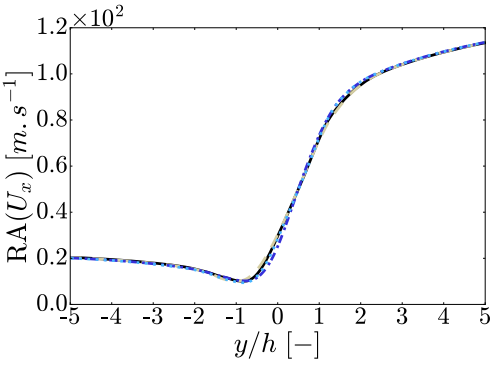
FIGURE 5.26 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



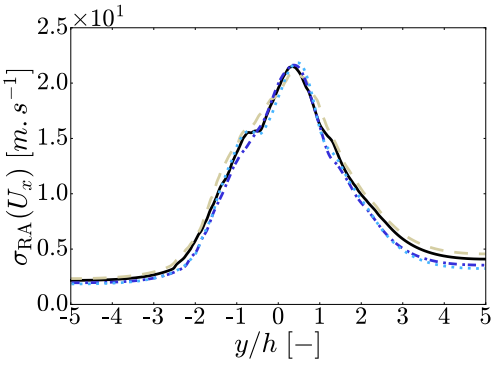
$x/h = 7$ (RA)



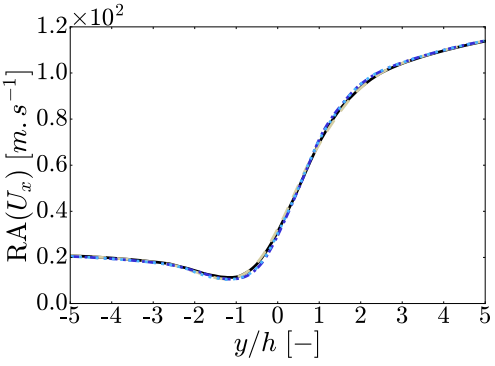
$x/h = 7$ (RA RMSD)



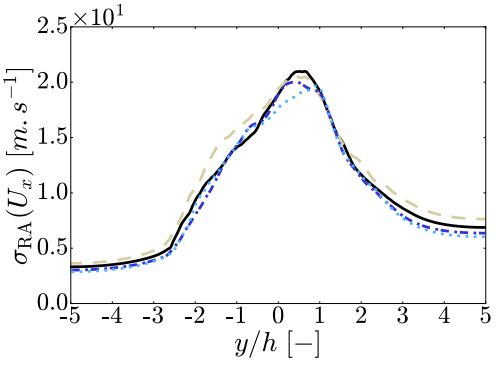
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

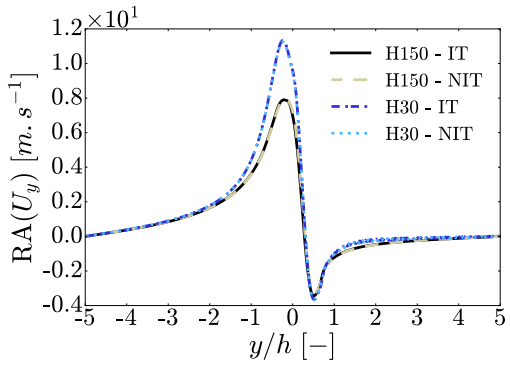


$x/h = 11$ (RA)

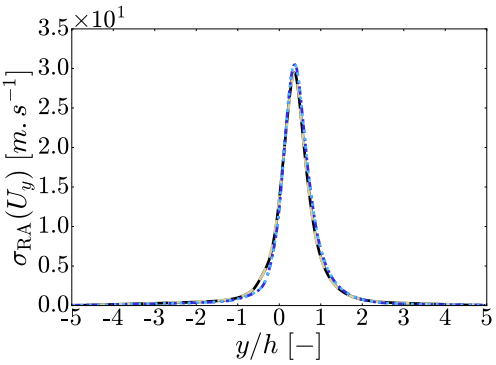


$x/h = 11$ (RA RMSD)

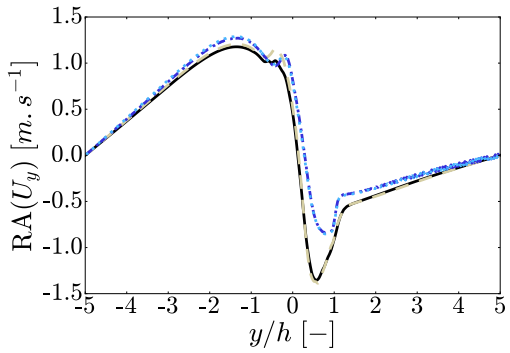
FIGURE 5.27 – Suite de la Fig. 5.26.



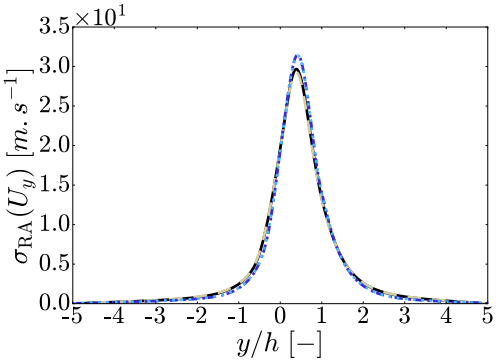
$x/h = 1$ (RA)



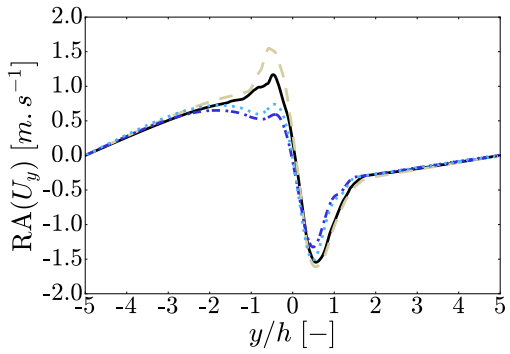
$x/h = 1$ (RA RMSD)



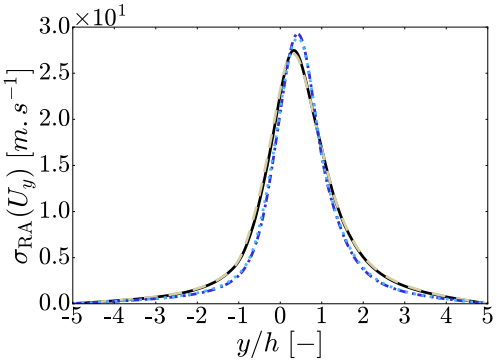
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

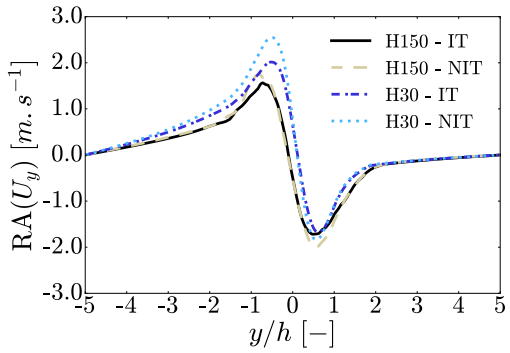


$x/h = 5$ (RA)

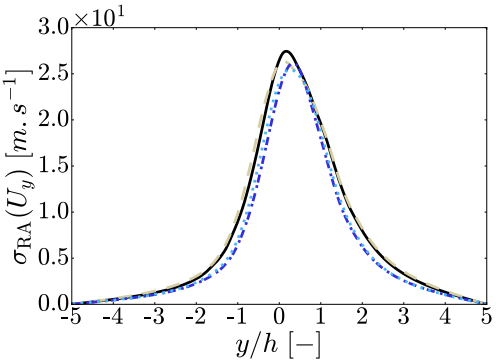


$x/h = 5$ (RA RMSD)

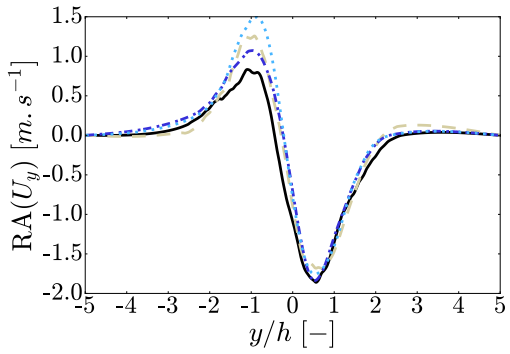
FIGURE 5.28 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



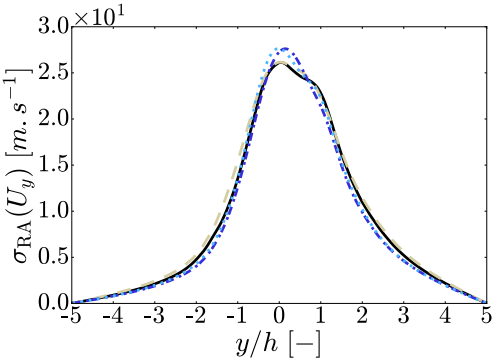
$x/h = 7$ (RA)



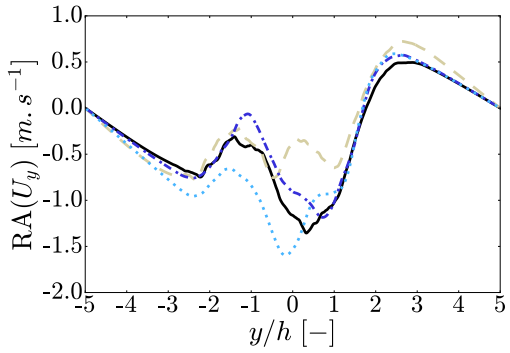
$x/h = 7$ (RA RMSD)



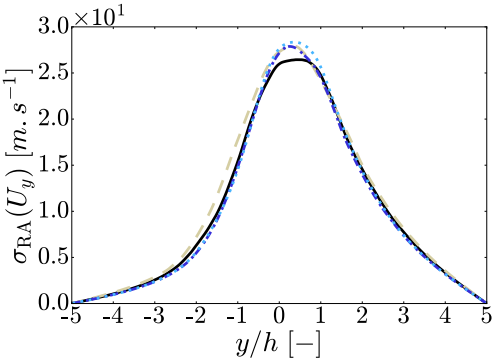
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)



$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 5.29 – Suite de la Fig. 5.28.

On pourrait toutefois s'attendre à de plus grandes différences lorsque des gradients de masse volumique plus importants sont en jeu, comme dans le cas d'une couche de mélange avec du méthane injecté supercritique au lieu du méthane injecté transcritique, ou encore lorsque l'écoulement est réactif (la masse volumique des gaz brulés étant relativement faible). De la même façon, dans un écoulement à plus faible vitesse, les phénomènes de diffusion auraient certainement un rôle plus important à jouer et ainsi les effets de diffusion non-idéale en seraient probablement d'autant plus importants.

Enfin, l'approche simpliste retenue pour modéliser les flux de diffusion en LES semble ici plutôt bien reproduire les écarts par rapport à une modélisation non-idéale des flux de diffusion.

5.3.4 Évaluation des flux de diffusion idéaux et non-idéaux

Dans cette section, on se propose de regarder de plus près comment sont modélisés les flux de diffusion (plus exactement, la force de diffusion ordinaire) avec les différentes approches, idéale et non-idéale.

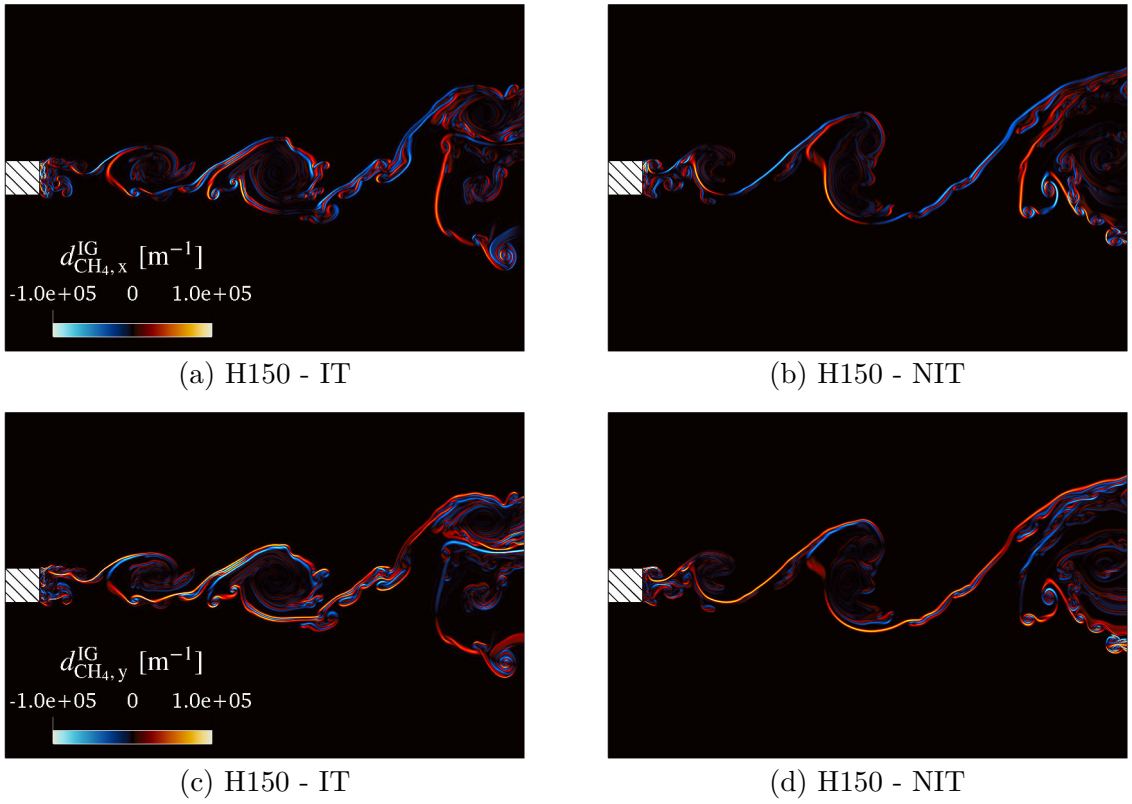
5.3.4.1 Comparaison sur le cas H150

Dans un premier temps, il est intéressant de comparer l'évaluation du terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$ avec l'approche idéale et l'approche non-idéale des flux de diffusion sur des champs instantanés. La Fig. 5.30 met justement en évidence les composantes axiales et transverses de ce terme pour l'espèce CH_4 (les composantes pour l'espèces O_2 étant simplement égales à l'opposé de celles pour le CH_4).

On voit sur cette figure que ces différents termes de diffusion sont disposés au même endroit, i.e. à l'interface entre le méthane et l'oxygène, ce qui est normal puisque le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$ est directement évalué grâce au gradient de fraction molaire de l'espèce k. Il semblerait également que la composante de diffusion transverse soit en général un peu plus élevée (en valeur absolue) que la composante axiale, ce qui est également attendu puisque la direction privilégiée de mélange est y du fait des conditions d'injections (méthane en haut et oxygène en bas, par rapport à la lèvre).

Il est également intéressant de regarder où agit la diffusion non-idéale (terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$) dans le cas de la simulation H150 - NIT et les différents termes $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,sm}}$ et $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,T}}$ qui la constituent, sur la Fig. 5.31. En effet, étonnamment la diffusion non-idéale semblerait essentiellement s'appliquer non pas à l'interface entre le méthane et l'oxygène où l'on a un gradient de masse volumique, mais plutôt vers le centre des structures tourbillonnaires, c'est-à-dire où l'on a un fort gradient de pression. Il est également bon de noter que la valeur de ce terme est plus faible d'au moins un ordre de grandeur à celle du terme de diffusion idéale.

Par contre, les fortes valeurs des termes $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,sm}}$ et $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,T}}$ sont bien quant à elles, localisées au niveau de l'interface entre le méthane et l'oxygène. Si l'on regarde également les valeurs minimales et maximales atteintes par ces termes, on voit bien que l'on est sur le même ordre de grandeur que la composante de diffusion idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$. Toutefois, un phénomène notable et que ces deux termes sont quasi-systématiquement de signes opposés et tendent à presque s'annuler mutuellement. Le résidu entre les deux étant le terme de diffusion que l'on cherche, à savoir $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$. C'est en fait ce phénomène d'auto-annulation entre ces deux termes qui pousse à presque entièrement annihiler les effets de diffusion non-idéale.



(a) H150 - IT (b) H150 - NIT

(c) H150 - IT (d) H150 - NIT

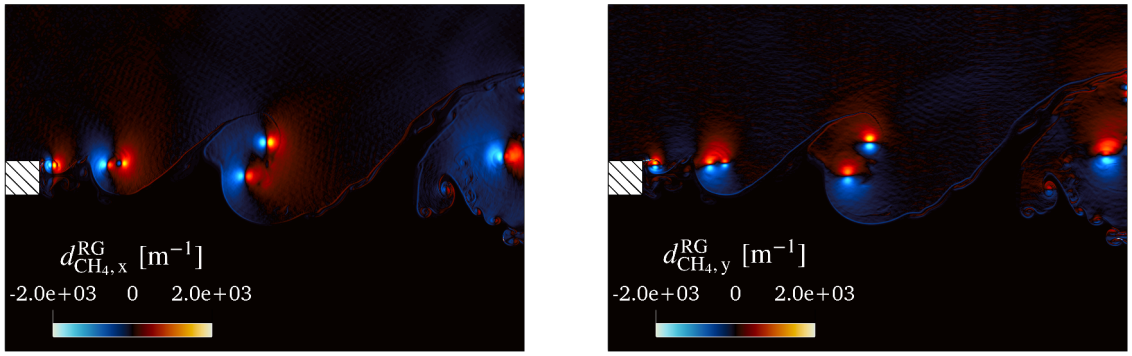
FIGURE 5.30 – Comparaison des champs instantanés de la composante idéale de la force de diffusion ordinaire de l'espèce CH_4 dans la direction x (a, b), et dans la direction y (c, d), avec diffusion idéale et non-idéale pour un maillage H150.

Cependant, rien ne dit que ce phénomène soit représentatif de ce qu'il pourrait se passer dans d'autres configurations. En effet, ici nous avons un faible gradient de masse volumique entre le méthane et l'oxygène (rapport de masse volumique d'un facteur 3 environ) et le gradient de pression au centre des structures tourbillonnaires est maximisé par la turbulence modélisée ici en 2D.

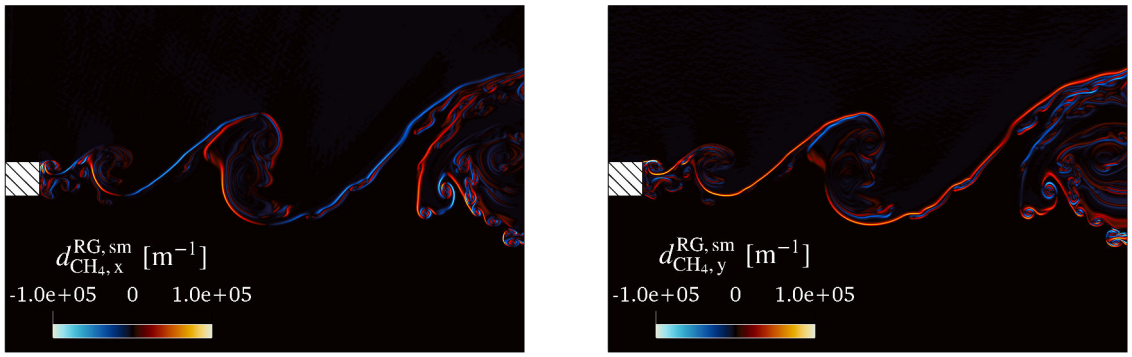
De ce constat-là, nous pouvons en tirer deux conjectures. La première est que les effets de diffusion non-idéale seront très probablement plus importants lorsqu'un gradient de masse volumique plus important est en jeu, soit à cause de différentes températures d'injection, soit par l'ajout de la combustion des deux ergols. Cette conjecture-là sera évaluée dans la section 5.4 avec la simulation d'une couche de mélange LOx/GCH_4 non réactive. La deuxième conjecture est qu'en 3D, les effets de diffusion non-idéale liés à des gradients de pression présents au niveau du centre des structures tourbillonnaires seront probablement plus faibles.

Il est également intéressant de comparer les profils de champs moyens des différents termes qui composent la force de diffusion ordinaire, modélisée avec les différentes approches, idéale et non-idéale, toujours dans le cas de simulations avec le maillage H150. Les Fig. 5.32 et Fig. 5.33 comparent les profils des termes qui composent la force de diffusion ordinaire du méthane dans la direction x et les Fig. 5.34 et Fig. 5.35 comparent ces mêmes termes dans la direction y.

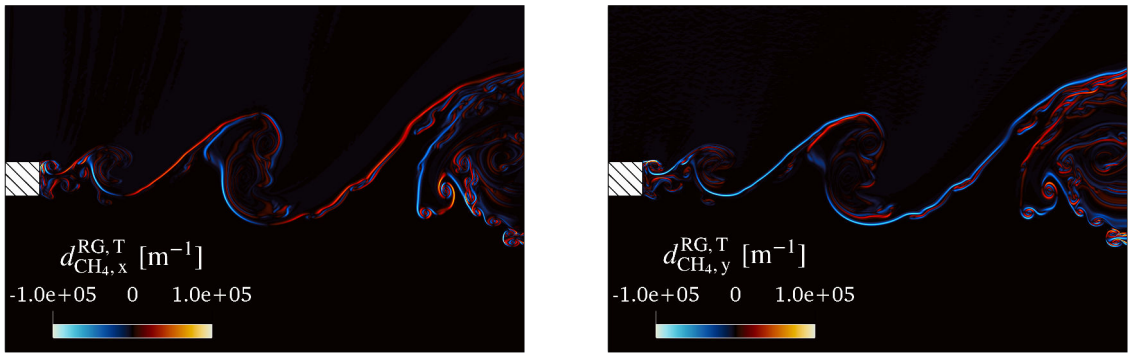
La première chose que l'on observe est que d'une manière générale, beaucoup de bruit est présent dans les profils, en particulier dans la direction x. Ceci est probablement du au fait



(a) $d^{RG}_{CH_4,x} = d^{RG,sm}_{CH_4,x} + d^{RG,T}_{CH_4,x}$ (b) $d^{RG}_{CH_4,y} = d^{RG,sm}_{CH_4,y} + d^{RG,T}_{CH_4,y}$



(c) $d^{RG,sm}_{CH_4,x}$ (d) $d^{RG,sm}_{CH_4,y}$

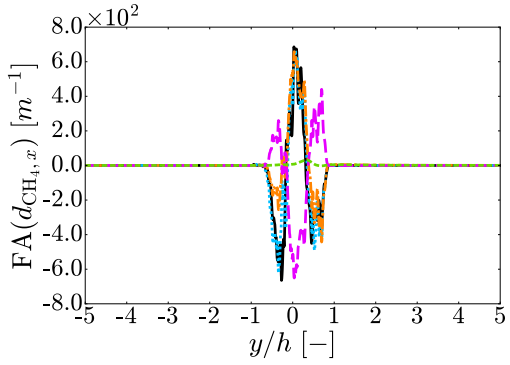


(e) $d^{RG,T}_{CH_4,x}$ (f) $d^{RG,T}_{CH_4,x}$

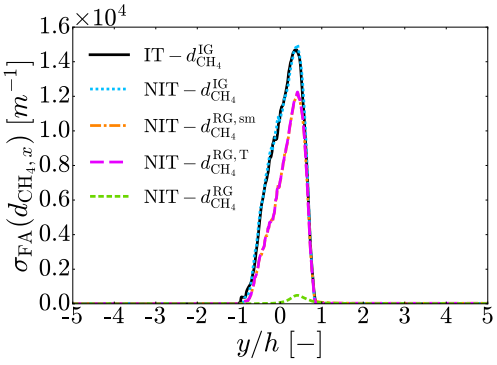
FIGURE 5.31 – Comparaison des champs instantanés de la composante non-idéale de la force de diffusion ordinaire de l'espèce CH_4 dans les directions x (a) et y (b) et des termes qui la constitue (c), (d), (e) et (f). Cas H150 - NIT.

que malgré le fait que les statistiques aient été cumulées sur un temps jugé suffisamment long d'environ 80 temps de passage, cette durée n'est peut être pas suffisante pour moyenner des grandeurs calculées à l'ordre un (i.e. issus de gradients), les gradients étant plus sensibles aux petites variations. Toutefois, des tendances se dégageant, les résultats restent tout de même exploitables.

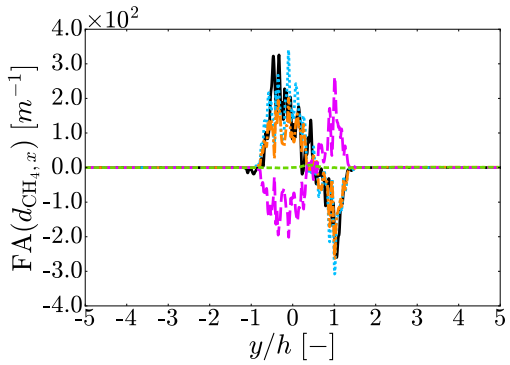
En effet, on peut remarquer d'une part que les termes $\mathbf{d}_k^{RG,sm}$ et $\mathbf{d}_k^{RG,T}$ sont en valeurs absolues, du même ordre de grandeur que le terme de diffusion idéale $\mathbf{d}_k^{IG}$. En revanche, ces deux termes, $\mathbf{d}_k^{RG,sm}$ et $\mathbf{d}_k^{RG,T}$ semblent être toujours de signes opposés. Ainsi, le terme résultant



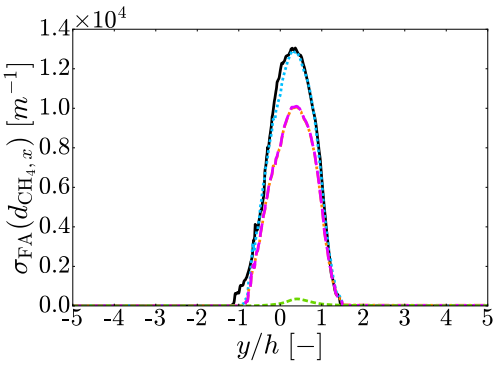
$x/h = 1$ (FA)



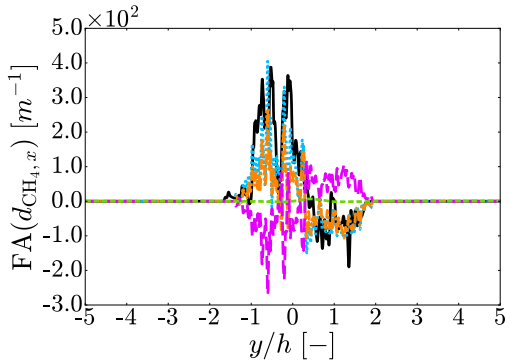
$x/h = 1$ (FA RMSD)



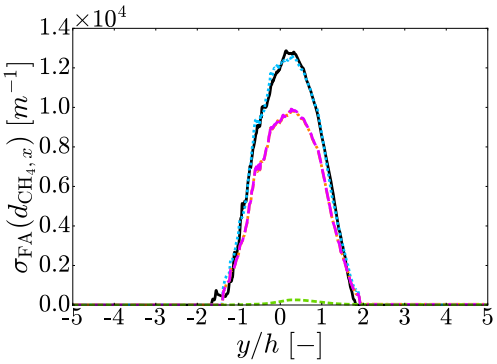
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

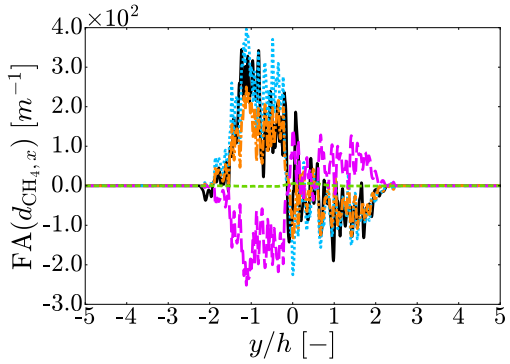


$x/h = 5$ (FA)

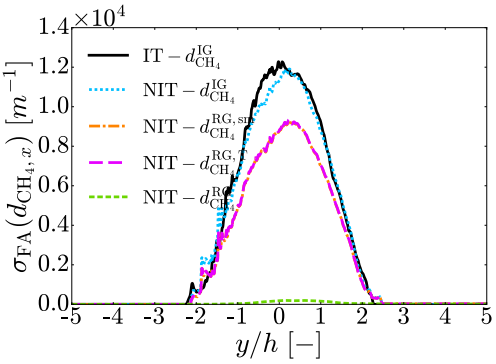


$x/h = 5$ (FA RMSD)

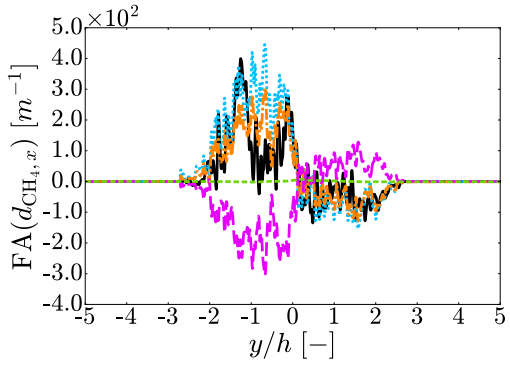
FIGURE 5.32 – Profils des **différents termes composants la force de diffusion ordinaire axiale moyenne de l'espèce CH_4** et de leur écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*. Cas H150 - IT (ligne continue noire) et H150 - NIT (autres lignes).



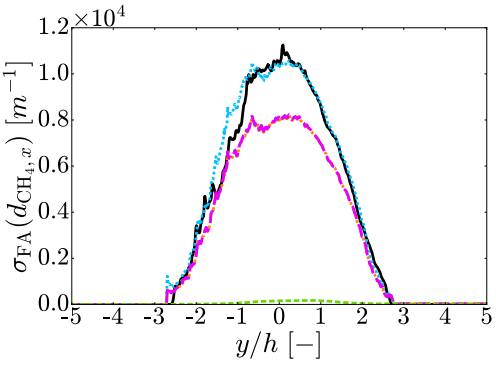
$x/h = 7$ (FA)



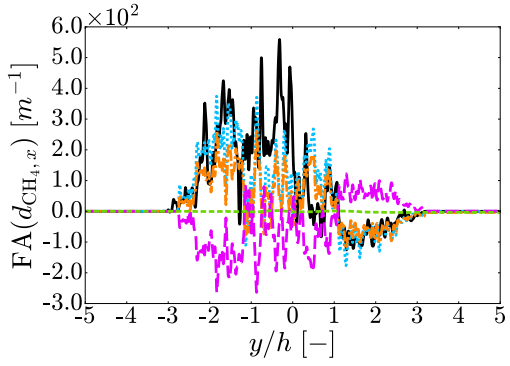
$x/h = 7$ (FA RMSD)



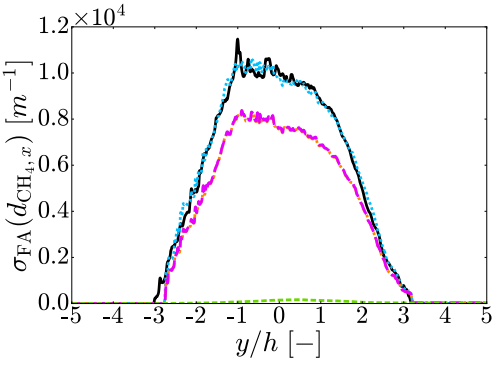
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

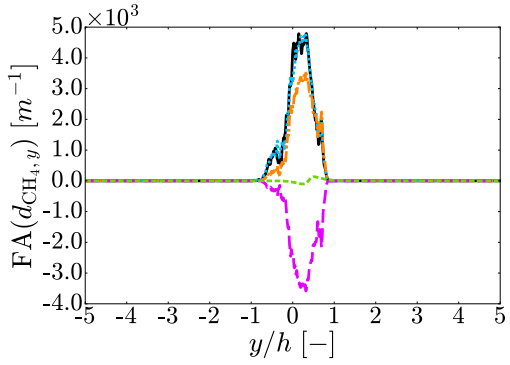


$x/h = 11$ (FA)

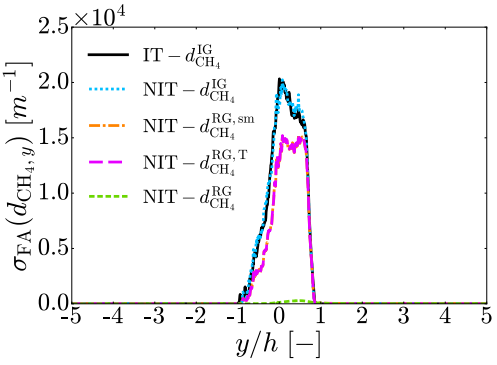


$x/h = 11$ (FA RMSD)

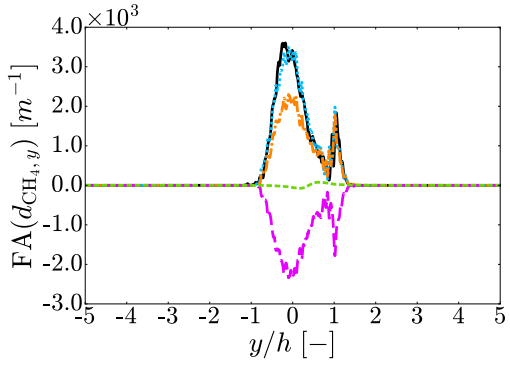
FIGURE 5.33 – Suite de la Fig. 5.32.



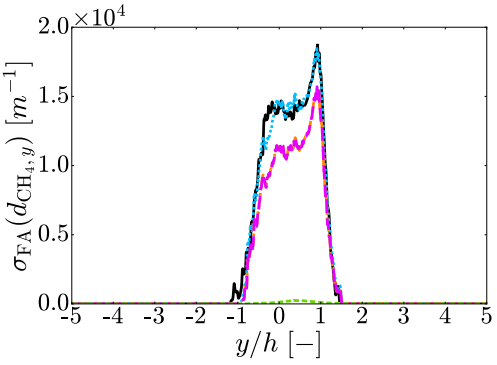
$x/h = 1$ (FA)



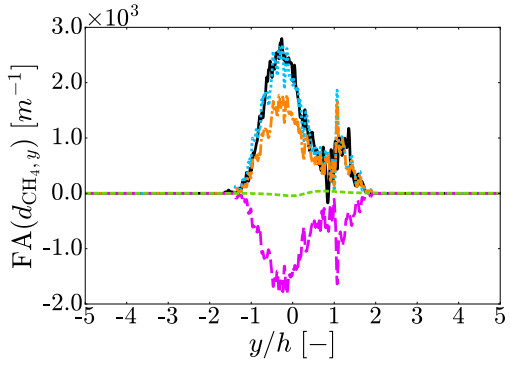
$x/h = 1$ (FA RMSD)



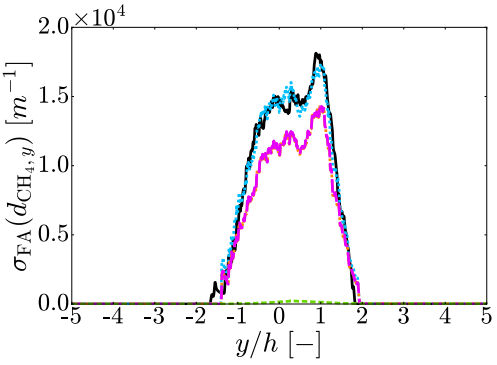
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

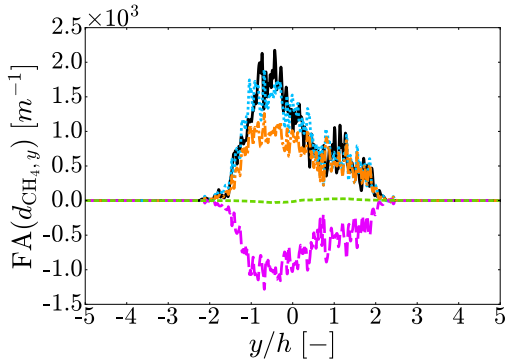


$x/h = 5$ (FA)

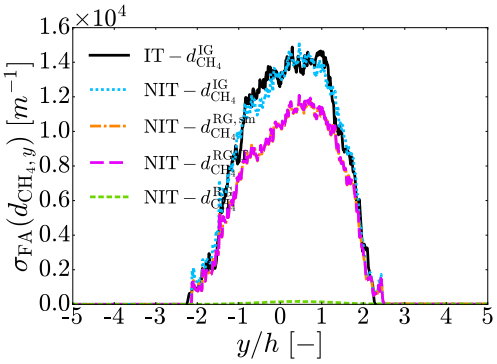


$x/h = 5$ (FA RMSD)

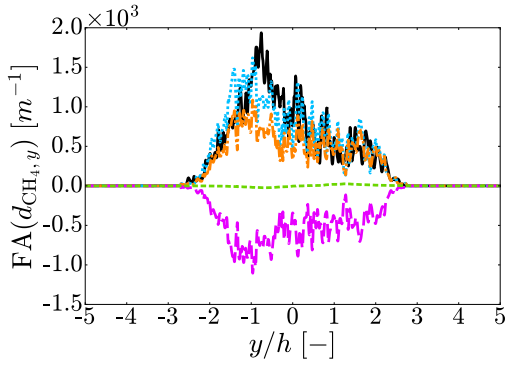
FIGURE 5.34 – Profils des **différents termes composants la force de diffusion ordinaire transverse moyenne de l'espèce CH_4** et de leur écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*. Cas H150 - IT (ligne continue noire) et H150 - NIT (autres lignes).



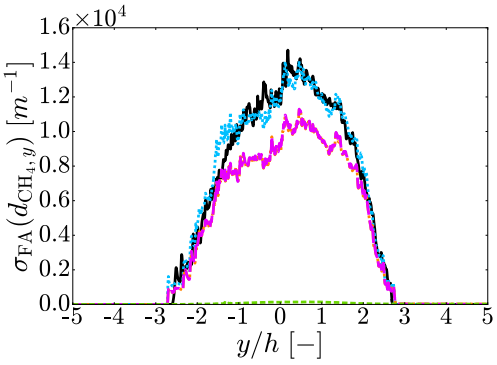
$x/h = 7$ (FA)



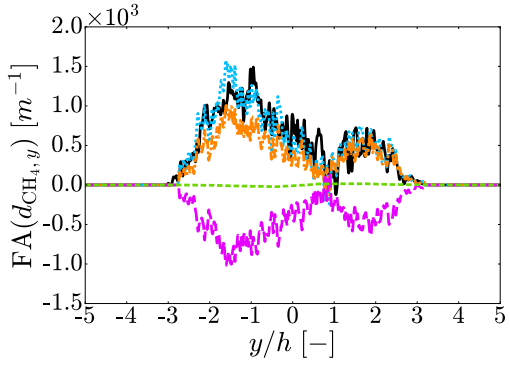
$x/h = 7$ (FA RMSD)



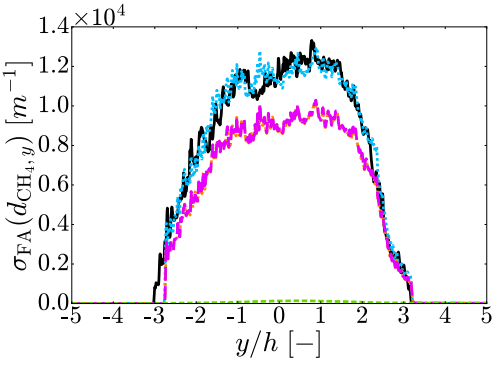
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE 5.35 – Suite de la Fig. 5.34.

de la somme de ces deux termes, à savoir $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$, est relativement faible et quasi nul, ce qui rejoint les observations effectuées plus haut sur des champs instantanés.

Cela nous conduit aussi à conclure que faire l'hypothèse selon laquelle le gradient à température fixée du potentiel chimique serait à peu près égal au gradient du potentiel chimique, i.e. l'hypothèse $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}} \simeq \mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,sm}}$ est fausse, en tout cas au moins ici. En effet, faire une telle hypothèse reviendrait à négliger la contribution du terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,T}}$. On aurait alors un terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ bien plus important, du même ordre de grandeur que celui issu de la diffusion idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$ sur ce cas-là, ce qui conduirait à une prédiction erronée des flux de diffusion.

Enfin, on remarque également que la diffusion suivant la direction y est bien en moyenne plus importante que celle dans la direction x d'environ un ordre de grandeur, comme attendu et observé précédemment.

5.3.4.2 Modélisation du flux de diffusion non-idéal par LES

On peut également se concentrer sur la capacité de la modélisation H30 - SMD - NIT à reproduire le terme de diffusion non-idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ obtenu avec la simulation H150 - NIT, avec les Fig. 5.36 et Fig. 5.37 ainsi que les Fig. 5.38 et Fig. 5.39.

En effet, ces figures montrent d'une part que le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ est globalement bien reproduit par le cas H30, sauf éventuellement pour quelques profils, en particulier dans la direction x aux positions $x/h = 3$ et $x/h = 11$ où l'on constate des écarts bien plus importants. Toutefois, on remarque également que la diffusion dans la direction transverse est environ d'un ordre de grandeur supérieur à celle dans la direction principale de l'écoulement, ce qui n'est pas étonnant puisque la direction privilégiée du mélange est bien suivant y.

Ainsi, il n'est pas surprenant de cumuler des erreurs plus grandes dans la direction x puisque la diffusion dans cette direction est relativement faible d'une manière générale. Dans la direction transverse, les profils H150 sont plutôt bien reproduits par le cas H30, même si les minima et maxima des profils sont un peu exagérés.

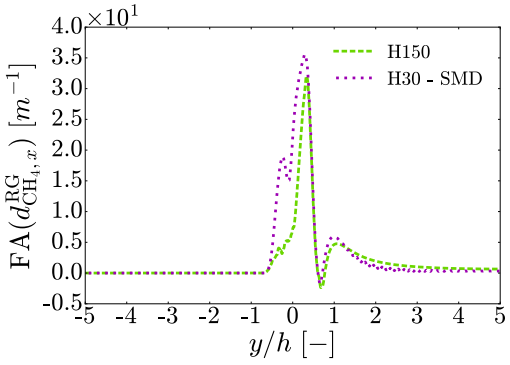
Enfin, on remarque que la courbe des profils est bien plus lisse avec le cas H30 que ceux obtenus avec le cas de référence H150. En effet, même avec environ 80 temps de passage, les statistiques ne sont pas cumulés sur un temps suffisamment long pour atteindre une parfaite convergence, laissant des fluctuations locales plus ou moins importantes dans les profils. Or l'approche directe du cas H150 (DNS) est plus sensible aux petites variations que celle du cas H30 (LES) qui a tendance a lisser les gradients à cause du filtrage induit par la taille de maille ainsi que par l'ajout de viscosité turbulente. Il est donc normal d'avoir des profils qui semblent bien plus lisses et convergés avec le cas H30.

5.4 Couche de mélange LOx/GCH_4

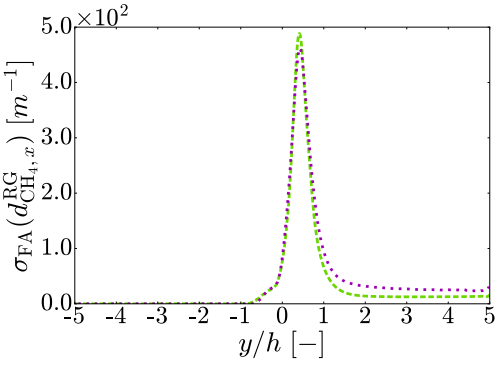
5.4.1 Configuration et description de l'écoulement

Il est également intéressant de réaliser une simulation similaire à celle présentée ci-dessus, mais cette fois-ci avec du méthane "chaud", dans l'état supercritique, afin de voir comment évolue la couche de mélange.

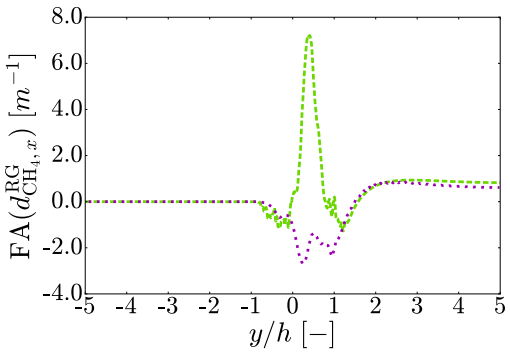
Sur cette configuration, le domaine fait $15h \times 15h$, avec 150 mailles dans l'épaisseur de la lèvre de hauteur $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, $u_{\mathrm{CH_4}} = 100\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, $u_{\mathrm{O_2}} = 10\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$, $T_{\mathrm{CH_4}} = 300$ K, $T_{\mathrm{O_2}} = 85$ K et



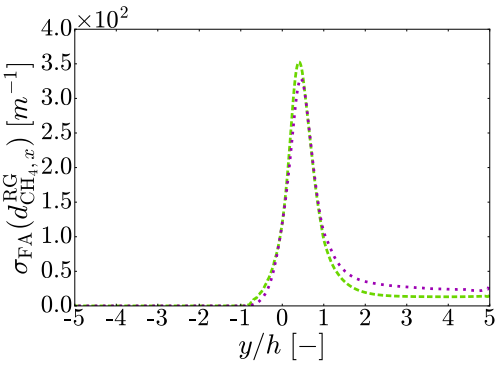
$x/h = 1$ (FA)



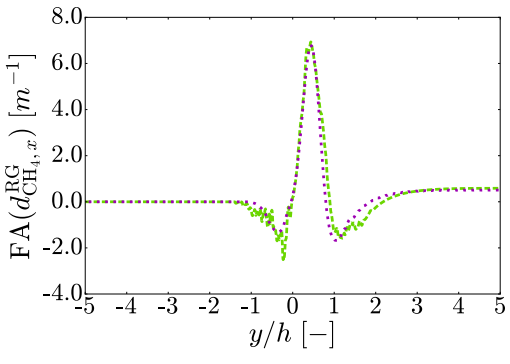
$x/h = 1$ (FA RMSD)



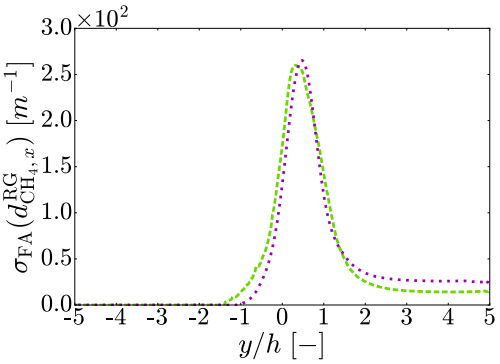
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

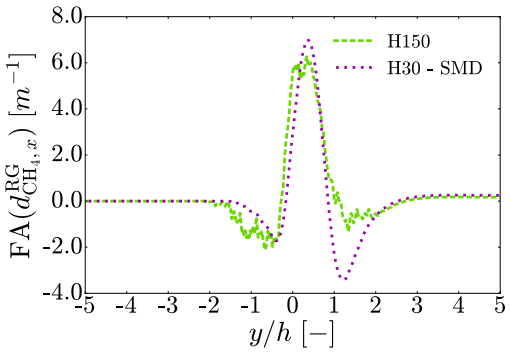


$x/h = 5$ (FA)

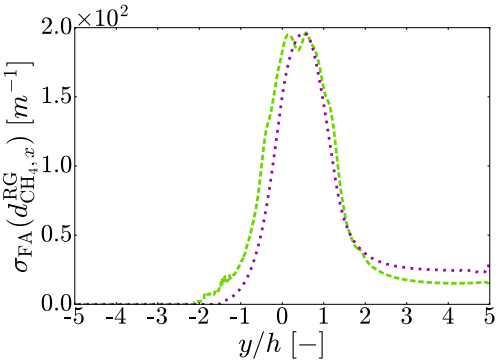


$x/h = 5$ (FA RMSD)

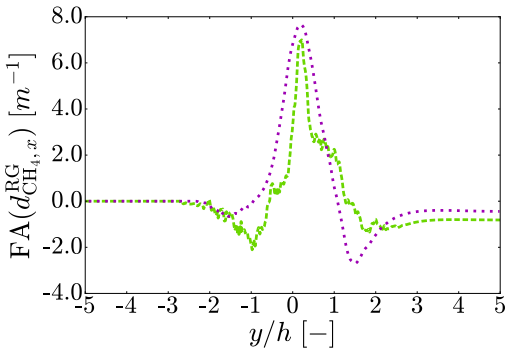
FIGURE 5.36 – Comparaison H150 - NIT et H30 - SMD - NIT. Profils de la **composante non-idéale de la force de diffusion ordinaire axiale moyenne de l'espèce CH_4** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



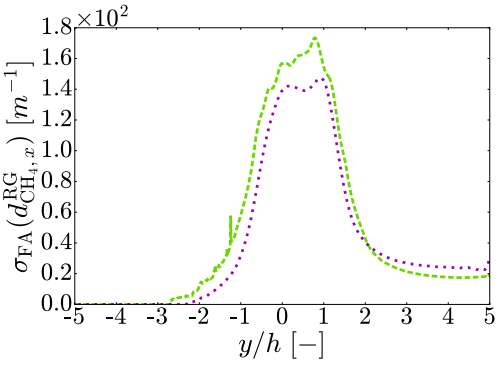
$x/h = 7$ (FA)



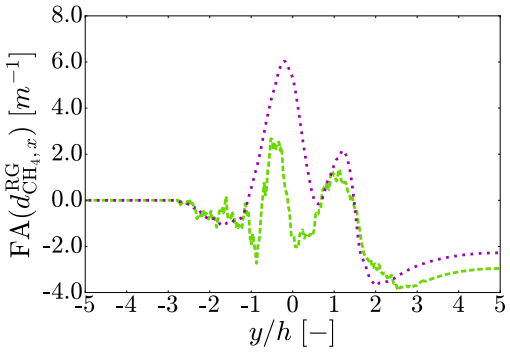
$x/h = 7$ (FA RMSD)



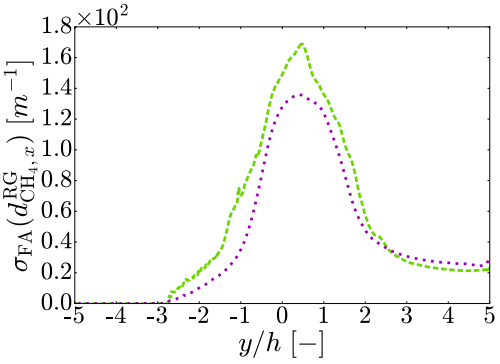
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

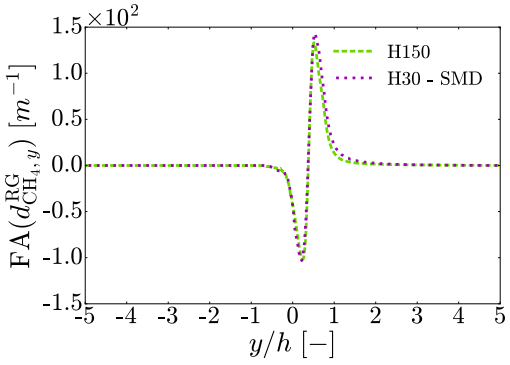


$x/h = 11$ (FA)

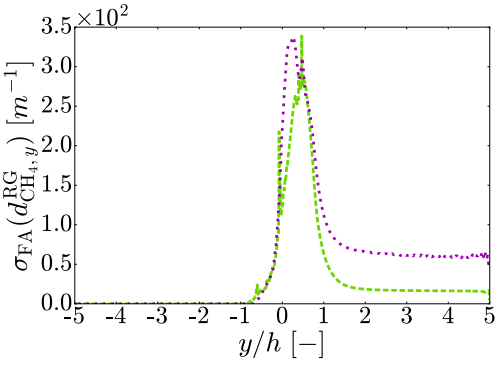


$x/h = 11$ (FA RMSD)

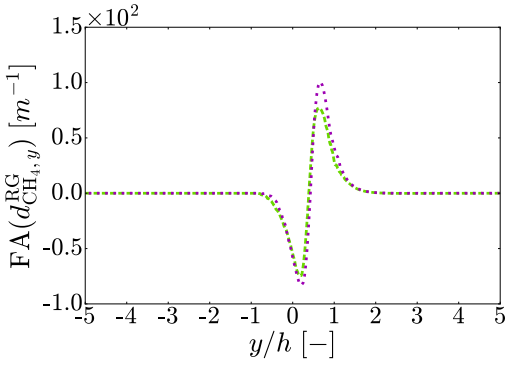
FIGURE 5.37 – Suite de la Fig. 5.36.



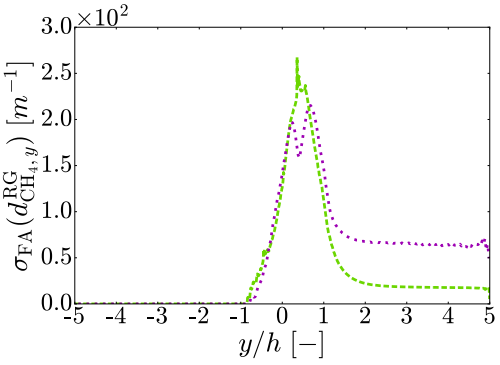
$x/h = 1$ (FA)



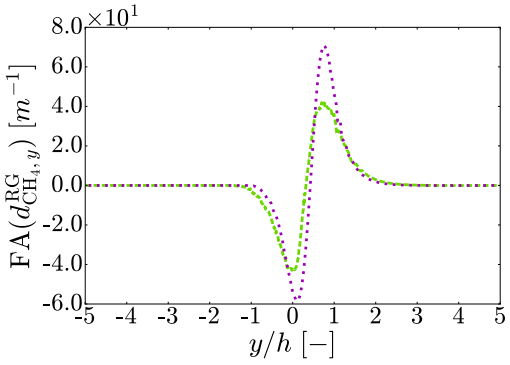
$x/h = 1$ (FA RMSD)



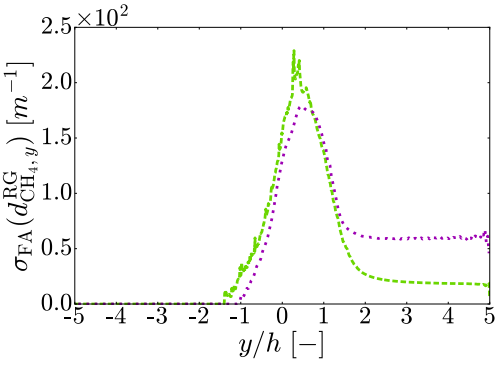
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

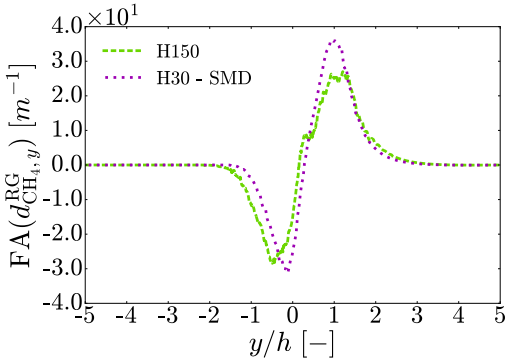


$x/h = 5$ (FA)

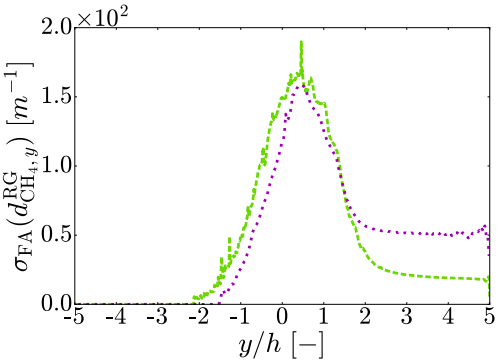


$x/h = 5$ (FA RMSD)

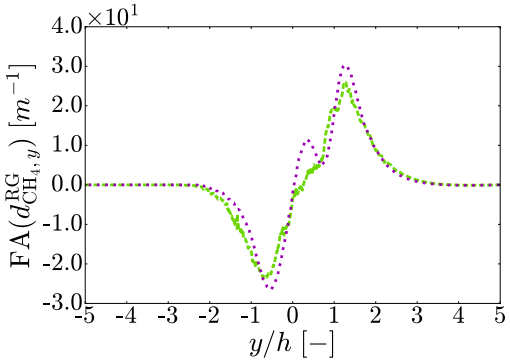
FIGURE 5.38 – Comparaison H150 - NIT et H30 - SMD - NIT. Profils de la **composante non-idéale de la force de diffusion ordinaire transverse moyenne de l'espèce CH_4** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



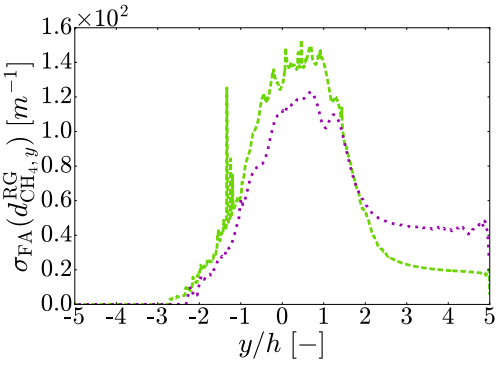
$x/h = 7$ (FA)



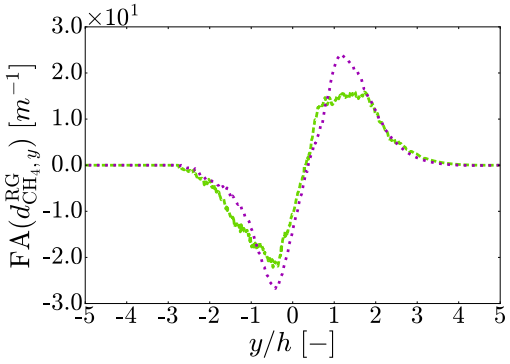
$x/h = 7$ (FA RMSD)



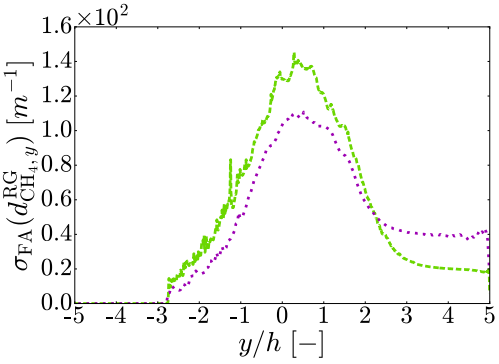
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)

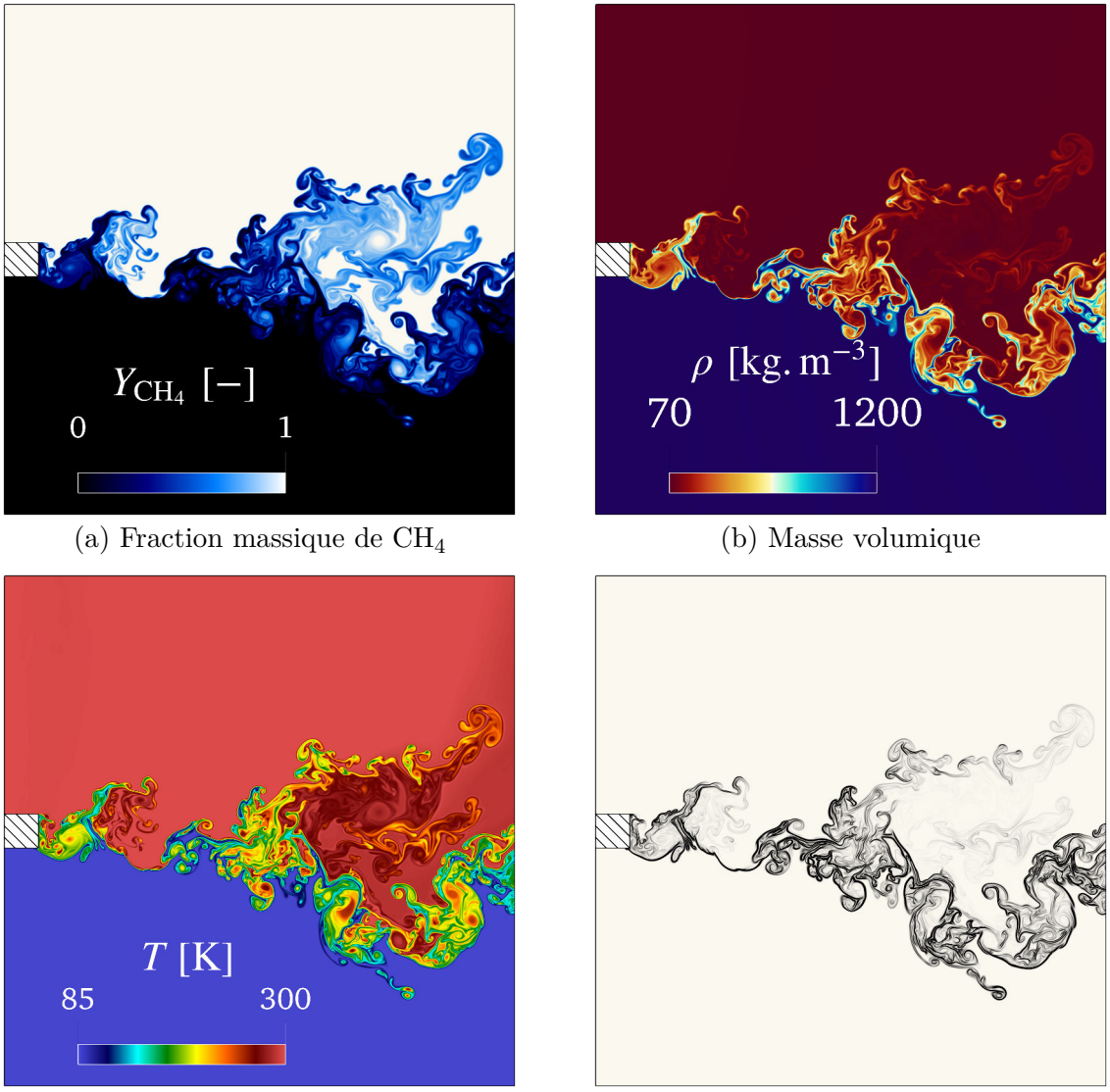


$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE 5.39 – Suite de la Fig. 5.38.

$P = 10$ MPa. Les profils sont similaires à ceux imposés pour la couche de mélange LOx/LCH_4. Ces conditions de vitesses donnent $J \simeq 6.3$. Cette simulation est effectuée avec la modélisation non-idéale des flux de diffusion.

Le comportement de la couche de mélange LOx/GCH_4 est alors très différent de celui de la couche de mélange LOx/LCH_4 étudiée juste avant, comme l'illustre la Fig. 5.40.



(a) Fraction massique de CH_4

(b) Masse volumique

(c) Température

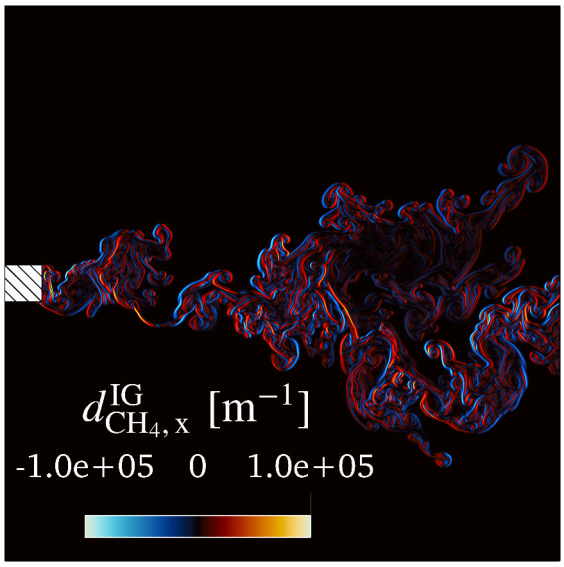
(d) Schlieren

FIGURE 5.40 – Champs instantanés de fraction massique de CH_4 et de température dans le cas d'une couche de mélange LOx/GCH_4. Simulation sur le maillage H150 avec diffusion non-idéale.

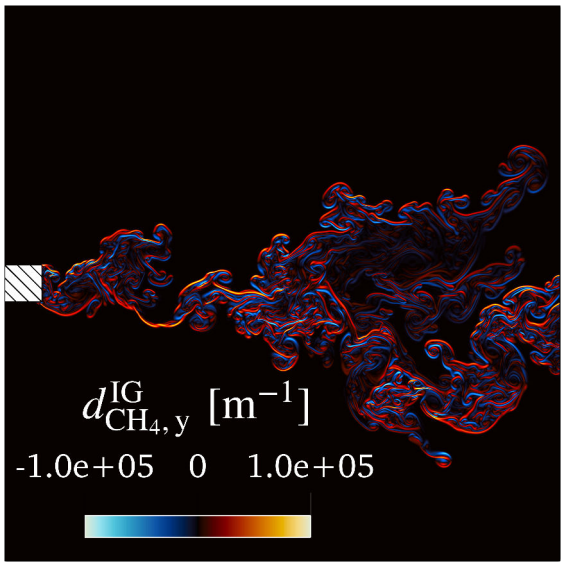
En effet, dans le cas où le méthane est injecté directement dans l'état supercritique, celui-ci a une masse volumique bien plus faible, de l'ordre de 75 kg $\cdot$ m^{-3}, contre environ 420 kg $\cdot$ m^{-3} dans où il est injecté transcritique. Le méthane se diffuse alors plus facilement dans l'oxygène et la turbulence génère des structures tourbillonnaires bien plus fines, qui pénètrent plus facilement dans l'oxygène dense. L'angle d'ouverture du jet produit par la couche de mélange est ainsi plus important.

5.4.2 Effets de la diffusion non-idéale

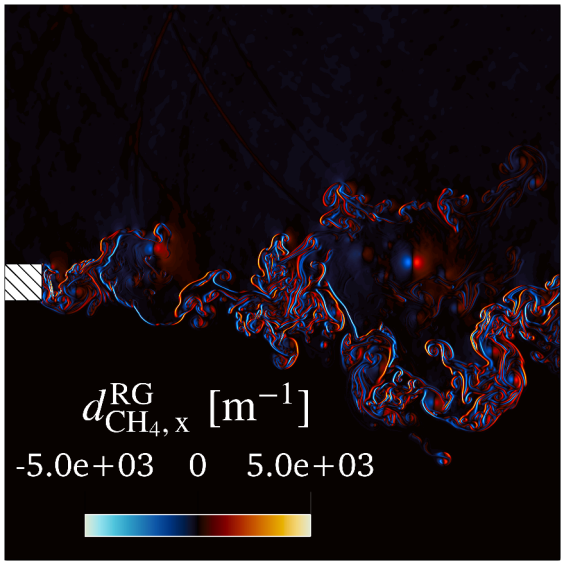
La Fig. 5.41 montre des champs instantanés des termes de diffusion idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$ et non-idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ dans le cas de la couche de mélange LOx/GCH$_4$. Il semblerait que dans ce cas, la diffusion joue un rôle encore plus important que dans le cas précédent quand on voit la répartition spatiale de l'activation de la diffusion, du fait que l'écoulement comprenne de nombreuses structures turbulentes à l'origine de nombreuses zones de stratification en masse volumique.



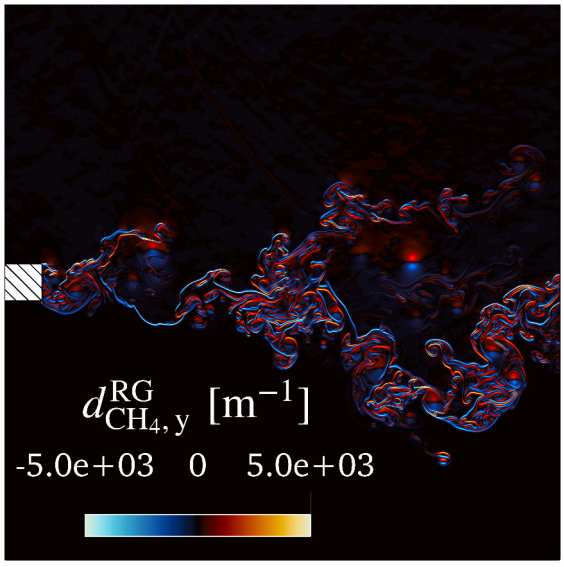
(a) $d^{\mathrm{IG}}_{\mathrm{CH_4,x}}$



(b) $d^{\mathrm{IG}}_{\mathrm{CH_4,y}}$



(c) $d^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{CH_4,x}}$



(b) $d^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{CH_4,y}}$

FIGURE 5.41 – Champs instantanés des différentes composantes idéale et non-idéale de la force de diffusion ordinaire de l'espèce CH4 dans les directions axiale (x) et transverse (y), dans le cas d'une couche de mélange LOx/GCH$_4$.

On constate également que contrairement au cas de la couche de mélange LOx/LCH$_4$, ici le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ ne s'active pas uniquement au centre des tourbillons, mais davantage même au

niveau de l'interface entre le méthane et l'oxygène, comme on aurait pu s'y attendre à l'origine. Or dans ce cas, le gradient de masse volumique entre le méthane et l'oxygène est bien plus important puisqu'il est environ d'un facteur 16, contre un facteur 3 dans le cas précédent. Cela confirme l'une des conjectures effectuées dans la section 5.3.4.1. Dans le cas d'un écoulement où les effets de compressibilités sont importants, des forts gradients de masse volumique auront tendance à accentuer les effets de diffusion non-idéale. Des forts gradients de pression peuvent aussi en être à l'origine, mais on peut supposer que ces effets-là sont de second ordre devant les effets des gradients de masse volumique.

Il est également intéressant de remarquer que l'ordre de grandeur des flux de diffusion non-idéaux, en tout cas du terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$, sont supérieurs d'au moins un facteur 2 dans ce cas par rapport au cas de la couche de mélange LOx/LCH_4.

On peut ainsi imaginer que ces effets de diffusion non-idéale seront d'autant plus importants dès-lors que l'on s'intéressera à la combustion, les gradients de masse volumique entre les ergols frais (en particulier cryogénique comme le LOx) et les gaz brulés issus de la combustion, étant très élevés. Ce point restant évidemment à être démontré.

Par ailleurs, il est également intéressant de remarquer que presque partout où le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$ est positif (dans une direction donnée), le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ est négatif, et vise-versa. Tout se passe comme si le terme de diffusion non-idéale tendait à s'opposer au terme de diffusion idéale, et réduisant ainsi le processus global de diffusion. Ce phénomène, appelé rétro-diffusion, est un phénomène connu et expliqué dans certains articles [146]. Gaillard [88] a également montré que la prise en compte des effets non-idéaux de diffusion dans le cas d'une couche de mélange laminaire avait tendance à réduire la diffusion globale du mélange, réduisant ainsi l'angle d'ouverture de la couche de mélange.

Ainsi, on se doute bien que la prise en compte de ces effets de diffusion non-idéale pourrait avoir un impact non négligeable dans le cas de tels écoulements, en particulier lorsque la combustion est simulée.

Enfin, il aurait été intéressant de refaire l'étude complète de ce cas-là avec notamment le cumul de statistiques et la comparaison avec la même simulation mais sans prise en compte des effets non-idéaux des flux de diffusion, mais par manque de temps et de moyens (temps CPU), une telle étude n'a pas pu être menée.

5.5 Vers l'inclusion des effets de diffusion non-idéale dans les écoulements réactifs

5.5.1 Présentation du cas

Afin d'étudier l'impact des effets de diffusion non-idéale sur un cas d'écoulement réactif simplifié, une simulation de flamme laminaire prémélangée 1D libre de propagation d'un mélange CH_4/O_2 est réalisée avec le code SiTCom-B. La pression est fixée à $P = 10$ MPa, la richesse à $\Phi = 1$ et la température des gaz frais à $T^{\mathrm{u}} = 300$ K ou $T^{\mathrm{u}} = 100$ K. Le domaine fait $L = 1.0 \times 10^{-4}$ m de longueur et le maillage est régulier avec une taille de cellule fixe de $\Delta_x = 1.0 \times 10^{-7}$ m.

Pour le cas à 300 K, ou bien l'équation d'état (EoS) gaz parfait est considérée, ou bien l'EoS SRK [358] employée avec les corrections de Chung [53] et de Takahashi [367] est considérée. Pour le cas à 100 K, les effets de compressibilités étant clairement non négligeables, uniquement l'EoS

SRK avec les corrections de Chung et Takahashi ont été utilisés. Sauf mention du contraire, les simulations sont réalisées par défaut avec un modèle de diffusion idéale.

Le mécanisme chimique utilisé est le RAMEC-17S-44R, présenté dans le chapitre 3.

5.5.2 Stabilité du mélange CH_4/O_2

Dans un premier temps, on peut se demander si un mélange de méthane et d'oxygène stable est réellement possible à une pression de 10 MPa. Grâce à la librairie HPLIB [217] du laboratoire CMAP de l'École Polytechnique, qui résout les équations d'équilibre [301] afin de prédire les états instables [100], il est possible de montrer que pour un mélange d'oxygène et de méthane à $P = 5.2$ MPa, il existe une zone d'équilibre instable à basse température (entre environ 160 K et 177 K) , comme le montre la Fig. 5.42. Merci à Yoann Le Calvez du CMAP d'avoir simulé ce problème-là et d'avoir fourni cette figure.

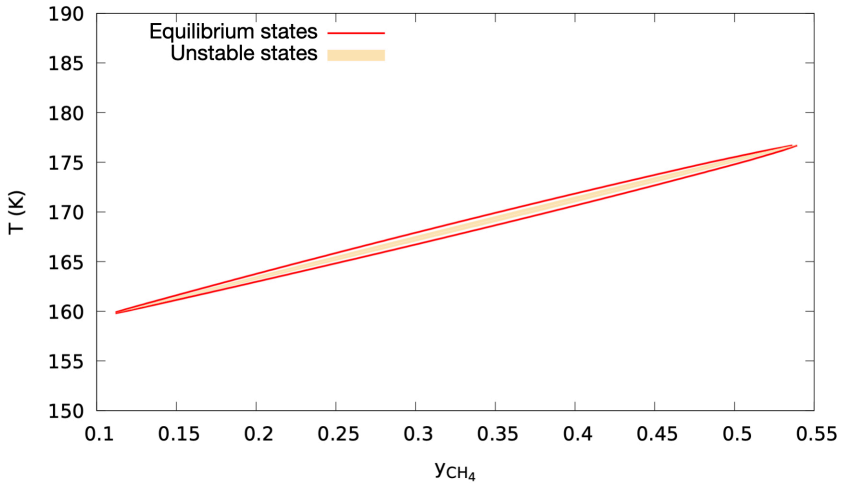


FIGURE 5.42 – Équilibre de phase d'un mélange CH_4/O_2 à pression $P = 5.2$ MPa.

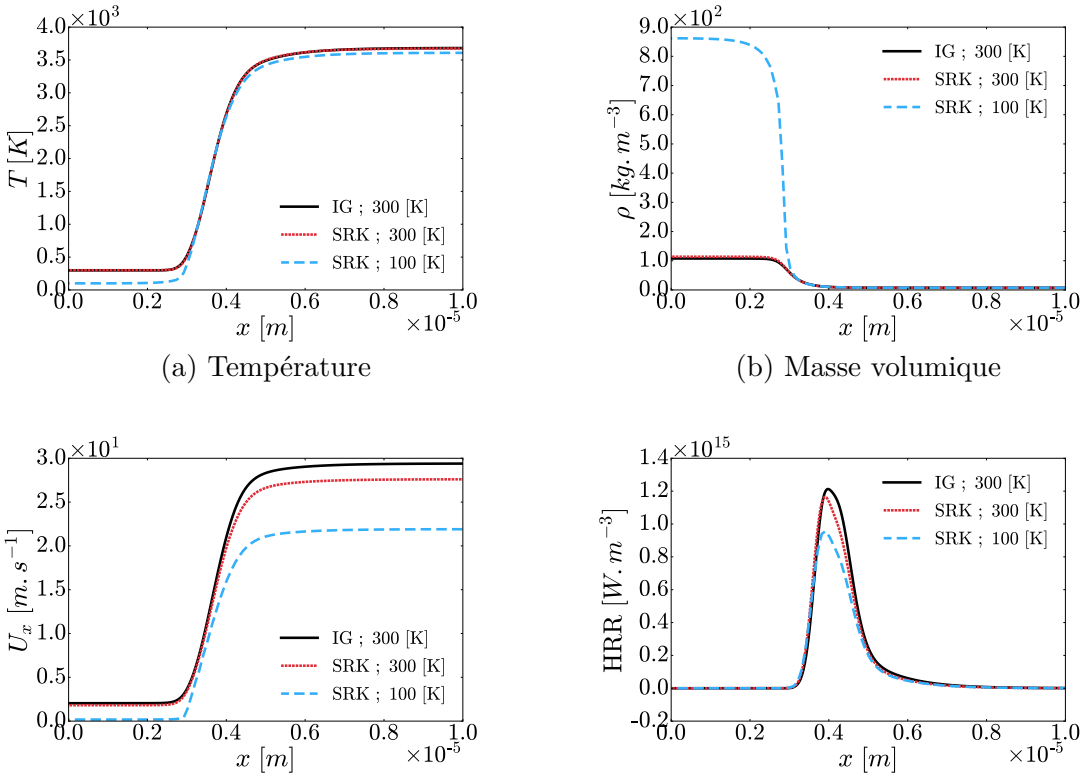
Autrement dit, dans cet intervalle de température et pour cette pression, un mélange de méthane et d'oxygène aura tendance à se séparer en deux phases distinctes. En revanche, on peut également montrer qu'au-delà d'une pression de 5.3 MPa, il n'existe pas d'état instable entre les deux espèces. Ainsi, à $P = 10.0$ MPa, un prémélange d'oxygène et de méthane est bien stable.

Toutefois, lors des réactions de combustion, d'autres espèces que l'oxygène et du méthane sont produites, ce qui pourrait ne pas constituer un mélange stable localement dans l'épaisseur du front de flamme. Ce problème-là sort cependant du cadre de cette thèse et est mis de côté pour de futures études.

5.5.3 Résultats et discussion

5.5.3.1 Comparaison des cas

La Fig. 5.43 compare les profils de température (a), masse volumique (b), vitesse (c) et taux de dégagement de chaleur (d) issus des simulations de flammes 1D pour les trois cas simulés : $T^u = 300$ K ; EOS = IG, $T^u = 300$ K ; EOS = SRK ou encore $T^u = 300$ K ; EOS = SRK.



(a) Température (b) Masse volumique

(d) Vitesse (b) Taux de dégagement de chaleur

FIGURE 5.43 – Profils de flammes laminaire prémélangée 1D simulés avec une thermodynamique gaz parfait (IG) ou gaz réel avec l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) et pour deux températures de gaz frais différentes, $T^{\mathrm{u}} = 300$ K et $T^{\mathrm{u}} = 100$ K.

Comparaison approche EoS IG et SRK à 300 K

En premier lieu, si on compare les effets de l'inclusion de la thermodynamique gaz réel sur le cas à 300 K, on voit que les différences sont infimes sur la prédiction du profil de température et relativement faibles sur les autres profils. En effet, la température des gaz brulés obtenue avec la thermodynamique gaz parfait est de $T^{\mathrm{bg}} = 3682.9$ K contre $T^{\mathrm{bg}} = 3675.8$ K avec la thermodynamique gaz réel, ce qui induit une erreur de seulement 0.2 %. On note cependant une différence un peu plus marquée sur la prédiction de la masse volumique des gaz frais, où celle-ci vaut $\rho^{\mathrm{u}} = 107.8\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ avec l'approche gaz parfait, contre $\rho^{\mathrm{u}} = 113.9\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ avec l'approche gaz réel, ce qui équivaut à un écart relatif de 5.4 %.

Le pic de taux de dégagement de chaleur est également légèrement sur-prédit de 4.1 % et la vitesse de flamme laminaire S_L calculée avec l'approche gaz parfait est de $2.04\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$ avec l'approche gaz parfait contre $1.81\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}$ avec l'approche gaz réel, soit un écart relatif de 12.5 %. La vitesse dans les gaz brulés est également sur-évaluée avec l'approche gaz parfait, d'environ 6.5 %.

Malgré ces différences, on peut toutefois conclure que pour un mélange d'oxygène et de méthane à $T^{\mathrm{u}} = 300$ K et $P = 10.0$ MPa, les erreurs commises par l'approximation gaz parfait restent raisonnables pour ces conditions-là. Ces faibles différences étaient attendues, du fait que le facteur de compressibilité $Z \simeq 0.94$ est relativement proche de l'unité ici.

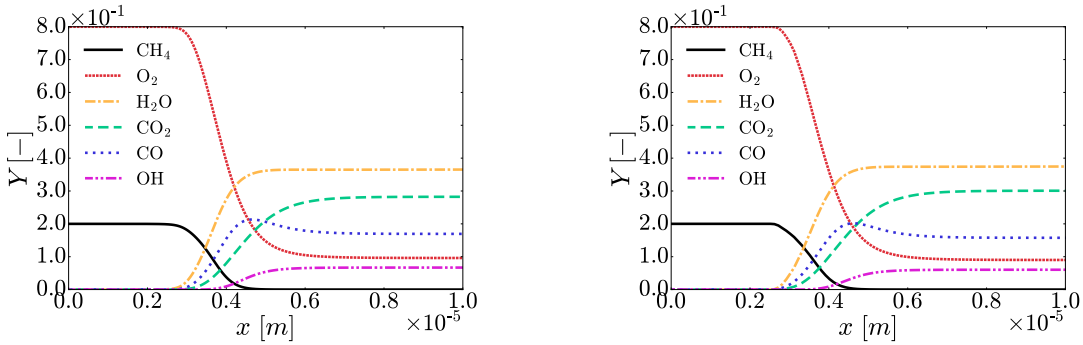
Ainsi, le gain en temps de calcul (CPU) offert par une approximation gaz parfait dans ces conditions de température et de pression peut justifier un tel choix, en particulier lors de simulations avec des géométries complexes sur des cas d'applications industrielles.

Toutefois, dans le cas à 100 K, comme le facteur de compressibilité est de $Z \simeq 0.37$ dans les gaz frais, la prise en compte d'une thermodynamique gaz réel est indispensable.

Comparaison profils 300 K et 100 K

Dans un second temps, on peut comparer les profils des flammes à 300 K et à 100 K obtenus avec la même modélisation, i.e. l'EoS SRK [358] avec les corrections de Chung [53] et de Takahashi [367]. En effet, on voit des différences assez marquées sur les profils présentés dans la Fig. 5.43. La température des gaz brulés obtenus avec le mélange à 300 K est de 3675.8 K contre 3609.7 K pour le mélange à 100 K. La masse volumique dans les gaz frais passe quant à elle de 113.9 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ à 862.1 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$. La vitesse de flamme laminaire chute d'environ un facteur 10 pour atteindre 0.176 $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$ avec le mélange à 100 K contre 1.81 $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$ avec le mélange à 300 K. Enfin, le pic du taux de dégagement de chaleur est également moins important et atteint environ 9.57×10^{14} $\mathrm{W \cdot m^{-3}}$ avec le mélange à 100 K contre 1.16×10^{15} $\mathrm{W \cdot m^{-3}}$ avec le mélange à 300 K, ce qui représente une diminution de près de 17.9 %.

On peut également comparer les profils des espèces majoritaires CH_4, O_2, H_2O, CO_2, CO et OH, grâce à la Fig. 5.44. On voit alors que bien que des différences soient présentes entre les deux cas, les différences sur les profils des espèces majoritaires ne sont pas extrêmement marquées.



(a) $T^{\mathrm{u}} = 300$ K (b) $T^{\mathrm{u}} = 100$ K

FIGURE 5.44 – Profils de fractions massiques des espèces majoritaires obtenus avec deux températures de gaz frais différentes : (a) $T^{\mathrm{u}} = 300$ K et (b) $T^{\mathrm{u}} = 100$ K.

5.5.3.2 Inclusion des effets de diffusion non-idéaux

Maintenant que la structure d'une flamme laminaire prémélangée 1D en conditions cryogénique ($T^{\mathrm{u}} = 100$ K) a été étudiée en détail, on peut inclure les effets de diffusion non-idéale et voir comment cela affecte la structure de la flamme. On repart ainsi de la configuration où $T^{\mathrm{u}} = 100$ K, convergée avec la diffusion idéale comme solution initiale, puis on active la diffusion non-idéale.

La Fig. 5.45 compare les différentes composantes du terme de diffusion ordinaire pour l'espèce CH_4 une itération après l'activation de la diffusion non-idéale, puis n itérations après (la valeur

de n n'a pas vraiment d'importance ici). Sur la figure (a), on voit que les termes $d^{\mathrm{RG,sm}}_{\mathrm{CH4,x}}$ et $d^{\mathrm{RG,T}}_{\mathrm{CH4,x}}$

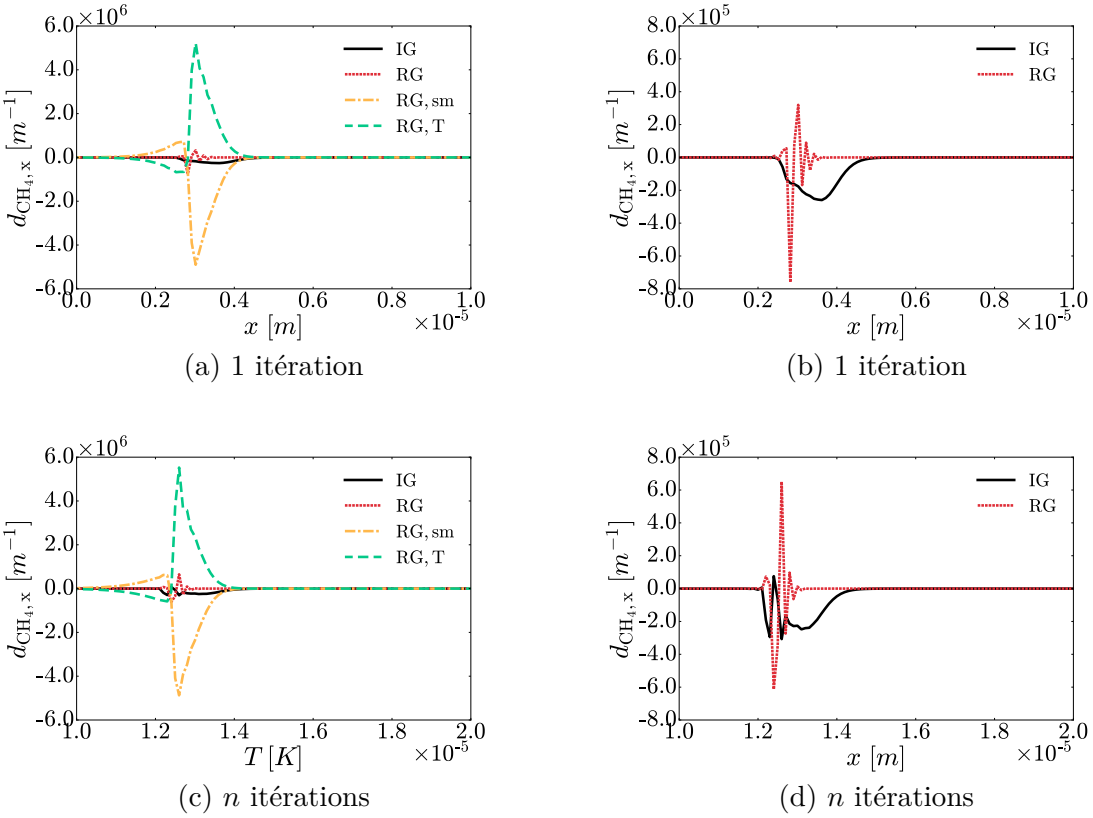


FIGURE 5.45 – Profils des différentes composantes de la force de diffusion ordinaire pour le CH_4 juste après activation de la diffusion non-idéale (1 itération) et un peu après (n itérations).

sont du même ordre de grandeur, mais de signes opposés, comme observés dans le cas de la couche de mélange non réactive. On observe cependant que cette fois, ces termes-là sont supérieurs d'au moins un ordre de grandeur au terme de diffusion idéale. Comme ils se compensent presque mutuellement, la différence de ces deux termes nous donne le terme de diffusion non-idéale, $d^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{CH4,x}}$. Ce terme-là semble être alors du même ordre de grandeur que le terme gaz parfait, d'après la figure (b). On observe cependant qu'il n'est pas lisse du tout, avec des fortes variations et une alternance de signe. Ce même type de comportement peut être observé pour d'autres espèces, notamment pour l'O_2.

Après un certain nombre d'itérations, on voit que les profils des termes de diffusion commencent à évoluer et les pics des valeurs ont tendance à s'accentuer, d'après la figure (c). En fait l'ajout de la diffusion non-idéale ici a tendance a rendre instable la diffusion idéale, comme le montre la figure (d). On peut expliquer ceci par le fait que les deux termes $d^{\mathrm{RG,sm}}_{\mathrm{CH4,x}}$ et $d^{\mathrm{RG,T}}_{\mathrm{CH4,x}}$ ont des fortes valeurs mais de signes opposés. En fait, la somme de ces deux termes calculés via des gradients est source d'erreur numérique. On est ici dans un cas où l'erreur numérique issue du calcul des gradients impliqués dans les termes $d^{\mathrm{RG,sm}}_{\mathrm{CH4,x}}$ et $d^{\mathrm{RG,T}}_{\mathrm{CH4,x}}$ est peut-être supérieure au résidu de la somme de ces termes-là en certains points. En fait, la pente des termes $d^{\mathrm{RG,sm}}_{\mathrm{CH4,x}}$ et $d^{\mathrm{RG,T}}_{\mathrm{CH4,x}}$ est tellement importante, qu'un décalage d'une seule maille dans la manière de calculer un gradient (valeurs aux noeuds, au centre des cellules, etc.) peut induire des fortes variations.

Si l'on laisse le calcul évoluer suffisamment longtemps, les flux de diffusion divergent peu à peu avec des pics de valeurs de plus en plus importants, ce qui rend la simulation de plus en plus instable. On observe par exemple une nouvelle distribution des espèces avec notamment un pic d'oxygène (fraction massique supérieure à 0.8) en amont de la flamme, qui n'est probablement pas physique, comme l'illustre la Fig. 5.46. La simulation finit par diverger après un grand nombre d'itérations.

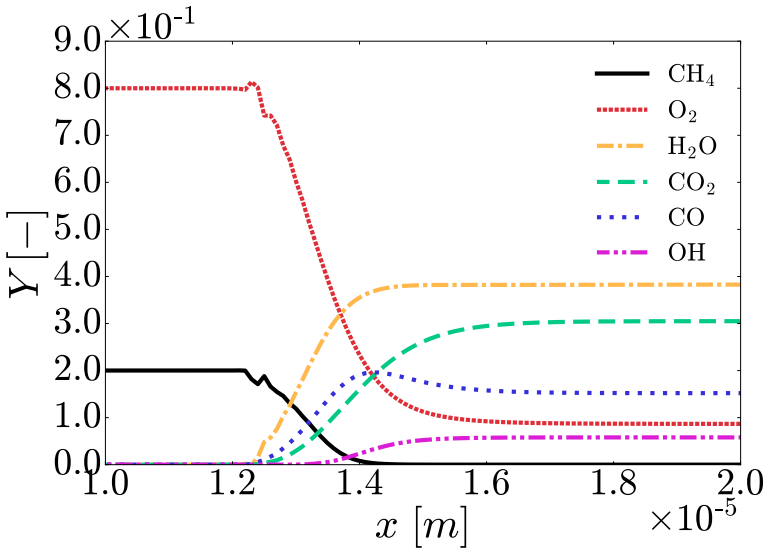


FIGURE 5.46 – Profils de fractions massiques des espèces majoritaires obtenus après n itérations, dans le cas où $T^{\mathrm{u}} = 100$ K avec la modélisation non-idéale des flux de diffusion.

L'ajout de la diffusion non-idéale a également été tentée sur certains cas réactifs 2D simulés au cours de cette thèse (blobs, couche de mélange, etc). On observe alors des pics des termes de diffusion à l'interface entre le mélange d'oxygène et de méthane où les gradients de masse volumique sont les plus importants, avec des fortes irrégularités et changement de signes qui confirment bien que l'on ne simule pas quelque chose de physique mais que l'on rajoute localement plutôt une instabilité numérique. Ainsi, la formulation proposée des flux de diffusion non-idéaux dans cette thèse, ne semble pas satisfaisante en l'état pour simuler des cas de combustion où les effets de compressibilité sont importants.

Différents maillages, de plus en plus fins ont été testés afin de pallier à ce problème, mais sans succès. De toute façon, si la solution serait d'avoir un maillage de l'ordre du nanomètre pour résoudre le problème, elle ne constituerait pas une solution intéressante car inenvisageable dans un calcul 2D ou 3D.

Différentes méthodes afin de tenter de résoudre le problème ont été testées. Par exemple, couper la diffusion non-idéale de toutes les espèce sauf pour le méthane et l'oxygène, mais cela n'a pas été concluant. Des méthodes de filtrage ont également été testées. Cela pouvait améliorer les choses pendant un certain temps mais sans pour autant donner une solution satisfaisante, ni facilement reproductible ou adaptable à d'autres cas de calculs. Il faut ainsi probablement se tourner vers d'autres méthodes afin de résoudre ce problème.

5.5.3.3 Perspectives

Afin de pouvoir inclure des effets de diffusion non-idéale dans le cas d'écoulements réactifs de manière plus stable, on pourrait envisager plusieurs méthodes.

Une première approche serait de traiter numériquement le problème, en épaississant par exemple l'interface où les gradients sont trop raides, en linéarisant certains termes, en rajoutant un terme pour compenser les erreurs numériques ou en détectant et en agissant directement sur les discontinuités jugées non physiques.

Une seconde approche, probablement plus appropriée, serait d'implémenter une méthode de calcul numérique de gradient de potentiel chimique à température fixée. Une telle approche a déjà été testée par Giovangigli *et al.* [102] sur le cas d'une flamme 1D et pourrait être étendue au cas de simulations 2D et 3D. Cette méthode aurait un double avantage : le premier serait d'éviter l'évaluation de deux termes, $d^{\mathrm{RG,sm}}_{\mathrm{CH4,x}}$ et $d^{\mathrm{RG,T}}_{\mathrm{CH4,x}}$, au profit de l'évaluation d'un seul terme. Le second avantage serait de ne plus avoir à calculer la somme de deux termes de signes opposés qui ont tendance à se compenser. Le flux de diffusion non-idéale reposerait alors sur l'évaluation d'un seul terme. L'inconvénient de cette méthode, est que l'implémentation d'un gradient à température fixée peut ne pas être simple en 2D ou 3D, en particulier dans le cas de maillages non structurés. Cela repose aussi sur certaines hypothèses, comme par exemple de considérer une température moyenne entre deux cellules adjacentes, etc.

Une troisième méthode serait éventuellement de ré-écrire les flux de diffusion. En effet, d'après Giovangigli *et al.* [102], comme on a :

$$\mathrm{d}\mu_k = \frac{W_k v_k}{\mathcal{R}T}\mathrm{d}P + \sum_{l=1}^{N_{sp}} \frac{\partial \mu_j}{X_l}\mathrm{d}X_l - \frac{W_k h_k}{\mathcal{R}T^2}\mathrm{d}T \ , \tag{5.9}$$

il est également possible d'écrire :

$$\mathbf{d}_k = \frac{X_k W_k v_k}{\mathcal{R}T}\nabla P + \sum_{l=1}^{N_{sp}} \Gamma_{kl}\nabla X_l \ , \tag{5.10}$$

avec v_k, le volume partiel par unité de masse de l'espèce k et :

$$\Gamma_{kl} = X_k \frac{\partial \mu_k}{\partial X_l} \ . \tag{5.11}$$

En simplifiant légèrement l'Éq. (5.10), on obtient alors :

$$\mathbf{d}_k = \frac{W}{\rho \mathcal{R}T}\nabla P + \sum_{l=1}^{N_{sp}} \Gamma_{kl}\nabla X_l \ . \tag{5.12}$$

On dispose alors d'une nouvelle écriture du terme de diffusion ordinaire d_j. Le premier terme de droite dans l'Éq. (5.12) pourrait être également mis sous la forme $\nabla P/P^{\mathrm{IG}}$, où $P^{\mathrm{IG}} = \rho(\mathcal{R}/W)T$ représenterait la pression évaluée avec une approche gaz parfait. Dans le cas d'une flamme plane isobare, ce terme est nul.

L'inconvénient de cette approche est qu'elle nécessite l'évaluation de tous les termes Γ_{kl}, ce qui peut représenter un effort CPU non négligeable. Toutefois, on pourrait envisager recourir à différentes méthodes afin de réduire ce temps de calcul.

En effet, d'une part, il n'est pas forcément nécessaire d'évaluer les termes de diffusion non-idéale en tout point mais que dans les zones d'intérêts, c'est-à-dire là où les effets de compressibilité sont non négligeables et dans les zones de mélange. On pourrait alors ne pas calculer ces termes de diffusion dans les zones qui où la diffusion non-idéale est non nulle. Le gain offert par une telle approche ne serait par contre pas si important que cela dans le cas d'un calcul parallèle, si la charge sur les processeurs n'est pas redistribuée en conséquence de manière équivalente.

Une autre approche afin de réduire les couts CPU pour l'inclusion de ces effets de diffusion non-idéale serait de regarder la contribution de chaque espèce. En effet, on pourrait imaginer que la contribution des flux non-idéaux de certaines espèces est négligeable par rapport à celles d'autres espèces. En effet, il est probablement plus important de prendre en compte la diffusion non-idéale des espèces majoritaires, surtout dans les gaz frais, que celles des espèces minoritaires qui n'existent que dans le front de flamme, même si cela reste à vérifier. Par ailleurs, la diffusion non-idéale d'espèces majoritaires dans les produits de combustion comme le CO_2, le CO ou encore H_2O est probablement négligeable à haute température, puisque les effets de compressibilité sont moindres dès lors que la température devient relativement élevée.

Enfin, selon Gaillard *et al.* [89] le problème vient de la formulation des flux de diffusion elle-même employée dans cette thèse, ou sa version alternative proposée ci-dessus (Éq. (5.12)). En effet, il semblerait que l'enthalpie de l'espèce k impliquée dans l'Éq. (2.109) diverge, de même que la quantité Γ_{kl} impliquée dans l'Éq. (5.12), dès lors que $\frac{\partial P}{\partial \rho}\Big|_{T,Y_k} \to 0$. Une solution proposée par Gaillard *et al.* [89] afin de contourner ce problème, consiste à réécrire les flux de diffusion et de chaleur sous une forme relativement différente. Il s'agit probablement de la solution mathématique la plus adaptée pour résoudre le problème, mais celle-ci nécessite un effort de développement supplémentaire assez conséquent qui n'a pas pu être réalisé dans le cadre de cette thèse. Cela pourrait toutefois faire l'objet d'une future étude.

5.6 Conclusion

La simulation d'une couche de mélange O_2/CH_4 haute pression non réactive en configuration *splitter-plate* a été réalisée avec succès.

Dans un premier temps, deux maillages (H150 et H30) ont été utilisés afin d'étudier l'effet de la taille du filtre LES ainsi que d'évaluer différents modèles de sous-mailles pour la turbulence. Il en ressort que le modèle WALE est le plus prédictif proche de la paroi de la lèvre et que le modèle original de Smagorinsky est celui qui reproduit le mieux le comportement de la couche de mélange à mesure que l'on s'éloigne de la lèvre. La version dynamique du modèle de Smagorinsky corrige un peu les défauts du modèle classique en proche paroi, mais ne semble pas aussi prédictif que le modèle SM suffisamment loin de la lèvre. Notons également que ces résultats étant obtenus sur une configuration 2D alors que la turbulence est un phénomène 3D par nature, il serait intéressant de voir si les conclusions restent les mêmes en 3D, en particulier sur un domaine de plus grande taille où la turbulence aurait davantage le temps de s'établir.

Ensuite, une comparaison détaillée des résultats obtenus lors de la prise en compte des effets de diffusion non-idéale, entre les cas H150 (absence de modèle SGS) et H30 (modèle de Smagorinsky dynamique), a été réalisée. De cette analyse en ressort plusieurs points intéressants. D'une part, dans le cas de cette configuration, l'inclusion d'effets non-idéaux de diffusion ne modifie que très peu la structure de l'écoulement, en diminuant légèrement la diffusion suffisamment loin

de la lèvre ($x/h = 9$). D'autre part, la modélisation LES simplifiée proposée dans cette thèse de ces termes de diffusion non-idéaux, semble globalement bien reproduire le comportement de ces phénomènes de diffusion complexes.

De plus, une étude approfondie des termes de force de diffusion ordinaire et de ses différentes composantes idéale et non-idéale, sur des champs instantanés et des profils moyens, a mis en évidence plusieurs phénomènes intéressants. Premièrement, les termes de diffusion non-idéale sont bien plus faibles que ceux issus de la diffusion idéale dans le cas de la couche de mélange LOx/LCH_4 ici à l'étude. Deuxièmement, les termes qui composent la diffusion non-idéale, à savoir $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,sm}}$ et $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG,T}}$ sont du même ordre de grandeur que le terme de diffusion idéale $\mathbf{d}_k^{\mathrm{IG}}$, mais sont de signes opposés, ce qui tend à les faire mutuellement s'annuler et donc à produire un terme de diffusion non-idéale, $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$, relativement faible. Par ailleurs, il a été montré que le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ s'activait au centre des structures tourbillonnaires à cause de forts gradients de pression plutôt qu'à l'interface entre le méthane et l'oxygène, là où un gradient de masse volumique est localisé. Toutefois, ce comportement a été démontré comme étant relativement spécifique à ce cas d'étude, par la simulation complémentaire d'une couche de mélange LOx/GCH_4. En effet, dans ce cas-là, le gradient de masse volumique entre le méthane et l'oxygène étant bien plus important, le terme $\mathbf{d}_k^{\mathrm{RG}}$ devient alors également bien plus important et cette fois-ci se retrouve davantage localisé au niveau des gradients de masse volumique plutôt qu'au niveau des gradients de pression.

Enfin, on pourrait s'attendre à ce que les effets de diffusion non-idéale soient encore plus importants dans le cas d'un écoulement haute pression où de très forts gradients de masse volumique seraient impliqués, comme dans un cas où de la combustion serait impliquée. Cependant, il semblerait que la modélisation non-idéale des flux de diffusion proposée dans cette thèse ne soit pas satisfaisante pour modéliser un tel problème et qu'une autre formulation nécessite d'être adoptée, afin de stabiliser les calculs et limiter les erreurs numériques comme celles rencontrées lors de la simulation d'une flamme laminaire prémélangée 1D. Différentes méthodes ont été proposées et pourraient faire l'objet d'études par la suite : procédure purement numérique, implémentation d'un calcul de gradient à température fixée ou réécriture des flux de diffusion.

Chapitre 6

Simulation numérique de la combustion CH_4/O_2 à haute pression en configuration *splitter-plate* avec un mécanisme chimique réduit

Sommaire

6.1 Introduction 225
6.1.1 Contexte 225
6.1.2 Objectifs 226
6.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation 227
6.2.1 Configurations 227
6.2.2 Paramétrage numérique 228
6.2.3 Initialisation et procédure de calcul 228
6.3 Résultats et discussion 229
6.3.1 Description de l'écoulement 229
6.3.2 Vers la simulation aux grandes échelles 239
6.4 Conclusion 276

6.1 Introduction

6.1.1 Contexte

Dans le chapitre 3, un nouveau mécanisme réduit (le RAMEC-17S-44R) adapté à la prédiction de la combustion méthane-oxygène à haute pression a été présenté, puis validé par comparaison avec le mécanisme chimique détaillé dont il a été issu (le RAMEC [278]), sur des cas de flammes canoniques 1D (prémélange et diffusion) et des calculs de temps d'auto-allumage, ainsi que pour des flammes turbulentes prémélangées 2D et 3D.

Dans le chapitre 4, ce même mécanisme chimique a été utilisé avec succès pour simuler des flammes dans des configurations initialement non-prémélangées, montrant la capacité du mécanisme chimique réduit à pouvoir reproduire le comportement de son mécanisme parent dans tous les régimes de combustion et en prenant en compte des effets de turbulence. Des structures de flammes triples ont également été observées durant ces simulations et leur mode de propagation dans des milieux hétérogènes en composition a pu être étudié avec précision. Le régime de flamme prémélangée qui n'était pas forcément attendu dans des configurations de flamme de diffusion, a montré qu'il n'était pas négligeable dans ces configurations-là et même pouvait jouer un rôle important. Dans ce même chapitre, l'allumage d'une couche de mélange réactive en configuration *splitter-plate* a montré que l'on retrouvait des structures de flammes triples se propageant le long de l'interface entre le méthane et l'oxygène, là où les conditions pour brûler étaient le plus favorable (stœchiométrie). Toutefois, dans cette étude, uniquement l'allumage et la propagation des flammes triples juste après allumage ont été étudiées, essentiellement pour des raisons de coût CPU.

Ensuite, dans le chapitre 5, l'étude d'une couche de mélange CH_4/O_2 non réactive, en configuration *splitter-plate*, a également été réalisée. Différents modèles de sous-maille LES pour la modélisation de la turbulence ont également été utilisés et comparés, mettant en évidence les forces et faiblesses de chacun dans ce cadre précis.

Toutefois, l'étude approfondie d'une couche de mélange CH_4/O_2 réactive avec le mécanisme chimique réduit obtenu durant cette thèse n'a pas encore été menée. En effet, il reste à voir dans un tel cas si lorsqu'un régime quasi-stationnaire est atteint, on observe toujours des structures de flammes triples ou plus simplement de la combustion prémélangée. Par ailleurs, s'il a été montré que la prise en compte d'effets non-idéaux de diffusion n'avait qu'un impact limité en l'absence de combustion, il a également été montré que ce n'était peut-être pas le cas dans le cadre d'un écoulement réactif. Cependant, comme la modélisation des flux de diffusion implémentée dans cette thèse ne s'est pas avérée stable et satisfaisante dans le cas de la simulation d'une flamme laminaire prémélangée dans des conditions thermodynamiques proches de celle de la couche de mélange LOx/LCH_4 étudiée, celle-ci ne peut pas être utilisée en l'état pour simuler un cas réactif.

Enfin, si la simulation par approche numérique directe (DNS) reste très interéssante pour essayer de mieux comprendre la physique ou fournir des données nécessaires au calibrage de modèles moins coûteux (approches LES ou RANS par exemple), elle n'en reste pas moins quasi-exclusivement réservée à un cadre académique à cause de son fort coût CPU. Partant de ce constat-là, il est nécessaire d'entamer des réflexions autour des conséquences que peuvent entrainer une baisse de la résolution du maillage (début de réflexion dans l'annexe C.3) et de l'inclusion de modèles de sous-maille pour prédire la turbulence elle-même, ainsi que l'interaction entre la chimie et la turbulence. Or jusqu'à présent dans ce manuscrit de thèse, aucune étude LES dans le cadre d'un écoulement turbulent réactif représentatif d'un point de fonctionnement moteur-fusée n'a encore été présentée.

6.1.2 Objectifs

Les objectifs de ce chapitre sont les suivants :

1. étude d'une couche de mélange turbulente réactive CH_4/O_2, en configuration *splitter-plate* à haute pression, simulée en DNS 2D dans les mêmes conditions que le chapitre 5 ;

2. analyse des différents régimes de combustion sur cette configuration ;
3. réalisation d'une LES 2D de cette même configuration avec deux approches différentes pour modéliser le terme source chimique et comparaison avec la DNS.

6.2 Configurations, paramétrage numérique et initialisation

6.2.1 Configurations

La configuration étudiée est la même que celle présentée dans le chapitre 5, mais cette fois-ci en prenant en compte la combustion. En effet, le point de fonctionnement et les conditions aux limites sont identiques, comme l'illustre la Fig. 6.1.

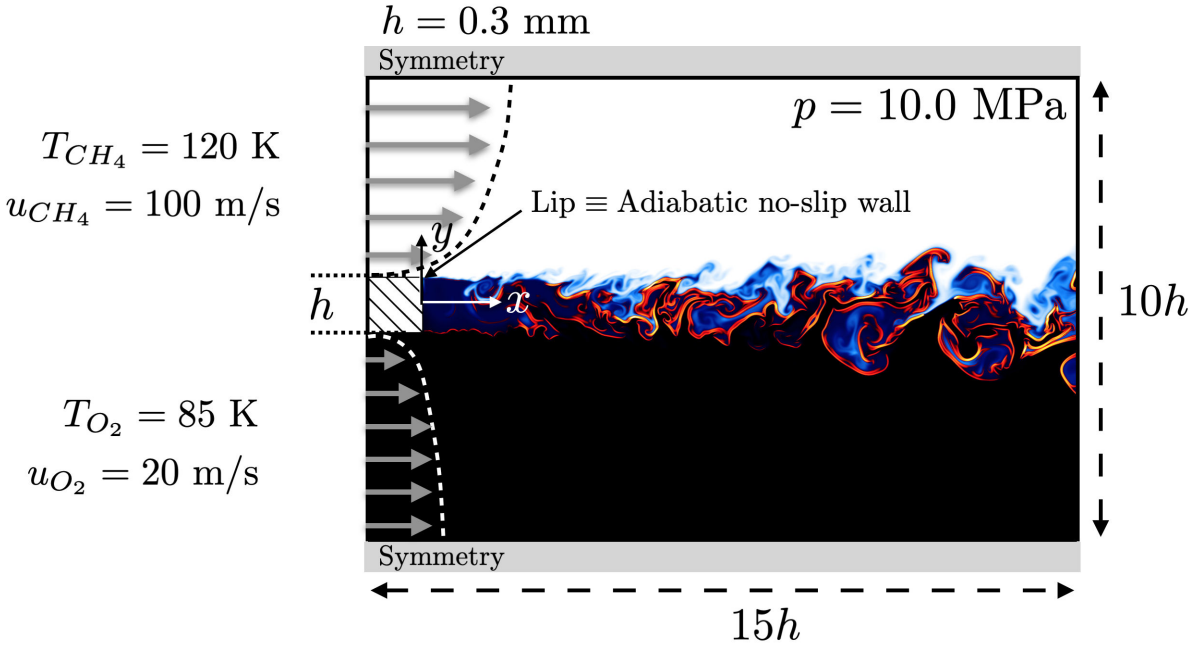


FIGURE 6.1 – Point de fonctionnement et conditions aux limites. Visualisation de la flamme avec le taux de dégagement de chaleur (HRR), superposé au champ de fraction de mélange (Z).

La configuration étudiée est donc une couche de mélange turbulente réactive avec une injection CH_4/O_2 doublement transcritique, en configuration *splitter-plate*. Les conditions de cet écoulement diffèrent de celles rencontrées dans le chapitre 4, où seulement l'allumage d'une couche de mélange similaire a été réalisée. En effet, la pression est plus élevée ici ($P = 10$ MPa) que celle du chapitre 4 ($P = 5.4$ MPa), afin de s'éloigner du point critique qui peut causer quelques difficultés numériques, tout en restant représentative d'une pression atteignable dans un générateur de gaz de moteur-fusée. De plus, les vitesses sont également plus élevées ici ($u_{CH_4} = 100$ m $\cdot$ s^{-1} et $u_{O_2} = 20$ m $\cdot$ s^{-1}) que dans le chapitre 4 ($u_{CH_4} = 20$ m $\cdot$ s^{-1} et $u_{O_2} = 2$ m $\cdot$ s^{-1}), de façon à diminuer le temps de séjour des particules dans l'écoulement. L'idée est que le pas de temps limitant étant celui de la chimie, augmenter la vitesse de l'écoulement permet de simuler un plus grand nombre de temps de passage pour un temps physique donné.

Pour rappel (voir chapitre 5), dans cette configuration, le rapport de quantité de mouvement J vaut environ 8.8 et la vitesse convective est d'environ 50 m $\cdot$ s^{-1}, ce qui se traduit par un

temps de passage $\tau = 6 \times 10^{-5}$ s, sur une longueur de $10h$, avec $h = 0.3$ mm.

Tout comme dans le chapitre 5, les deux mêmes maillages sont considérés ici, à savoir le "H150" qui contient 150 mailles dans l'épaisseur de la lèvre ($\Delta_{H150} = 2.0 \times 10^{-6}$ m) et le "H30" qui lui en contient 30 dans l'épaisseur de la lèvre ($\Delta_{H30} = 1.0 \times 10^{-5}$ m).

6.2.2 Paramétrage numérique

Les simulations sont réalisées avec SiTCom-B. L'EoS SRK [358] est utilisée. Les propriétés de transport haute pression sont évaluées avec les méthodes de Chung [53] et de Takahashi [367]. Le mécanisme chimique utilisé est le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44, introduit dans le chapitre 3 et également utilisé dans le chapitre 4.

Étant donné les conclusions du chapitre 5, on ne considère ici qu'une modélisation idéale des flux de diffusion (voir détails dans la section 2.1.6.2).

De plus, tout comme dans le chapitre 5, deux approches pour la modélisation des termes de sous-maille ont été envisagées. Dans un premier temps, une simulation sans terme de sous-maille pour la modélisation de la turbulence est réalisée avec le maillage H150 (approche que l'on qualifiera ici de DNS). Dans un second temps, deux simulations (qualifiées de LES) sont réalisées sur le maillage H30 avec le modèle de Smagorinsky dynamique [93, 185] (SMD), mais avec deux approches différentes pour modéliser l'interaction entre la chimie et la turbulence (TCI).

En effet, avec le maillage H150, on peut considérer que celui-ci est suffisamment fin pour bien représenter la chimie ainsi que la turbulence, et donc aucun modèle TCI n'est considéré. Pour ce qui est du maillage H30, dans un premier temps aucun modèle TCI n'est pris en compte et dans un second temps le modèle de flamme épaissie dynamique [57, 182] (TFLES) largement décrit dans la section 2.3.7.2 est utilisé sans fonction d'efficacité et conditionné aux flammes de prémélanges grâce à l'indice de Takeno (Éq. 2.143). Dans le cas où le modèle TFLES est employé, le facteur d'épaississement est de $\mathcal{F} = 5$, qui correspond au ratio entre les tailles de cellules des maillages H150 et H30.

Finalement, la Tab. 6.1 résume l'ensemble des simulations effectuées et les modèles employés.

Nom	Taille de maille	SGS	TCI
H150	$\Delta = 2.0 \times 10^{-6}$ m	[-]	[-]
H30 - NO TCI	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	SMD [93, 185]	[-]
H30 - TFLES	$\Delta = 1.0 \times 10^{-5}$ m	SMD [93, 185]	TFLES [57, 182]

TABLE 6.1 – Présentation de l'ensemble des simulations réalisées et des différents modèles employés.

6.2.3 Initialisation et procédure de calcul

6.2.3.1 Initialisation

Comme dans cette étude on ne s'intéresse pas à proprement parlé à l'allumage de la couche de mélange, comme c'était le cas par exemple dans le chapitre 4, la mise en place du calcul est légèrement différente.

En effet, une des solutions de l'écoulement non réactif obtenu en LES dans le chapitre 5 sur le maillage H30 a été reprise, puis un point chaud et une procédure d'allumage similaire à celle du chapitre 4 a été utilisée. Quelques temps de passage ont été simulés avec le maillage H30 et des modèles de transports simplifiés afin d'établir rapidement la flamme sur toute la longueur du domaine et de la stabiliser. La solution obtenue a ensuite été interpolée sur un maillage H150 puis l'écoulement a été simulé avec l'ensemble des paramètres numériques décrits dans la section 6.2.2.

6.2.3.2 Procédure de calcul

Une fois la flamme établie et interpolée sur le maillage H150, environ 3 temps de passage ont été simulés afin de laisser l'écoulement s'établir et les structures turbulentes se développer et interagir avec la flamme. Les simulations ont alors été poursuivies pendant encore 3 temps de passage supplémentaires (i.e. $3\tau = 1.8 \times 10^{-4}$ s) durant lesquels des statistiques (moyennes temporelles de Reynolds et de Favre) ont pu être cumulées.

Une des solutions obtenues pendant la phase de cumul de statistiques du cas H150 a ensuite été retenue puis interpolée sur un maillage H30. Les deux simulations H30 avec et sans modèle TCI ont alors été réalisées à partir de cette solution initiale. Environ $2-3$ temps de passage ont été réalisés durant une phase de convergence, avant d'enclencher à nouveau une phase de cumul de statistiques pendant la même durée que pour le cas H150, c'est-à-dire 3 temps de passage.

Il est pratiquement certain qu'en seulement 3 temps de passage, les statistiques ne sont pas parfaitement convergées et qu'idéalement il faudrait au moins $10-15$ temps de passage. Toutefois, le coût en CPU bien trop important de ces simulations (en particulier le cas H150) qui transportent 17 espèces et où la chimie d'Arrhenius est résolue en tout point de manière explicite, en plus de considérer la thermodynamique gaz réel et des flux de diffusion avec l'approche de Curtiss et Hirschfelder [128] (pas de Lewis unitaire ou constant pour toutes les espèces), ne permet pas de réaliser ces simulations durant un temps physique simulé aussi important.

Néanmoins, l'effort réalisé de cumuler des statistiques pendant 3 temps de passage permet tout de même de dégager une certaine tendance et de comparer plus facilement les simulations H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES entre elles, comme montré ci-après.

6.3 Résultats et discussion

6.3.1 Description de l'écoulement

Dans cette section, on s'intéresse uniquement au cas H150. Les différents champs instantanés présentés dans ce qui suit sont obtenus après la phase de convergence, donc suffisamment longtemps après l'initialisation, et sont donc supposés être assez représentatifs de l'écoulement en régime quasi-stationnaire.

6.3.1.1 Champs instantanés

Analyse préliminaire de l'écoulement

Dans un premier temps, une analyse de l'écoulement et de la structure de flamme obtenue sur le cas H150 est menée. La Fig. 6.2 qui superpose les champs du taux de dégagement de chaleur

(HRR) et de fraction de mélange (Z) permet de mettre en évidence certaines caractéristiques particulières de cette configuration.

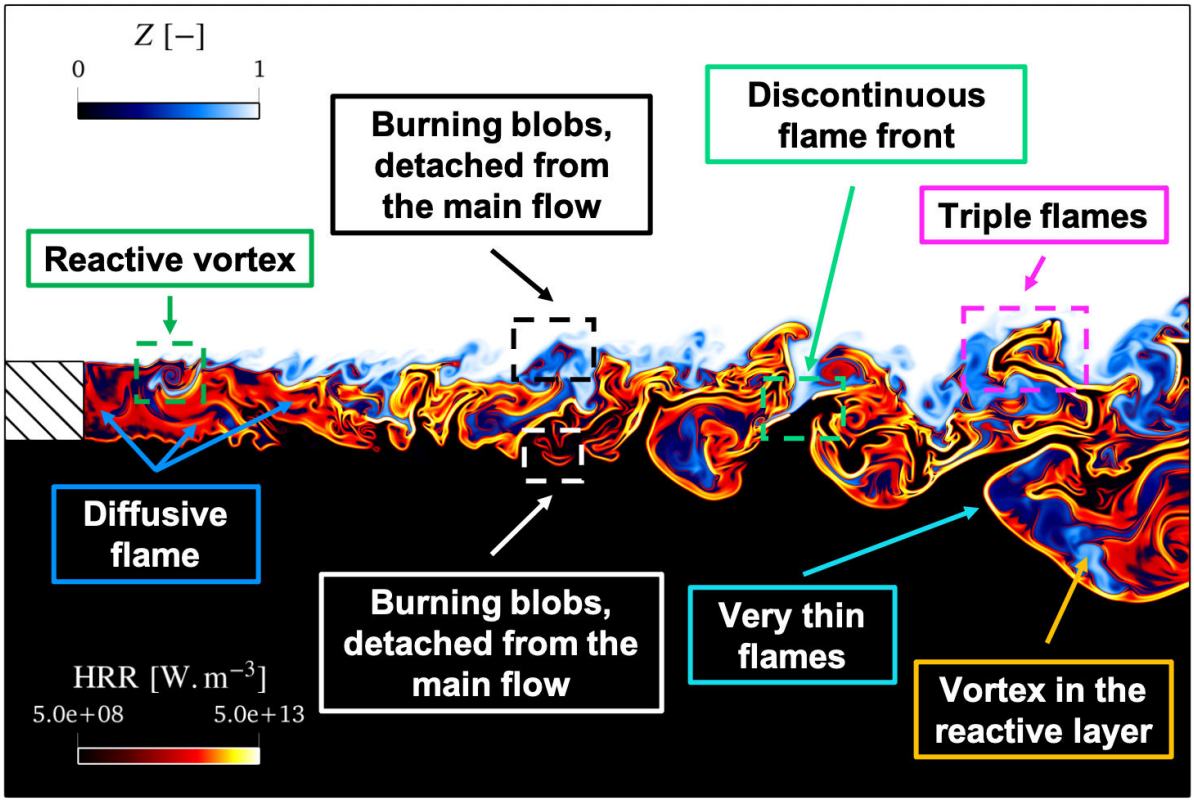


FIGURE 6.2 – Taux de dégagement de chaleur (HRR) superposé au champ de fraction de mélange (Z), obtenu avec le maillage H150.

En effet, cette figure démontre la structure relativement complexe de la flamme à l'étude où différents phénomènes physiques sont rencontrés. On observe par exemple des zones où la flamme est relativement épaisse et diffuse et d'autres zones où le front de flamme est relativement fin.

Des fronts de flammes de fortes intensités (en terme de HRR) très minces et très rapprochés peuvent également être observés, à la manière des structures de flammes observées dans le chapitre 4.

L'enveloppe de la flamme est même discontinue par endroit (encadré vert sur la Fig. 6.2), probablement à cause de contraintes de cisaillement localement trop importantes (plissement de la flamme) et de la turbulence qui est en train d'amener un front froid en provenance du méthane ou de l'oxygène.

Il est également possible d'observer des poches pauvres en méthane qui se détachent de la structure principale de l'écoulement et viennent brûler côté injection d'oxygène et réciproquement, des poches pauvres en oxygène qui brûlent côté injection de méthane.

On peut aussi avoir des phénomènes d'extinctions locales au niveau des poches de combustible ou d'oxydant qui se détachent de l'enveloppe principale de la flamme.

De plus, il semblerait que localement des structures de flammes triples (encadré magenta sur la Fig. 6.2) puissent apparaître, laissant supposer la présence locale des différents régimes de combustion (prémélange et diffusion).

Caractérisation de l'écoulement avec les variables principales

Des champs issus de différentes variables au même instant, sont comparés sur la Fig. 6.3.

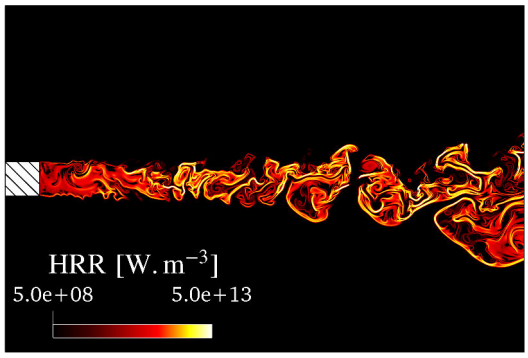
Par exemple, le champ d'index de flamme (b) permet de confirmer que l'on observe bien deux régimes de combustion canoniques dans cette flamme, à savoir celui de la combustion non-prémélangée (jaune moutarde) et celui de la combustion prémélangée, qu'elle soit riche (rose) ou pauvre (bleu marine). Sur cette figure, le champ d'index de flamme n'est montré que dans la zone de flamme, i.e. pour $\mathrm{HRR} > 0\ \mathrm{W \cdot m^{-3}}$.

Ainsi, l'index de flamme nous montre ici que l'on a de la combustion prémélangée dans des proportions clairement non négligeables, ce qui démontre une fois de plus à quel point un tel écoulement peut être complexe. Or *a priori*, avec une injection séparée de méthane et d'oxygène on pouvait plutôt s'attendre à avoir une flamme de diffusion, comme c'est le cas pour des configurations similaires avec une flamme d'hydrogène [113,325]. Pourtant, ici est clairement démontré que si la diffusion joue probablement un rôle important dans cette situation, le mélange par la turbulence et la cinétique chimique relativement complexe du méthane par rapport à celle de l'hydrogène semblent également jouer un rôle au premier ordre.

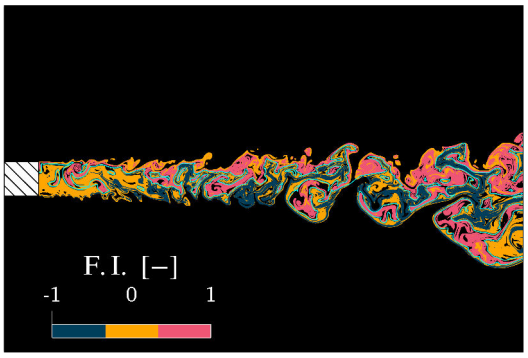
En effet, dans le cas particulier d'une injection doublement transcritique comme c'est le cas ici, nous avons à la fois une masse volumique élevée pour le combustible ($\rho_{\mathrm{CH_4}} \simeq 420\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$) et pour l'oxydant ($\rho_{\mathrm{O_2}} \simeq 1190\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$). Or dans le cas où de l'hydrogène est injecté dans des conditions de température ($T = 100$ K) et de pression ($P = 10.0$ MPa) similaires, celui-ci est injecté supercritique ($T_c = 33$ K) avec une masse volumique plus faible, de l'ordre de $\rho_{\mathrm{H_2}} \simeq 23\ \mathrm{kg \cdot m^{-3}}$. Cette forte différence de masse volumique d'un facteur environ 18 entre le méthane et l'hydrogène pour des mêmes conditions d'injection, impacte ainsi la structure de l'écoulement. Si l'on rajoute à cela le fait que le méthane se diffuse également moins facilement que l'hydrogène et que la cinétique chimique du méthane n'est pas aussi rapide que celle de l'hydrogène, on aboutit à une structure d'écoulement très différente et probablement plus complexe à certains égards, pour des conditions d'injection similaires. Le méthane semble ainsi avoir bien plus de mal à se mélanger et à brûler que l'hydrogène dans des conditions similaires.

Le champ de température (c) de la Fig. 6.3 montre également que la température n'est pas très homogène dans les gaz brulés. En particulier, on observe localement des structures froides (de l'ordre de 100 K), capables même de venir séparer localement le front de flamme en deux parties distinctes. Par ailleurs, on observe qu'une zone de forte température de près de 3800 K est présente derrière la lèvre de l'injecteur. Toutefois dans cette simulation, comme la lèvre est supposée adiabatique alors que ce n'est bien évidemment pas le cas dans la réalité où celle-ci est refroidie efficacement par les ergols de part et d'autre afin d'éviter que celle-ci ne fonde, la température juste derrière la lèvre est probablement sur-estimée ici. De la même façon, le mécanisme de stabilisation de la flamme observé ici serait certainement différent en considérant la lèvre isotherme ou en résolvant la thermique du solide, comme démontré par exemple par Mari [208] ou encore Laurent *et al.* [176] dans leurs simulations respectives. C'est pourquoi une étude approfondie de la stabilisation de la flamme en proche paroi ne sera pas effectuée ici mais pourrait faire l'objet d'une future étude.

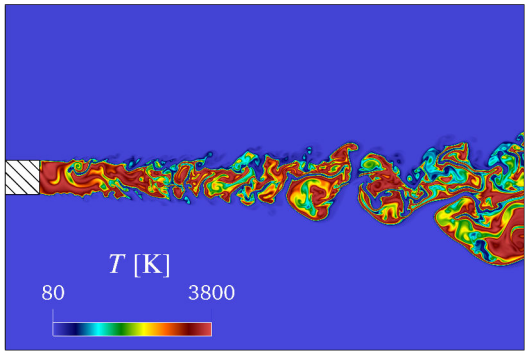
Une zone de recirculation relativement étendue (environ $4h$) derrière la lèvre de l'injecteur est également présente, comme le montre l'iso-contour blanc dans le champ de vitesse axiale (e), ce qui favorise l'accroche de la flamme derrière la lèvre de l'injecteur. Cette zone de recirculation est présente sur environ la moitié supérieure de la lèvre, i.e. côté méthane. On peut également



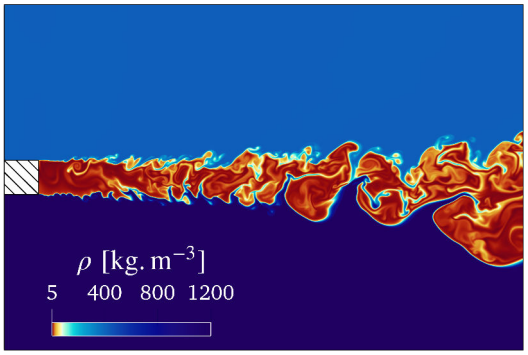
(a) Taux de dégagement de chaleur



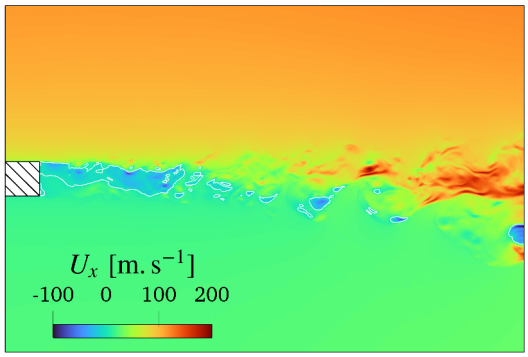
(b) Index de flamme et stœchiométrie



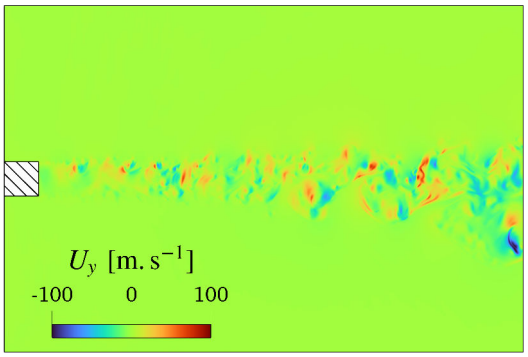
(c) Température



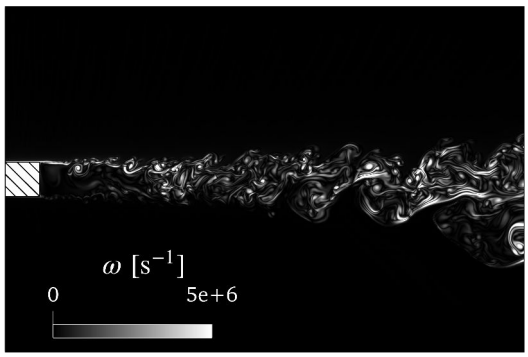
(d) Masse volumique



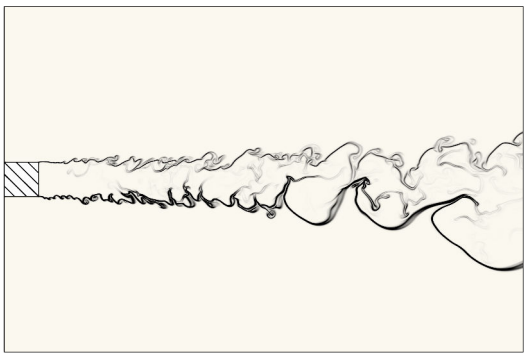
(e) Vitesse axiale et iso-vitesse axiale nulle



(f) Vitesse transverse



(g) Vorticité



(h) Schlieren

FIGURE 6.3 – Comparaison de champs instantanés pour différentes variables avec le maillage H150.

noter la présence d'une petite zone de recirculation dans le coin inférieur droit de la lèvre, côté oxygène.

Le champ du taux de dégagement de chaleur (a) illustre une structure de flamme turbulente composée localement de flammelettes déformées et plissées par la turbulence, qui semblent produire une source de chaleur localement plus intense que dans le reste de la flamme.

Les champs de vitesse transverse (f) et de vorticité (g) mettent en évidence l'intensité de la turbulence et son rôle dans le mélange des gaz en présence. On observe par exemple que la vitesse transverse peut localement atteindre des valeurs de près de 100 $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$ ce qui est du même ordre de grandeur que la vitesse (axiale) d'injection du méthane.

Par ailleurs, les champs de masse volumique (d) et de Schlieren (h) de la Fig. 6.3 démontrent que les gradients de masse volumique en jeu sont très élevés ici, en particulier au niveau de l'interface entre les gaz frais (côtés oxygène et méthane) et les gaz brulés.

Enfin, la complexité de flamme étudiée se retrouve dans la Fig. 6.4 au travers du gradient de température.

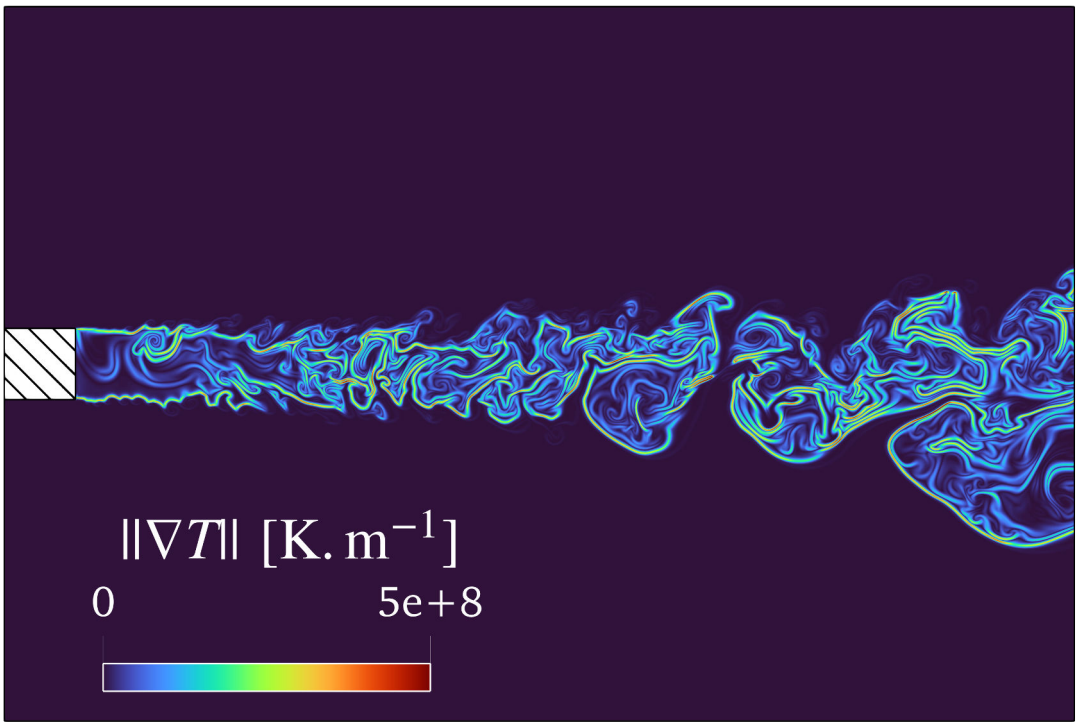


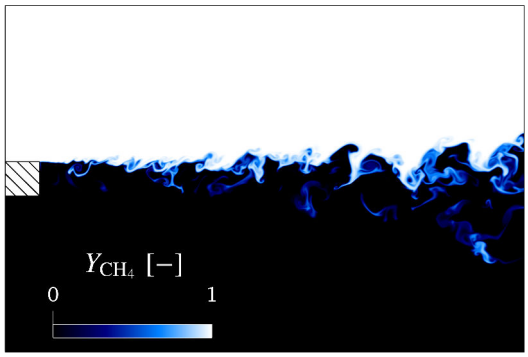
FIGURE 6.4 – Champ instantané de la norme du gradient de température, obtenu avec le maillage H150.

Répartition des principales espèces chimiques au sein de l'écoulement

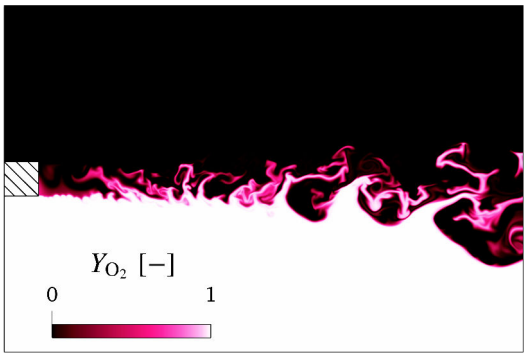
L'agencement des différentes espèces au sein de l'écoulement est illustré sur la Fig. 6.5.

On retrouve ainsi des ligaments de méthane (a) ou d'oxygène (b) caractéristiques des écoulements transcritiques. Ces derniers, plus denses, peuvent davantage pénétrer dans la zone réactive, même si ceux de méthane semblent légèrement plus se diffuser que ceux d'oxygène.

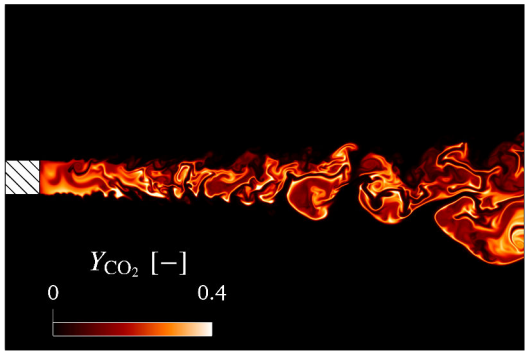
Côté gaz brulés, la répartition de CO_2 (c) et d'H_2O (d) sont similaires et localisées dans toute l'enveloppe de la flamme turbulente. Les espèces CO (e) et H_2 (f) sont quant à elles présentes



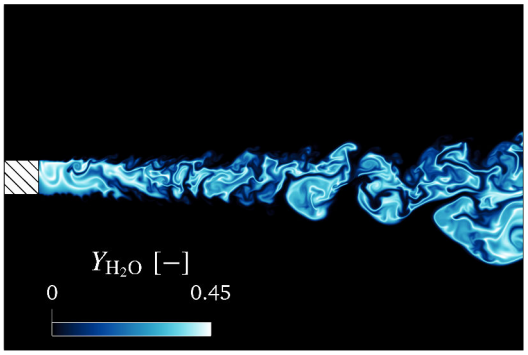
(a) Fraction massique de CH_4



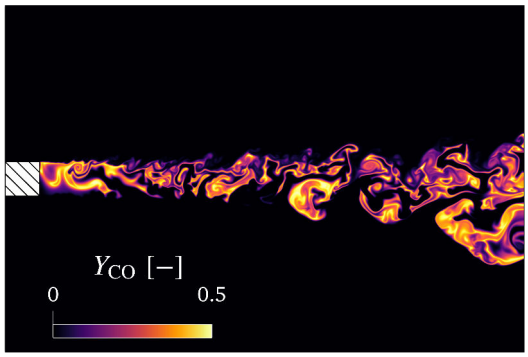
(b) Fraction massique d'O_2



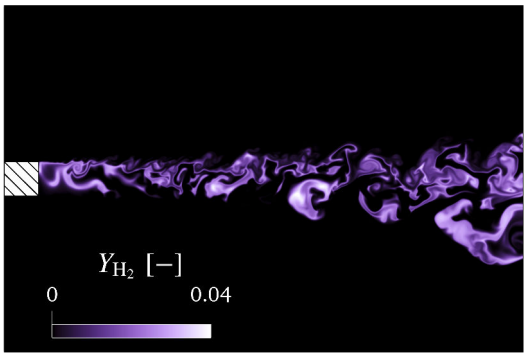
(c) Fraction massique de CO_2



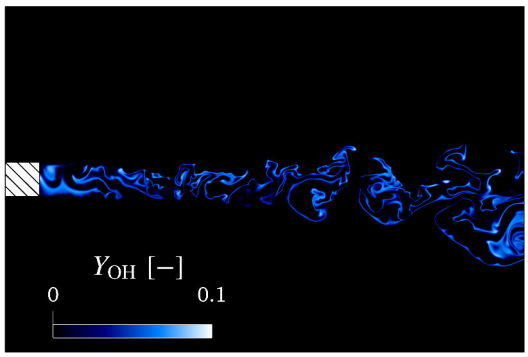
(d) Fraction massique d'H_2O



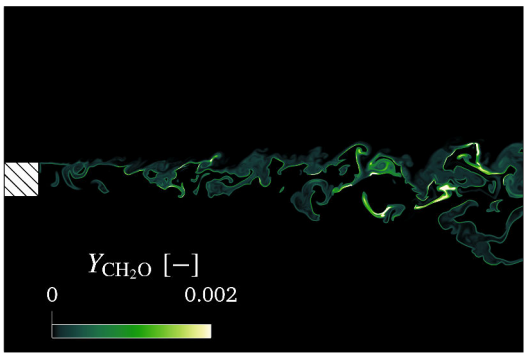
(e) Fraction massique de CO



(f) Fraction massique d'H_2



(g) Fraction massique d'OH



(h) Fraction massique de CH_2O

FIGURE 6.5 – Comparaison de champs instantanés pour différentes fractions massiques avec le maillage H150.

en plus grande quantité dans les zones riches en méthane alors que le radical OH semble plutôt indiquer la présence de la flamme dans les régions pauvre en méthane, d'après l'index de flamme de la Fig. 6.3. Ainsi, expérimentalement (ou même numériquement), identifier uniquement la présence de la flamme par la présence seule du radical OH pourrait conduire à une mauvaise interprétation de la localisation de la flamme, en passant à côté d'une partie de celle-ci. Une solution pourrait être de regarder en complément l'évolution d'un autre radical comme le radical CH_2O, davantage présent dans les zones de combustion riche en méthane.

L'ensemble de ces observations se retrouve pour des instants éloignés, comme le témoigne la Fig. 6.6 sur laquelle est tracé le taux de dégagement de chaleur superposé au champ de fraction de mélange.

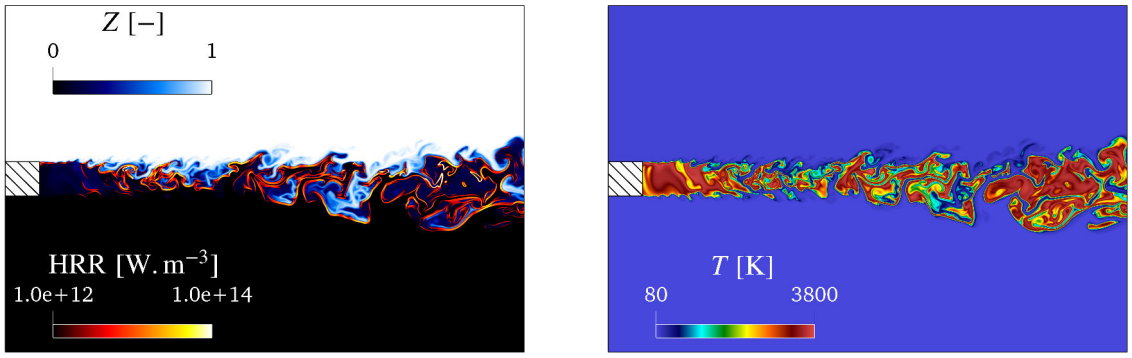
6.3.1.2 Dynamique de l'écoulement

Les Fig. 6.7, 6.8, et 6.9, montrent comment évolue la structure de la flamme de manière globale (colonne de gauche) et localement (colonne de droite) avec un focus (zoom) sur une zone particulière de l'écoulement où l'on peut observer différents phénomènes physiques intéressants.

En effet, dans la Fig. 6.7, si l'on se focalise par exemple sur la zone de l'écoulement encadrée en vert (a.1), on obtient le zoom (a.2) qui met en évidence dans l'encadré magenta, la présence locale d'un front de flamme relativement mince avec une intensité en terme de taux de dégagement de chaleur assez importante (de l'ordre de 1×10^{12} à 1×10^{13} $W \cdot m^{-3}$). On voit ensuite que ce front de flamme est coupé en deux (b.1) et (b.2), probablement à cause d'un étirement local trop important. La structure locale du front de flamme de droite se complexifie alors de plus en plus (c) et (d). On commence ensuite à voir apparaître dans la Fig. 6.8 des structures de flammes triples (e), (f), (g) et (h) au niveau des deux fronts de flammes qui essaient de se rapprocher, le gradient de fraction de mélange étant localement suffisamment important pour permettre l'existence de telles flammes tri-brachiales. L'index de flamme (g.2) permet alors de confirmer la présence de ces flammes triples en témoignant de la présence des trois régimes de combustion, à savoir de diffusion, de prémélange riche et de prémélange pauvre. Ces flammes triples tendent à se rapprocher jusqu'à se rejoindre et fusionner, comme le montre la Fig. 6.9.

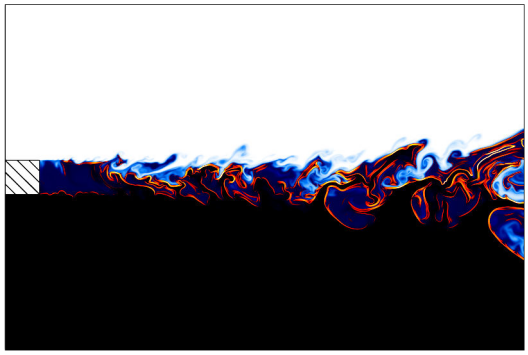
On peut aussi s'intéresser à différents champs afin de caractériser au mieux les structures de flammes triples observées dans la Fig. 6.8, à l'instant $t_1 + 1.2 \times 10^{-5}$ s (g). On arrive en effet bien à identifier grâce à la Fig. 6.10, comment le méthane et l'oxygène arrivent à alimenter ces flammes triples. Il est également bon de noter que la présence des radicaux OH et CH_2O n'est pas localisée au même endroit, comme déjà remarqué précédemment, le radical OH étant présent plutôt côté pauvre en méthane, l'espèce CH_2O plutôt côté riche. Par ailleurs, la norme du gradient de la fraction massique d'OH ne permet pas de mettre en évidence la structure de flamme triple en ne montrant qu'un double front, alors que la norme du gradient de la fraction massique de CH_2O laisse apparaître trois zones de gradients relativement intenses, associées à trois fronts de flammes caractéristiques des flammes triples.

Enfin, il semblerait que ce mécanisme de propagation de flammes triples ne soit pas un phénomène physique isolé et peut être retrouvé sous différentes formes à différents instants de la simulation. En fait, l'apparition et éventuellement l'extinction, la perturbation de ces flammes par la turbulence ou l'étirement et le plissement engendrés par celle-ci, le fait que de telles flammes puissent transiter d'une structure flamme tri-brachiale vers une structure bi-brachiale

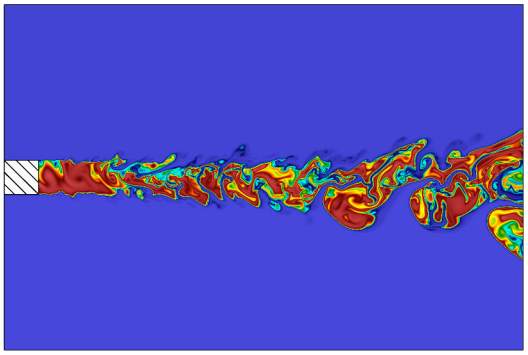


(a.1) t_0

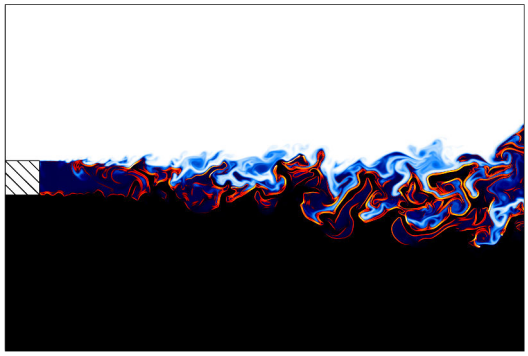
(a.2) t_0



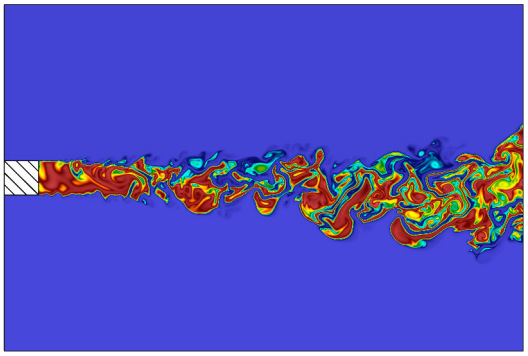
(b.1) $t_0 + \tau$



(b.2) $t_0 + \tau$

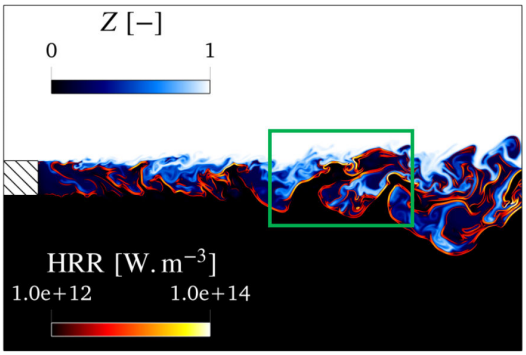


(c.1) $t_0 + 2\tau$

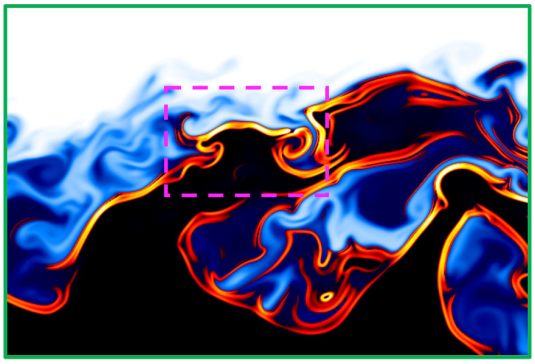


(c.2) $t_0 + 2\tau$

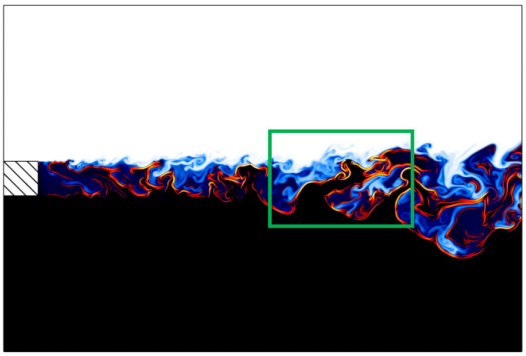
FIGURE 6.6 – Comparaison de champs instantanés du taux de dégagement de chaleur superposé avec la fraction de mélange (colonne de gauche) et de température (colonne de droite), pour différents instants avec le maillage H150. t_0 arbitraire et $\tau = 6.0 \times 10^{-5}$ s.



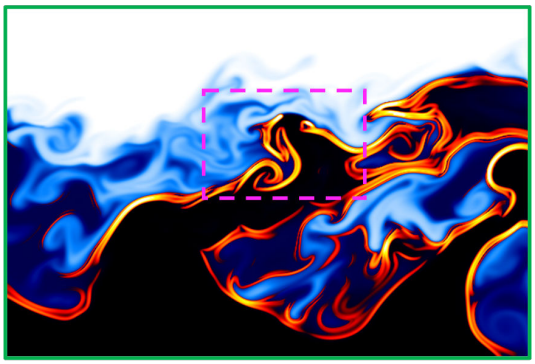
(a.1) t_1



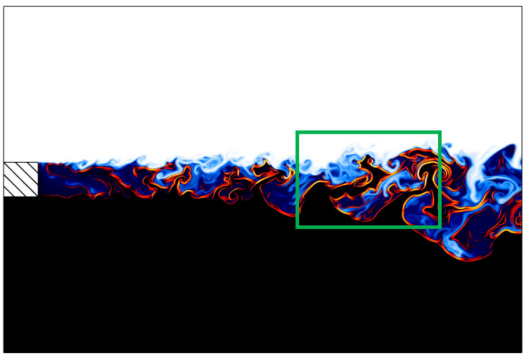
(a.2) t_1 - zoom



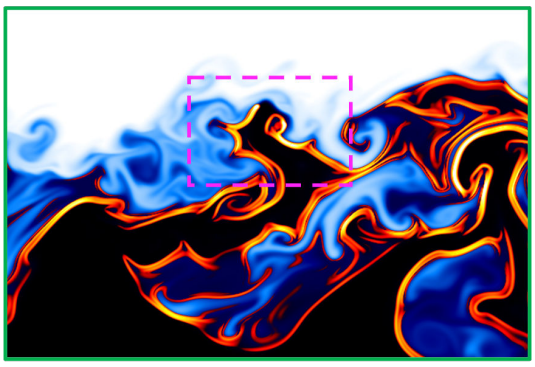
(b.1) $t_1 + 2.0 \times 10^{-6}$ s



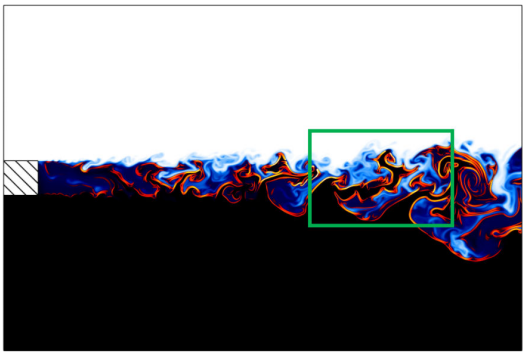
(b.2) $t_1 + 2.0 \times 10^{-6}$ s - zoom



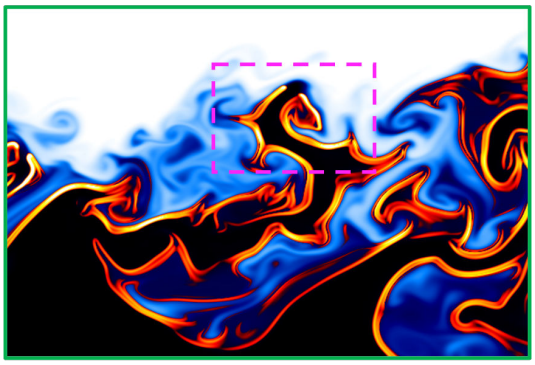
(c.1) $t_1 + 4.0 \times 10^{-6}$ s



(c.2) $t_1 + 4.0 \times 10^{-6}$ s - zoom

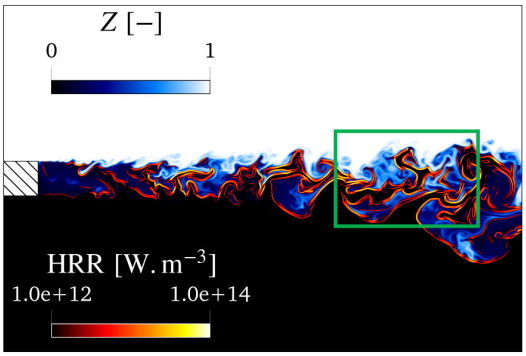


(d.1) $t_1 + 6.0 \times 10^{-6}$ s

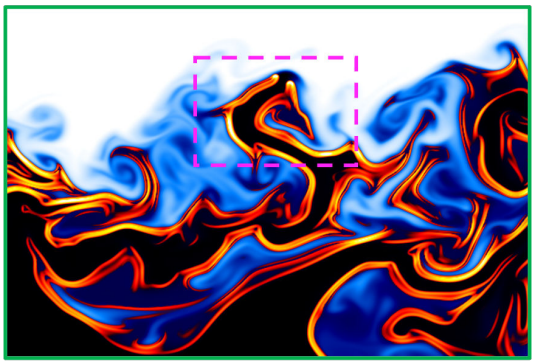


(d.2) $t_0 + 6.0 \times 10^{-6}$ s - zoom

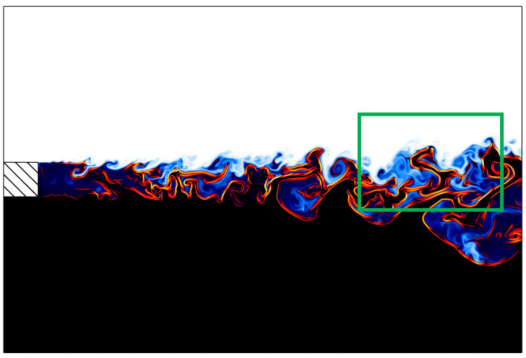
FIGURE 6.7 – Comparaison de champs instantanés du taux de dégagement de chaleur superposé avec la fraction de mélange, pour différents instants relativement rapprochés avec le maillage H150. t_1 arbitraire.



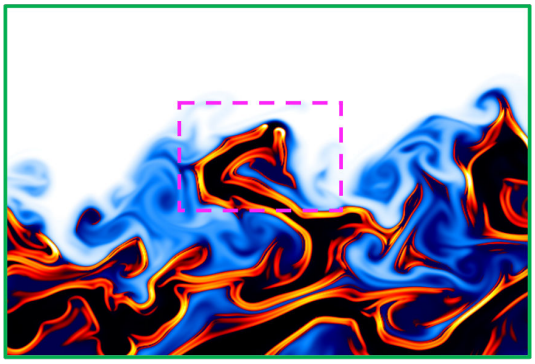
(e.1) $t_1 + 8.0 \times 10^{-6}$ s



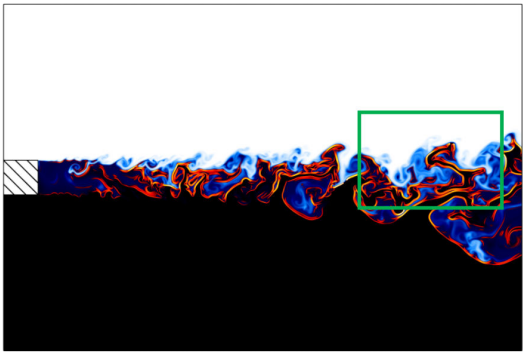
(e.2) $t_1 + 8.0 \times 10^{-6}$ s - zoom



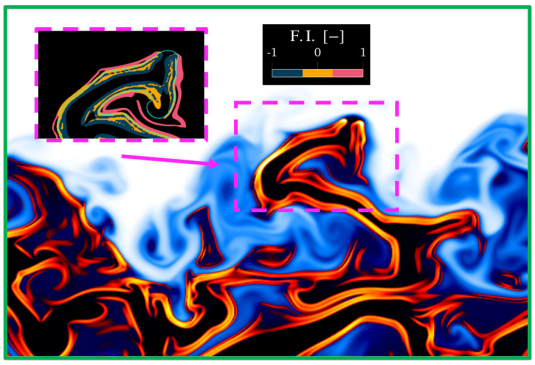
(f.1) $t_1 + 1.0 \times 10^{-5}$ s



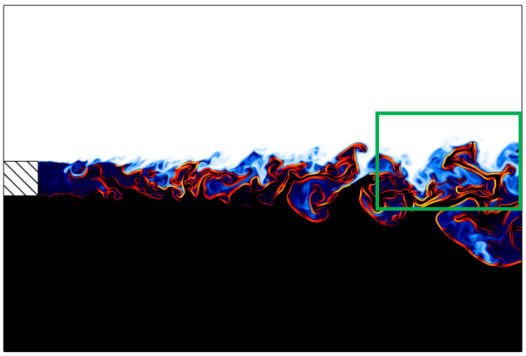
(f.2) $t_1 + 1.0 \times 10^{-5}$ s - zoom



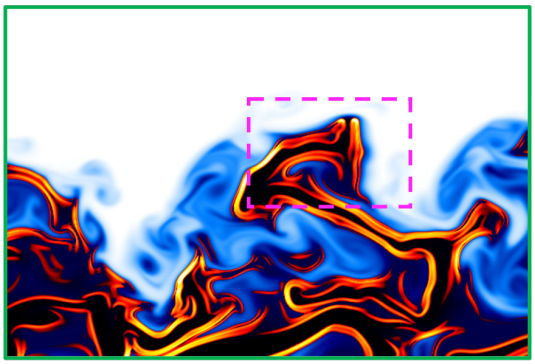
(g.1) $t_1 + 1.2 \times 10^{-5}$ s



(g.2) $t_1 + 1.2 \times 10^{-5}$ s - zoom

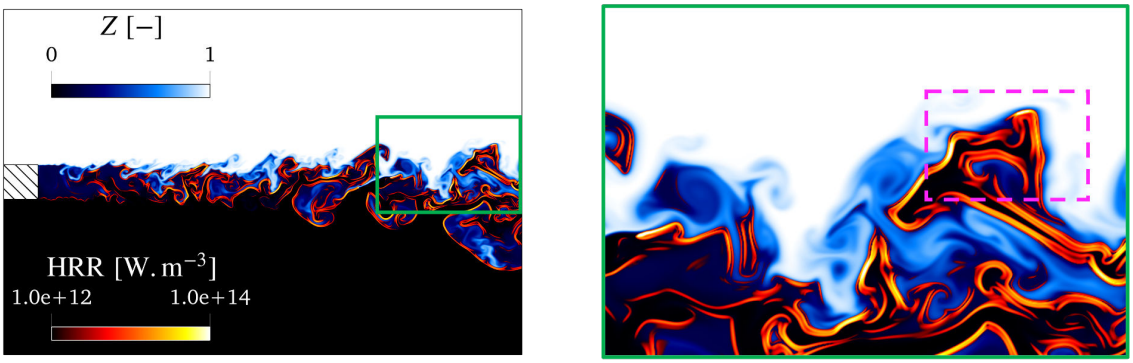


(h.1) $t_1 + 1.4 \times 10^{-5}$ s



(h.2) $t_1 + 1.4 \times 10^{-5}$ s - zoom

FIGURE 6.8 – Suite de la Fig. 6.7.



(i.1) $t_1 + 1.6 \times 10^{-5}$ s (i.2) $t_1 + 1.6 \times 10^{-5}$ s - zoom

FIGURE 6.9 – Suite de la Fig. 6.8.

(une flamme à double front), met en clairement évidence que la chimie n'est pas infiniment rapide dans ces conditions. Cela montre également à quel point les simulations et les analyses effectuées dans le chapitre 4 étaient bel et bien représentatives de certains phénomènes physiques que l'on peut observer à plus grande échelle, sur une configuration qui se rapproche davantage des conditions d'injection d'un vrai générateur de gaz de moteur-fusée.

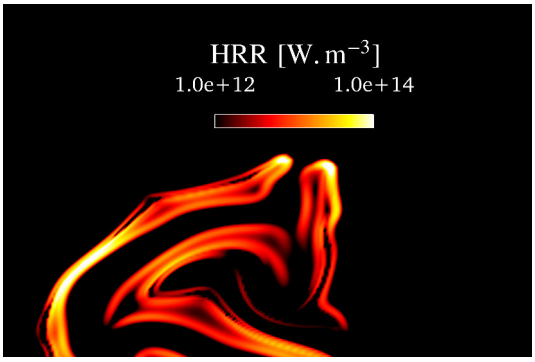
6.3.2 Vers la simulation aux grandes échelles

La structure de l'écoulement réactif étudié étant relativement complexe, on peut se demander comment modéliser un tel écoulement avec une approche moins coûteuse en temps CPU comme la LES, tout en préservant ses principales caractéristiques. Un début de réponse à cette question est proposé dans cette section où deux LES avec deux approches différentes pour modéliser l'interaction entre le terme source chimique et la turbulence sont proposées. La première approche consiste à ne pas utiliser de modèle en particulier (cas "NO TCI") et la seconde recourt au modèle de flamme épaissie (cas "TFLES").

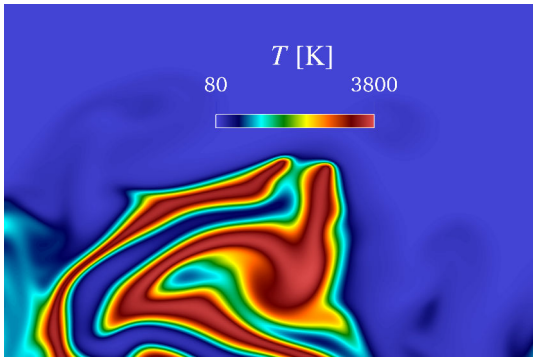
6.3.2.1 Comparaison des champs instantanés

Grandeurs caractéristiques principales

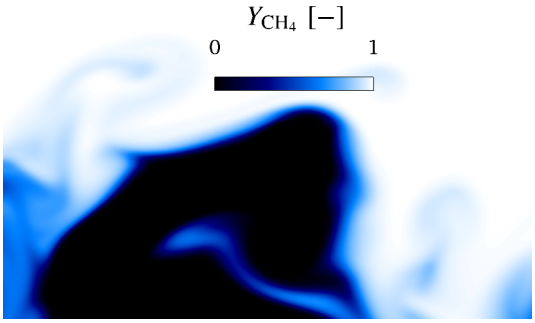
La Fig. 6.11 compare des champs instantanés obtenus avec les deux approches LES, à savoir H30 - NO TCI et H30 - TFLES. Ces champs peuvent également être comparés à ceux issus de la Fig. 6.3 avec le cas H150. On ne remarque pas de différences significatives sur le champ du taux de dégagement de chaleur (a) entre les deux approches LES, mais l'enveloppe de la flamme diffère bien de celle obtenue dans le cas H150. En effet, la flamme semble être plus bien turbulente et avec un angle d'ouverture bien plus important avec l'approche DNS qu'avec les deux approches LES. Néanmoins, la LES permet de reproduire certains comportements observés en DNS, comme la discontinuité du front de flamme, bien visible ici avec le cas H30 - TFLES. Si l'aspect global de la flamme ressemble davantage à une flamme de diffusion "classique" avec les approches LES, l'index de flamme (b) nous montre que l'on retrouve pourtant bien des zones de combustion prémélangées riche et pauvre dans des proportions non négligeables et dans toute la longueur de la flamme. En revanche, on observe davantage de différences sur le champ de température (c), où la flamme H30 - TFLES semble être globalement plus chaude et diffuse avec



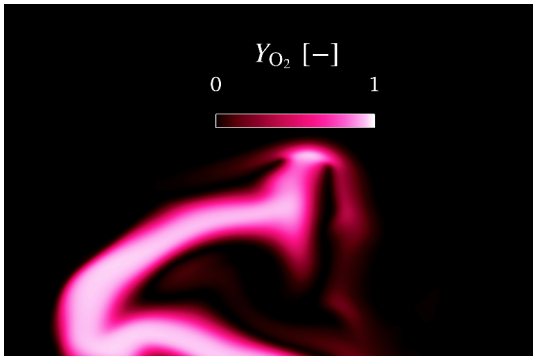
(a) Taux de dégagement de chaleur



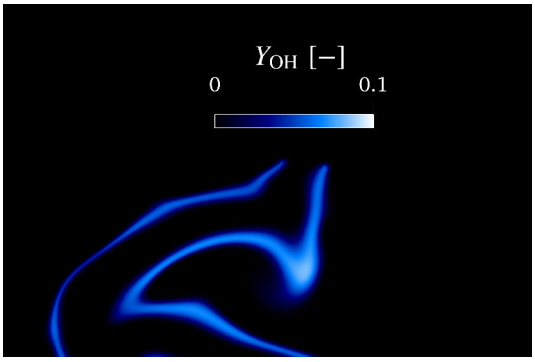
(b) Température



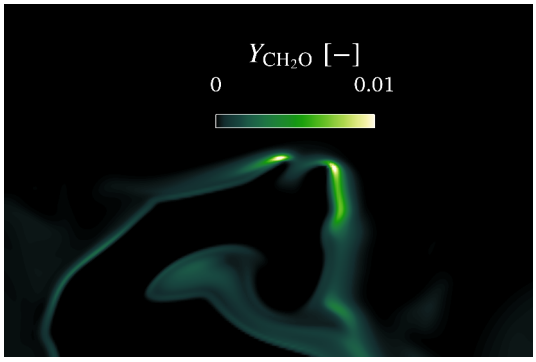
(c) Fraction massique de CH_4



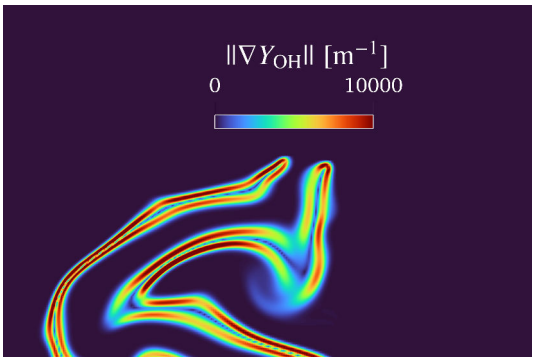
(d) Fraction massique d'O_2



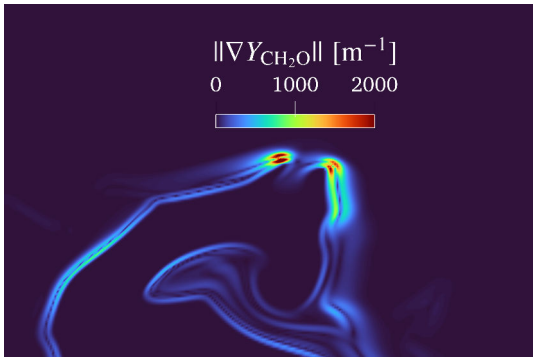
(e) Fraction massique d'OH



(f) Fraction massique de CH_2O



(g) Norme du gradient de Y_{OH}



(h) Norme du gradient de Y_{CH_2O}

FIGURE 6.10 – Comparaison de champs instantanés au même instant avec un zoom sur une structure de flammes triples.

des gaz chauds répartis de manière plus homogène que dans le cas H30 - NO TCI, ce qui se retrouve également sur le champ de masse volumique (d).

La Fig. 6.12 compare ensuite des champs instantanés de vitesse axiale (e), de vitesse transverse (f), de vorticité (g) et de Schlieren (h), obtenus avec les cas H30 - NO TCI et H30 - TFLES, que l'on peut aussi comparer au cas H150 avec la Fig. 6.3. Avec le champ de vitesse axiale, on constate que la zone de recirculation derrière la lèvre s'étend sur près de $5h$ à $6h$ dans le cas H30 - NO TCI, contre entre $6h$ et $7h$ dans le cas H30 - TFLES. Par ailleurs, cette zone de recirculation est présente dans toute l'épaisseur de la lèvre pour le cas H30 - NO TCI contre uniquement sur la moitié supérieur de la lèvre côté méthane, pour le cas H30 - TFLES, ce qui est plus proche de ce qui avait été observé sur le cas H150. Toutefois, cette zone de recirculation pouvant varier d'un instant à l'autre, on ne peut établir de conclusion définitive pour l'instant, sur la simple base de champs instantanés.

On constate également que la vitesse transverse est relativement faible dans la zone proche de la lèvre avec les deux approches H30, par rapport au cas H150. De la même façon, le champ de vorticité met en évidence des structures tourbillonaires assez grandes et plutôt de faibles intensités avec les cas H30, contrairement au cas H150 où un plus large spectre de la turbulence est décrit, des plus petites structures tourbillonnaires aux plus grandes.

Enfin, les champs de Schlieren obtenus en LES sont assez similaires et démontrent une fois de plus que la LES a tendance à lisser les gradients et les effets de la turbulence. En effet, les gradients de masse volumique de part et d'autre de l'enveloppe de la flamme et mis en évidence par le Schlieren permettent de délimiter la zone dans laquelle des gaz chauds sont présents et entourés par les gaz frais. L'angle d'ouverture du jet de gaz brulés semble plus faible dans les cas H30 que dans le cas H150. Cette observation sera confirmée ci-après, avec l'analyse de profils moyens sur des coupes à différentes positions dans l'écoulement.

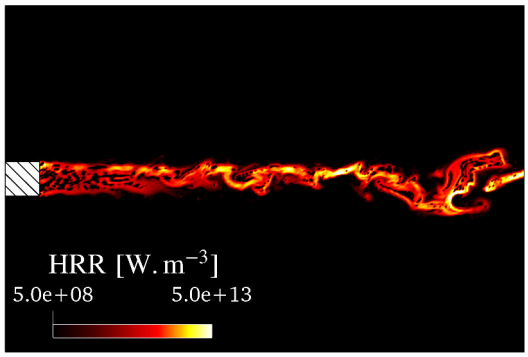
Fractions massiques d'espèces

Les Fig. 6.13 et Fig. 6.14 mettent en avant des champs instantanés de fractions massiques de CH_4 (a.i), O_2 (b.i), CO_2 (c.i), H_2O (d.i), CO (e.i), H_2 (f.i), OH (g.i) et CH_2O (h.i) obtenus avec les simulations H30 - NO TCI (i = 1) et H30 - TFLES (i = 2).

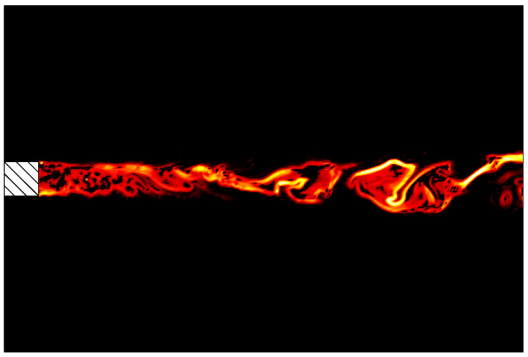
D'une manière générale, les profils de fractions massiques semblent plus diffus dans le cas où le modèle TFLES est employé, ce qui est attendu, étant donné que ce modèle rajoute artificiellement de la diffusion dans les zones où il s'active.

De plus, si le champ de fraction massique de CH_4 obtenu avec les deux LES ne montre pas de différence significative, on observe toutefois une différence plus marquée pour le champ de fraction massique d'O_2, en particulier derrière la lèvre. En effet, dans le cas H30 - NO TCI, de l'oxygène en grande quantité ($Y_{O2} > 0.5$) est présent dans la quasi totalité de l'épaisseur de la lèvre alors qu'il n'y en a presque pas dans le cas H30 - TFLES, ce qui se rapproche davantage de ce que l'on obtient avec le cas H150 (voir Fig. 6.5). Le CO_2 est quant à lui produit et réparti de manière assez homogène derrière la lèvre dans toute son épaisseur dans le cas H30 - NO TCI alors que sa présence est légèrement plus marquée dans la partie basse de la lèvre, pour le cas H30 - TFLES, de manière similaire au cas H150. Le champ d'H_2O montre également que de l'H_2O en plus grande quantité est présente derrière la lèvre dans le cas où le modèle TFLES est employé, ce qui semble être plus représentatif du cas H150.

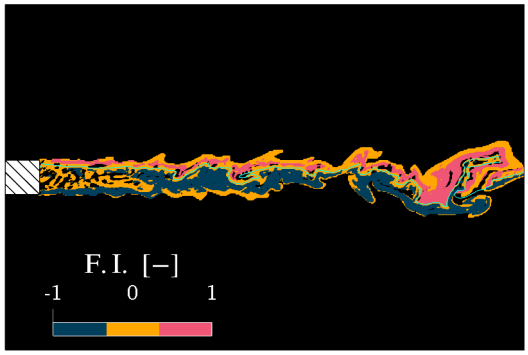
Des conclusions similaires peuvent être tirées avec les champs d'H_2, CO et OH, qui montrent



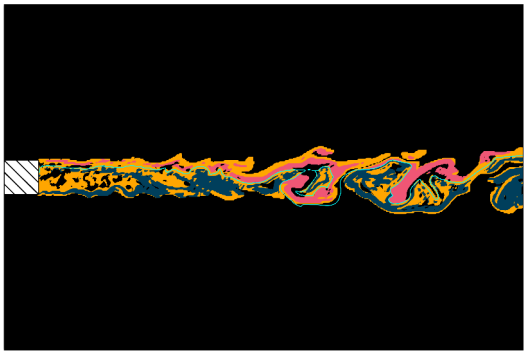
(a.1) H30 - NO TCI



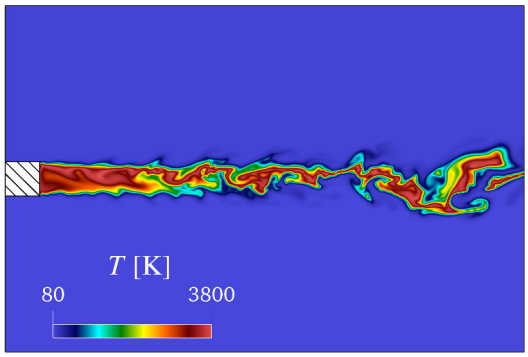
(a.2) H30 - TFLES



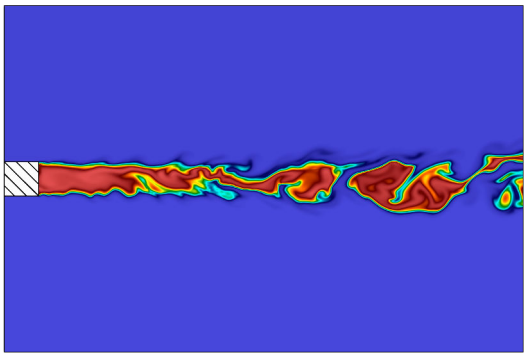
(b.1) H30 - NO TCI



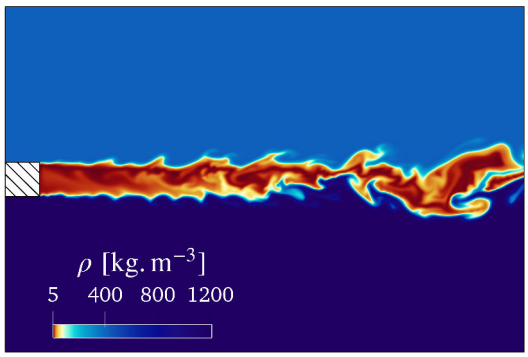
(b.2) H30 - TFLES



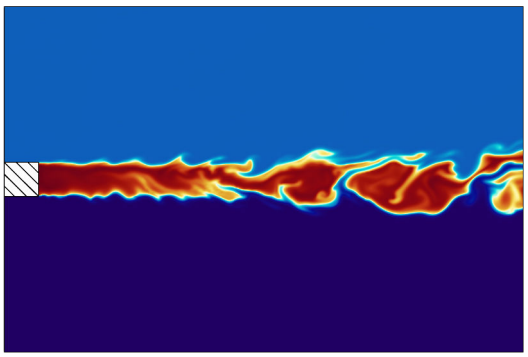
(c.1) H30 - NO TCI



(c.2) H30 - TFLES

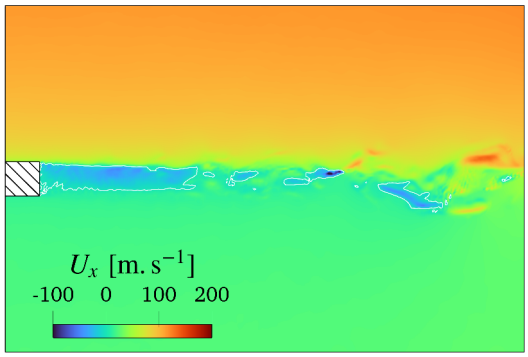


(d.1) H30 - NO TCI

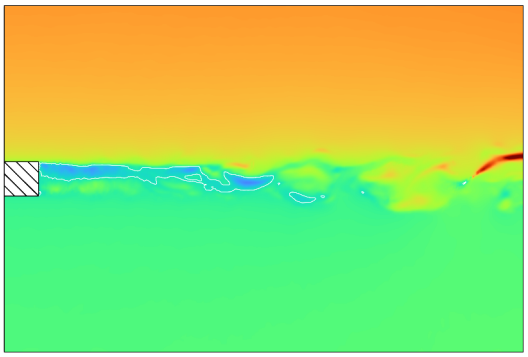


(d.2) H30 - TFLES

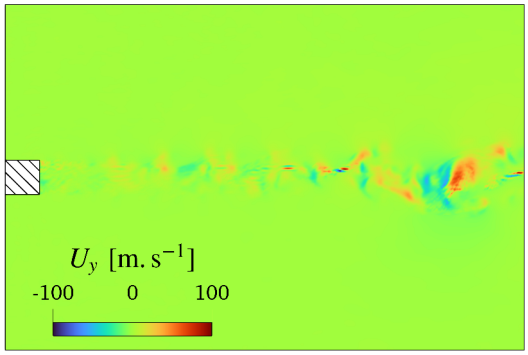
FIGURE 6.11 – Comparaison de champs instantanés pour différentes variables avec les simulations H30 - NO TCI (colonne de gauche) et H30 - TFLES (colonne de droite).



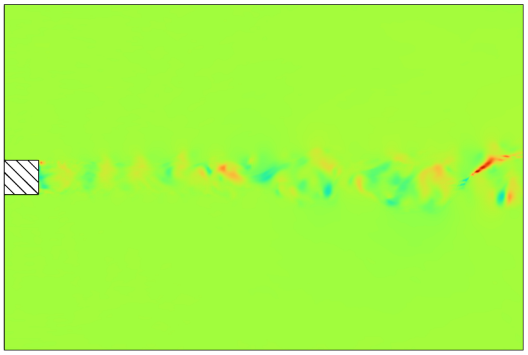
(e.1) H30 - NO TCI



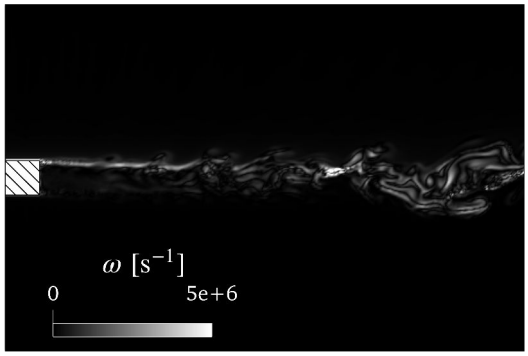
(e.2) H30 - TFLES



(f.1) H30 - NO TCI



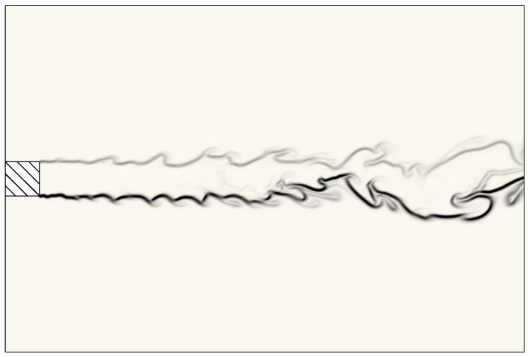
(f.2) H30 - TFLES



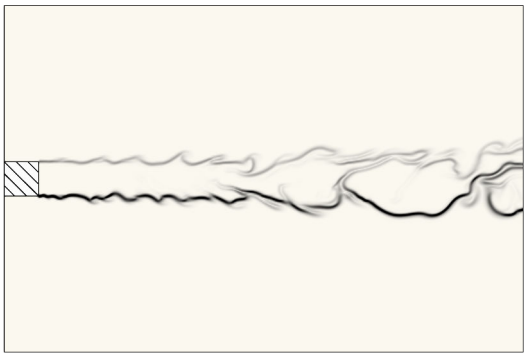
(g.1) H30 - NO TCI



(g.2) H30 - TFLES

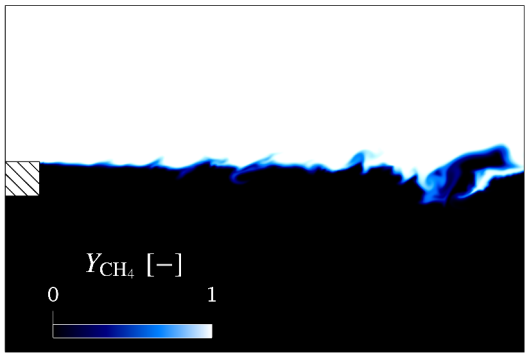


(h.1) H30 - NO TCI (Schlieren)

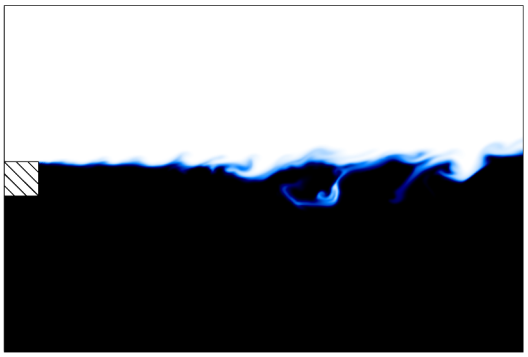


(h.2) H30 - TFLES (Schlieren)

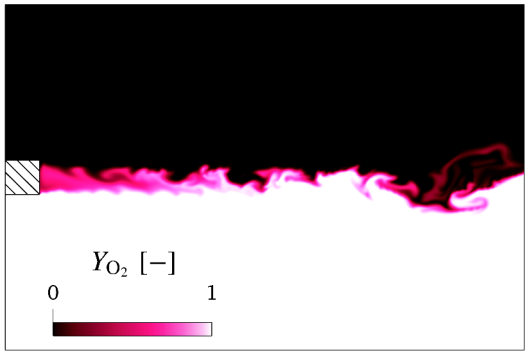
FIGURE 6.12 – Suite de la Fig. 6.11.



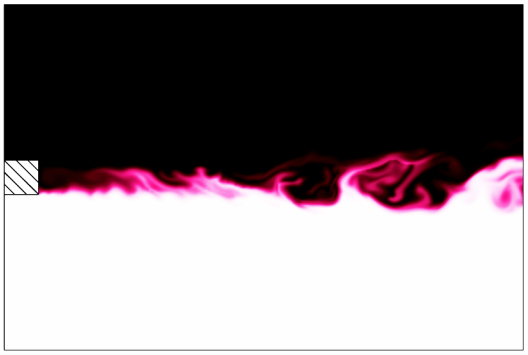
(a.1) H30 - NO TCI



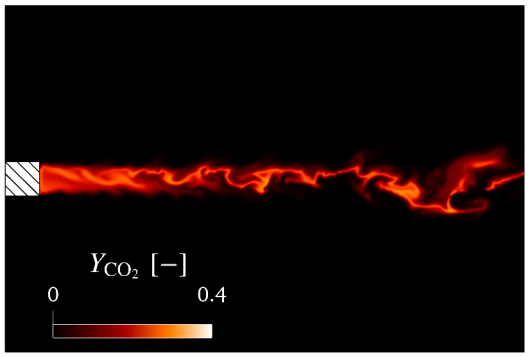
(a.2) H30 - TFLES



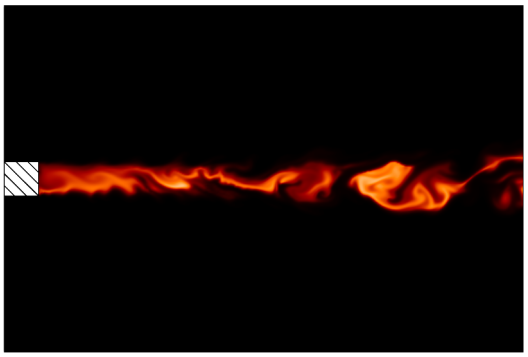
(b.1) H30 - NO TCI



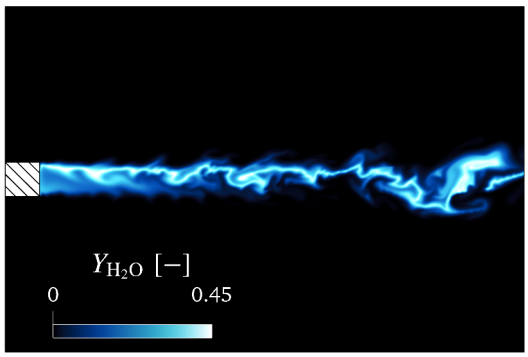
(b.2) H30 - TFLES



(c.1) H30 - NO TCI



(c.2) H30 - TFLES

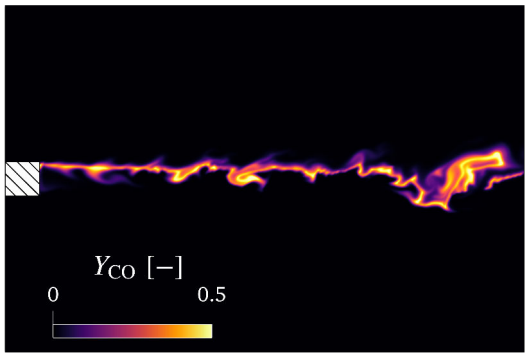


(d.1) H30 - NO TCI

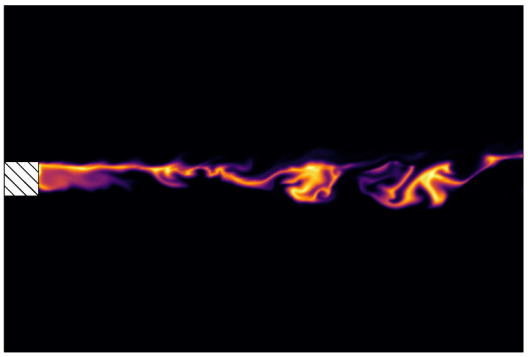


(d.2) H30 - TFLES

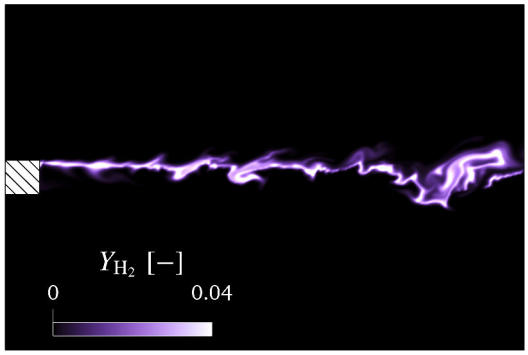
FIGURE 6.13 – Comparaison de champs instantanés pour différentes fractions massiques avec les simulations H30 - NO TCI (colonne de gauche) et H30 - TFLES (colonne de droite).



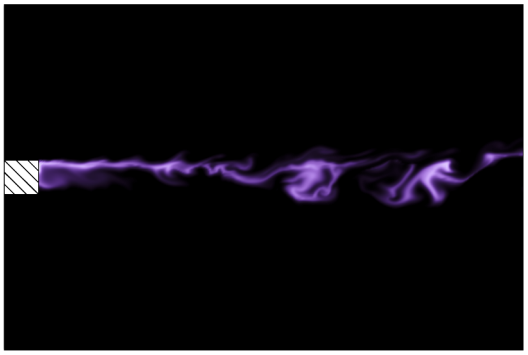
(e.1) H30 - NO TCI



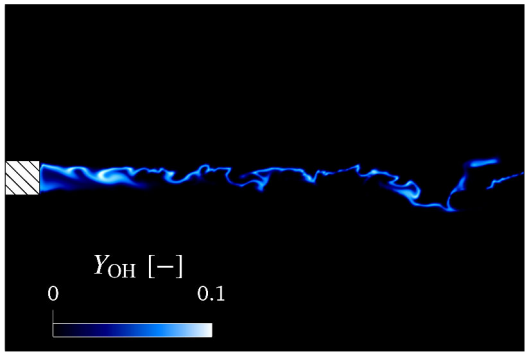
(e.2) H30 - TFLES



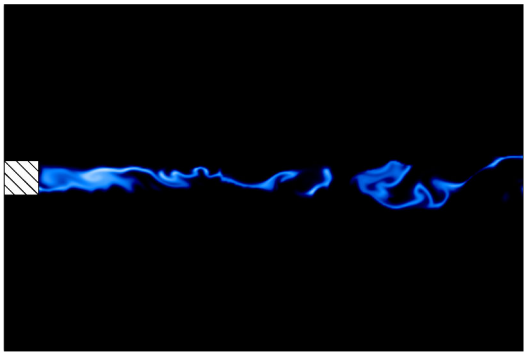
(f.1) H30 - NO TCI



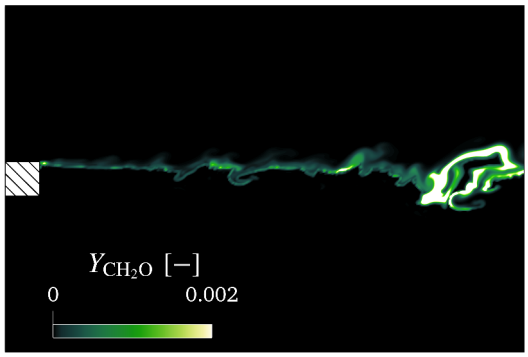
(f.2) H30 - TFLES



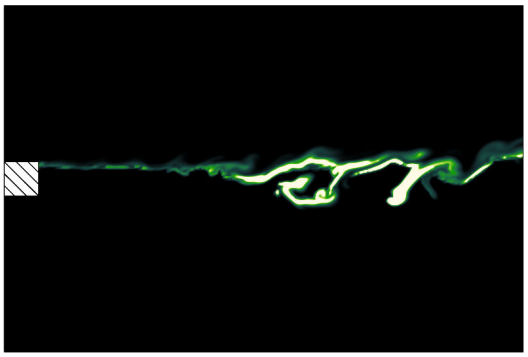
(g.1) H30 - NO TCI



(g.2) H30 - TFLES



(h.1) H30 - NO TCI



(h.2) H30 - TFLES

FIGURE 6.14 – Suite de la Fig. 6.13.

simplement que la combustion est plus efficace dans la zone de recirculation juste derrière la lèvre, selon les prédictions de la simulation H30 avec le modèle TFLES. Ces observations et analyses sont cohérentes avec les champs de température de la Fig. 6.11 qui mettent en évidence une zone de plus forte température derrière la lèvre avec le modèle TFLES. En revanche, on n'observe pas de différence significative au niveau du champ de fraction massique de CH_2O.

Il reste néanmoins à confirmer si ces observations se retrouvent sur des champs moyens ou des profils de grandeurs moyennes.

Facteur d'épaississement dynamique dans le cas H30 - TFLES

La Fig. 6.15 montre où s'applique le facteur d'épaississement dynamique $\mathcal{F}$ et quelle valeur il prend, dans le cas où le modèle TFLES est utilisé.

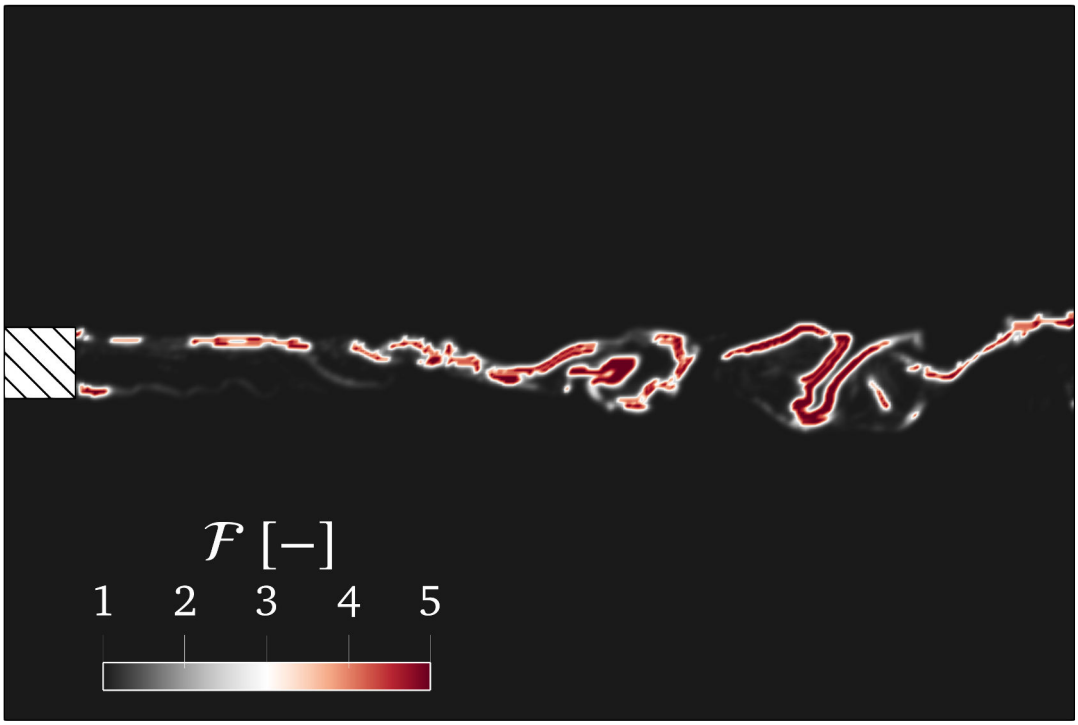


FIGURE 6.15 – Champ instantané du facteur d'épaississement dynamique, obtenu avec cas H30 - TFLES.

En effet, on voit bien que l'épaississement n'est pas constant partout dans la flamme et que celui-ci ne s'applique qu'aux flammes de prémélange les plus intenses avec le paramétrage retenu pour cette étude. On peut cependant se douter qu'un paramétrage différent en terme de seuil de déclenchement ou de facteur d'épaississement maximal, pourrait conduire à des résultats différents. Idéalement, il faudrait mener une étude paramétrique afin de trouver le lot de paramètres permettant d'obtenir les meilleurs résultats. Cependant, par manque de temps et de disponibilité en temps de calculs, une telle étude n'a pas pu être menée au cours de cette thèse.

6.3.2.2 Profils des grandeurs moyennes

Les profils des grandeurs moyennes, notées RA pour *Reynolds Average* et FA pour *Favre Average* ainsi que leur écart-type respectif, ont été obtenus en cumulant des statistiques sur 3 temps de passage en raison d'un coût CPU élevé. Les tendances entre les 3 simulations étudiées sont analysées pour différentes coupes transverses, excepté celle à $x/h = 11$ qui se trouve trop influencée par la condition de sortie.

Profils de masse volumique moyenne

Les Fig. 6.16 et Fig. 6.17 comparent les profils de $RA(\rho)$ et $\sigma_{\mathrm{RA}}(\rho)$, obtenus à différentes positions axiales par rapport à la lèvre de l'injecteur.

Proche de la lèvre de l'injecteur, jusqu'à au moins $5h$, les deux approches LES reproduisent assez fidèlement le profil obtenu avec l'approche DNS. Un fort écart-type est observé de part et d'autre de la lèvre (pour $y/h \simeq 1$ ou $y/h \simeq -1$), de l'ordre de 500 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ côté oxygène et 150 $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$ côté méthane, qui met en évidence la présence locale de fortes variations temporelles.

Des différences plus marquées apparaissent à partir de $x/h = 7$, qui montrent que l'enveloppe des gaz brulés, de faible masse volumique, ne s'ouvre pas assez et reste trop resserrée sur l'axe avec les simulations H30, ce qui est confirmé par des valeurs de $\sigma_{\mathrm{RA}}(\rho)$ plus faibles en LES qu'en DNS. Le modèle TFLES semble toutefois être un peu plus prédictif dans la zone de faible masse volumique, autour de la position $y/h = 0$.

Profils de température moyenne

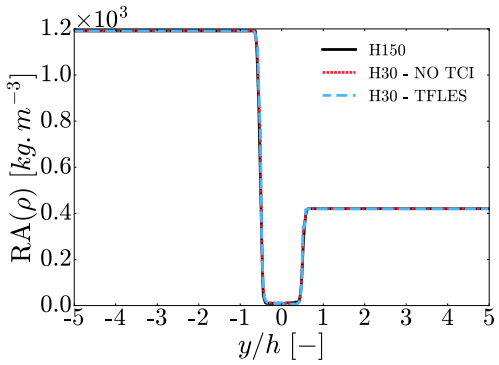
Les Fig. 6.18 et Fig. 6.19 comparent les profils $\mathrm{RA}(T)$ et de $\sigma_{\mathrm{RA}}(T)$ pour les différentes simulations réalisées au cours de cette étude.

Très proche de la lèvre ($x/h = 1$), la température moyenne est plutôt bien représentée par les LES, et même légèrement mieux avec le modèle TFLES. Cependant, l'écart-type reste bien plus faible avec les LES. En revanche, dès que l'on s'éloigne un peu de la lèvre, à $x/h = 3$ par exemple, on observe un pic de température moyenne à 3500 K avec les LES, alors que celui-ci approche 2500 K avec la DNS. De plus, $\sigma_{\mathrm{RA}}^{\mathrm{DNS}} \simeq 2\sigma_{\mathrm{RA}}^{\mathrm{LES}}$, ce qui signifie que la DNS tend à prédire un écoulement plus froid en moyenne que la LES, mais avec des variations de température bien plus importantes, i.e. une alternance de fronts froids et fronts chauds plus marquée, probablement caractéristique d'une plus grande intensité de turbulence.

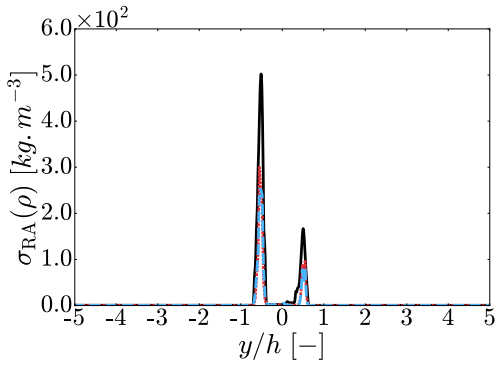
Pour $x/h = 3$ et $x/h = 5$, de forts écarts en température sont toujours présents entre les simulations H30 et H150, mais ceux-ci tendent à diminuer à mesure que l'on s'éloigne de la lèvre de l'injecteur, en ce qui concerne la valeur max du pic de température. À la position $x/h = 9$, la température moyenne maximale est plus élevée d'environ 10 % en LES avec le modèle TFLES par rapport à la DNS. Enfin, l'angle d'ouverture de la flamme turbulente est sous-estimé d'environ 27 % en LES à la position $x/h = 9$.

Profils de vitesse axiale moyenne

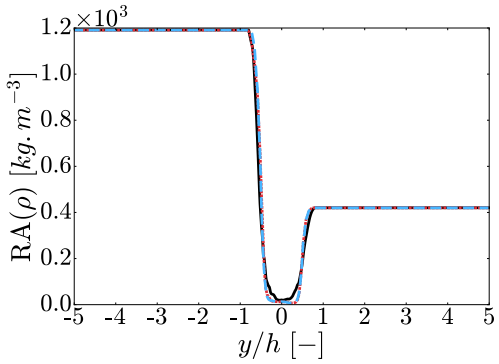
D'une manière générale, la vitesse axiale moyenne est plutôt bien reproduite par la LES (Fig. 6.20 et Fig. 6.21), côté méthane et côté oxygène. Par contre, on constate que pour environ $|y/h| \leq 1$, celle-ci n'est pas très bien reproduite dès lors que s'éloigne un peu de la lèvre (i.e. pour $x/h > 1$). La zone de recirculation derrière la lèvre est en effet trop longue (changement



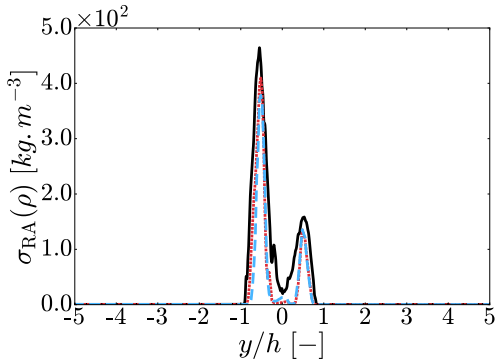
$x/h = 1$ (RA)



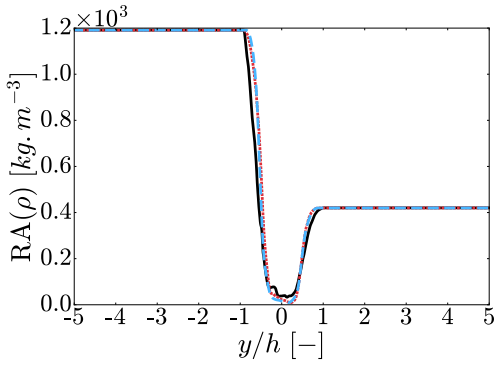
$x/h = 1$ (RA RMSD)



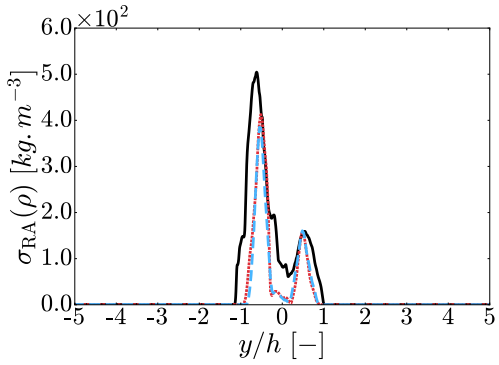
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

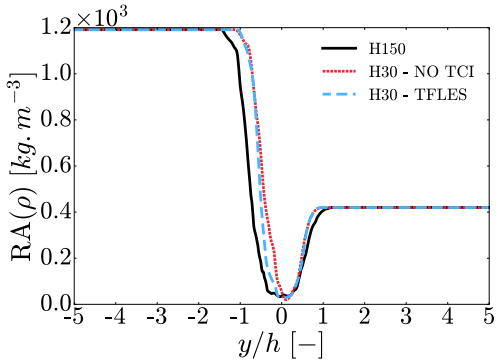


$x/h = 5$ (RA)

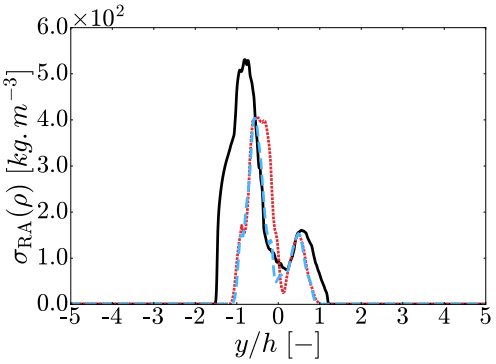


$x/h = 5$ (RA RMSD)

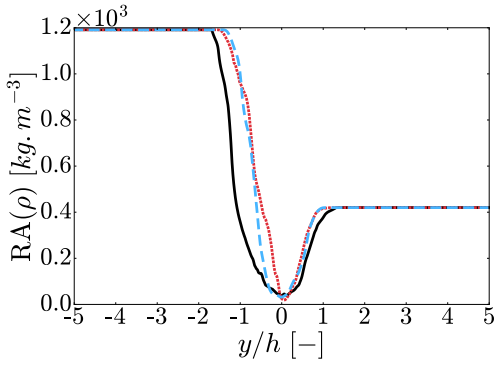
FIGURE 6.16 – Profils de **masse volumique moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



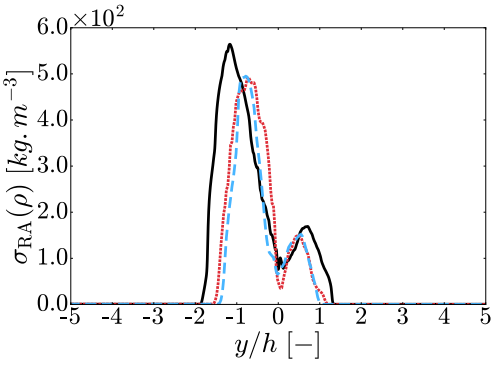
$x/h = 7$ (RA)



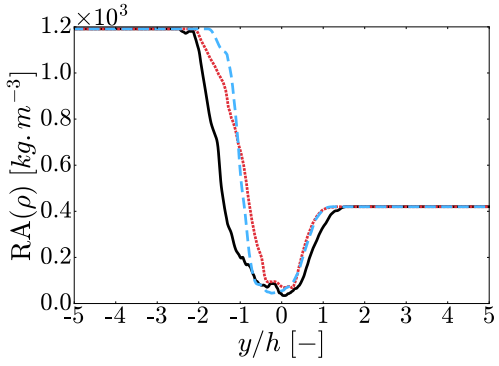
$x/h = 7$ (RA RMSD)



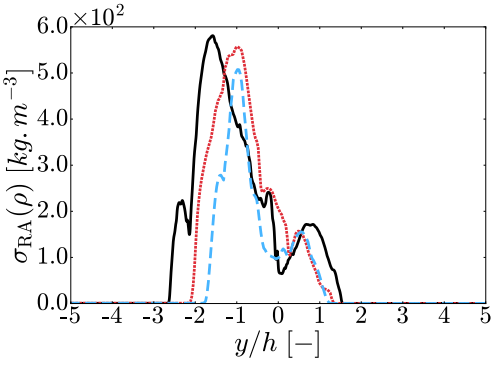
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

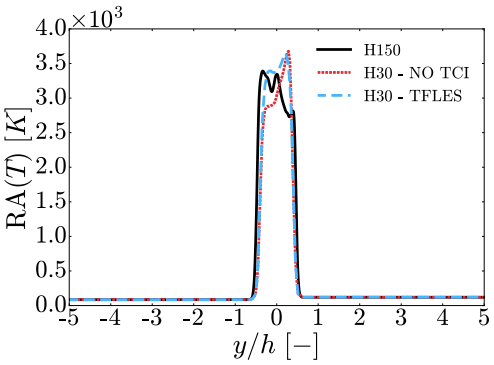


$x/h = 11$ (RA)

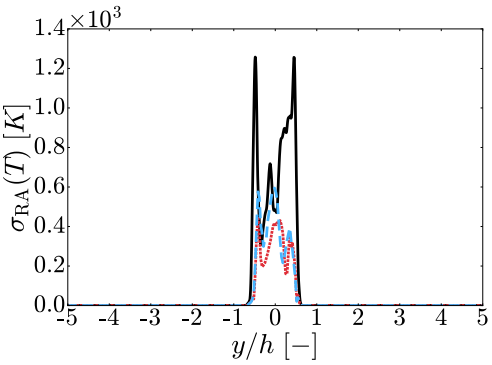


$x/h = 11$ (RA RMSD)

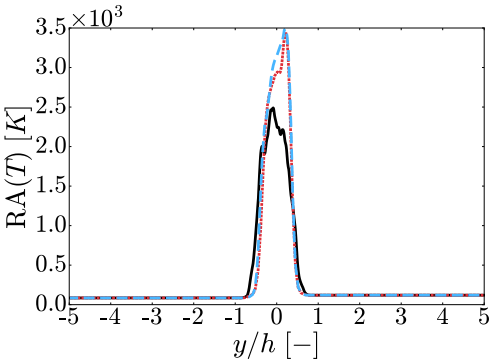
FIGURE 6.17 – Suite de la Fig. 6.16.



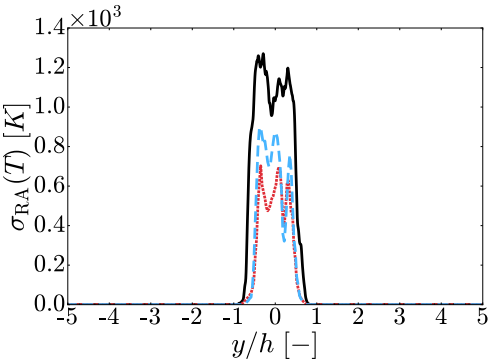
$x/h = 1$ (RA)



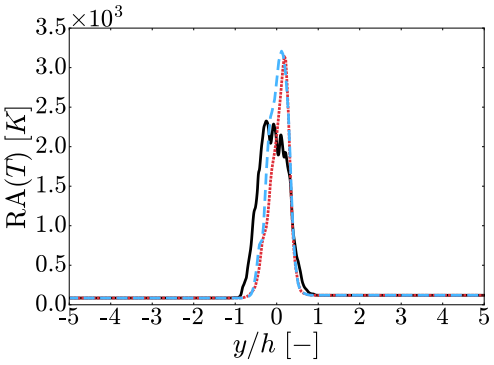
$x/h = 1$ (RA RMSD)



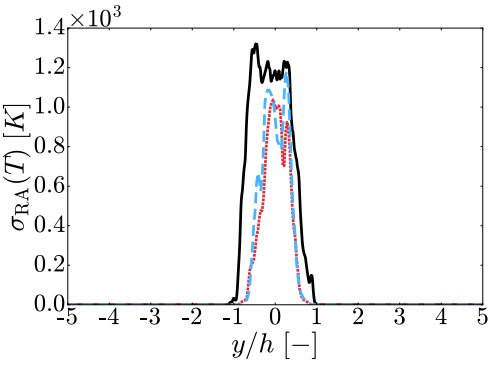
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

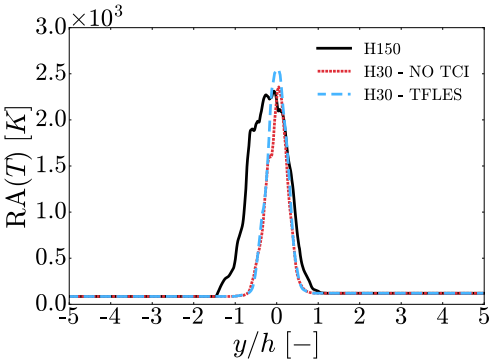


$x/h = 5$ (RA)

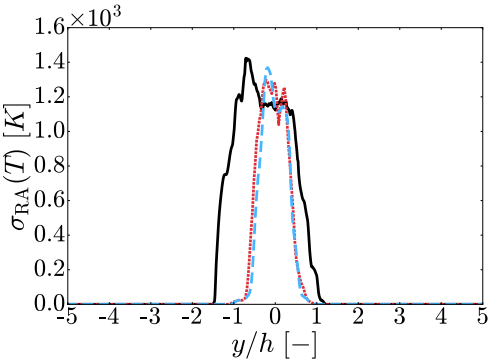


$x/h = 5$ (RA RMSD)

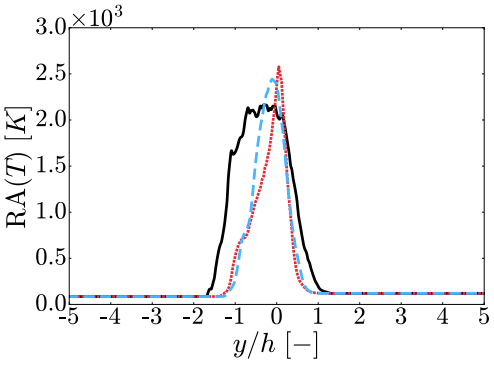
FIGURE 6.18 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



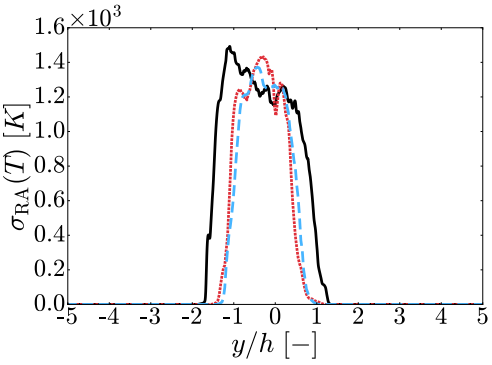
$x/h = 7$ (RA)



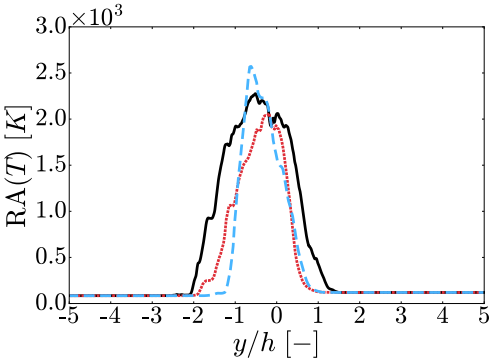
$x/h = 7$ (RA RMSD)



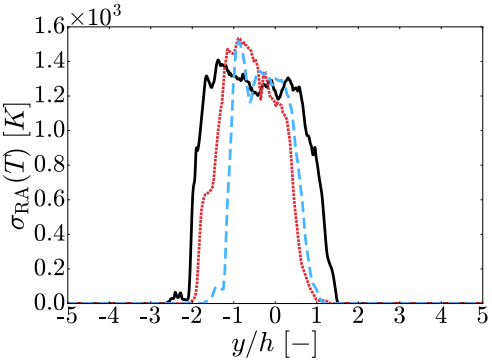
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)



$x/h = 11$ (RA)



$x/h = 11$ (RA RMSD)

FIGURE 6.19 – Suite de la Fig. 6.18.

de signe de U_x pour $|y/h| \leq 1$), puisqu'elle est encore présente jusqu'à près de $x/h = 7$ pour les deux LES. Peut-être qu'une autre approche LES avec par exemple le modèle de sous-maille de Smagorinsky [352], pourrait donner des meilleurs résultats à ce niveau-là.

Profils de vitesse transverse moyenne

Sur les Fig. 6.22 et Fig. 6.23, la composante de vitesse transverse, plus faible d'un ordre de grandeur que la vitesse axiale, n'est pas bien prédite par la LES. Cela signifie que la couche de mélange reste très centrée autour de l'axe $y = 0$ et s'étend verticalement peu en LES. Autrement dit, l'angle d'ouverture du jet de la couche de mélange prédit par la LES est bien plus faible que celui prédit par la DNS.

Profils du taux de dégagement de chaleur moyen

À la position $x/h = 1$, on observe sur les Fig. 6.24 et 6.25, trois pics du taux de dégagement de chaleur moyen avec le cas H150, localisés aux positions $y/h = -0.5$, $y/h = 0$ et $y/h = 0.5$, que l'on peut probablement associer aux trois différents régimes de combustion. En effet, de part et d'autre de la lèvre, on pouvait déjà constater sur des champs instantanés la présence de fronts de prémélange riche côté méthane (voir par exemple la Fig. 6.6 à l'instant t_0 (a.1)), de fronts de prémélange pauvre côté oxygène (voir par exemple la Fig. 6.6 aux instants $t_0 + \tau$ (b.1) et $t_0 + 2\tau$ (c.1)) ou encore de flamme de diffusion dans presque toute l'épaisseur de la lèvre (voir par exemple la Fig. 6.3 (a)). Ces trois pics-là ne sont pas retrouvés statistiquement par les LES, même si l'approche avec le modèle TFLES tend à bien capter le pic du taux de dégagement de chaleur côté oxygène.

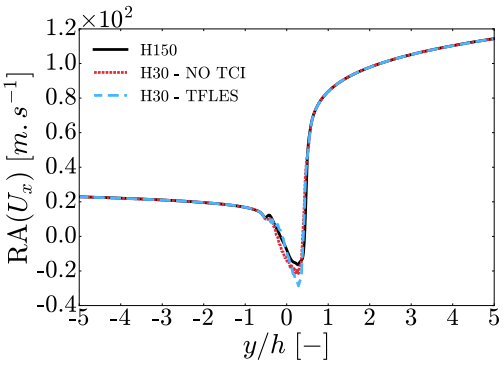
Pour $x/h = 3$, le pic du taux de dégagement de chaleur est légèrement sous-prédit par les deux approches LES, plus encore sans le modèle TFLES, mais ce pic est surtout décalé d'environ $0.5h$ (suivant la direction y) côté injection de méthane. Pour $x/h = 5$, $x/h = 7$ et $x/h = 9$, le pic du taux de dégagement de chaleur est largement sur-prédit dans le cas H30 - NO TCI et celui-ci est également bien plus mince que dans le cas H150. On constate sur ces mêmes profils que le cas H30 - TFLES donne de biens meilleurs résultats, ce qui témoigne d'une certaine efficacité du modèle d'épaississement de flamme ici. La flamme est globalement plus épaisse avec le modèle TFLES, ce qui se rapproche un peu plus du cas de référence H150.

Profils de fractions massiques de différentes espèces

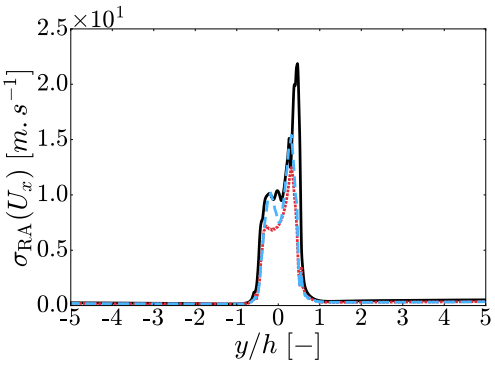
Proche de la lèvre, pour $x/h \leq 5$, les deux LES donnent des résultats très proches (Fig. 6.26 et Fig. 6.27), mais la pente de $\mathrm{RA}(Y_{CH_4})$ est un peu trop raide par rapport à la courbe du profil obtenu avec la DNS. Pour $x/h = 7$ et $x/h = 9$, la simulation H30 avec le modèle TFLES donne des résultats assez proches du cas H150. Des résultats similaires peuvent être observés pour la fraction massique moyenne d'O_2 avec les Fig. 6.28 et Fig. 6.29.

On peut également s'intéresser aux fractions massiques moyennes des produits de combustion principaux, grâce aux Fig. 6.30 et 6.31 pour le CO_2, les Fig. 6.32 et 6.33 pour l'H_2O, les Fig. 6.34 et 6.35 pour le CO, les Fig. 6.36 et 6.37 pour l'H_2 ou encore les Fig. 6.38 et 6.39 pour le radical OH.

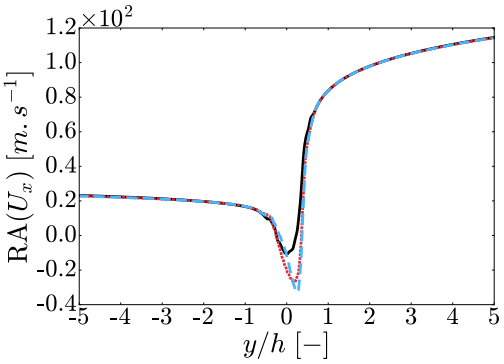
D'une manière générale, pour chacun de ces profils, on observe le même type de comportement avec les trois simulations. En effet, les LES ont tendance à largement sur-estimer la valeur



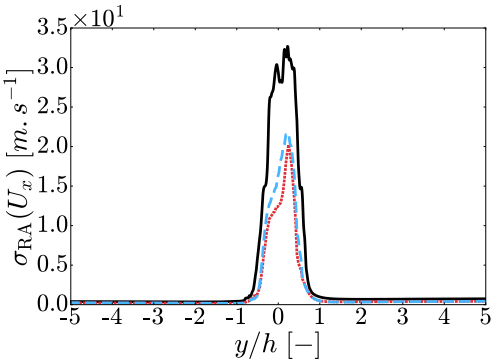
$x/h = 1$ (RA)



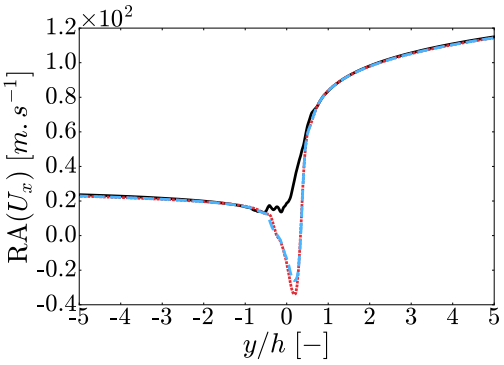
$x/h = 1$ (RA RMSD)



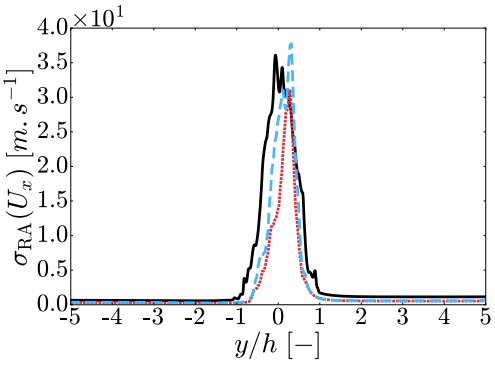
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

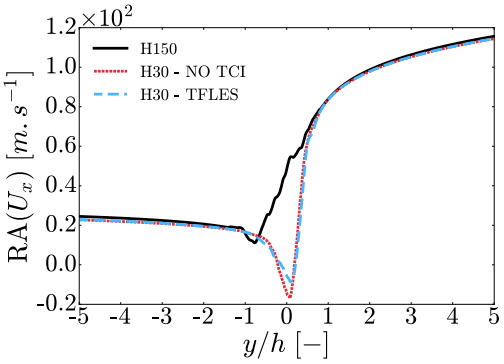


$x/h = 5$ (RA)

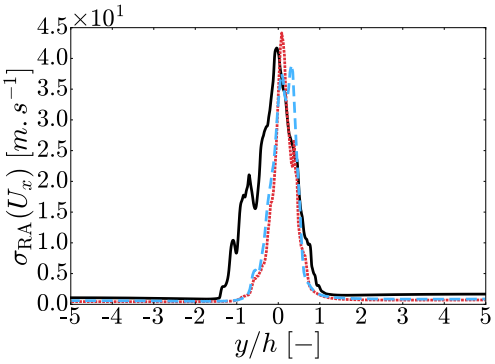


$x/h = 5$ (RA RMSD)

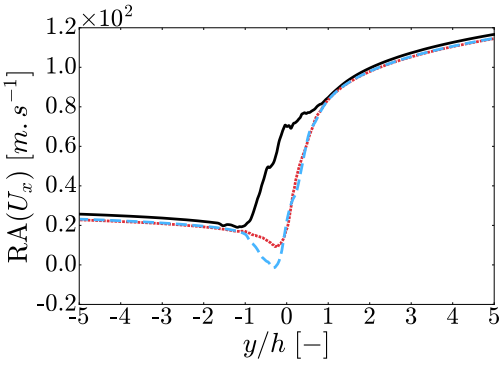
FIGURE 6.20 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



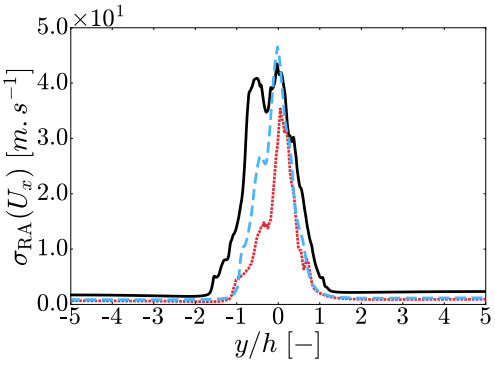
$x/h = 7$ (RA)



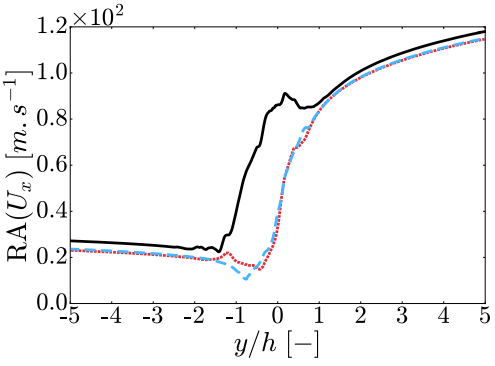
$x/h = 7$ (RA RMSD)



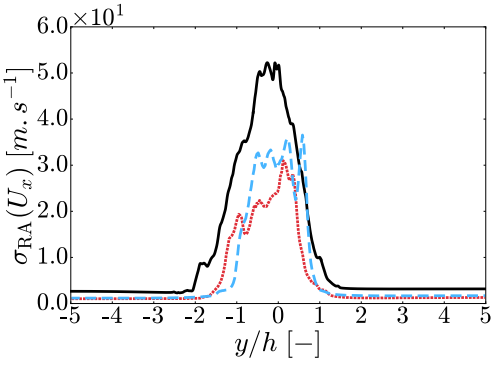
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

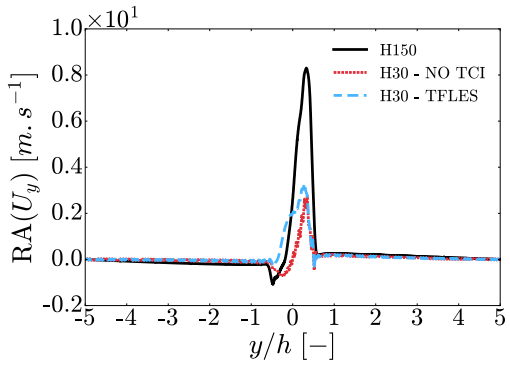


$x/h = 11$ (RA)

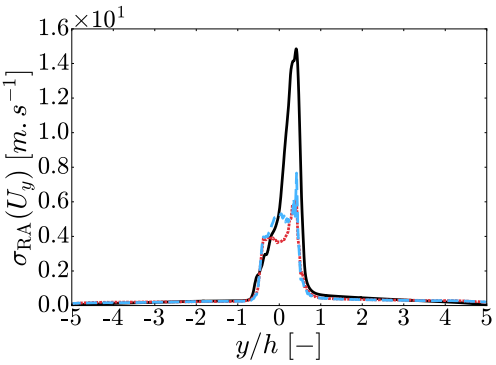


$x/h = 11$ (RA RMSD)

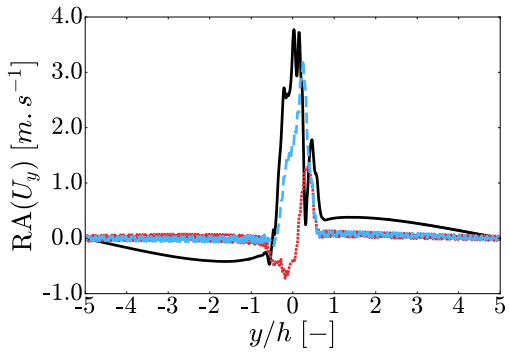
FIGURE 6.21 – Suite de la Fig. 6.20.



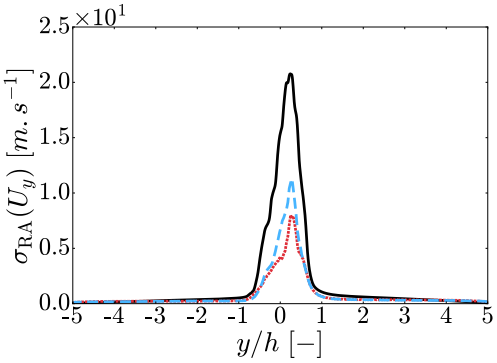
$x/h = 1$ (RA)



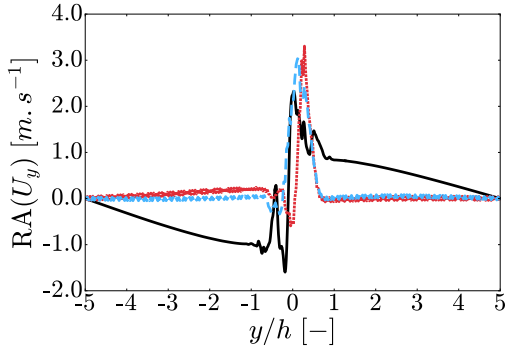
$x/h = 1$ (RA RMSD)



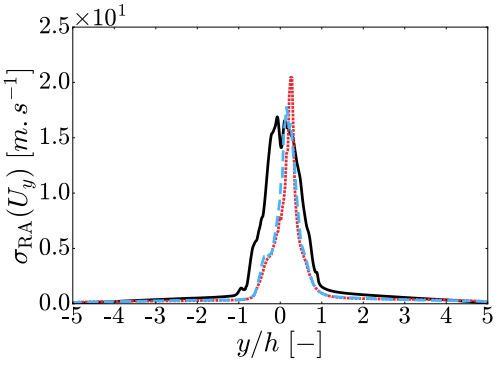
$x/h = 3$ (RA)



$x/h = 3$ (RA RMSD)

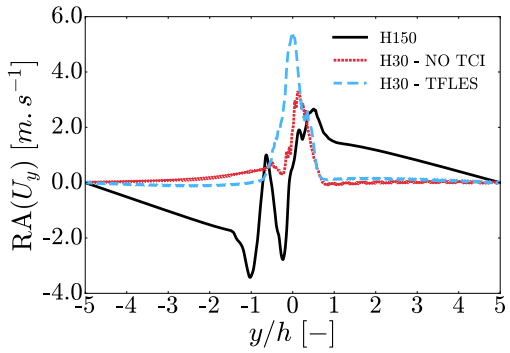


$x/h = 5$ (RA)

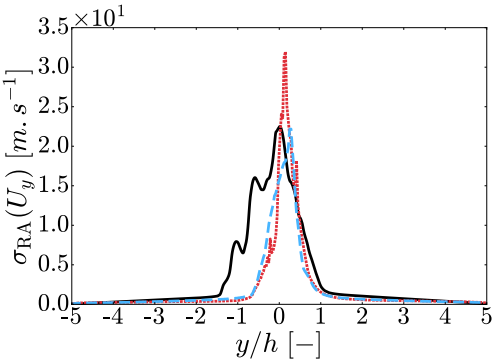


$x/h = 5$ (RA RMSD)

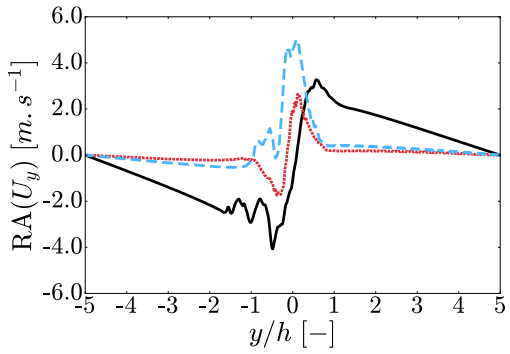
FIGURE 6.22 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, RA = *Reynolds Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



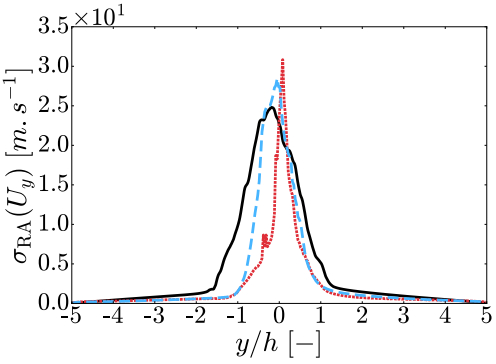
$x/h = 7$ (RA)



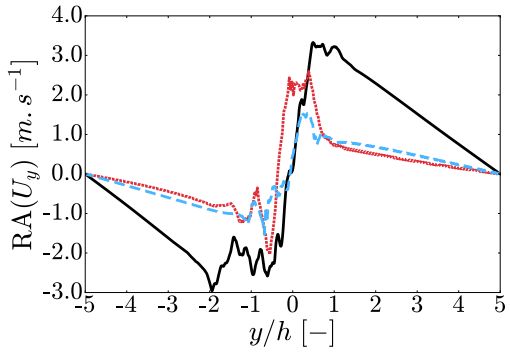
$x/h = 7$ (RA RMSD)



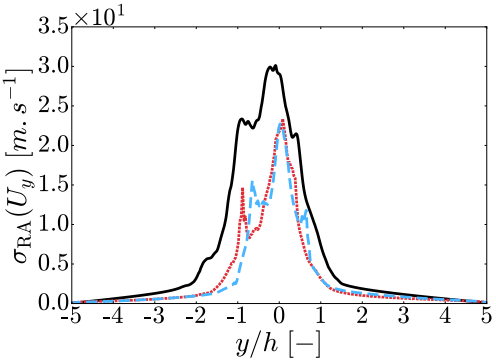
$x/h = 9$ (RA)



$x/h = 9$ (RA RMSD)

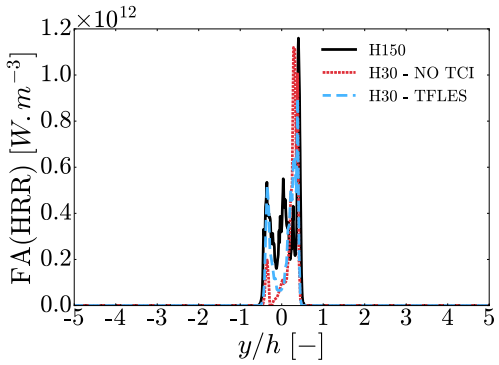


$x/h = 11$ (RA)

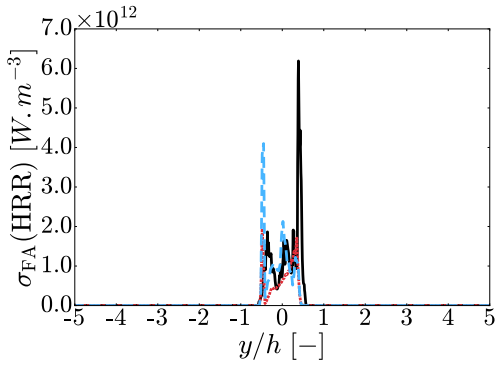


$x/h = 11$ (RA RMSD)

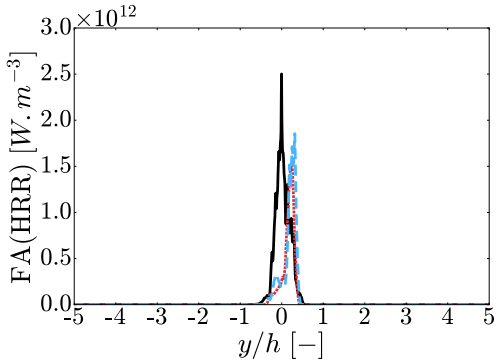
FIGURE 6.23 – Suite de la Fig. 6.22.



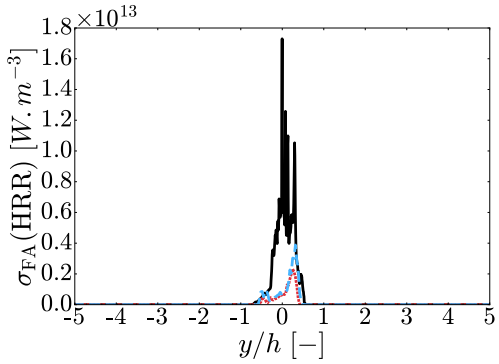
$x/h = 1$ (FA)



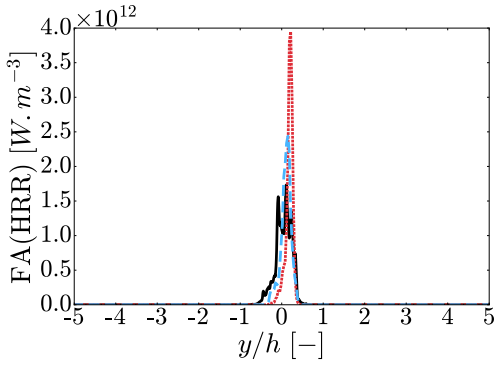
$x/h = 1$ (FA RMSD)



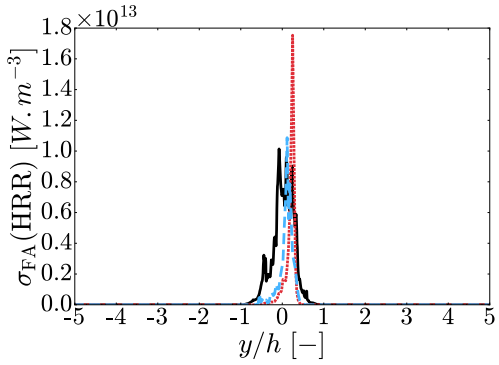
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

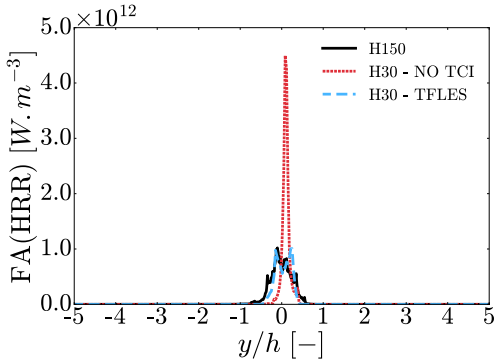


$x/h = 5$ (FA)

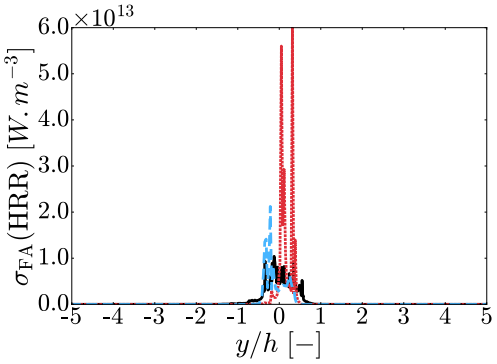


$x/h = 5$ (FA RMSD)

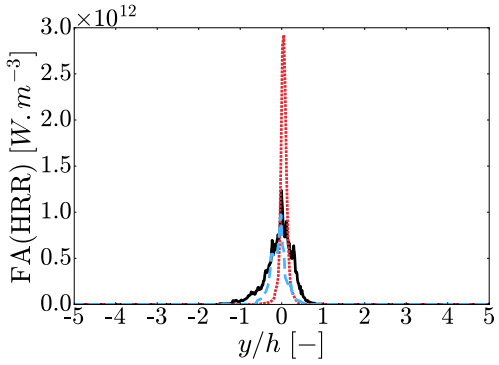
FIGURE 6.24 – Profils du **taux de dégagement de chaleur moyen** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



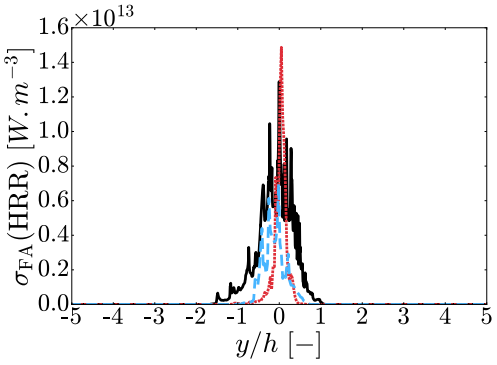
$x/h = 7$ (FA)



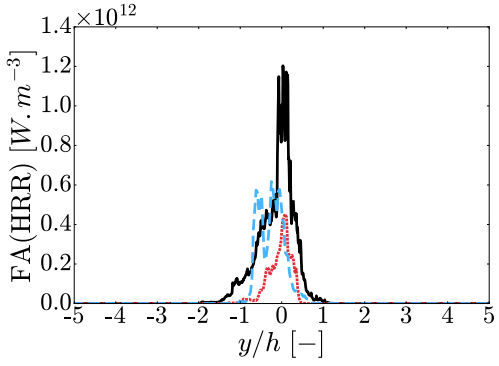
$x/h = 7$ (FA RMSD)



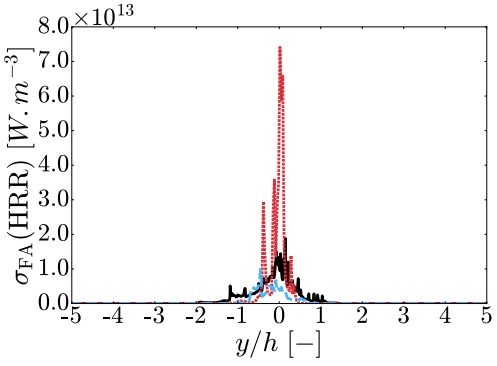
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE 6.25 – Suite de la Fig. 6.24.

des pics de ces produits de combustion, en particulier proche de la lèvre jusqu'à $x/h = 5$. Ces pics sont encore sur-estimés entre $x/h = 7$ et $x/h = 9$ mais dans une moindre mesure. On peut également noter que la largeur de ces pics est plus petite avec les LES qu'avec la DNS, ce qui démontre une fois de plus que l'ouverture du jet de gaz chauds n'est pas parfaitement bien décrite par la LES. On remarque toutefois dans la plupart des cas une nette amélioration lorsque le modèle TFLES est employé. En effet, les valeurs maximales des pics sont moindres et les pics sont également plus larges lorsque le modèle TFLES est employé, ce qui se rapproche un peu plus du cas de référence H150.

Ainsi, les LES peinent à reproduire parfaitement les profils moyens des différentes espèces de la DNS, mais on note toutefois une amélioration non négligeable lorsque le modèle d'épaississement de flamme est employé.

Pour aller plus loin

Des champs moyens sont disponibles dans l'annexe E.1.1, tout comme des profils en moyenne de Favre pour les grandeurs T, U_x et U_y sont également disponibles dans l'annexe E.1.2.

6.3.2.3 Longueur de flamme

La Fig. 6.42 compare l'évolution de la longueur de flamme L_f pour l'ensemble des simulations réalisées au cours de cette étude, avec $L_f = \int_S |\nabla c| \, dS$ [331]. c est la variable de progrès normalisée telle que $c = Y_c / Y_c^{\max}$ avec $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2}$, et $Y_c^{\max}$ est la valeur maximale de Y_c prise dans l'ensemble des simulations.

La longueur de flamme est alors entre deux à trois fois plus grande dans le cas H150 que dans les cas H30, ce qui est cohérent avec toutes les observations et analyses menées jusqu'à présent. En effet, la flamme, qui joue le rôle d'une interface entre les gaz frais et les gaz brulés est bien plus étendue en DNS qu'en LES du fait de la turbulence.

On peut également noter que l'évolution de la longueur de flamme est plus stable en LES qu'en DNS et que les deux LES donnent des résultats similaires, probablement car celle-ci est moins perturbée par la turbulence.

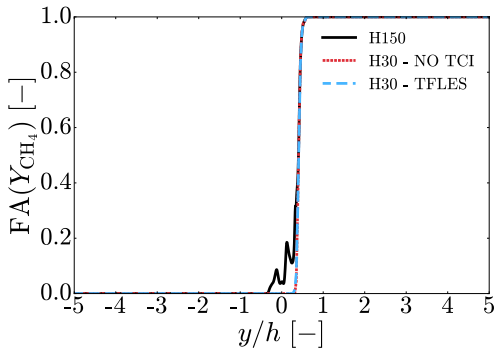
Enfin, si on intègre ces courbes dans le temps, on obtient une longueur de flamme moyenne de 3.87×10^{-2} m dans le cas H150, 1.36×10^{-2} m dans le cas H30 - NO TCI (soit environ 2.85 fois plus faible que dans le cas H150) et 1.31×10^{-2} m dans le cas H30 - TFLES (soit environ 2.95 fois plus faible que dans le cas H150).

6.3.2.4 Régimes de combustion

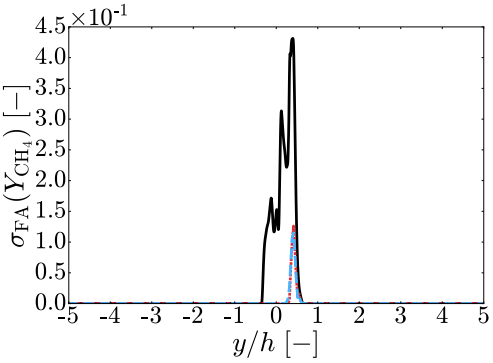
Dans ce qui suit, HR [$W \cdot m^{-1}$] désigne le dégagement de chaleur, qui correspond à l'intégrale du taux de dégagement de chaleur (HRR [$W \cdot m^{-3}$]) sur la surface de flamme associée Σ_{HR} [m^2], pour toute valeur de positive de HRR.

Évolution des régimes de combustion

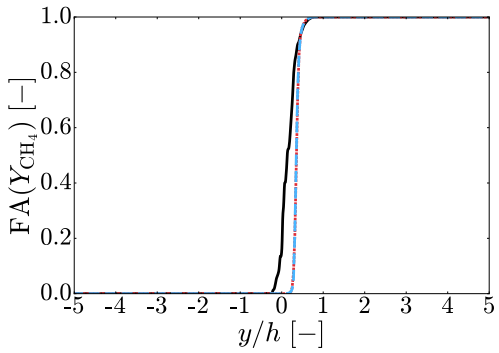
La Fig. 6.41 montre pour les différentes simulations réalisées au cours de cette étude, l'évolution au cours du temps de la répartition du dégagement de chaleur en fonction des différents



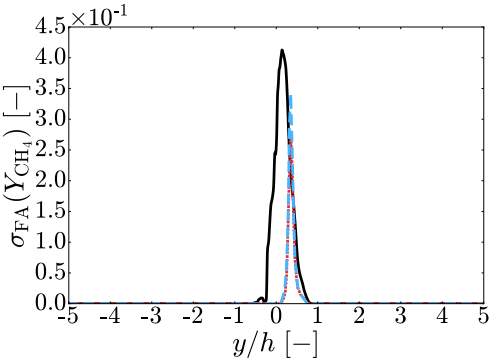
$x/h = 1$ (FA)



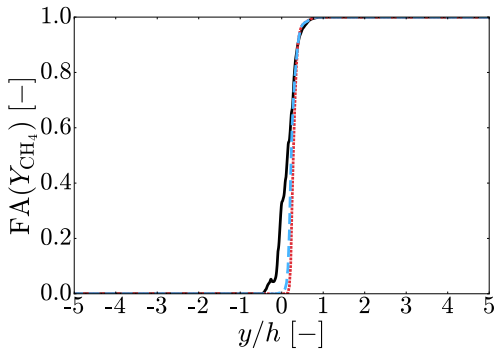
$x/h = 1$ (FA RMSD)



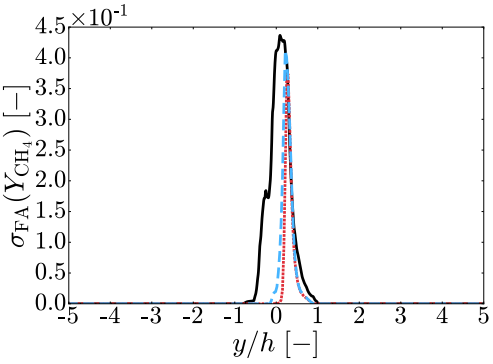
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

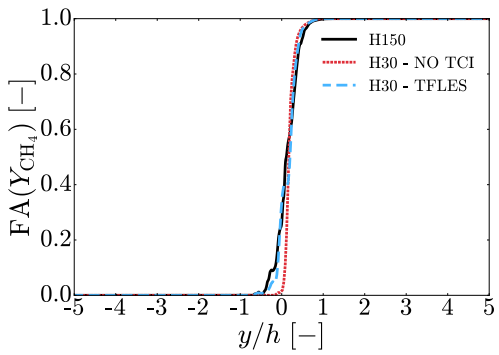


$x/h = 5$ (FA)

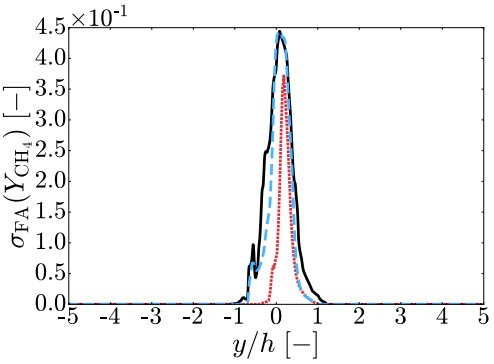


$x/h = 5$ (FA RMSD)

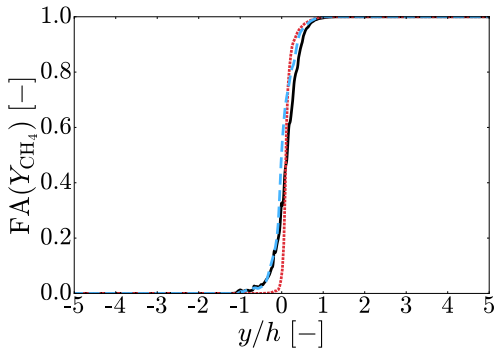
FIGURE 6.26 – Profils de **fraction massique moyenne de CH_4** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



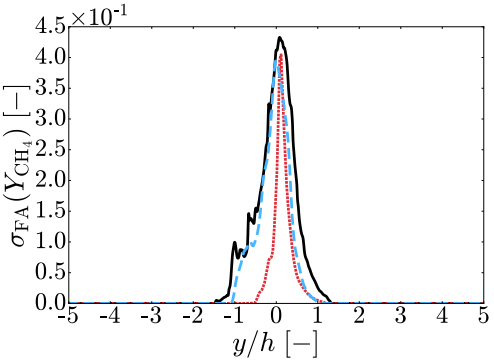
$x/h = 7$ (FA)



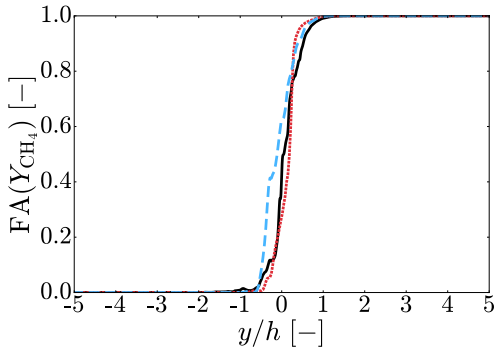
$x/h = 7$ (FA RMSD)



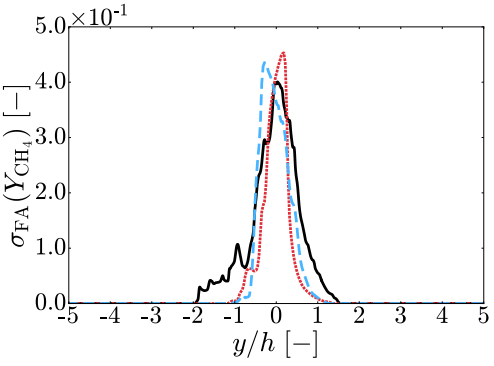
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

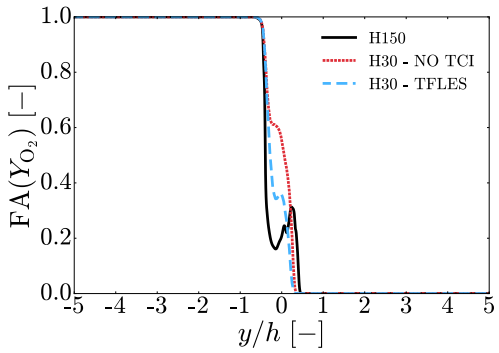


$x/h = 11$ (FA)

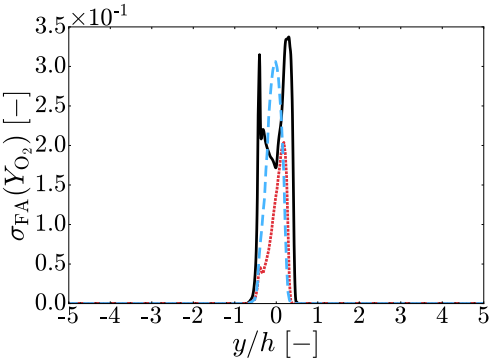


$x/h = 11$ (FA RMSD)

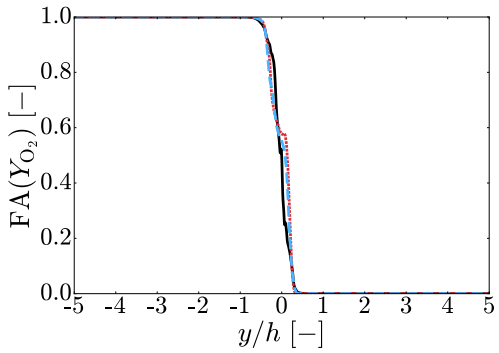
FIGURE 6.27 – Suite de la Fig. 6.26.



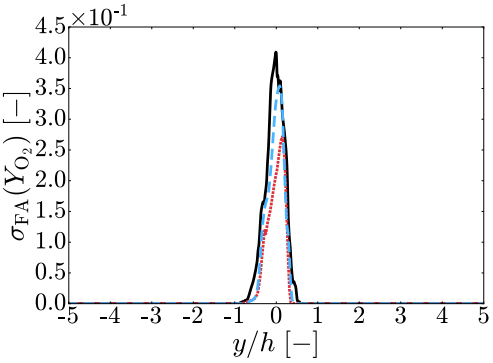
$x/h = 1$ (FA)



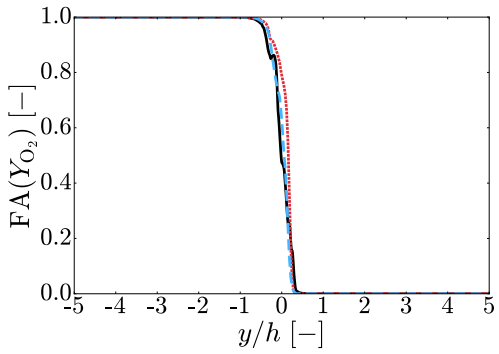
$x/h = 1$ (FA RMSD)



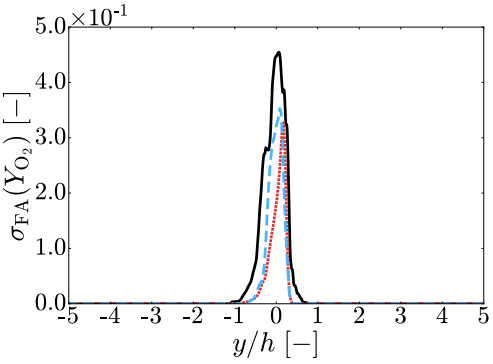
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

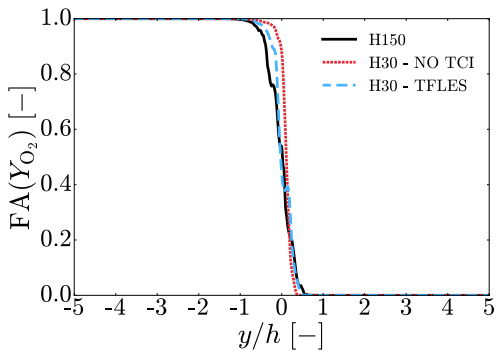


$x/h = 5$ (FA)

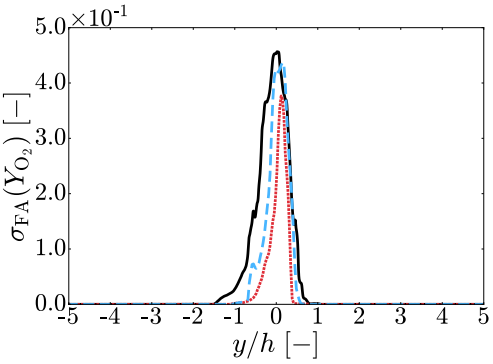


$x/h = 5$ (FA RMSD)

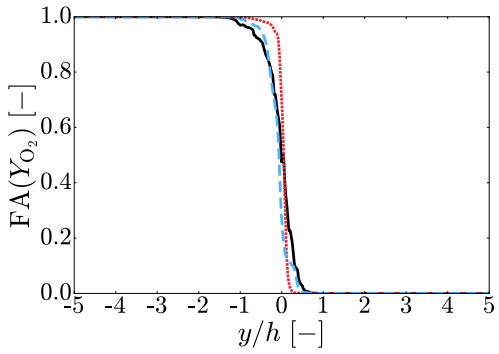
FIGURE 6.28 – Profils de **fraction massique moyenne d'O_2** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



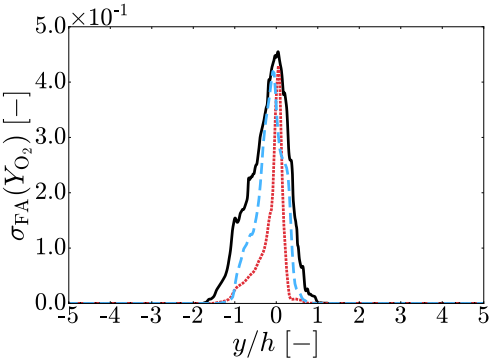
$x/h = 7$ (FA)



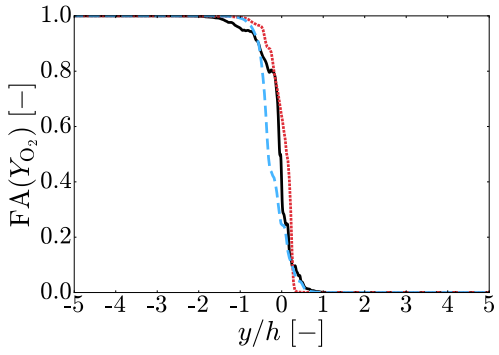
$x/h = 7$ (FA RMSD)



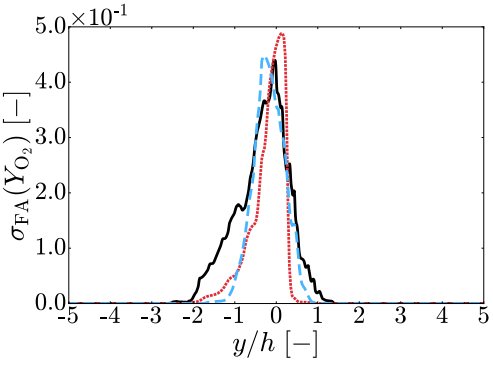
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

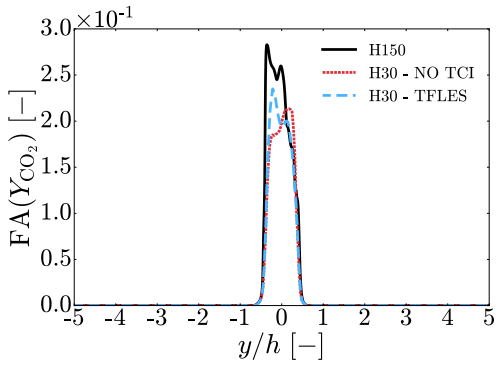


$x/h = 11$ (FA)

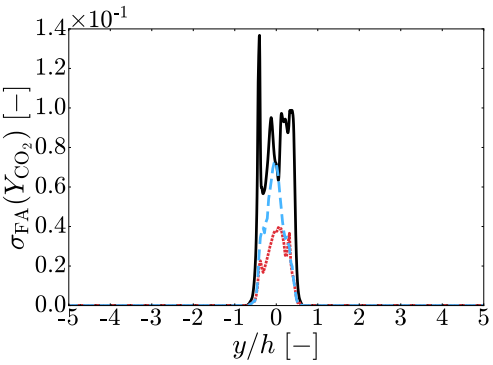


$x/h = 11$ (FA RMSD)

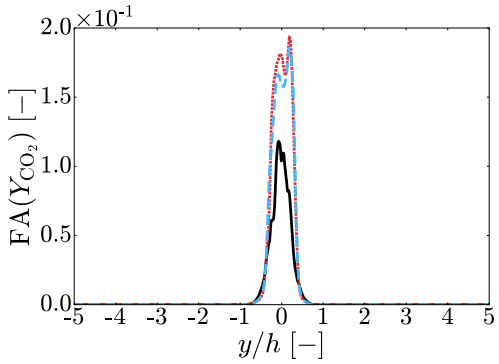
FIGURE 6.29 – Suite de la Fig. 6.28.



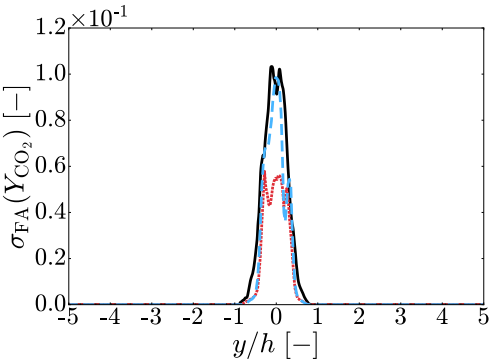
$x/h = 1$ (FA)



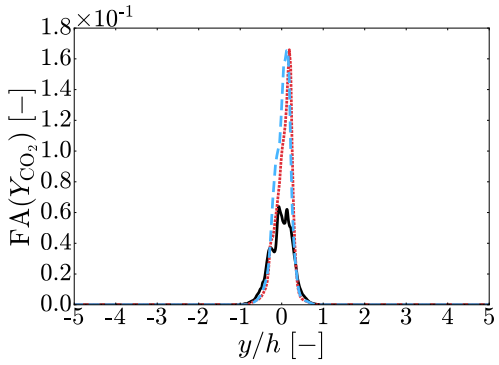
$x/h = 1$ (FA RMSD)



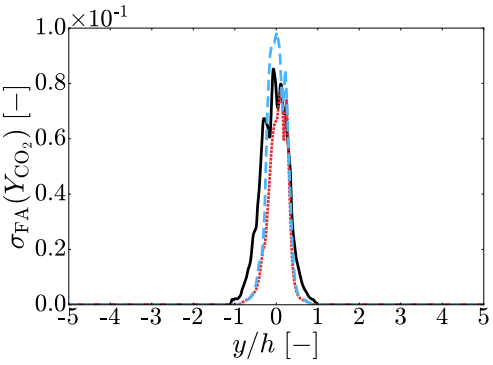
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

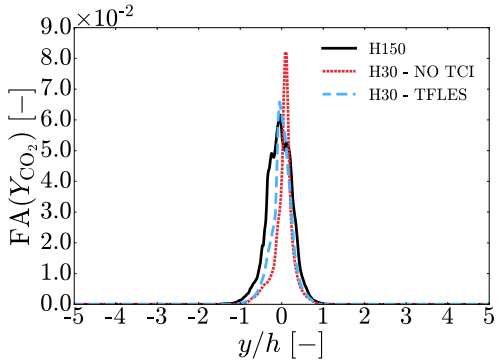


$x/h = 5$ (FA)

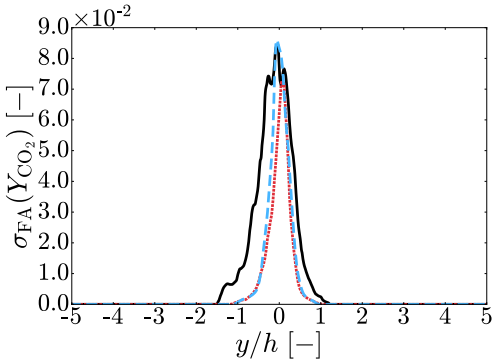


$x/h = 5$ (FA RMSD)

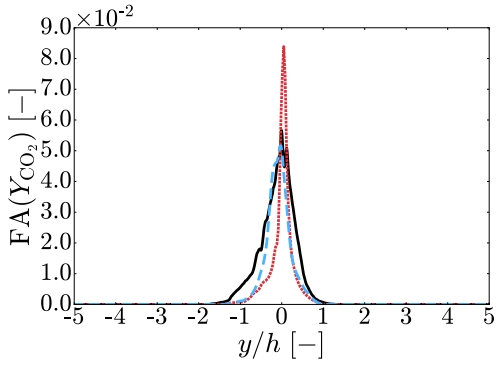
FIGURE 6.30 – Profils de **fraction massique moyenne de CO_2** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



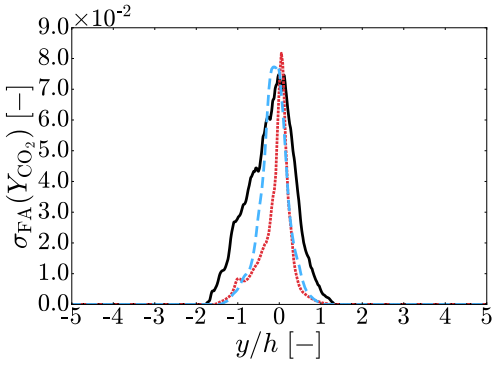
$x/h = 7$ (FA)



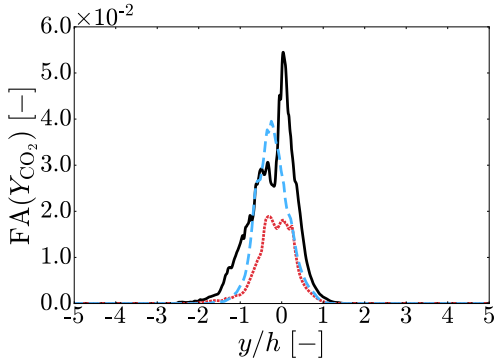
$x/h = 7$ (FA RMSD)



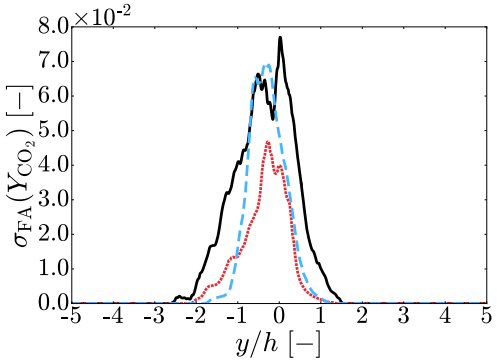
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

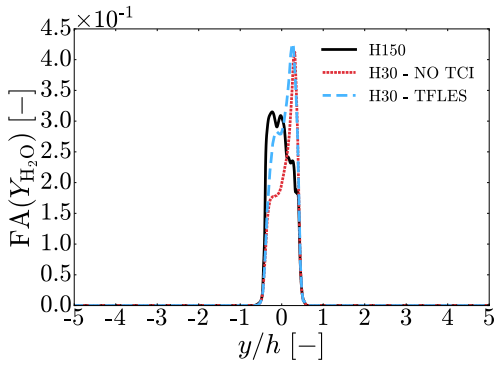


$x/h = 11$ (FA)

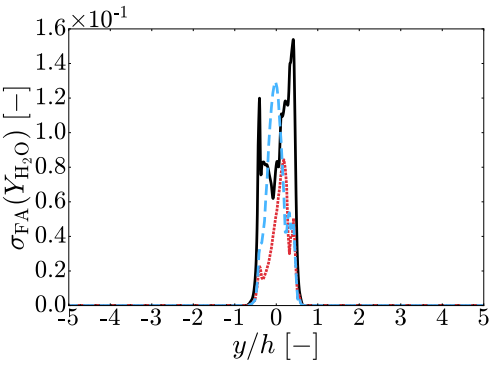


$x/h = 11$ (FA RMSD)

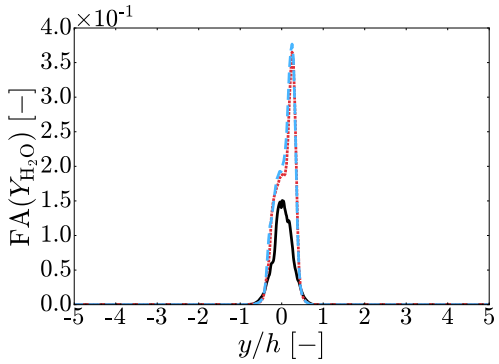
FIGURE 6.31 – Suite de la Fig. 6.30.



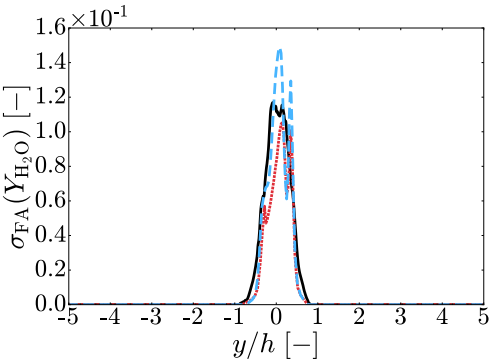
$x/h = 1$ (FA)



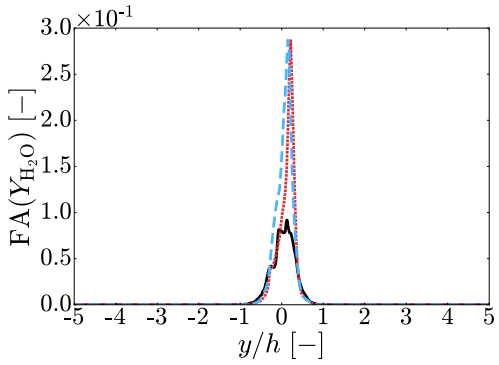
$x/h = 1$ (FA RMSD)



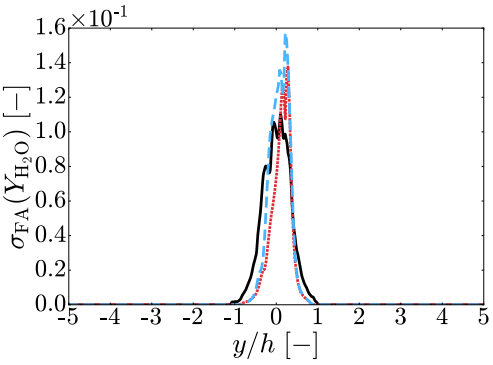
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

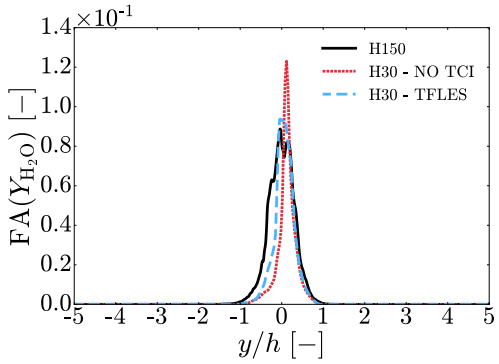


$x/h = 5$ (FA)

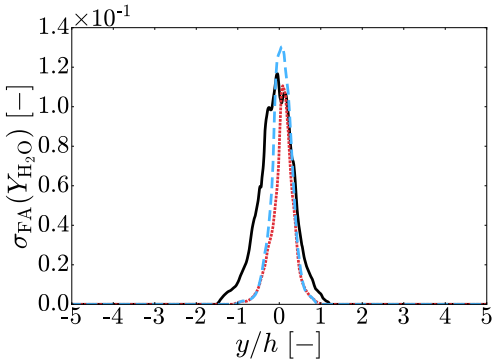


$x/h = 5$ (FA RMSD)

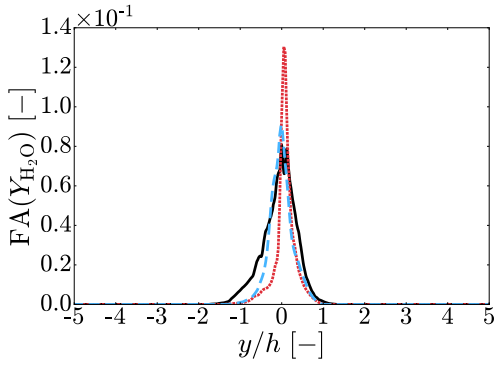
FIGURE 6.32 – Profils de **fraction massique moyenne d'H_2O** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



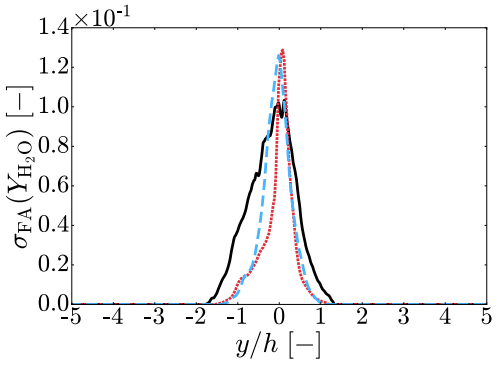
$x/h = 7$ (FA)



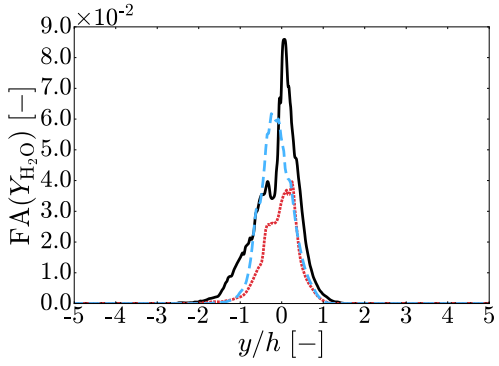
$x/h = 7$ (FA RMSD)



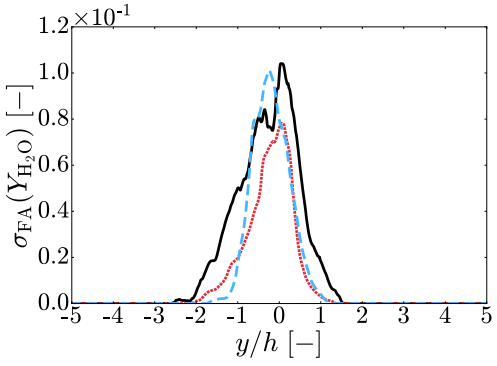
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

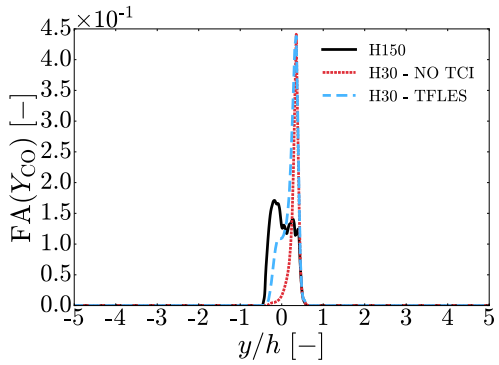


$x/h = 11$ (FA)

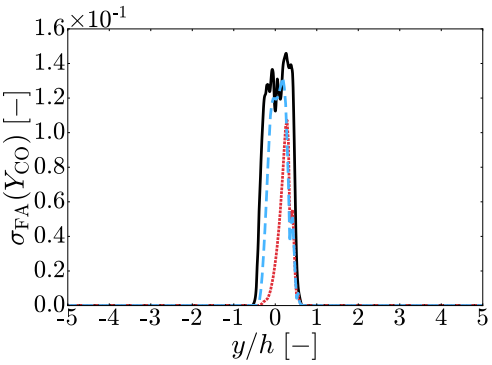


$x/h = 11$ (FA RMSD)

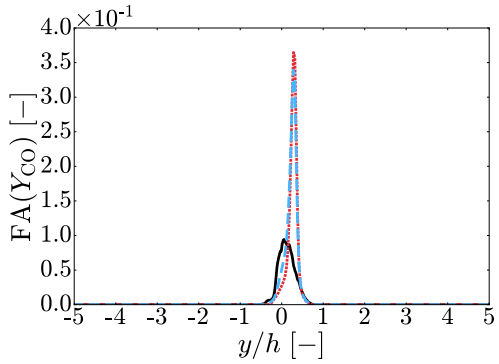
FIGURE 6.33 – Suite de la Fig. 6.32.



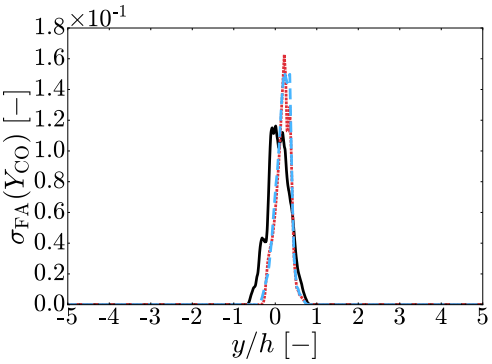
$x/h = 1$ (FA)



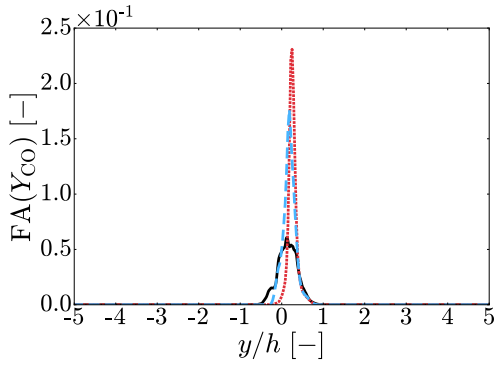
$x/h = 1$ (FA RMSD)



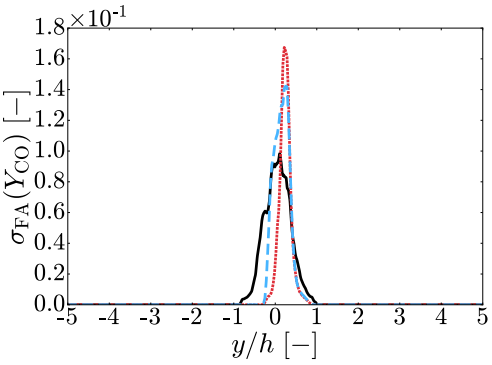
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

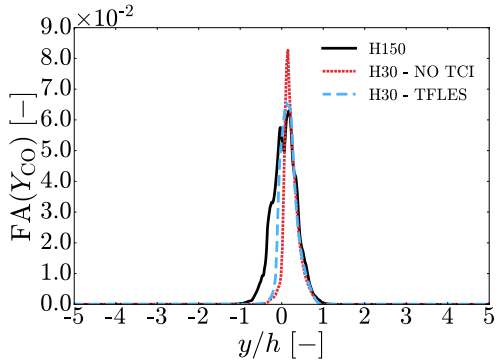


$x/h = 5$ (FA)

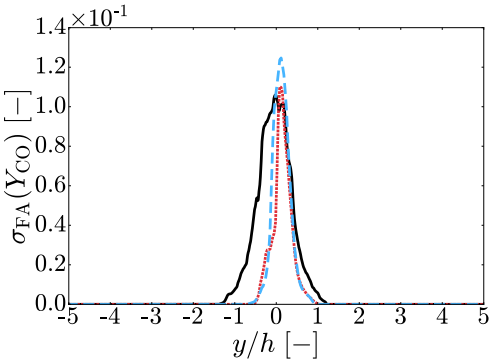


$x/h = 5$ (FA RMSD)

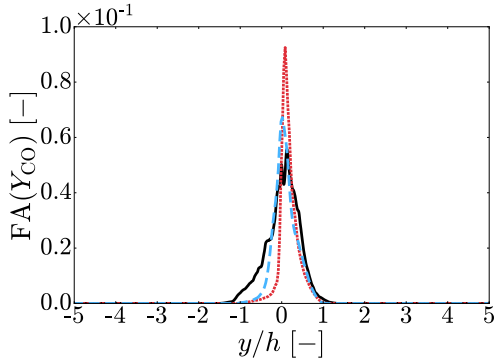
FIGURE 6.34 – Profils de **fraction massique moyenne de CO** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



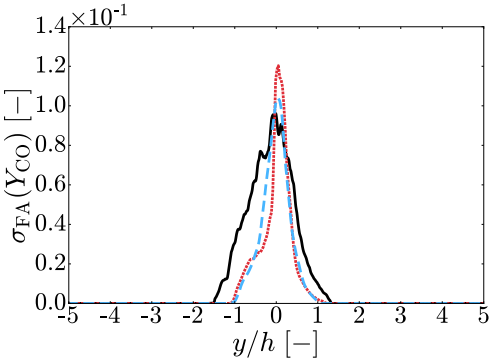
$x/h = 7$ (FA)



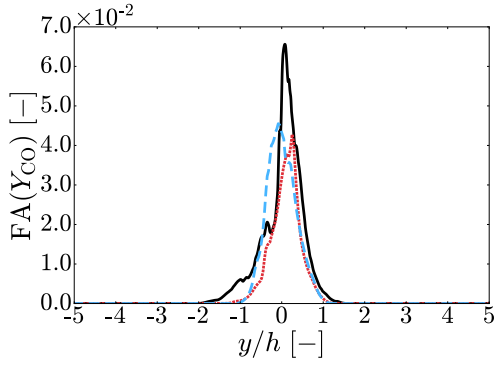
$x/h = 7$ (FA RMSD)



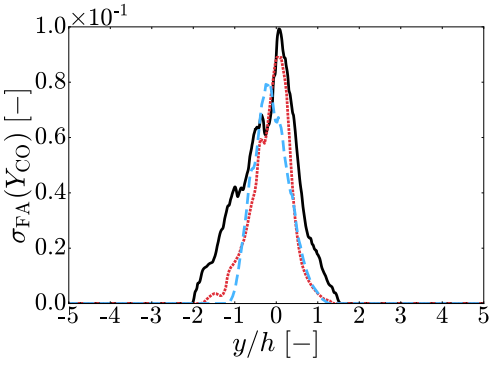
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

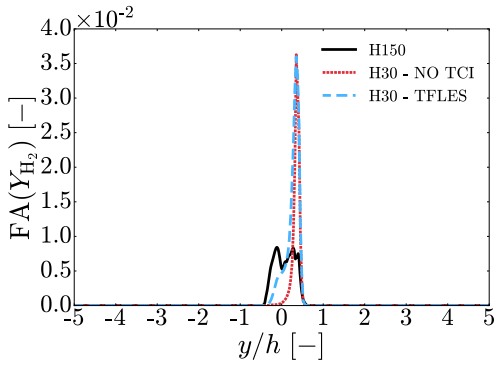


$x/h = 11$ (FA)

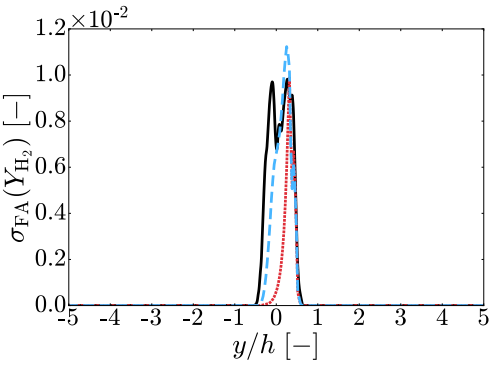


$x/h = 11$ (FA RMSD)

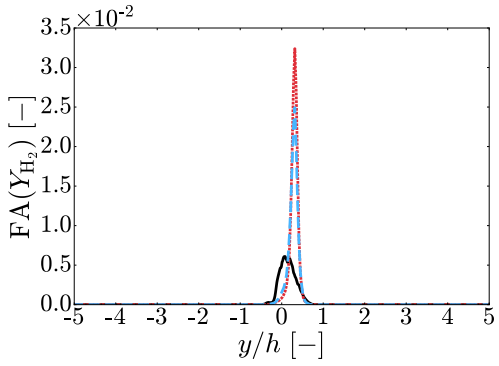
FIGURE 6.35 – Suite de la Fig. 6.34.



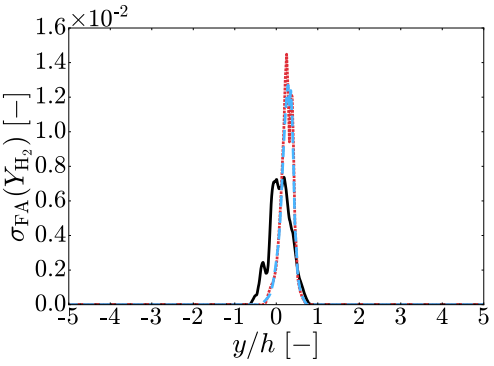
$x/h = 1$ (FA)



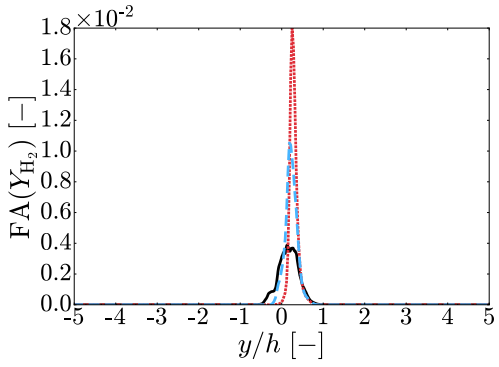
$x/h = 1$ (FA RMSD)



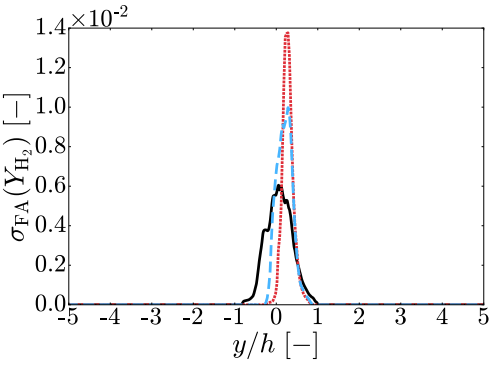
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

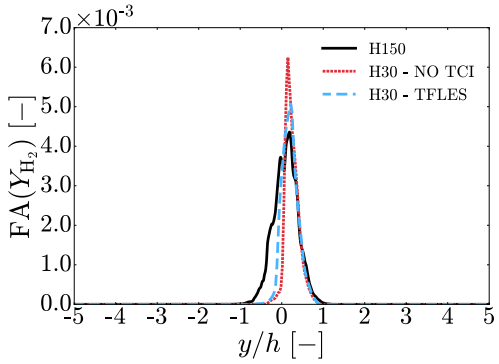


$x/h = 5$ (FA)

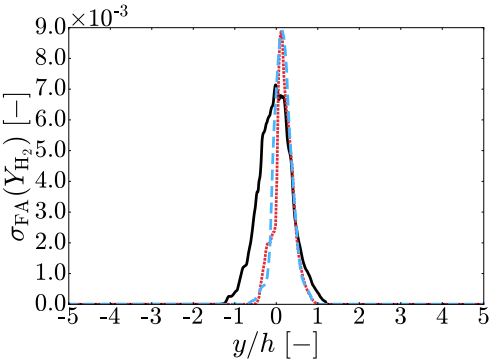


$x/h = 5$ (FA RMSD)

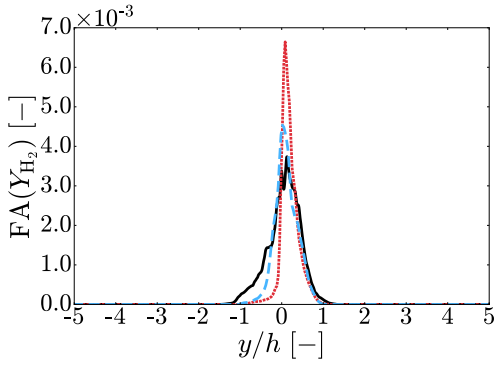
FIGURE 6.36 – Profils de **fraction massique moyenne d'H_2** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



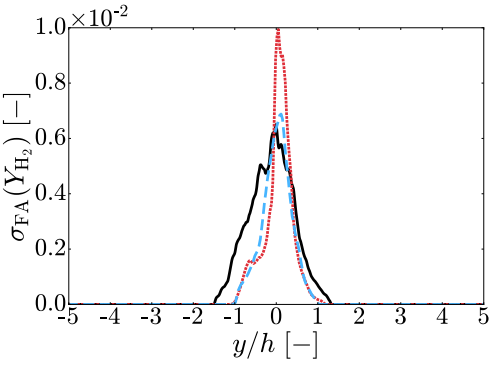
$x/h = 7$ (FA)



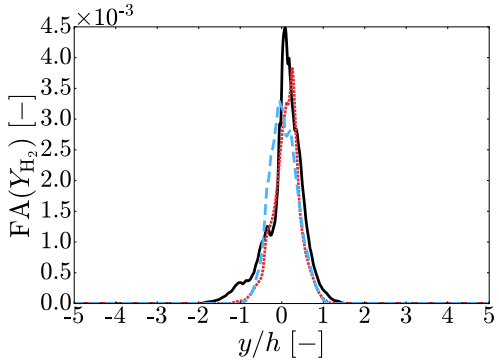
$x/h = 7$ (FA RMSD)



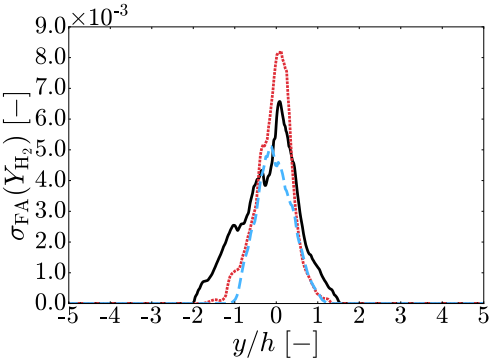
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

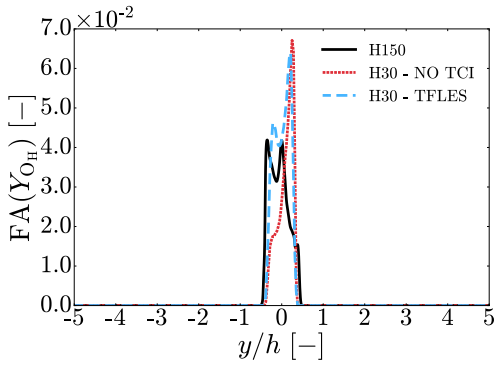


$x/h = 11$ (FA)

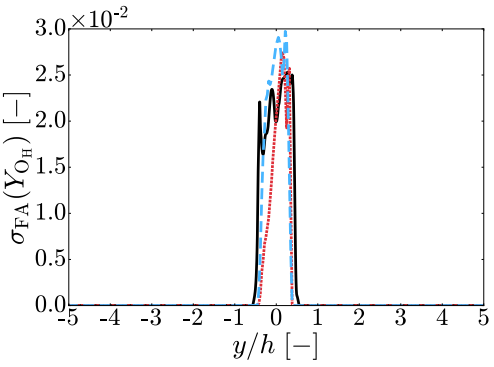


$x/h = 11$ (FA RMSD)

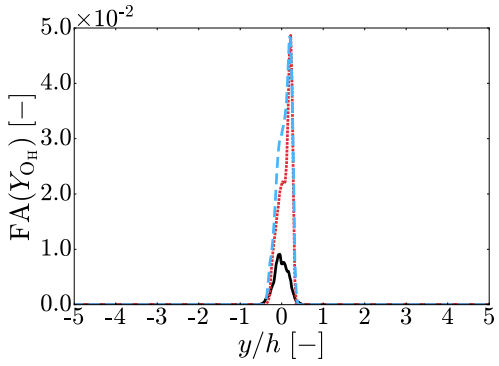
FIGURE 6.37 – Suite de la Fig. 6.36.



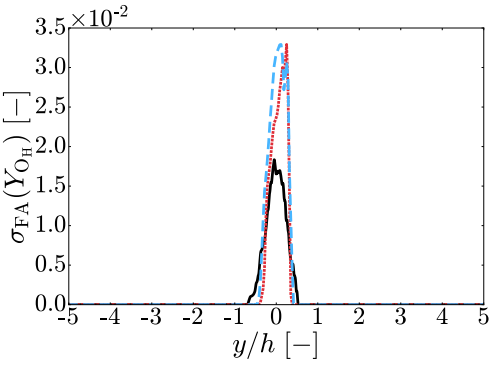
$x/h = 1$ (FA)



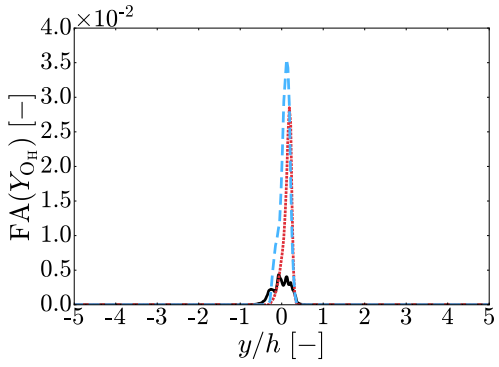
$x/h = 1$ (FA RMSD)



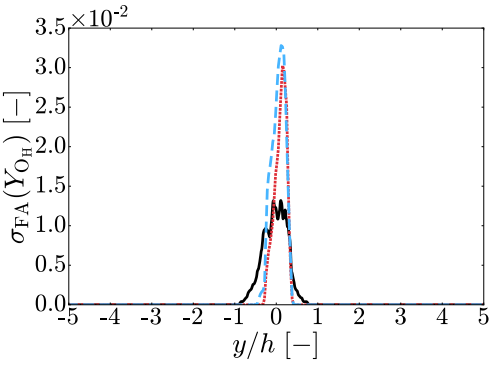
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

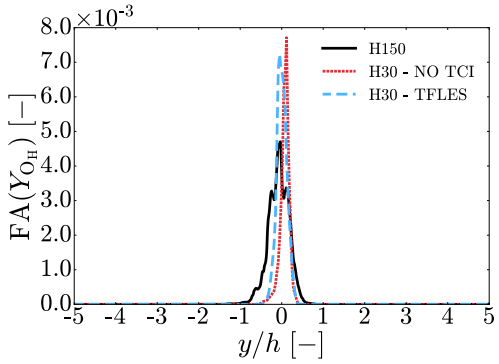


$x/h = 5$ (FA)

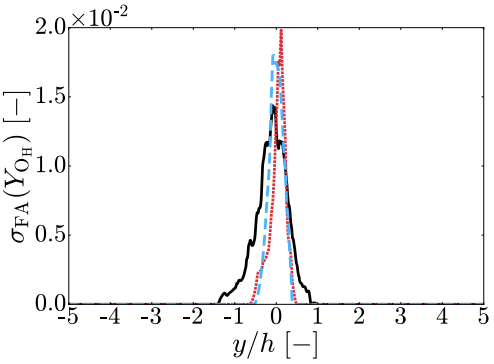


$x/h = 5$ (FA RMSD)

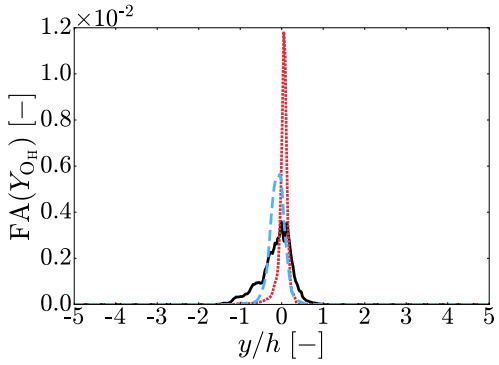
FIGURE 6.38 – Profils de **fraction massique moyenne d'OH** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



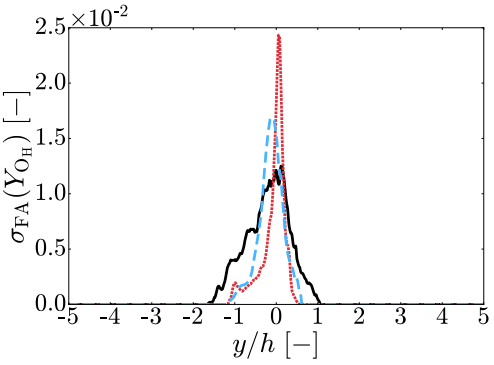
$x/h = 7$ (FA)



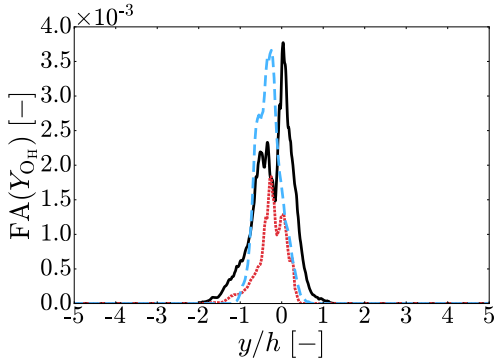
$x/h = 7$ (FA RMSD)



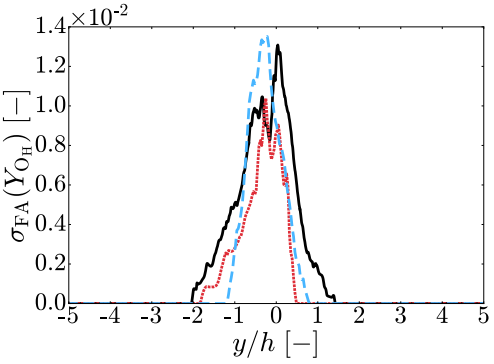
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE 6.39 – Suite de la Fig. 6.38.

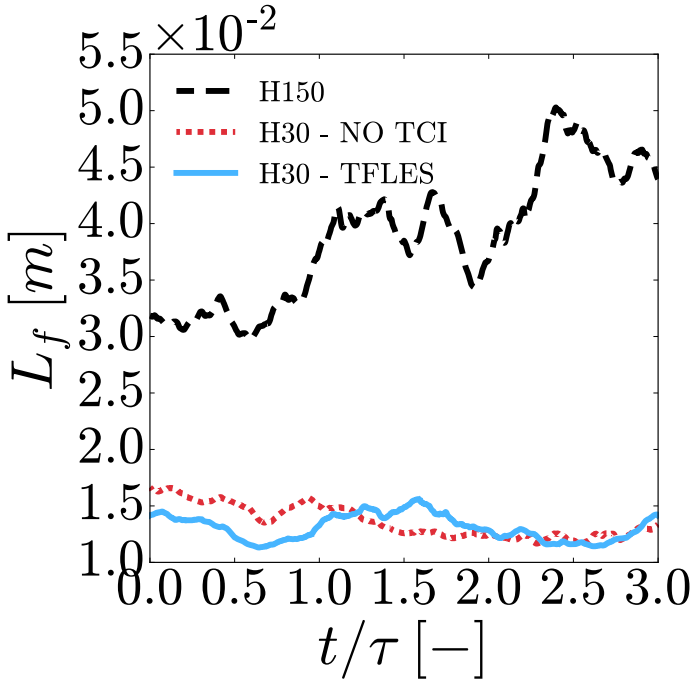


FIGURE 6.40 – Évolution de la longueur de flamme en fonction du temps normalisé par le temps de passage $\tau = 6 \times 10^{-5}$ s.

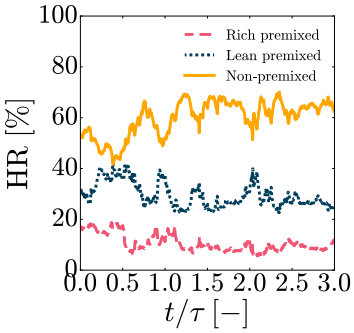
régimes de combustion (colonne de gauche), ainsi que l'évolution au cours du temps de la répartition de la surface de flamme associée en fonction des différents régimes de combustion (colonne de droite).

On remarque alors que dans tous les cas, les trois régimes de combustion sont bien retrouvés, mettant en évidence des proportions de dégagement de chaleur pour chaque régime ainsi qu'une surface de flamme associée relativement importante, à chaque instant.

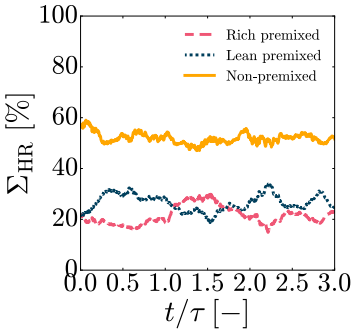
Le régime de combustion dominant est celui des flammes de diffusion, suivi par le régime des flammes de prémélange pauvre et enfin celui des flammes de prémélange riche. La répartition du dégagement de chaleur est relativement stable pour les cas H150 et H30 - NO TCI alors qu'on a des variations plus importantes dans le cas H30 - TFLES. On peut certainement expliquer cela par le fait que le modèle d'épaississement de flamme venant modifier localement la valeur des termes sources et de la diffusion des espèces si de la combustion prémélangée est détectée, il n'est pas étonnant qu'il puisse agir indirectement sur la répartition du dégagement de chaleur à travers les différents régimes de combustion. Puisque les flammes de prémélange sont épaissies, le régime de combustion prémélangé est ainsi promu devant celui des flammes non-prémélangées.

Répartition des régimes de combustion

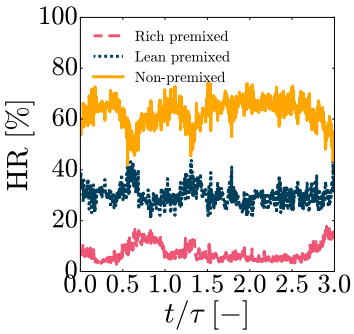
Afin de quantifier plus exactement la contribution de chaque régime de combustion dans les différentes simulations, le dégagement de chaleur est intégré dans le temps. Sur la Fig. 6.42



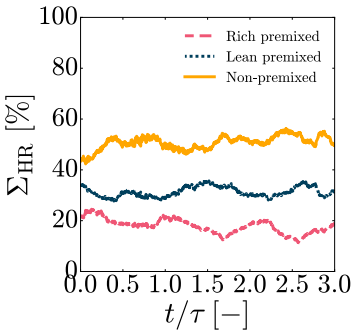
H150 (HR)



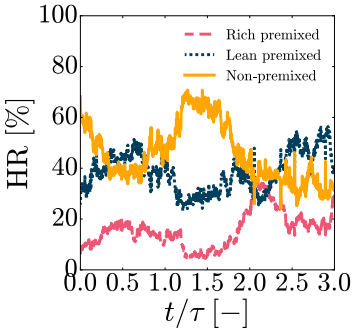
H150 (Σ_{HR})



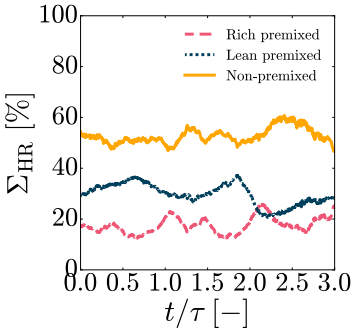
H30 - NO TCI (HR)



H30 - NO TCI (Σ_{HR})



H30 - TFLES (HR)



H30 - TFLES (Σ_{HR})

FIGURE 6.41 – Évolution temporelle de la répartition du dégagement de chaleur en fonction du régime de combustion (colonne de gauche) et de la répartition de la surface de flamme associée en fonction du régime de combustion (colonne de droite). $\tau = 6 \times 10^{-5}$ s représente un temps de passage.

est mis en évidence le dégagement de chaleur total moyen ("ALL") associé aux trois régimes de combustion ainsi que leur contribution respective dans un diagramme à barres. La répartition du dégagement de chaleur moyen pour chaque régime de combustion par rapport au dégagement de chaleur total moyen est indiqué en pourcentage au dessus de chaque barre.

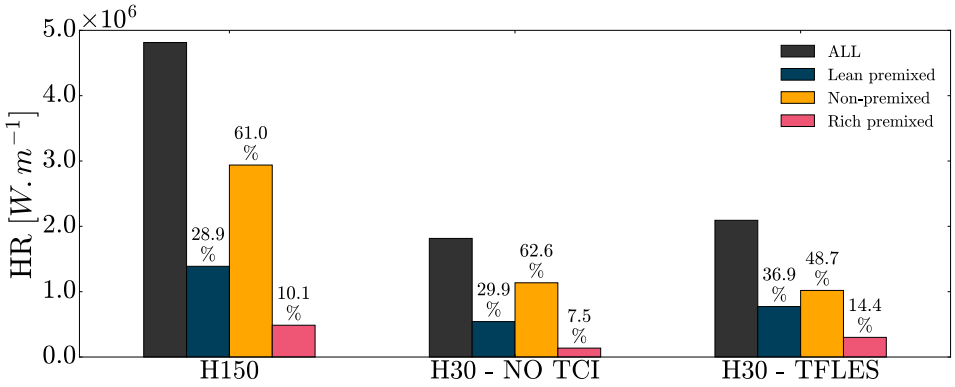


FIGURE 6.42 – Diagramme à barres de la répartition du dégagement de chaleur en fonction des différents régimes de combustion, pour les différentes simulations. "ALL" signifie que tous les régimes de combustion sont pris en compte (= 100 %).

La Fig. 6.42 montre alors que le dégagement de chaleur total moyen est plus important d'au moins un facteur deux dans le cas H150 par rapport aux cas H30, la simulation avec le modèle TFLES donnant un dégagement de chaleur total moyen légèrement plus important que celle sans modèle.

On constate également que le dégagement de chaleur moyen est environ 60 % dû au régime de combustion non-prémélangée, 30 % dû au régime de combustion prémélangée pauvre et 10 % au régime de combustion prémélangée riche. Une distribution similaire est observée dans le cas H30 - NO TCI à quelques % près, mais celle-ci semble plus affectée par l'usage du modèle TFLES. Le modèle TFLES n'étant employé que pour le régime de combustion prémélangé, il n'est pas étonnant de voir sa promotion au détriment du régime de combustion non-prémélangé.

Enfin, la Fig. 6.43 montre que près de la moitié de la surface de la flamme est caractérisée par de la combustion prémélangée et que cette répartition est bien préservée par la LES. On remarque cependant que si la répartition entre les flammes prémélangées riches et pauvre est très similaire dans le cas H150 (environ 25 %), le régime de combustion prémélangé pauvre semble privilégié devant celui prémélangé riche dans les cas H30 avec un écart d'au moins 12 points.

6.4 Conclusion

La simulation haute fidélité d'une couche de mélange réactive avec une injection CH_4/O_2 doublement transcritique en configuration *splitter-plate* et dans des conditions caractéristiques de celles d'un moteur-fusée, a été réalisée avec succès. Durant cette étude, le mécanisme chimique

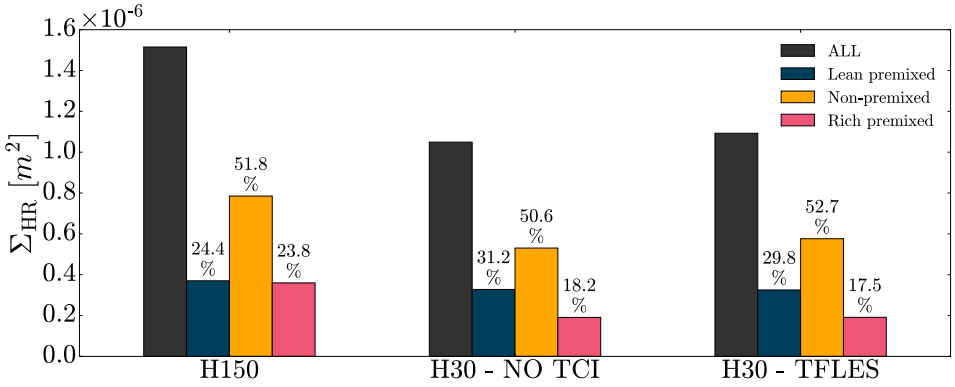


FIGURE 6.43 – Diagramme à barres de la répartition de la surface de flamme en fonction des différents régimes de combustion, pour les différentes simulations. "ALL" signifie que tous les régimes de combustion sont pris en compte.

réduit RAMEC-17S-44R développé au cours de cette thèse a été utilisé pour décrire au mieux la combustion.

Une première simulation n'utilisant aucun modèle de sous-maille pour la turbulence et réalisée sur un maillage très fin (cas H150), a permis de mettre en évidence toute la complexité de l'écoulement étudié. Alors que les ergols sont injectés de part et d'autre de la lèvre de l'injecteur, i.e. dans une configuration non-prémélangée, des structures de flamme de prémélange sont rencontrées localement et en quantités importantes. Ainsi, environ 40 % du dégagement de chaleur produit par la flamme est issu de la combustion prémélangée, provenant d'environ 50 % de la surface totale de la flamme. Il a également été montré que des structures de flammes triples plus ou moins plissées et déformées par la turbulence pouvaient être rencontrées dans l'écoulement. Des phénomènes assez fréquents d'extinctions locales et des discontinuités dans le front de flamme turbulente ont également été observés, ce qui complexifie encore davantage la nature de l'écoulement étudié.

Il en ressort que dans ces conditions d'injection à haute pression et basse température, la combustion du méthane exhibe un comportement très différent de celui de l'hydrogène pour des conditions similaires. En effet, le méthane semble brûler beaucoup moins bien que l'hydrogène, pour différentes raisons. La première est liée à la forte masse volumique du méthane injecté transcritique ($T_c^{CH_4} = 190$ K), contrairement à l'hydrogène injecté supercritique ($T_c^{H_2} = 33$ K) dans les mêmes conditions de température ($T = 120$ K) et pression ($P = 10.0$ MPa). Les ligaments denses de méthane ont alors plus de mal à venir se mélanger aux ligaments d'oxygène, ce qui défavorise la combustion. Par ailleurs, à $P = 10.0$ MPa, le méthane est également plus proche de sa pression critique ($P_c^{CH_4} = 4.6$ MPa) que l'hydrogène ($P_c^{H_2} = 1.3$ MPa) et donc la variation de masse volumique lorsque le fluide se réchauffe est d'autant plus prononcée. De plus, le méthane se diffuse naturellement moins bien que l'hydrogène, ce qui réduit également sa capacité à venir pénétrer le front froid et dense d'oxygène. Enfin, la cinétique chimique du méthane, plus lente et complexe que celle de l'hydrogène, ne favorise pas non plus la combustion.

Ces résultats tendent à montrer à quel point un tel écoulement peut être complexe et explique probablement pourquoi une approche simplifiée de modélisation de la chimie soit par une chimie infiniment rapide, soit par une tabulation sur des flammes de diffusion, n'est certainement pas suffisante pour rendre totalement compte d'une telle complexité. Il est certainement primordial de modéliser efficacement le caractère partiellement prémélangé de certaines régions de l'écoulement.

Par ailleurs, deux LES 2D avec deux approches différentes pour la modélisation de l'interaction entre la chimie et la turbulence ont également été réalisées. Dans la première approche, le terme source chimique était directement calculé sans utiliser de modèle (cas H30 - NO TCI) alors que le modèle d'épaississement de flamme conditionné aux flammes de prémélange, TFLES, a été utilisé dans la seconde approche (cas H30 - TFLES). L'étude à la fois de champs instantanés mais également de statistiques sur des grandeurs moyennes, a permis de comparer qualitativement et quantitativement les simulations entre elles.

D'une manière générale, il a été montré qu'avec les approches LES, la structure de flamme était moins turbulente et que son aspect global ressemblait davantage à une flamme de diffusion. L'enveloppe de la flamme turbulente est moins ouverte et la température maximale des gaz brulées est sur-estimée.

Dans l'ensemble, l'inclusion de modèle TFLES assure une meilleure prédiction des différentes grandeurs caractéristiques de l'écoulement comme la masse volumique, la température, la vitesse ou encore les espèces majoritaires comme le CH_4, l'O_2, le CO_2, l'H_2O, etc.

En outre, les trois régimes de combustion ont également été retrouvés dans les LES, dans des proportions relativement proches de celles observées dans le cas de référence. Le modèle TFLES semble cependant affecter légèrement la distribution du dégagement de chaleur entre les différents régimes de combustion.

Ainsi, même si la LES ne parvient pas à reproduire parfaitement la DNS, elle peut être un bon compromis pour les industriels étant donné son coût CPU relativement attractif par rapport à la DNS (25 à 40 fois plus rapide ici). Il reste néanmoins à voir si les observations effectuées avec un maillage H30 restent vraies dans le cas où l'on dégraderait davantage le maillage, avec par exemple un maillage équivalent à un H10 (10 mailles dans l'épaisseur de la lèvre) ou un H5 (5 mailles dans l'épaisseur de la lèvre), cas probablement plus représentatifs de la taille de maille réellement accessible en LES dans une configuration industrielle ou semi-industrielle.

Enfin, la LES serait d'autant plus attractive si un moyen de faire évoluer la simulation au pas de temps convectif (CFL) au lieu du pas de temps chimique était mis en place, sans pour autant sacrifier la précision numérique.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

Sommaire

7.1 Conclusions 279
7.2 Perspectives 282

7.1 Conclusions

L'objectif de cette thèse portait sur l'étude la plus précise possible de la structure des flammes LOx/CH_4 en conditions moteurs-fusées afin d'en comprendre la physique et ainsi pouvoir proposer par la suite une modélisation adaptée pour la LES.

La chimie du CH_4/O_2 à haute pression est peu connue et l'étude bibliographique menée au cours de cette thèse n'a permis d'identifier que des mécanismes réactionnels contenant trop d'espèces et donc difficilement utilisables dans des simulations de type DNS ou LES.

Un nouveau mécanisme chimique réduit a ainsi été produit pendant cette thèse. Celui-ci a été pensé pour être valable, par comparaison avec le schéma détaillé initial à partir duquel il a été construit, pour une gamme de pression et de richesse les plus larges possibles ($P \in [0.1, 10]$ MPa et $\Phi \in [0.2, 14]$). Ce dernier a montré sa capacité sur des cas canoniques 1D, à pouvoir reproduire les grandeurs principales caractéristiques de la combustion (temps d'auto-allumage, température et vitesse de flamme, limite d'extinction, profils d'espèces majoritaires, etc.), en particulier à haute pression ($P \in [5, 10]$ MPa, $\forall\ \Phi$). Des simulations 2D et 3D de flammes turbulentes prémélangées et non-prémélangées haute pression ont ensuite été réalisées avec SiTCom-B. Celles-ci ont permis de démontrer la capacité du mécanisme chimique réduit à reproduire assez fidèlement la forme et la propagation de la flamme turbulente que l'on pouvait obtenir avec le schéma détaillé, tout en réduisant le coût CPU d'environ un facteur 8-10. La principale différence observée entre les deux mécanismes chimiques est un retard dans la propagation de la flamme avec la chimie réduite par rapport à la chimie détaillée, probablement issu d'une légère différence dans la prédiction du temps d'auto-allumage avec les deux mécanismes chimiques.

Une fois développé un mécanisme chimique adapté à nos objectifs de simulations, DNS/LES, la problématique de la diffusion non-idéale (effets gaz réel) qui est un point majeur des écoulements à haute pression, a été appréhendée. Si dans le cas de la combustion H_2/O_2 celle-ci

semble jouer un rôle indéniable, ce point restait néanmoins à être vérifié dans le cas de la combustion du CH_4. L'étude approfondie sur une couche de mélange LCH_4/LO_2 non réactive des différents termes constituants l'expression de la force de diffusion ordinaire a montré que le terme de diffusion non-idéale était relativement faible par rapport au terme de diffusion idéale. En effet, les deux termes impliqués dans l'expression du terme non-idéal étaient de signes opposés et tendaient à s'annuler mutuellement. Dans le cas particulier de cet écoulement, le terme de diffusion non-idéale s'est avéré être plus important au centre des structures tourbillonnaires simulées, là où des forts gradients de pression sont présents, plutôt qu'au niveau des gradients de masse volumique, à l'interface entre l'oxygène et le méthane. Il se pourrait cependant que ce comportement soit spécifique à ce cas d'étude, puisque la simulation additionnelle d'une couche de mélange LO_2/GCH_4 a mis en avant un comportement différent, avec la localisation du terme de diffusion non-idéale cette fois-ci davantage au niveau des gradients de masse volumique. On pourrait s'attendre à ce que ces flux de diffusion non-idéale soient également amplifiés quand les gradients de masse volumique sont encore plus importants, comme dans le cas d'un écoulement réactif par exemple. Par ailleurs, une simulation 1D de flamme laminaire prémélangée CH_4/O_2 à haute pression mais faible température, a démontré que la formulation des flux de diffusion non-idéale employée dans cette thèse n'était peut-être pas la plus adaptée pour simuler un cas réactif, les flux de diffusion divergeant au niveau du fort gradient de masse volumique produit par la flamme au voisinage des gaz frais denses. Différentes propositions d'améliorations sont laissées en perspectives afin de proposer une solution permettant d'inclure de manière stable les flux de diffusion non-idéale dans les simulations. La diffusion non-idéale a alors été négligée lors des DNS/LES réactives, préjugeant que les structures de l'écoulement n'allaient pas être profondément perturbées.

L'étude de la structure de flammes LOx/CH_4 a quant à elle permis de révéler la présence de flammes triples dans des écoulements supercritiques. À la connaissance de l'auteur, c'est la première fois qu'une telle structure de flamme est observée en régime supercritique. On notera au passage, la capacité du mécanisme chimique réduit à reproduire ce cas de flamme extrêmement difficile. Une étude approfondie des différents régimes de combustion relatifs à ces structures de flammes triples a permis de confirmer la présence des branches de diffusion et de prémélange riche et pauvre, mais également de mettre en évidence à quel point la combustion identifiée comme prémélangée pouvait jouer un rôle important dans les configurations étudiées. Par exemple, les flammes de prémélange pauvre dans les simulations de "blobs" (chapitre 4) étaient celles qui dégageaient le plus de chaleur. L'ajout de turbulence a accéléré le processus de combustion en favorisant le mélange, tout en complexifiant la nature de l'écoulement, avec la présence de structures de flammes triples ainsi que des fronts de flammes mono-brachiales purement prémélangées ou non-prémélangées. Des observations similaires ont ensuite été réalisées sur des configurations CH_4/O_2 de type *splitter-plate*, lors de l'allumage du mélange ou lorsque la flamme était établie. Dans le premier cas, on retrouve une structure de flamme triple évoluant le long de la ligne stœchiométrique, en direction de la lèvre de l'injecteur. Dans le second cas, notre étude a mis en évidence une structure d'écoulement très complexe avec différents phénomènes physiques à l'œuvre (extinction, combustion prémélangée, flammes triples, etc.). Du fait de l'injection doublement transcritique, la flamme est piégée entre deux couches de gaz frais très denses, ce qui rend plus difficile son expansion. De plus, il a été observé que les ligaments denses de méthane peinaient à se mélanger aux ligaments d'oxygène, ce qui défavorise la combustion. La cinétique

chimique du méthane, relativement lente et moins énergétique que celle de l'hydrogène, couplée à la difficulté du méthane à bien se mélanger et diffuser dans l'oxygène, ne favorise pas non plus la combustion, ce qui peut conduire à l'obtention d'un front de flamme turbulent discontinu avec des phénomènes d'extinctions locales.

Ainsi, les simulations réalisées au cours de cette thèse ont permis par l'étude des flammes LOx/CH_4 et l'inclusion d'une cinétique chimique semi-détaillée adaptée, de mieux comprendre comment la chimie du méthane pouvait interagir avec la turbulence dans des conditions représentatives de moteurs-fusées. En effet, la connaissance fine des structures de flammes permet d'orienter une modélisation plus juste pour la réalisation de simulations sur de plus grandes échelles, LES (notre cas) ou RANS, plus accessibles pour l'industrie. La complexité relevée de ces flammes, aves les trois régimes de combustion (flammes non-prémélangées et flammes de prémélange riche et pauvre) détectés, reste néanmoins un challenge pour la simulation numérique, en particulier si l'on veut être capable de rendre compte avec précision des phénomènes observés en DNS, mais avec une approche LES par exemple. Le choix de la modélisation devient ici crucial.

Dans le cas d'une couche de mélange CH_4/O_2 non réactive, la comparaison des champs moyens et des statistiques cumulés sur environ 80 temps de passages ont permis de montrer que même si la LES ne rendait pas parfaitement compte de toutes les caractéristiques de l'écoulement simulé en DNS, on en retrouvait les caractéristiques principales. En particulier, il a été montré que les modèles WALE et Smagorinsky dynamique étaient ceux qui prédisaient le mieux le comportement de l'écoulement en proche paroi, tandis que le modèle simple de Smagorinsky était le plus prédictif loin de la lèvre de l'injecteur. Le meilleur modèle serait probablement le modèle de Smagorinsky légèrement modifié de façon à diminuer la viscosité turbulente en proche paroi, mais cette idée-là n'a pas pu être vérifiée en pratique par manque de temps. Les observations étant effectuées dans le cadre de simulations 2D, rien ne garantit par contre que l'on obtiendrait les mêmes résultats en 3D, puisque la turbulence est un phénomène 3D et non 2D par nature, mais l'on peut pré-supposer que la tendance resterait la même. La LES a également montrée sa capacité à pouvoir modéliser des effets de diffusion non-idéale avec une approche relativement simple sur ce cas non réactif, même si un modèle plus poussé serait certainement plus précis. Deux approches pour modéliser l'interaction chimie turbulence (TCI) ont ensuite été envisagées pour l'étude d'une couche de mélange CH_4/O_2 réactive. La première consistait à ne pas appliquer de modèle en particulier (approche "NO TCI"), quand la seconde recourait au modèle d'épaississement de flamme dynamique (TFLES), étant donné la présence du régime de combustion prémélangé. La structure de flamme simulée en LES se trouve globalement moins turbulente et son aspect général ressemble davantage à une flamme de diffusion. En particulier, l'angle d'ouverture de la flamme turbulente est sous-estimé d'environ 27 % et les gaz brulés sont plus chauds, avec par exemple une température moyenne maximale plus élevée d'environ 16 % en LES avec le modèle TFLES, par rapport à la DNS, dans une coupe à une position axiale correspondant au 2/3 du domaine simulé. Toutefois, le modèle TFLES conditionné aux flammes de prémélange assure une meilleure prédiction des principales grandeurs caractéristiques de l'écoulement (masse volumique, température, vitesse et espèces). Pour autant, malgré la difficulté de la LES à pouvoir bien rendre compte de la complexité de la flamme turbulente simulée en DNS, les trois régimes de combustion ont bien été retrouvés. L'expression de ces différents régimes de combustion a globalement bien été reproduit par la LES dans des proportions similaires à celles

observées en DNS, le modèle TFLES modifiant légèrement la distribution du dégagement de chaleur entre les différents régimes de combustion, en promouvant quelque peu le régime de combustion prémélangé.

Finalement, c'est bien l'analyse détaillée des structures de flammes menées au cours de cette thèse avec une chimie adéquate qui a permis de proposer une modélisation adaptée de l'interaction chimie-turbulence pour la LES en mettant en évidence le rôle non attendu mais indéniable de la combustion prémélangée dans les conditions étudiées, avec l'utilisation du modèle TFLES conditionné aux flammes de prémélange, montrant une amélioration significative des résultats par comparaison à ceux obtenus en DNS.

7.2 Perspectives

Dans cette thèse, des flammes LOx/CH_4 ont été étudiées dans des conditions moteurs-fusées en incluant des effets de cinétique chimique complexe grâce à un mécanisme chimique réduit adapté, mais pour des pressions supérieures à la pression critique du méthane et de l'oxygène, c'est-à-dire, en conditions supercritiques. Or le fonctionnement d'un moteur-fusée, en particulier lors de l'allumage, passe nécessairement par des des phases sous-critiques à basse pression, qu'il s'agisse de la chambre de combustion principale ou du générateur de gaz dans le cas d'un moteur tel que Prometheus. Il serait intéressant de pouvoir simuler ces points de fonctionnement précis et même étudier le comportement des transitions sous-critiques/supercritiques des différents ergols et des conséquences sur la flamme. Afin de prendre en compte la phase liquide et de pouvoir traiter aussi bien des conditions sous-critiques que supercritiques, la méthode des interfaces diffuses [88, 146, 243] semble être un bon compromis. Celle-ci permettrait en même temps de pouvoir modéliser le comportement de l'eau liquide, qui n'a pas été prise en compte dans les simulations réalisées au cours de cette thèse, contrairement au travail de Gaillard [88] par exemple. En effet, si l'on regarde précisément le profil de fraction massique de l'eau issu des simulations de flammes prémélangées 1D (voir section 5.5.3.1) et que l'on trace son évolution en fonction de la température comme c'est le cas sur la Fig. 7.1, on peut observer qu'une quantité non négligeable d'eau produite par la combustion est susceptible de se retrouver dans l'état liquide pour les mélanges à 300 K et à 100 K, mais également dans l'état solide dans le cas où la température du mélange initial est de 100 K. On peut également retrouver la présence d'eau à très basse température dans le cas de la couche de mélange CH_4/O_2 réactive simulée dans le chapitre 5, comme le suggère la Fig. 7.2. En effet, en périphérie de l'enveloppe de la flamme turbulente, de l'eau est susceptible d'être dans l'état liquide (a) et même solide (b), en particulier du côté de l'injection de méthane (partie supérieure de la couche de mélange). Toutefois, comme les changements d'états ne sont pas pris en compte dans les simulations réalisées au cours de cette thèse (non prise en compte de la chaleur latente), il est difficile de se prononcer sur la formation effective d'eau à l'état liquide et encore plus sur la production de glace, même s'il semblerait d'après l'expérience de Singla *et al.* [347] sur le banc MASCOTTE, qu'un bloc de glace d'environ 4 mm aurait été retrouvé rattaché à la lèvre externe de l'injecteur coaxial, côté méthane, après un essai en conditions d'injections transcritiques avec des températures d'injection de 85 K pour l'O_2 et 120 K pour le CH_4. Les changements de phase et leurs impacts sur la structure de flamme restent donc un véritable challenge à relever.

Toujours dans le but d'inclure le plus de phénomènes physiques possibles dans une simulation

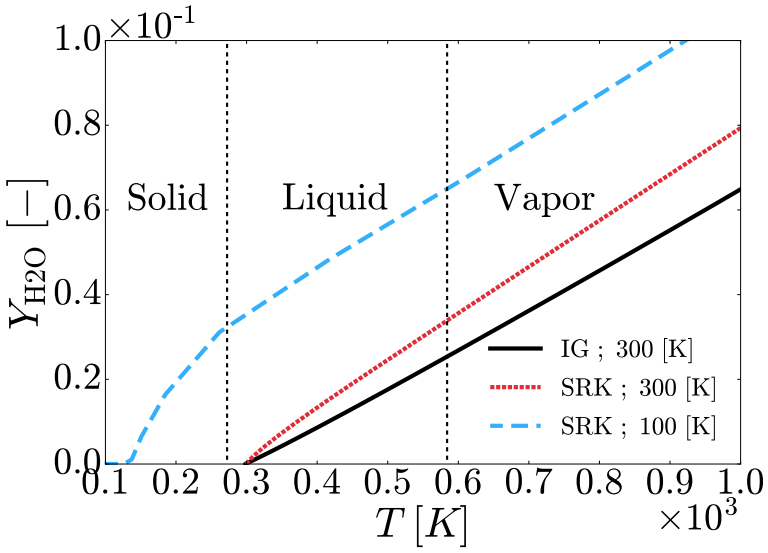
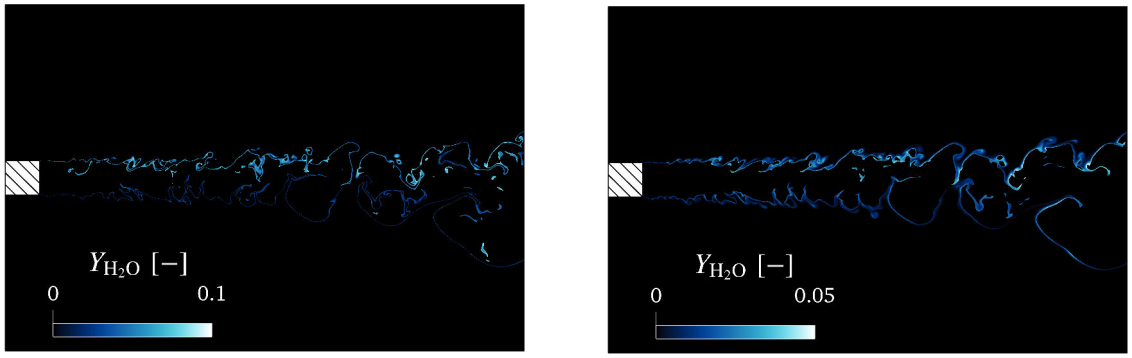


FIGURE 7.1 – Évolution de la fraction massique d'eau en fonction de la température et mise en évidence des différents états de l'eau à $P = 10$ MPa au travers d'une flamme 1D prémélangée.



(a) $T_{sol}^{H_2O} < T < T_{liq}^{H_2O}$ (b) $T < T_{sol}^{H_2O}$

FIGURE 7.2 – Mise en évidence d'eau potentiellement solide ou liquide dans l'écoulement en DNS avec un maillage contenant 150 cellules dans l'épaisseur de la lèvre (H150). À $P = 10.0$ MPa, $T_{sol}^{H_2O} = 272.4$ K et $T_{liq}^{H_2O} = 584.15$ K.

numérique, nous devons encore statuer si la diffusion non-idéale joue un rôle important ou non dans le cas de flammes LOx/CH_4. En effet, si les simulations réalisées au cours de cette thèse sur une couche de mélange non réactive tendent à montrer que la prise en compte de celle-ci n'affecte que peu les résultats dans le cas d'un mélange à basse température et haute pression (conditions cryogéniques), rien ne garantit que c'est bien le cas en présence d'une flamme. Or, comme évoqué dans le chapitre 5, la formulation actuelle des flux de diffusion employée dans cette thèse n'est pas satisfaisante et ne permet pas la prise en compte d'effets non-idéaux de diffusion dans le cas d'un écoulement réactif, de manière stable. Pour ce faire, il faudrait réécrire les flux de diffusion sous une autre forme décrite dans [89] (voir section 5.5.3.3), adaptée à la prise en compte de ces effets non-idéaux, ce qui nécessiterait des développements de code assez conséquents dans SiTCom-B. On pourrait toutefois s'attendre à ce que la prise en compte de

ces effets de diffusion non-idéale ait un rôle à jouer, mais que leur influence soit du second ordre par rapport à la prise en compte d'une chimie non infiniment rapide par exemple.

Un autre point important est la mise à l'échelle des simulations numériques. En effet, celles réalisées au cours de cette thèse n'ont été réalisées que sur des domaines de relativement petite taille, allant du dixième de millimètre (chapitres 3 et 4) à quelques millimètres (chapitres 4, 5 et 6), essentiellement en DNS et en 2D. Or si l'on prend l'exemple du banc MASCOTTE dans sa configuration mono-injecteur [347], la longueur de la flamme est de l'ordre de la dizaine de centimètres dans une section carrée de 5 cm de côté. On comprend alors bien tout l'intérêt de développer une méthode LES performante pour pouvoir simuler des flammes LOx/CH_4 sur des domaines aussi grands (par rapport à ceux simulés dans cette thèse), la DNS étant hors de portée à l'heure actuelle sur des échelles aussi importantes. C'est pourquoi le dernier chapitre de cette thèse s'est intéressé de près à la problématique de comment préserver le maximum de phénomènes physiques observés en DNS, mais à moindre coût avec une approche LES. Si l'utilisation du modèle TFLES conditionné aux flammes de prémélange a montré sa capacité à améliorer notre prédictibilité de la physique prédite par la DNS, la version employée de ce modèle-ci dans cette thèse reste néanmoins perfectible. En effet, pour mieux préserver l'interaction entre la chimie et la turbulence lors de l'emploi du modèle TFLES, l'utilisation d'une fonction d'efficacité [57] afin d'augmenter la vitesse de flamme turbulente pour compenser la perte de surface de la flamme, pourrait être employée avec l'approche de Charlette *et al.* [45, 46]. Toutefois, comme indiqué dans la section 2.3.7.2, la connaissance *a priori* d'une vitesse de flamme laminaire S_L est nécessaire. Or comme les conditions locales du prémélange qui peuvent se former dans un écoulement où les ergols sont injectés séparément ne sont pas connues *a priori* (richesse et température locale), il est difficile d'estimer S_L, d'autant plus que celle-ci varie beaucoup selon que le prémélange est dans l'état supercritique ou de liquide compressé (voir 5.5.3.1). On pourrait cependant envisager de calculer S_L pour différentes richesses et températures sur des flammes 1D, puis de tabuler les valeurs obtenues en fonction d'une grandeur caractéristique du mélange local (fraction de mélange par exemple) et de l'enthalpie pour prendre en compte les effets thermiques. On aurait alors une prescription *a priori* de S_L plus représentative des conditions que l'on peut observer localement au sein d'un écoulement complexe. Une autre amélioration possible du modèle TFLES, proposée par Poncet *et al.* [295], serait de venir corriger les coefficients de diffusion des espèces ainsi que le facteur pré-exponentiel d'Arrhenius d'une certaine valeur (évaluée par simulation de flamme sphérique 1D), afin de préserver la longueur de Markstein lors de l'application du facteur d'épaississement et ainsi préserver les effets d'étirement sur la vitesse de flamme. Cela permettrait certainement de mieux conserver l'interaction entre la chimie et la turbulence pour des maillages plus grossiers.

Toutefois, quand bien même nous disposerions d'une meilleure modélisation de l'interaction chimie-turbulence, il resterait à trouver comment réduire le coût CPU des simulations pour les rendre plus accessibles. Si l'inclusion d'une chimie détaillée, même réduite comme dans cette thèse, reste un vrai challenge pour simuler entièrement par LES le banc MASCOTTE en configuration mono-injecteur, une telle approche pour la simulation complète d'une configuration multi-injecteurs semble hors de portée à l'heure actuelle. Or dans un vrai générateur de gaz ou dans la chambre de combustion principale d'un moteur-fusée, c'est bien l'interaction entre les différents injecteurs et les parois de la chambre qui peuvent entraîner des instabilités de combustion et éventuellement provoquer la ruine du moteur. Il est donc essentiel de pouvoir étudier

et quantifier précisément le couplage entre l'acoustique et la flamme. Il devient alors crucial de trouver un moyen de réduire le temps de calcul nécessaire à la réalisation de simulations numériques aussi complexes.

Une première idée afin d'accélérer les calculs serait d'implémenter une méthode de préconditionnement telle que celle recommandée par Zong et Yang [426]. En effet, une telle méthode de préconditionnement permet à la fois de stabiliser les calculs mais également de réduire le temps de calcul nécessaire lors des simulations mettant en jeu des écoulements à basse vitesse, ce qui est le cas ici.

Sur la partie chimie, on peut également envisager différentes approches afin de réduire les temps de calculs. En effet, l'un des problèmes rencontrés dans les simulations de la couche de mélange réactive du chapitre 6 est que l'avancement en temps d'une itération se faisait au pas de temps chimique (le pas de temps limitant ici) plutôt qu'au pas de temps limité par les nombres de CFL ou de Fourier. Afin de pallier à ce problème, plusieurs méthodes sont envisageables. Une première approche serait par exemple de linéariser les termes sources des espèces chimiques les plus limitantes à la manière de Belhi [9] ou encore de Blanchard [19]. Une alternative à cette approche serait de considérer une approche hybride entre la chimie tabulée et la chimie transportée, à la manière du modèle HTTC [74,75,311] décrit dans la section 1.2.3.4. Toutefois, le pas de temps chimique du méthane restant très faible (de l'ordre de quelques ns) dans les conditions thermodynamiques étudiées. Par conséquent, même si ces deux premières approches permettent éventuellement de gagner un ordre de grandeur voir deux en temps de calcul (ce qui est bien entendu déjà non négligeable), elles ne sont peut-être pas suffisantes pour simuler efficacement des configurations semi-industrielles à grande échelle. Une autre approche serait d'impliciter partiellement ou intégralement la chimie, avec une librairie permettant l'intégration de la chimie raide (*stiff chemistry*) comme CVODE par exemple. Cela pourrait avoir un intérêt dans le cas où plusieurs ordres de grandeurs entre les pas de temps chimique et ceux basés sur le CFL ou le Fourier sont en jeu de façon à compenser la perte de temps de calcul dépensée lors de l'intégration avec un schéma implicite. Il faudrait cependant s'assurer que la perte de précision induite par une intégration implicite de la chimie n'engendre pas trop d'erreurs. Enfin, une dernière alternative que l'on pourrait envisager serait de recourir à l'emploi d'intelligence artificielle avec l'intégration de réseaux de neurones convolutifs (CNNs) pour estimer les termes sources chimiques [246,401,402], comme introduit dans la section 1.2.3.5. Cette approche pourrait permettre de conserver pleinement les effets de chimie détaillée à moindre coût, mais nécessite des développement assez conséquents dans le code SiTCom-B et des études supplémentaires. Cette perpective pourrait toutefois faire l'objet d'un autre sujet de thèse.

Annexe A

Expression des potentiels chimiques

A.1 Équation d'état avec approche gaz réel

Dans la section 2.1.2.2, nous avons vu qu'une équation d'état cubique peut se mettre sous une forme généralisée (voir Éq. (2.10)) :

$$P = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W - b\rho} - \frac{\rho^2 a\alpha(\omega,\ T)}{W^2 + ubW\rho + wb^2\rho^2} \ , \tag{A.1}$$

que l'on peut également mettre sous la forme (voir Éq. (2.11)) :

$$P = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W - b\rho} - \frac{\rho^2 a\alpha(\omega,\ T)}{(W + \delta_1 b\rho)(W + \delta_2 b\rho)} \ , \tag{A.2}$$

avec :

$$\delta_1 = \frac{u}{2} + \sqrt{\frac{u^2}{4} - w} \quad \text{et} \quad \delta_2 = \frac{u}{2} - \sqrt{\frac{u^2}{4} - w} \ , \tag{A.3}$$

les valeurs des couples $(u,\ w)$ et $(\delta_1,\ \delta_2)$ étant donnés dans la Tab. 2.1.

Par ailleurs, l'expression des termes $a\alpha$ et b pouvant s'écrire :

$$a\alpha = \sum_{i=1}^{N_{sp}} \sum_{j=1}^{N_{sp}} X_i X_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j}(1 - \kappa_{i,j}) \quad \text{et} \quad b = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k b_k \ , \tag{A.4}$$

et sachant que :

$$X_k = \frac{W}{W_k} Y_k \ , \tag{A.5}$$

en posant $(a\alpha)^* = a\alpha/W^2$ et $b^* = b/W$, on obtient alors :

$$(a\alpha)^* = \sum_{i=1}^{N_{sp}} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i}{W_i} \frac{Y_j}{W_j} = \frac{a\alpha}{W^2} \quad \text{et} \quad b^* = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} b_k = \frac{b}{W} \ . \tag{A.6}$$

Si on pose également $v' = 1/\rho$ (v' étant le volume massique), l'Éq. (A.2) peut finalement s'écrire :

$$P = \frac{\mathcal{R} T}{W(v' - b^*)} - \frac{(a\alpha)^*}{(v' + \delta_1 b^*)(v' + \delta_2 b^*)} \ . \tag{A.7}$$

A.2 Expression pour l'énergie interne massique e_k de l'espèce k

A.2.1 Expression pour l'énergie interne massique e du mélange

En posant la fonction Φ comme étant la différence entre la pression calculée par une approche gaz réel P^{RG} et la pression calculée par une approche gaz parfait P^{IG}, i.e. :

$$\Phi = P^{\mathrm{RG}} - P^{\mathrm{IG}} \ , \tag{A.8}$$

on obtient :

$$\Phi = \frac{\mathcal{R}T}{W}\left(\frac{1}{v'-b^*} - \frac{1}{v'}\right) - \frac{(a\alpha)^*}{(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \ . \tag{A.9}$$

La connaissance de Φ permet alors de calculer l'énergie interne massique e définie par l'Éq. 2.48 :

$$e = e^{\mathrm{IG}} - \int_{v'}^{\infty} T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\Phi}{T}\right) dv'' \ . \tag{A.10}$$

Or pour cela il est d'abord nécessaire d'évaluer le terme $\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\Phi}{T}\right)$, que l'on calcule en dérivant l'Éq. (A.9) par rapport à la température :

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\Phi}{T}\right) = \frac{-1}{T}\frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} + \frac{1}{T^2}\frac{(a\alpha)^*}{(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \ , \tag{A.11}$$

ce qui nous amène à :

$$e = e^{\mathrm{IG}} + \left(T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*\right)\int_{v'}^{\infty} \frac{dv''}{(v''+\delta_1 b^*)(v''+\delta_2 b^*)} \ . \tag{A.12}$$

Il est alors nécessaire d'évaluer l'intégrale dans l'Éq. (A.12) :

$$\begin{aligned}
\int_{v'}^{\infty} \frac{dv''}{(v''+\delta_1 b^*)(v''+\delta_2 b^*)} &= \int_{v'}^{\infty} \frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\left(\frac{1}{v''+\delta_2 b^*} - \frac{1}{v''+\delta_1 b^*}dv''\right) \\
&= \frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\left(\int_{v'}^{\infty}\frac{1}{v''+\delta_2 b^*}dv'' - \int_{v'}^{\infty}\frac{1}{v''+\delta_1 b^*}dv''\right) \\
&= \frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\left(-\ln(v'+\delta_2 b^*) + \ln(v'+\delta_1 b^*)\right) \\
&= \frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ .
\end{aligned} \tag{A.13}$$

On obtient finalement :

$$e = e^{\mathrm{IG}} + \frac{T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \tag{A.14}$$

A.2.2 Expression de e_k

En écrivant $e_k = \left.\frac{\partial e}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}}$, il vient :

$$\begin{aligned} e_k = e_k^{\mathrm{IG}} &+ \frac{T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*}{b^*(\delta_1-\delta_2)} \frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right)\right) \\ &+ \left[\frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*\right) + \frac{T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*}{\delta_1-\delta_2}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{b^*}\right)\right. \\ &\left. + \frac{T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*}{b^*}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{\delta_1-\delta_2}\right)\right] \ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.15}$$

L'Éq. (A.15) peut alors être simplifiée en exprimants certains de ces termes. En effet, d'une part on a :

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*\right) = T\frac{\partial^2 (a\alpha)^*}{\partial Y_k \partial T} - \frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k} \ , \tag{A.16}$$

et d'autre part on a :

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{b^*}\right) = -\frac{b_k}{W_k b^{*2}} = -\frac{b_k^*}{b^{*2}} \ , \quad \text{en posant} \quad b_k^* = b_k/W_k \ . \tag{A.17}$$

Par ailleurs, en supposant également que :

$$\frac{\partial \delta_1}{\partial Y_k} = \frac{\partial \delta_2}{\partial Y_k} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{\delta_1-\delta_2}\right) = 0 \ , \tag{A.18}$$

ce qui est le cas pour SRK ou PR (δ_1 et δ_2 ne dépendent pas de l'espèce k et sont des constantes pour le mélange), mais pas nécessairement pour d'autres équations d'états cubiques. On obtient ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right)\right) = \frac{v' b_k^* (\delta_1-\delta_2)}{(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \ . \tag{A.19}$$

On obtient finalement une expression simplifiée de e_k :

$$\begin{aligned} e_k = e_k^{\mathrm{IG}} &+ \left(T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*\right)\frac{v' b_k^*}{b^*(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \\ &+ \left[\frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\left(T\frac{\partial^2 (a\alpha)^*}{\partial Y_k \partial T} - \frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k}\right)\right. \\ &\left. - \frac{b_k^*}{b^{*2}(\delta_1-\delta_2)}\left(T\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T} - (a\alpha)^*\right)\right] \ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.20}$$

A.3 Expression de l'entropie massique s_k de l'espèce k

A.3.1 Expression de l'entropie massique s du mélange

En réinjectant l'expression de Φ (voir Éq. (A.9)) dans l'Éq. (2.50), on obtient :

$$s = s^{\mathrm{IG}} - \int_{v'}^{\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial T} dv'' \ . \tag{A.21}$$

Or l'intégrale nécessite de connaitre l'expression du terme $\frac{\partial \Phi}{\partial T}$:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T} = \frac{\mathcal{R}}{W}\left(\frac{1}{v'-b^*} - \frac{1}{v'}\right) - \frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \ , \tag{A.22}$$

ce qui après calcul, nous donne :

$$s = s^{\mathrm{IG}} + \frac{\mathcal{R}}{W}\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right) + \frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \tag{A.23}$$

A.3.2 Calcul de s_k

En écrivant $s_k = \left.\frac{\partial s}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}}$, on a :

$$\begin{aligned} s_k = s_k^{\mathrm{IG}} &+ \mathcal{R}\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right)\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{W}\right) + \frac{\mathcal{R}}{W}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right)\right) \\ &+ \frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right)\right) \\ &+ \left[\frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}\right) + \frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{\delta_1-\delta_2}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{b^*}\right)\right. \\ &\left. + \frac{\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}}{b^*}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{\delta_1-\delta_2}\right)\right]\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.24}$$

Comme,

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right)\right) = -\frac{b_k^*}{v'-b^*} \tag{A.25}$$

et

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N}\frac{Y_k}{W_k} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{1}{W}\right) = \frac{1}{W_k} \ , \tag{A.26}$$

on obtient alors en réinjectant les équations (A.18), (A.19), (A.25) et (A.26) dans l'Éq. (A.24) :

$$\begin{aligned} s_k = s_k^{\mathrm{IG}} &+ \frac{\mathcal{R}}{W_k}\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right) - \frac{\mathcal{R}b_k^*}{W(v'-b^*)} + \frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}\frac{v'b_k^*}{b^*(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} \\ &+ \left[\frac{1}{b^*(\delta_1-\delta_2)}\frac{\partial^2 (a\alpha)^*}{\partial Y_k \partial T} - \frac{b_k^*}{{b^*}^2(\delta_1-\delta_2)}\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial T}\right]\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.27}$$

A.4 Expression de l'enthalpie libre de Gibbs g_k

A.4.1 Calcul de g_k

Par la relation de Gibbs, on peut écrire l'enthalpie libre de Gibbs massique g_k (autrement appelé potentiel chimique molaire de l'espèce k) comme :

$$g_k = \left.\frac{\partial e}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}} - T\left.\frac{\partial s}{\partial Y_k}\right|_{T,\rho,Y_{j\neq k}} = e_k - Ts_k \ . \tag{A.28}$$

C'est-à-dire ici :

$$g_k = e_k^{\mathrm{IG}} - Ts_k^{\mathrm{IG}} - \frac{\mathcal{R}T}{W_k}\ln\left(1-\frac{b^*}{v'}\right) + \frac{\mathcal{R}Tb_k^*}{W(v'-b^*)} - \frac{(a\alpha)^* b_k^* v'}{b^*(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} + \frac{(a\alpha)^* b_k^* - b^*\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k}}{b^{*2}(\delta_1-\delta_2)}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) . \tag{A.29}$$

Dans l'Éq. (A.29), on peut exprimer l'entropie d'un gaz parfait s_k^{IG} comme suit :

$$\begin{aligned} s_k^{\mathrm{IG}} = s_k^{\mathrm{IG}}(T,P,Y_k) =& s_k^{\mathrm{IG}}(T,P^\circ) - \frac{\mathcal{R}}{W_k}\ln\left(\frac{Y_k W}{W_k}\frac{P}{P^\circ}\right) \\ =& s_k^{\mathrm{IG}}(T,P^\circ) - \frac{\mathcal{R}}{W_k}\left[\ln(X_k) + \ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right)\right] \\ =& s_k^{\mathrm{IG}\circ} - \frac{\mathcal{R}}{W_k}\left[\ln(X_k) + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ v' W}\right)\right] . \end{aligned} \tag{A.30}$$

Par ailleurs, comme $e_k^{\mathrm{IG}} = e_k^{\mathrm{IG}}(T,Y_k) = e_k^{\mathrm{IG}\circ}$ où l'exposant "$\circ$" désigne la pression standard, on obtient finalement :

$$g_k = g^{\mathrm{IG}\circ} + \frac{\mathcal{R}T}{W_k}\left[\ln(X_k) + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{(v'-b^*)P^\circ W}\right)\right] + \frac{\mathcal{R}Tb_k^*}{W(v'-b^*)} - \frac{(a\alpha)^* b_k^* v'}{b^*(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} + \frac{(a\alpha)^* b_k^* - b^*\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k}}{b^{*2}(\delta_1-\delta_2)}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) . \tag{A.31}$$

A.5 Calcul du potentiel chimique molaire adimensionné μ_k

A.5.1 Expression de μ_k en fonction du volume massique v'

Le potentiel chimique molaire adimensionné μ_k de l'espèce k s'écrivant [102] :

$$\mu_k = \frac{g_k W_k}{\mathcal{R}T} , \tag{A.32}$$

on peut en déduire :

$$\mu_k = \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{RT}{(v'-b^*)P^\circ W}\right) + \frac{W_k b_k^*}{W(v'-b^*)} - \frac{W_k (a\alpha)^* b_k^* v'}{\mathcal{R}Tb^*(v'+\delta_1 b^*)(v'+\delta_2 b^*)} + \frac{(a\alpha)^* b_k^* - b^*\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k}}{b^{*2}(\delta_1-\delta_2)}\frac{W_k}{\mathcal{R}T}\ln\left(\frac{v'+\delta_1 b^*}{v'+\delta_2 b^*}\right) . \tag{A.33}$$

A.5.1.1 Application dans le cas de l'équation d'état SRK

Dans le cas de l'équation d'état SRK, comme $\delta_1 = 1$ et $\delta_2 = 0$, l'Éq. (A.33) devient :

$$\mu_k^{SRK} = \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{RT}{(v'-b^*)P^\circ W}\right) + \frac{W_k b_k^*}{W(v'-b^*)} - \frac{W_k (a\alpha)^* b_k^*}{\mathcal{R}Tb^*(v'+b^*)} + \frac{(a\alpha)^* b_k^* - b^*\frac{\partial (a\alpha)^*}{\partial Y_k}}{b^{*2}}\frac{W_k}{RT}\ln\left(1+\frac{b^*}{v'}\right) , \tag{A.34}$$

ce qui est conforme avec le résultat de Giovangigli [102].

A.5.2 Expression de μ_k en fonction de la masse volumique ρ

Il est également possible d'écrire l'Éq. (A.33) en fonction de la masse volumique ρ, ainsi que des paramètres $a\alpha$, b et b_k au lieu des paramètres $(a\alpha)^*$, b^* et b_k^* :

$$\begin{aligned}\mu_k = \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{RT}{(\frac{1}{\rho}-\frac{b}{W})P^\circ W}\right) + \frac{b_k}{W(\frac{1}{\rho}-\frac{b}{W})} - \frac{a\alpha b_k}{W\mathcal{R}Tb\rho(\frac{1}{\rho}+\delta_1\frac{b}{W})(\frac{1}{\rho}+\delta_2\frac{b}{W})} \\ + W^2\frac{\frac{a\alpha}{W^2}\frac{b_k}{W_k} - \frac{b}{W}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)}{b^2(\delta_1-\delta_2)}\frac{W_k}{\mathcal{R}T}\ln\left(\frac{\frac{1}{\rho}+\delta_1\frac{b}{W}}{\frac{1}{\rho}+\delta_2\frac{b}{W}}\right) ,\end{aligned} \tag{A.35}$$

ce qui donne après simplification :

$$\begin{aligned}\mu_k = \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\rho\mathcal{R}T}{P^\circ(W-b\rho)}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\delta_1 b\rho)(W+\delta_2 b\rho)} \\ + \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2(\delta_1-\delta_2)}\left[a\alpha b_k - bWW_k\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)\right]\ln\left(\frac{W+\delta_1 b\rho}{W+\delta_2 b\rho}\right) .\end{aligned} \tag{A.36}$$

Il ne reste alors plus qu'à déterminer l'expression du terme $\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)$.

A.5.3 Expression du terme $\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)$

A.5.3.1 Cas où $\kappa_{i,j} = 0$

Dans le cas particulier où $\forall\ (i,j) \in [\![1, N_{sp}]\!]^2,\ \kappa_{i,j} = 0$, l'Éq. (A.4) devient :

$$\begin{aligned}\frac{a\alpha}{W^2} &= \sum_{i=1}^{N_{sp}}\sum_{j=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\frac{Y_j}{W_j}\sqrt{(a\alpha)_i(a\alpha)_j} \\ &= \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i}\right)\left(\sum_{j=1}^{N_{sp}}\frac{Y_j}{W_j}\sqrt{(a\alpha)_j}\right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i}\right)^2 .\end{aligned} \tag{A.37}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right) &= \frac{\partial}{\partial Y_k}\left[\left(\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i}\right)^2\right] \\ &= 2\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{Y_k}{W_k}\sqrt{(a\alpha)_k}\right)\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i} \\ &= 2\frac{\sqrt{(a\alpha)_k}}{W_k}\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i} .\end{aligned} \tag{A.38}$$

Et comme $\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right) > 0$ ainsi que $\forall\ i \in [\![1, N_{sp}]\!]\ (a\alpha_i)_i > 0$:

$$\sum_{i=1}^{N_{sp}}\frac{Y_i}{W_i}\sqrt{(a\alpha)_i} = \sqrt{\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)} , \tag{A.39}$$

il vient que :

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right) = 2\frac{\sqrt{(a\alpha)_k}}{W_k}\frac{\sqrt{a\alpha}}{W} \ . \tag{A.40}$$

Finalement,

$$\begin{aligned}\mu_k = \ & \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\rho\mathcal{R}T}{P^\circ(W-b\rho)}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\delta_1 b\rho)(W+\delta_2 b\rho)} \\ & + \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2(\delta_1-\delta_2)}\left[a\alpha b_k - 2b\sqrt{(a\alpha)_k}\sqrt{a\alpha}\right]\ln\left(\frac{W+\delta_1 b\rho}{W+\delta_2 b\rho}\right) \ .\end{aligned} \tag{A.41}$$

A.5.3.2 Cas où $\kappa_{i,j} \neq 0$

Dans le cas général où $\kappa_{i,j} \neq 0$, l'expression du terme $\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right)$ est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial Y_k}\left(\frac{a\alpha}{W^2}\right) = 2\frac{\sqrt{(a\alpha)_k}}{W_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\,(1-\kappa_{l,k}) \ . \tag{A.42}$$

En réinjectant l'Éq. (A.42) dans l'Éq. (A.41), on obtient finalement :

$$\begin{aligned}\mu_k = \ & \ln(X_k) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\rho\mathcal{R}T}{P^\circ(W-b\rho)}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\delta_1 b\rho)(W+\delta_2 b\rho)} \\ & + \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2(\delta_1-\delta_2)}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\,(1-\kappa_{l,k})\right] \\ & \times \ln\left(\frac{W+\delta_1 b\rho}{W+\delta_2 b\rho}\right) \ .\end{aligned} \tag{A.43}$$

A.5.4 Expression finale

On peut décomposer le potentiel chimique molaire adimensionné μ_k en une somme de deux termes [102] :

$$\mu_k = \ln(X_k) + \mu_k^{\mathrm{sm}} \ , \tag{A.44}$$

avec :

$$\begin{aligned}\mu_k^{\mathrm{sm}} = & \ln\left(\frac{\rho}{W-b\rho}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\delta_1 b\rho)(W+\delta_2 b\rho)} \\ & + \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2(\delta_1-\delta_2)}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\,(1-\kappa_{l,k})\right] \\ & \times \ln\left(\frac{W+\delta_1 b\rho}{W+\delta_2 b\rho}\right) + \frac{W_k g^{\mathrm{IG}\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \ .\end{aligned} \tag{A.45}$$

On dispose alors d'une grandeur exprimée de manière totalement explicite avec les variables primaires comme ρ et T, et secondaires issues de la thermodynamique des gaz réels comme a ,b, α, etc. En remplaçant les δ_1 et δ_2 par leurs valeurs respectives utilisées via une loi d'état SRK ou PR, on obtient alors le terme correctif gaz réel pour le potentiel chimique utilisable en pratique.

A.5.5 Applications

A.5.5.1 Application au cas SRK

Avec l'équation d'état SRK, comme $\delta_1 = 1$ et $\delta_2 = 0$, on a :

$$\begin{aligned}\mu_k^{\text{sm, SRK}} = &\ln\left(\frac{\rho}{W-b\rho}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k\rho}{\mathcal{R}Tb(W+b\rho)} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\,(1-\kappa_{l,k})\right] \\ &\times \ln\left(1+\frac{b\rho}{W}\right) + \frac{W_k g^{\text{IG}^\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.46}$$

A.5.5.2 Application au cas PR

Avec l'équation d'état PR, comme $\delta_1 = 1+\sqrt{2}$ et $\delta_2 = 1-\sqrt{2}$, on a :

$$\begin{aligned}\mu_k^{\text{sm, PR}} = &\ln\left(\frac{\rho}{W-b\rho}\right) + \frac{b_k\rho}{W-b\rho} - \frac{a\alpha b_k W\rho}{\mathcal{R}Tb(W+\left(1+\sqrt{2}\right)b\rho)(W+\left(1-\sqrt{2}\right)b\rho)} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{R}Tb^2 2\sqrt{2}}\left[a\alpha b_k - 2bW\sqrt{(a\alpha)_k}\sum_{l=1}^{N_{sp}}\frac{Y_l}{W_l}\sqrt{(a\alpha)_l}\,(1-\kappa_{l,k})\right] \\ &\times \ln\left(\frac{W+\left(1+\sqrt{2}\right)b\rho}{W+\left(1-\sqrt{2}\right)b\rho}\right) + \frac{W_k g^{\text{IG}^\circ}}{\mathcal{R}T} + \ln\left(\frac{\mathcal{R}T}{P^\circ}\right) \ . \end{aligned} \tag{A.47}$$

Annexe B

Profils additionnels au chapitre 3

B.1 Trajectoires des simulations stochastiques avec ORCh

La comparaison des trajectoires stochastiques entre le mécanisme chimique détaillé et le mécanisme réduit est illustrée pour les fractions massiques des espèces majoritaires : CH_4, O_2, CO_2, H_2O, H_2 et CO. Les trajectoires des particules en provenance de l'entrée oxydant et de l'entrée combustible sont tracées dans la Fig. B.1 et respectivement dans la Fig. B.2, avec une pression constante $P = 56$ bar et une température $T = 300$ K. Pour ce cas spécifique, de très bonnes concordances sont trouvées.

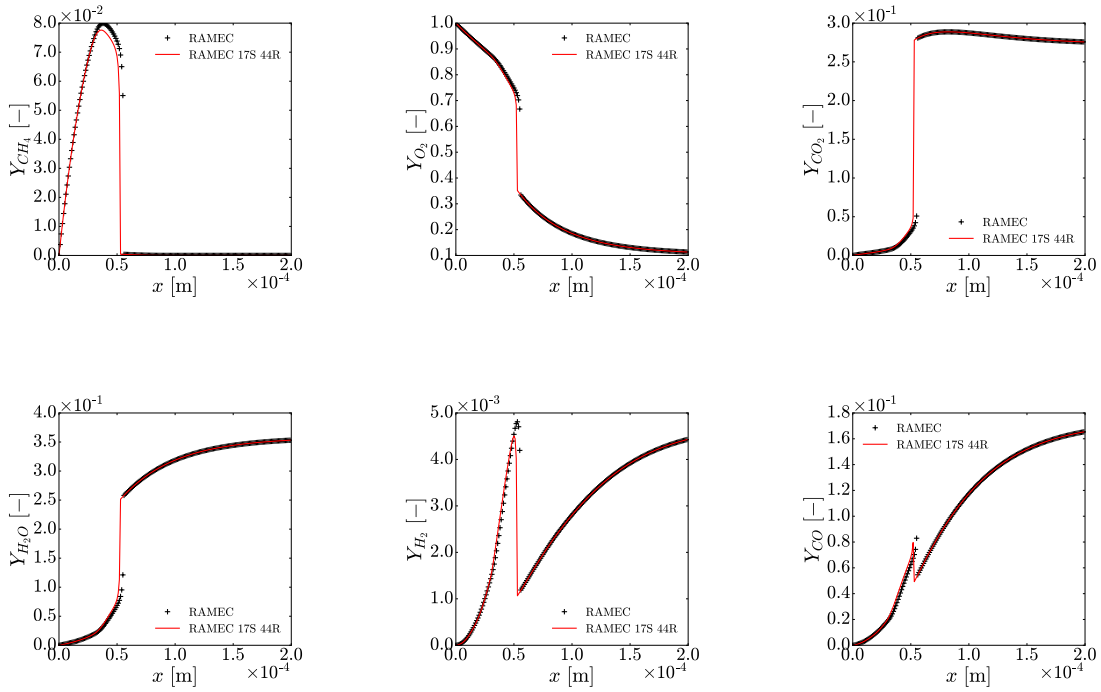


FIGURE B.1 – Trajectoires déterministes des fractions massiques en fonction du temps, en provenance de l'entrée oxydant.

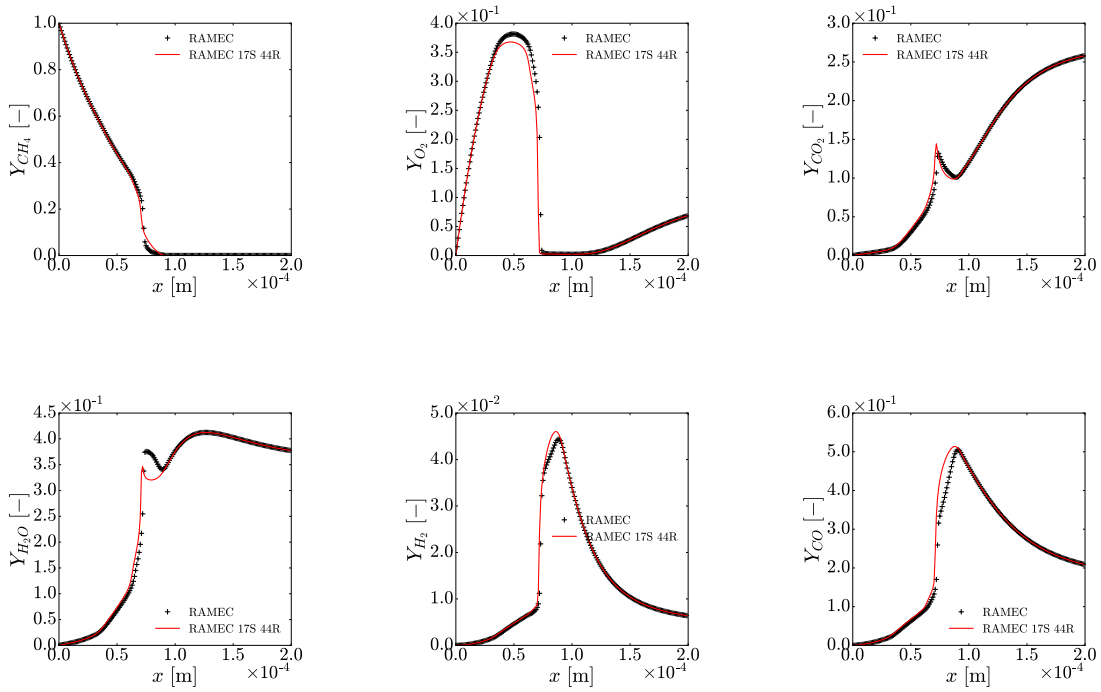


FIGURE B.2 – Trajectoires déterministes des fractions massiques en fonction du temps, en provenance de l'entrée combustible.

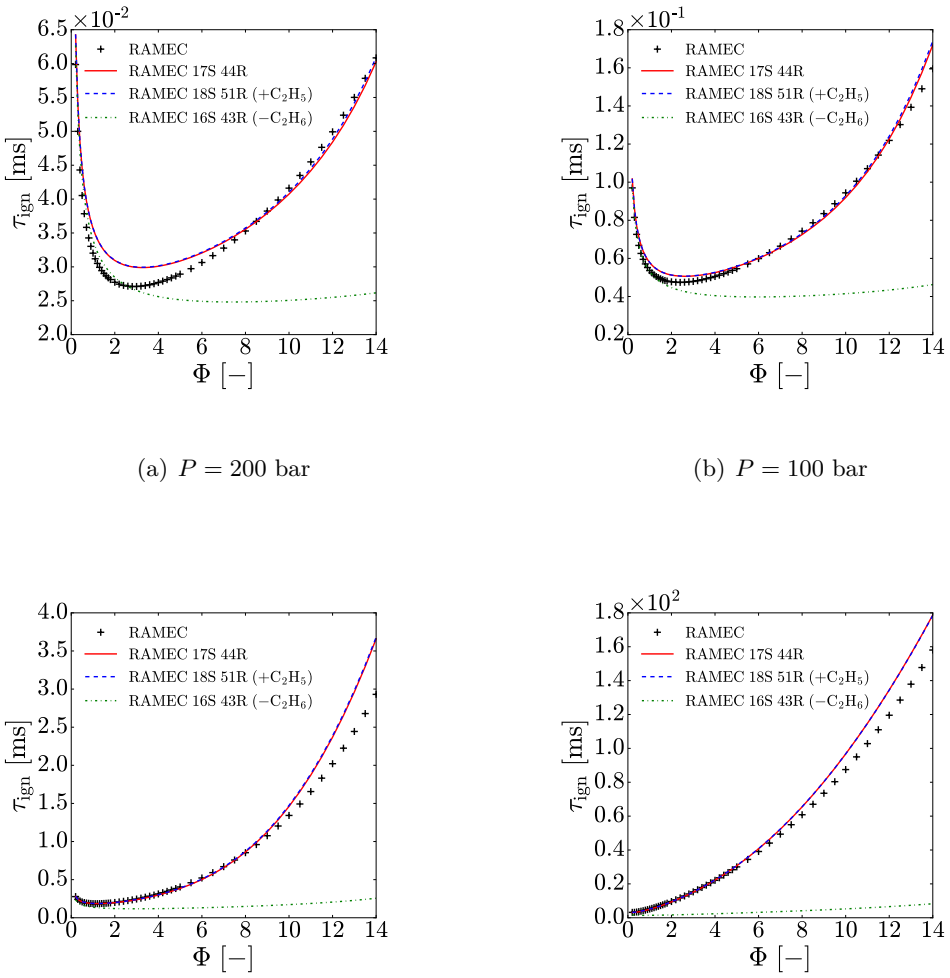
B.2 Temps d'auto-allumage

La comparaison entre les mécanismes chimiques réduit et détaillé est montrée dans la Fig. B.3 pour les temps d'auto-allumage en fonction de la richesse (Φ), à différents niveaux de pression : 1, 10, 100 et 200 bar. Pour $P = 100$ bar et $P = 200$ bar, un maximum de 10 % de différence est trouvé pour $\Phi \in [2, 3]$. Pour $P = 1$ bar et $P = 10$ bar, une différence plus marquée apparait entre les deux mécanismes quand $\Phi > 8$.

B.3 Flammes laminaires prémélangées libres de propagation

La comparaison entre le mécanisme chimique détaillé et sa version réduite est mise en évidence dans la Fig. B.4 pour la vitesse de flamme laminaire et la température des gaz brûlés. Celles-ci sont fonction de la richesse (Φ) et sont données pour différents niveaux de pression : 1, 20 et 100 bar. Pour $P = 1$ bar, la vitesse de flamme S_L est bien capturée par le mécanisme chimique réduit, excepté autour de la stœchiométrie. De plus, pour $\Phi > 3$, une différence autour de 100 K est observée sur la température des gaz brûlés du fait que les mélanges très riches favorisent la formation d'espèces fortement carbonées [75]. De très bons résultats sont obtenus pour $P = 20$ bar et $P = 100$ bar.

Les profils de fractions massiques des espèces sont donnés dans la Fig. B.5 pour une flamme stœchiométrique à $P = 56$ bar, démontrant un très bon accord entre les profils issus des deux mécanismes chimiques réduit et détaillé. Comme supposé dans la section 3.2.1, la fraction massique



(a) $P = 200$ bar

(b) $P = 100$ bar

(c) $P = 20$ bar

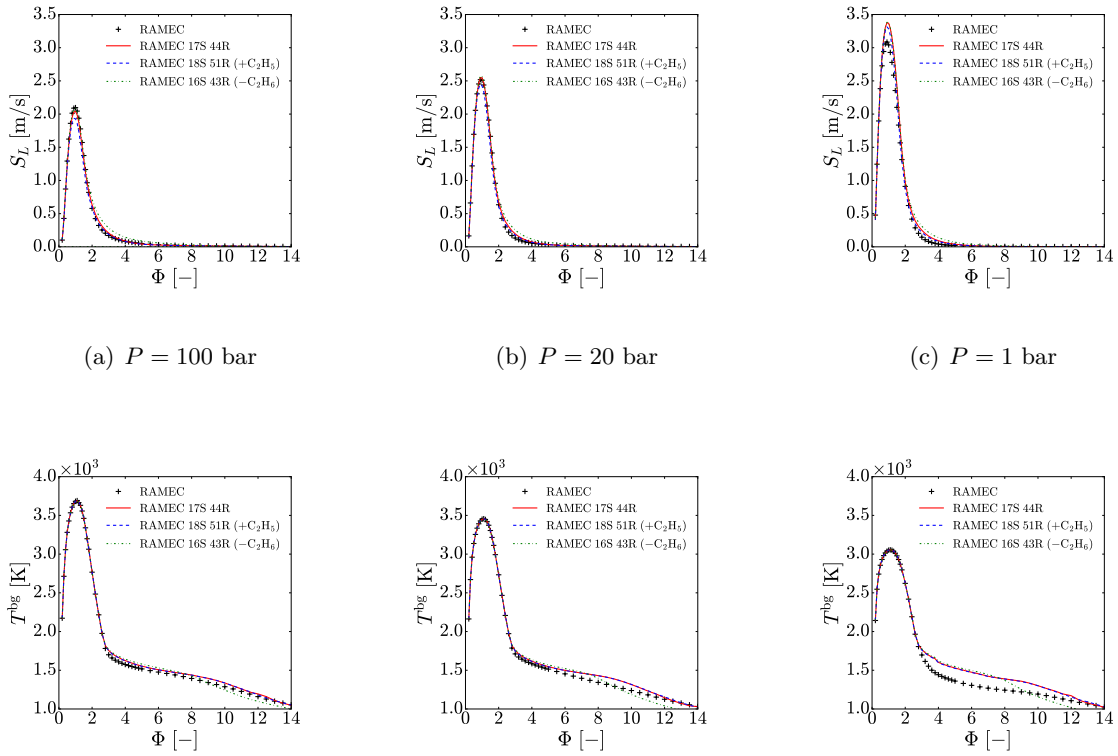
(d) $P = 1$ bar

FIGURE B.3 – Délais d'auto-allumage (τ_{ign}) en fonction de la richesse (Φ). Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

de C_2H_6 est trouvée sur-prédite et l'ajout de C_2H_5 ne permet pas de corriger cette différence. L'ajout d'autres espèces minoritaires pourrait permettre d'obtenir des meilleurs résultats, mais serait contre-productif dans la mesure où cela augmenterait le coût en calculs.

B.4 Flammes de diffusion à contre-courant

Les profils des fractions massiques des espèces minoritaires d'une flamme laminaire de diffusion à contre-courant CH_4/O_2 sont tracés dans la Fig. B.6 avec $P = 56$ bar et $\kappa \simeq 370$ s^{-1} (où κ représente le taux d'étirement), pour les mécanismes chimiques réduit et détaillé. Un très bon



(a) $P = 100$ bar (b) $P = 20$ bar (c) $P = 1$ bar

(d) $P = 100$ bar (e) $P = 20$ bar (f) $P = 1$ bar

FIGURE B.4 – Vitesse de flamme laminaire prémélangée (S_L, haut) et température des gaz brûlés (T^{bg}, bas) en fonction de la richesse (Φ) pour trois pressions constantes : 100 bar (a,d), 20 bar (b,e) et 20 bar (c,f). Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

accord est trouvé entre les deux mécanismes chimiques, excepté pour les espèces C_2H_6, CH_2O, CH_3, CH_3O_2 et CH_3O. Pour CH_3, C_2H_6 and CH_3O, le maximum du pic n'est pas retrouvé, mais la tendance est préservée. Comme indiqué dans [142], si une espèce intermédiaire était essentielle pour la simulation d'un phénomène physique en particulier, comme par exemple la prédiction de suies, elle pourrait être considérée comme une espèce cible lors d'une boucle d'optimisation.

Comme supposé dans la section 3.2.1, la fraction massique de C_2H_6 est de nouveau sur-prédite et l'ajout de C_2H_5 ne permet pas de corriger l'écart observé. L'ajout d'espèces minoritaires pourrait encore une fois améliorer les résultats, mais au détriment d'un coût en calculs plus important. De la même façon, dans la Fig. B.7, on voit que la limite d'extinction de la flamme est bien reproduite par le mécanisme chimique réduit, à l'exception près du cas à basse pression $P = 1$ bar.

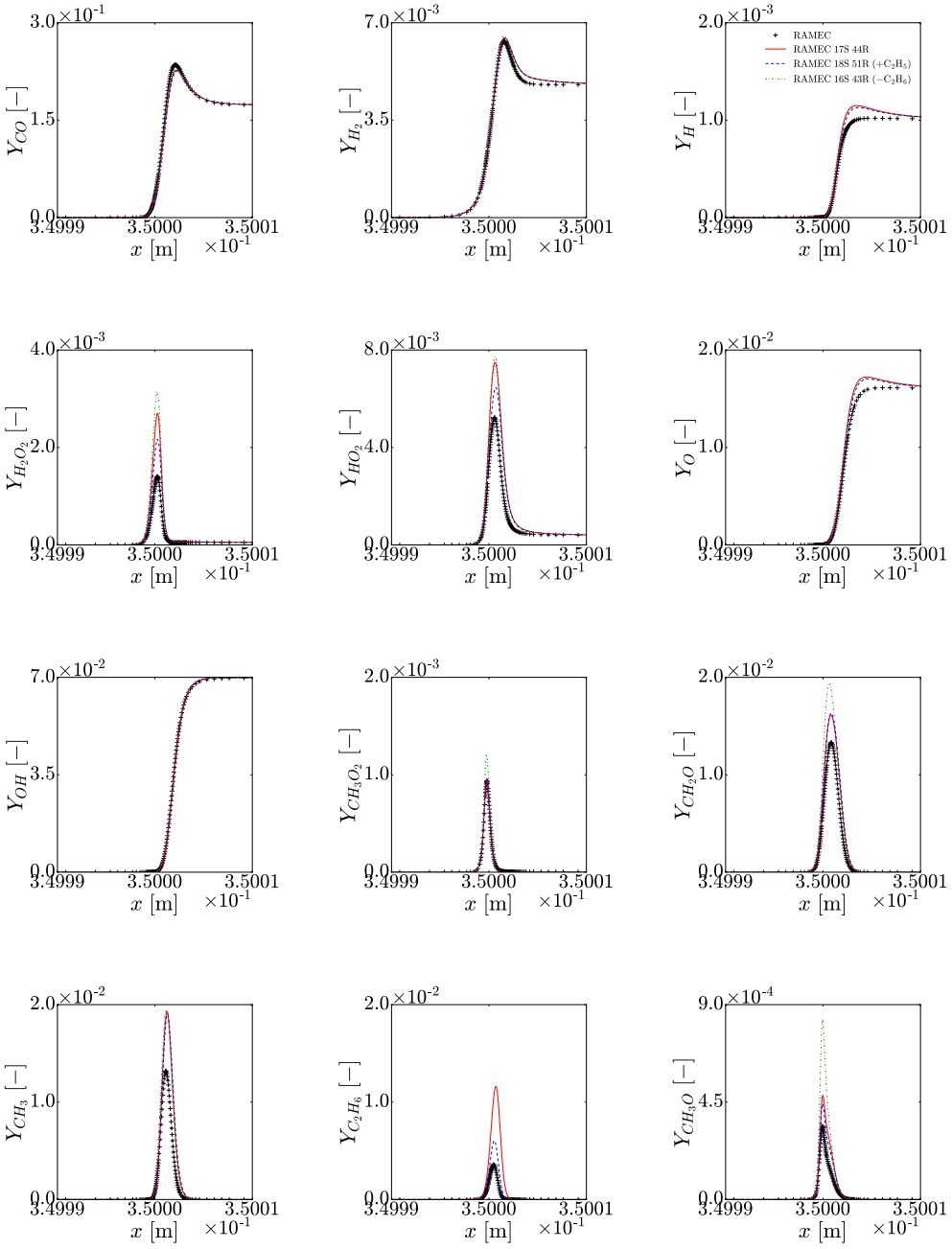


FIGURE B.5 – Structure de flamme prémélangée. Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). Fractions massiques des espèces en fonction de l'axe x. La pression est de $P = 56$ bar. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.

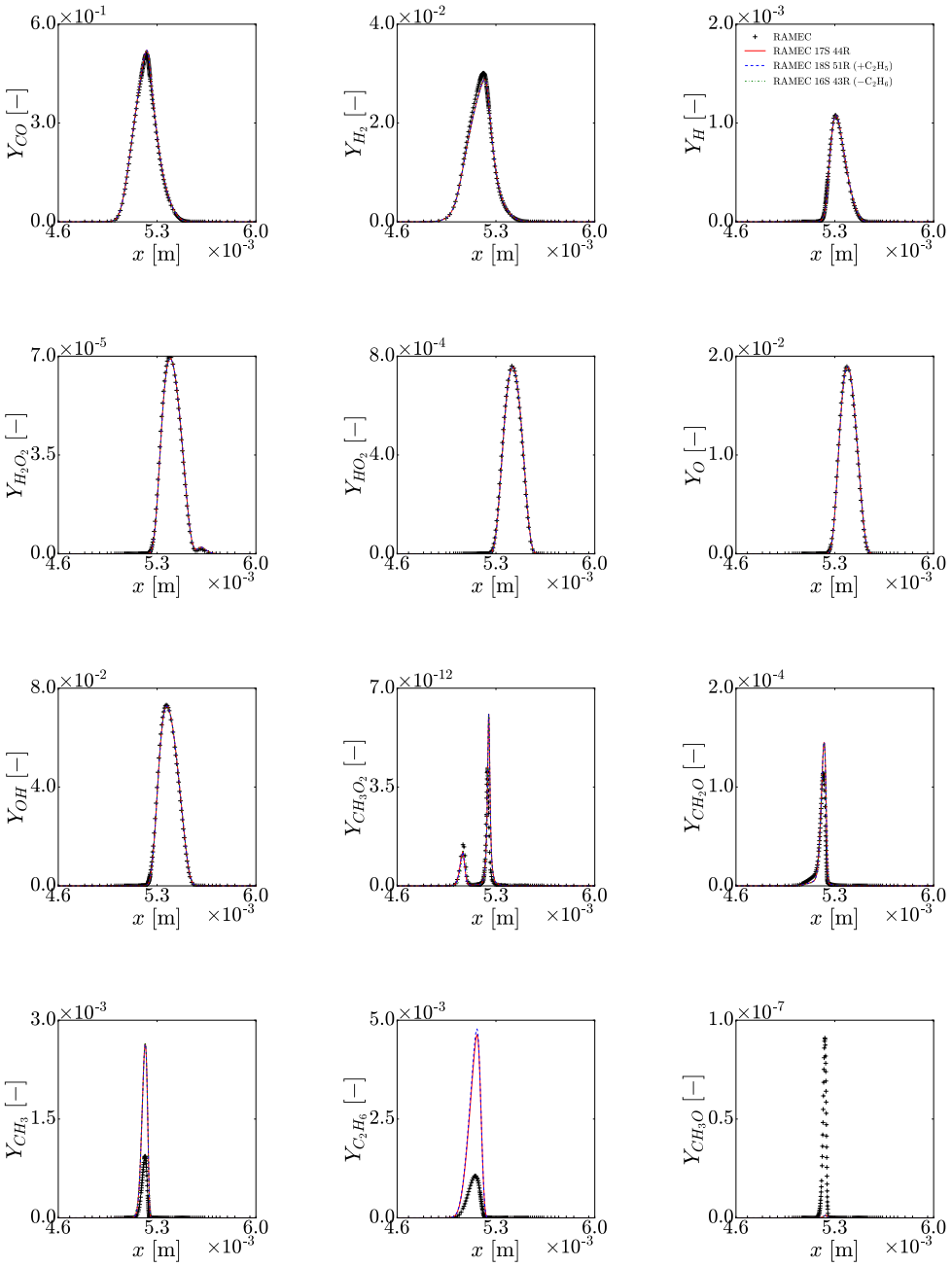
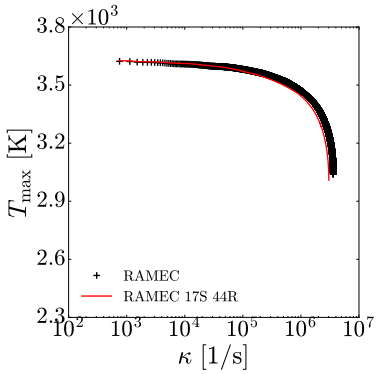
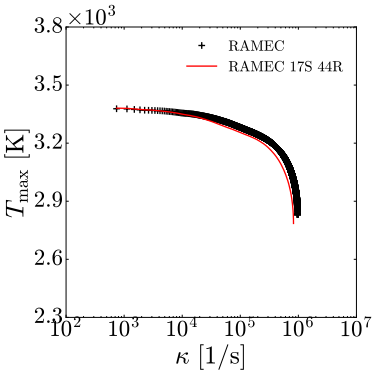


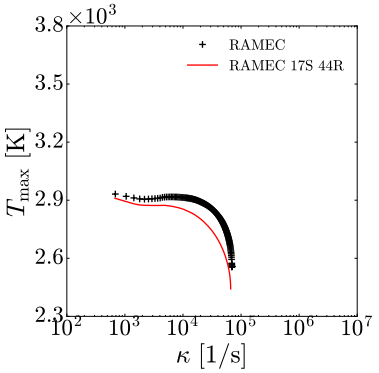
FIGURE B.6 – Structure de flamme laminaire de diffusion à contre-courant. Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). Fractions massiques des espèces en fonction de l'axe x. La pression est de $P = 56$ bar avec un taux d'étirement de $\kappa \simeq 370$ s^{-1}. RAMEC 18S 51R = RAMEC 17S 44R + C_2H_5 et RAMEC 16S 43R = RAMEC 17S 44R − C_2H_6.



(a) $P = 100$ bar



(b) $P = 20$ bar



(c) $P = 1$ bar

FIGURE B.7 – Flammes laminaires de diffusion à contre-courant. Comparaison entre le mécanisme chimique détaillé (RAMEC) et sa version réduite contenant 17 espèces et 44 réactions (RAMEC 17S 44R). Maximum de la température des gaz brûlés (T) en fonction du taux d'étirement (κ).

Annexe C

Suppléments du chapitre 4

C.1 Compléments simulations à $P = 10$ MPa

C.1.1 Simulation 3D du cas #1.1

Le cas #1.1 (4) a également été simulé en 3D, mais sur un domaine d'une longueur $L_{\text{box}} = 1.0 \times 10^{-5}$ m avec 400 cellules dans chaque direction. La taille de maille est donc la même qu'en 2D, à savoir $\Delta x_i = 0.25$ μm. Tous les paramètres numériques sont identiques au cas #1.1 en 2D. La Fig. C.1 illustre la forme de la flamme en 3D qui entoure la poche de méthane quelques temps après l'allumage, grâce une coupe passant par l'axe de symétrie.

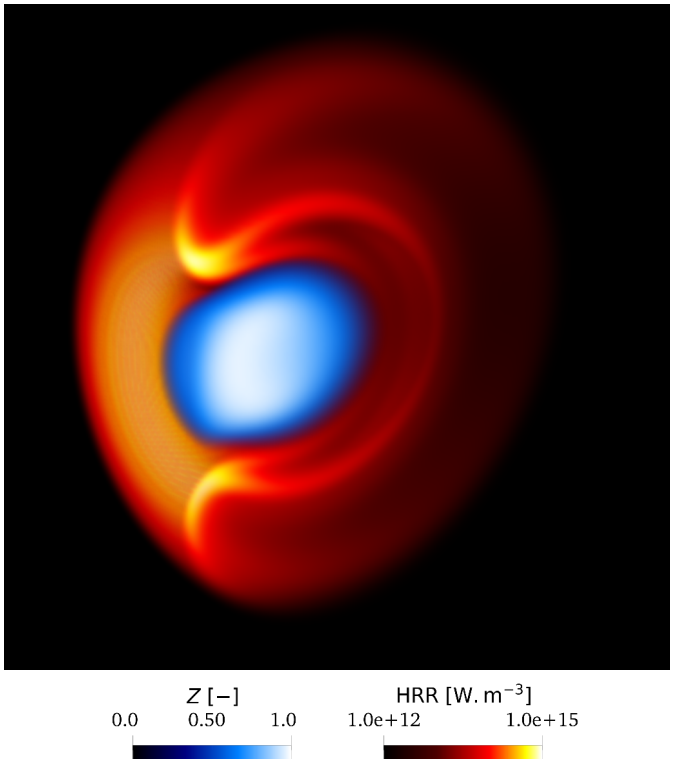


FIGURE C.1 – Visualisation 3D de la flamme (HRR) et de la poche de méthane (Z) par technique de *volume rendering* avec Paraview sur une coupe passant par l'axe de symétrie.

Les résultats dans un plan de coupe sont très similaires aux résultats obtenus en 2D dans ce même plan, la principale hypothèse en 2D venant de la non-sphéricité de la poche de méthane dans la troisième direction. En effet, la turbulence générée par le mouvement des gaz induit par la combustion reste faible ici et c'est généralement la modélisation de la turbulence en 2D qui est l'une des principales sources d'erreur. Cependant, à cause d'un problème informatique entrainant la perte des données de cette simulation 3D, d'autres résultats que ceux proposés par la Fig. C.1 ne seront pas donnés dans cette thèse.

C.1.2 Compléments simulations 2D

Les Fig. C.2 (cas #1.1), C.3 (cas #1.2), C.4 (cas #1.3), C.5 (cas #1.4), C.6 (cas #2.1), C.7 (cas #2.2), C.8 (cas #2.3) et C.9 (cas #2.4) illustrent sous forme de nuage de points colorisés par l'index de flamme afin de caractériser le régime de combustion, la répartition de la température et du taux de dégagement de chaleur (HRR) en fonction de la fraction de mélange Z au cours du temps.

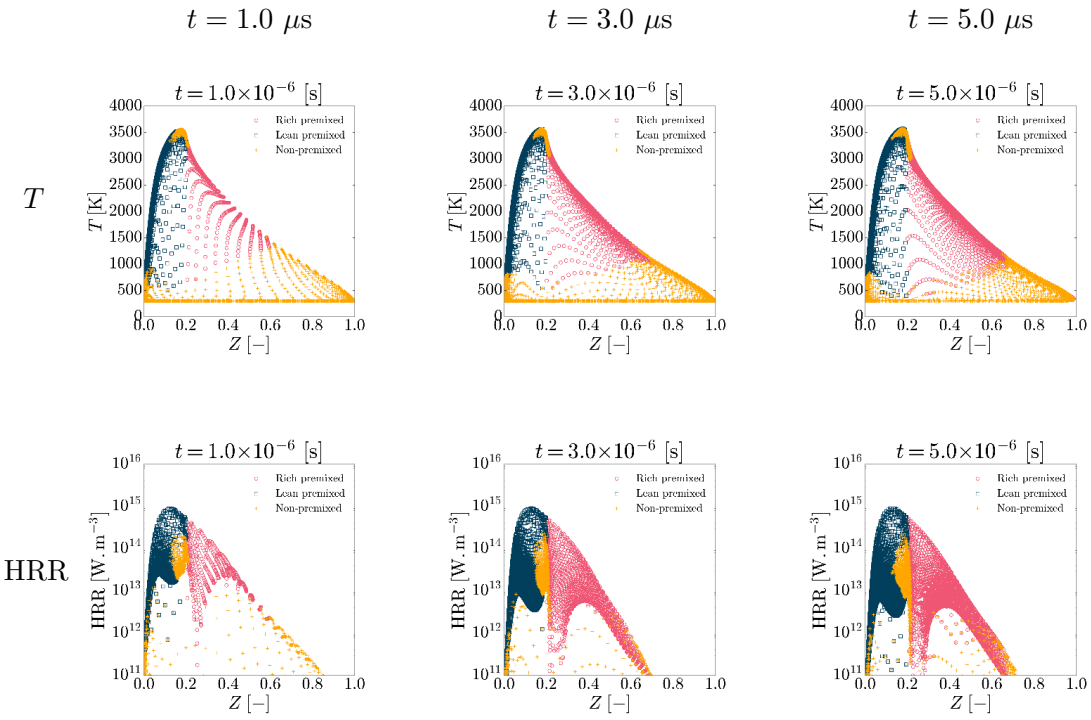
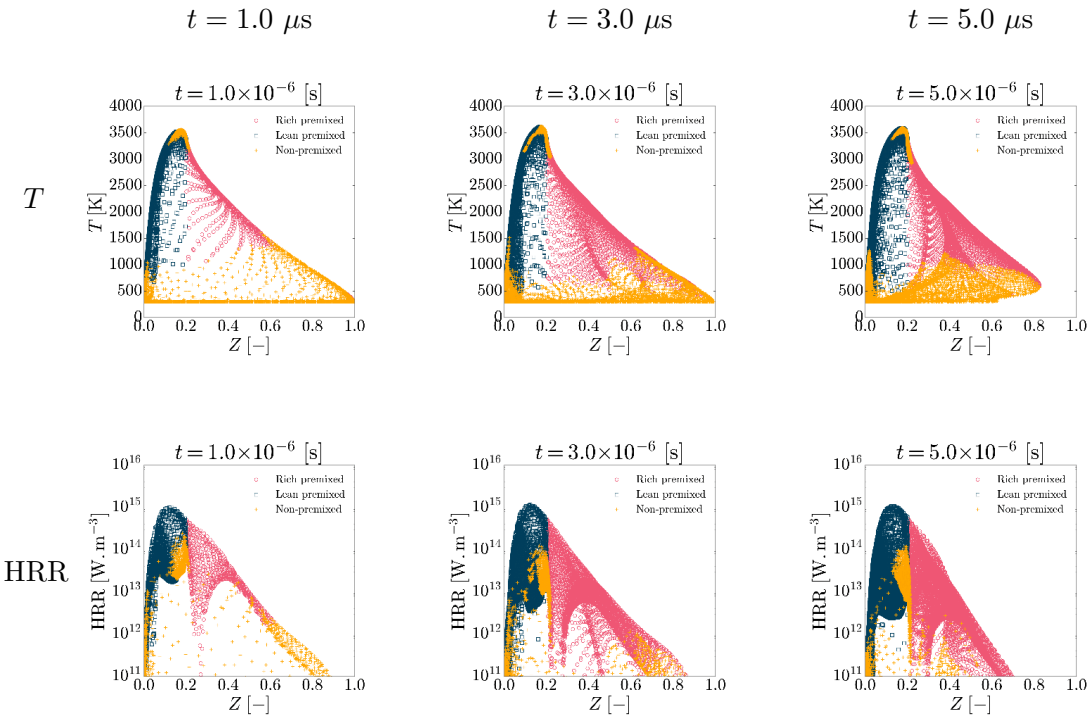
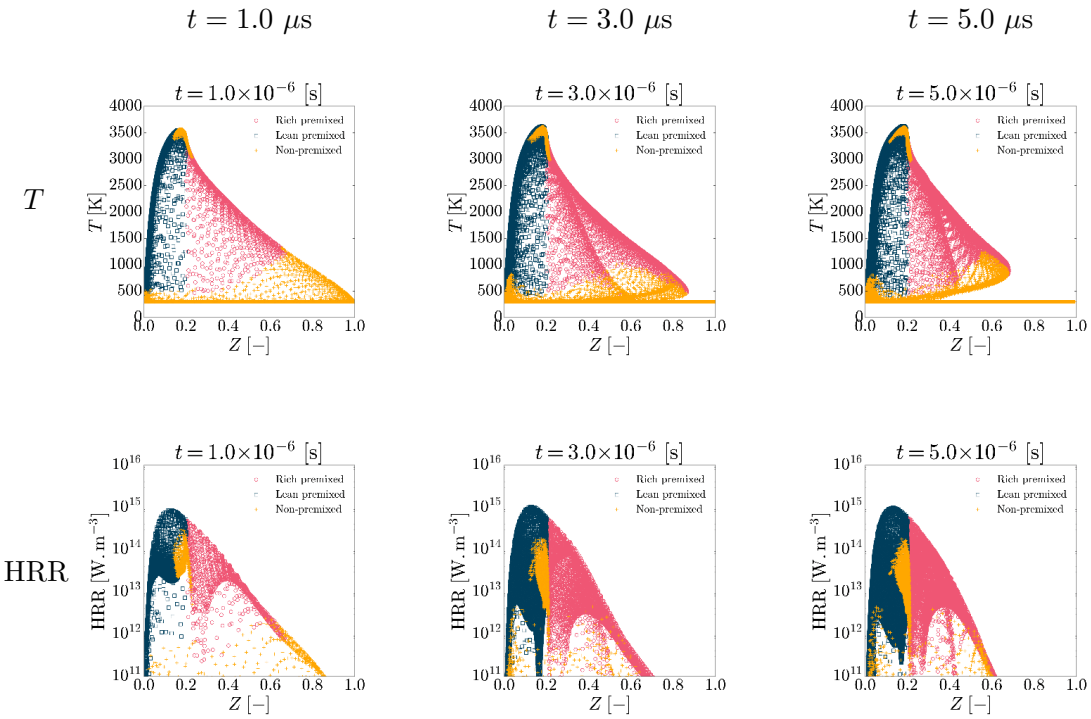


FIGURE C.2 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #1.1. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



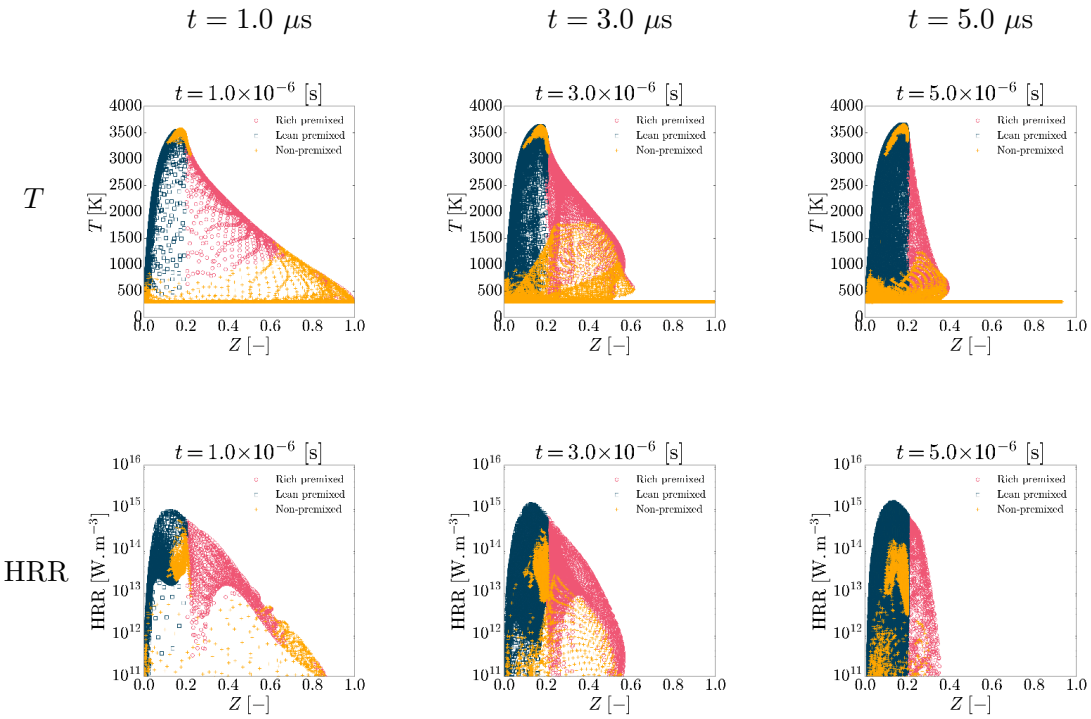
Cas #1.2

FIGURE C.3 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #1.2. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



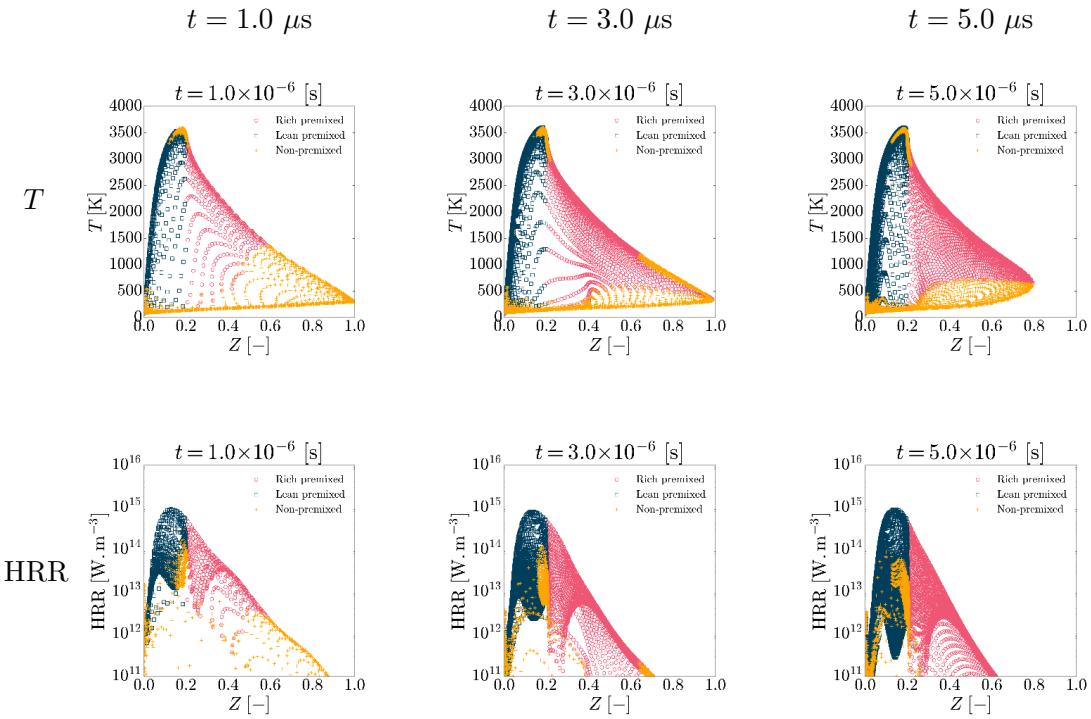
Cas #1.3

FIGURE C.4 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #1.3. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



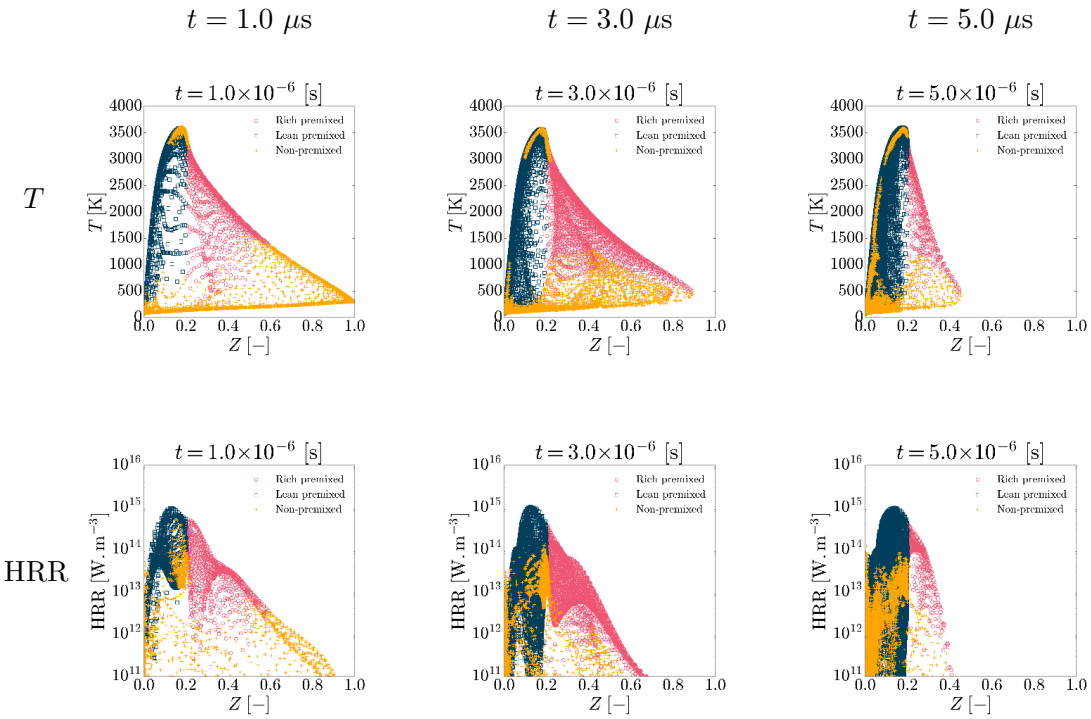
Cas #1.4

FIGURE C.5 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #1.4. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



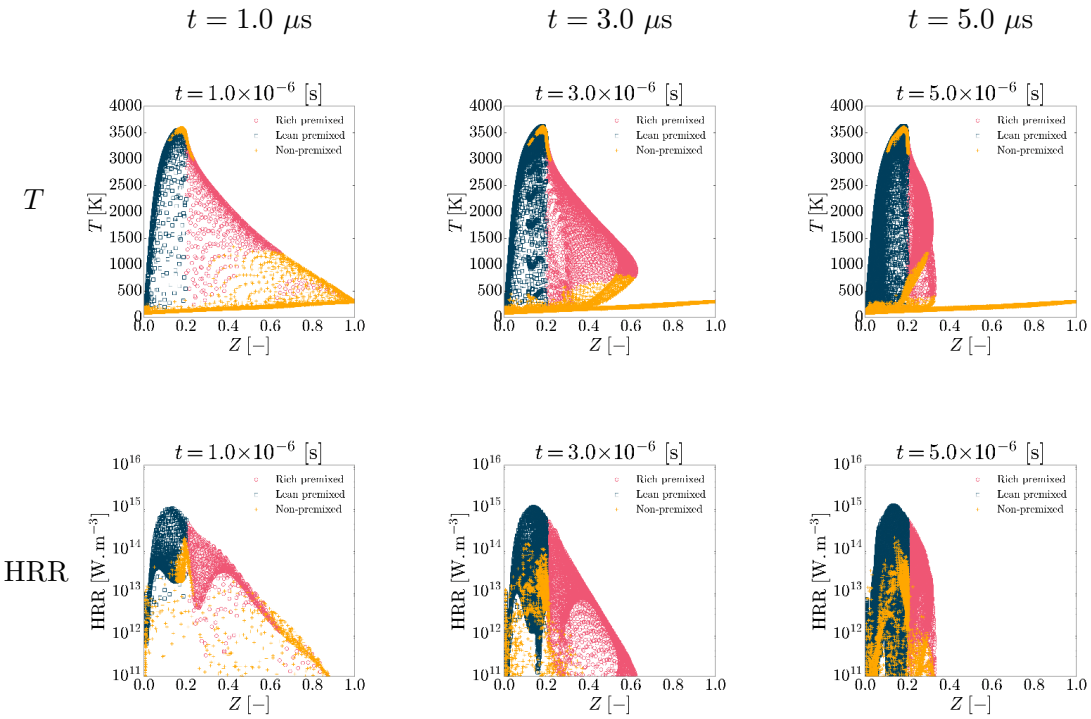
Cas #2.1

FIGURE C.6 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #2.1. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



Cas #2.2

FIGURE C.7 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #2.2. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.



Cas #2.3

FIGURE C.8 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #2.3. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.

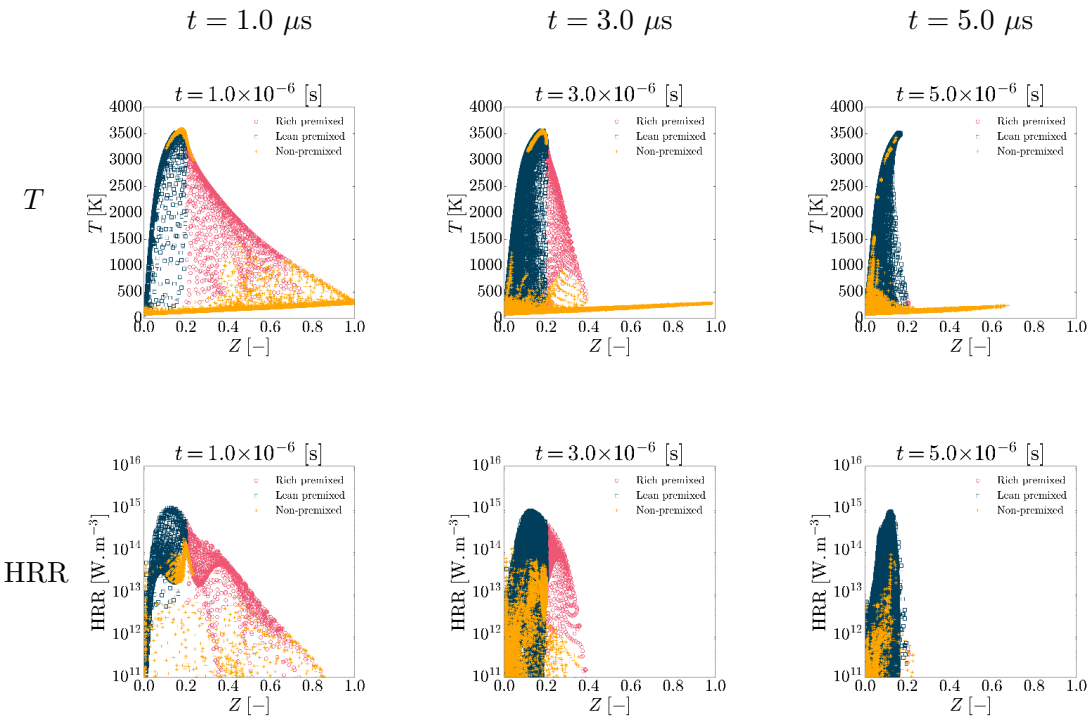


FIGURE C.9 – Nuages de points colorisés par l'index de flamme à différents instants dans le cas #2.4. Température (haut) et taux de dégagement de chaleur (bas) vs. fraction de mélange.

D'une manière générale, on remarque qu'au début des simulations, l'ensemble de la gamme en fraction de mélange est représentée, autorisant une combustion pour toute richesse possible dans les limites d'inflammabilité du mélange dans ces conditions. La température maximale (~ 3600 K) et le plus fort taux de dégagement de chaleur ($\sim 1 \times 10^{15}$ W $\cdot$ m^{-3}) sont atteints pour des conditions proches de la stœchiométrie (légèrement pauvre). Les fortes températures ($T > 3000$ K) sont essentiellement atteintes par de la combustion prémélangée pauvre ou non-prémélangée.

On constate également que les flammes de prémélange produisent un dégagement de chaleur maximal ($\sim 1 \times 10^{15}$ W $\cdot$ m^{-3}) environ d'un ordre de grandeur supérieur à celui des flammes de diffusion ($\sim 1 \times 10^{14}$ W $\cdot$ m^{-3}). Ainsi, proche de la stœchiométrie, on a des points identifiés comme appartenant au régime des flammes de diffusion avec des températures supérieures à celles des points appartenant au régime de flammes prémélangées riches, alors qu'on a un taux de dégagement de chaleur proche de la stœchiométrie plus important pour les flammes prémélangées riches que pour les flammes de diffusion. Cela peut paraître contre-intuitif au premier abord, mais on peut expliquer ce phénomène simplement par le fait que le taux de dégagement de chaleur est maximal dans l'épaisseur du front de flamme (en particulier près du point triple de la flamme tribachiale), là où les températures ne sont pas maximales mais plutôt de l'ordre de 1500 K. Ainsi, les points de HRR maximal ne sont pas nécessairement les mêmes que ceux correspondant à la température maximale.

On constate également sur ces figures que la densité de points à forte température et fort dégagement de chaleur augmente au cours du temps, ce qui est logique vu que la flamme se

propage, la combustion s'intensifie et la quantité de gaz brûlés augmente dans le temps.

De plus, la combustion prémélangée pauvre semble être le régime de combustion privilégié sur l'ensemble des simulations étant donné que la densité de points à forts HRR et température est plus représentée par ce régime de combustion dans l'ensemble des simulations, ce qui est cohérent avec la richesse globale pauvre (Tab. 4.1). Ce constat est d'autant plus marqué aux derniers instants des simulations ($t = 5.0$ μs), en particulier dans les cas #2.k, pour $k = 1$, 2, 3 ou 4. À mesure que le temps s'écoule dans les simulations, les points ont tendance à se regrouper autour de la stœchiométrie.

La turbulence accélère le processus de mélange et favorise la combustion. En effet, si l'on compare par exemple les Fig. C.8 (cas #2.3) et C.9 (cas #2.4), on voit bien qu'à l'instant $t = 5.0$ μs, il reste encore des zones de mélange riche dans le cas #2.3, mais pas dans le cas #2.4. Par exemple, la fraction de mélange dans les gaz frais vaut 1 à $T = 300$ K et est de 0.35 environ pour $T > 500$ K dans le cas #2.3, alors qu'est n'est plus que de 0.65 environ à $T = 300$ K et de 0.25 pour $T > 500$ K dans le cas #2.4.

Finalement, ces résultats sont cohérents avec les analyses fournies dans le chapitre 4, notamment avec l'histogramme présenté dans la Fig. 4.19 qui mettait en évidence l'importance de la combustion prémélangée pauvre et des effets de la turbulence.

C.2 Simulations à $P = 5.6$ MPa

Une première version des simulations de la première configuration présentée dans le chapitre 4 consistait à simuler l'allumage et la propagation de flammes d'une ou plusieurs poches de méthane dans un environnement d'oxygène à une pression initiale de $P = 5.6$ MPa, avec le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R (voir chapitre 3) et le mécanisme détaillé RAMEC [278]. Les résultats de ces simulations sont présentées ici.

C.2.1 Configuration numérique

Cette étude est similaire à celle de la première configuration présentée dans le chapitre 4. En effet, celle-ci porte également sur l'allumage d'une ou plusieurs poches de méthane dans un environnement rempli d'oxygène, en considérant différentes températures initiales, mais cette fois-ci avec une pression initiale de $P = 5.6$ MPa. La Tab. C.1 résume les conditions initiales des quatre cas considérés.

Cas	Blob #	THI	T_{CH_4}	T_{O_2}
#1	1	N	300	300
#2	1	O	300	300
#3	R	O	300	300
#4	1	N	300	85

TABLE C.1 – Blob # : simple (1) ou random (R). THI : oui (O) ou non (N). Les températures (T_{CH_4} et T_{O_2}) sont données en Kelvin. $P_{ch} = 10$ MPa.

Ces simulations 2D sont réalisées avec le solveur SiTCom-B. Le paramétrage numérique est le même que dans le chapitre 4, i.e. l'EoS SRK [358], et les propriétés de transport haute

pression évaluées avec les méthodes Chung [53] et Takahashi [367] sont utilisées dans le cas où la température de l'oxygène est de 85 K, sinon une modélisation gaz parfait est retenue afin d'accélérer les calculs. Lorsque de la Turbulence Homogène Isotrope (THI) est superposée à l'écoulement initial, le même paramétrage que dans les chapitres 3 et 4 est retenu (Tab. 3.2). La configuration géométrique est une boite carrée de côté $L_{\text{box}} = 1.5 \times 10^{-4}$ m. Le maillage structuré et cartésien contient 600 cellules dans chaque direction. La même résolution de maillage est utilisée dans tous les cas, $\Delta x_i = 0.25$ μm. Lorsqu'une poche unique de méthane est considérée, celle-ci possède un diamètre de 3.0×10^{-5} m.

Une autre différence importante par rapport au paramétrage des simulations du chapitre 4 consiste dans le fait d'utiliser des conditions aux limites périodiques au lieu de sorties NSCBC (sauf éventuellement pendant un cours instant après l'allumage afin d'évacuer les principales ondes de pression). L'avantage est de pouvoir préserver une certaine périodicité au niveau de la turbulence induite par la THI, mais l'inconvénient est que la pression augmente au cours de la simulation. En effet, l'écoulement ne pouvant pas sortir, tout se passe comme si le domaine de simulation était fermé. La combustion générant des gaz brûlés de faible masse volumique, le volume de gaz dans l'enceinte veut augmenter mais ne peut pas du fait que le volume de l'enceinte est fixé, ce qui se traduit par une augmentation de la pression. Autrement dit, les cas simulés ici reviennent à des cas de combustion à volume constant, contrairement à la configuration étudiée dans le chapitre 4 qui se fait à pression constante.

Enfin, la dernière différence entre les simulations présentées ici et celles du chapitre 4 réside dans la procédure d'allumage. En effet, dans cette étude est utilisé le même profil de température et avec la même composition de gaz brûlés que dans le chapitre 3, mais avec un diamètre de 3.0×10^{-5} m, contrairement à la procédure d'allumage du chapitre 4 qui n'utilise qu'un profil de température sans ajout de gaz brûlés.

C.2.2 Résultats

Dans le cas #1 (Fig. C.10), une flamme jumelle triple se propage tout autour de la poche de méthane de droite à gauche avant de fusionner à nouveau, de la même façon que dans la configuration présentée dans le chapitre 4. Chaque flamme possède trois zones de réaction, clairement visibles sur le champ de vitesse de dégagement de chaleur : l'une est du côté du méthane, l'autre du côté de l'oxygène, et la dernière entre les deux premières et située sur la ligne stœchiométrique et correspondant à une flamme de diffusion. Le champ de température se développe autour de la poche de méthane et atteint une valeur proche de celle observée dans les flammes 1D à contre-courant. L'ajout de la turbulence au champ de vitesse dans le cas #2 (Fig. C.11) résulte en de multiples flammes triples qui suivent les poches de méthane qui se détachent du blob de méthane initial. La complexité de l'écoulement est exacerbée lorsque de multiples blobs de méthane sont ajoutés au champ de vitesse turbulent dans le cas #3 (Fig. C.12). Là encore, des flammes triples apparaissent et disparaissent localement en fonction de la composition locale de méthane et d'oxygène.

L'ensemble des cas 1 à 3 a été simulé à la fois avec le mécanisme chimique réduit et avec le mécanisme chimique détaillé. Les Fig. C.10, C.11 et C.12 montrent que les fronts des flammes simulés avec les deux chimies sont très proches à chaque instant de la simulation, dans les trois configurations étudiées. Toutefois, le front de flamme simulé avec la chimie réduite est quelque peu retardé dans le temps par rapport à celui trouvé avec la chimie détaillée. Ce comportement

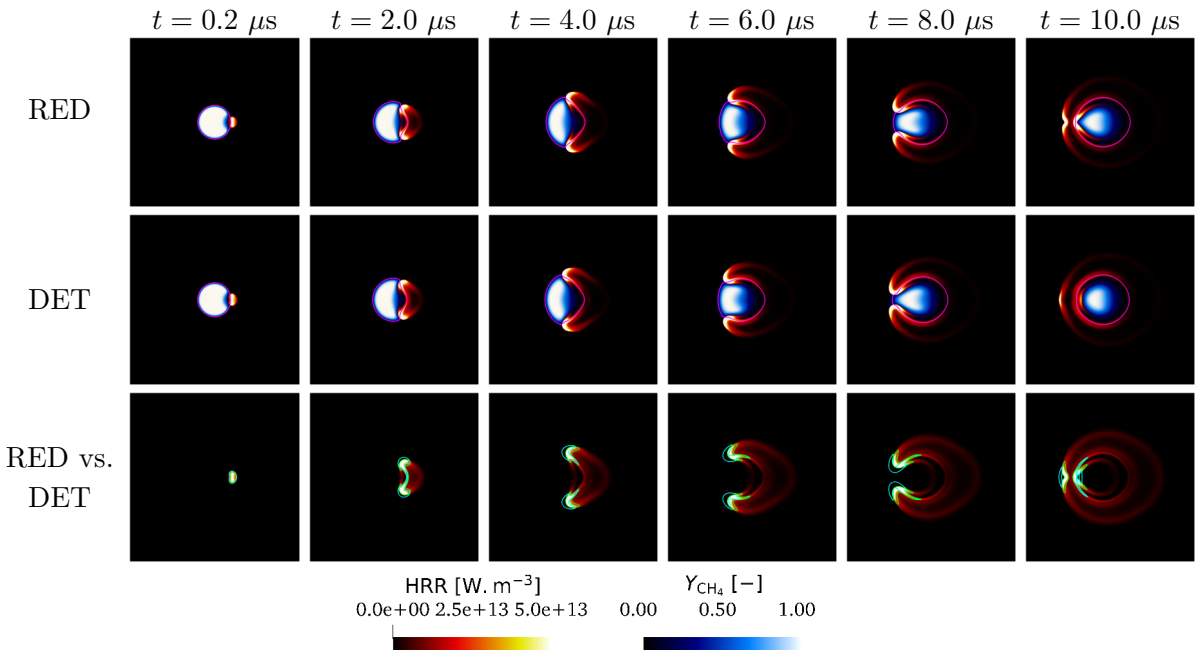


FIGURE C.10 – Évolution du champ du taux de dégagement de chaleur (HRR) pour le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R (RED) et le mécanisme chimique détaillé RAMEC (DET) sur le cas #1. Ligne stœchiométrique en magenta. Iso-ligne HRR $= 2.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} en vert pour le schéma RED et en bleu pour le schéma DET.

a déjà été observé dans les chapitre 3 et 4.

La Fig. C.13 illustre l'évolution de la température maximale au cours du temps dans le cas #3 avec le mécanisme chimique réduit et avec le mécanisme chimique détaillé. On voit que les deux courbes sont très proches et que l'écart principal entre les deux courbes est lié à un léger décalage temporel entre les deux courbes, déjà observé et commenté dans le chapitre 3. On peut également calculer l'erreur relative sur la moyenne de la $T_{\max}$ entre les deux mécanismes chimiques qui s'élève à seulement 2.65 %.

Par ailleurs, dans le cas #4, lors de l'allumage de la poche de méthane dans de l'oxygène dense ($\rho_{O_2} \simeq 1200$ kg$\cdot$m^{-3}) et cryogénique $T_{O_2} = 85$ K, des instabilités de type Rayleigh-Taylor, c'est-à-dire des instabilités dues à la différence de masse volumique des deux fluides, apparaissent avant la propagation de la flamme (Fig. C.14). Cette instabilité est initiée par l'onde de pression résultant de l'addition du point chaud à l'écoulement froid au moment de l'allumage. Notons que dans le chapitre 4 sur le cas similaire (cas #2.1), aucune instabilité de Rayleigh-Taylor n'a été constatée. On peut expliquer ce phénomène par le changement de la procédure d'allumage entre les deux études. En effet, la procédure d'allumage utilisée dans le chapitre 4 génère des ondes de pression moins importantes que la procédure d'allumage utilisée ici, dans les premiers instants de la simulations. Notons également que la pression initiale n'étant pas la même, le gradient de masse volumique séparant le méthane de l'oxygène n'est également pas le même. Toutefois une étude approfondie permettant de caractériser précisément les conditions initiales déclenchant ou non des instabilités n'a pas été menée et dépasse la cadre de cette étude. On peut néanmoins supposer que deux facteurs entrent en jeu pour savoir si une telle instabilité va se déclencher ou non. Le premier serait lié au gradient de masse volumique entre les deux phases méthane et

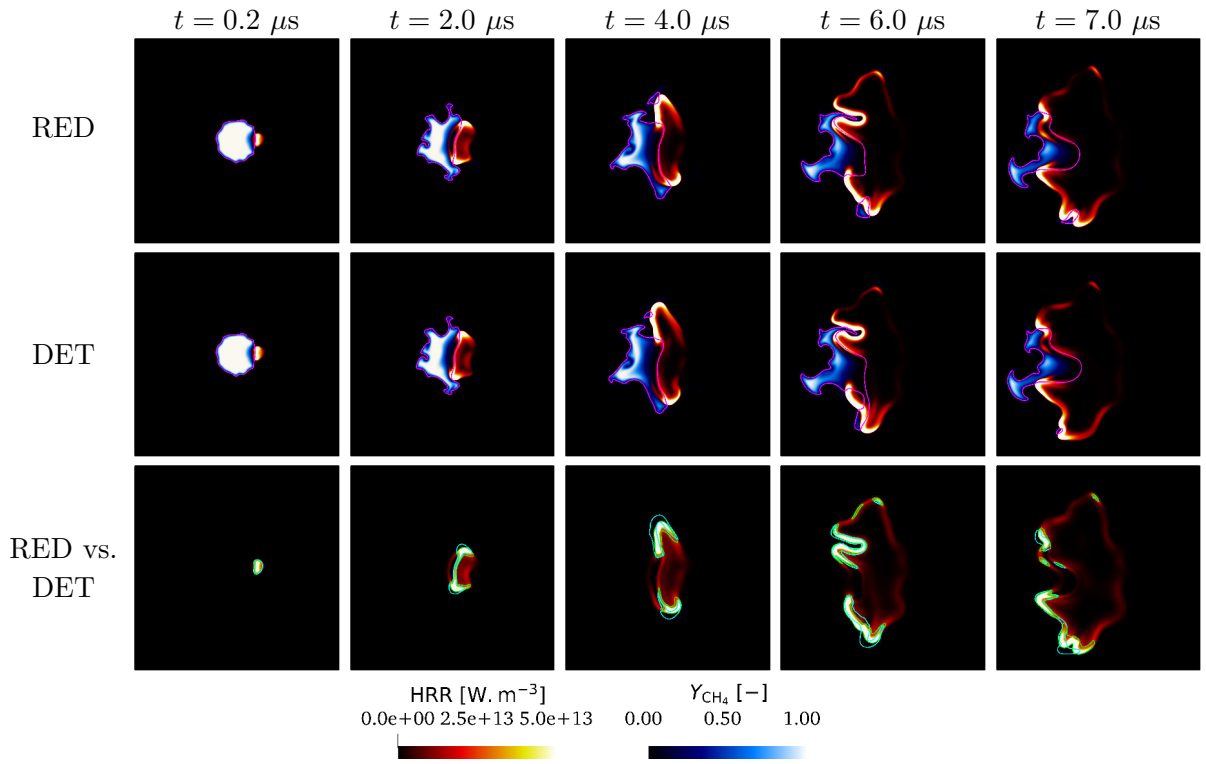


FIGURE C.11 – Évolution du champ du taux de dégagement de chaleur (HRR) pour le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R (RED) et le mécanisme chimique détaillé RAMEC (DET) sur le cas #2. Ligne stœchiométrique en magenta. Iso-ligne HRR $= 2.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} en vert pour le schéma RED et en bleu pour le schéma DET.

oxygène dense et le second serait lié au ΔP (écart en pression) entre la pression générée par la procédure d'allumage (onde acoustique) et la pression régnant dans le domaine.

Finalement, la propagation de la flamme est similaire à celle observée dans le cas #1 avec une double flamme triple se développant autour de la poche de méthane. Cependant, la vitesse de propagation est modifiée du fait que la flamme est incapable d'entourer directement la poche de méthane, c'est-à-dire de suivre la pseudo-interface séparant l'oxygène du méthane. Au contraire, la flamme pousse la poche de méthane peu dense vers la gauche tout en la consommant.

C.3 Étude effets de maillage

C.3.1 Présentation du cas

Différentes simulations sur une configuration similaire à la configuration #1.1 étudiée dans le chapitre 4 (présentation du cas dans la section 4.2) ont également été réalisées afin d'étudier l'effet de la taille de maille sur la propagation des flammes triples et leur structure. L'allumage d'une poche de méthane entourée d'oxygène et sans ajout de turbulence est ainsi simulé avec différentes tailles de mailles, allant de $\Delta_i = 0.25$ μm à $\Delta_i = 10.0$ μm ($i = x$ ou y). La prise en compte du modèle de flamme épaissie dynamique [57, 182] (TFLES) est également étudiée pour les simulations réalisées avec les maillages les plus grossiers.

Cette fois-ci, le domaine (2D) est un carré de 1 mm de côté avec des conditions de sorties

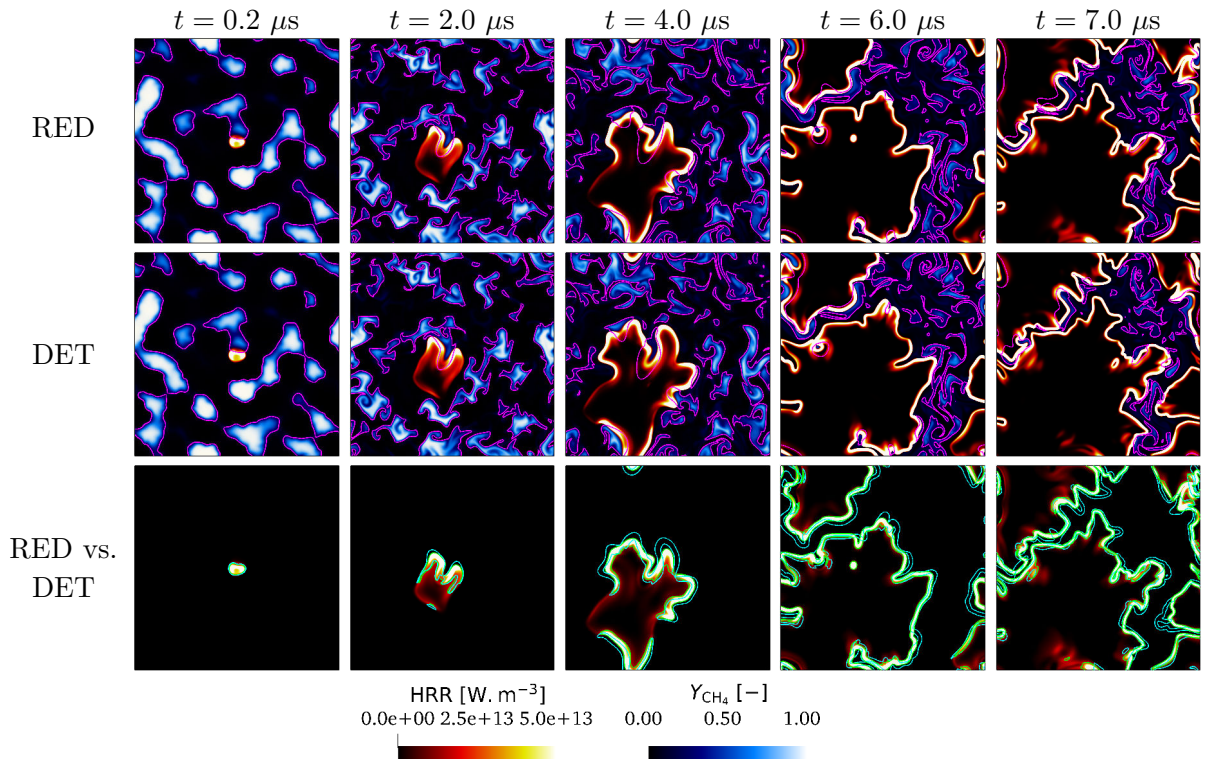


FIGURE C.12 – Évolution du champ du taux de dégagement de chaleur (HRR) pour le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R (RED) et le mécanisme chimique détaillé RAMEC (DET) sur le cas #3. Ligne stœchiométrique en magenta. Iso-ligne HRR $= 2.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} en vert pour le schéma RED et en bleu pour le schéma DET.

aux extrémités. La pression est de 10.0 MPa et la température initiale est uniforme et égale à 300 K. Le mécanisme chimique utilisé est le RAMEC-17S-44R (voir chapitre 3)

C.3.2 Résultats et discussions

C.3.2.1 Effets de maillage

La Fig. C.15 montre les champs instantanés du taux de dégagement de chaleur superposé à celui de la fraction de mélange obtenus à différents instants et pour les différents maillages étudiés, en l'absence du modèle TFLES. Le domaine entier n'est pas montré (zoom dans un carré de côté 0.5 mm).

On voit bien les structures des flammes triples jumelles qui se développent et se propagent le long de la poche de méthane jusqu'à une taille de maille $\Delta_i = 2.0$ μm. Les différentes branches des flammes triples deviennent en revanche plus difficiles à discerner, ce qui devient même quasi-impossible dès-lors que $\Delta_i \geq 5.0$ μm.

Un autre phénomène intéressant est de constater qu'à mesure que la simulation avance dans le temps, la poche de méthane se diffuse dans l'oxygène, ce qui affecte la structure de la flamme triple dont l'angle d'ouverture des branches de prémélange augmente en conséquence. En effet, plus la flamme triple se propage le long de la poche de méthane, plus celui-ci a eu le temps de se diffuser dans l'oxygène, ce qui affecte le gradient de fraction de mélange (de manière équivalente, le gradient de fraction massique de méthane) en amont de la flamme. La structure de flamme tri-

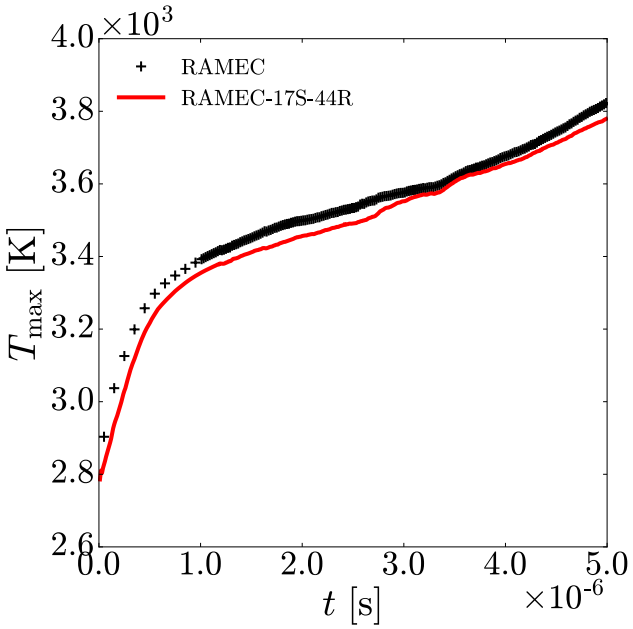


FIGURE C.13 – Évolution du maximum de température $T_{\max}$ dans le cas #3 pour le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R et le mécanisme chimique détaillé RAMEC.

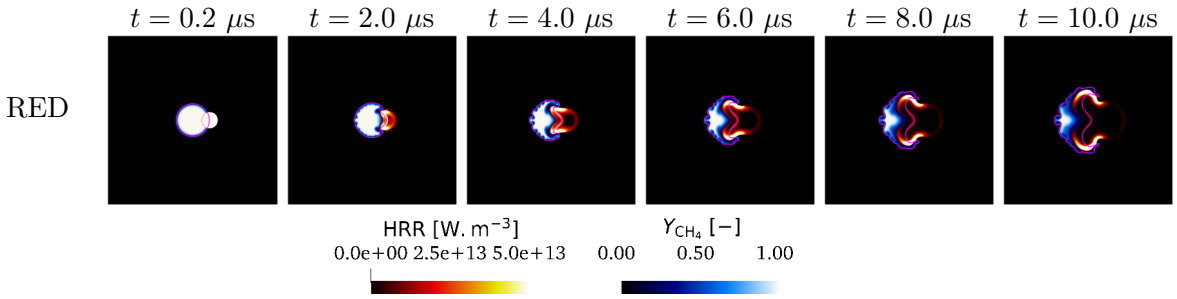


FIGURE C.14 – Évolution du champ du taux de dégagement de chaleur (HRR) pour le mécanisme chimique réduit RAMEC-17S-44R (RED) et le mécanisme chimique détaillé RAMEC (DET) sur le cas #1. Ligne stœchiométrique en magenta. Iso-ligne HRR $= 2.0 \times 10^{13}$ W $\cdot$ m^{-3} en vert pour le schéma RED et en bleu pour le schéma DET.

brachiale tend alors peu à peu vers une structure d'*edge flame* bi-brachiale (voir section 4.1.1), ce qui est très similaire au phénomène observé par Kim *et al.* [158] (voir Fig. 4.2).

On peut également observer que pour les maillages les plus fins, i.e. $\Delta_i \leq 1.0$ μm, plus difficilement pour $\Delta_i = 2.0$ μm, mais pas du tout pour $\Delta_i \geq 2.0$ μm, le fait que la branche de diffusion semble se séparer assez rapidement en deux branches localisées de part et d'autre de la ligne stœchiométrique.

En outre, les différences entre les simulations sont à peine perceptibles jusqu'à une taille de maille de $\Delta_i \leq 1.0$ μm. Celles-ci commencent légèrement à se manifester pour le maillage $\Delta_i = 2.0$ μm, mais les résultats restent tout de même très proches. À cause d'un léger décalage à l'allumage, les flammes triples simulées avec le maillage $\Delta_i = 2.0$ μm ont un léger retard par

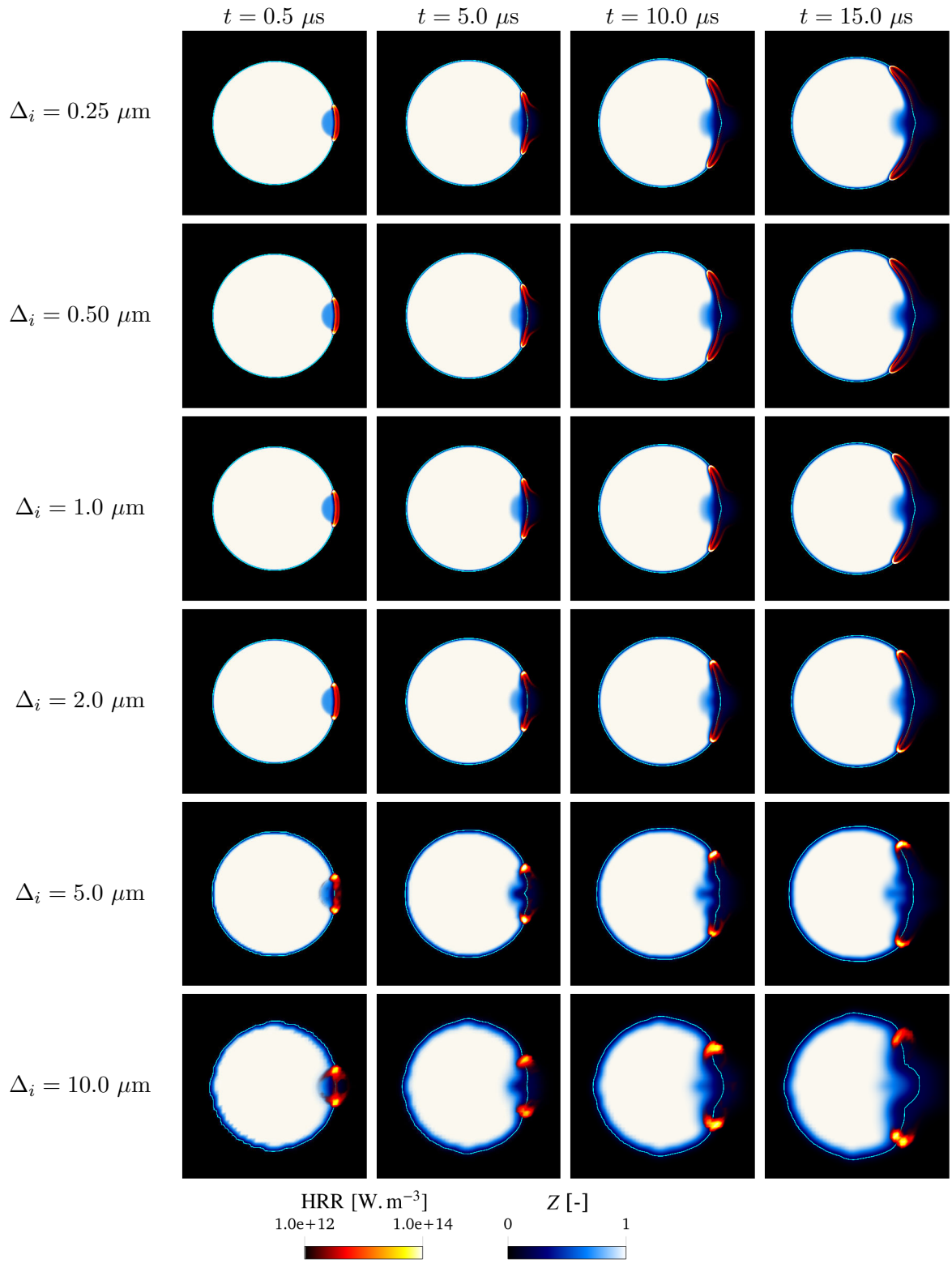


FIGURE C.15 – Comparaison des effets de la taille de maille sur les champs du taux de dégagement de chaleur superposé à la fraction de mélange et pour différents instants.

rapport à celles simulées avec un maillage plus fin. La simulation avec le maillage $\Delta_i = 2.0$ μm semble toutefois donner une reproduction assez fidèle de celle réalisée avec le maillage le plus fin, pour un coût CPU moindre.

En revanche, dégrader davantage le maillage entraine une perte d'information conséquente, puisque l'on peine à retrouver les structures de flammes triples et la forme de la poche de méthane elle-même n'évolue plus de la même façon, en particulier pour le maillage le plus grossier. Pour autant, la position des fronts de flammes au cours du temps semble globalement être bien retrouvée, même si par manque de temps, une étude plus approfondie n'a pas été menée à ce sujet afin de quantifier plus précisément les écarts observés. On peut également se douter que l'effet du maillage sur la flamme pourrait être bien plus important lorsque l'écoulement est turbulent, en particulier en l'absence de modèle d'interaction chimie-turbulence.

La Fig. C.16 met en évidence les différents régimes de combustion à l'aide de l'index de flamme (rose pour prémélangé riche, jaune moutarde pour diffusion et bleu marine pour prémélangé pauvre).

On voit alors que dans tous les cas, l'index de flamme met bien en évidence la présence des trois régimes de combustion. En revanche, plus le maillage se dégrade et moins la frontière entre les différents régimes de combustion est nette. On constate de nouveau que la structure de la flamme est plutôt bien décrite pour $\Delta_i \leq 2.0$ μm.

C.3.2.2 Effets du modèle TFLES

Des simulations additionnelles avec le modèle TFLES (conditionné aux flammes de prémélange grâce à l'indice de Takeno) ont également été réalisées afin de voir comment celui-ci pouvait affecter la structure des flammes triples simulées sur les maillages les plus grossiers, i.e. $\Delta_i = 5.0$ μm et $\Delta_i = 10.0$ μm. Pour une taille de maille de $\Delta_i = 5.0$ μm, un facteur d'épaississement $\mathcal{F} = 2.5$ a été utilisé contre $\mathcal{F} = 5.0$ dans le cas où $\Delta_i = 10.0$ μm.

La Fig. C.17 compare alors les champs du taux de dégagement de chaleur superposé à la fraction de mélange, pour les simulations réalisées avec et sans modèle TFLES, avec des tailles de mailles $\Delta_i = 5.0$ μm et $\Delta_i = 10.0$ μm.

On voit alors que l'ajout du modèle TFLES a tendance à épaissir un peu les fronts des flammes (comportement attendu) et ceux-si semblent légèrement moins intenses et également plus homogènes, en particulier avec le maillage le plus grossier. Toutefois les différences observables ne sont pas très importantes. On pourrait cependant s'attendre à ce que les différences entre les simulations soient plus marquées lors de l'ajout de turbulence dans l'écoulement ou en dégradant davantage encore le maillage.

Une étude plus approfondie afin de quantifier précisément les différences (positions et vitesses de propagation des flammes, évolution de la température, etc.) entre les diverses simulations n'a en revanche pas pu être menée dans le cadre de cette thèse, faute de temps. Cela donne néanmoins un premier aperçu de l'effet de la dégradation du maillage et de l'emploi du modèle TFLES sur une telle configuration.

Enfin la Fig. C.18 montre que la prise en compte du modèle TFLES ne semble pas affecter significativement la structure de la flamme, puisque l'on retrouve de manière équivalente la répartition des différents régimes de combustion.

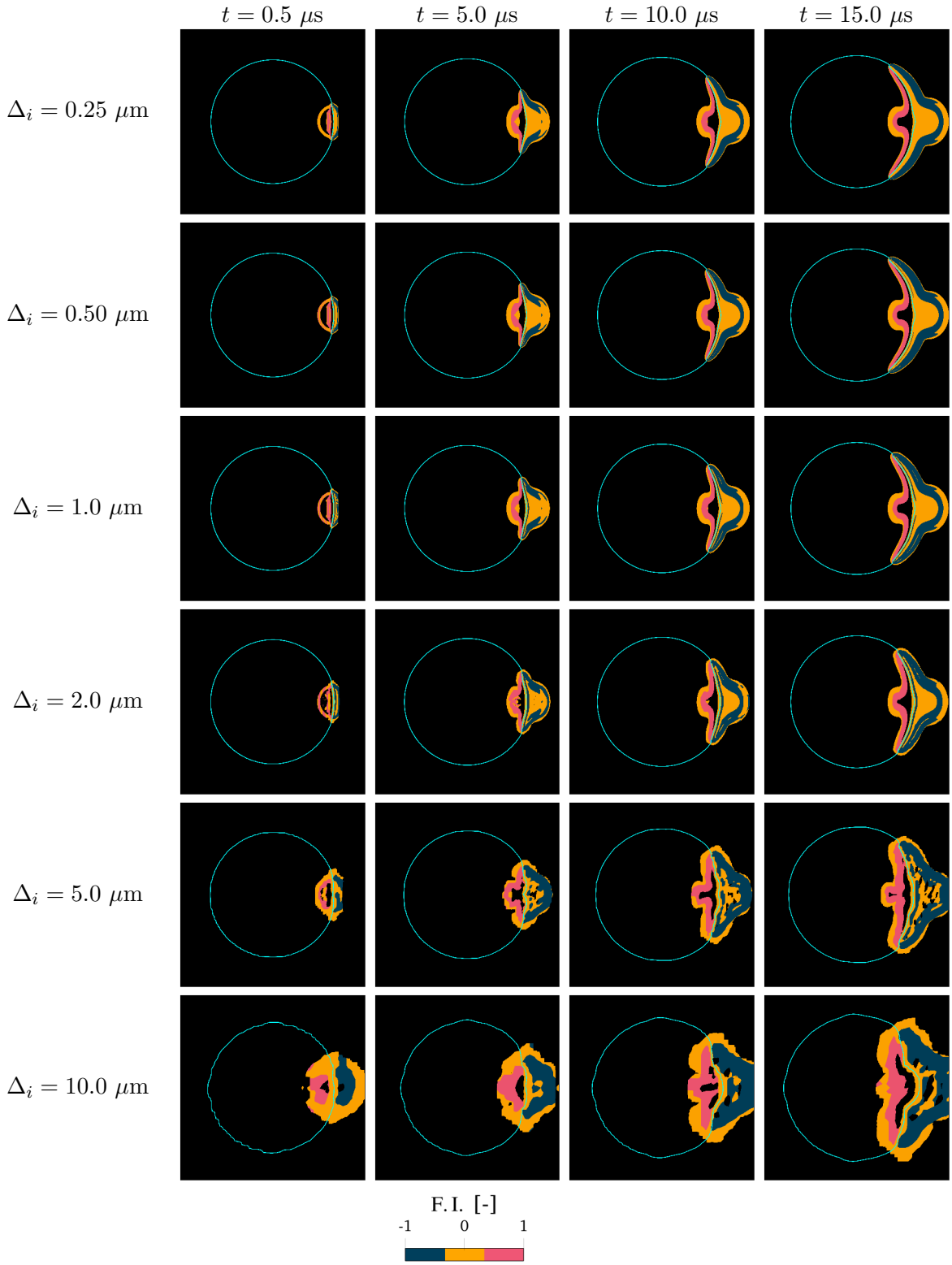


FIGURE C.16 – Comparaison des effets de la taille de maille sur les champs d'index de flamme à différents instants.

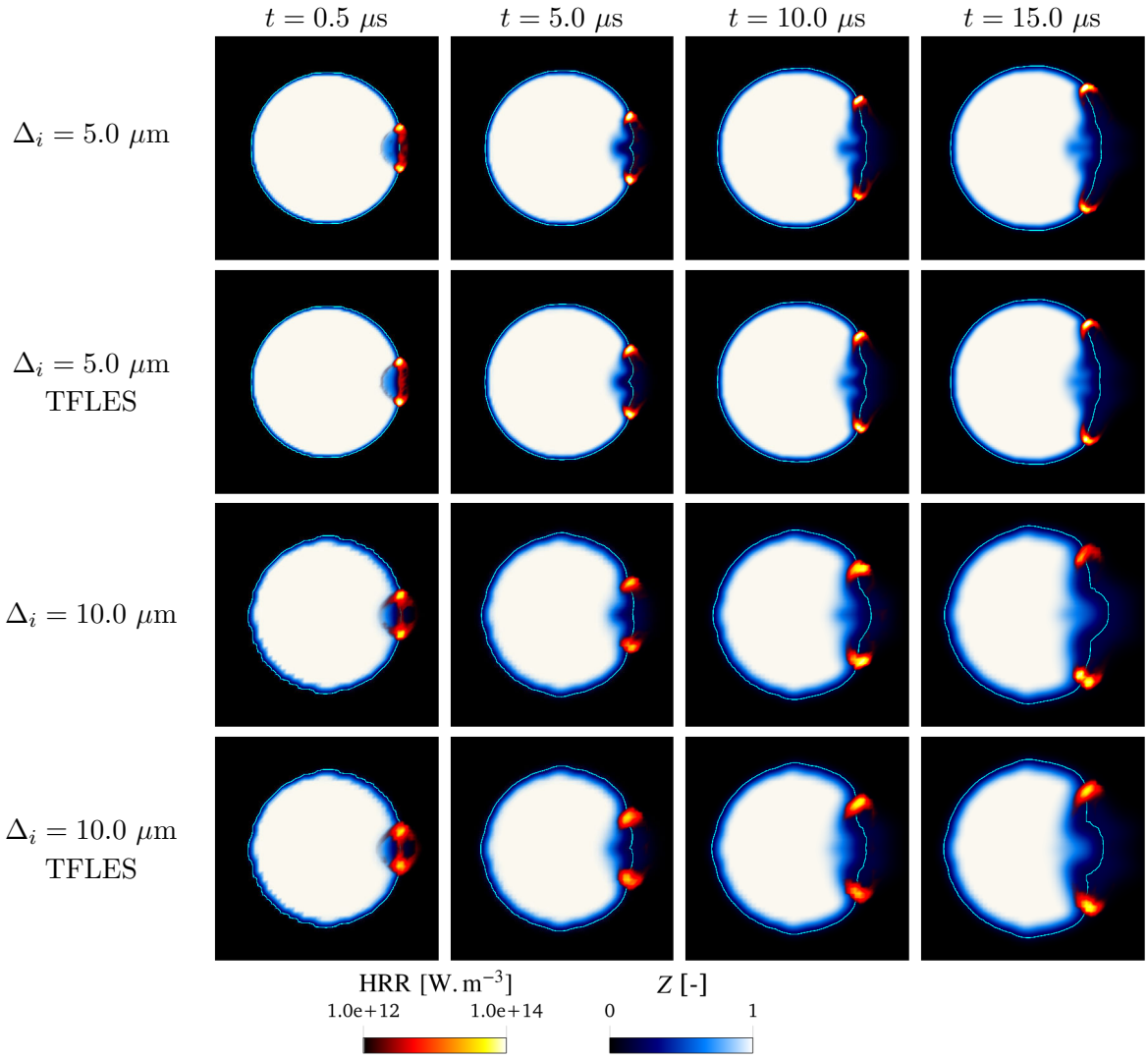


FIGURE C.17 – Comparaison des effets du modèle TFLES pour deux maillages différents sur les champs du taux de dégagement de chaleur superposé à la fraction de mélange et pour différents instants.

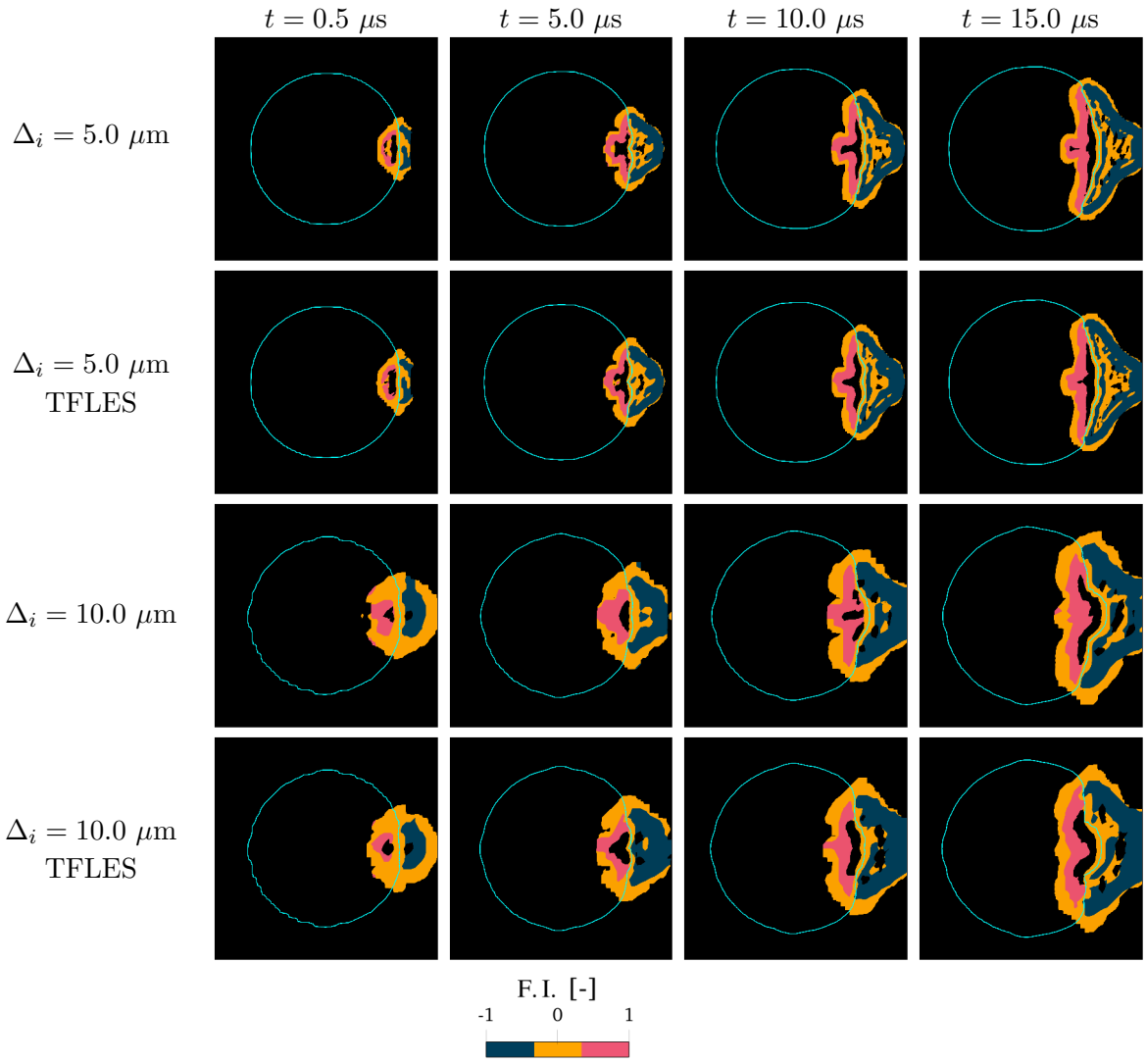


FIGURE C.18 – Comparaison des effets du modèle TFLES pour deux maillages différents sur les champs d'index de flamme à différents instants.

Annexe D

Suppléments du chapitre 5

D.1 Compléments comparaison H150 vs H30

D.1.1 Champs moyens

Bien que les profils à différentes positions axiales fournissent des renseignements précis sur la capacité du maillage H30 avec différents modèles SGS à reproduire l'écoulement simulé avec le maillage H150, il est également intéressant de comparer directement les champs moyens.

Les champs moyens et leur écart-type sont comparés respectivement à travers les Fig. D.1, D.2, D.3, D.4 et D.5, pour respectivement la fraction massique de CH_4, la masse volumique, la température, la vitesse axiale et la vitesse transverse.

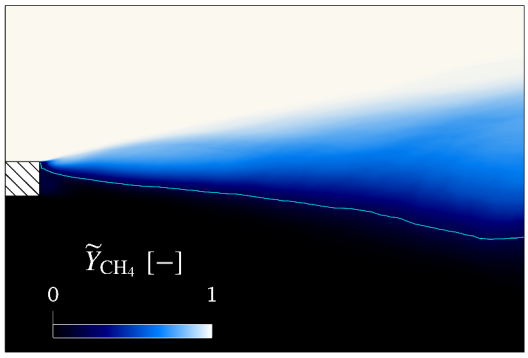
On observe sur l'ensemble de ces figures que d'une manière générale, l'écoulement est globalement bien reproduit par les différents cas H30, sauf éventuellement proche de la lèvre de l'injecteur où l'on observe le plus de différences.

En effet, les remarques effectuées dans la section 5.3.2.2 en analysant les différents profils peuvent se visualiser directement sur ces champs moyens. On peut constater que l'ensemble simulations H30 a tendance à trop élargir la zone de recirculation derrière la lèvre (bien visible grâce à l'iso-ligne de vitesse axiale nulle en blanc, présent sur la Fig. D.4). Les cas H30 ont également tendance à favoriser un peu trop le mélange de méthane et d'oxygène, qui contient davantage de méthane qu'avec le cas H150 dans la région très proche de la lèvre (voir Fig. D.1 et D.2).

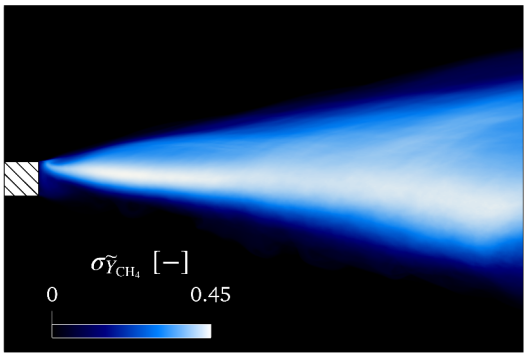
Enfin, ces champs confirment que dans la zone proche de la lèvre, c'est le modèle WALE [249] qui semble être le plus prédictif, suivi de près par le modèle SMD [93,185]. En revanche, le modèle SM [352] est plus prédictif que les autres suffisamment loin de la lèvre, puisque la pente de la couche de mélange est la mieux représentée.

D.1.2 Compléments des profils

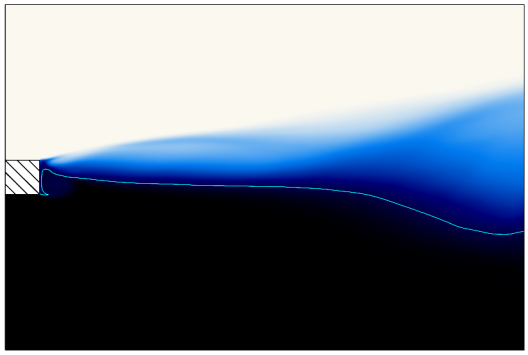
Les profils des principales grandeurs caractéristiques de l'écoulement moyennées au sens de Favre, à savoir la température, la vitesse axiale ainsi que la vitesse transverse sont également disponibles dans les Fig. D.6, D.7, D.8, D.9, D.10 et D.11, afin de proposer une base de données directement comparable avec des résultats issus de simulations RANS.



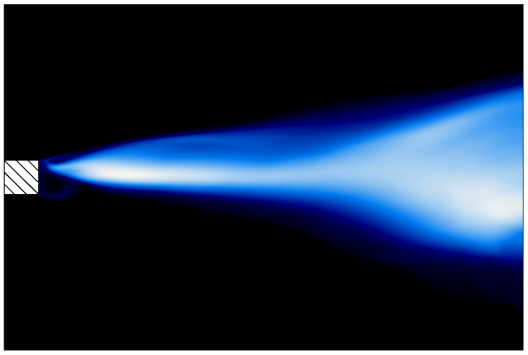
(a) FA : H150 - IT



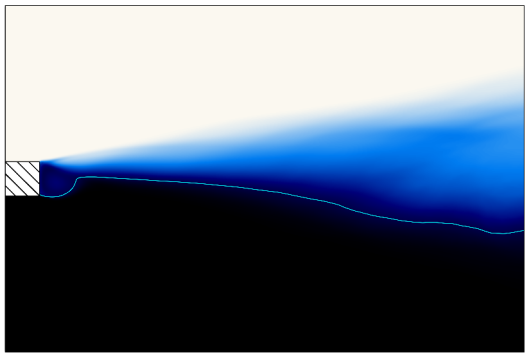
(b) FA RMSD : H150 - IT



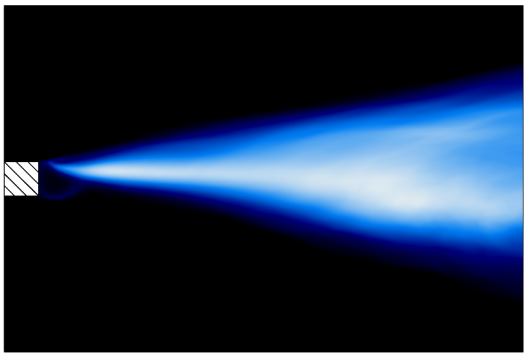
(c) FA : H30 - WALE - IT



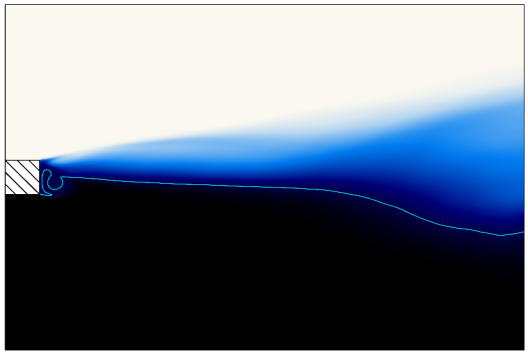
(d) FA RMSD : H30 - WALE - IT



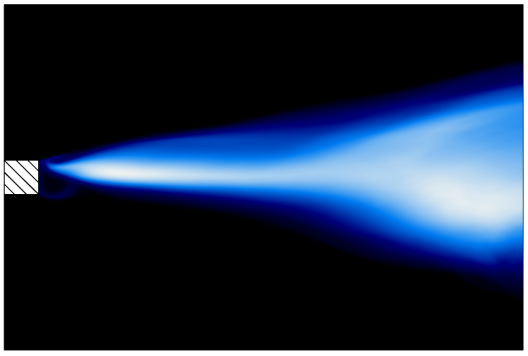
(e) FA : H30 - SM - IT



(f) FA RMSD : H30 - SM - IT

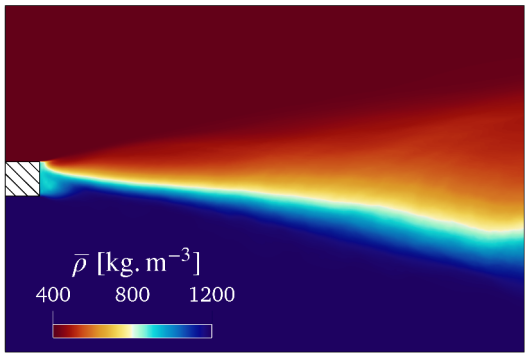


(g) FA : H30 - SMD - IT

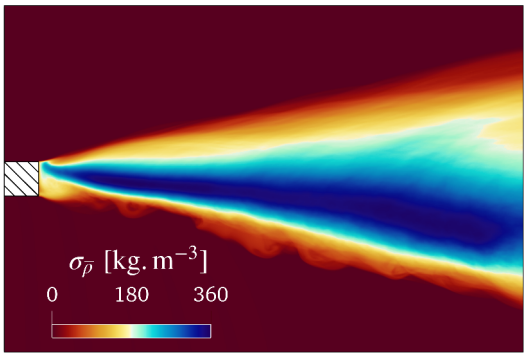


(h) FA RMSD : H30 - SMD - IT

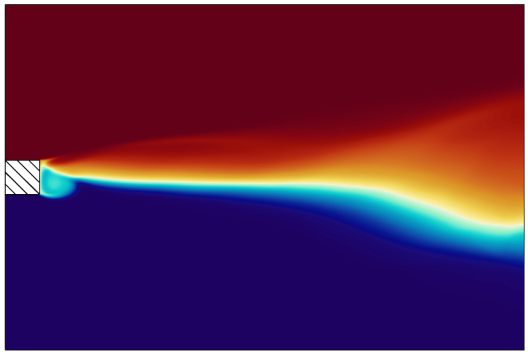
FIGURE D.1 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique de CH_4** et de son écart-type, entre les cas H150 - IT, H30 - WALE - IT, H30 - SM - IT et H30 - SMD - IT.



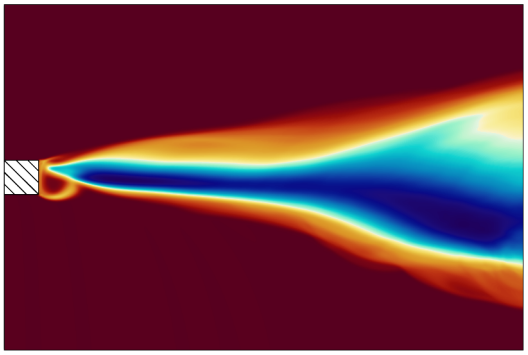
(a) RA : H150 - IT



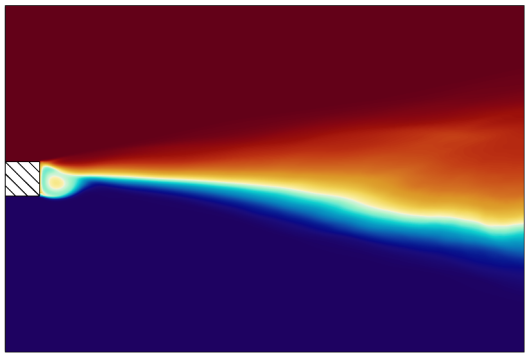
(b) RA RMSD : H150 - IT



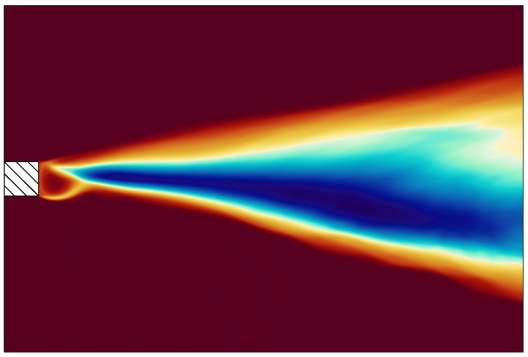
(c) RA : H30 - WALE - IT



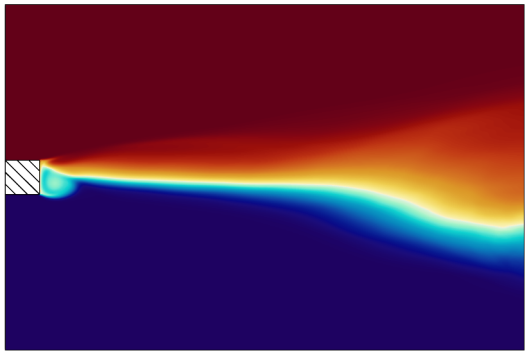
(d) RA RMSD : H30 - WALE - IT



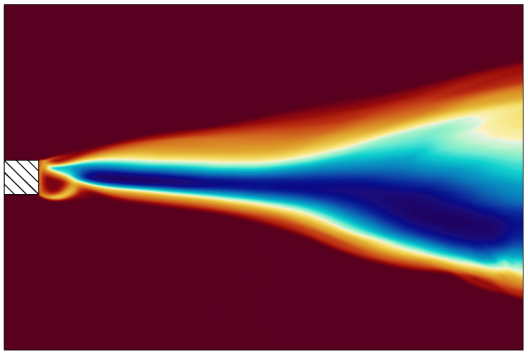
(e) RA : H30 - SM - IT



(f) RA RMSD : H30 - SM - IT

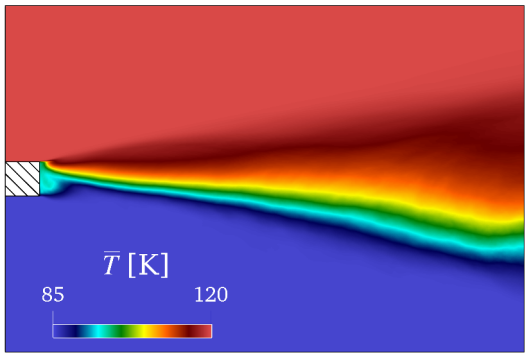


(g) RA : H30 - SMD - IT

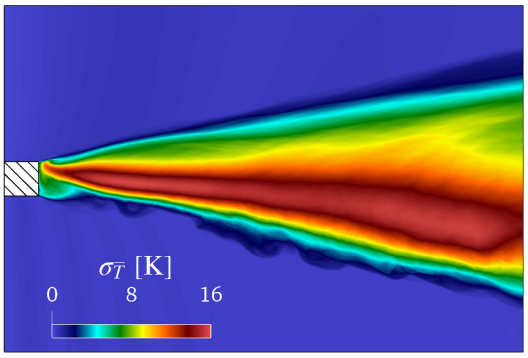


(h) RA RMSD : H30 - SMD - IT

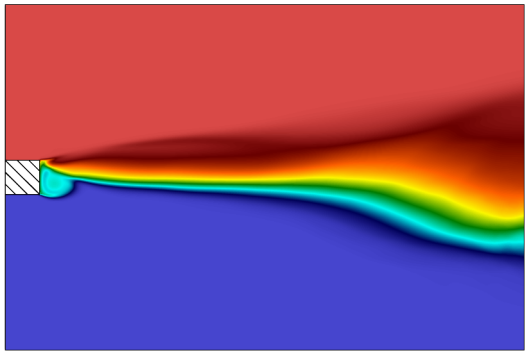
FIGURE D.2 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **masse volumique** et de son écart-type, entre les cas H150 - IT, H30 - WALE - IT, H30 - SM - IT et H30 - SMD - IT.



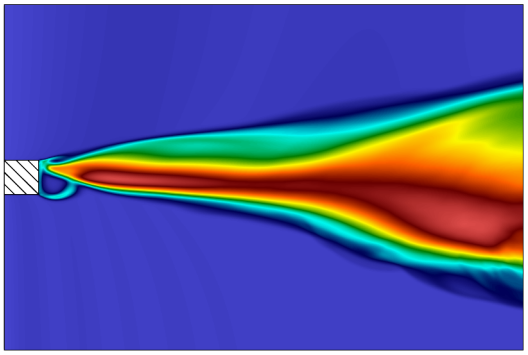
(a) RA : H150 - IT



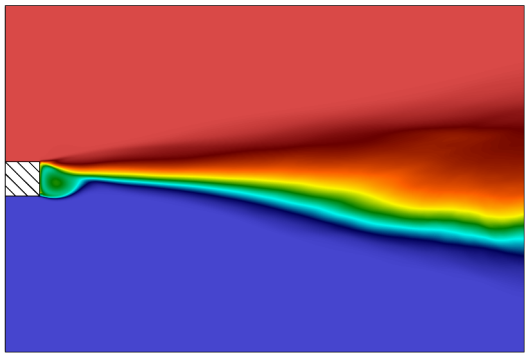
(b) RA RMSD : H150 - IT



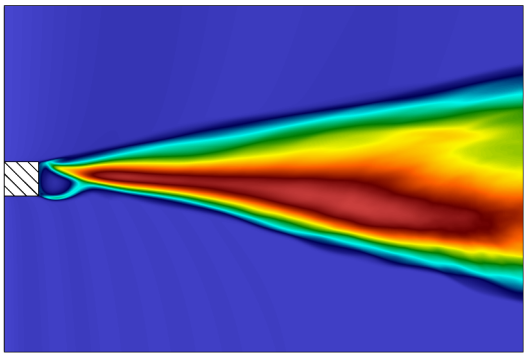
(c) RA : H30 - WALE - IT



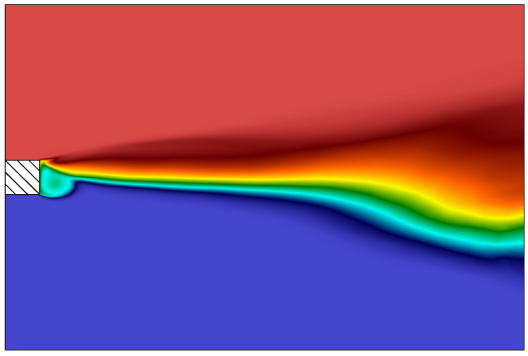
(d) RA RMSD : H30 - WALE - IT



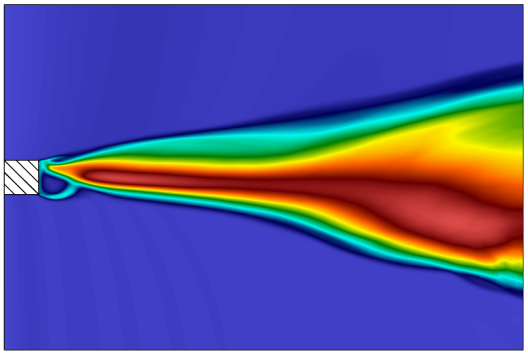
(e) RA : H30 - SM - IT



(f) RA RMSD : H30 - SM - IT

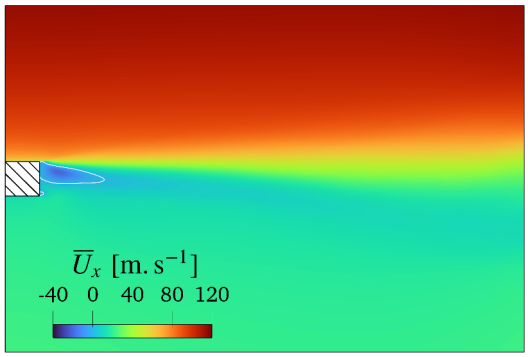


(g) RA : H30 - SMD - IT

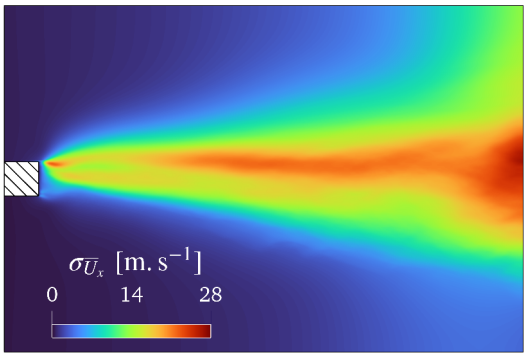


(h) RA RMSD : H30 - SMD - IT

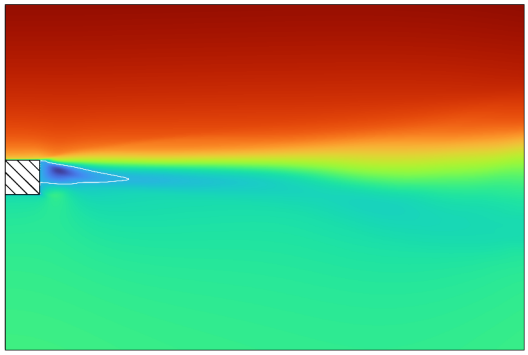
FIGURE D.3 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **température** et de son écart-type, entre les cas H150 - IT, H30 - WALE - IT, H30 - SM - IT et H30 - SMD - IT.



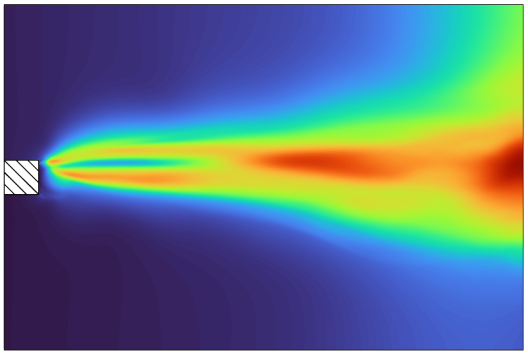
(a) RA : H150 - IT



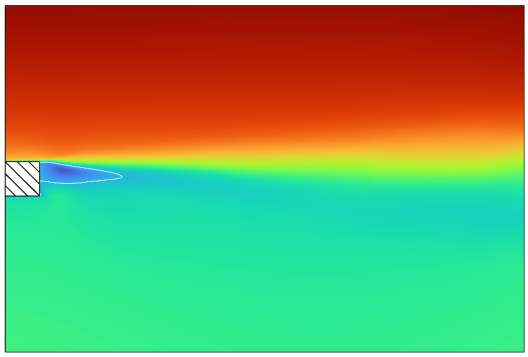
(b) RA RMSD : H150 - IT



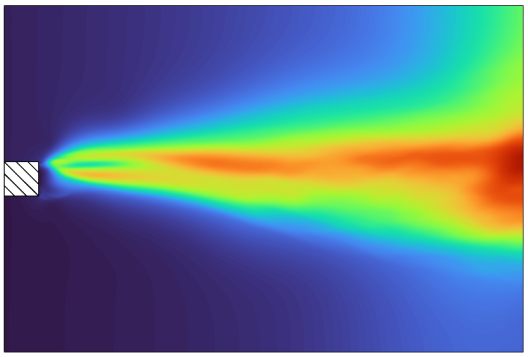
(c) RA : H30 - WALE - IT



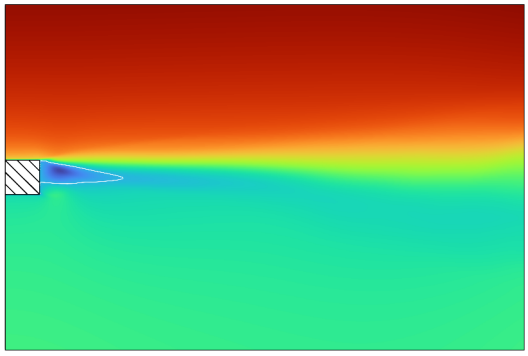
(d) RA RMSD : H30 - WALE - IT



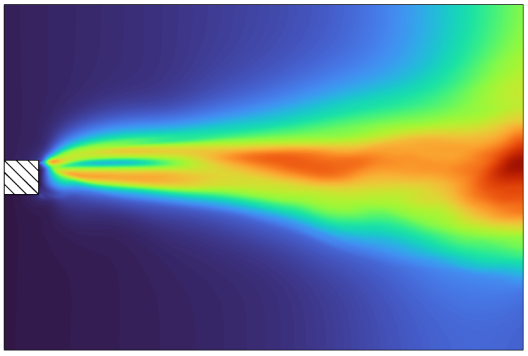
(e) RA : H30 - SM - IT



(f) RA RMSD : H30 - SM - IT

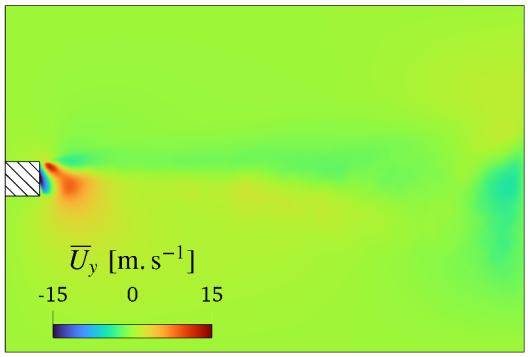


(g) RA : H30 - SMD - IT

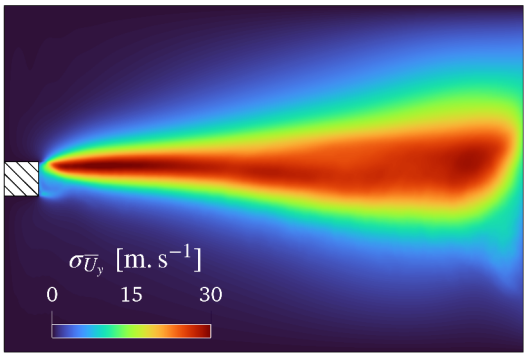


(h) RA RMSD : H30 - SMD - IT

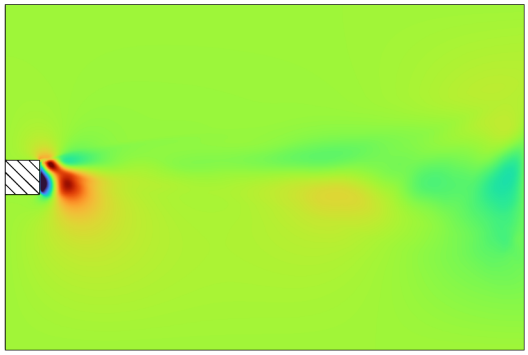
FIGURE D.4 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **vitesse axiale** et de son écart-type, entre les cas H150 - IT, H30 - WALE - IT, H30 - SM - IT et H30 - SMD - IT.



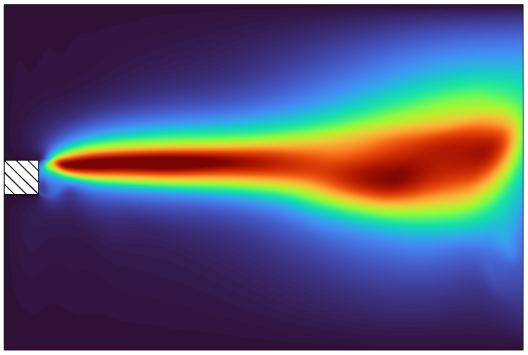
(a) RA : H150 - IT



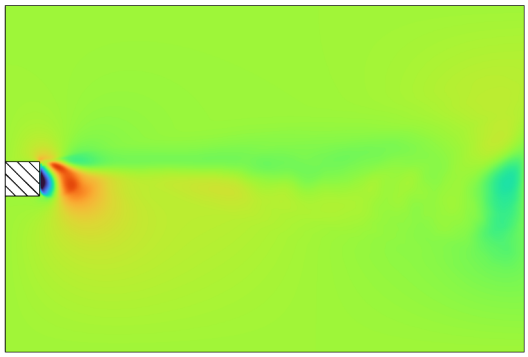
(b) RA RMSD : H150 - IT



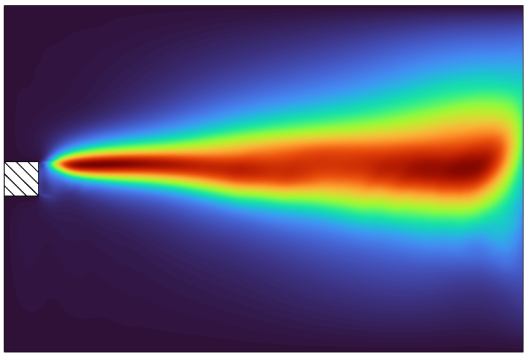
(c) RA : H30 - WALE - IT



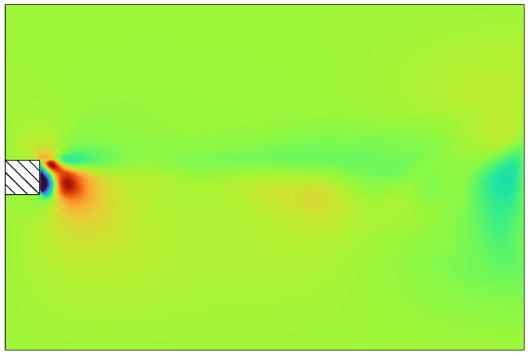
(d) RA RMSD : H30 - WALE - IT



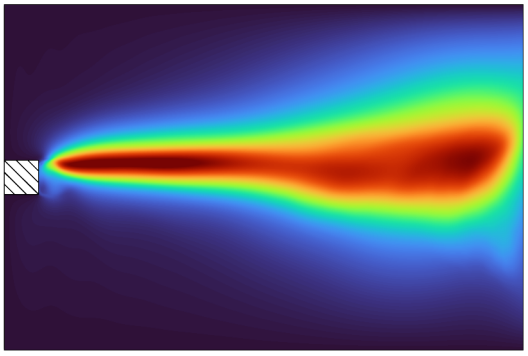
(e) RA : H30 - SM - IT



(f) RA RMSD : H30 - SM - IT

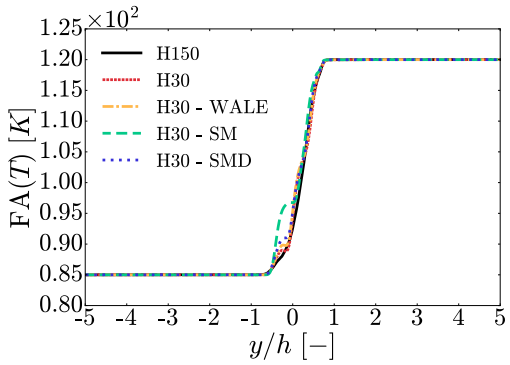


(g) RA : H30 - SMD - IT

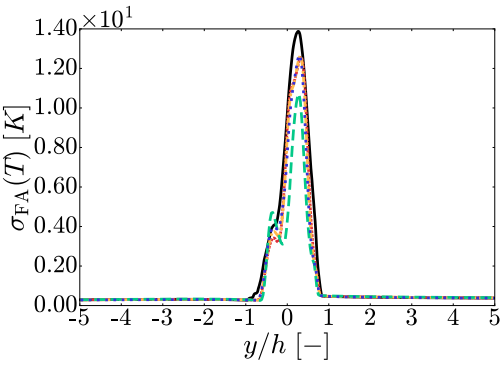


(h) RA RMSD : H30 - SMD - IT

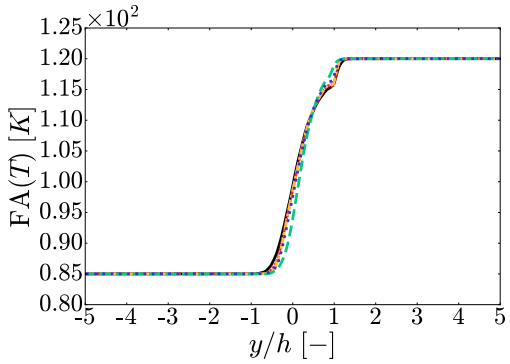
FIGURE D.5 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **vitesse transverse** et de son écart-type, entre les cas H150 - IT, H30 - WALE - IT, H30 - SM - IT et H30 - SMD - IT.



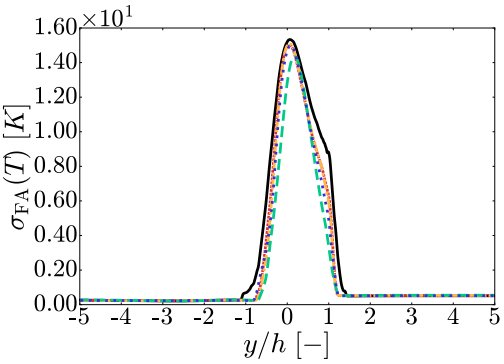
$x/h = 1$ (FA)



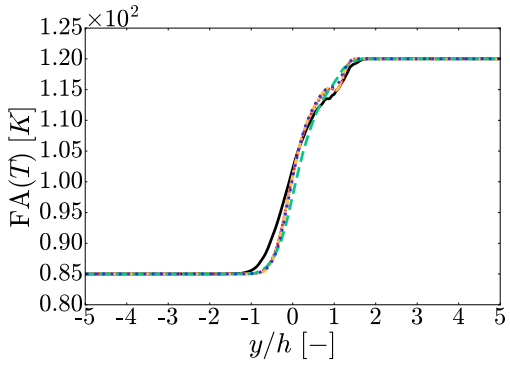
$x/h = 1$ (FA RMSD)



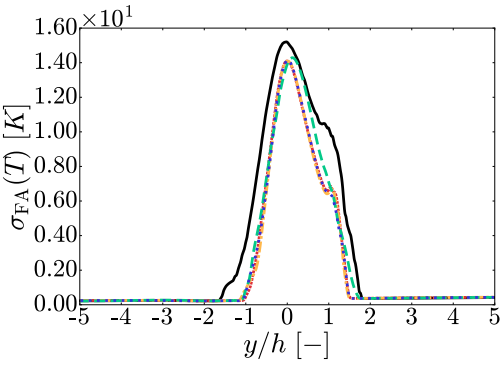
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

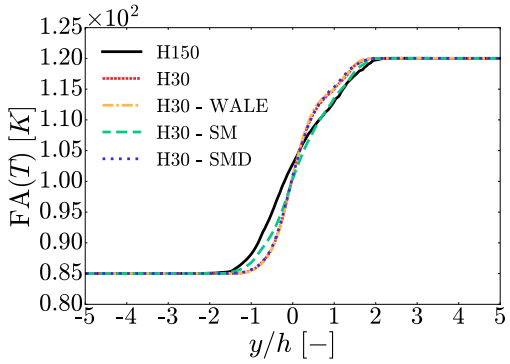


$x/h = 5$ (FA)

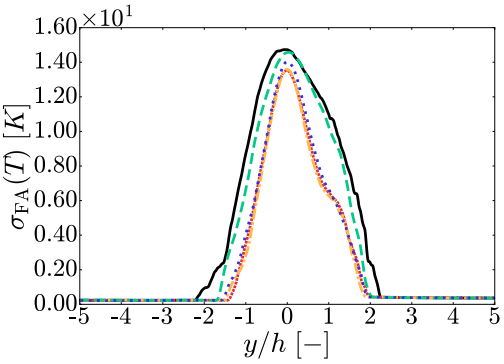


$x/h = 5$ (FA RMSD)

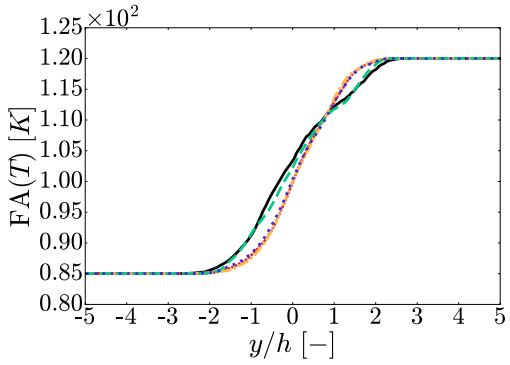
FIGURE D.6 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



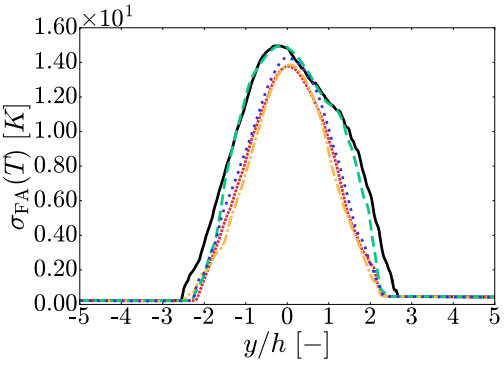
$x/h = 7$ (FA)



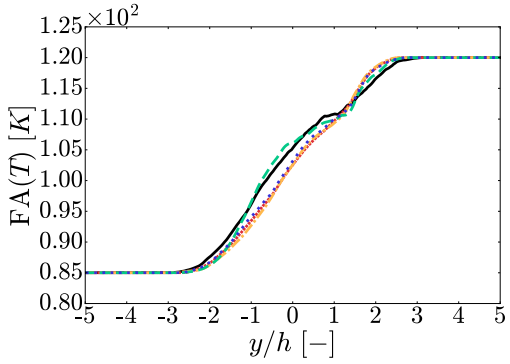
$x/h = 7$ (FA RMSD)



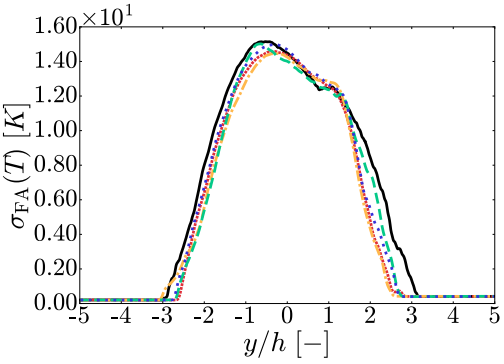
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

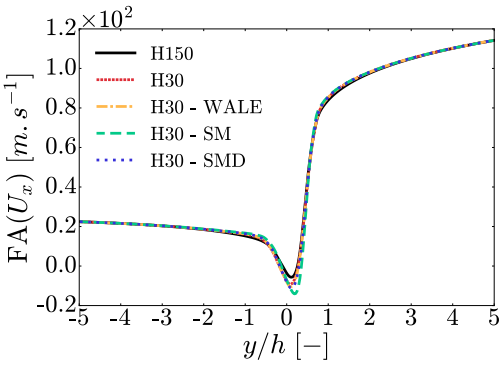


$x/h = 11$ (FA)

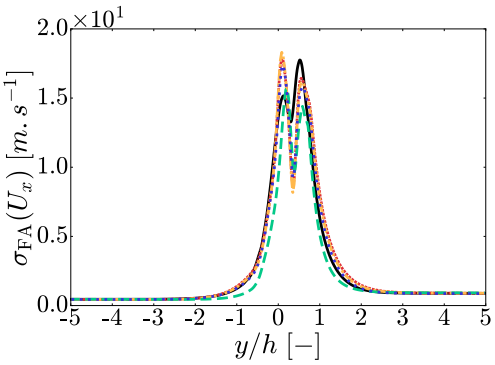


$x/h = 11$ (FA RMSD)

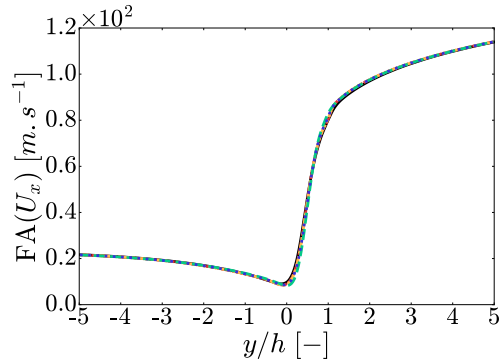
FIGURE D.7 – Suite de la Fig. D.6.



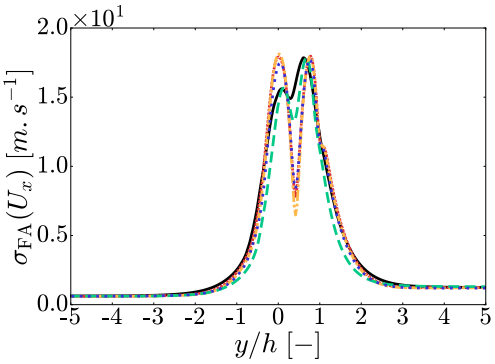
$x/h = 1$ (FA)



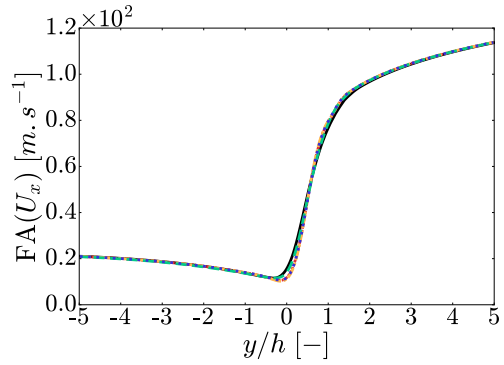
$x/h = 1$ (FA RMSD)



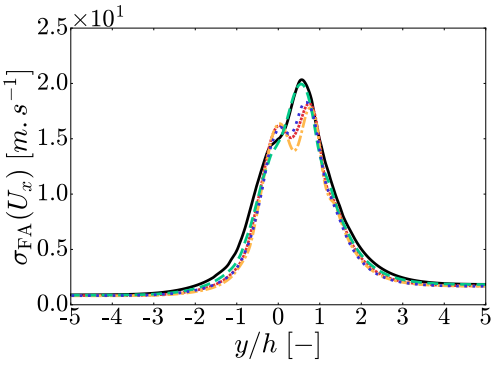
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

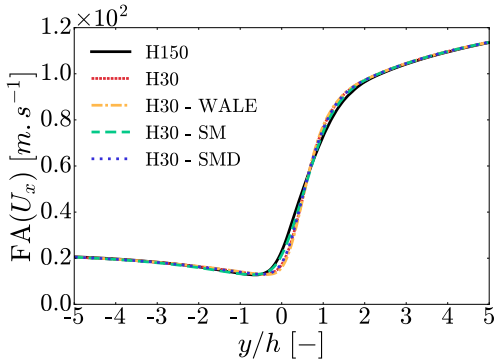


$x/h = 5$ (FA)

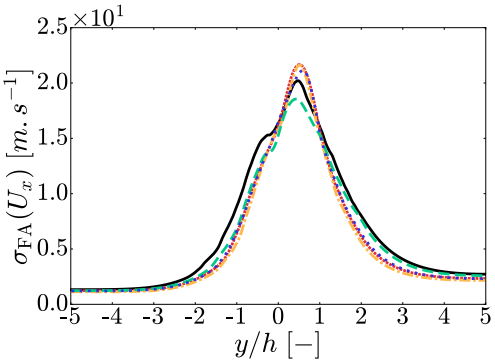


$x/h = 5$ (FA RMSD)

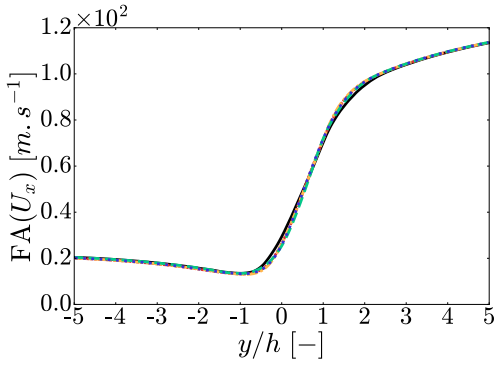
FIGURE D.8 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



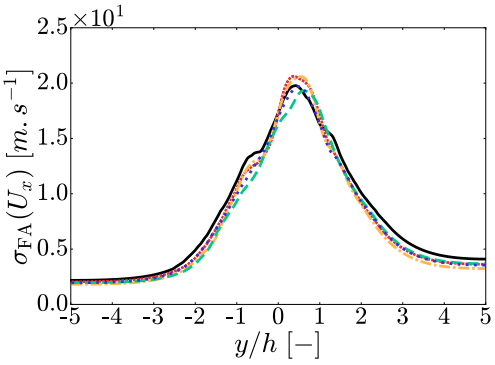
$x/h = 7$ (FA)



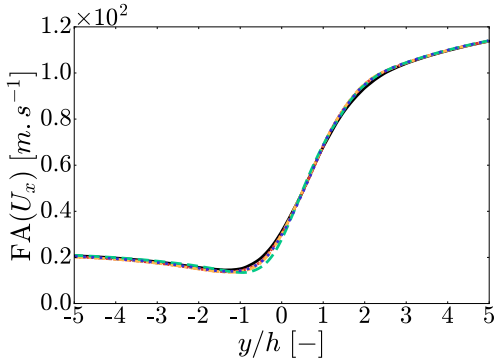
$x/h = 7$ (FA RMSD)



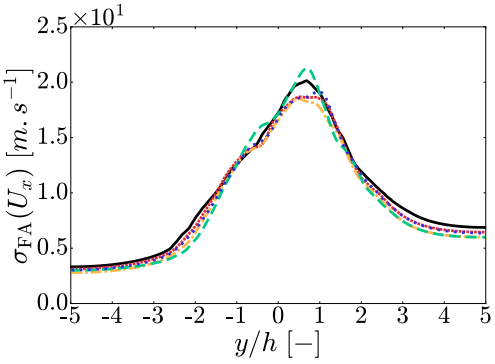
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

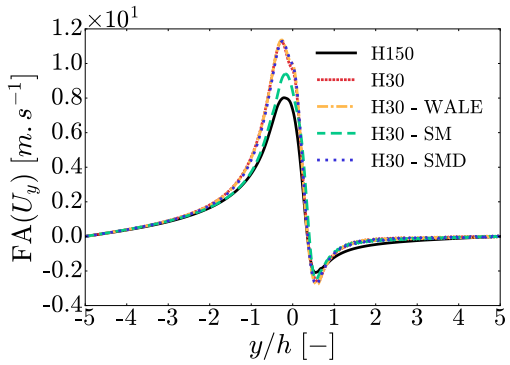


$x/h = 11$ (FA)

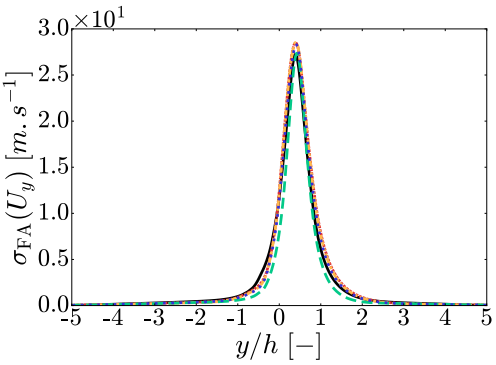


$x/h = 11$ (FA RMSD)

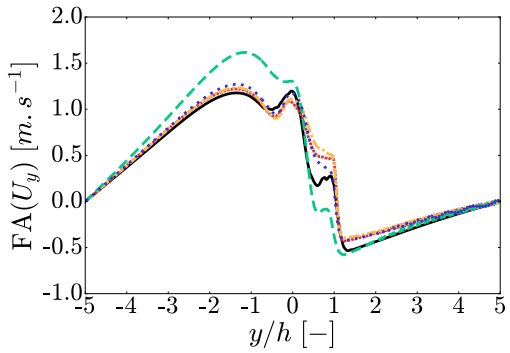
FIGURE D.9 – Suite de la Fig. D.8.



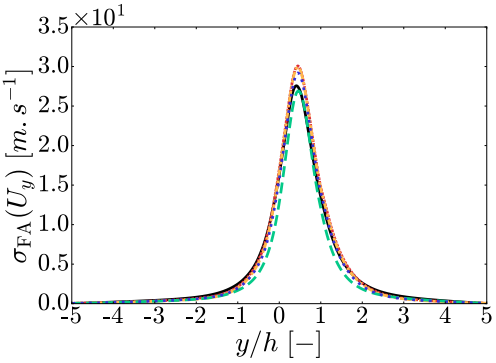
$x/h = 1$ (FA)



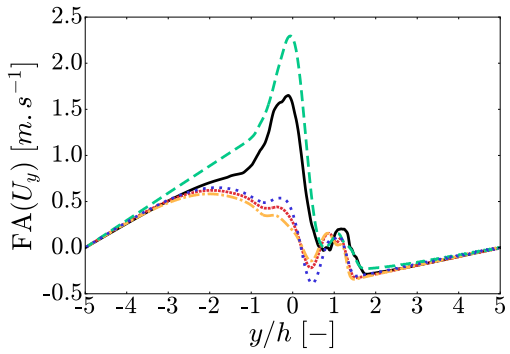
$x/h = 1$ (FA RMSD)



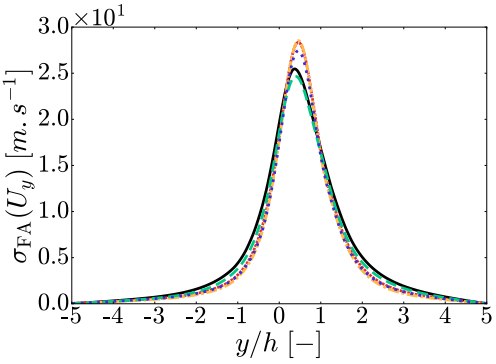
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

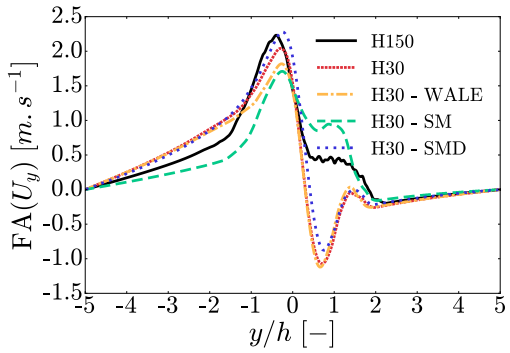


$x/h = 5$ (FA)

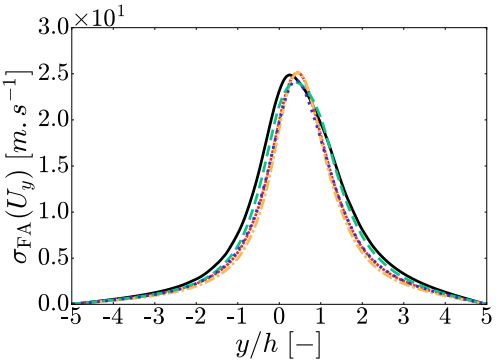


$x/h = 5$ (FA RMSD)

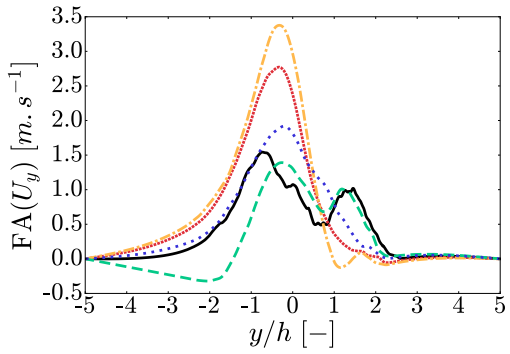
FIGURE D.10 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



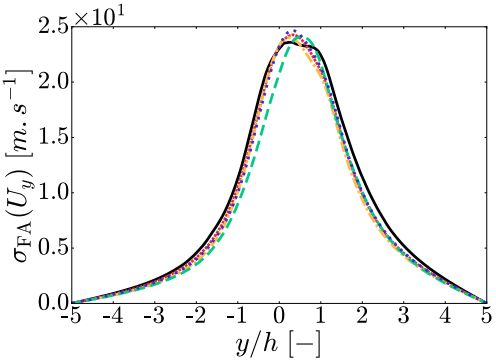
$x/h = 7$ (FA)



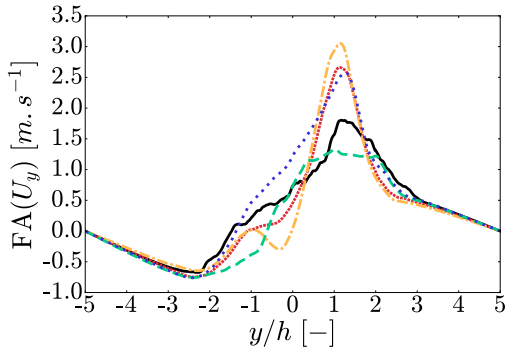
$x/h = 7$ (FA RMSD)



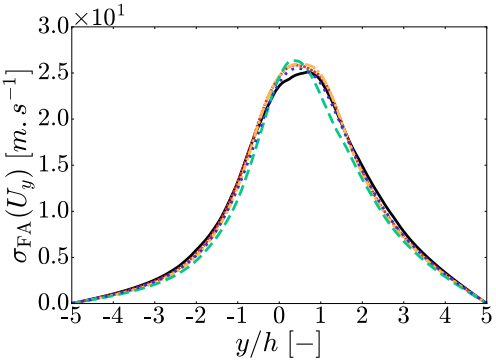
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)

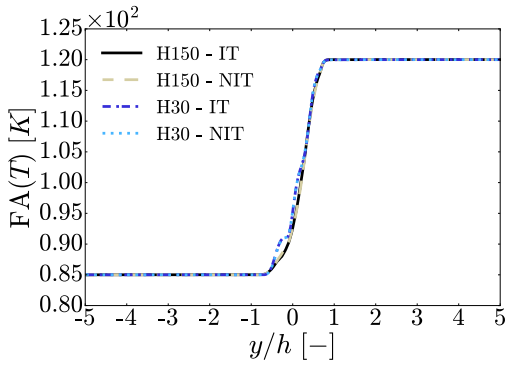


$x/h = 11$ (FA RMSD)

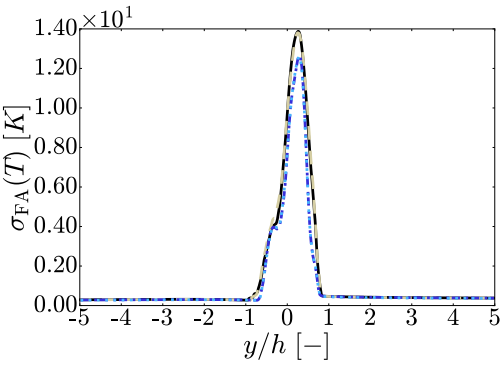
FIGURE D.11 – Suite de la Fig. D.10.

D.2 Compléments profils IT vs NIT

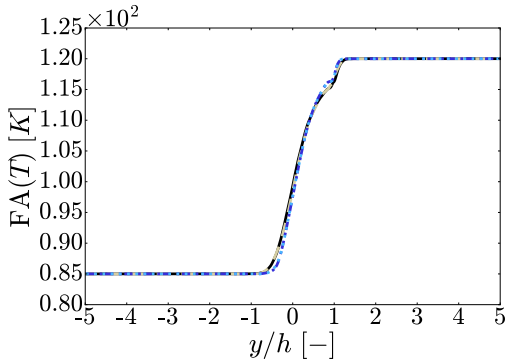
De la même façon, les profils des principales grandeurs caractéristiques de l'écoulement moyennées au sens de Favre avec l'inclusion de la diffusion non-idéale des flux de diffusion, à savoir la température, la vitesse axiale ainsi que la vitesse transverse sont également disponibles dans les Fig. D.12, D.13, D.14, D.15, D.16 et D.17, afin de proposer une base de données directement comparable avec des résultats issus de simulations RANS.



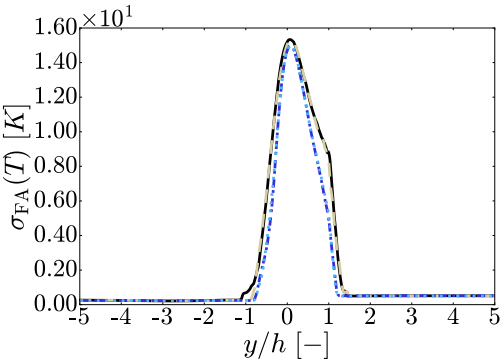
$x/h = 1$ (FA)



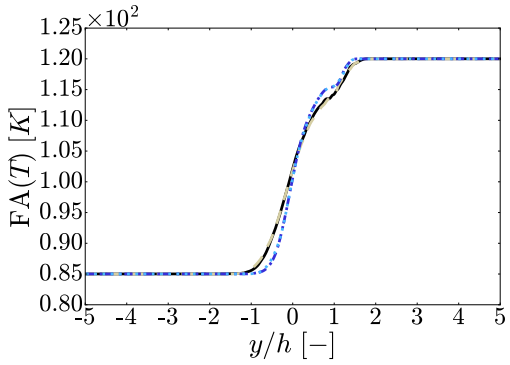
$x/h = 1$ (FA RMSD)



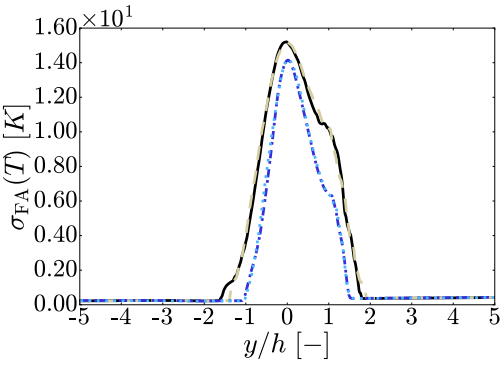
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

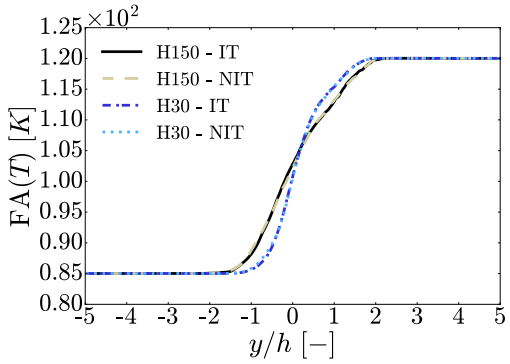


$x/h = 5$ (FA)

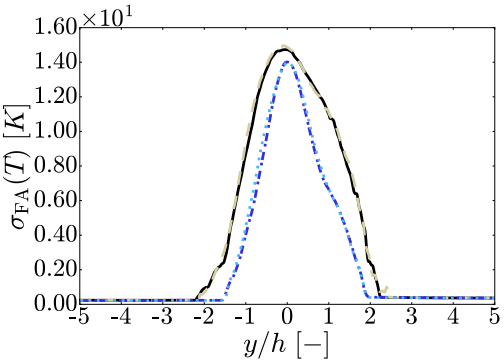


$x/h = 5$ (FA RMSD)

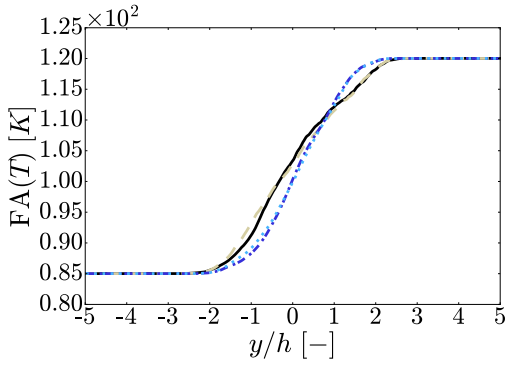
FIGURE D.12 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



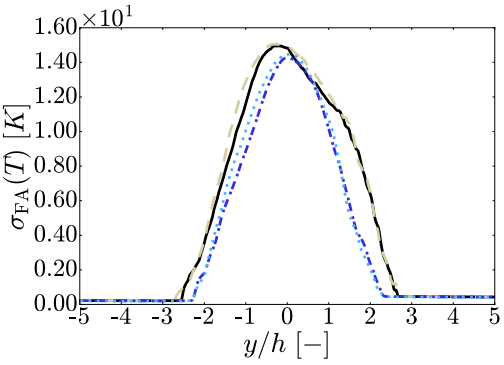
$x/h = 7$ (FA)



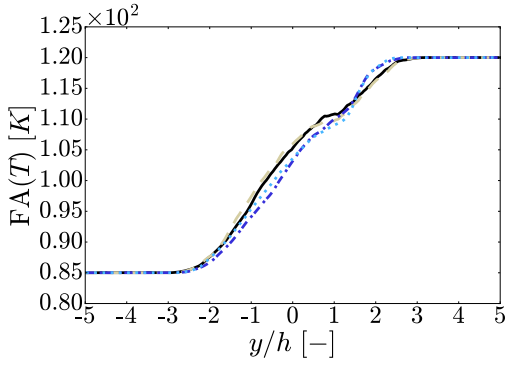
$x/h = 7$ (FA RMSD)



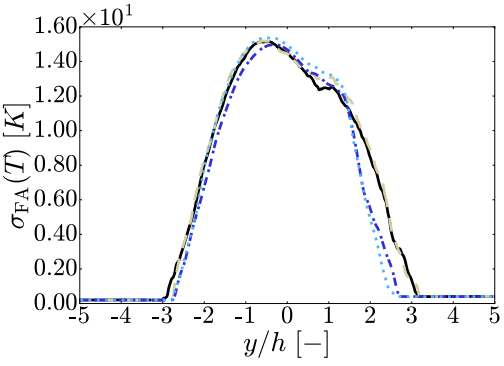
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

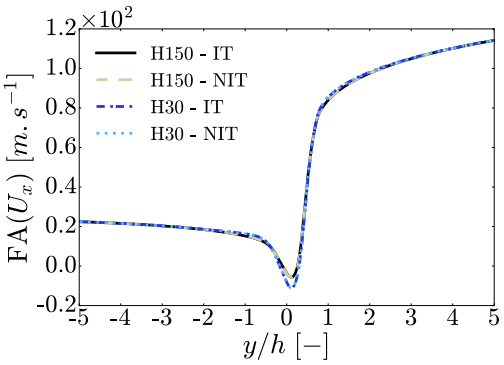


$x/h = 11$ (FA)

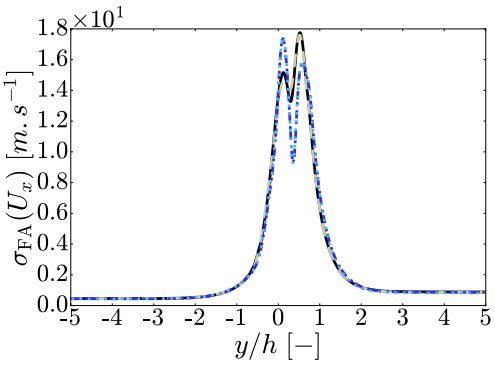


$x/h = 11$ (FA RMSD)

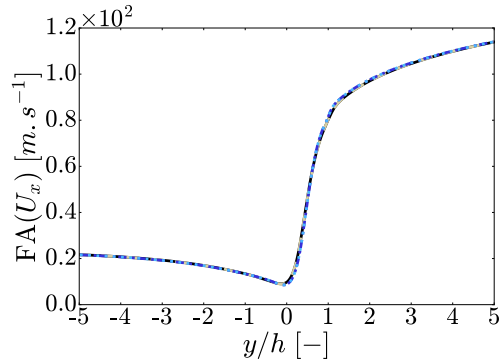
FIGURE D.13 – Suite de la Fig. D.12.



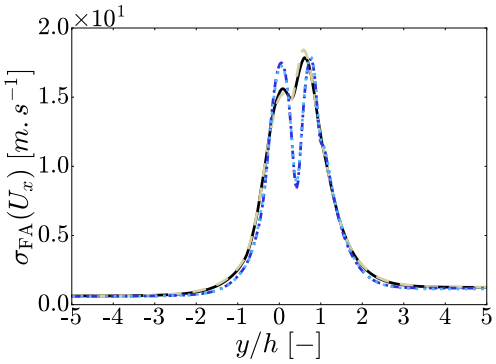
$x/h = 1$ (FA)



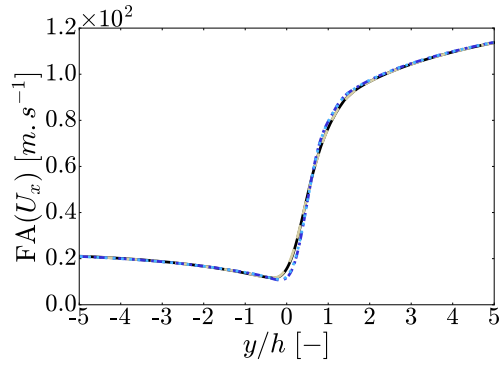
$x/h = 1$ (FA RMSD)



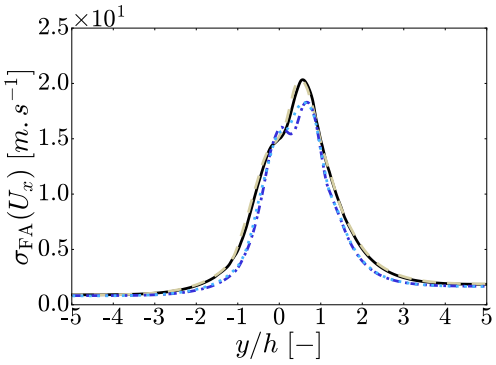
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

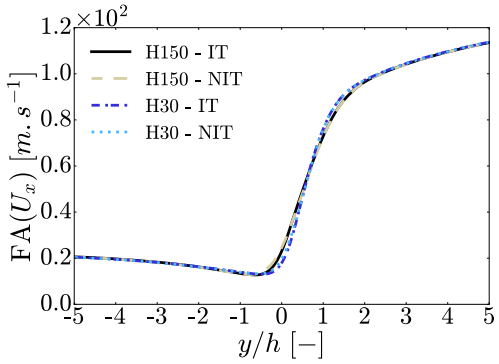


$x/h = 5$ (FA)

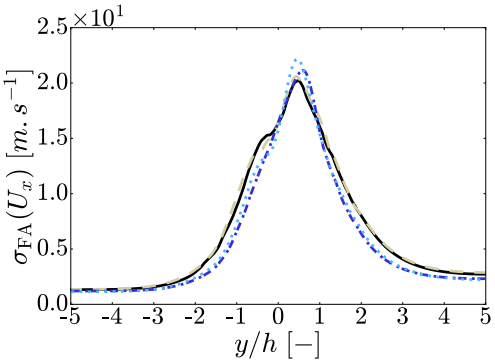


$x/h = 5$ (FA RMSD)

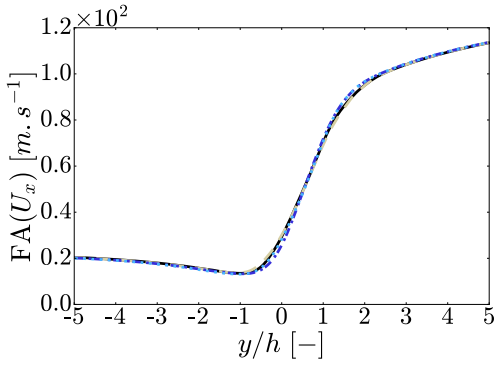
FIGURE D.14 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



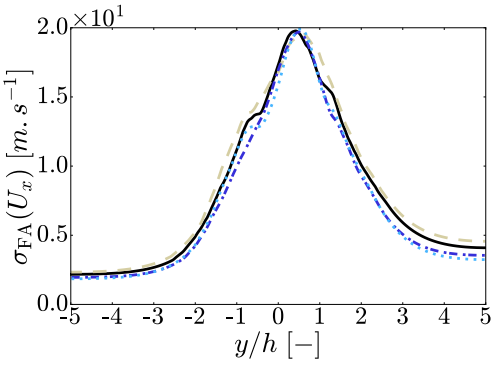
$x/h = 7$ (FA)



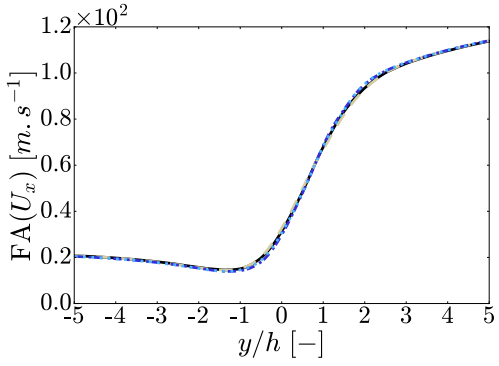
$x/h = 7$ (FA RMSD)



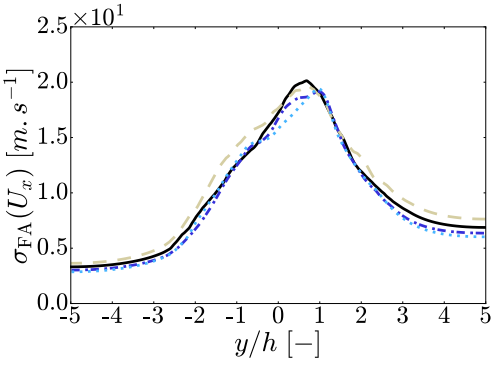
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

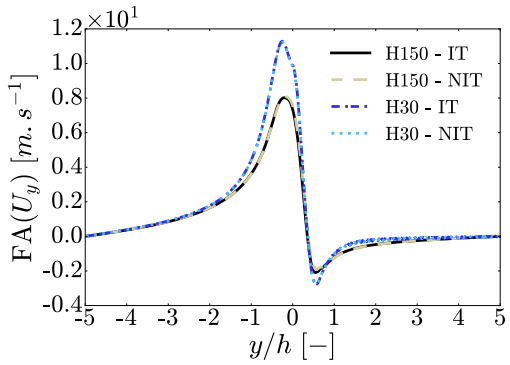


$x/h = 11$ (FA)

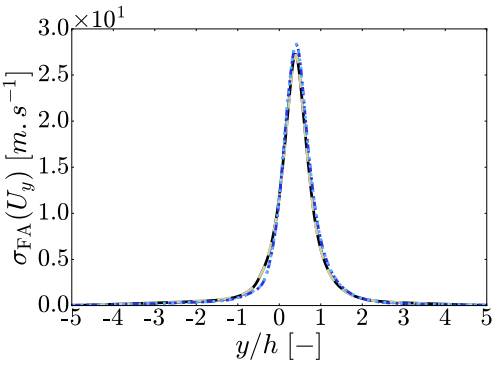


$x/h = 11$ (FA RMSD)

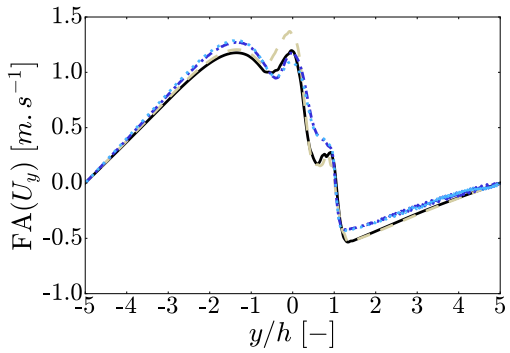
FIGURE D.15 – Suite de la Fig. D.14.



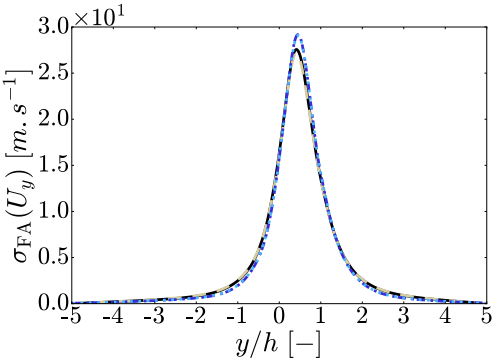
$x/h = 1$ (FA)



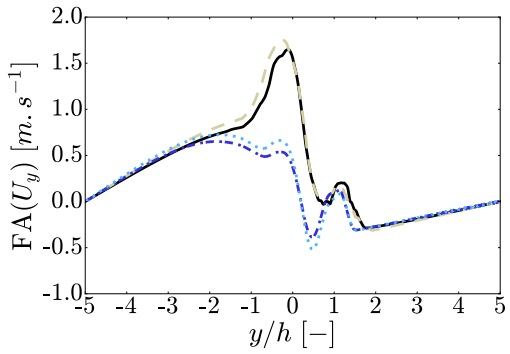
$x/h = 1$ (FA RMSD)



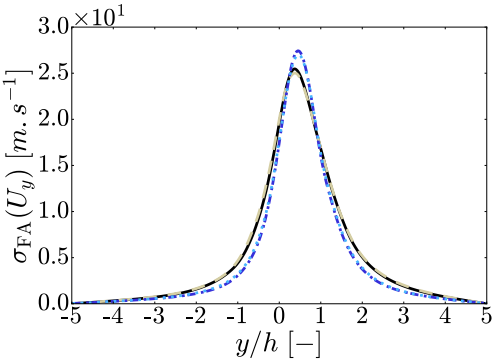
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

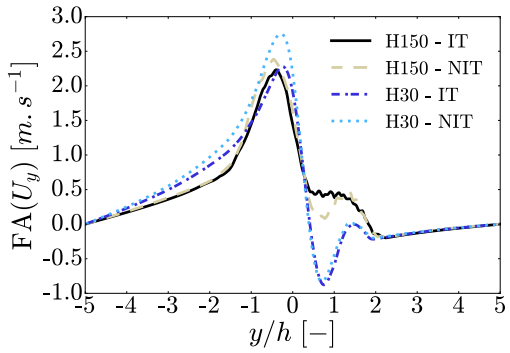


$x/h = 5$ (FA)

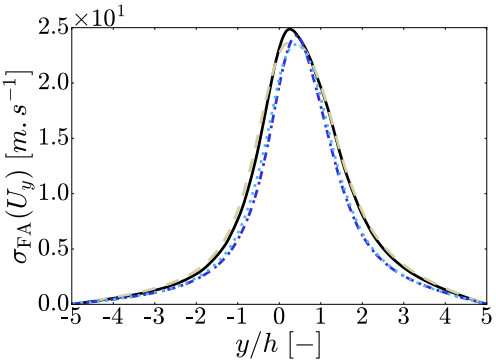


$x/h = 5$ (FA RMSD)

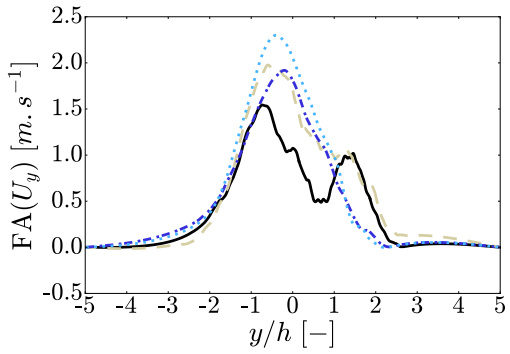
FIGURE D.16 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



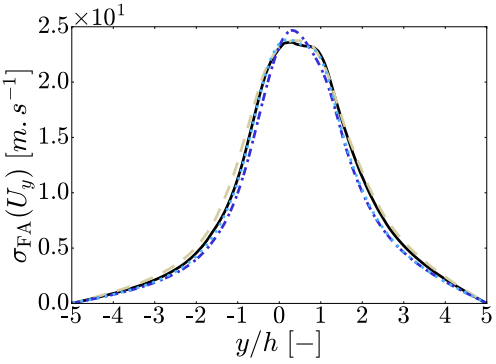
$x/h = 7$ (FA)



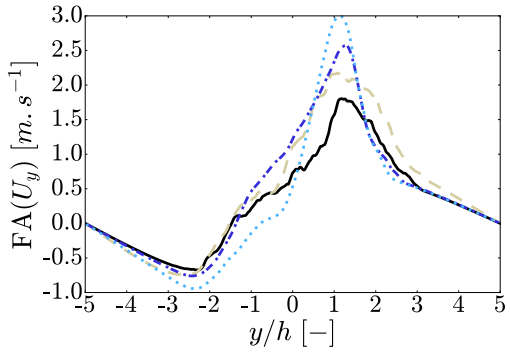
$x/h = 7$ (FA RMSD)



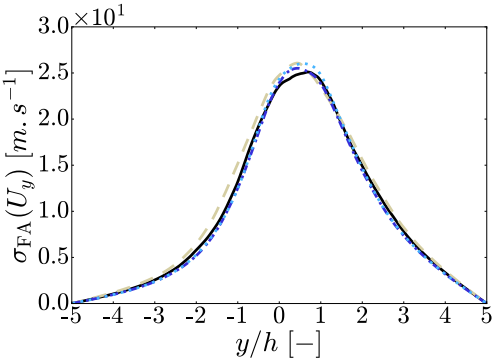
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE D.17 – Suite de la Fig. D.16.

Annexe E

Suppléments du chapitre 6

E.1 Compléments de la simulation splitter-plate

E.1.1 Champs moyens

Les Fig. E.1, E.2, E.3, E.4, E.5, E.6, E.7, E.8, E.9 et E.10 comparent respectivement les champs moyens de masse volumique, température, vitesse axiale, vitesse transverse, taux de dégagement de chaleur, ainsi que les champs moyens des fractions massiques de CH_4, O_2, CO_2, H_2O et CO, obtenus avec les simulations H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.

Les principaux résultats issus des simulations étant largement commentés et analysés à l'aide des profils moyens dans la section 6.3.2.2, ces champs moyens ne seront pas décrits en détail ici, puisque des conclusions similaires en émanent.

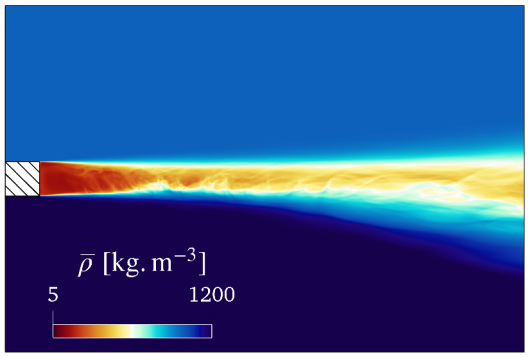
E.1.2 Profils moyens

Les Fig. E.11 et E.12, mettent en évidence les profils de température moyenne en moyenne de Favre.

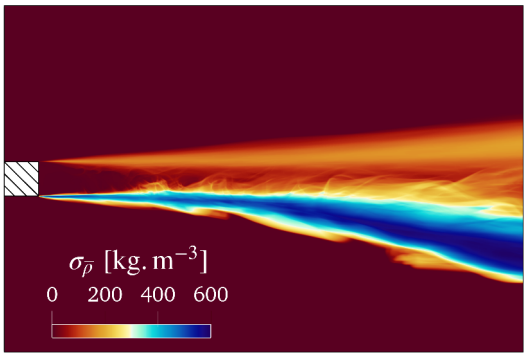
On remarque que la température de la couche de mélange dans le cas H150 chute assez rapidement et prend des valeurs étonnamment faibles ($T < 1000$ K pour $x/h \geq 5$). On peut expliquer ceci par le fait que comme la moyenne de Favre est une moyenne pondérée par la masse volumique, celle-ci tend à donner plus de poids aux cellules ayant une masse volumique importante, qui sont également celles ayant les températures les plus faibles. Or dans le cas particulier de cet écoulement, une masse volumique très importante est à la fois présente côté méthane et côté oxygène, en plus d'être associée à des très faibles températures.

Par ailleurs, un très fort gradient de masse volumique est également présent à basse température lors du passage de l'état de liquide compressé à celui de fluide supercritique, pour une augmentation relativement faible de température (phénomène hautement non linéaire).

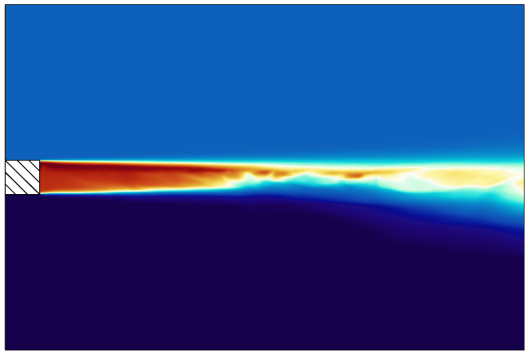
Il a également été constaté dans le cas H150 que parfois des fronts froids et denses pouvaient venir rompre le front de flamme. De la même façon, des structures de prémélange relativement froides peuvent aussi se former avant de brûler, produisant une alternance locale de gaz frais et de gaz chauds. Il suffit qu'un tel évènement se produise à un instant donné pour qu'il diminue la valeur de température moyenne au sens de Favre pendant relativement longtemps, à cause du poids accordé au faibles valeurs de masse volumiques. Si ce genre phénomène se produit avec une certaine fréquence, il peut venir diminuer fortement la valeur de température moyenne. La



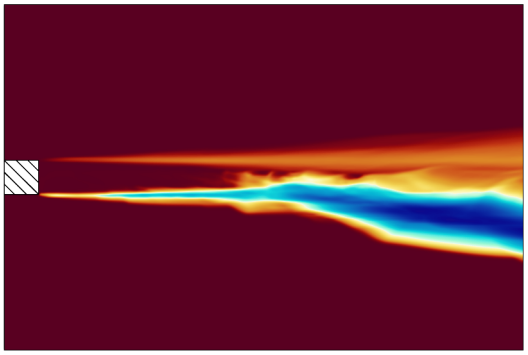
(a) RA : H150



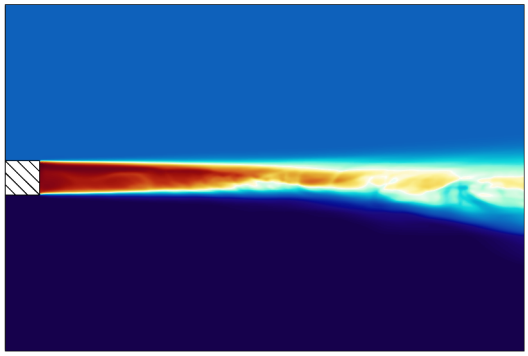
(b) RA RMSD : H150



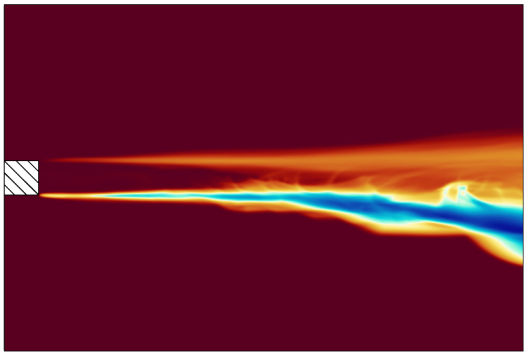
(c) RA : H30 - NO TCI



(d) RA RMSD : H30 - NO TCI

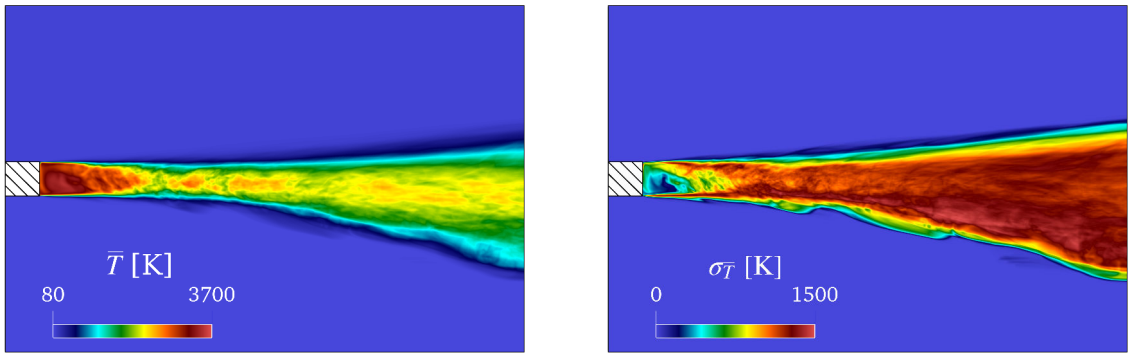


(e) RA : H30 - TFLES

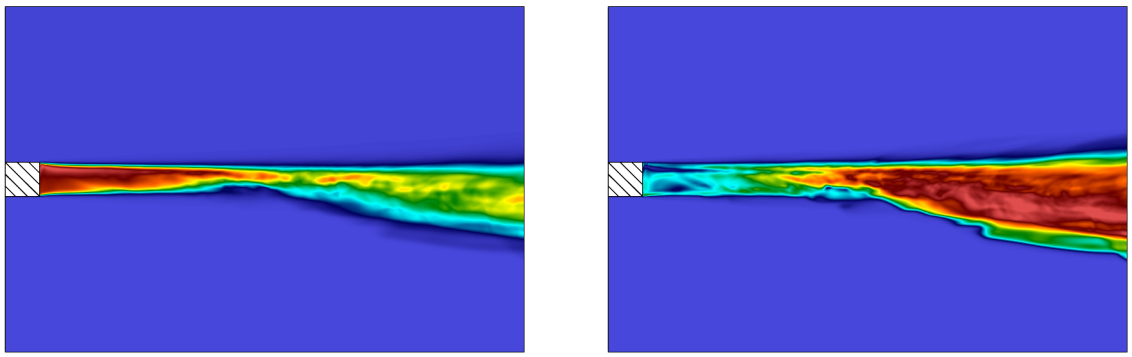


(f) RA RMSD : H30 - TFLES

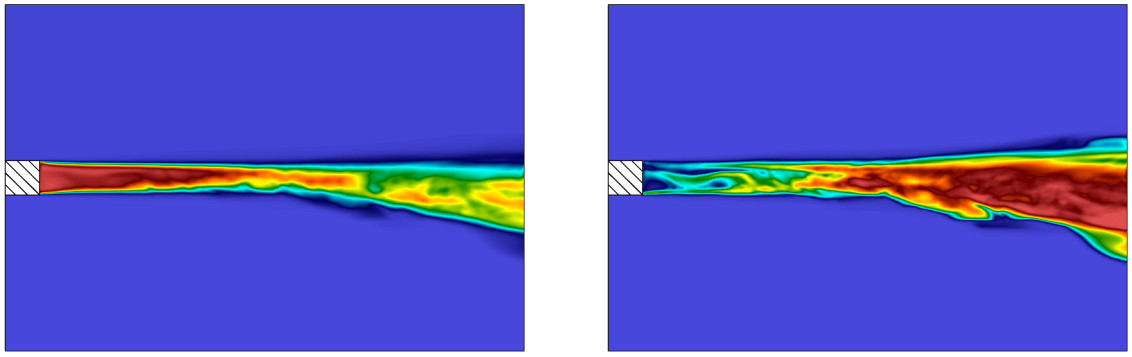
FIGURE E.1 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **masse volumique** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.



(a) RA : H150 (b) RA RMSD : H150

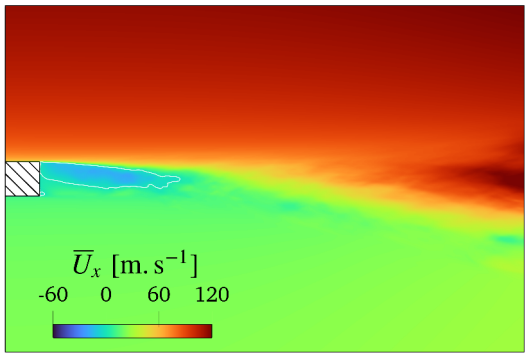


(c) RA : H30 - NO TCI (d) RA RMSD : H30 - NO TCI

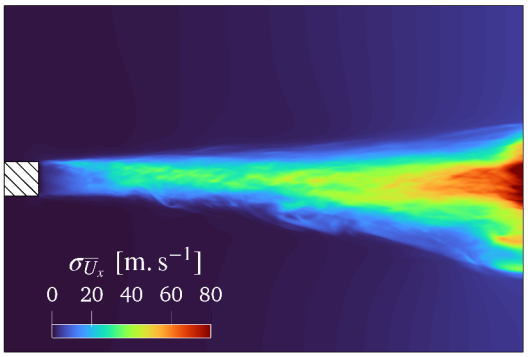


(e) RA : H30 - TFLES (f) RA RMSD : H30 - TFLES

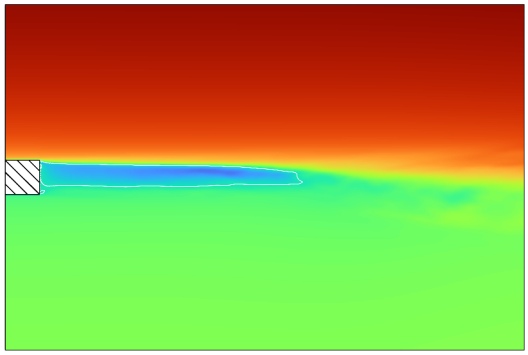
FIGURE E.2 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **température** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.



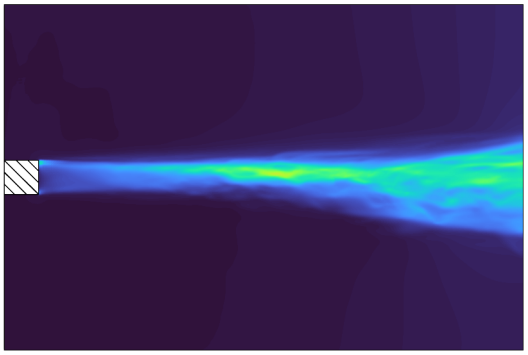
(a) RA : H150



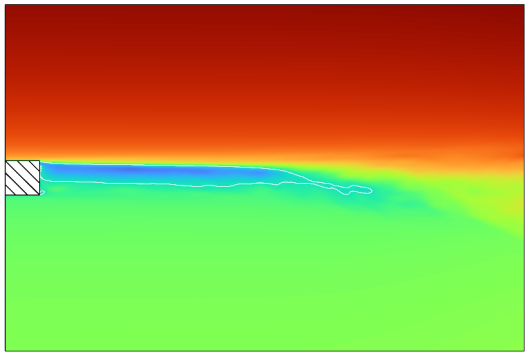
(b) RA RMSD : H150



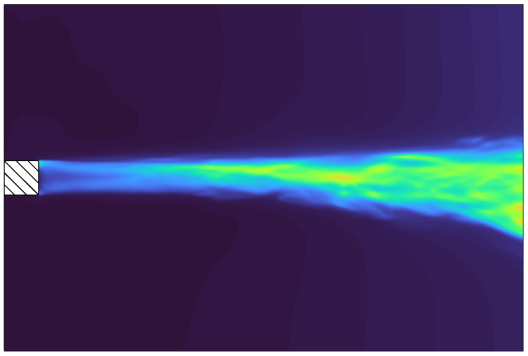
(c) RA : H30 - NO TCI



(d) RA RMSD : H30 - NO TCI

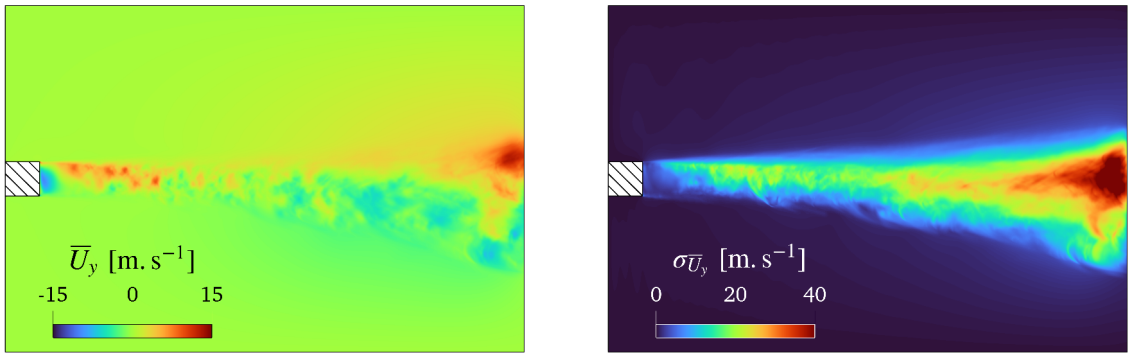


(e) RA : H30 - TFLES



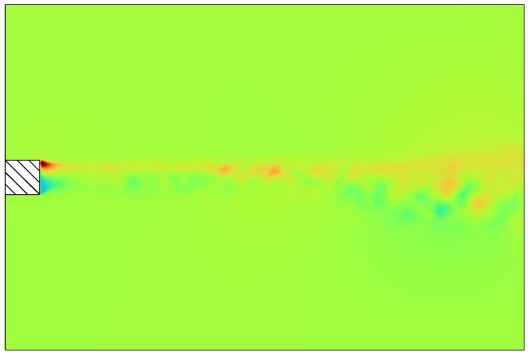
(f) RA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.3 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **vitesse axiale** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES. La ligne blanche représente l'iso-contour de vitesse axiale moyenne nulle.

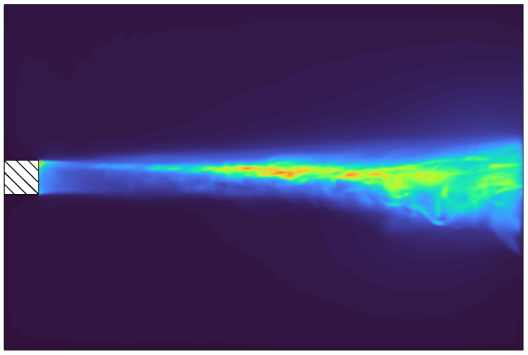


(a) RA : H150

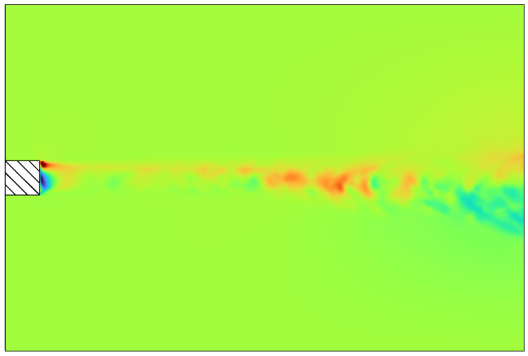
(b) RA RMSD : H150



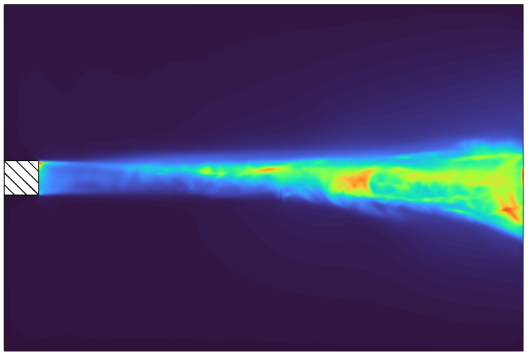
(c) RA : H30 - NO TCI



(d) RA RMSD : H30 - NO TCI

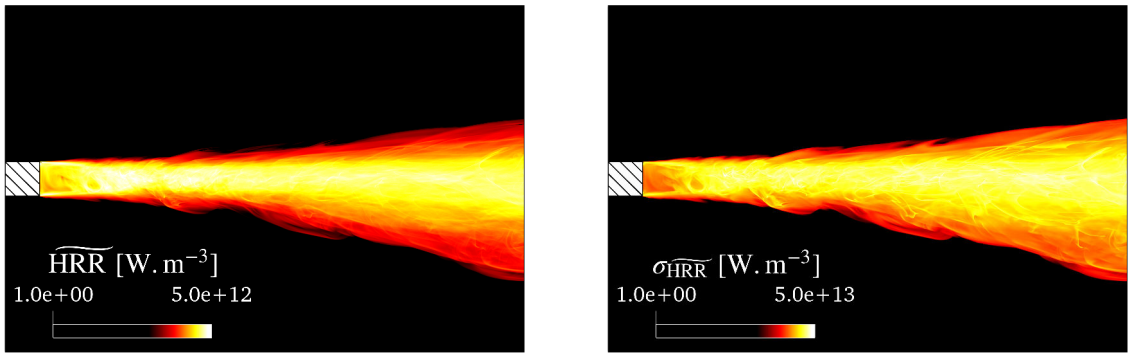


(e) RA : H30 - TFLES

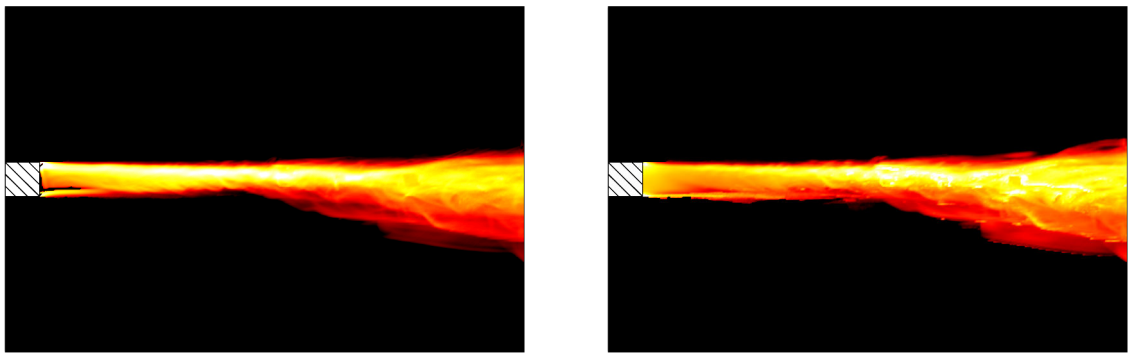


(f) RA RMSD : H30 - TFLES

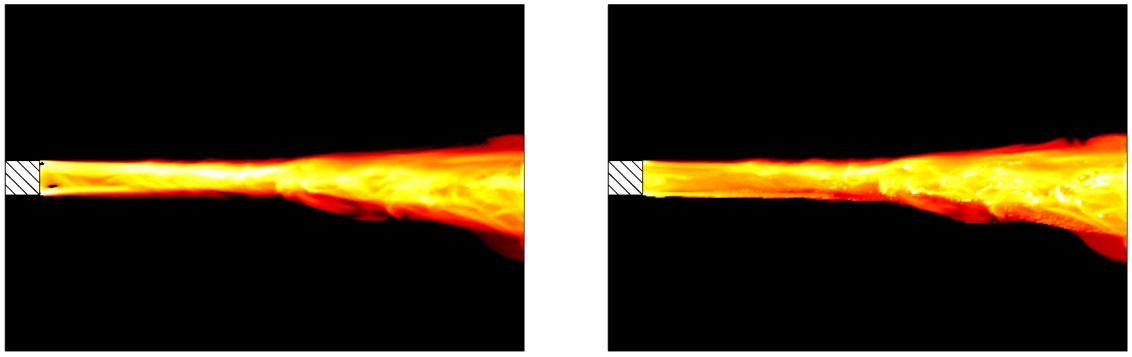
FIGURE E.4 – Comparaison des champs moyens (Reynolds) de **vitesse transverse** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.



(a) FA : H150 (b) FA RMSD : H150

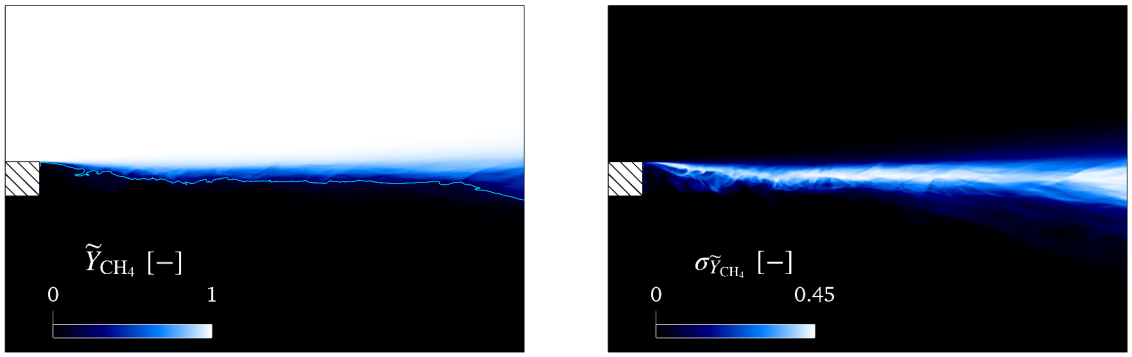


(c) FA : H30 - NO TCI (d) FA RMSD : H30 - NO TCI



(e) FA : H30 - TFLES (f) FA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.5 – Comparaison des champs moyens (Favre) du **taux de dégagement de chaleur**, (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.

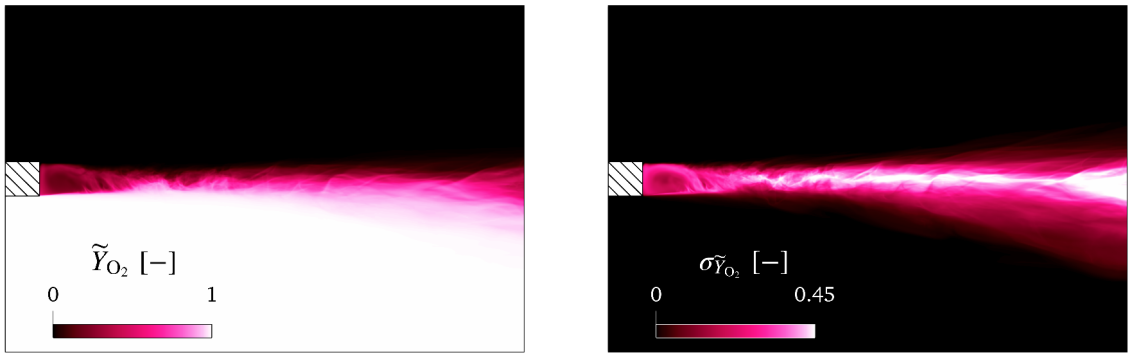


(a) FA : H150 (b) FA RMSD : H150

(c) FA : H30 - NO TCI (d) FA RMSD : H30 - NO TCI

(e) FA : H30 - TFLES (f) FA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.6 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique de CH_4** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES. L'iso-ligne cyan représente la ligne stœchiométrique moyenne.



(a) FA : H150

(b) FA RMSD : H150

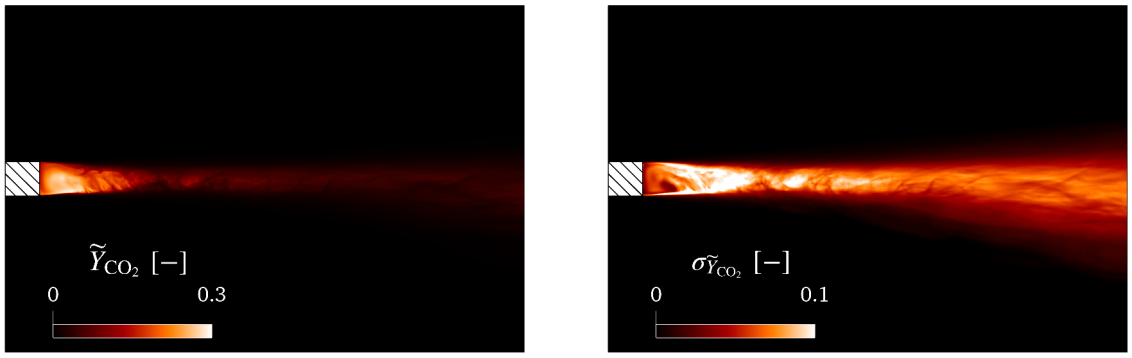
(c) FA : H30 - NO TCI

(d) FA RMSD : H30 - NO TCI

(e) FA : H30 - TFLES

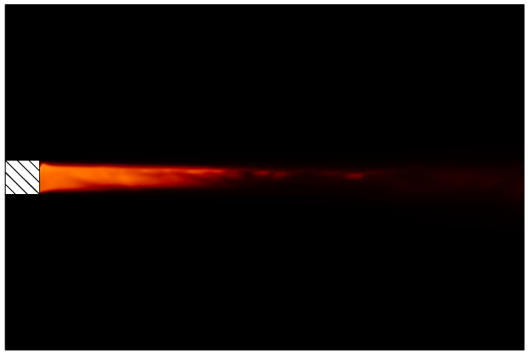
(f) FA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.7 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique d'O_2** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.

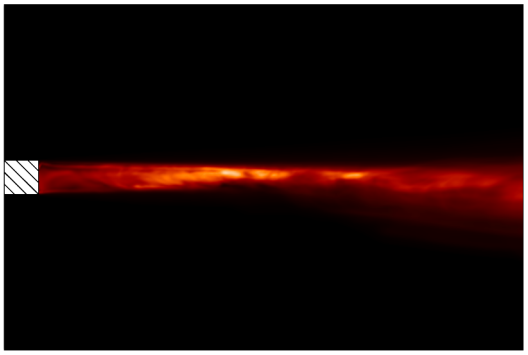


(a) FA : H150

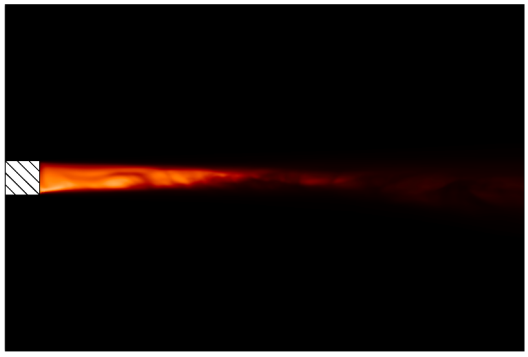
(b) FA RMSD : H150



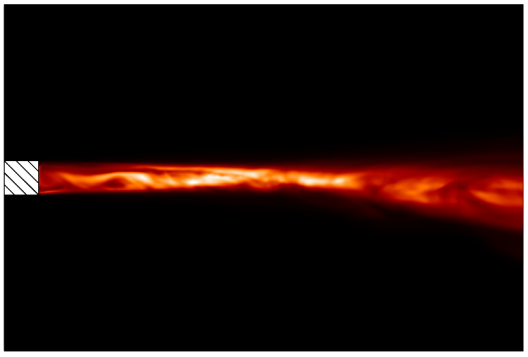
(c) FA : H30 - NO TCI



(d) FA RMSD : H30 - NO TCI

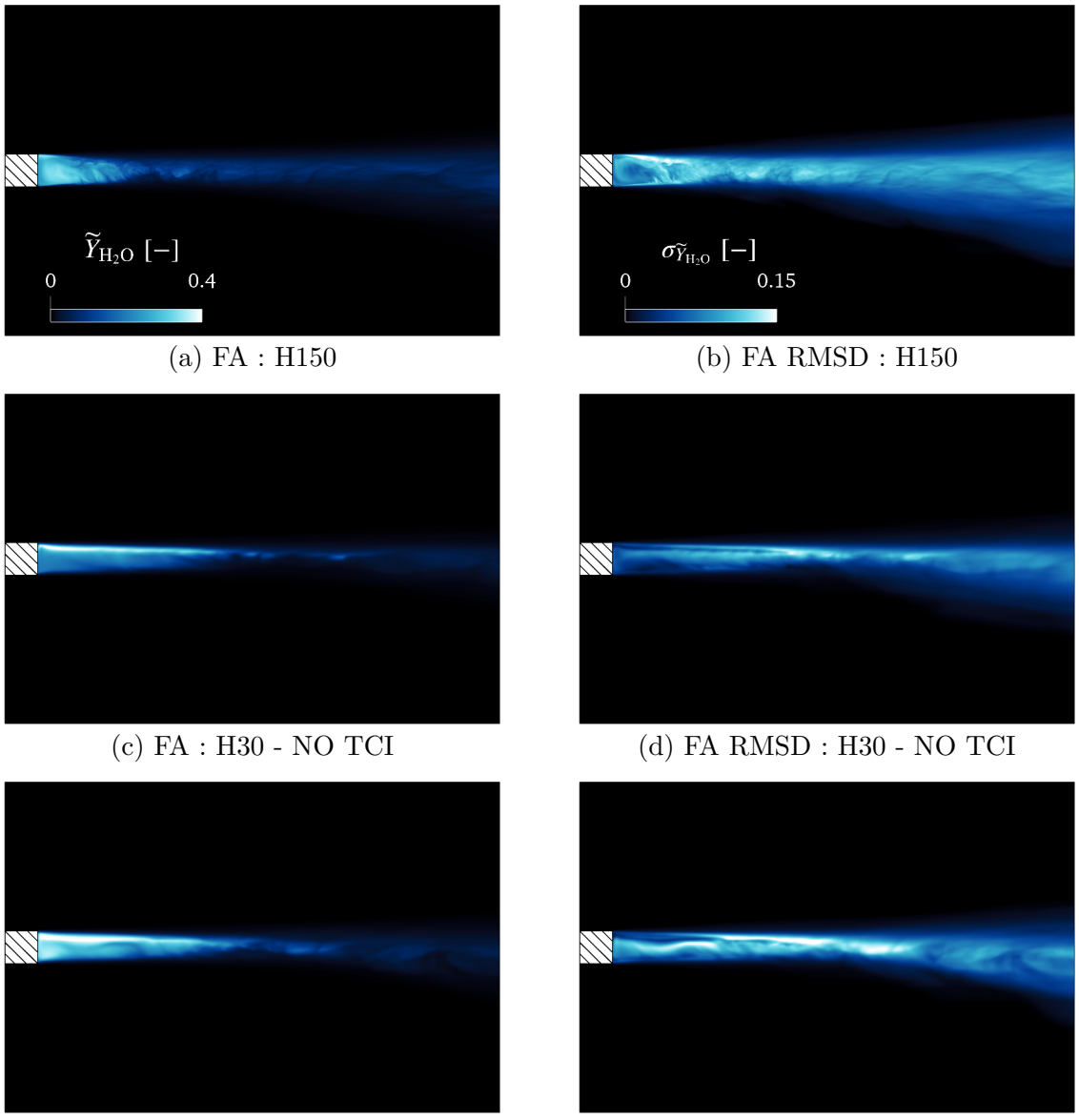


(e) FA : H30 - TFLES



(f) FA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.8 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique de CO_2** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.



(a) FA : H150

(b) FA RMSD : H150

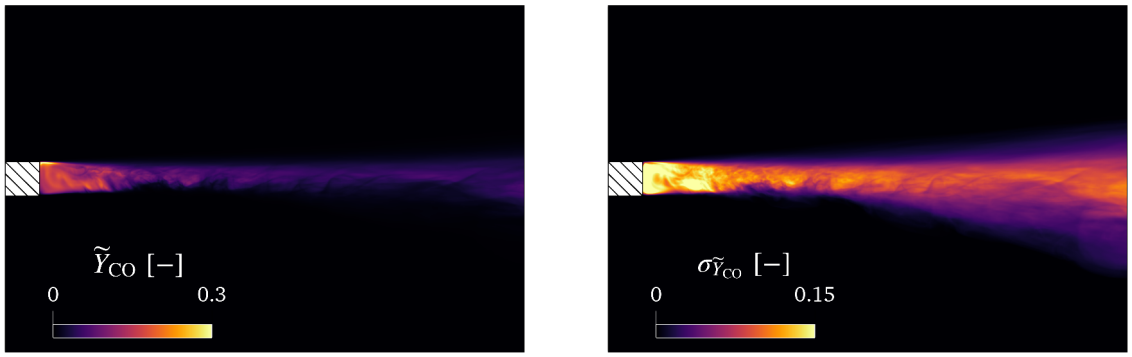
(c) FA : H30 - NO TCI

(d) FA RMSD : H30 - NO TCI

(e) FA : H30 - TFLES

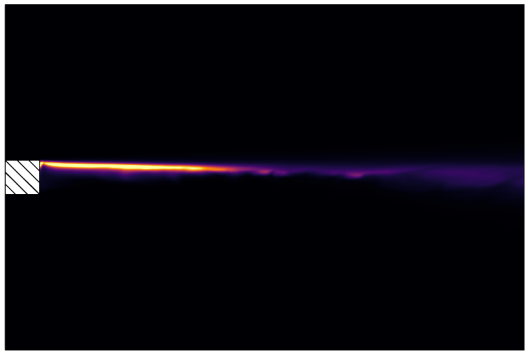
(f) FA RMSD : H30 - TFLES

FIGURE E.9 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique d'H_2O** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.

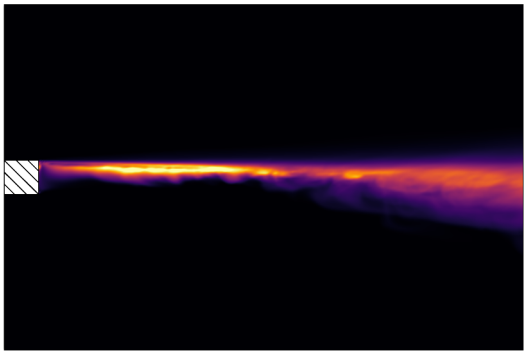


(a) FA : H150

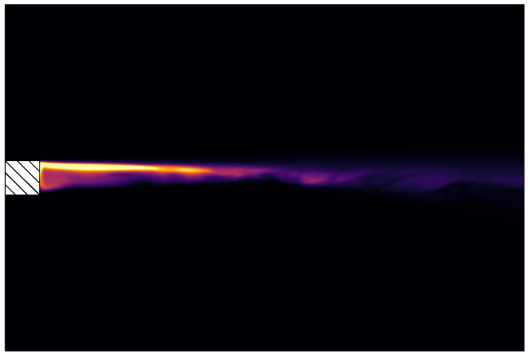
(b) FA RMSD : H150



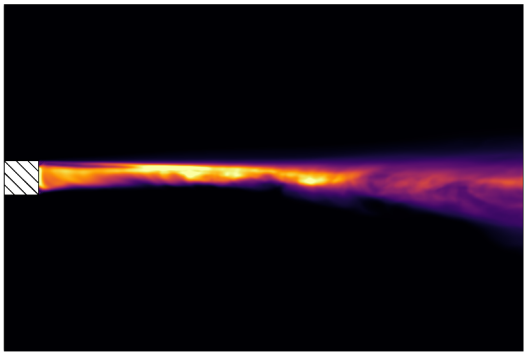
(c) FA : H30 - NO TCI



(d) FA RMSD : H30 - NO TCI

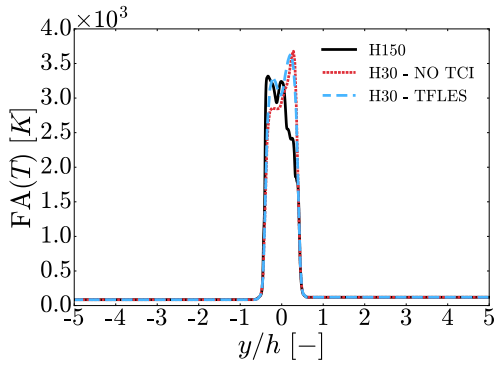


(e) FA : H30 - TFLES

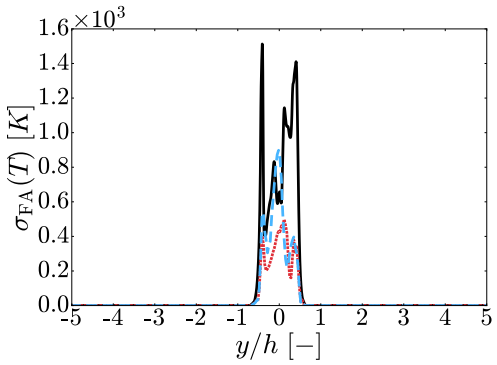


(f) FA RMSD : H30 - TFLES

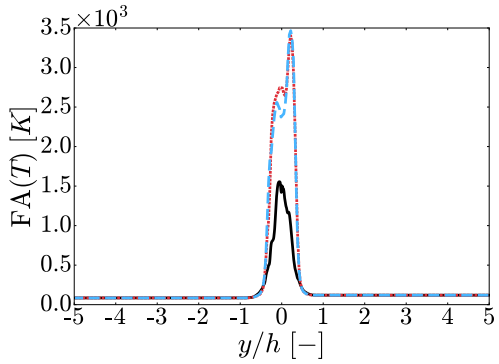
FIGURE E.10 – Comparaison des champs moyens (Favre) de **fraction massique de CO** (colonne de gauche) et de son écart-type (colonne de droite), entre les cas H150, H30 - NO TCI et H30 - TFLES.



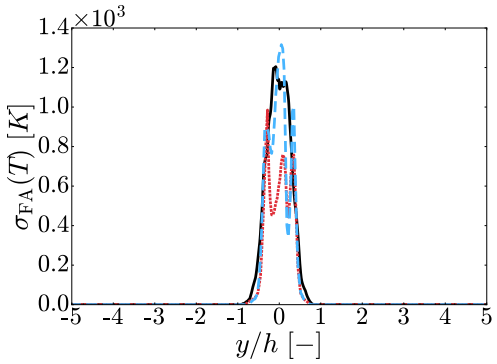
$x/h = 1$ (FA)



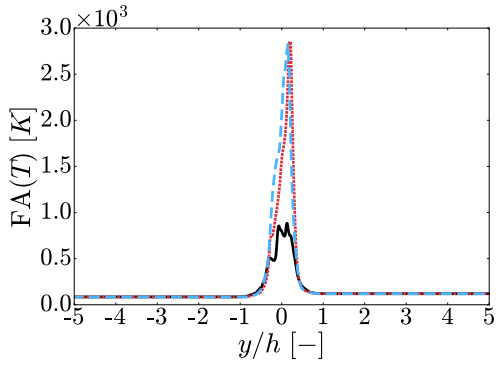
$x/h = 1$ (FA RMSD)



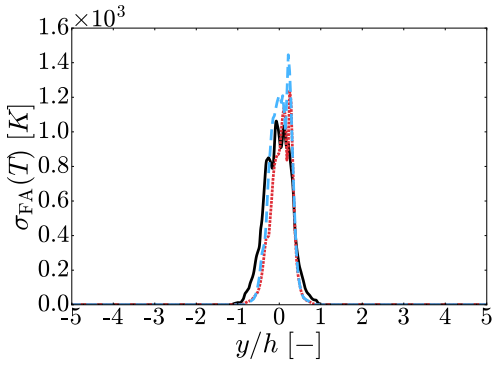
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

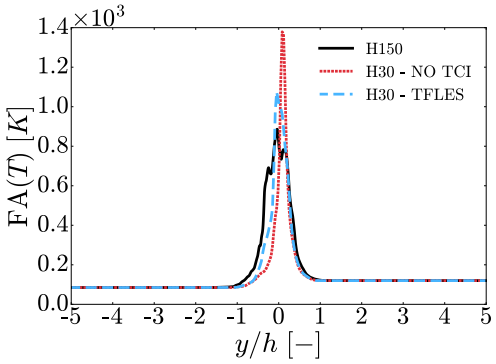


$x/h = 5$ (FA)

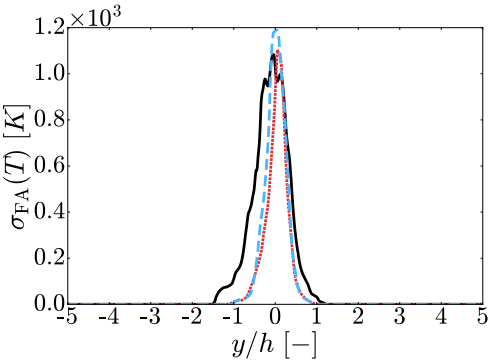


$x/h = 5$ (FA RMSD)

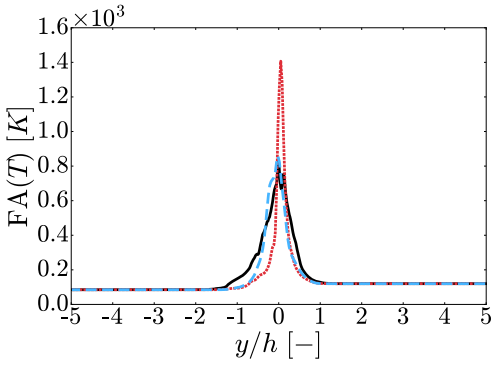
FIGURE E.11 – Profils de **température moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



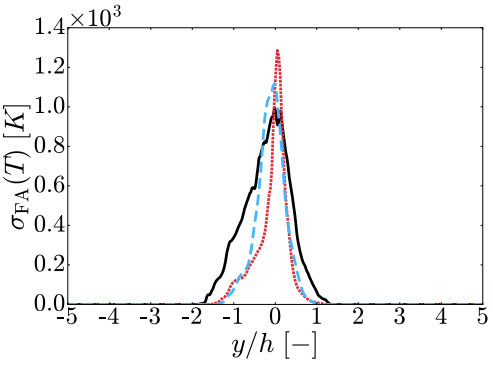
$x/h = 7$ (FA)



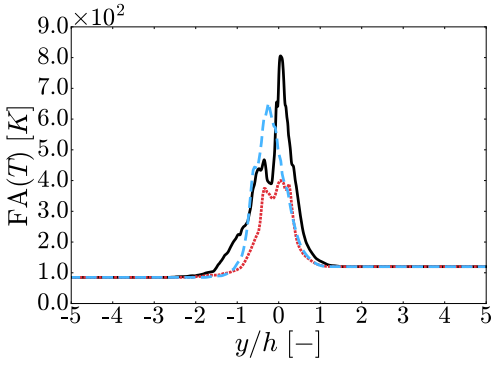
$x/h = 7$ (FA RMSD)



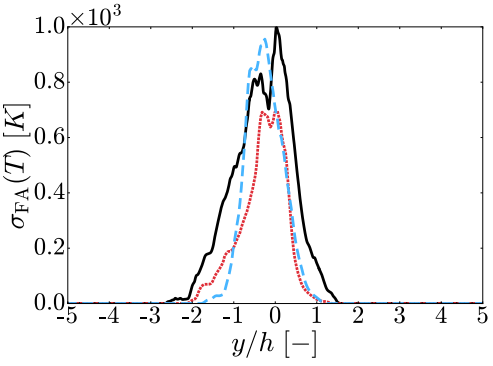
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



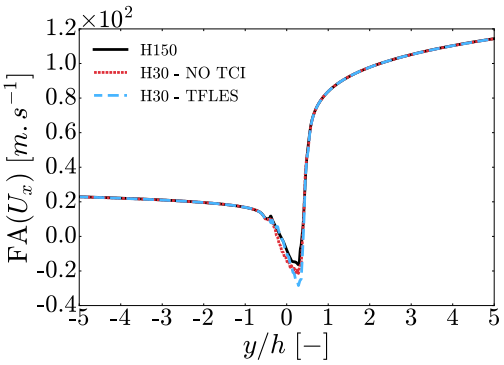
$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE E.12 – Suite de la Fig. E.11.

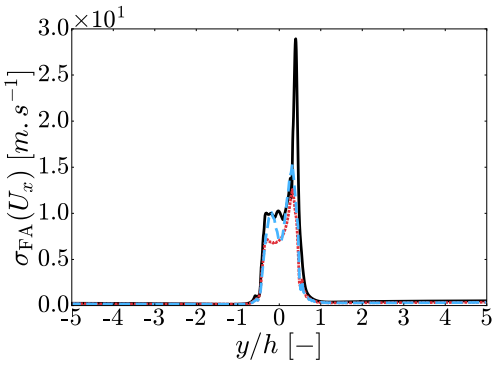
flamme étant plus diffuse est moins sujette à ce genre de phénomène dans les cas H30, la valeur moyenne en température de Favre est plus élevée à peu près partout.

En outre, il est évident que trois temps de passages ne sont pas suffisants pour atteindre une parfaite convergence d'un point de vue statistique, en particulier dans le cas H150 pour lequel des fluctuations plus importantes sont présentes. Il serait intéressant de voir si avec un temps de simulation bien plus important on aurait toujours des valeurs de température en moyenne de Favre aussi basses.

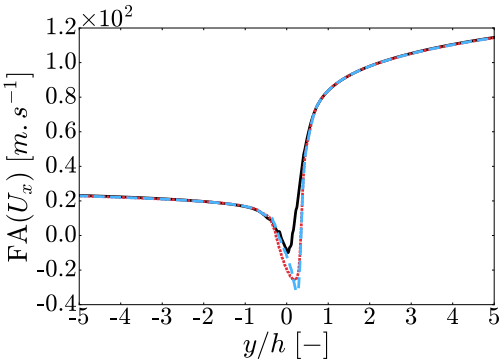
Enfin les Fig. E.13 et E.14 ainsi que les Fig. E.15 et E.16 mettent respectivement en évidence les profils de vitesse axiale moyenne (Favre) et de vitesse transverse moyenne (Favre).



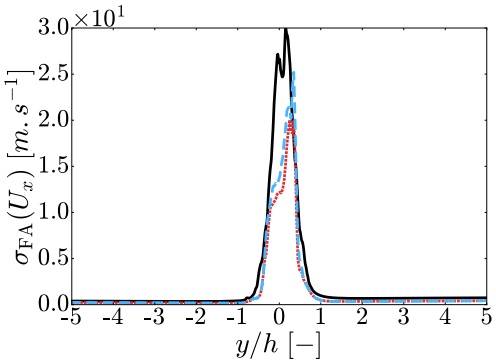
$x/h = 1$ (FA)



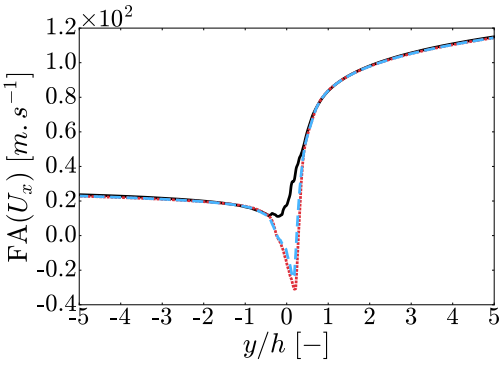
$x/h = 1$ (FA RMSD)



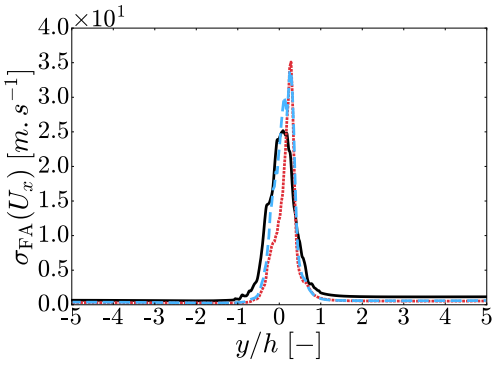
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

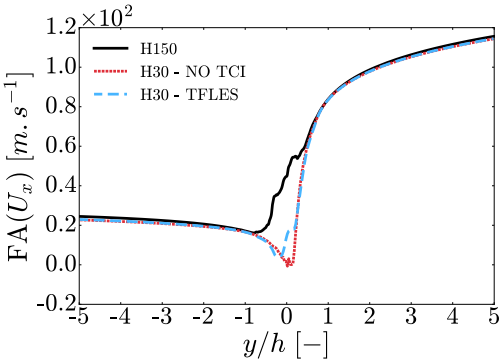


$x/h = 5$ (FA)

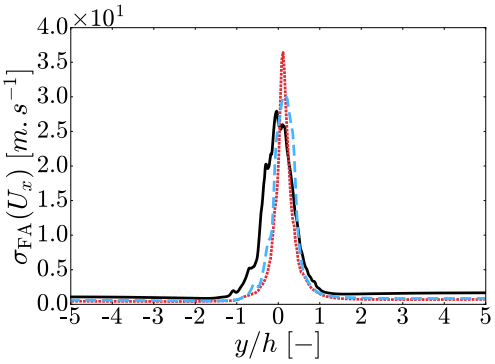


$x/h = 5$ (FA RMSD)

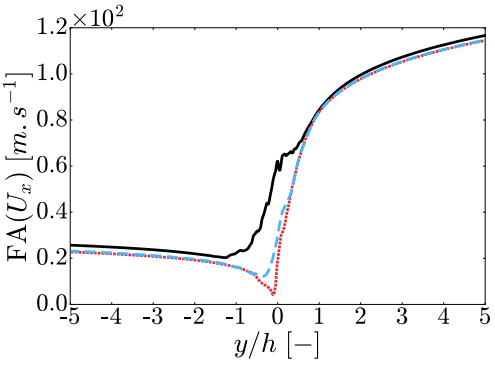
FIGURE E.13 – Profils de **vitesse axiale moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



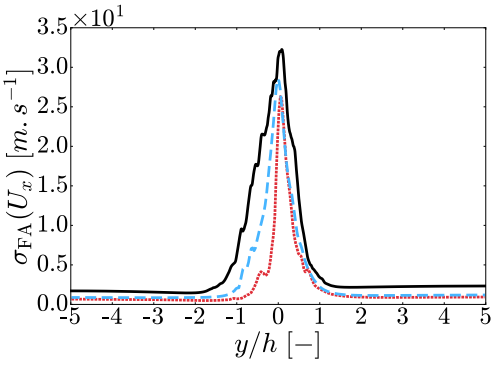
$x/h = 7$ (FA)



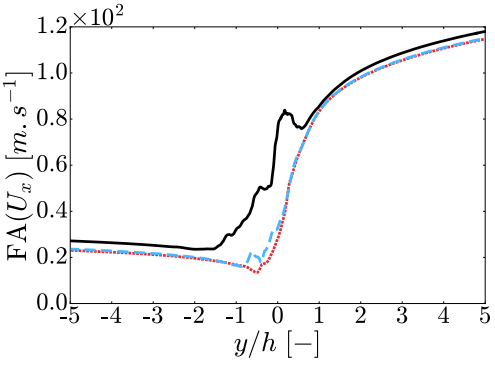
$x/h = 7$ (FA RMSD)



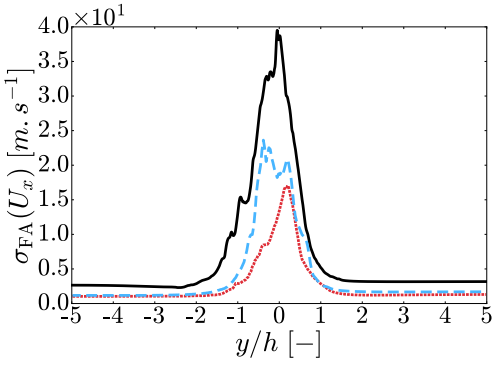
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)

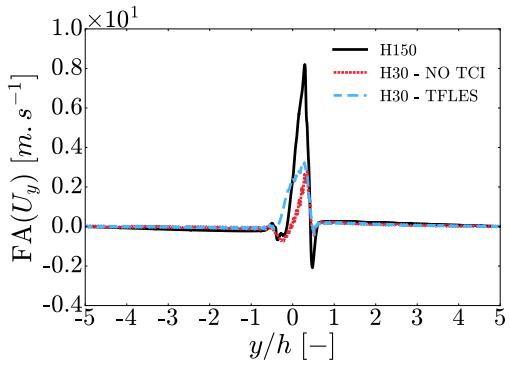


$x/h = 11$ (FA)

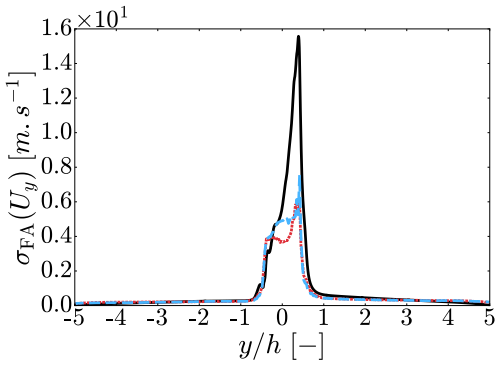


$x/h = 11$ (FA RMSD)

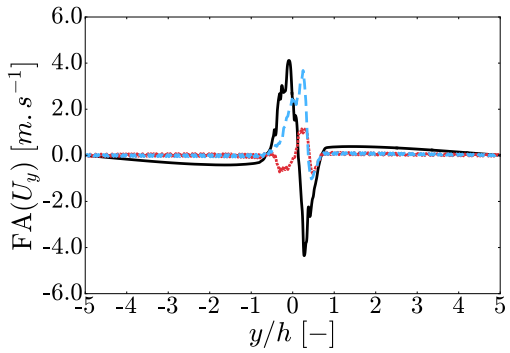
FIGURE E.14 – Suite de la Fig. E.13.



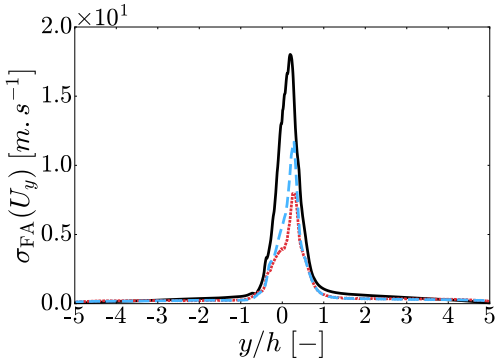
$x/h = 1$ (FA)



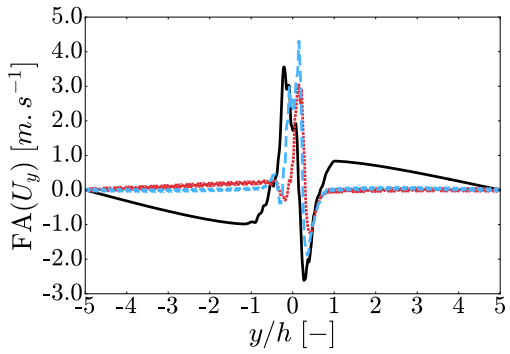
$x/h = 1$ (FA RMSD)



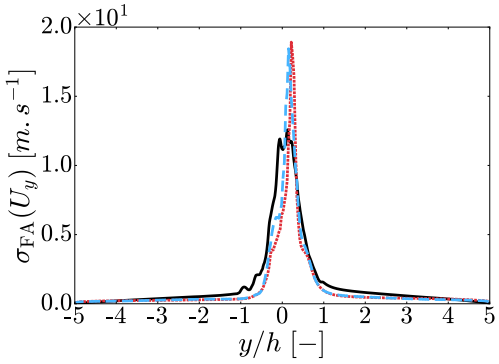
$x/h = 3$ (FA)



$x/h = 3$ (FA RMSD)

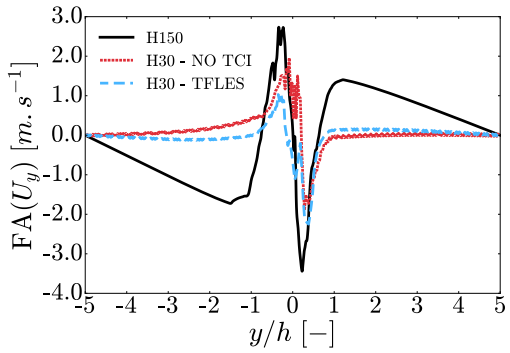


$x/h = 5$ (FA)

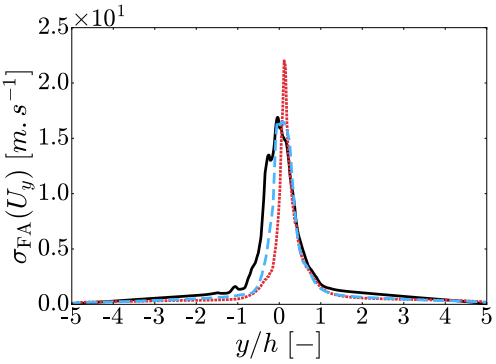


$x/h = 5$ (FA RMSD)

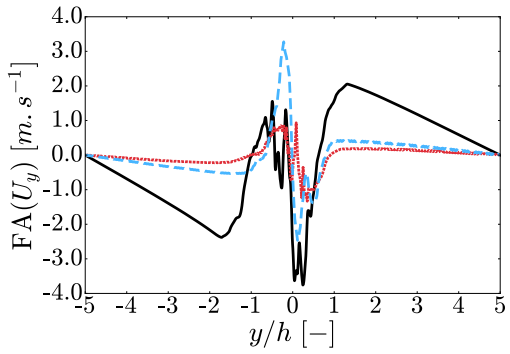
FIGURE E.15 – Profils de **vitesse transverse moyenne** et de son écart-type en fonction de la hauteur y/h à différentes positions axiales x/h par rapport à la lèvre de l'injecteur, avec $h = 3.0 \times 10^{-4}$ m, FA = *Favre Average* et RMSD = *Root Mean Square Deviation*.



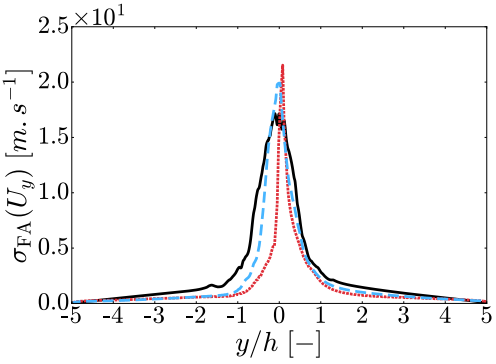
$x/h = 7$ (FA)



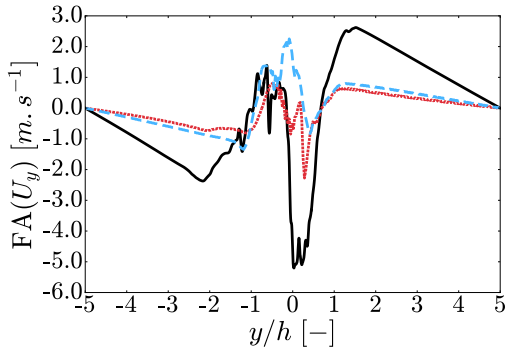
$x/h = 7$ (FA RMSD)



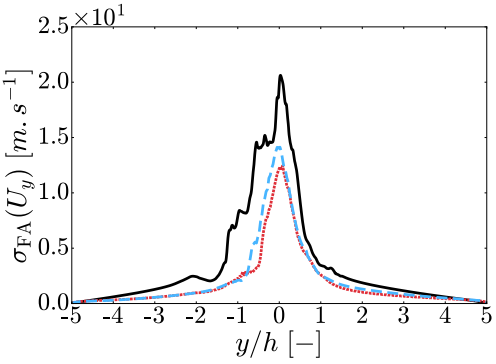
$x/h = 9$ (FA)



$x/h = 9$ (FA RMSD)



$x/h = 11$ (FA)



$x/h = 11$ (FA RMSD)

FIGURE E.16 – Suite de la Fig. E.15.

Bibliographie

[1] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program*, pages 61–82. Citeseer, 1998.

[2] W. Armbruster, J. S. Hardi, and M. Oschwald. Flame-acoustic response measurements in a high-pressure, 42-injector, cryogenic rocket thrust chamber. *P. Combust. Inst.*, 38(4):5963–5970, 2021.

[3] A. Badhe. *Low-order Thermoacoustic Network Modeling and Simulation of Spray Flame Transfer Function*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2022.

[4] G. Bagheri, E. Ranzi, M. Pelucchi, A. Parente, A. Frassoldati, and T. Faravelli. Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact: Mild and oxy-fuel combustion of methane. *Combust. Flame*, 212:142–155, 2020.

[5] D. Banuti. Crossing the widom-line–supercritical pseudo-boiling. *J. Supercrit. Fluids*, 98:12–16, 2015.

[6] D. Banuti, P. Ma, J.-P. Hickey, and M. Ihme. Thermodynamic structure of supercritical LOx-GH2 diffusion flames. *Combust. Flame*, 196:364–376, 2018.

[7] C. Barnaud. *Méthode avancée de prototypage virtuel pour le dimensionnement d'un ensemble lance-tuyère avec prise en compte des transferts thermiques*. PhD thesis, Normandie Université, 2022.

[8] F. Battista, D. Ricci, P. Natale, D. Cardillo, M. Fragiacomo, M. Ferraiuolo, R. Borrelli, and V. Salvatore. The hyprob demonstrator line: status of the LOx/LCH4 propulsion activities. In *8th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, EUCASS2019-FP0621, Madrid, Spain*, 2019.

[9] M. Belhi. *Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité des flammes de diffusion*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2012.

[10] J. Bellan. Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. *Prog. Energ. Combust.*, 26:329–366, 2000.

[11] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combust. Sci. Technol.*, 178(1-3):253–281, 2006.

[12] J. Bellan. *High-pressure flows for propulsion applications*, volume 260. AIAA Progr. Astronaut. Aero., 2020.

[13] J. Bellan, N. Okongo, K. Harstad, and J. Hutt. Aspects of supercritical turbulence: Direct numerical simulation of O2/H2 and C7H16/N2 temporal mixing layers. In *38th JANNAF Combustion Subcommittee Meeting*, volume 1, 2002.

[14] A. Benmansour, A. Liazid, P.-O. Logerais, and J.-F. Durastanti. A 3d numerical study of LO2/GH2 supercritical combustion in the onera-mascotte test-rig configuration. *J. Therm. Sci.*, 25(1):97–108, 2016.

[15] R. Bilger. The structure of turbulent non-premixed flames. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 22, pages 475–488. Elsevier, 1989.

[16] K. Bioche, A. Pieyre, G. Ribert, F. Richecoeur, and L. Vervisch. The role of gravity in the asymmetry of flames in narrow combustion chambers. *Combust. Flame*, 203:238–246, 2019.

[17] K. Bioche, G. Ribert, and L. Vervisch. Simulating upstream flame propagation in a narrow channel after wall preheating: Flame analysis and chemistry reduction strategy. *Combust. Flame*, 200:219–231, 2019.

[18] K. Bioche, L. Vervisch, and G. Ribert. Premixed flame–wall interaction in a narrow channel: impact of wall thermal conductivity and heat losses. *J. Fluid. Mech.*, 856:5–35, 2018.

[19] S. Blanchard, Q. Cazères, and B. Cuenot. Chemical modeling for methane oxy-combustion in liquid rocket engines. *Acta Astronaut.*, 190:98–111, 2022.

[20] A. Bouaniche, N. Jaouen, P. Domingo, and L. Vervisch. Vitiated high karlovitz n-decane/air turbulent flames: Scaling laws and micro-mixing modeling analysis. *Flow. Turbul. Combust.*, 102(1):235–252, 2019.

[21] A. Bouaniche, L. Vervisch, and P. Domingo. A hybrid stochastic/fixed-sectional method for solving the population balance equation. *Chem. Eng. Sci.*, 209:115198, 2019.

[22] A. Bouaniche, J. Yon, P. Domingo, and L. Vervisch. Analysis of the soot particle size distribution in a laminar premixed flame: A hybrid stochastic/fixed-sectional approach. *Flow. Turbul. Combust.*, 104(2):753–775, 2020.

[23] A. Boucher. *Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée*. PhD thesis, Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris, 2015.

[24] L. Bouheraoua. *Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersonique*. PhD thesis, Rouen, INSA, 2014.

[25] L. Bouheraoua, P. Domingo, and G. Ribert. Large-eddy simulation of a supersonic lifted jet flame: Analysis of the turbulent flame base. *Combust. Flame*, 179:199–218, 2017.

[26] J. Boussinesq. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Impr. nationale, 1877.

[27] B. Boyd and D. Jarrahbashi. A diffuse-interface method for reducing spurious pressure oscillations in multicomponent transcritical flow simulations. *Comput. Fluids*, 222:104924, 2021.

[28] R. Branam and W. Mayer. Characterization of cryogenic injection at supercritical pressure. *J. Propul. Power*, 19(3):342–355, 2003.

[29] R. Branam, J. Telaar, and W. Mayer. Simulation of cryogenic jet injection, RCM 1. Technical report, AIR FORCE RESEARCH LAB EDWARDS AFB CA, 2001.

[30] K. Bray, M. Champion, and P. A. Libby. Premixed flames in stagnating turbulence part iv: a new theory for the reynolds stresses and reynolds fluxes applied to impinging flows. *Combust. Flame*, 120(1-2):1–18, 2000.

[31] K. Bray, P. A. Libby, and J. Moss. Unified modeling approach for premixed turbulent combustion—part i: General formulation. *Combust. Flame*, 61(1):87–102, 1985.

[32] K. Bray and J. B. Moss. A unified statistical model of the premixed turbulent flame. *Acta Astronaut.*, 4(3-4):291–319, 1977.

[33] J. Buckmaster. Edge-flames. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 28:435–475, 2002.

[34] T. Butler and P. O'rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 16, pages 1503–1515. Elsevier, 1977.

[35] R. Buttay, L. Gomet, G. Lehnasch, and A. Mura. Highly resolved numerical simulation of combustion downstream of a rocket engine igniter. *Shock Waves*, 27(4):655–674, 2017.

[36] D. Byun and S. W. Baek. Numerical investigation of combustion with non-gray thermal radiation and soot formation effect in a liquid rocket engine. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 50(3-4):412–422, 2007.

[37] P. Bénard. *Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles*. PhD thesis, Rouen, INSA, 2015.

[38] R. Cabra, J.-Y. Chen, R. Dibble, A. Karpetis, and R. Barlow. Lifted methane–air jet flames in a vitiated coflow. *Combust. Flame*, 143(4):491–506, 2005.

[39] W. A. Cañas-Marín, U. E. Guerrero-Aconcha, and J. D. Ortiz-Arango. Comparison of different cubic equations of state and combination rules for predicting residual chemical potential of binary and ternary lennard–jones mixtures: Solid-supercritical fluid phase equilibria. *Fluid Phase Equilibr.*, 234:42–50, 2005.

[40] W. A. Cañas-Marín, J. D. Ortiz-Arango, U. E. Guerrero-Aconcha, and C. P. Soto-Tavera. Thermodynamic derivative properties and densities for hyperbaric gas condensates: Srk equation of state predictions versus monte carlo data. *Fluid Phase Equilibr.*, 253(2):147–154, 2007.

[41] S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scouflaire, and C. Rolon. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combust. Sci. Technol.*, 178(1-3):161–192, 2006.

[42] D. Carati, S. Ghosal, and P. Moin. On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Phys. Fluids*, 7(3):606–616, 1995.

[43] F. Chang and C.-J. Chen. *A component-labeling algorithm using contour tracing technique*. 7th ICDAR, IEEE, 2003.

[44] S. Chapman, T. G. Cowling, and D. Burnett. *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge university press, 1990.

[45] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion part i: non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame*, 131(1-2):159–180, 2002.

[46] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion part ii: dynamic formulation. *Combust. Flame*, 131(1-2):181–197, 2002.

[47] J. G. Charney, R. Fjörtoft, and J. v. Neumann. Numerical integration of the barotropic vorticity equation. In *The Atmosphere—A Challenge*, pages 267–284. Springer, 1990.

[48] B. Chehroudi, R. Cohn, and D. Talley. Cryogenic shear layers: experiments and phenomenological modeling of the initial growth rate under subcritical and supercritical conditions. *Int. J. Heat. Fluid Fl.*, 23(5):554–563, 2002.

[49] B. Chehroudi and D. Talley. Interaction of acoustic waves with a cryogenic nitrogen jet at sub-and supercritical pressures. In *40th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, page 342, 2002.

[50] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy. Visual characteristics and initial growth rates of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures. *Phys. Fluids*, 14(2):850–861, 2002.

[51] F. Christo, A. Masri, E. Nebot, and S. Pope. An integrated PDF/neural network approach for simulating turbulent reacting systems. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 26, pages 43–48. Elsevier, 1996.

[52] S. Chung. Stabilization, propagation and instability of tribrachial triple flames. *Proc. Combust. Inst.*, 31:877–892, 2007.

[53] T. H. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee, and K. E. Starling. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 27:671–679, 1988.

[54] W. T. Chung, P. C. Ma, and M. Ihme. Examination of diesel spray combustion in supercritical ambient fluid using large-eddy simulations. *Int. J. Engine Res.*, 21(1):122–133, 2020.

[55] R. A. Clark, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. *J. Fluid. Mech.*, 91(1):1–16, 1979.

[56] T. Coffee and J. Heimerl. Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames. *Combust. Flame*, 43(Supplement C):273 – 289, 1981.

[57] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7):1843–1863, 2000.

[58] T. L. Connell Jr, G. A. Risha, R. A. Yetter, and B. Natan. Hypergolic ignition of hydrogen peroxide/gel fuel impinging jets. *J. Propul. Power*, 34(1):182–188, 2018.

[59] A. Coppalle and P. Vervisch. The total emissivities of high-temperature flames. *Combust. Flame*, 49(1-3):101–108, 1983.

[60] S. M. Correa. Turbulence-chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion. *Combust. Flame*, 93(1-2):41–60, 1993.

[61] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen*, 100(1):32–74, 1928.

[62] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM J. Res. Dev.*, 11(2):215–234, 1967.

[63] B. Cuenot, F. Shum-Kivan, and S. Blanchard. The thickened flame approach for non-premixed combustion: Principles and implications for turbulent combustion modeling. *Combust. Flame*, 239:111702, 2022.

[64] F. E. Culick and V. Yang. Overview of combustion instabilities in liquid-propellant rocket engines. 1995.

[65] 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(3):485–498, 2010.

[66] L. Cutrone, M. Ihme, and M. Herrmann. Modeling of high-pressure mixing and combustion in liquid rocket injectors. In *Proceedings of the summer program*, page 269, 2006.

[67] D. W. Davis and B. Chehroudi. Measurements in an acoustically driven coaxial jet under sub-, near-, and supercritical conditions. *J. Propul. Power*, 23(2):364–374, 2007.

[68] S. DeSouza and C. Segal. Sub-and supercritical jet disintegration. *Phys. Fluids*, 29(4):047107, 2017.

[69] P. Domingo and L. Vervisch. Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed turbulent mixtures. *Symp. (Int.) Combust.*, 26:223–240, 1996.

[70] P. Domingo and L. Vervisch. Recent developments in DNS of turbulent combustion. *P. Combust. Inst.*, 2022.

[71] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combust. Flame*, 152(3):415–432, 2008.

[72] C. Dopazo and E. E. O'Brien. Functional formulation of nonisothermal turbulent reactive flows. *The Phys. Fluids*, 17(11):1968–1975, 1974.

[73] B. Duboc. *Modélisation hybride de la chimie pour la simulation numérique de la combustion.* PhD thesis, Normandie Université, 2017.

[74] B. Duboc, G. Ribert, and P. Domingo. Evaluation of chemistry models on methane/air edge flame simulation. *P. Combust. Inst.*, 37:1691–1698, 2019.

[75] B. Duboc, G. Ribert, and P. Domingo. Hybrid transported-tabulated chemistry for partially premixed combustion. *Comput. Fluids*, 179:206–227, 2019.

[76] F. Ducros, V. Ferrand, F. Nicoud, C. Weber, D. Darracq, C. Gacherieu, and T. Poinsot. Large-eddy simulation of the shock/turbulence interaction. *J. Comput. Phys.*, 152:517–549, 1999.

[77] L. Elliott, D. B. Ingham, A. G. Kyne, N. S. Mera, M. Pourkashanian, and S. Whittaker. Reaction mechanism reduction and optimisation for modelling aviation fuel oxidation using standard and hybrid genetic algorithms. *Comput. Chem. Eng.*, 30(5):889–900, 2006.

[78] G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, C. G. Speziale, and T. A. Zang. Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. *J. Fluid. Mech.*, 238:155–185, 1992.

[79] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*, volume 24. Springer Science & Business Media, 1994.

[80] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame*, 140(3):147–160, 2005.

[81] B. Fischer and J. Moss. The influence of pressure on soot production and radiation inturbulent kerosine spray flames. *Combust. Sci. Technol.*, 138(1-6):43–61, 1998.

[82] L. L. Franke, A. K. Chatzopoulos, and S. Rigopoulos. Tabulation of combustion chemistry via Artificial Neural Networks (ANNs): Methodology and application to LES-PDF simulation of Sydney flame L. *Combust. Flame*, 185:245–260, 2017.

[83] B. G. Franzelli. *Impact of the chemical description on direct numerical simulations and large eddy simulations of turbulent combustion in industrial aero-engines.* PhD thesis, 2011.

[84] A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, E. Ranzi, C. Candusso, and D. Tolazzi. Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion. In *1st International conference on sustainable fossil fuels for future energy*, pages 6–10, 2009.

[85] G. Frenken, E. Vermeulen, F. Bouquet, and B. Sanders. Development status of the ignition system for vinci. In *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 4330, 2002.

[86] M. Frenklach, H. Wang, M. Goldenberg, G. Smith, D. Golden, C. Bowman, R. Hanson, W. Gardiner, and V. Lissianski. GRI-Mech., an optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion. *Gas Research Institute topical report, Gas Research Institute, Chicago*, 1995.

[87] E. Fuller and J. Giddings. A comparison of methods for predicting gaseous diffusion coefficients. *J. Chromatogr. Sci.*, 3(7):222–227, 1965.

[88] P. Gaillard. *Interfaces diffuses et flammes transcritiques LOx/H2.* PhD thesis, Paris 6, 2015.

[89] P. Gaillard, V. Giovangigli, and L. Matuszewski. A diffuse interface LOx/hydrogen transcritical flame model. *Combust. Theor. Model.*, 20(3):486–520, 2016.

[90] P. Gaillard, V. Giovangigli, and L. Matuszewski. Nonmixing layers. *Phys. Rev. Fluids*, 1(8):084001, 2016.

[91] G. Gargiulo, P. Ciottoli, E. Martelli, R. M. Galassi, and M. Valorani. Numerical analysis of laser-pulse transient ignition of oxygen/methane mixtures in rocket-like combustion chamber. *Acta Astronaut.*, 159:136–155, 2019.

[92] J. Gastal. Ariane third stage ignition improvement. In *24th Joint Prop. Conf.*, page 2932, 1988.

[93] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A-Fluid*, 3(7):1760–1765, 1991.

[94] S. Ghosal, T. S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *J. Fluid. Mech.*, 286:229–255, 1995.

[95] E. Giacomazzi, C. Bruno, and B. Favini. Fractal modelling of turbulent mixing. *Combust. Theor. Model.*, 3(4):637, 1999.

[96] E. Giacomazzi, C. Bruno, and B. Favini. Fractal modelling of turbulent combustion. *Combust. Theor. Model.*, 4(4):391, 2000.

[97] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *P. Combust. Inst.*, 28(2):1901–1908, 2000.

[98] G. Gill and W. Nurick. Liquid rocket engine injectors. Technical report, 1976.

[99] V. Giovangigli and L. Matuszewski. Numerical simulation of transcritical strained laminar flames. *Combust. Flame*, 159:2829–2840, 2012.

[100] V. Giovangigli and L. Matuszewski. Supercritical fluid thermodynamics from equations of state. *Physica D*, 241(6):649–670, 2012.

[101] V. Giovangigli and L. Matuszewski. Mathematical modeling of supercritical multicomponent reactive fluids. *Math. Med Meth. Appl. S.*, 23(12):2193–2251, 2013.

[102] V. Giovangigli, L. Matuszewski, and F. Dupoirieux. Detailed modeling of planar transcritical H_2-O_2-N_2 flames. *Combust. Theor. Model.*, 15:141–182, 2011.

[103] G. Godel. *Modélisation de sous-maille de la combustion turbulente: développement d'outils pour la prédiction de la pollution dans une chambre aéronautique*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2010.

[104] D. G. Goodwin, R. L. Speth, H. K. Moffat, and B. W. Weber. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, 2018.

[105] M. S. Graboski and T. E. Daubert. A modified soave equation of state for phase equilibrium calculations. 3. systems containing hydrogen. *Ind. Eng. Chem. Proc. DD.*, 18(2):300–306, 1979.

[106] P. Grenard, N. Fdida, L. Vingert, L.-H. Dorey, L. Selle, and J. Pichillou. Experimental investigation of heat transfer in a subscale liquid rocket engine. *J. Propul. Power*, 35(3):544–551, 2019.

[107] S. Gröning, J. Hardi, D. Suslov, and M. Oschwald. Influence of hydrogen temperature on the stability of a rocket engine combustor operated with hydrogen and oxygen. *CEAS Space Journal*, 9(1):59–76, 2017.

[108] S. Gröning, J. S. Hardi, D. Suslov, and M. Oschwald. Injector-driven combustion instabilities in a hydrogen/oxygen rocket combustor. *J. Propul. Power*, 32(3):560–573, 2016.

[109] S. Gröning, D. Suslov, J. Hardi, and M. Oschwald. Influence of hydrogen temperature on the acoustics of a rocket engine combustion chamber operated with LOx/H2 at representative conditions. 2014.

[110] S. Gröning, D. Suslov, M. Oschwald, and T. Sattelmayer. Stability behaviour of a cylindrical rocket engine combustion chamber operated with liquid hydrogen and liquid oxygen. *Proceedings 5th EUCASS*, 2013.

[111] U. Guven. *Simulation haute-fidélité de la combustion pour les moteurs-fusées*. PhD thesis, Normandie, 2018.

[112] U. Guven and G. Ribert. Large-eddy simulation of supersonic hydrogen/oxygen combustion: application to rocketlike igniter. *J. Propul. Power*, 34:291–307, 2018.

[113] U. Guven and G. Ribert. Impact of non-ideal transport modeling on supercritical flow simulation. *P. Combust. Inst.*, 37:3255–3262, 2019.

[114] M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert, and P. Gicquel. Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the mascotte facility. *Combust. Sci. Technol.*, 178(1-3):101–128, 2006.

[115] O. Haidn and M. Habiballah. Research on high pressure cryogenic combustion. *Aerosp. Sci. Technol.*, 7(6):473–491, 2003.

[116] O. Haidn and M. Habiballah. Research on high pressure cryogenic combustion. *Aerosp. Sci. Technol.*, 7(6):473–491, 2003.

[117] O. J. Haidn. Advanced rocket engines. *Advances on propulsion technology for high-speed aircraft*, 1:6–1, 2008.

[118] L. Hakim, A. Ruiz, T. Schmitt, M. Boileau, G. Staffelbach, S. Ducruix, B. Cuenot, and S. Candel. Large eddy simulations of multiple transcritical coaxial flames submitted to a high-frequency transverse acoustic modulation. *P. Combust. Inst.*, 35(2):1461–1468, 2015.

[119] L. Hakim, T. Schmitt, S. Ducruix, and S. Candel. Dynamics of a transcritical coaxial flame under a high-frequency transverse acoustic forcing: Influence of the modulation frequency on the flame response. *Combust. Flame*, 162(10):3482–3502, 2015.

[120] K. Harstad and J. Bellan. Isolated fluid oxygen drop behavior in fluid hydrogen at rocket chamber pressures. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 41(22):3537–3550, 1998.

[121] K. Harstad and J. Bellan. An all-pressure fluid drop model applied to a binary mixture: heptane in nitrogen. *Int. J. Multiphas. Flow*, 26(10):1675–1706, 2000.

[122] K. Harstad and J. Bellan. High-pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applications. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43(2):645–654, 2004.

[123] D. Haworth and T. Poinsot. Numerical simulation of Lewis number effect in turbulent premixed flames. *J. Fluid Mech.*, 244:405–436, 1992.

[124] B. S. Haynes and H. G. Wagner. Soot formation. *Prog. Energ. Combust.*, 7(4):229–273, 1981.

[125] L. He, Y. Chao, X. Zhao, B. Yao, H. Kasuya, and A. Ohta. *An algorithm for calculating objects' shape features in binary images.* 2nd AIEA (Z. You, H. Davis, G. Ke Editors), DEStech, 2017.

[126] L. He, X. Ren, Q. Gao, X. Zhao, B. Yao, and Y. Chao. The connected-component labeling problem: A review of state-of-the-art algorithms. *Pattern Recogn.*, 70:25–43, 2017.

[127] C. Hensel, D. Wiedmann, W. Oechslein, and J. Görgen. Ignition aspects of the vinci thrust chamber. In *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 4008, 2002.

[128] J. Hirschfelder, C. Curtiss, and R. B. Wiley. Molecular theory of gases and liquids. 1954.

[129] Y. Hong, Z. Liu, S. Silvestri, M. P. Celano, O. J. Haidn, and Z. Yu. An experimental and modelling study of heat loads on a subscale methane rocket motor. *Acta Astronaut.*, 164:112–120, 2019.

[130] H. Huo and V. Yang. Subgrid-scale models for large-eddy simulation of supercritical combustion. In *51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 706, 2013.

[131] H. Huo and V. Yang. Large-eddy simulation of supercritical combustion: Model validation against gaseous H2-O2 injector. *J. Propul. Power*, 33(5):1272–1284, 2017.

[132] A. Iannetti. *Méthodes de diagnostic pour les moteurs de fusée à ergols liquides.* PhD thesis, Universite Paris-Saclay, 2016.

[133] A. Iannetti, N. Girard, D. Tchou-Kien, C. Bonhomme, N. Ravier, and E. Edeline. Prometheus, a LOx/LCH4 reusable rocket engine. In *Proceedings of the 7th European Conference for aeronautics and space sciences (EUCASS), Milan, Italy*, pages 3–6, 2017.

[134] N. Ierardo, A. Congiunti, and C. Bruno. Mixing and combustion in supercritical O2/CH4 liquid rocket injectors. In *42nd AIAA aerospace sciences meeting and exhibit*, page 1163, 2004.

[135] M. Ihme and H. Pitsch. Prediction of extinction and reignition in non-premixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2. application in LES of Sandia flames D and E. *Combust. Flame*, 155(1-2):90–107, 2008.

[136] G. Indelicato and F. Creta. Assessment of an algebraic equilibrium wall-function for supercritical flows. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 197:123350, 2022.

[137] G. Indelicato, P. Lapenna, A. Remiddi, and F. Creta. An efficient modeling framework for wall heat flux prediction in rocket combustion chambers using non adiabatic flamelets and wall-functions. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 169:120913, 2021.

[138] B. Ivancic and W. Mayer. Time-and length scales of combustion in liquid rocket thrust chambers. *J. Propul. Power*, 18(2):247–253, 2002.

[139] J.-F. Izard and A. Mura. Stabilization of non-premixed flames in supersonic reactive flows. *CR. Mécanique*, 337(6-7):362–372, 2009.

[140] K. Jansen. Unstructured-grid large-eddy simulation of flow over an airfoil. *Annual Research Briefs, 1994*, 1994.

[141] N. Jaouen, L. Vervisch, and P. Domingo. Auto-thermal reforming (atr) of natural gas: an automated derivation of optimised reduced chemical schemes. *P. Combust. Inst.*, 36:3321–3320, 2017.

[142] N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo, and G. Ribert. Automatic reduction and optimisation of chemistry for turbulent combustion modelling: impact of the canonical problem. *Combust. Flame*, 175:60–79, 2017.

[143] T. Jaravel. *Prediction of pollutants in gas turbines using large eddy simulation.* PhD thesis, 2016.

[144] M.-M. Jarczyk and M. Pfitzner. Large eddy simulation of supercritical nitrogen jets. In *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 1270, 2012.

[145] D. Jensen. Prediction of soot formation rates: a new approach. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 338(1614):375–396, 1974.

[146] L. Jofre and J. Urzay. Transcritical diffuse-interface hydrodynamics of propellants in high-pressure combustors of chemical propulsion systems. *Prog. Energ. Combust.*, 82:100877, 2021.

[147] W. Jones and R. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame*, 73(3):233–249, 1988.

[148] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 15(2):301–314, 1972.

[149] H. I. Joo and Ö. L. Gülder. Soot formation and temperature structure in small methane–oxygen diffusion flames at subcritical and supercritical pressures. *Combust. Flame*, 157(6):1194–1201, 2010.

[150] M. Juniper and S. Candel. Edge diffusion flame stabilization behind a step over a liquid reactant. *J. Propul. Power*, 19(3):332–341, 2003.

[151] M. Juniper, N. Darabiha, and S. Candel. The extinction limits of a hydrogen counterflow diffusion flame above liquid oxygen. *Combust. Flame*, 135(1-2):87–96, 2003.

[152] M. Juniper, A. Tripathi, P. Scouflaire, J.-C. Rolon, and S. Candel. Structure of cryogenic flames at elevated pressures. *P. Combust. Inst.*, 28(1):1103–1109, 2000.

[153] A. E. Karataş and Ö. L. Gülder. Soot formation in high pressure laminar diffusion flames. *Prog. Energ. Combust.*, 38(6):818–845, 2012.

[154] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin, and J. A. Miller. A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase multicomponent transport properties. *Sandia National Laboratories Report SAND86-8246*, 13:80401–1887, 1986.

[155] D. Kendrick, G. Herding, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Effects of a recess on cryogenic flame stabilization. *Combust. Flame*, 118(3):327–339, 1999.

[156] I. M. Kennedy. Models of soot formation and oxidation. *Prog. Energ. Combust.*, 23(2):95–132, 1997.

[157] A. Kéromnès, W. Metcalfe, K. Heufer, N. Donohoe, A. Das, C. Sung, J. Herzler, C. Naumann, P. Griebel, O. Mathieu, M. Krejci, E. Petersen, W. Pitz, and H. Curran. An experimental and detailed chemical kinetic modelling study of hydrogen and syngas mixtures at elevated pressures. *Combust. Flame*, 160:995–1011, 2013.

[158] N. I. Kim, J. I. Seo, Y. T. Guahk, and H. D. Shin. The propagation of tribrachial flames in a confined channel. *Combust. Flame*, 146(1-2):168–179, 2006.

[159] T. Kim, Y. Kim, and S.-K. Kim. Numerical study of cryogenic liquid nitrogen jets at supercritical pressures. *J. Supercrit. Fluids*, 56(2):152–163, 2011.

[160] T. Kim, Y. Kim, and S.-K. Kim. Effects of pressure and inlet temperature on coaxial gaseous methane/liquid oxygen turbulent jet flame under transcritical conditions. *J. Supercrit. Fluid*, 81:164–174, 2013.

[161] P. N. Kioni, B. Rogg, K. Bray, and A. Linán. Flame spread in laminar mixing layers: the triple flame. *Combust. Flame*, 95(3):276–290, 1993.

[162] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303, 1941.

[163] W. W. Koschel and O. J. Haidn. P8—the new French/German test facility for H2/O2 high pressure rocket engine combustion research. *Int. J. Hydrogen Energ.*, 23(8):683–694, 1998.

[164] N. Koutras, V. Harismiadis, and D. Tassios. A simple equation of state for the lennard-jones fluid: A new reference term for equations of state and perturbation theories. *Fluid Phase Equilibr.*, 77:13–38, 1992.

[165] G. Kroupa and M. Börner. A miniaturized high energy laser for ignition of rocket engines. In *Int. Conf. Space Optics (ICSO 2018)*, volume 11180, pages 1999–2007. SPIE, 2019.

[166] G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka. LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry. *Combust. Flame*, 158(9):1750–1767, 2011.

[167] R. F. Kulakhmetov and T. L. Pourpoint. 1D plug flow reactor modeling approach of soot formation and deposition in a fuel rich kerosene combustor. In *AIAA Scitech 2020 Forum*, page 1428, 2020.

[168] R. A. Kumar and G. Rajesh. Shock transformation and hysteresis in underexpanded confined jets. *J. Fluid. Mech.*, 823:538–561, 2017.

[169] K. K. Kuo. Principles of combustion. 1986.

[170] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinsot, and M. Oschwald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame*, 156(6):1166–1180, 2009.

[171] G. Lacaze and J. Oefelein. A non-premixed combustion model based on flame structure analysis at supercritical pressures. *Combust. Flame*, 159:2087–2103, 2012.

[172] C. J. Lapeyre, A. Misdariis, N. Cazard, D. Veynante, and T. Poinsot. Training convolutional neural networks to estimate turbulent sub-grid scale reaction rates. *Combust. Flame*, 203:255–264, 2019.

[173] C. Laurent. *Low-order modeling and high-fidelity simulations for the prediction of combustion instabilities in liquid rocket engines and gas turbines.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2022.

[174] C. Laurent, A. Badhe, and F. Nicoud. Representing the geometrical complexity of liners and boundaries in low-order modeling for thermoacoustic instabilities. *J. Comput. Phys.*, 428:110077, 2021.

[175] C. Laurent, M. Bauerheim, T. Poinsot, and F. Nicoud. A novel modal expansion method for low-order modeling of thermoacoustic instabilities in complex geometries. *Combust. Flame*, 206:334–348, 2019.

[176] C. Laurent, L. Esclapez, D. Maestro, G. Staffelbach, B. Cuenot, L. Selle, T. Schmitt, F. Duchaine, and T. Poinsot. Flame-wall interaction effects on the flame root stabilization mechanisms of a doubly-transcritical LO_2/LCH_4 cryogenic flame. *P. Combust. Inst.*, 37:5147–5154, 2019.

[177] C. Laurent, G. Staffelbach, F. Nicoud, and T. Poinsot. Heat-release dynamics in a doubly-transcritical LO_2/LCH_4 cryogenic coaxial jet flame subjected to fuel inflow acoustic modulation. *P. Combust. Inst.*, 38(4):6375–6383, 2021.

[178] C. K. Law. Combustion at a crossroads: Status and prospects. *P. Combust. Inst.*, 31(1):1–29, 2007.

[179] V. Lechner, C. Betrancourt, C. Mirat, P. Scouflaire, and S. Ducruix. Full spectrum fitting method: a new approach for instantaneous phosphor thermometry in harsh environments. *Experiments in Fluids*, 63(7):1–14, 2022.

[180] V. Lechner, C. Betrancourt, P. Scouflaire, L. Vingert, and S. Ducruix. Dynamic characterization of wall temperature in LOx/CH4 rocket engine operating conditions using phosphor thermometry. *P. Combust. Inst.*, 2022.

[181] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton. Deep learning. *nature*, 521(7553):436–444, 2015.

[182] J.-P. Legier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proceedings of the summer program*, volume 12, pages 157–168. Citeseer, 2000.

[183] E. Lenormand, P. Sagaut, and L. Ta Phuoc. Large eddy simulation of subsonic and supersonic channel flow at moderate reynolds number. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 32(4):369–406, 2000.

[184] I. A. Leyva, J. I. Rodriguez, B. Chehroudi, and D. Talley. Preliminary results on the effect of phase angle on coaxial jet behavior spanning sub-to supercritical pressures, 2008.

[185] D. K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A-Fluid*, 4(3):633–635, 1992.

[186] P. Lindstedt. Modeling of the chemical complexities of flames. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 27, pages 269–285. Elsevier, 1998.

[187] L. LIOU. Laser ignition in liquid rocket engines. In *30th Joint Prop. Conf. and Exhibit*, page 2980, 1994.

[188] C. Locci, L. Vervisch, B. Farcy, P. Domingo, and N. Perret. Selective non-catalytic reduction (SNCR) of nitrogen oxide emissions: a perspective from numerical modeling. *Flow Turbul. Combust.*, 100:301–340, 2018.

[189] A. J. Lock, A. M. Briones, X. Qin, S. K. Aggarwal, I. K. Puri, and U. Hegde. Liftoff characteristics of partially premixed flames under normal and microgravity conditions. *Combust. Flame*, 143(3):159–173, 2005.

[190] J. Locke, S. Pal, R. Woodward, and R. Santoro. High speed visualization of LOx/GH2 rocket injector flowfield: hot-fire and cold-flow experiments. In *46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 7145, 2010.

[191] J. M. Locke. *High speed diagnostics for characterization of oxygen/hydrogen rocket injector flowfields*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2011.

[192] G. Lodato, P. Domingo, and L. Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 227(10):5105–5143, 2008.

[193] T. Lu and C. K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *P. Combust. Inst.*, 30:1333–1341, 2005.

[194] T. Lu and C. K. Law. Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph: n-heptane and iso-octane. *Combust. Flame*, 144(1-2):24–36, 2006.

[195] J. Lux and O. Haidn. Effect of recess in high-pressure liquid oxygen/methane coaxial injection and combustion. *J. Propul. Power*, 25:24–32, 2009.

[196] J. Lux and O. Haidn. Flame stabilization in high-pressure liquid oxygen/methane rocket engine combustion. *J. Propul. Power*, 25:15–23, 2009.

[197] J. Lux, D. Suslov, and O. Haidn. Experimental investigation of porous injectors for liquid propellant rocket engines. In *44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 4563, 2008.

[198] K. Lyons. Toward an understanding of the stabilization mechanisms of lifted turbulent jet flames: experiments. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 33:211–231, 2007.

[199] P. C. Ma, H. Wu, D. T. Banuti, and M. Ihme. On the numerical behavior of diffuse-interface methods for transcritical real-fluids simulations. *Int. J. Multiphas. Flow*, 113:231–249, 2019.

[200] P. C. Ma, H. Wu, T. Jaravel, L. Bravo, and M. Ihme. Large-eddy simulations of transcritical injection and auto-ignition using diffuse-interface method and finite-rate chemistry. *P. Combust. Inst.*, 37(3):3303–3310, 2019.

[201] U. Maas and S. B. Pope. Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame*, 88(3-4):239–264, 1992.

[202] D. Maestro, B. Cuenot, and L. Selle. Large eddy simulation of flow and combustion in a single-element GCH4/GOX rocket combustor. In *7th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*, 2017.

[203] D. Maestro, B. Cuenot, and L. Selle. Large eddy simulation of combustion and heat transfer in a single element GCH4/GOx rocket combustor. *Flow. Turbul. Combust.*, 103(3):699–730, 2019.

[204] B. Magnussen. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In *19th Aerospace Sciences Meeting*, page 42, 1981.

[205] B. F. Magnussen and B. H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 16, pages 719–729. Elsevier, 1977.

[206] D. Makel and I. Kennedy. Soot formation in laminar inverse diffusion flames. *Combust. Sci. Technol.*, 97(4-6):303–314, 1994.

[207] C. Manfletti, J. Sender, and M. Oschwald. Theoretical and experimental discourse on laser ignition in liquid rocket engines. 2009.

[208] R. Mari. *Influence of heat transfer on high pressure flame structure and stabilization in liquid rocket engines*. PhD thesis, 2015.

[209] A. Maries, A. Haque, S. L. Yilmaz, M. B. Nik, and G. E. Marai. Interactive exploration of stress tensors used in computational turbulent combustion. In *New Developments in the Visualization and Processing of Tensor Fields*, pages 137–156. Springer, 2012.

[210] W. Marshall, S. Pal, R. Woodward, and R. Santoro. Benchmark wall heat flux data for a GO2/GH2 single element combustor. In *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 3572, 2005.

[211] W. M. Marshall. *Experimental studies on combustion instabilities in a multi-element, rectangular rocket chamber*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2008.

[212] E. Masi, J. Bellan, K. G. Harstad, and N. A. 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.

[213] M. Masquelet and S. Menon. Large-eddy simulation of flame-turbulence interactions in a shear coaxial injector. *J. Propul. Power*, 26(5):924–935, 2010.

[214] M. Masquelet, S. Menon, Y. Jin, and R. Friedrich. Simulation of unsteady combustion in a LOx-GH2 fueled rocket engine. *Aerosp. Sci. Technol.*, 13(8):466–474, 2009.

[215] E. Mastorakos. Ignition of turbulent non-premixed flames. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 35:57–97, 2009.

[216] S. Matsuyama, J. Shinjo, S. Ogawa, and Y. Mizobuchi. Large eddy simulation of LOx/GH2 shear-coaxial jet flame at supercritical pressure. In *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 208, 2010.

[217] L. Matuszewski. *Modélisation et simulation numérique des phénomènes de combustion en régime supercritique*. PhD thesis, Paris 6, 2011.

[218] W. Mayer, A. Schik, M. Schaf fler, and H. Tamura. Injection and mixing processes in high-pressure liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. *J. Propul. Power*, 16(5):823–828, 2000.

[219] W. Mayer and H. Tamura. Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *J. Propul. Power*, 12(6):1137–1147, 1996.

[220] W. Mayer, J. Telaar, R. Branam, G. Schneider, and J. Hussong. Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39(8):709–719, 2003.

[221] W. O. Mayer, B. Ivancic, A. Schik, and U. Hornung. Propellant atomization and ignition phenomena in liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. *J. Propul. Power*, 17(4):794–799, 2001.

[222] W. O. Mayer, A. H. Schik, B. Vielle, C. Chauveau, I. Gokalp, D. G. Talley, and R. D. Woodward. Atomization and breakup of cryogenic propellants under high-pressure subcritical and supercritical conditions. *J. Propul. Power*, 14(5):835–842, 1998.

[223] W. Meier, P. Weigand, X. R. Duan, and R. Giezendanner-Thoben. Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame. *Combust. Flame*, 150(1-2):2–26, 2007.

[224] C. Meneveau and T. Poinsot. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 86(4):311–332, 1991.

[225] 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.

[226] R. Mercier, T. Schmitt, D. Veynante, and B. Fiorina. The influence of combustion SGS submodels on the resolved flame propagation. application to the LES of the cambridge stratified flames. *P. Combust. Inst.*, 35(2):1259–1267, 2015.

[227] C. Merlin. *Simulation numérique de la combustion turbulente: Méthode de frontières immergées pour les écoulements compressibles, application à la combustion en aval d'une cavité*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2011.

[228] Y. Méry, L. Hakim, P. Scouflaire, L. Vingert, S. Ducruix, and S. Candel. Experimental investigation of cryogenic flame dynamics under transverse acoustic modulations. *CR. Mécanique*, 341(1-2):100–109, 2013.

[229] R. S. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. *J. Fluid. Mech.*, 384:293–338, 1999.

[230] R. S. Miller, K. G. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane–nitrogen. *J. Fluid. Mech.*, 436:1–39, 2001.

[231] K. Mishra, M. K. Das, A. De, and K. K. Kar. Hybrid RANS/LES simulation of methane-LOx combustion. In *Sustainable Development for Energy, Power, and Propulsion*, pages 199–219. Springer, 2021.

[232] Y. Mizobuchi, J. Shinjo, S. Ogawa, and T. Takeno. A numerical study on the formation of diffusion flame islands in a turbulent hydrogen jet lifted flame. *P. Combust. Inst.*, 30:611–619, 2005.

[233] P. Moin and J. Kim. Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid. Mech.*, 118:341–377, 1982.

[234] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A-Fluid*, 3(11):2746–2757, 1991.

[235] F. Monnier and G. Ribert. Numerical simulation of supercritical CH4/O2 combustion. In *International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS)*, volume 1, 2021.

[236] F. Monnier and G. Ribert. Simulation of high-pressure methane-oxygen combustion with a new reduced chemical mechanism. *Combust. Flame*, 235:111735, 2022.

[237] F. Monnier and G. Ribert. Numerical simulations of supercritical CH4/O2 flame propagation in inhomogeneous mixtures following ignition. *Proc. Combust. Inst.*, 39(2):2747–2755, 2023.

[238] A. Mouze-Mornettas, M. M. Benito, G. Dayma, C. Chauveau, B. Cuenot, and F. Halter. Laminar flame speed evaluation for CH4/O2 mixtures at high pressure and temperature for rocket engine applications. *P. Combust. Inst.*, 2022.

[239] A. Mouze-Mornettas, G. Dayma, F. Halter, B. Cuenot, and M. M. Benito. Modelling and reduction of LOx-methane chemical kinetics for rocket engine application. *EUCASS*, 2022.

[240] H. Müller and M. Pfitzner. Large-eddy simulation of transcritical LOx/CH4 jet flames. In *6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS), Krakau, Poland*, 2015.

[241] C. Muthukumaran and A. Vaidyanathan. Experimental study of elliptical jet from sub to supercritical conditions. *Phys. Fluids*, 26(4):044104, 2014.

[242] C. Muthukumaran and A. Vaidyanathan. Experimental study of elliptical jet from supercritical to subcritical conditions using planar laser induced fluorescence. *Phys. Fluids*, 27(3):034109, 2015.

[243] D. Nayigizente, S. Ducruix, and T. Schmitt. Development of an interface thickening method for the direct numerical simulation of compressible liquid–vapor flows in the framework of the second gradient theory. *Phys. Fluids*, 33(5):052119, 2021.

[244] J. A. Newman and T. Brzustowski. Behavior of a liquid jet near the thermodynamic critical region. *AIAA journal*, 9(8):1595–1602, 1971.

[245] H.-T. Nguyen. *Numerical modeling and simulation of steel gases combustion under flameless combustion*. PhD thesis, Normandie Université, 2022.

[246] H.-T. Nguyen, P. Domingo, L. Vervisch, and P.-D. Nguyen. Machine learning for integrating combustion chemistry in numerical simulations. *Energy and AI*, 5:100082, 2021.

[247] P.-D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, and P. Domingo. Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combust. Flame*, 157(1):43–61, 2010.

[248] G. Nickerson and C. Johnson. A soot prediction model for the tdk computer program. In *28th Joint Prop. Conf. and Exhibit*, page 3391, 1992.

[249] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow. Turbul. Combust.*, 62(3):183–200, 1999.

[250] F. Nicoud, H. B. Toda, O. Cabrit, S. Bose, and J. Lee. Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Phys. Fluids*, 23(8):085106, 2011.

[251] Z. Nikolaou, C. Chrysostomou, L. Vervisch, and S. Cant. Progress variable variance and filtered rate modelling using convolutional neural networks and flamelet methods. *Flow. Turbul. Combust.*, 103(2):485–501, 2019.

[252] W. Oechslein. Status of the vinci combustion chamber vacuum ignition tests. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. and Exhibit*, page 3531, 2004.

[253] J. C. Oefelein. *Simulation and analysis of turbulent multiphase combustion processes at high pressures*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 1997.

[254] J. C. Oefelein. Thermophysical characteristics of shear-coaxial LOx-H2 flames at supercritical pressure. *P. Combust. Inst.*, 30(2):2929–2937, 2005.

[255] J. C. Oefelein. Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. *Combust. Sci. Technol.*, 178(1-3):229–252, 2006.

[256] J. C. Oefelein and V. Yang. Comprehensive review of liquid-propellant combustion instabilities in f-1 engines. *J. Propul. Power*, 9(5):657–677, 1993.

[257] J. C. Oefelein and V. Yang. Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *J. Propul. Power*, 14(5):843–857, 1998.

[258] N. A. Okong'o and J. Bellan. Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: heptane and nitrogen. *J. Fluid. Mech.*, 464:1–34, 2002.

[259] N. A. Okong'o and J. Bellan. Consistent large-eddy simulation of a temporal mixing layer laden with evaporating drops. part 1. direct numerical simulation, formulation and a priori analysis. *J. Fluid. Mech.*, 499:1–47, 2004.

[260] N. Okong'o, K. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulations of O/H temporal mixing layers under supercritical conditions. *AIAA journal*, 40(5):914–926, 2002.

[261] P. O'Rourke and F. Bracco. Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames. *J. Comput. Phys.*, 33(2):185–203, 1979.

[262] R. Osborne, J. Wehrmeyer, H. Trinh, and J. Early. Evaluation and characterization study of dual pulse laser-induced spark (DPLIS) for rocket engine ignition system application. In *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. and Exhibit*, page 4905, 2003.

[263] M. Oschwald, F. Cuoco, B. Yang, M. De Rosa, and O. Haidn. Combustion of LOx/H2 and LOx/CH4 sprays. *Institute of Space Propulsion, German Aerospace Center, Lampolsdhausen, Germany*, 2009.

[264] M. Oschwald and A. Schik. Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous raman scattering. *Experiments in Fluids*, 27(6):497–506, 1999.

[265] A. Z. Panagiotopoulos. Direct determination of fluid phase equilibria by simulation in the gibbs ensemble: a review. *Mol. Simulat.*, 9:1–23, 1992.

[266] T. S. Park. LES and RANS simulations of cryogenic liquid nitrogen jets. *J. Supercrit. Fluids*, 72:232–247, 2012.

[267] T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *J. Fluid. Mech.*, 181:441–466, 1987.

[268] A. Patureau de Mirand, J.-M. Bahu, and O. Gogdet. Ariane Next, a vision for the next generation of Ariane Launchers. *Acta Astronaut.*, 170:735–749, 2020.

[269] C. Pauly, J. Sender, and M. Oschwald. Ignition of a gaseous methane/oxygen coaxial jet. *Pr. Prop. Phys.*, 1:155–170, 2009.

[270] F. Pecquery. *Développement d'un modèle numérique de prédiction des émissions d'oxydes d'azote pour la simulation aux grandes échelles de chambres de combustion aéronautiques.* PhD thesis, INSA de Rouen, 2013.

[271] D.-Y. Peng and D. B. Robinson. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, 15(1):59–64, 1976.

[272] P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combust. Flame*, 154:67–81, 2008.

[273] N. Perakis, O. J. Haidn, D. Eiringhaus, D. Rahn, S. Zhang, Y. Daimon, S. Karl, and T. Horchler. Qualitative and quantitative comparison of RANS simulation results for a 7-element GOX/GCH4 rocket combustor. In *2018 Joint Prop. Conf.*, page 4556, 2018.

[274] C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves: a numerical method. *J. Comput. Phys.*, 10(2):252–271, 1972.

[275] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energ. Combust.*, 10(3):319–339, 1984.

[276] N. Peters. Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. In *Numerical simulation of combustion phenomena*, pages 90–109. Springer, 1985.

[277] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge university press, 2000.

[278] E. Petersen, D. Davidson, and R. Hanson. Kinetics modeling of shock-induced ignition in low-dilution CH4/O2 mixtures at high pressures and intermediate temperatures. *Combust. Flame*, 117:272–290, 1999.

[279] E. L. Petersen and R. K. Hanson. Reduced kinetics mechanisms for ram accelerator combustion. *J Propul. Power*, 15:591–600, 1999.

[280] X. Petit. *Etude de l'interaction cinétique chimique/turbulence dans une flamme cryotechnique LOx/CH4.* PhD thesis, Rouen, INSA, 2014.

[281] X. Petit, G. Ribert, and P. Domingo. LOx/CH4 mixing and combustion under supercritical conditions. In *51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 713, 2013.

[282] X. Petit, G. Ribert, and P. Domingo. Framework for real-gas compressible reacting flows with tabulated thermochemistry. *J. Supercrit. Fluid*, 101:1–16, 2015.

[283] X. Petit, G. Ribert, G. Lartigue, and P. Domingo. Large-eddy simulation of supercritical fluid injection. *J. Supercrit. Fluid*, 84:61–73, 2013.

[284] H. Phillips. Flame in a buoyant methane flame. *Symp. (Int.) Combust.*, 10:1277–1283, 1965.

[285] J. Pichillou, P. Grenard, L. Vingert, G. Leplat, and P. Reulet. Experimental analysis of heat transfer in cryogenic combustion chambers on mascotte test bench. In *7th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (Eucass)*, volume 32, 2017.

[286] C. D. Pierce and P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *J. Fluid. Mech.*, 504:73–97, 2004.

[287] U. Piomelli and J. Liu. Large-eddy simulation of rotating channel flows using a localized dynamic model. *Phys. Fluids*, 7(4):839–848, 1995.

[288] N. Pletnev, N. Ponomarev, G. Motalin, and V. Murashov. Development and testing of the laser system of ignition of rocket engines. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 56(2):181–187, 2020.

[289] S. Pohl, M. Jarczyk, M. Pfitzner, and B. Rogg. Real gas CFD simulations of hydrogen/oxygen supercritical combustion. *Pr. Prop. Phys.*, 4:583–614, 2013.

[290] T. Poinsot. Prediction and control of combustion instabilities in real engines. *P. Combust. Inst.*, 36(1):1–28, 2017.

[291] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.

[292] T. Poinsot, D. Veynante, and S. Candel. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *J. Fluid. Mech.*, 228:561–606, 1991.

[293] T. J. Poinsot and S. Lelef. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101:104–129, 1992.

[294] W. Polifke, W. Geng, and K. Döbbeling. Optimization of rate coefficients for simplified reaction mechanisms with genetic algorithms. *Combust. Flame*, 113(1-2):119–134, 1998.

[295] S. Poncet, C. Mehl, K. Truffin, and O. Colin. Modified diffusion model adapted to non-unity Lewis number mixtures for low flame stretch using the thickened flame model. In *11th European Combustion Meeting-ECM 2023*, 2023.

[296] S. B. Pope. PDF methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energ. Combust.*, 11(2):119–192, 1985.

[297] S. B. Pope. Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion. *P. Combust. Inst.*, 34:1–31, 2013.

[298] S. B. Pope and S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge university press, 2000.

[299] M. Popp, J. Hulka, V. Yang, and M. Habiballah. *Liquid rocket thrust chambers*, volume 200. AIAA Progr. Astronaut. Aero., 2004.

[300] L. Potier, F. Duchaine, B. Cuenot, D. Saucereau, and J. Pichillou. Prediction of wall heat fluxes in a rocket engine with conjugate heat transfer based on large-eddy simulation. *Entropy*, 24(2):256, 2022.

[301] J. M. Prausnitz, R. N. Lichtenthaler, and E. G. De Azevedo. *Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria*. Pearson Education, 1998.

[302] D. Rahn, H. Riedmann, R. Behr, and O. J. Haidn. Non-adiabatic flamelet modeling for the numerical simulation of methane combustion in rocket thrust chambers. In *2018 Joint Prop. Conf.*, page 4869, 2018.

[303] E. Ranzi, C. Cavallotti, A. Cuoci, A. Frassoldati, M. Pelucchi, and T. Faravelli. New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes. *Combust. Flame*, 162:1679–1691, 2015.

[304] N. M. Razali, J. Geraghty, et al. Genetic algorithm performance with different selection strategies in solving tsp. In *Proceedings of the world congress on engineering*, volume 2, pages 1–6. International Association of Engineers Hong Kong, China, 2011.

[305] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, and B. E. Poling. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill Book Co., New York, NY, 1987.

[306] J. Reveillon. Numerical procedures to generate and to visualize flow fields from analytical or experimental statistics: Turbulent velocity, fluctuating scalars, and variable density sprays. *J. of Flow Visualization and Image Processing*, 12(3), 2005.

[307] O. Reynolds. XXIX. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall he direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 174:935–982, 1883.

[308] G. Ribert, P. Domingo, X. Petit, N. Vallée, and J. Blaisot. *High-Pressure Flows for Propulsion Applications*, volume 260, chapter Modelling and simulations of high-pressure practical flows, pages 629–676. AIAA Prog. Astronaut. Aero., 2020.

[309] 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. *P. Combust. Inst.*, 37:2345–2351, 2019.

[310] G. Ribert, X. Petit, and P. Domingo. High-pressure methane-oxygen flames. analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state. *J. Supercrit. Fluid*, 121:78–88, 2017.

[311] G. Ribert, L. Vervisch, P. Domingo, and Y.-S. Niu. Hybrid transported-tabulated strategy to downsize detailed chemistry for numerical simulation of premixed flames. *Flow. Turbul. Combust.*, 92(1):175–200, 2014.

[312] F. Richecoeur, S. Ducruix, P. Scouflaire, and S. Candel. Experimental investigation of high-frequency combustion instabilities in liquid rocket engine. *Acta Astronaut.*, 62(1):18–27, 2008.

[313] F. Richecoeur, P. Scouflaire, S. Ducruix, and S. Candel. High-frequency transverse acoustic coupling in a multiple-injector cryogenic combustor. *J. Propul. Power*, 22(4):790–799, 2006.

[314] M. Roa, D. Forliti, A. Badakhsahn, and D. Talley. Acoustically forced coaxial hydrogen/liquid oxygen jet flames. Technical report, Air Force Research Laboratory (AFMC) AFRL/RQRC Edwards AFB United States, 2016.

[315] J. Rodriguez, J. Graham, I. Leyva, and D. Talley. Effect of variable phase transverse acoustic fields on coaxial jet forced spread angles. In *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 231, 2009.

[316] A. Roy, C. Joly, and C. Segal. Disintegrating supercritical jets in a subcritical environment. *J. Fluid. Mech.*, 717:193–202, 2013.

[317] A. Roy and C. Segal. Sub-to-supercritical jet mixing and core length analysis. In *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 1149, 2010.

[318] A. Roy and C. Segal. Sub-to-supercritical mixing and core length analysis of a single round jet. In *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 792, 2011.

[319] G. Rozenchan, D. L. Zhu, C. K. Law, and S. D. TSE. Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 atm. *P. Combust. Inst.*, 29:1461–1469, 2002.

[320] J. L. Ruan. *Large eddy simulation of supersonic combustion in cavity-based scramjets.* PhD thesis, Normandie, 2019.

[321] J. L. Ruan, P. Domingo, and G. Ribert. Analysis of combustion modes in a cavity based scramjet. *Combust. Flame*, 215:238–251, 2020.

[322] J. L. Ruan, G. Ribert, and P. Domingo. Stabilisation and extinction mechanisms of flames in cavity flameholder scramjets. *Combust. Theor. Model.*, 25(2):193–207, 2021.

[323] G. Ruetsch, L. Vervisch, and A. Liñán. Effects of heat release on triple flames. *Phys. Fluids*, 7(6):1447–1454, 1995.

[324] A. Ruiz, L. Selle, B. Cuenot, and T. Poinsot. Stabilization of a supercritical hydrogen/oxygen flame behind a splitter plate. 2011.

[325] A. M. Ruiz, G. Lacaze, J. C. Oefelein, R. Mari, B. Cuenot, L. Selle, and T. Poinsot. Numerical benchmark for high-reynolds-number supercritical flows with large density gradients. *AIAA Journal*, 54(5):1445–1460, 2016.

[326] V. A. Sabel'Nikov and L. F. F. da Silva. Partially stirred reactor: study of the sensitivity of the monte-carlo simulation to the number of stochastic particles with the use of a semi-analytic, steady-state, solution to the pdf equation. *Combust. Flame*, 129(1-2):164–178, 2002.

[327] D. Salgues, A.-G. Mouis, S.-Y. Lee, D. Kalitan, S. Pal, and R. Santoro. Shear and swirl coaxial injector studies of LOx/GCH4 rocket combustion using non-intrusive laser diagnostics. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 757, 2006.

[328] R. J. Santoro. High frequency combustion instability studies of LOx/Methane fueled rocket engines. Technical report, The Pennsylvania State University, 2009.

[329] V. Schmidt, D. Klimenko, and M. Oschwald. Preliminary results of test case "A" laser ignition tests for coaxial GH2/GO2-injection. *DLR, Lampoldshausen*, 2003.

[330] T. Schmitt. Large-eddy simulations of the mascotte test cases operating at supercritical pressure. *Flow. Turbul. Combust.*, 105(1):159–189, 2020.

[331] T. Schmitt, M. Boileau, and D. Veynante. Flame wrinkling factor dynamic modeling for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Flow Turbul. Combust.*, 94(1):199–217, 2015.

[332] T. Schmitt, L. Hakim, M. Boileau, G. Staffelbach, A. Ruiz, S. Ducruix, B. Cuenot, and S. Candel. Large-eddy simulation of a multiple injector cryogenic combustor under transcritical conditions and large amplitude high frequency modulations. In *Space Prop. 2014*, 2014.

[333] T. Schmitt, Y. Méry, M. Boileau, and S. Candel. Large-eddy simulation of oxygen/methane flames under transcritical conditions. *P. Combust. Inst.*, 33:1383–1390, 2011.

[334] T. Schmitt, A. Ruiz, L. Selle, and B. Cuenot. Numerical investigation of destabilization of supercritical round turbulent jets using large eddy simulation. *Pr. Prop. Phys.*, 2:225–238, 2011.

[335] T. Schmitt, A. Sadiki, B. Fiorina, and D. Veynante. Impact of dynamic wrinkling model on the prediction accuracy using the f-tacles combustion model in swirling premixed turbulent flames. *P. Combust. Inst.*, 34(1):1261–1268, 2013.

[336] T. Schmitt, L. Selle, B. Cuenot, and T. Poinsot. Large-eddy simulation of transcritical flows. *CR. Mécanique*, 337(6-7):528–538, 2009.

[337] T. Schmitt, L. Selle, A. Ruiz, and B. Cuenot. Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets. *AIAA Journal*, 48(9):2133–2144, 2010.

[338] T. Schmitt, G. Staffelbach, S. Ducruix, S. Gröning, J. Hardi, and M. Oschwald. Large-eddy simulations of a sub-scale liquid rocket combustor: Influence of fuel injection temperature on thermo-acoustic stability. In *7th European Conference for Aeronautics and Aerospace Sciences (EUCASS)*, 2017.

[339] S. A. Schumaker and J. F. Driscoll. Coaxial turbulent jet flames: Scaling relations for measured stoichiometric mixing lengths. *P. Combust. Inst.*, 32(2):1655–1662, 2009.

[340] C. Segal and S. Polikhov. Subcritical to supercritical mixing. *Phys. Fluids*, 20(5):052101, 2008.

[341] L. Selle, R. Blouquin, M. Théron, L.-H. Dorey, M. Schmid, and W. Anderson. Prediction and analysis of combustion instabilities in a model rocket engine. *J. Propul. Power*, 30(4):978–990, 2014.

[342] A. Seltz. *Application of deep learning to turbulent combustion modeling of real jet fuel for the numerical prediction of particulate emissions*. PhD thesis, Normandie Université, Sept. 2020.

[343] A. Seltz, P. Domingo, and L. Vervisch. Solving the population balance equation for non-inertial particles dynamics using probability density function and neural networks: Application to a sooting flame. *Phys. Fluids*, 33(1):013311, 2021.

[344] A. Seltz, P. Domingo, L. Vervisch, and Z. M. Nikolaou. Direct mapping from LES resolved scales to filtered-flame generated manifolds using convolutional neural networks. *Combust. Flame*, 210:71–82, 2019.

[345] J. Sender, C. Manfletti, M. Oschwald, and C. Pauly. Ignition transients of a gaseous CH4/O2 coaxial jet. In *22nd European Conference on Liquid Atomization Spray Systems*, pages 11–5, 2008.

[346] M. L. Shur, P. R. Spalart, M. K. Strelets, and A. K. Travin. A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities. *Int. J. Heat. Fluid Fl.*, 29(6):1638–1649, 2008.

[347] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. *P. Combust. Inst.*, 30:2921–2928, 2005.

[348] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Flame stabilization in high pressure LOx/GH_2 and GCH_4 combustion. *P. Combust. Inst.*, 31:2215–2222, 2007.

[349] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, S. Candel, S. Zurbach, and J. Thomas. Experiments and simulations of LOx/CH_4 combustion at high pressures. In *Proc. Combust. Inst*, volume 30, pages 2921–2928, 2005.

[350] G. Singla, P. Scouflaire, J. C. Rolon, S. Candel, and L. Vingert. OH planar laser-induced fluorescence and emission imaging in high pressure LOx/methane flames. *J. Propul. Power*, 23(3):593–602, 2007.

[351] N. Slavinskaya, M. Abbasi, J.-H. Starcke, A. Mirzayeva, and O. J. Haidn. Skeletal mechanism of the methane oxidation for space propulsion applications. In *52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Prop. Conf.*, page 4781, 2016.

[352] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly weather review*, 91(3):99–164, 1963.

[353] B. Smit. Phase diagrams of lennard-jones fluids. *J. Chem. Phys.*, 96(11):8639–8640, 1992.

[354] G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, N. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Bowman, R. Hanson, S. Song, W. Gardiner, et al. Grimech 3.0 reaction mechanism. *Sandia National Laboratory*, 2000.

[355] G. Smith, Y. Tao, and H. Wang. Foundational fuel chemistry model version 1.0, 2016.

[356] T. F. Smith, Z. F. Shen, and J. N. Friedman. Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model. *J. Heat Tran.*, 104(4):602–608, 11 1982.

[357] R. Snyder, G. Herding, J. C. ROLON, and S. Candel. Analysis of flame patterns in cryogenic propellant combustion. *Combust. Sci. Technol.*, 124(1-6):331–370, 1997.

[358] G. Soave. Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state. *Chem. Eng. Sci.*, 27:1197–1203, 1972.

[359] S. Soller, C. Maeding, B. Kniesner, A. Preuss, N. Rackemann, and R. Blasi. Characterisation of a LOx-LCH_4 gas generator. In *Space Prop. Conf.*, volume 2014, 2014.

[360] S. Soller, N. Rackemann, A. Preuss, and G. Kroupa. Application of laser-ignition systems in liquid rocket engines. In *Space Prop. Conf.*, volume 2016, 2016.

[361] D. Spalding. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 13, pages 649–657. Elsevier, 1971.

[362] S. Subramaniam and S. Pope. A mixing model for turbulent reactive flows based on euclidean minimum spanning trees. *Combust. Flame*, 115:487–514, 1998.

[363] J. C. Sutherland and A. Parente. Combustion modeling using principal component analysis. *P. Combust. Inst.*, 32(1):1563–1570, 2009.

[364] G. P. Sutton. *History of liquid propellant rocket engines*. AIAA, 2006.

[365] R. Swanson, R. Radespiel, and E. Turkel. On some numerical dissipation schemes. *J. Comput. Phys.*, 147:518–544, 1998.

[366] R. Swanson and E. Turkel. On central-difference and upwind schemes. *J. Comput. Phys.*, 101:292–306, 1992.

[367] S. Takahashi. Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficients of gases at high pressures. *J. Chem. Eng. Jpn.*, 7:417–420, 1975.

[368] H. Tani, S. Teramoto, and T. Nagashima. Injector geometry effects on cryogenic coaxial jets at supercritical pressures. In *46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 6738, 2010.

[369] H. Tani, S. Teramoto, and K. Okamoto. High-speed observations of cryogenic single and coaxial jets under subcritical and transcritical conditions. *Experiments in Fluids*, 56(4):1–13, 2015.

[370] S. Tatsumi, L. Martinelli, and A. Jameson. Flux-limited schemes for the compressible Navier-Stokes equations. *AIAA J.*, 33:252–261, 1995.

[371] D. Thévenin, O. Gicquel, J. De Charentenay, R. Hilbert, and D. Veynante. Two- versus three-dimensional direct simulations of turbulent methane flame kernels using realistic chemistry. *P. Combust. Inst.*, 29:2031–2039, 2002.

[372] C. Traxinger, M. Banholzer, and M. Pfitzner. Real-gas effects and phase separation in underexpanded jets at engine-relevant conditions. In *2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting*, page 1815, 2018.

[373] C. Traxinger, M. Pfitzner, S. Baab, G. Lamanna, and B. Weigand. Experimental and numerical investigation of phase separation due to multicomponent mixing at high-pressure conditions. *Phys. Rev. Fluids*, 4(7):074303, 2019.

[374] C. Traxinger, J. Zips, and M. Pfitzner. Single-phase instability in non-premixed flames under liquid rocket engine relevant conditions. *J. Propul. Power*, 35(4):675–689, 2019.

[375] A. Tripathi. *Structure des flammes cryotechniques à haute pression.* PhD thesis, Chatenay-Malabry, Ecole centrale de Paris, 2001.

[376] P. Tucker, S. Menon, C. Merkle, J. Oefelein, and V. Yang. Validation of high-fidelity CFD simulations for rocket injector design. In *44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. & Exhibit*, page 5226, 2008.

[377] C. H. Twu, J. E. Coon, and J. R. Cunningham. A new generalized alpha function for a cubic equation of state part 2. redlich-kwong equation. *Fluid Phase Equilibr.*, 105(1):61–69, 1995.

[378] U. Unnikrishnan, H. Huo, X. Wang, and V. Yang. Subgrid scale modeling considerations for large eddy simulation of supercritical turbulent mixing and combustion. *Phys. Fluids*, 33(7):075112, 2021.

[379] U. Unnikrishnan, J. C. Oefelein, and V. Yang. Direct numerical simulation of a turbulent reacting liquid-oxygen/methane mixing layer at supercritical pressure. In *2018 Joint Prop. Conf.*, page 4564, 2018.

[380] U. Unnikrishnan, J. C. Oefelein, and V. Yang. A priori analysis of subfilter scalar covariance fields in turbulent reacting LOx-CH4 mixing layers. In *AIAA Scitech 2019 Forum*, page 1495, 2019.

[381] U. Unnikrishnan, J. C. Oefelein, and V. Yang. Subgrid modeling of the filtered equation of state with application to real-fluid turbulent mixing at supercritical pressures. *Phys. Fluids*, 34(6):065112, 2022.

[382] A. Urbano, Q. Douasbin, L. Selle, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Schmitt, S. Ducruix, and S. Candel. Study of flame response to transverse acoustic modes from the LES of a 42-injector rocket engine. *P. Combust. Inst.*, 36(2):2633–2639, 2017.

[383] A. Urbano, L. Selle, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Schmitt, S. Ducruix, and S. Candel. Exploration of combustion instability triggering using large eddy simulation of a multiple injector liquid rocket engine. *Combust. Flame*, 169:129–140, 2016.

[384] N. Vallee. *Caractérisation des jets à hautes pressions : étude expérimentale d'injections continues sub-, trans- et super-critiques.* PhD thesis, Normandie Université, June 2018.

[385] N. Vallée, U. Guven, J. Blaisot, and G. Ribert. Real-gas effect on fluid injection: A numerical and experimental study.

[386] N. Vallee, G. Ribert, J.-B. Blaisot, and D. Lisiecki. Experimental investigation of ethane and propane injection under sub-and super-critical conditions. In *Ilass Europe. 28th european conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, pages 954–961. Editorial Universitat Politècnica de València, 2017.

[387] N. Vallée, G. Ribert, J.-B. Blaisot, and S. Dozias. Characterization of ethane jet from sub-critical to super-critical conditions through visible light and x-ray imaging. In *14th ICLASS*, 2018.

[388] J. D. Van der Waals. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. *J. Stat. Phys.*, 20(2):200–244, 1979.

[389] J. Van Oijen and L. De Goey. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combust. Sci. Technol.*, 161(1):113–137, 2000.

[390] L. Verhoeven, W. Ramaekers, J. Van Oijen, and L. De Goey. Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds. *Combust. Flame*, 159(1):230–241, 2012.

[391] D. Veynante and V. Moureau. Analysis of dynamic models for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combust. Flame*, 162(12):4622–4642, 2015.

[392] D. Veynante, T. Schmitt, M. Boileau, and V. Moureau. Analysis of dynamic models for turbulent premixed combustion. In *Proceedings of the Summer Program*, volume 387. Center for Turbulence Research, Stanford Univ./NASA-Ames, 2012.

[393] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energ. Combust.*, 28(3):193–266, 2002.

[394] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling, 2021.

[395] R. Vicquelin. *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente.* PhD thesis, Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris, 2010.

[396] L. Vingert, N. Fdida, Y. Mauriot, I. O. Colomer, C. Irimea, D. Delhaye, A. K. Mohamed, V. Corbas, and M. Theron. Experimental investigations of liquid oxygen/methane combustion at very low mixture ratio at the mascotte test facility. In *32nd ISTS & 9th NSAT Joint Symposium*, 2019.

[397] L. Vingert, M. Habiballah, and J. Traineau. Mascotte, a research test facility for high pressure combustion of cryogenic propellants. In *AAAF/CEAS, European Aerospace Conference, 12 th, Paris, France, Nov. 29-Dec. 1, 1999, ONERA, TP*, number 2000-15, 2000.

[398] C. B. von Sethe, S. Soller, and O. J. Haidn. Experimental investigation of a single element LOx/GCH4 heat-sink combustion chamber. In *8th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*, 2019.

[399] A. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Phys. Fluids*, 16(10):3670–3681, 2004.

[400] A. Vreman, B. Albrecht, J. Van Oijen, L. De Goey, and R. Bastiaans. Premixed and non-premixed generated manifolds in large-eddy simulation of sandia flame d and f. *Combust. Flame*, 153(3):394–416, 2008.

[401] K. Wan, C. Barnaud, L. Vervisch, and P. Domingo. Chemistry reduction using machine learning trained from non-premixed micro-mixing modeling: Application to DNS of a syngas turbulent oxy-flame with side-wall effects. *Combust. Flame*, 220:119–129, 2020.

[402] K. Wan, C. Barnaud, L. Vervisch, and P. Domingo. Machine learning for detailed chemistry reduction in DNS of a syngas turbulent oxy-flame with side-wall effects. *P. Combust. Inst.*, 38(2):2825–2833, 2021.

[403] K. Wan, L. Vervisch, Z. Gao, P. D. annd C. Jiang, J. Xia, and Z. Wang. Development of reduced and optimized reaction mechanism for potassium emissions during biomass combustion based on genetic algorithms. *Energy*, 211:118565–14p, 2020.

[404] G. Wang, M. Boileau, and D. Veynante. Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combust. Flame*, 158(11):2199–2213, 2011.

[405] J. Wegener, I. A. Leyva, D. J. Forliti, and D. G. Talley. Development of a facility for combustion stability experiments at supercritical pressure. In *52nd Aerospace Sciences Meeting*, page 0137, 2014.

[406] J. Wei, M. Ye, S. Zhang, J. Qin, and O. J. Haidn. Modeling of a 7-elements GOX/GCH4 combustion chamber using RANS with Eddy-Dissipation Concept model. *Aerosp. Sci. Technol.*, 99:105762, 2020.

[407] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Prog. Energ. Combust.*, 10(1):1–57, 1984.

[408] F. Williams. Turbulent combustion. In *The mathematics of combustion*, pages 97–131. SIAM, 1985.

[409] S. Won, J. Kim, K. Hong, M. Cha, and S. Chung. Stabilization mechanism of lifted flame edge in the near field of coflow jets for diluted methane. *P. Combust. Inst.*, 30(1):339–347, 2005.

[410] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 26, pages 27–34. Elsevier, 1996.

[411] B. Yang, F. Cuoco, and M. Oschwald. Atomization and flames in LOx/H2-and LOx/CH4-spray combustion. *J. Propul. Power*, 23(4):763–771, 2007.

[412] V. Yang. *Liquid rocket engine combustion instability*, volume 169. AIAA, 1995.

[413] V. Yang. Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. *P. Combust. Inst.*, 28(1):925–942, 2000.

[414] E. Yhuel, G. Ribert, and P. Domingo. Numerical simulation of laminar premixed hydrogen-air flame/shock interaction in semi-closed channel. *P. Combust. Inst.*, 2022.

[415] A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *The Phys. Fluids*, 29(7):2152–2164, 1986.

[416] K. Young, C. Stewart, and J. Moss. Soot formation in turbulent non-premixed kerosine-air flames burning at elevated pressure: experimental measurement. In *Symp. (Int.) Combust.*, volume 25, pages 609–617. Elsevier, 1994.

[417] B. Zhao, Z. Yang, M. V. Johnston, H. Wang, A. S. Wexler, M. Balthasar, and M. Kraft. Measurement and numerical simulation of soot particle size distribution functions in a laminar premixed ethylene-oxygen-argon flame. *Combust. Flame*, 133(1-2):173–188, 2003.

[418] V. Zhukov. Kinetic model of alkane oxidation at high pressure from methane to n-heptane. *Combust. Theor. Model.*, 13:427–442, 2009.

[419] V. Zhukov and A. Kong. A compact reaction mechanism of methane oxidation at high pressures. *Prog. React. Kinet. Mec.*, 43:62–78, 2018.

[420] V. Zhukov, V. Sechenov, and A. Y. Starikovskii. Spontaneous ignition of methane–air mixtures in a wide range of pressures. *Combust. Explo. Shock+*, 39:487–495, 2003.

[421] V. Zhukov, V. Sechenov, and A. Y. Starikovskii. Autoignition of a lean propane-air mixture at high pressures. *Kinet. Catal+*, 46:319–327, 2005.

[422] J. Zips, H. Müller, and M. Pfitzner. Efficient thermo-chemistry tabulation for non-premixed combustion at high-pressure conditions. *Flow. Turbul. Combust.*, 101(3):821–850, 2018.

[423] J. Zips, C. Traxinger, and M. Pfitzner. Time-resolved flow field and thermal loads in a single-element GOx/GCH4 rocket combustor. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 143:118474, 2019.

[424] N. Zong, H. Meng, S.-Y. Hsieh, and V. Yang. A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. *Phys. Fluids*, 16(12):4248–4261, 2004.

[425] N. Zong and V. YANG. Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. *Combust. Sci. Technol.*, 178(1-3):193–227, 2006.

[426] N. Zong and V. Yang. An efficient preconditioning scheme for real-fluid mixtures using primitive pressure–temperature variables. *Int. J. Comput. Fluid D.*, 21(5-6):217–230, 2007.

[427] N. Zong and V. Yang. Near-field flow and flame dynamics of LOx/methane shear-coaxial injector under supercritical conditions. *P. Combust. Inst.*, 31:2309–2317, 2007.

[428] S. Zurbach. LOx/methane studies for fuel rich preburner. In *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Prop. Conf. and Exhibit*, page 5063, 2003.

Modélisation et simulation numérique de la combustion dans les moteurs-fusées : étude des flammes LOx/CH_4.

Résumé

Dans le cadre du développement d'une fusée à bas coût et réutilisable, l'utilisation du méthane comme ergol peut apparaître comme un axe de développement privilégié. Par comparaison avec l'hydrogène, combustible historique du lanceur européen, celui-ci offre des perspectives intéressantes du fait entre autres des propriétés de stockage et de mise en œuvre, i.e. de son coût. D'un point de vue scientifique, l'oxy-combustion du méthane à haute pression, i.e. en régime supercritique, est peu connue et nécessite de revisiter l'ensemble de la chaine de modélisation des écoulements réactifs. Ainsi, une chimie réduite contenant 17 espèces et 44 réactions a été proposée puis validée dans le cadre de la combustion haute-pression LOx/CH_4 sur des cas de flammes canoniques 1D puis 2D de prémélange et de diffusion, en interaction ou non avec une turbulence homogène et isotrope. L'étude de la diffusion non-idéale du mélange, point important dans les écoulements supercritiques, n'a pas été jugée significative pour les cas d'applications rencontrés, i.e. le cas d'une couche de mélange LOx/CH_4 doublement transcritique de type *splitter-plate*. Plusieurs modèles de sous-maille pour la turbulence ont été testés avec le code de calcul SiTCom-B. Dans le cas d'une couche de mélange réactive, des structures de flammes triples peu habituelles ont été observées aussi en bien en DNS qu'en LES. Pour ces dernières, la prise en compte du modèle d'épaississement de flamme (TFLES) conditionné aux flammes de prémélange a montré une amélioration significative des résultats par rapport au cas de référence sans modèle dédié. L'utilisation du schéma réduit développé ici, s'est avéré crucial dans l'obtention puis l'observation d'une flamme bien plus complexe que celle habituellement observée lorsque l'hydrogène est utilisé comme ergol, la flamme LOx/CH_4 faisant apparaître, par exemple, des zones d'extinctions locales. La conception classique de la flamme de diffusion du moteur-fusée laisse place alors à une combustion complexe étalée sur les trois régimes de combustion : prémélangée riche et pauvre, et non-prémélangée.

Mots-clés : Moteur-Fusée à Propulsion Liquide, Simulation Numérique Directe, Simulation aux Grandes Échelles, Oxy-combustion du Méthane, Fluides Supercritiques, Chimie Réduite

---

Modelling and numerical simulation of combustion in rocket engines: study of LOx/CH_4 flames.

Abstract

The use of methane as a propellant is currently being studied in the development of low-cost and reusable rockets. Compared to hydrogen, the historical fuel of the European launcher, it has interesting advantages due to its storage and implementation properties, with an impact on its financial cost. From a scientific point of view, the oxy-combustion of methane at high pressure, i.e. in a supercritical regime, is not well known and requires to adapt the entire chain of the modelling of reactive flows. Thus, a reduced chemistry containing 17 species and 44 reactions was proposed and validated in the context of high-pressure LOx/CH_4 combustion on 1D canonical flames, then 2D premixed and non-premixed flames, in interaction or not with homogeneous and isotropic turbulence. The study of the non-ideal diffusion of the mixture, a crucial point in supercritical flows, was not considered significant for the cases of applications encountered, i.e. the case of a doubly transcritical LOx/CH_4 mixture layer in a *splitter-plate* configuration. Several subgrid models for turbulence were tested with the CFD solver, SiTCom-B. In the case of a reactive mixture layer, unusual triple-flame structures were observed in both DNS and LES. For the latter, taking into account the thickened flame model (TFLES) conditioned to premixed flames showed a significant improvement in the results compared to the reference case without a dedicated model. The use of the reduced kinetic scheme developed here, is proven to be necessary for obtaining and observing a much more complex flame than the one usually observed when hydrogen is used as a propellant, like local extinction areas for instance. The classical conception of the non-premixed flame in rocket-engine leaves room for a complex combustion spread over the three combustion regimes: rich and lean premixed, and non-premixed.

Keywords: Liquid-Powered Rocket-Engine, Direct Numerical Simulation, Large-Eddy Simulation, Methane Oxy-combustion, Supercritical Fluids, Reduced Chemistry