

Numéro d'ordre : 2347

THÈSE
présentée pour obtenir le titre de
DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE
spécialité : Dynamique des fluides

Antoine Dauphin

ALLUMAGE DES MOTEURS FUSÉES CRYOTECHNIQUES

Soutenue le 16 juin 2006 devant le jury composé de :

M. Pierre Comte	Rapporteur
M. Luc Vervisch	Rapporteur
M. Patrick Chassaing	Membre
M. Pierre Sagaut	Membre
M. Stephan Zurbach	Membre
M. Gérard Ordonneau	Membre
M. Marie Théron	Membre
M. Bénédicte Cuenot	Directeur de Thèse

Réf. CERFACS/TH/CFD/06/85

A Guenaëlle

Sommaire

1	Introduction	5
1.1	Histoire des moteurs fusées	5
1.2	Marché actuel des lanceurs spatiaux	16
1.3	Cadre de la thèse	22
2	Etat de l'art	23
2.1	Description de l'allumage d'un moteur fusée	23
2.2	La chimie de l'auto-allumage	28
2.3	La dynamique des jets supersoniques sous-détendus	32
2.4	La combustion supersonique	35
2.5	Stratégie de la thèse	38
3	Equations	39
3.1	Equations d'écoulements réactifs	39
3.1.1	Equations de conservation	39
3.1.2	Variables thermodynamiques	40
3.1.3	Equation d'état des gaz parfaits	41
3.1.4	Conservation de la masse et vitesse de correction	42
3.1.5	Coefficients de transport	42
3.1.6	Flux de chaleur	43
3.1.7	Cinétique chimique	44
3.2	Equations SGE d'écoulements réactifs	45
3.2.1	La Simulation aux Grandes Echelles (SGE)	45
3.2.2	Equations SGE pour les milieux réactifs	46
3.2.3	Modèles pour le tenseur de sous-maille	49
3.3	Présentation du code AVBP	50
3.3.1	Discretisation <i>Cell-Vertex</i>	51

3.3.2	Schémas numériques	53
3.3.3	Modèles de viscosité artificielle	53
3.4	Les conditions limites	55
4	Auto-allumage	57
4.1	Configurations de références	57
4.1.1	Auto-allumage homogène	57
4.1.2	Auto-allumage en diffusion	59
4.1.3	Turbulence	61
4.2	Simulations	62
4.3	Conclusions	84
5	Jets supersoniques sous-détendus	85
5.1	Objectif	85
5.2	Description d'un jet supersonique sous-détendu	85
5.3	Approche numérique d'un écoulement supersonique	86
5.4	Viscosité de Von Neumann-Richtmyer	88
5.4.1	Application à une onde de Riemann	90
5.4.2	Application à un tube à choc	92
5.5	Outils d'analyse	94
5.5.1	Evolution spatiale de spectre	95
5.5.2	Analyse Spectrale Fréquence-Nombre d'Onde	96
5.5.3	Bicohérence	99
5.5.4	Application à la couche de mélange de Brown et Roshko	102
5.6	Simulations	106
5.6.1	Analyse dimensionnelle	106
5.6.2	Echelle de coupure	107
5.6.3	Publication	107
5.6.4	Analyse de l'instabilité du jet	126
5.7	Elements particuliers au calcul de jets supersoniques	129
5.7.1	Conditions aux limites	129
5.7.2	Quelques précisions sur des calculs en supersoniques	131
6	Combustion Supersonique	143
6.1	Objectif	143
6.2	Description de la flamme de Cheng	143
6.3	Etude dimensionnelle	147

6.3.1	Turbulence	147
6.3.2	Echelle de coupure	148
6.3.3	Compressibilité	149
6.3.4	Mélange réactif	149
6.4	Création d'un schéma cinétique simplifié	151
6.4.1	Thermodynamique	151
6.4.2	Cinétique chimique	154
6.5	Simulations	156
6.6	Analyse de l'hétérogénéité	168
7	Conclusion	179
7.1	Récapitulation	179
7.2	Analyse	180
7.3	Perspectives	181
8	Remerciements	183
9	Annexe 1	185
9.1	Lois du mouvement	185
9.1.1	Mouvement dans le champ gravitationnel terrestre loin du sol	185
9.1.2	Mouvement dans le champ gravitationnel terrestre près du sol	187
9.2	Loi du vol d'une fusée	187
10	Annexe 2	191
10.1	Méthode des caractéristiques	191
10.2	Taille des bouteilles de Mach	195
10.3	Analyse du champ lointain d'un jet sous-détendu	199
10.3.1	Diamètre virtuel du jet	199
10.3.2	Vitesses et concentrations axiales	201
11	Annexe 3	205
11.1	Contrainte du coût de calcul	205
11.2	Panorama des moyens de calculs	205
11.3	Coût des codes de calculs	206
11.4	Coût des SGE présentées	207

Chapitre 1

Introduction

Cette introduction décrit les contraintes relatives à la construction des moteurs fusées cryotechniques, et identifie le besoin d'étudier en détail leur allumage. Pour commencer, quelques éléments de l'histoire des fusées établissent les contraintes techniques incontournables. Ces contraintes sont à replacer dans le panorama économique actuel pour mettre en évidence les besoins particuliers des futurs lanceurs spatiaux. L'ensemble de ces éléments forment le cadre général de cette thèse.

1.1 Histoire des moteurs fusées

Origine Grecque, de -400 à -100

La première mise en évidence indiscutable du principe de propulsion par réaction date de 100 av. J.C (c.f. (134), Mediterranean Civilizations and Middle Ages). A cette époque *Hero* d'Alexandrie invente l'*aeolipile* (litt.'boule à vent'), une sorte de roue à réaction illustrée par la Fig. 1.1. Un chaudron clos produit de la vapeur s'évacuant par une sphère. Cette sphère peut tourner autour de l'axe d'alimentation en vapeur. Les tuyaux d'évacuation de la sphère mobile étant coudés, l'éjection de vapeur provoque un mouvement de rotation. Cette invention n'a cependant aucune application pratique.

Origine Chinoise, de -200 à 1232

Dès 200 av. J.C., des chinois connaissent empiriquement les propriétés pyrotechniques des mélange de poudre de charbon, de soufre et de salpêtre (c.f. Fig 1.8, ①). Sur cette base de chimie, ils développent l'art des feux d'artifices. Ces feux sont utilisés pour les rituels religieux, dans le but de chasser les mauvais esprits. La poudre noire, ou plutôt l'utilisation du salpêtre en combustion, se répand en occident au VII^e siècle grâce au commerce. Les Byzantins se servent des propriétés du salpêtre, en l'ajoutant à leurs feux grégeois pendant les batailles navales. Pour une rétrospective exhaustive de l'histoire de la poudre noire, on peut se référer aux travaux de M. Mercier (105). Concernant les fusées proprement dites, on préférera l'analyse historique précise de Jixing Pan (113). Pour résumer son propos, les historiens hésitent entre plusieurs dates de mise en service de projectiles auto-propulsés.

Il y a tout d'abord en 1161 le *p'i-li-pao* (fusée Tonnerre, Fig. 1.2), un cylindre de papier contenant deux compartiment de poudre delimités par trois couches de terre cuite. La première charge



FIG. 1.1 – L'*aeolipile* construit par *Hero* d'Alexandrie en 100 av.J.C.

de propulsion est forcée sur toute sa longueur. La deuxième contient un agent fumigène. Ces fusées permettent de dresser des écrans de fumée à distance. Les témoignages écrits comme *Hai-ch'iu fou-hsü* (Postface de l'Ode aux Navires de Guerre Anguilles) par Yang Wan-li en 1170, et les techniques de l'époque, depuis la fabrication de la poudre jusqu'aux techniques de forages d'un pain de poudre comprimé, attestent que cet engin peut avoir été utilisé en 1161. Un doute reste quant au rôle de la couche de boue inférieure. Elle peut être une simple protection avant lancement, ou jouer le rôle de tuyère rudimentaire, accélérant les gaz par effet Venturi. Seul Jixing Pan la décrit comme une tuyère, c'est pourquoi cette conclusion reste à étayer.

On trouve ensuite en 1232 la célèbre *Fei-huo-ch'iang* (Lance de feu volante, Fig. 1.2). La traduction controversée de *Chin-Shih* (Histoire de la dynastie Chin), écrite par *T'o T'o et Ouyang Hsüan* en 1345, laisse place à de nombreuses ambiguïtés. En effet, lors de la description de la victoire de l'armée *Chin* contre le siège des troupes mongoles autour de la ville de *K'ai-feng-fu* en 1232, il est question de lances de feu volantes. Ce sont des lances de grande taille (approximativement deux mètres) auxquelles sont fixées une cartouche de poudre de 'deux pieds de long' (approximativement 50 cm). Aucun système de lancement (arbalète, catapulte) n'étant décrit, ceci fait penser naturellement aux fusées. En revanche, le texte parle de 'répandre le feu sur une distance de dix pas', une portée trop courte pour une fusée de cette taille, à moins qu'il ne s'agisse du panache d'éjection. Enfin, le texte ajoute que la cartouche contenant la poudre est intacte après combustion, une difficulté technique inutile pour un projectile explosif ou incendiaire, plaidant en faveur du caractère propulsif de la poudre. La *Fei-huo-ch'iang* est donc probablement la première fusée au monde à emporter une charge utile conséquente.

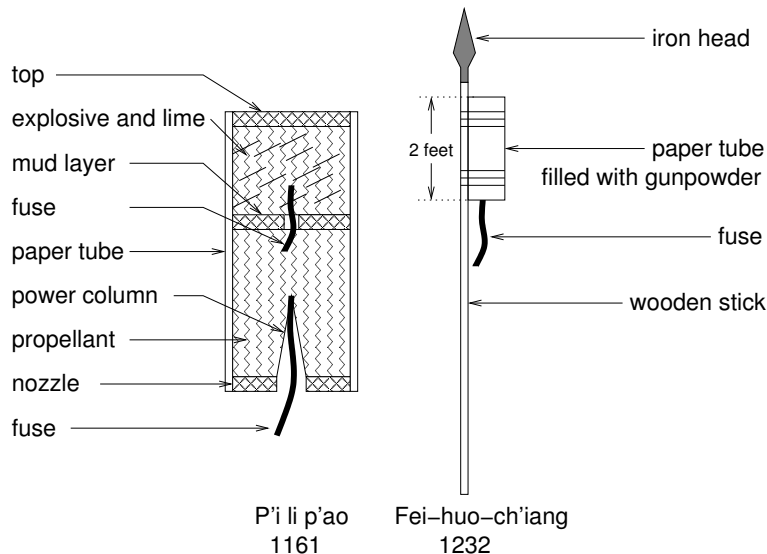


FIG. 1.2 – Reproduction littérale des schémas de Jixing Pan (113)

L'Empire du Milieu est cependant limité par une barrière technique de l'ordre de la dizaine de kilogrammes de charge utile : au delà d'une certaine quantité de poudre noire, la combustion détruit son support. Inversement, un support suffisamment solide possède un poids bien supérieur à la



FIG. 1.3 – L'idéogramme japonais feu - flèche signifie 'fusée', un dispositif régulièrement utilisé autour de 1200 ap. J.C. à des fins religieuses et militaires. *Dessin postérieur au XIX^e siècle d'un soldat japonais lançant un fusée militaire.*

poussée disponible. Il est donc impossible de passer à des applications de grande échelle, comme la construction d'armes de destruction plus massive ou la propulsion d'un homme (cf. Fig. 1.4). On voit déjà se poser ici le problème du rapport de masse mis en évidence à l'aube du xx^e siècle : la charge utile et la distance à parcourir définissent la masse de carburant nécessaire.

De l'Orient à l'Occident, fin du xiii^e siècle

L'efficacité militaire des fusées étant prouvée lors du siège de *K'ai-feng-fu* en 1232, la technologie des fusées de combat se propage rapidement dans le monde pendant le xiii^e siècle (c.f. Fig 1.8,②). On sait que les Mongols attaquent le Japon par ce moyen en 1274 et 1281. Le Japon, le Java, la Corée et l'Inde intègrent vite la nouvelle arme dans leur arsenal. A des milliers de kilomètres de là, l'empire arabo-musulman collecte et enrichit depuis six siècles les sciences des civilisations voisines, notamment des empires grec, égyptien, perse, indien et chinois (c.f. Fig 1.8,③). Les liens commerciaux soutenus, en particulier par la route de la soie, induisent des échanges culturels et techniques rapides. La manne de savoir ainsi obtenue, fruit d'une volonté politique initiée par les califes *Al Malik* (685-705) et *Al Mamun* (813-833), permet de déployer les fusées militaires arabo-musulmanes moins de 50 ans après l'épisode du siège de *Kai-Fung-Fu*, comme l'attestent les écrits de l'érudite syrien *al-Hasan al-Rammah* en 1285. Leurs alchimistes améliorent le processus de fabrication de la poudre noire en utilisant des composés purifiés. Le produit de leurs recherches est un explosif rapide autorisant les premières applications ballistiques.

A l'aube du xiv^e siècle, l'Europe commence enfin à combler son retard sur l'Orient avec les travaux sur la poudre noire de Roger Bacon, Albertus Magnus et Marcus Gaecus (c.f. Fig 1.8,④). La connaissance mondiale des fusées va alors s'enrichir régulièrement de perfectionnements mineurs entre le xiv^e siècle et le xix^e siècle. En particulier, la marine s'intéresse à la pyrotechnie pour développer des signaux envoyés par des fusées. Cependant, les progrès réalisés concernent des fusées de faible charge utile, à carburant solide. Nous passerons donc directement au début du xx^e siècle.

Le début du xx^e siècle

Trois hommes sont considérés comme les fondateurs de l'aéronautique moderne (cf. Fig. 1.6). Tout d'abord, le professeur de mathématiques russe Konstatin E. Tsiolkovski (1857-1935) publie ses premiers travaux théoriques sur le vol spatial en 1898 (c.f. Fig 1.8, ⑤). Insistant sur le fait que la vitesse et l'altitude maximale d'une fusée sont limitées par la vitesse d'éjection des gaz, il introduit la notion d'impulsion spécifique d'un moteur, pour finalement montrer l'intérêt décisif d'une fusée multi-étages pour atteindre de hautes altitudes. Il suggère enfin l'utilisation de carburant liquide, notamment le couple hydrogène-oxygène, pour augmenter la puissance du moteur. Plus tard, l'ingénieur américain Robert Goddard (1882-1945) présente en 1922 'A Method of Reaching Extreme Altitudes' (Une méthode pour atteindre les altitudes extrêmes). Il est le premier à réaliser et faire voler avec succès une fusée à carburant liquide en 1926. Parallèlement, l'allemand Hermann J. Oberth publie en 1923 sa dissertation doctorale 'Die Rakete zu den Planetenräumen' (Les fusées dans l'espace interplanétaire, c.f. Fig 1.8,⑦), contenant un travail théorique analogue à celui de R. Goddard. Ce livre engendre une discussion scientifique centrée en Allemagne. En 1927, le VfR ou 'Verein für Raumfahrt' (société pour le voyage spatial) est créé. Il regroupe très vite plusieurs centaines de jeunes scientifiques, publie le périodique 'Die Rakete' (La fusée), et favorise les échanges scientifiques entre pays. On pourra trouver des informations dans la chronique historique de Singer (134), volume 'XXth century part II'. Une introduction aux lois régissant le vol de fusées,



Un poète distrait nommé Wan Hu souhaitait par dessus tout explorer les cieux et rencontrer les étoiles. Après avoir escaladé des montagnes et même essayé des catapultes, il construisit une chaise de bambou équipée de cerfs volants et de 47 fusées. Lorsque la fumée se dissipa, il ne restait aucune trace de Wan-Hu, ni de son véhicule.

FIG. 1.4 – Un conte situe le premier homme à voler dans l'espace en l'an 1500. *Illustration contemporaine d'un livre de contes pour enfants*



FIG. 1.5 – La civilisation arabo-musulmane joue un rôle essentiel dans la diffusion de la science au moyen-âge. Le cas des fusées en est une illustration parfaite. *Peinture d'influence européenne (perspective) d'une scène turque ou perse (Arche à voute circulaire bicolore).*

obtenues presque simultanément par ces trois hommes, est présentée en Annexe I.



FIG. 1.6 – De gauche à droite, le russe K.E.Tsiolkovsky, l’américain R.Goddard et l’allemand H.E.Oberth, les trois fondateurs de l’astronautique moderne

La deuxième guerre mondiale

Les progrès du VfR intéressent les militaires, désireux de contourner les interdits du traité de Versailles, notamment concernant la fabrication ou l’utilisation d’artillerie tirant des obus à plus de 35 km. Absorbé par l’armée en 1932, le collectif est définitivement dissout au cours de l’hiver 1934. Des dizaines de spécialistes sont alors intégrés aux équipes de recherches de l’armée (c.f. Fig 1.8, ⑧). Lorsque la guerre éclate, A. Hitler leur demande une fusée capable de transporter une tonne de charge militaire à 300 Km. Le lanceur A4 est développé et construit sous la supervision de Werner von Braun, un membre du VfR de la première heure. Rebaptisé ‘Vergeltungswaffe 2’ (arme de représailles 2), l’engin ne sera pas prêt à temps pour changer le cours de la guerre, même si il représente un impact psychologique immense. En effet, les V2 ne sont déployés qu’en septembre 1944, avec un taux de réussite sur les vols inférieur à 25%. Néanmoins le trésor de guerre que constitue la science et la technologie allemandes est récupéré par les nouvelles superpuissances de l’Est et de l’Ouest. A l’occasion de l’opération militaire ‘Special Mission V2’, W. von Braun et 150 de ses collaborateurs sont envoyés aux Etats-Unis avec une bonne partie des installations de construction des fusées, installations qui conformément aux accords de Yalta auraient dû rester dans la juridiction russe. Ce fut l’un des premiers actes de la guerre froide.

Le cas Von Braun

Ce personnage est le sujet d’un débat éthique encore ouvert de nos jours. En 1939, il utilise ses connaissances pour créer une arme décisive au service d’une idéologie, le national socialisme. En 1945, il manœuvre activement pour passer à l’Ouest, se mettant au service du capitalisme au détriment du bolchevisme/communisme/socialisme. Ses rares défenseurs parlent de résistance passive en notant les retards, la très faible fiabilité technique du V2 et la quantité de projets non militaires étudiés par son équipe pendant la guerre. Ses détracteurs lui reprochent ses années de travail pour l’armée allemande, ses contacts avec la ‘Schutzstaffel’ (Escouade de protection), sa conscience des conditions de vie des travailleurs qui construisirent 5000 V2 en quelque mois. Les relations entre

science et guerre donnent lieu à bien des réflexions intéressantes à lire, comme celle de Edgerton dans "Science and War" (111).



FIG. 1.7 – Wernher von Braun, qui construisit le V2, puis contribua directement aux programmes d’exploration spatiale et de défense des Etats Unis d’Amérique, fut au centre d’un débat éthique toute sa vie.

La guerre froide

La conquête spatiale est souvent présentée comme une des plus belles pages de l’histoire humaine. La légende bien lisse de ‘l’étoffe des héros’, ces explorateurs intrépides repoussant les limites humaines, ne doit cependant pas occulter que le lancement de Spoutnik ou les premiers vols des hommes dans l’espace et vers la Lune sont autant de manières de montrer la maîtrise de chaque camp dans le domaine des lanceurs (c.f. Fig 1.8, ⑨). Le développement des théories de dissuasion issues de la crise de Cuba en 1962, induisant l’escalade dans l’équilibre de la terreur, exige des lanceurs toujours plus rapides à mettre en œuvre. L’objectif militaire est de convaincre l’adversaire qu’un missile balistique intercontinental peut décoller en quelques minutes (d’où le nom du missile américain *Minuteman*¹). C’est pourquoi les recherches sont développées en direction des carburants dit “stockables”. Ces carburants ont l’avantage de simplifier la préparation d’une fusée, mais possèdent une très haute toxicité. Le risque technique (et environnemental) soulevé par ces réactifs fut cependant accepté dans les deux camps, malgré l’opposition farouche de plusieurs spécialistes comme S.P. Korolev, le célèbre ‘père des fusées russes’. La technologie des carburants stockables correspond aujourd’hui aux divers propulseurs à poudre encore largement utilisés. Bien que ces réactifs soient particulièrement stables, leur synthèse fait toujours intervenir des gaz hautement toxiques comme le Phosgen. La guerre froide se termine dans les années 80 avec la politique d’ouverture de Michaël Gorbatchev, la *perestroïka*. C’est alors l’avènement de l’économie spatiale, décrite dans la prochaine section.

Vue d’ensemble

¹Lors de la guerre de sécession américaine, les *minutemen* étaient des volontaires prêts à rejoindre l’armée au premier appel, en moins d’une minute.

Tous ces événements possèdent une organisation intéressante. En effet, dans une première période, de -500 à 1900, plusieurs civilisations acquièrent successivement la technologie des fusées de combat. A chaque fois, la technologie de la poudre apparaît comme un prérequis. Par exemple, les Grecs possédaient presque le principe du moteur fusée avec la vapeur, mais ne pouvaient le mettre en pratique faute d'un carburant suffisamment efficace. Cela corrobore la prépondérance de la nature du carburant, identifiée plus tard par K.E. Tsiolkovski dans sa définition de l'impulsion spécifique. Par la suite, un grand regroupement scientifique permet d'obtenir la technologie elle-même, et le cycle se termine par un document écrit prouvant et datant la maîtrise de cette nouvelle technologie. On pourra noter le rôle essentiel du Moyen Orient dans la propagation de la science en général et des fusées en particulier.

La deuxième période, de 1900 à 1980 concerne les lanceurs de haute altitude. Les moyens financiers et technologiques nécessaires limitent le nombre de nations capables de construire ces engins. Les grandes guerres du xx^e siècle conditionnent la recherche, effectuée sous forme de compétition parallèle, principalement entre les blocs de l'Est et de l'Ouest de 1945 à 1980. Ce contexte d'émulation et d'oppositions a mis en évidence les problèmes éthiques liés aux fusées, à savoir les applications militaires toujours proches et la pollution colossale provoquée par les carburants. La troisième période, de 1980 à aujourd'hui, est caractérisée par l'ouverture mondiale (c.f. Fig 1.8, ⑩) qui succède à la guerre froide. Le nombre de pays lanceurs de fusées spatiales s'est considérablement élargi et les montages internationaux se sont développés. Les transferts de technologies ne sont plus rares, bien qu'ils ne soient pas encouragés par les nations, comme l'a prouvé le Congrès Américain en condamnant en 2003 Boeing et Hughes à verser 32 000 000\$ d'amende suite à des transferts illégaux de technologies vers la Chine dans les années 90. Boeing avait déjà dû payer en 1998 une amende de 10 000 000\$ pour plusieurs centaines de délits "d'exportations de services ou d'articles de défense sans autorisation" dans la création du montage international *Sealaunch*, de 1994 à 1998. Cette nouvelle ère complexe de partenariats est la conséquence de la priorité donnée à la composante économique de l'industrie spatiale, qui va être abordée dans la partie suivante.

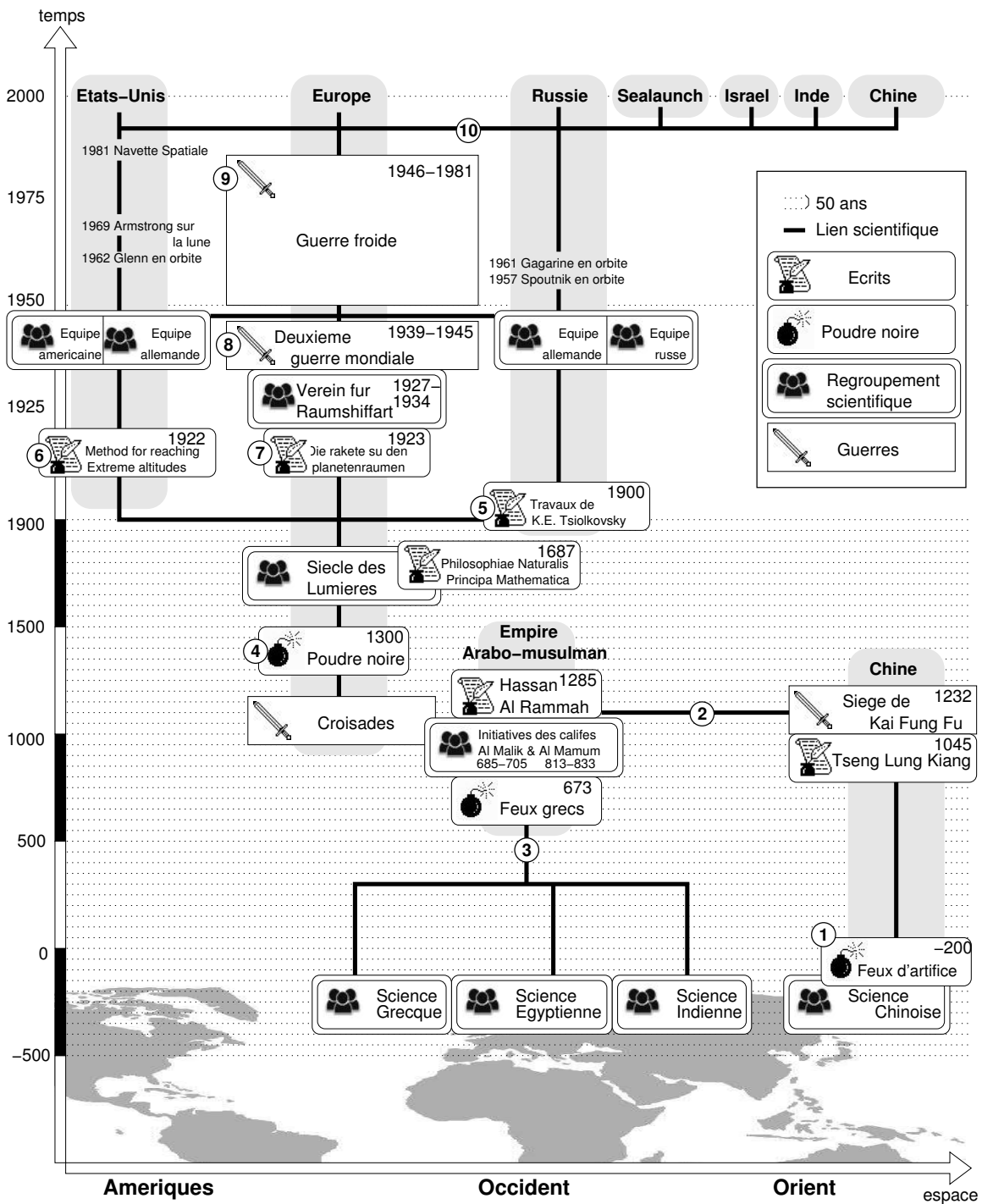


FIG. 1.8 – Chronologie et répartition mondiale des principaux événements constituant l’histoire des moteurs fusées.

1.2 Marché actuel des lanceurs spatiaux

Aujourd'hui, le marché des lanceurs spatiaux est constitué à 80% de lancements intra-nationaux, i.e. concernant des missions commandées par l'état lanceur. Ainsi, une grande partie des missions échappe pour le moment aux lois du marché. La situation est telle qu'il y a plus de lanceurs à vocation commerciale que d'offres de missions commerciales (environ 14 par an). Après une revue des intérêts nationaux mis en jeu, une rapide discussion concernant les stratégies actuelles des industries spatiales mettra en évidence le besoin de maîtriser parfaitement les mécanismes d'allumage des moteurs fusées cryotechniques.

Intérêts nationaux

La volonté des nations constitue le moteur principal dans le marché du moteur fusée. Les intérêts des états sont multiples. Trois intérêts majeurs financent l'essentiel de l'effort spatial :

1. La quête de la supériorité militaire. Il s'agit de se procurer des armes d'attaques (missiles balistiques intercontinentaux), de renseignement (satellites militaires d'observation), ou encore des armes plus exotiques (bouclier spatial anti-missile, satellites tueurs de satellites). Ainsi, une grande part de l'argent injecté dans ce marché provient des budgets de défense nationaux.
2. La quête du prestige national. Un pays dont les lanceurs spatiaux échouent régulièrement n'est plus crédible lorsqu'il parle de missiles qui par construction utilisent les mêmes technologies. Il s'agit donc en premier lieu d'un intérêt militaire indirect, suffisamment important pour soutenir les programmes spatiaux les plus démesurés. Par exemple, Le "missile gap" dénoncé par le candidat Kennedy en 1961 a mené les Etats Unis sur la Lune. C'est également un intérêt économique : la fiabilité et la régularité de métronome des lancements Russes attirent des investissements étrangers, comme la Plateforme de lancement Russo-américano-norvégien 'SeaLaunch'.
3. La quête de l'indépendance stratégique. L'autonomie des sources d'informations spatiales est un besoin indispensable dans le domaine du renseignement militaire, des observations scientifiques ou des télécommunications privées. Par exemple, le projet européen de navigation par satellite 'Gallileo' doit doubler le système américain 'GPS', alors que les relations transatlantiques sont pacifiques depuis des décennies.




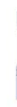
















Le coût de l'accès à l'espace

Baisser le coût d'accès à l'espace constitue le premier objectif des industries spatiales. Cependant, le prix du kilogramme de charge utile envoyé en orbite semble avoir atteint un palier, illustré sur la Fig. 1.9. Bien que les prix varient largement suivant les missions et les lanceurs, on voit une nette cohérence dans les missions concernant des satellites géostationnaires. Le prix de ces missions stagne de plus en plus sur la période 1996-2000.

Parmi les stratégies mises en œuvre pour passer ce pallier, on distingue deux grandes tendances. On trouve en premier lieu les lanceurs 'transnationaux' qui optimisent au maximum la filière de lancement utilisée en utilisant la coopération internationale au détriment de l'autonomie nationale. C'est par exemple la stratégie des partenariats *SeaLaunch* (Russie, Norvège, Etats Unis, Ukraine) ou *Starsem* (Europe, Russie), illustrés en Fig. 1.10. La deuxième voie utilise les lanceurs lourds. En comparant les caractéristiques de lanceurs présentées dans le Tableau 1.1, on voit que les lanceurs légers sont plus coûteux. Par exemple, un lancement commun de quatre satellites de une tonne sur

une orbite géostationnaire (lancement GTO²) par une fusée chinoise *Longue Marche 3B* revient à 60 M\$, tandis que quatre lancements par des fusées chinoises *Longue Marche 2C* reviennent à 90 m\$, soit 50% plus cher avec une technologie identique. Cela explique l'existence des lanceurs 'gros porteurs' comme *Delta IV Heavy* (Boeing, 13 tonnes en orbite géostationnaire), *Ariane 5 ECA* (Arianespace, 10 tonnes en orbite géostationnaire) illustrés en Fig. 1.11. Pour soulever de telles masses, on utilise de préférence des moteurs cryotechniques Hydrogène liquide - Oxygène liquide, comme les quatre moteurs de *Delta IV Heavy*. Le problème commercial qui en découle se situe dans le carnet de commande : rares sont les missions qui permettent de tels regroupements de satellites. Si le lanceur est capable de varier les orbites d'injections des charges utiles lors d'une même mission, les possibilités de missions se multiplient. C'est la raison d'être du projet de moteur de deuxième étage *Vinci*, réallumable cinq fois en cours de vol. Cela étant, l'allumage d'un moteur est l'une des actions les plus critiques pour le lanceur, causant de nombreux accidents. Ainsi, **la baisse du prix d'accès à l'espace est étroitement liée à la maîtrise des phénomènes physiques mis en jeu lors de l'allumage des moteurs cryotechniques.**

²L'orbite géostationnaire est la plus éloignée de la terre, et donc la plus coûteuse des missions de lancement en orbite terrestre. Le lanceur place la charge utile sur une trajectoire elliptique excentrée appelée Orbite de Transfert Géostationnaire ou GTO. L'impulsion finale vers l'orbite circulaire est réalisée par le satellite.

							
Nom	Shtil	Pegasus XL	START	Taurus	Cosmos	Rockot	Athena 2
Origine	Russie	USA	Russie	USA	Russie	Russie	USA
Capacité LEO	430 Kg	443 Kg	632 Kg	1 380 Kg	1 500 Kg	1 850 Kg	2 065 Kg
Capacité GTO	-	-	-	448 Kg	-	-	590 Kg
Prix lancement	0.2M\$	13.5M\$	7.5M\$	19M\$	13M\$	13,5M\$	24M\$
Prix LEO	465 \$/Kg	30 474 \$/Kg	11 647 \$/Kg	13 768 \$/Kg	8 667 \$/Kg	7 297 \$/Kg	11 622 \$/Kg
Prix GTO	-	-	-	42 411 \$/Kg	-	-	40 678 \$/Kg
							
Nom	Longue Marche 2C	Dnepr	Delta 2	Soyuz	Atlas 2AS	Longue Marche 2E	Ariane 44L
Origine	China	Russie	USA	Russie	USA	China	Europe
Capacité LEO	3 200 Kg	4 400 Kg	5 144 Kg	7 000 Kg	8 618 Kg	9 200 Kg	10 200 Kg
Capacité GTO	1 000 Kg	-	1 800 Kg	1 350 Kg	3 719 Kg	3 370 Kg	4 790 Kg
Prix lancement	22.5M\$	15M\$	55M\$	37.5M\$	97.5M\$	50M\$	112.5M\$
Prix LEO	7 031\$/Kg	3 409\$/Kg	10 692\$/Kg	5 357\$/Kg	11 314\$/Kg	5 435\$/Kg	11 029\$/Kg
Prix GTO	22 500\$/Kg	-	30 556\$/Kg	27 778\$/Kg	26 217\$/Kg	14 837\$/Kg	23 486\$/Kg
							
Nom	Longue Marche 3B	Zenit 2	Zenit 3SL	Ariane 5G	Proton	Navette spatiale	
Origine	China	Ukraine	Multinational	Europe	Russie	USA	
Capacité LEO	13 600 Kg	13 740 Kg	15 876 Kg	18 000 Kg	19 760 Kg	28 803 Kg	
Capacité GTO	4 630 Kg	-	5 250 Kg	6 800 Kg	4 630 Kg	5 900 Kg	
Prix lancement	60M\$	42.5M\$	85M\$	165M\$	85M\$	300M\$	
Prix LEO	4 412\$/Kg	3 093\$/Kg	5 354\$/Kg	9 167\$/Kg	4 302\$/Kg	10 416\$/Kg	
Prix GTO	11 538\$/Kg	-	16 190\$/Kg	24 265\$/Kg	18 359\$/Kg	50 847\$/Kg	

TAB. 1.1 – Lanceurs légers, moyens et lourds, par ordre croissant de charge utile en orbite basse. GTO et LEO désignent respectivement des missions vers des orbites géostationnaires (36 000 Km d'altitude) et vers des orbites basses (400 km). Source : documents publics Futron Corp. Sept. 2002.

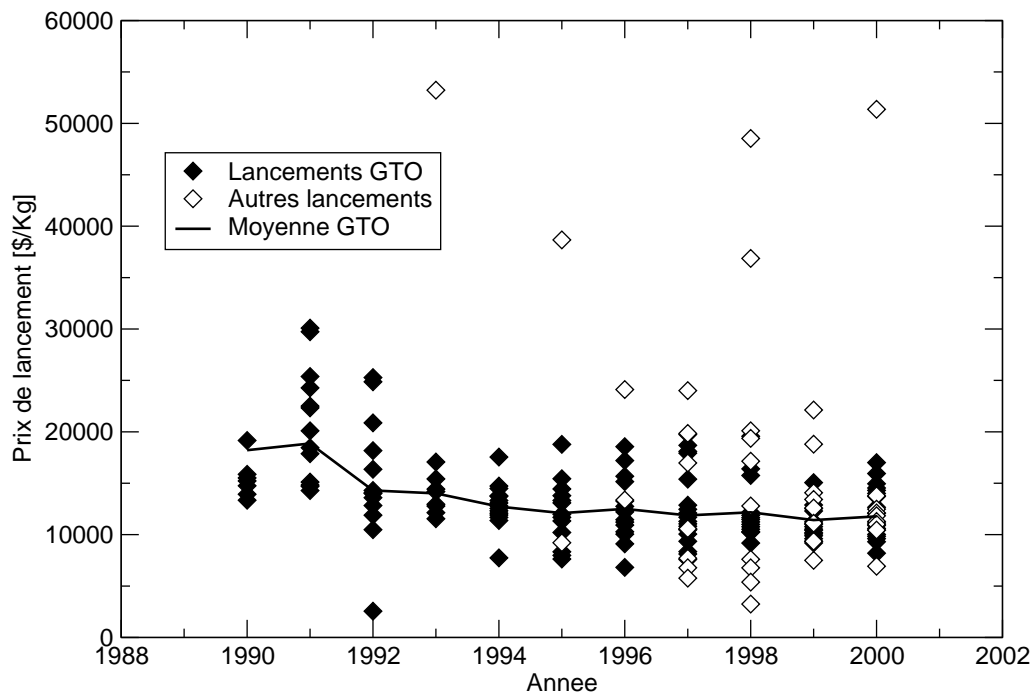


FIG. 1.9 – Evolution annuelle du coût de lancement de satellites, évalué sur 264 lancements de satellites commerciaux, normalisé en dollars (valeur Etats-Unis en 2000). Avec l'aimable autorisation de T. Freeland, Futron Corporation



FIG. 1.10 – Les lanceurs transnationaux : *Sea Launch* est un partenariat **Boeing** (USA), **Kvaerner ASA** (Norvège), **RSC-Energia** (Russie) et **SDO Yuzhnoye/PO Yuzhmash** (Ukraine). *Starsem*, ou *Soyuz Company*, est un partenariat **EADS** (Europe), **Arianespace** (Europe), **Russian Federal Space Agency** (Russie) et **The Samara Space Center** (Russie).



 **BOEING**



 **arianespace**

FIG. 1.11 – Les lanceurs gros porteurs *Delta IV 'Heavy'* de **Boeing** (USA) et *Ariane V ECA* d'**Arianespace** (Europe).

1.3 Cadre de la thèse

Cette introduction définit le cadre global de la thèse présente. Le volet historique montre l'importance du carburant et du rapport de masse. Les lois de la physique clarifient cette assertion, grâce aux travaux de Tsiolkovski (Cf. Annexe I). Le volet économique démontre l'importance critique de l'investigation scientifique du phénomène d'allumage.

En résumé, pour lancer de grandes charges utiles, il faut un carburant très énergétique comme les couples Hydrogène-Oxygène ou Kérosène-Oxygène. Le stockage liquide de ces carburants implique une technologie cryotechnique. De plus il faut un rapport de masse optimisé, c'est à dire entre autres un moteur le plus léger possible, des protections thermiques réduites au minimum.

Dans ce contexte, le travail de cette thèse se focalise sur *l'allumage des moteurs fusées cryotechniques*.

Chapitre 2

Etat de l'art

Plusieurs disciplines techniques interviennent dans l'allumage d'un moteur fusée cryotechniques. La partie de la fusée qui nous intéresse se situe dans la chambre de combustion d'un moteur à carburant liquide, depuis l'injection des ergols jusqu'au col précédent le divergent. Trois mécanismes de base contrôlent le fonctionnement : l'auto-allumage, les jets supersoniques sous-détendus, et la combustion supersonique. L'état de l'art dans la recherche sur chacun des ces phénomènes constituent le point de départ de ce travail.

2.1 Description de l'allumage d'un moteur fusée

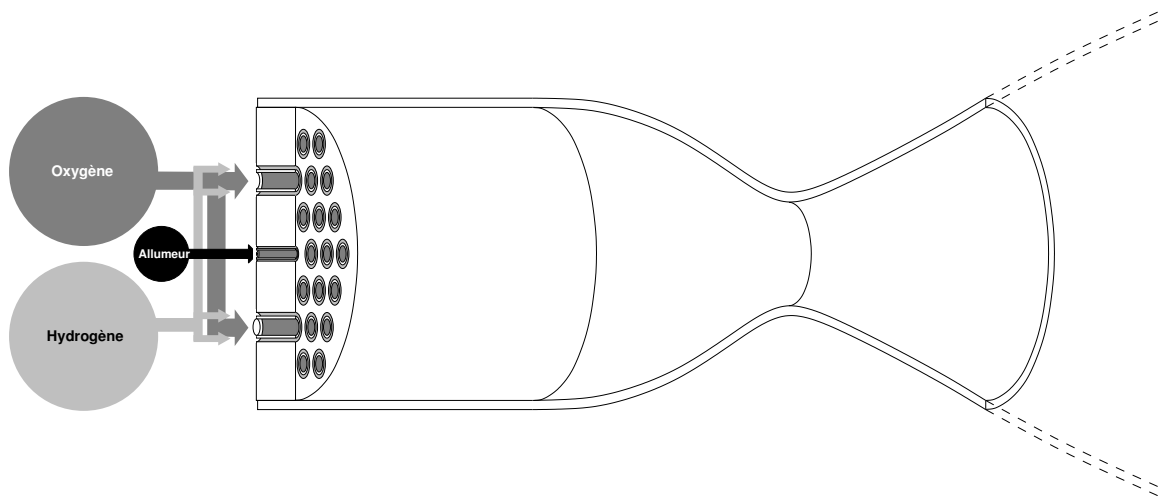


FIG. 2.1 – Chambre de combustion d'un moteur fusée cryotechnique

Voyons tout d'abord le lieu sur lequel vont porter les recherches. Les informations techniques qui suivent ont été fournies par les ingénieurs de la division "grosse propulsion liquide" de la Snecma. Le schéma de la Fig. 2.1 illustre la chambre de combustion d'un moteur cryotechnique,

depuis la plaque d'admission des réactifs, également appelés ergols, jusqu'au col de la tuyère. Le diamètre de la chambre fait plusieurs dizaines de centimètres. Les injecteurs coaxiaux, au nombre d'une centaine sur l'ensemble de la plaque, ont un diamètre extérieur de l'ordre du centimètre, et l'allumeur un diamètre de quelques millimètres.

Le démarrage d'un moteur fusée se déroule dans l'ordre suivant : purge complète par un gaz neutre, remplissage par le carburant sans combustion, mise en route de l'allumeur, et enfin admission de l'oxydant. On remarque que procédure d'allumage doit créer un mélange réducteur avant l'allumage car un mélange oxydant attaque les parois du moteur (Fig. 2.3). Voici les quatre étapes détaillées :

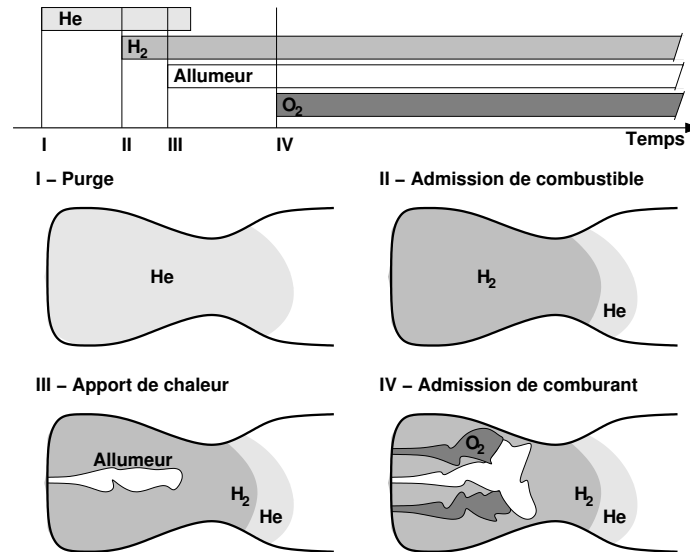


FIG. 2.2 – Procédure d'allumage classique d'un moteur fusée

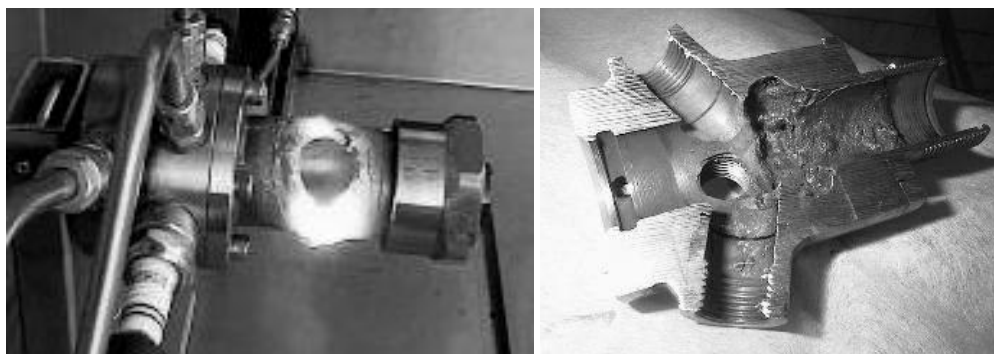


FIG. 2.3 – Destruction par excès d'oxydant d'une chambre de combustion expérimentale. Avec l'aimable autorisation de B. Berger, Swiss Propulsion Laboratory.

1. **Purge** : La mise en route d'un moteur fusée commence par la mise en place d'un état 'nominal'. C'est l'objectif de la purge (Fig. 2.2-I), qui consiste à balayer tous les systèmes par de l'hélium (He), un gaz neutre. Lors d'un allumage au sol ce gaz chasse l'air présent dans le moteur afin d'obtenir un milieu sans oxygène, tandis qu'en altitude cet hélium comble rapidement le vide spatial, créant une faible pression avant l'arrivée des ergols. La purge fait intervenir la mécanique des fluides et des gaz raréfiés.
2. **Admission du carburant** : Ensuite, le carburant, ici de l'hydrogène pur (H_2), est injecté à haute pression par une turbo-pompe (Fig. 2.2-II). La pression dans la chambre après purge en altitude s'approchant de quelques centièmes de Bars, carburant liquide se détend fortement, remplissant la chambre sous forme gazeuse. L'admission de carburant fait appel à la mécanique des fluides multi-espèces appliquée à des jets supersoniques issus de fortes détente : les jets supersoniques sous-détendus.
La durée de l'admission du carburant, quelques dixièmes de secondes, est à comparer avec le temps caractéristique d'injection de l'hydrogène, inférieur à quelques dixièmes de millisecondes. Ainsi, le calcul complet d'un remplissage de carburant est excessivement long.
3. **Allumage** : L'allumeur se met alors en route (Fig. 2.2-III). Son rôle consiste à créer une zone robuste de gaz chauds. Deux stratégies sont possibles. Les allumeurs pyrotechniques (Fig. 2.5.a) sont des fusées d'ergols solides qui créent un jet chaud de produits de combustions inertes. Cette technologie est bien maîtrisée, mais s'adapte mal au réallumage. En effet, il faudrait utiliser un barillet de plusieurs allumeurs, c'est-à-dire un système complexe et lourd. L'alternative est un allumeur cryotechnique (Fig. 2.4 et 2.5.b), une torche créée par la combustion des carburants et oxydants liquides. Dans le cas d'un allumeur cryotechnique



FIG. 2.4 – Allumeur cryotechnique. Le diamètre de la canne d'injection est de l'ordre du centimètre. Avec l'aimable autorisation de Stork / Aerospace Propulsion Products

(Fig. 2.5.b), l'oxygène réagit avec une partie de l'hydrogène (typiquement un tiers du débit massique) pour créer un jet initial de gaz chauds riches en oxygène. L'autre partie de l'hy-

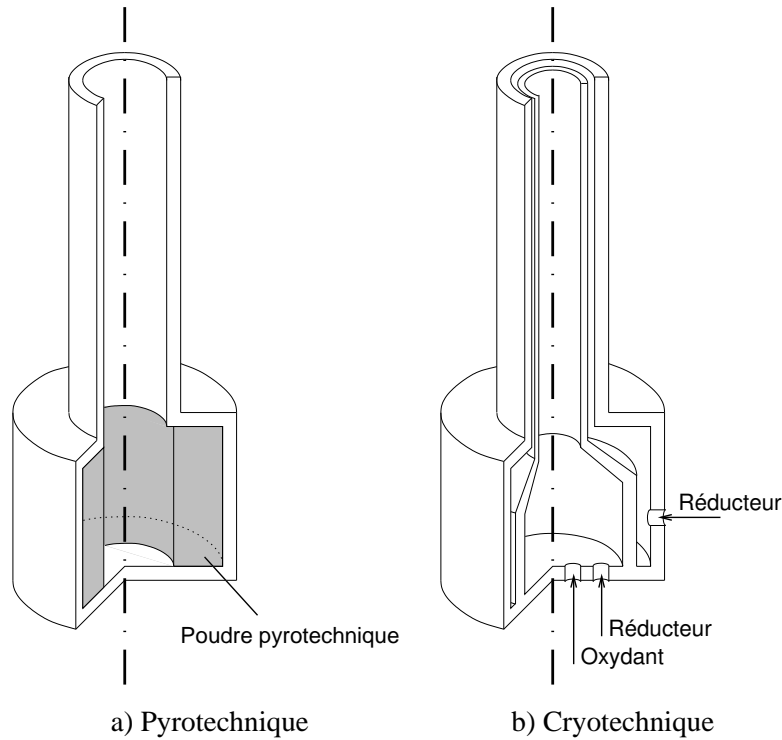


FIG. 2.5 – Allumeurs à jets pyrotechniques ou cryotechniques

drogène (deux tiers du débit massique) permet de refroidir les parois de l'allumeur et brûle dans la chambre au contact du jet initial oxydant chaud, ce qui provoque le panache d'allumage. Dans son ensemble, l'allumeur est un moteur fusée stœchiométrique. La technologie de l'allumeur utilise la chimie à cinétique finie, les écoulements supersoniques multi-espèces réactifs couplés aux transferts thermiques et à la résistance des matériaux.

Lors de la mise en route de l'allumeur, sa pression statique en sortie est bien supérieure à la pression chambre ($NPR=50$ dans les premiers instants). Cela produit un nouveau jet supersonique fortement sous-détendu (c.f. Annexe II) qui contient un choc hydrodynamique avec un rapport de pression statique aval/amont de plusieurs centaines. Le calcul d'une telle discontinuité suppose l'emploi de techniques numériques spécifiques, c.f. Chap. 5.

4. **Admission de l'oxydant** : Enfin l'oxydant, ici de l'oxygène pur (O_2), est admis de la même manière que le carburant (Fig. 2.2-IV). La combustion augmente progressivement la température et la pression. Le jet d'oxydant gazeux redevient liquide, puis supercritique. La présence antérieure d'un mélange chaud doit assurer une combustion progressive, sans apparition de poches froides de mélange carburant/oxydant. Dans le cas contraire, ces poches sont des zones de combustion incontrôlée violente qui secouent le lanceur par des pics de pression brutaux : c'est un allumage 'dur'.

Lorsque l'admission d'oxygène débute, la combustion principale commence. Cet ergol initialement injecté à l'état liquide. Les gaz produits font augmenter alors la pression de la chambre

jusqu'à plusieurs dizaines de bar, et l'injection de l'oxydant devient supercritique. Outre le fait que les fluides ne suivent plus simplement une loi d'état de gaz parfaits, des gradients de densités extrêmes ($1 \cdot 10^8$) apparaissent, tout aussi difficiles à simuler qu'un choc hydrodynamique.

La description ci-avant montre une grande variété de domaines scientifiques et techniques. La combustion pyrotechnique est écartée, car elle n'est pas adaptée aux réallumages. La mécanique des structures, et la résistance des matériaux nécessitent encore un travail de recherche séparé de la combustion et ne sont pas étudiés ici. L'injection diphasique ou supercritique est quant à elle une discipline trop récente pour être prise en compte dans ce travail. Ainsi, **on se concentrera sur trois sujets essentiels : la chimie complexe à cinétique finie de l'auto-allumage, la dynamique des jets supersoniques sous-détendus, et la combustion supersonique stabilisée par auto-allumage.** Ces sujets seront traités de façon à faciliter les développements ultérieurs : simulations de phénomènes supercritiques (lois d'état modifiés, gradients de densité), configurations industrielles (temps de simulations longs, géométries complexes), ou encore fatigue des matériaux (transferts de chaleurs, interactions fluide-structure).

2.2 La chimie de l'auto-allumage

L'auto-allumage intervient dans les brûleurs séquentiels ou multi-étages ou dans les réchauffes des réacteurs aéronautiques où du carburant froid est injecté à la sortie d'une chambre de combustion principale pour brûler dans une chambre secondaire. On le trouve également dans la combustion supersonique des super stato-réacteurs (Scramjets) dans lesquels l'air est chauffé par des effets de compression. C'est enfin le principe d'allumage des moteurs diesels, où la température de l'air est augmentée par la compression d'un piston avant l'injection du carburant. L'auto-allumage a même été utilisé à des fins militaires. La bombe thermobarique (i.e. utilisant l'oxygène atmosphérique) au phosphore blanc en est une des plus spectaculaires applications (Fig. 2.6). En effet, le phosphore blanc s'enflamme spontanément au contact d'un air humide à 30°C.

Photo # NH 57483 Former USS Alabama is hit by a phosphorus bomb, during tests in September 1921



FIG. 2.6 – Une bombe au phosphore blanc testée au début du siècle

L'auto-allumage signifie l'établissement spontané d'une zone réactive entre deux réactifs mis en contact. Pour la plupart des mélanges, la réaction s'effectue seulement au-dessus d'une température critique. Généralement, les réactifs sont mélangés froids, puis le mélange est chauffé de différentes manières pour obtenir une combustion : flamme pilote, poche de gaz chauds, diffusion et rayonne-

ment de la flamme principale, etc... Si la température à laquelle se fait le mélange est déjà au-dessus de la température critique, alors la combustion est "spontanée", et on parle d'auto-allumage.

La chronologie des études menées sur l'auto-allumage, présentée en figure 2.7, fait apparaître trois ensembles de recherches. Le premier ensemble concerne la modélisation de la cinétique chimique. En 1889, Arrhénius (7) propose un modèle mathématique pour décrire un taux de réaction. Les schémas cinétiques développés par la suite sont un ensemble d'étapes chimiques de type Arrhénius. En 1980, Kee, Miller et Rupley (81) proposent un ensemble d'outils informatiques, CHEMKIN, qui devient un standard de la discipline. Les schémas cinétiques plus ou moins complexes sont ajustés pour simuler différentes applications. Certains schémas sont créés pour être cohérents dans plusieurs configurations (flamme prémélangée, flamme de diffusion, autoallumage en tube à choc, etc...). Concernant plus particulièrement l'hydrogène, la thermodynamique montre que les hautes température atteintes lors de la combustion (2500 à 3000 °K) autorisent la présence d'ions (H , O , OH) en proportion non négligeable dans les produits. D'un point de vue cinétique, il apparaît que les intermédiaires réactionnels (HO_2 , H_2O_2) prennent une part incontournable dans la combustion. Plusieurs schémas globaux sont également disponibles, comme celui de Yetter (155). Les échelles de temps ou d'espace associées aux réactions contenant les intermédiaires (HO_2 , H_2O_2) étant très petites, elles nécessitent une puissance de calcul très au-delà de ce qui est acceptable dans le cadre de la simulation de systèmes complets. augmentent dramatiquement la puissance de calcul nécessaire. On a donc souvent recours à des schémas simplifiés ne faisant pas intervenir ces intermédiaires rapides, comme celui de Baurle (9) avec seulement 6 espèces (H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H) pour seulement 7 réactions.

Un deuxième ensemble de travaux regroupe de 1994 à 1997 l'étude de la technologie Diesel par les motoristes (Baritaud - Institut Français du Pétrole (8), Kong - Engine Research Center (86)). La puissance des calculateurs augmentant, il est suivi d'une série de simulations numériques directes d'auto-allumage (8; 86; 116; 151) mêlant cinétique chimique détaillée, turbulence résolue et processus de diffusion complexes. Ces travaux ont montré que le temps d'apparition des premiers sites d'auto-allumage est peu sensible à la turbulence, et qu'ils se situent sur une richesse correspondant à celle du prémélange parfait le plus rapide à s'allumer. Sur cette iso-surface de richesse, ils débutent là où la dissipation scalaire est la plus basse. Enfin, ces premiers sites, apparus en temps t , transitent vers une flamme non-prémélangée complètement turbulente pendant une durée allant de $0.8t$ à $1.8t$.

Réactions en Chaîne H_2/O_2				<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
1	$H + O_2 \leftrightarrow O + OH$			$1.92 \cdot 10^{14}$	0.00	16.44
2	$O + H_2 \leftrightarrow H + OH$			$5.08 \cdot 10^4$	2.67	6.29
3	$H_2 + OH \leftrightarrow H_2O + H$			$2.16 \cdot 10^8$	1.51	3.43
4	$O + H_2O \leftrightarrow OH + OH$			$1.23 \cdot 10^4$	2.62	-1.88
Dissociation/Recombinaison						
5	$H_2 + M \leftrightarrow H + H + M(\dagger)$			$4.57 \cdot 10^{19}$	-1.40	104.40
6	$O + O + M \leftrightarrow O_2 + M(\dagger)$			$6.17 \cdot 10^{15}$	-0.50	0.00
7	$O + H + M \leftrightarrow OH + M(\dagger)$			$4.72 \cdot 10^{18}$	-1.00	0.00
8	$H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M(\dagger)$			$2.25 \cdot 10^{22}$	-2.00	0.00
Formation/Consommation HO_2						
9	$H + O_2 + M \leftrightarrow HO_2 + M(\dagger)$			$6.17 \cdot 10^{19}$	-1.42	0.00
10	$HO_2 + H \leftrightarrow H_2 + O_2$			$6.63 \cdot 10^{13}$	0.00	2.13
11	$HO_2 + H \leftrightarrow OH + OH$			$1.69 \cdot 10^{14}$	0.00	0.87
12	$HO_2 + O \leftrightarrow OH + O_2$			$1.81 \cdot 10^{13}$	0.00	-0.40
13	$HO_2 + OH \leftrightarrow H_2O + O_2$			$1.45 \cdot 10^{16}$	-1.00	0.00
Formation/Consommation H_2O_2						
14	$HO_2 + HO_2 \leftrightarrow H_2O_2 + O_2$			$3.02 \cdot 10^{12}$	0.00	1.39
15	$H_2O_2 + M \leftrightarrow OH + OH + M(\dagger)$			$1.20 \cdot 10^{17}$	0.00	45.5
17	$H_2O_2 + H \leftrightarrow H_2O + OH$			$1.00 \cdot 10^{13}$	0.00	3.59
18	$H_2O_2 + H \leftrightarrow H_2 + HO_2$			$4.82 \cdot 10^{13}$	0.00	7.95
19	$H_2O_2 + O \leftrightarrow OH + HO_2$			$9.55 \cdot 10^6$	2.00	3.97
20	$H_2O_2 + OH \leftrightarrow H_2O + HO_2$			$7.00 \cdot 10^{12}$	0.00	1.43

† Efficacité du troisième corps H_2 : 2.5 ; H_2O : 12.0

ТАВ. 2.1 – Schéma cinétique de Yetter (155) pour la combustion de l'Hydrogène. Unités en $cm^3 - mol - Kcal - K$.

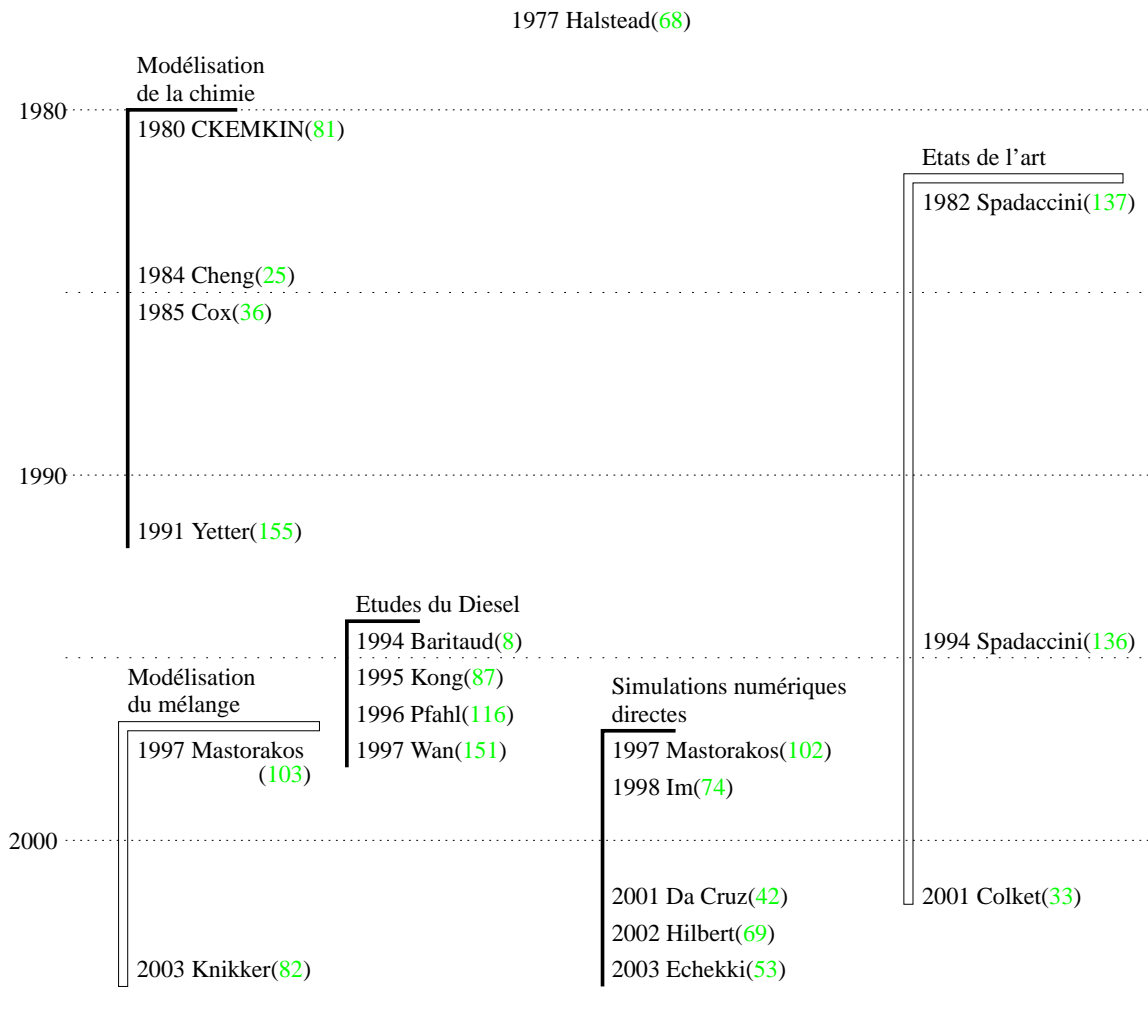


FIG. 2.7 – Chronologie bibliographique de l'auto-allumage - Premier Auteur (Référence)

La Chronologie bibliographique ci-dessus et celles qui vont suivre mettent en évidence des regroupements thématiques non exhaustifs de travaux en relation directe (traits pleins noirs) ou indirecte (traits blancs) avec le sujet.

2.3 La dynamique des jets supersoniques sous-détendus

Les jets supersoniques sous-détendus sont eux aussi présents dans de nombreuses applications. En physique fondamentale, les accélérateurs de particules sont alimentés par un jet à très haute vitesse et très basse pression pour obtenir un flux de particules raréfiées et fortement corrélées en vitesse. En sécurité nucléaire ou aérienne, les fuites d'une enceinte à haute pression (centrales nucléaires, carters de moteur aviation) forment des jets supersoniques capables de détruire les équipements avoisinants. En propulsion, la performance d'un moteur à flux supersonique dépend du contrôle de la pression de sortie par la tuyère, c.a.d. du jet sous-détendu propulsif. Dans cette

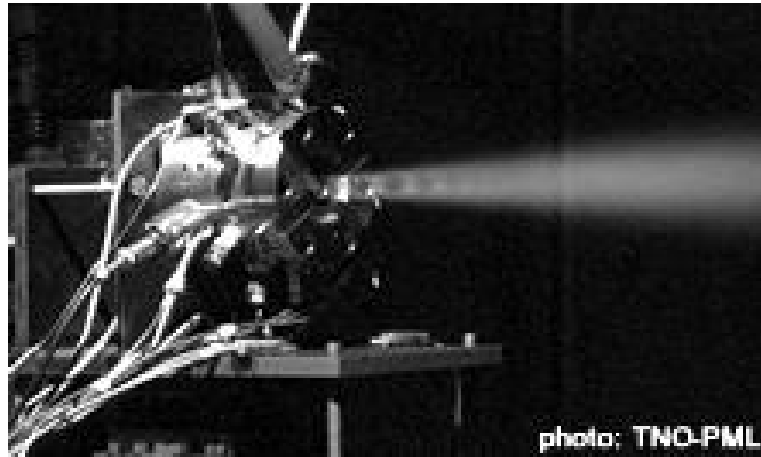


Fig. 2.8 – Photographie d'un micro-propulseur / allumeur en phase de test. La structure en 'queue de tigre' est caractéristique d'une détente dans un jet supersonique. (Photo : Stork / Aerospace Propulsion Products)

thèse, ce sont les allumeurs de moteurs fusées qui génèrent ce type de jet : ils produisent des gaz chauds à une pression supérieure à celle de la chambre de combustion (Fig. 2.8). Lorsque les rapports de pression statique sont de l'ordre de 10 ou plus, les fluides subissent de fortes détentes, des chocs, et des couches de cisaillement intenses. Ce type particulier de jet est illustré en Fig. 2.9

Les premiers éléments de la théorie des jets supersoniques sont issus de la guerre mondiale 1939-1945. La thèse de I. S. Chang propose dès 1945 une prédiction de la forme des jets sous-détendus par la méthode des caractéristiques. On peut également citer A. Ferri (58; 59; 60; 61), précurseur des études supersoniques à la NACA puis la NASA.

Les dispositifs expérimentaux dédiés spécifiquement aux jets sous-détendus commencent en 1959. Les caractéristiques non visqueuses (longueur et rayon de la cellule de détente) sont assez vite connues. A. D. Birch (14; 15) établit ensuite le lien entre le panache d'un jet sous-détendu et celui d'un jet supersonique établi¹ équivalent. Ces connaissances sont détaillées dans l'Annexe 'Dimensionnement de jets sous-détendus'. Les couches de mélanges supersoniques courbées de ces jets sous-détendus font encore aujourd'hui l'objet d'observations poussées. On notera par exemple

¹Un jet supersonique établi est un jet sortant à la même pression que le milieu ambiant.

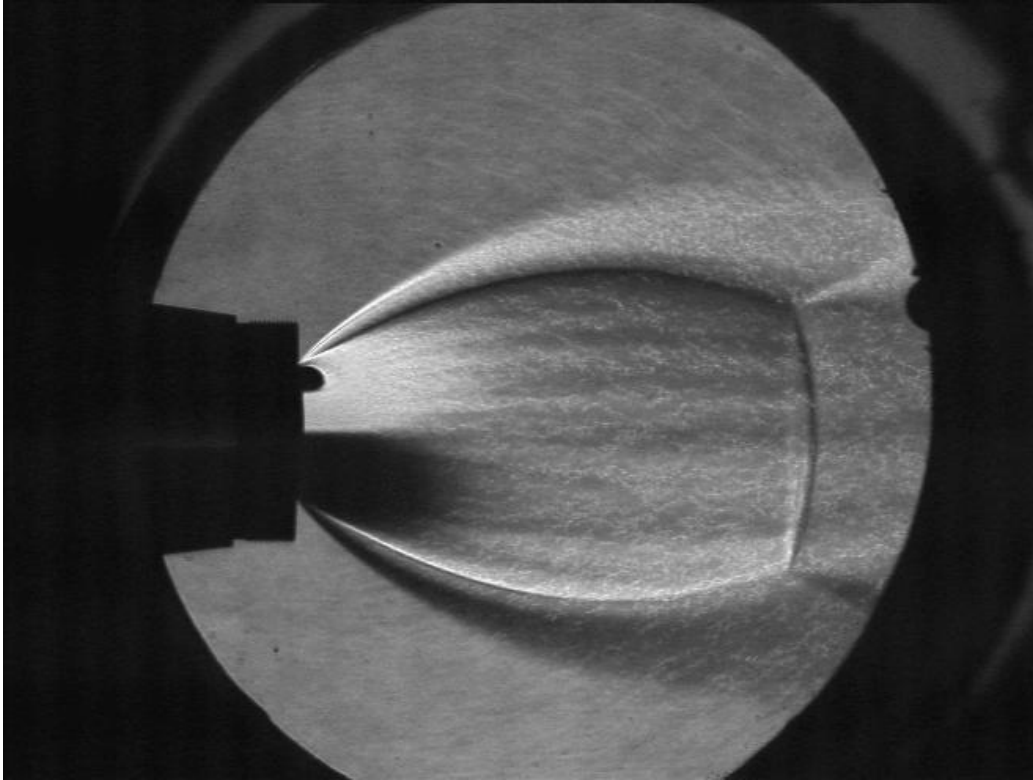


Fig. 2.9 – Photo de type Schlieren d'un jet sous-détendu d'air à 270K, rapport de pression statique : 32.45, Diametre de buse : 30 mm : exposition 1/30s. Avec l'aimable autorisation de V.I. Zapryagaev, ITAM Novossibirsk.

l'image de B. Yip (156) , une coupe laser, montrant une structure tourbillonnaire proche de l'instabilité Kelvin-Helmoltz, ou la série de mesures de V. Zapryagaev (160; 159; 161) sur l'instabilité de Görtler, qui s'avère déterminante dans les couches de mélange des jets sous-détendus réactifs.

Les simulations numériques de ce phénomène ont commencé tôt avec la méthode des caractéristiques. Cette méthode est toujours utilisée aujourd'hui lorsque l'on s'intéresse seulement à l'intérieur de la cellule de détente (112). Les méthodes aux volumes finis sont devenues applicables à ce type d'écoulements à partir de 1985 (Code SCIPVIS (43)) et ont été améliorées depuis avec le développement de modèles RANS (2). Actuellement, le code utilisé par la NASA se nomme VULCAIN, issu d'une collaboration NASA-Taitech (152).

Les simulations aux grandes échelles sont difficiles à réaliser sur des configurations contenant des chocs. C'est pourquoi elles se limitent pour l'essentiel à l'acoustique de jets supersoniques adaptés, comme dans le travail de Bogey (17). A l'heure actuelle, les chocs sont majoritairement traités en LES par des schémas de type WENO, sur des maillages structurés. Ils ont été récemment appliqués avec succès en deux dimensions sur un jet sous-détendu par T.S. Cheng (26).

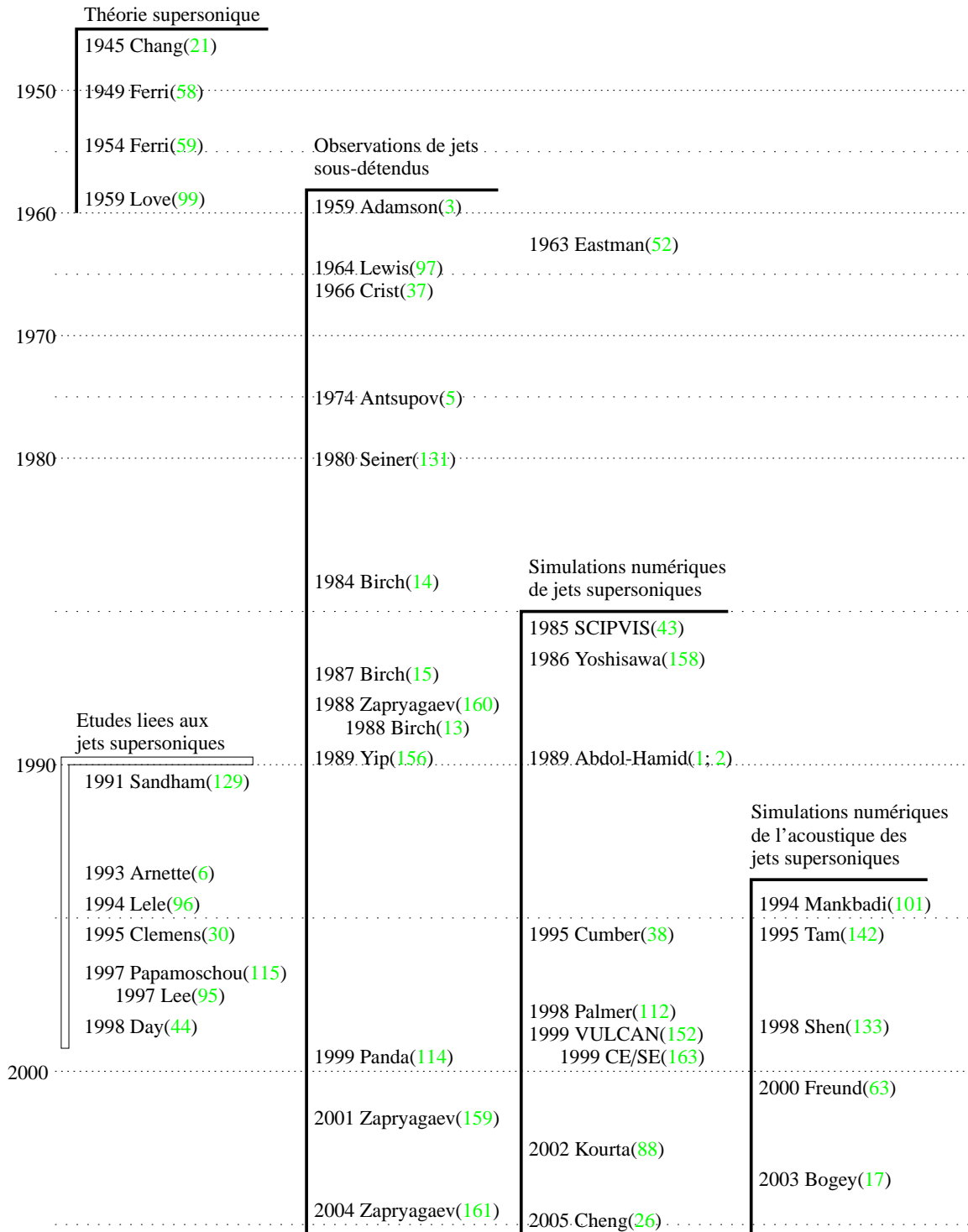


FIG. 2.10 – Chronologie Bibliographique jets sous-détendus - Premier Auteur (Référence)

2.4 La combustion supersonique

Le régime de combustion supersonique est essentiellement réservé aux super-stato-réacteurs (scramjets) fonctionnant avec une flamme stabilisée dans un flux interne supersonique. Cette solution est considérée comme une possible 'rupture technologique' car elle autorise des performances réservées aux moteurs fusées ($Mach > 5$) alors que l'oxydant est puisé dans l'atmosphère. En conséquence, les avions verraient leurs performances augmentées substantiellement, tandis que les premiers étages des lanceurs spatiaux affranchis des réservoirs d'oxygène multiplieraient leur efficacité (L'annexe 1 "lois du vol spatial" explique l'importance du poids dans l'efficacité d'un étage de fusée). La NASA soutient depuis les années soixante un effort de recherche dans ce domaine, récemment récompensé par le premier vol de l'avion hypersonique expérimental X-43A, le 16 novembre 2004, cf. Fig. 2.11. Par ailleurs, on trouve également la combustion supersonique dans les allumeurs cryotechniques de moteurs-fusées, où les deux réactifs sont injectés à vitesse supersonique dans des conditions assurant l'auto-allumage. Comme les deux réactifs réagissent spontanément, la flamme ainsi créée est extrêmement robuste.

A. Ferri (60) en 1964, puis huit ans plus tard F. Suttrop (141) et M. C. Burrows (19) sont parmi les premiers à étudier les super-stato-réacteurs et la combustion supersonique de l'hydrogène. Les expériences sur flammes supersoniques sont nombreuses, mais rares sont celles qui permettent des validations quantitatives de simulations numériques. Les mesures très complètes de T. S. Cheng (27; 28) dans une flamme supersonique issue d'un jet coaxial auto-allumé seront d'un intérêt tout particulier pour cette thèse. D'autres mesures plus anciennes de jets réactifs sont disponibles grâce à l'équipe de J.S. Evans *et al.* (55; 56). Plus récemment, les montages expérimentaux se sont focalisés sur des configurations plus complexes de type super-stato-réacteurs (80; 125), mais la question fondamentale du contrôle de la cinétique chimique reste un sujet d'observation essentiel (100; 140; 122). On retiendra également le travail de J. F. Driscoll (48) en 1996, qui permet d'évaluer *a priori* la taille d'une flamme supersonique. L'étude d'une flamme décollée par un jet supersonique fortement sous-détendu par C. B. Devaud (46) en 2002 est intéressante mais ne fait pas intervenir le mécanisme d'auto-allumage.

Du côté des simulations numériques, la méthode des caractéristiques qui fut largement utilisée pour les écoulements supersoniques n'a pas pu être généralisée aux écoulements réactifs. Il faut attendre les progrès de l'informatique et des volumes finis jusqu'en 1986 pour qu'apparaisse une grande variété de simulations de combustion supersonique (Drummond (50; 49), Wilson (153), Baurle (9), Zheng (164)). La simulation aux grandes échelles apparaît pour la première fois en 1997 (Norris (110), étude bidimensionnelle), mais son coût la limite pour l'instant à des configurations fondamentales. Les méthodes RANS sont par contre intensivement utilisées dans la construction des super-stato-réacteurs (84; 83).

Les processus de mélange à petite échelle (micro-mélange) compliquent l'étude de la combustion supersonique. Les approches par "fonction de densité de probabilité"(PDF) donnent d'excellents résultats (79; 154) sur les flammes turbulentes non prémélangées. Les équipes de R.A. Baurle *et al.* (9; 10) puis de H. Mobius *et al.* (106) ont su étendre ces méthodes aux écoulements supersoniques. La comparaison de plusieurs formulations montre que le transport lagrangien des PDF par une technique de Monte Carlo proposée par S.B. Pope (120) couplé à un calcul RANS pour la dynamique du fluide donne les résultats les plus satisfaisants (106).



NASA Dryden Flight Research Center Photo Collection
<http://www.dfrc.nasa.gov/Gallery/Photo/index.html>
 NASA Photo: EC04-0029-50 Date: January 26, 2004 Photo By: Carla Thomas

The black X-43A rides on the front of a modified Pegasus booster rocket hung from the special pylon under the wing of NASA's B-52B mother ship. The photo was taken during a captive carry flight Jan. 26, 2004 to verify systems before an upcoming launch.

FIG. 2.11 – X-43A, le premier aéronef propulsé par super-stato-reacteur (scramjet).

Plusieurs revues complètes de la combustion supersonique sont disponibles : Waltrup (150), Jachimovski (75), Billig (12), Spadaccini et Colket (136; 33) et enfin Curran (39; 40). On y apprend essentiellement que le problème de combustion des super-stato-réacteurs est d'obtenir une combustion suffisamment rapide pour s'effectuer à l'intérieur du moteur malgré des temps convectifs extrêmement courts. Le dimensionnement du moteur et de la zone de réaction deviennent des paramètres critiques. C'est pourquoi de nombreuses études se focalisent sur le mélange, l'injection de carburant, et la cinétique chimique. Concernant la simulation numérique, les avis sur le choix des modèles de turbulence ou de combustion sont moins tranchés car l'augmentation directe de la puissance de calcul (c.a.d. des maillages plus fins ou un plus grand nombre de particules stochastiques) reste encore aujourd'hui le meilleur moyen d'améliorer les résultats. Comme pour les jets supersoniques, la simulation des grandes échelles a essentiellement été réservée à des cas académiques de flammes supersoniques bidimensionnelles. Le modèle de combustion le plus adapté passe par des fonctions de densité de probabilité, couplées à des approches RANS ou SGE.

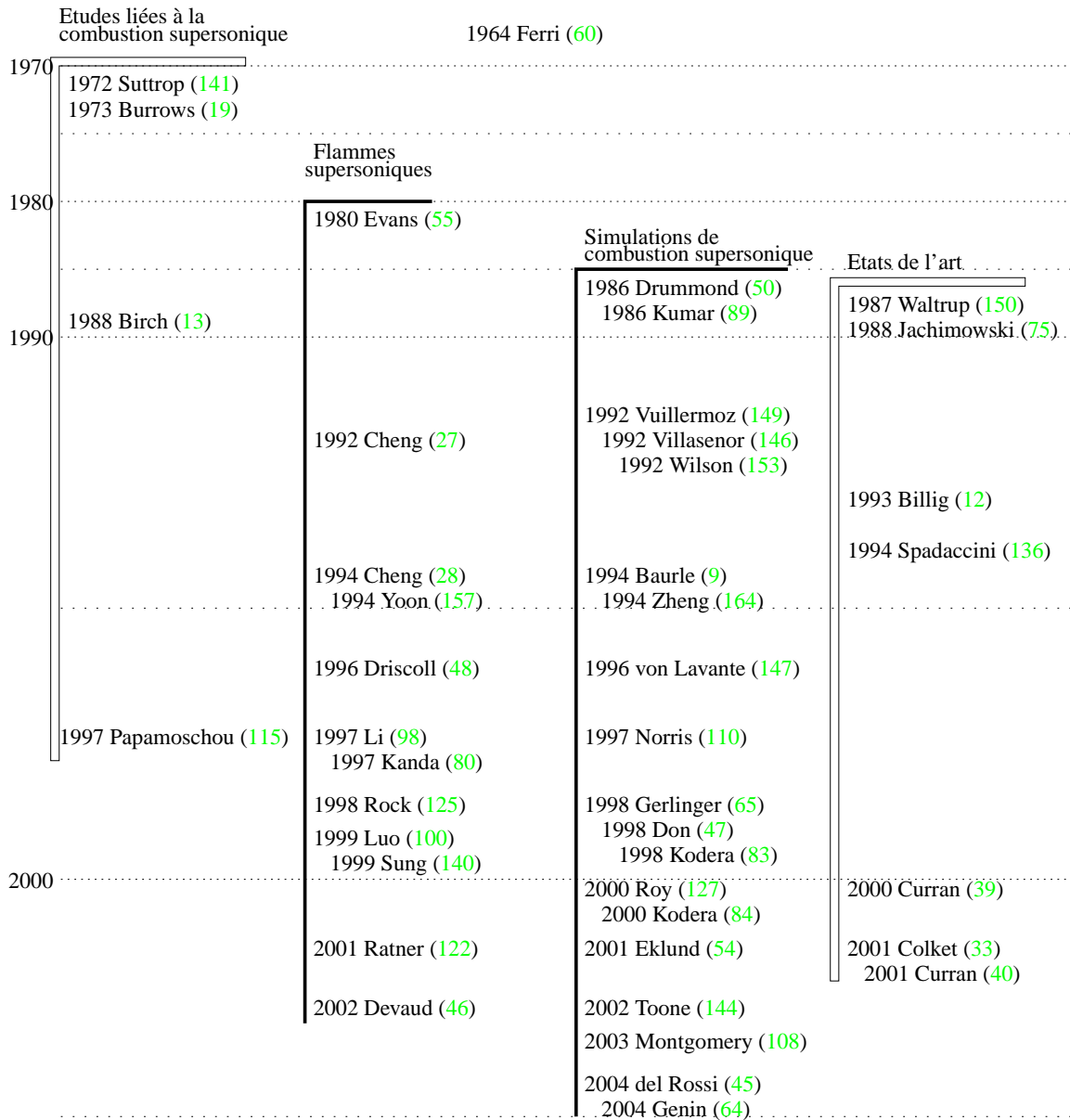


FIG. 2.12 – Chronologie Bibliographique la combustion supersonique - Premier Auteur (Référence)

2.5 Stratégie de la thèse

Cette thèse est le point de départ d'un effort de recherches visant à rendre la simulation des grandes échelles capable à moyen terme d'étudier en détail l'allumage transitoire des moteurs fusées cryotechniques. Par conséquent, les choix faits ici auront un impact direct sur les travaux futurs. La particularité des travaux présentés tient dans les décisions techniques prises face à chaque problème. Les choix se sont portés sur des techniques simples, indépendantes de la géométrie, du maillage ou du processus chimique, au lieu de techniques hautement spécifiques (capture de choc, modèles de combustion complexes) qui ne peuvent traiter l'ensemble des phénomènes présents.

1. En 2003, la connaissance fondamentale du processus d'auto-allumage est donc bien avancée. Cela dit, le couple hydrogène/ oxygène qui nous intéresse a pour particularité de diffuser les espèces bien plus vite que la chaleur. L'impact de cette originalité sur l'auto-allumage n'a pas encore fait l'objet d'une analyse spécifique. Nous étudierons ce point afin d'en déduire une estimation du temps d'auto-allumage, qui pourra alors être utilisé dans la construction d'une cinétique chimique réduite.
2. Les méthodes classiquement utilisées en simulation d'écoulement supersonique doivent être écartées, car l'objectif final de simulation concerne une configuration complexe. En effet les méthodes RANS s'appliquent à la quantification précise de phénomènes dans des écoulements dont la turbulence est préalablement connue. Les méthodes SGE sont plus prédictives, mais l'utilisation de schémas de capture de choc pour les supersoniques souffre d'un coût de calcul élevé. Par ailleurs, ces schémas sont encore en cours de développement pour les maillages structurés tridimensionnels. En conséquence, cette thèse doit développer pour la SGE une autre manière plus économique de traiter les chocs supersoniques.
3. Concernant la combustion supersonique, les schémas de cinétique chimique simples n'existent pas pour l'auto-allumage, alors qu'en SGE une cinétique complexe n'est pas envisageable. Le travail sur ce sujet commence donc par la proposition d'un schéma cinétique simple. Ensuite, les méthodes utilisant des PDF font actuellement l'objet de multiples études. Leur principal inconvénient est qu'elles prennent des hypothèses fortes concernant le mélange. Par exemple, elles considèrent pour l'instant une diffusion identique de la chaleur et des espèces, hypothèse gênante si la diffusion différentielle a un impact fort sur le temps d'auto-allumage. Ce processus peut être pris en compte, mais complique sérieusement l'écriture des lois de mélange. A titre informatif, nous allons observer le comportement d'une SGE sans modèle de mélange ou de combustion, c.a.d. sans hypothèse préalable.

Ces développements vont jeter les bases d'un outil de simulation capable de simuler l'allumage des moteurs fusées cryotechniques. Au passage, nous verrons plusieurs moyens d'analyser ces simulations, afin d'en extraire des informations nouvelles et pertinentes.

Chapitre 3

Equations

Les équations résolues par l'approche SGE sont résumées dans ce chapitre. Le code utilisé dans cette thèse pour résoudre ces équations se nomme AVBP. Il est développé conjointement par l'Institut Français du Pétrole et le CERFACS.

Les équations de la combustion et de la dynamique des fluides, communes à toute approche SGE, sont décrites en début de chapitre. Elles sont suivies d'une sélection des modèles existants pour la dynamique et de la combustion, puis de l'implantation numérique spécifique utilisée dans le code AVBP.

3.1 Equations d'écoulements réactifs

3.1.1 Equations de conservation

Les équations de conservation d'un écoulement monophasique réactif s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{s} \quad (3.1)$$

où $\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives avec respectivement ρ , u , v , w , E , ρ_k la densité, les trois composantes du vecteur vitesse $\vec{V} = (u, v, w)^T$, l'énergie par unité de masse et $\rho_k = \rho Y_k$ avec Y_k la fraction massique de l'espèce k , k variant de 1 à N , N étant le nombre d'espèces. Une décomposition classique en parties visqueuse et non visqueuse est utilisée pour le tenseur des flux :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{w})^I + \mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V \quad (3.2)$$

Les trois composantes du tenseur non visqueux $\mathbf{F}(\mathbf{w})^I$ sont :

Termes non visqueux :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 3.15).

Termes visqueux : Les trois composantes du tenseur visqueux $\mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V$ sont :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{g}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{h}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Le tenseur des contraintes τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}), \quad i, j = 1, 3 \quad (3.5)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right), \quad i, j = 1, 3 \quad (3.6)$$

avec μ la viscosité dynamique explicitée en section 3.1.5. $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k suivant i défini en section 3.1.4 (Eq. 3.26) et q_i est le flux de chaleur défini en section 3.1.6 (Eq. 3.32).

3.1.2 Variables thermodynamiques

L'état de référence est pris à la pression $P_0 = 1$ bar et à la température $T_0 = 0$ K. Les enthalpies $\tilde{h}_{s,k}$ et entropies \tilde{s}_k sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 100 K de 0 à 5000 K et sont définies par les Eq. 3.7 et 3.8. Le symbole $\tilde{}$ correspond aux valeurs tabulées et l'exposant m correspond aux valeurs molaires. $\tilde{h}_{s,k}^m$, \tilde{s}_k^m et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF (139). L'énergie sensible de chaque espèce est également définie à l'aide de l'Eq. 3.9.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{\tilde{h}_{s,k}^m(T_i) - \tilde{h}_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (3.7)$$

$$\tilde{s}_k(T_i) = \frac{\tilde{s}_k^m(T_i) - \tilde{s}_k^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (3.8)$$

$$\tilde{e}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = \tilde{h}_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad i = 1, 51 \quad (3.9)$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100$. Elles sont respectivement déterminées par les Eq. 3.10 et 3.11. L'énergie sensible est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 3.12). L'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eq. 3.13 et 3.14.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (3.10)$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \quad (3.11)$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{i+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (3.12)$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (3.13)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (3.14)$$

3.1.3 Equation d'état des gaz parfaits

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$P = \rho \frac{R}{\overline{W}} T \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\overline{W}_k} \quad (3.16)$$

où \overline{W} est la masse molaire du mélange. La constante du mélange variable en temps et en espace \bar{r} et les capacités calorifiques dépendent des fractions massiques :

$$\bar{r} = \frac{R}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\overline{W}_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (3.17)$$

$$\overline{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (3.18)$$

$$\overline{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (3.19)$$

où $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J/mol.K}$ est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\bar{\gamma} = \overline{C}_p / \overline{C}_v$. Donc, la constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition local du mélange définie par les fractions massiques locales $Y_k(x, t)$:

$$\bar{r} = \bar{r}(x, t), \quad \overline{C}_p = \overline{C}_p(x, t), \quad \overline{C}_v = \overline{C}_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(x, t) \quad (3.20)$$

A partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 3.12 et 3.13. Enfin, les conditions limites font intervenir la vitesse du son du mélange c définie par l'Eq. 3.21.

$$c^2 = \gamma \bar{r} T \quad (3.21)$$

3.1.4 Conservation de la masse et vitesse de correction

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation totale de la masse implique que l'Eq. 3.22 soit satisfaite. V_i^k représente la composante dans la direction i ($i=1,2,3$) de la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k=1,\dots,N$). Afin d'exprimer cette vitesse de diffusion, l'approximation d'Hirschfelder-Curtis est utilisée. Cette fonction, définie par l'Eq. 3.23, utilise les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \bar{W} / W_k$. En terme de fraction massique, l'Eq. 3.23 devient l'Eq. 3.24.

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (3.22)$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.23)$$

$$\text{ou encore} \quad Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.24)$$

En sommant les k Eq. 3.24, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 3.22 n'est pas nécessairement respectée. Pour assurer la conservation globale de la masse, une vitesse de diffusion corrective \vec{V}^c est ajoutée. Cette vitesse est définie par l'Eq. 3.25 (119). Le flux de diffusion des espèces $J_{i,k}$ est alors défini par l'Eq. 3.26.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.25)$$

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.26)$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange (voir section 3.1.5).

3.1.5 Coefficients de transport

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air¹. La loi puissance, définie par l'Eq. 3.27, est utilisée pour déterminer la viscosité dynamique.

$$\mu = c_1 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (3.27)$$

où b est typiquement dans la plage 0.5-1.0 (air : $b = 0.76$). La conductivité thermique du mélange est définie, en utilisant un nombre de Prandtl Pr supposée constant en temps et en espace, par l'Eq. 3.28.

$$\lambda = \frac{\mu \bar{C}_p}{Pr} \quad (3.28)$$

¹Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles par rapport aux propriétés thermodynamiques

La diffusivité moléculaire D_k est exprimée à l'aide des coefficients binaires D_{ij} obtenus à l'aide de la théorie cinétique des gaz (72). La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 3.29 (16).

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (3.29)$$

Les coefficients binaires D_{ij} sont des fonctions complexes dépendant des intégrales de collision et des variables thermodynamiques. Dans un code de simulation numérique directe utilisant une chimie complexe, utiliser l'Eq. 3.29 a un sens. Cependant, dans la plupart des codes de simulation numérique directe, un schéma simplifié est utilisé et la modélisation de la diffusivité n'a pas besoin d'être aussi précise. En conséquence, une approche plus simplifiée est utilisée. En faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants, la diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 3.30.

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (3.30)$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant en temps et en espace. Pr et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Les valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel PREMIX, inclus dans le package CHEMKIN (81) en calculant leur valeur dans les gaz brûlés pour une flamme de prémélange laminaire monodimensionnelle.

3.1.6 Flux de chaleur

Dans le cas d'écoulements multi-espèces, le flux de chaleur total q_i est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces. Ces deux termes sont détaillées dans l'Eq. 3.32.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.31)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} - \underbrace{\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (3.32)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange (voir section 3.1.5).

3.1.7 Cinétique chimique

Le terme source \mathbf{s} de l'Eq. 3.1 est défini par : $\mathbf{s} = (\dot{\omega}_u, \dot{\omega}_v, \dot{\omega}_w, \dot{\omega}_T, -\dot{\omega}_k)^T$ avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k . Les termes sources $\dot{\omega}_u, \dot{\omega}_v, \dot{\omega}_w$ sont utilisés pour imposer des contraintes sur les composantes de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Par exemple, un gradient de pression est imposé dans le cas d'un écoulement avec périodicité. Cependant, dans la plupart des cas, $\dot{\omega}_u = \dot{\omega}_v = \dot{\omega}_w = 0$. Le modèle de combustion implanté dans AVBP est une loi d'Arrhénius écrite pour N réactifs \mathcal{M}_{kj} et M réactions. Les réactions se mettent sous la forme définie par l'Eq. 3.33. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$, défini par l'Eq. 3.34, est la somme des taux de réaction de l'espèce k durant la réaction j $\dot{\omega}_{kj}$ pour j variant de 1 à M . Les coefficients stœchiométriques des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$. Q_j est la variable d'avancement de la réaction j définie par l'Eq. 3.35. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directes ("forward") et inverses ("reverse") respectivement définis par les équations 3.36 et 3.37. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ se déduit de l'hypothèse d'équilibre.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (3.33)$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} Q_j \quad (3.34)$$

$$Q_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (3.35)$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \quad (3.36)$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (3.37)$$

K_{eq} est la constante d'équilibre (90) définie par l'Eq. 3.38. La pression de référence est égale à $p_0 = 1$ bar. ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 3.39 et ΔS_j^0 la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 3.40. $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0K$. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est défini par l'Eq. 3.41.

$$K_{eq} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (3.38)$$

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (3.39)$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (3.40)$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (3.41)$$

3.2 Equations SGE d'écoulements réactifs

3.2.1 La Simulation aux Grandes Echelles (SGE)

La Simulation aux Grandes Echelles (128; 121) est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont pour but de reproduire les écoulements turbulents dans les systèmes complexes.

En appliquant des opérateurs au système d'équations de conservation d'un écoulement turbulent compressible, de nouvelles équations de conservation sont obtenues. Des termes non modélisés apparaissent et nécessitent l'utilisation de modèles spécifiques pour pouvoir assurer la fermeture des équations. Les principales différences entre les deux approches proviennent du choix de l'opérateur employé :

Approche RANS L'opérateur est une moyenne temporelle ou une moyenne d'ensemble sur un certain nombre de réalisations du champ fluide (121; 24).

Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour toutes les échelles de la turbulence.

Approche SGE L'opérateur est un filtre local, de taille fixée Δ , indépendant du temps, appliqué à une seule réalisation du champ fluide. De ce *filtrage spatial* résulte une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence.

Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour les échelles de la turbulence plus petites que l'échelle de coupure Δ , liée à la taille du filtre.

La différence fondamentale entre ces deux approches réside dans la plage d'échelles résolues qui représente toutes les échelles dans le cas du RANS et seulement les grandes échelles dans le cas de la Simulation aux Grandes Echelles. Le concept SGE avec sa fréquence de coupure est illustré sur le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope (THI) sur la figure 3.1.

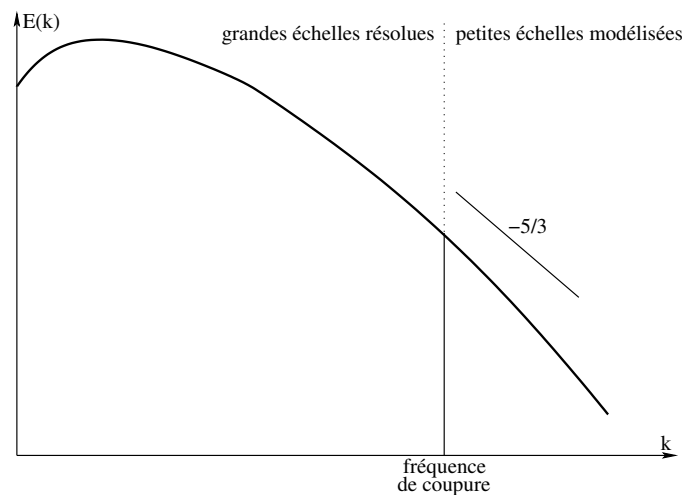


FIG. 3.1 – Spectre d'énergie d'une THI : concept SGE

Grâce à l'utilisation du filtre pour séparer petites et grandes échelles, la SGE permet une représentation dynamique des tourbillons de plus grande taille dont les contributions jouent le premier rôle en géométrie complexe. Ainsi la prédiction des écoulements turbulents est améliorée puisque les phéno-mènes à grande échelle, comme la propagation des ondes acoustiques, sont intrinsèquement présents dans les équations de conservation (119).

La SGE a donc un potentiel évident pour la prédiction des écoulements turbulents réactifs rencontrés dans les applications industrielles. Cependant, cette utilisation est limitée par les hypothèses introduites pour construire les modèles de la SGE.

Les équations de conservation SGE sont décrites en section 3.2.2 et les modèles de sous-maille en section 3.2.3.

3.2.2 Equations SGE pour les milieux réactifs

La quantité filtrée \bar{f} est la quantité résolue par la simulation numérique. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \bar{f}$. Dans le cas d'un écoulement à densité variable, un filtre de Favre est défini par l'Eq. 3.42.

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (3.42)$$

Les équations de conservation d'un écoulement turbulent réactif en approche SGE (Eq. 3.43) sont obtenues par filtrage des équations exactes (Eq. 3.1).

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (3.43)$$

Le tenseur des flux est défini par $\bar{\mathbf{F}} = (\bar{\mathbf{f}}, \bar{\mathbf{g}}, \bar{\mathbf{h}})^T$. Le terme source est défini par $\bar{\mathbf{s}}$. Les flux $\bar{\mathbf{f}}$, $\bar{\mathbf{g}}$ et $\bar{\mathbf{h}}$ sont divisés en trois contributions :

$$\bar{\mathbf{f}}^I, \bar{\mathbf{g}}^I, \bar{\mathbf{h}}^I \quad \text{contribution non visqueuse} \quad (3.44)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^V, \bar{\mathbf{g}}^V, \bar{\mathbf{h}}^V \quad \text{contribution visqueuse} \quad (3.45)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^t, \bar{\mathbf{g}}^t, \bar{\mathbf{h}}^t \quad \text{contribution de sous-maille} \quad (3.46)$$

$$\text{et peuvent s'écrire : } \bar{\mathbf{f}} = \bar{\mathbf{f}}^I + \bar{\mathbf{f}}^V + \bar{\mathbf{f}}^t \quad (3.47)$$

$$\bar{\mathbf{g}} = \bar{\mathbf{g}}^I + \bar{\mathbf{g}}^V + \bar{\mathbf{g}}^t \quad (3.48)$$

$$\bar{\mathbf{h}} = \bar{\mathbf{h}}^I + \bar{\mathbf{h}}^V + \bar{\mathbf{h}}^t \quad (3.49)$$

L'échelle de coupure entre petites et grandes échelles correspond en pratique à la taille de la maille. De plus, on utilise l'hypothèse de commutation entre l'opérateur de filtrage et la dérivée partielle.

Termes non visqueux

Les trois composantes du tenseur non visqueux sont définies par l'Eq. 3.50.

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho u^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho uv} \\ \overline{\rho uw} \\ \overline{\rho E u} + \bar{P} u \\ \overline{\rho_k u} \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho uv} \\ \overline{\rho v^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho vw} \\ \overline{\rho E v} + \bar{P} v \\ \overline{\rho_k v} \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho uw} \\ \overline{\rho vw} \\ \overline{\rho w^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho E w} + \bar{P} w \\ \overline{\rho_k w} \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

Termes visqueux en non réactif

Les trois composantes du tenseur visqueux sont définies par l'Eq. 3.51.

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{f}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u \tau_{xx}} + \overline{v \tau_{xy}} + \overline{w \tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix} \\
 \bar{\mathbf{g}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u \tau_{xy}} + \overline{v \tau_{yy}} + \overline{w \tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\
 \bar{\mathbf{h}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u \tau_{xz}} + \overline{v \tau_{yz}} + \overline{w \tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

D'après Poinot et Veynante (119) Chap. 4, les termes de diffusion en SGE s'écrivent :

le tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll})}, \tag{3.52}$$

$$\text{approximation : } \overline{\tau_{ij}} \approx 2\overline{\mu}(\overline{S_{ij}} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\overline{S_{ll}}), \quad i, j = 1, 3 \tag{3.53}$$

$$\text{avec : } \overline{S_{ij}} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j}), \quad i, j = 1, 3 \tag{3.54}$$

le tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}$

$$\text{en non réactif : } \overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \tag{3.55}$$

$$\text{approximation : } \overline{J_{i,k}} \approx -\overline{\rho} \left(\overline{D_k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \overline{X}_k}{\partial x_i} - \overline{Y}_k \overline{V}_i^c \right), \quad i = 1, 2, 3 \tag{3.56}$$

le flux de chaleur $\overline{q_i}$

$$\overline{q_i} = -\overline{\lambda} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \tag{3.57}$$

$$\text{approximation : } \overline{q_i} \approx -\overline{\lambda} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \overline{h}_{s,k}, \quad i = 1, 2, 3 \tag{3.58}$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont négligeables et un modèle de gradient suffit pour les modéliser. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille dont les modélisations sont présentées dans la section 3.2.2.

Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille sont définies par l'Eq. 3.59.

$$\mathbf{f}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ J_{x,k}^t \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ J_{y,k}^t \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ J_{z,k}^t \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

Les différents termes s'écrivent :

le tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho}(\overline{u_i u_j} - \widetilde{u_i u_j}), \quad i, j = 1, 3 \quad (3.60)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}}^t = 2\bar{\rho} \nu_t (\overline{S_{ij}} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{S_{ll}}), \quad i, j = 1, 3 \quad (3.61)$$

La modélisation de ν_t est détaillée en section 3.2.3.

le tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}^t$

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\overline{u_i Y_k} - \widetilde{u_i Y_k}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.62)$$

$$\text{modèle : } \overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V_i}^{c,t} \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.63)$$

$$\text{avec : } D_k^t = \frac{\nu_t}{S c_k^t} \quad (3.64)$$

Le nombre de Schmidt turbulent $S c_k^t$ est un paramètre délicat à déterminer. Des études ont montré qu'il n'était pas constant, et des modèles plus complexes ont été développés. Cependant, dans une grande majorité d'études, $S c_k^t$ est pris constant, proche de l'unité.

le flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho} (\overline{u_i E} - \widetilde{u_i E}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.65)$$

$$\text{modèle : } \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h}_{s,k}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.66)$$

$$\text{avec : } \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr^t} \quad \text{et} \quad Pr^t = 0.9 \quad (3.67)$$

Les vitesses de correction sont obtenues à partir de l'Eq. 3.68.

$$\widetilde{V}_i^c + \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} + \frac{\mu_t}{\bar{\rho} S c_k^t} \right) \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.68)$$

3.2.3 Modèles pour le tenseur de sous-maille

Ces trois modèles de sous-maille s'appuient sur la même hypothèse théorique d'invariance spatiale et temporelle du filtre SGE. Des variations dans la taille du filtre dues à un maillage non uniforme ou à un maillage mobile ne sont pas directement prises en compte. Le changement de topologie de la cellule n'est pris en compte que dans le calcul local du volume de la cellule : $\Delta = V_{cell}^{1/3}$. Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (*SGS : Sub-Grid Scale*) qui décrivent l'interaction entre petites échelles modélisées et grandes échelles résolues. L'influence de la sous-maille sur les échelles résolues est prise en compte au travers d'un modèle SGS utilisant une viscosité turbulente ν_t défini par l'Eq. 3.69. Une telle approche suppose l'effet de la sous-maille uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse n'est valide qu'en appliquant la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov (85).

$$\overline{\tau_{ij}^t} = -\bar{\rho} (\overline{u_i u_j} - \widetilde{u_i u_j}) \quad (3.69)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}^t} = 2\bar{\rho} \nu_t \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \overline{\tau_{ll}^t} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.70)$$

$$\text{avec : } \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 3. \quad (3.71)$$

Dans ces équations, $\overline{\tau_{ij}^t}$ est le tenseur des contraintes à modéliser, ν_t est la viscosité turbulente de sous-maille, \widetilde{u}_i est le vecteur vitesse filtré et \widetilde{S}_{ij} est le tenseur des déformations résolu. Les trois modèles présentés ici (disponibles dans AVBP) diffèrent par la définition de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t .

Le modèle de Smagorinsky

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij}}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.72)$$

$$\text{avec : } C_S = (0.1 - 0.18) \quad \text{suivant l'écoulement} \quad (3.73)$$

Le modèle de Smagorinsky (135), développé dans les années 1960, fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur de multiples types d'écoulement. Il est très utilisé du fait de sa simplicité. Cette fermeture a la particularité, dans le cas d'une THI, de fournir le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Ce modèle est connu pour être trop dissipatif, spécialement près des murs et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée (128).

Le modèle WALE

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\widetilde{g}_{ij}^2 + \widetilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \widetilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.74)$$

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.75)$$

$$\text{avec : } C_w = 0.4929 \quad (3.76)$$

Dans l'Eq. 3.74, \tilde{g}_{ij} est le gradient de vitesse résolu. Le modèle WALE (109) fut développé pour les écoulements en proche paroi afin de déterminer de nouvelles lois de paroi.

Le modèle de Smagorinsky filtré

$$\nu_t = (C_{S_F} \Delta)^2 \sqrt{2 HP(\tilde{S}_{ij}) HP(\tilde{S}_{ij})}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.77)$$

$$\text{avec : } C_{S_F} = 0.37 \quad (3.78)$$

Dans l'Eq. 3.77, $HP(\tilde{S}_{ij})$ est le tenseur des déformations résolu obtenu à partir d'un champ de vitesse filtré au travers d'un filtre passe-haut. Ce modèle fut développé afin d'améliorer la représentation de phénomènes locaux typiques des écoulements turbulents (51). Avec le modèle de Smagorinsky filtré, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

3.3 Présentation du code AVBP

Le projet AVBP commence en 1993 sur une initiative de Michael Rudgyard et Thilo Schönfeld, dans le but de construire un code de mécanique des fluides numérique flexible et numériquement performant. Depuis, le projet se développe rapidement et AVBP représente aujourd'hui un des outils les plus avancés dans le domaine de la simulation numérique des fluides réactifs. Il est utilisé pour des recherches fondamentales et pour des applications industrielles. Actuellement, le projet comprend un total de trente chercheurs scientifiques et ingénieurs.

AVBP est un code parallèle qui résout en trois dimensions les équations de Navier-Stokes compressibles sur des maillages non-structurés ou hybrides. Conçu initialement pour des écoulements stationnaires aérodynamiques, il a évolué vers la modélisation des écoulements instationnaires réactifs dans les configurations de brûleurs basée sur approche de Simulation aux Grandes Echelles (SGE) couplée à un modèle de chimie réduite en loi d'Arrhénius.

Les études académiques et développements de modèles sont faits au CERFACS et à l'IFP en collaboration avec divers laboratoires, comme l'EM2C de l'Ecole Centrale de Paris (ECP). Des liens importants sont établis vers l'industrie avec le groupe Safran (Snecma, Turbomeca), Air Liquide, Gaz de France, ou encore Alstom et Siemens Power Generation.

L'utilisation de maillages non-structurés ou hybrides est un des éléments clefs de AVBP. Une combinaison d'éléments différents (tétraèdres, hexaèdres) dans un même maillage permet de cumuler la flexibilité de l'approche non-structurée et de la précision de l'approche structurée. Pour réaliser cela, la structure de donnée emploie une formulation volume finis de type "Cell-Vertex" Les méthodes numériques employées sont des schémas entrés Lax-Wendroff (second ordre) ou Taylor-Galerkin (troisième ordre) avec un modèle de viscosité artificielle.

La manipulation des maillages est faite par le pré-processeur HIP. Cet outil propose des opérations variées telles que l'interpolation de solution, le découpage ou la fusion de deux maillages, la vérification de la validité, le raffinement local adaptatif, l'extrusion de maillage ou encore la création de maillages périodiques, axi-symétriques et axi-périodiques.

Concernant l'aspect "parallélisme", le code utilise une librairie incluant le partitionnement de domaine intégré, l'envoi et la réception des messages, l'allocation dynamique de mémoire, les

entrées/sorties parallèles de données et les méthodes itératives. AVBP est portable sur les principales plateformes de calculs (PCs, stations de travail, super-calculateurs), restant efficace sur la majorité des architectures parallèles.

3.3.1 Discrétisation *Cell-Vertex*

Le code de mécanique des fluides AVBP utilise un solveur aux volumes finis pour discrétiser les équations de conservation d'un écoulement turbulent diphasique réactif. Deux techniques sont disponibles pour les méthodes volumes finis :

1. la formulation *Cell-Vertex* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées aux nœuds de la cellule considérée et les valeurs moyennes des flux sont obtenues en moyennant le long des arêtes limitant la cellule
2. la formulation *Cell-Centered* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées au centre des volumes de contrôle (les cellules du maillage) et les valeurs des éléments voisins sont moyennées au travers des limites de la cellule pour calculer les flux

La discrétisation *Cell-Vertex* est utilisée dans le code AVBP.

Approche des résidus pondérés

Considérons d'abord les équations de Navier-Stokes d'un écoulement laminaire monophasique non réactif dans leur formulation conservative :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{0} \quad (3.79)$$

où \mathbf{w} est le vecteur des variables conservatives et $\vec{\mathcal{F}}$ est le tenseur de flux correspondant. Ce tenseur est décomposé en une partie visqueuse et une partie non visqueuse au travers de l'équation 3.80. Les termes spatiaux sont approchés dans chaque volume de contrôle pour en déduire le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par l'équation 3.81.

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^I(\mathbf{w}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{w}, \vec{\nabla} \mathbf{w}) \quad (3.80)$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial \Omega_j} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n} dS \quad (3.81)$$

où $\partial \Omega_j$ est la projetée de Ω_j le long de la normale \vec{n} . L'approche *Cell-Vertex* est applicable à des types de cellules quelconques et apparaît donc très utile pour des maillages hybride. Le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par l'équation 3.81 est d'abord calculé pour chaque cellule en utilisant une loi d'intégration simple appliquée aux faces. Pour des faces triangulaires, les composantes individuelles du flux sont supposées varier linéairement. Pour des faces quadrilatères, où les nœuds peuvent ne pas être coplanaires, afin d'assurer l'exactitude de l'intégration pour des éléments quelconques, chaque face est divisée en triangles et intégrée sur chaque triangle. La valeur du flux est obtenue après moyennage des quatre triangles (deux divisions le long des deux diagonales). Cette propriété qui permet de conserver la linéarité joue un rôle important car elle assure une bonne précision même sur des

maillages irréguliers. Il est utile d'écrire le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par l'équation 3.81 au travers d'une cellule quelconque. L'équation 3.81 devient alors l'équation 3.82.

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{\mathcal{F}}_i \cdot d\vec{\mathcal{S}}_i, \quad (3.82)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_i$ est une approximation de $\vec{\mathcal{F}}$ aux nœuds, N_d représente le nombre de dimensions de l'espace et $\{i \in \Omega_j\}$ sont les sommets de la cellule. Dans cette formulation, l'information géométrique a été factorisée en termes $d\vec{\mathcal{S}}_i$ qui sont associés aux nœuds individuels de la cellule et non à ses faces. $d\vec{\mathcal{S}}_i$ est la moyenne des normales pondérées par les surfaces des faces triangulaires d'un nœud commun i , $i \in \Omega_j$. Pour assurer la consistance, $\sum_{i \in \Omega_j} d\vec{\mathcal{S}}_i = \vec{0}$. La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume V_{Ω_j} est défini par l'équation 3.83.

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot d\vec{\mathcal{S}}_i, \quad \text{avec} \quad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \quad (3.83)$$

Une fois les résidus calculés, le schéma semi-discret est défini par l'équation 3.84.

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \quad (3.84)$$

où $D_{\Omega_j}^k$ est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre Ω_j vers le nœud k (*scatter*) et V_k est le volume de contrôle associé à chaque nœud k . La conservation est garantie si $\sum_{k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k = I$. Dans le contexte présent, l'équation 3.84 est résolue, en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps, afin d'obtenir une solution stationnaire.

La matrice de distribution est définie par l'équation 3.85.

$$D_{\Omega_j}^k = \frac{1}{n_n} \left(I + C \frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \vec{\mathcal{A}}_{\Omega_j} \cdot d\vec{\mathcal{S}}_k \right), \quad (3.85)$$

Le nombre de nœuds de Ω_j est n_n et $\vec{\mathcal{A}}$ est la matrice jacobienne du tenseur des flux. Le schéma classique centré, obtenu en choisissant $C = 0$, est stable combiné avec des pas de temps Runge-Kutta. Un schéma de type Lax-Wendroff est obtenu en choisissant la constante C dépendante du nombre de dimensions du problème et du type de cellule. Une forme simple de C est définie par : $C = n_n^2 / 2N_d$.

Calcul des gradients

Afin de déterminer les valeurs des gradients $\vec{\nabla} \mathbf{w}$ aux nœuds, une approximation de sa valeur liée à la cellule Ω_j est d'abord calculée puis distribuée aux nœuds k . Le gradient à la cellule, défini par l'équation 3.86, suit une description identique à celle utilisé pour définir la divergence à l'équation 3.82. Une approximation de ce gradient à la cellule est ainsi obtenue et définie par

l'équation 3.87. Une approximation de ce gradient au nœud, définie par l'équation 3.88, est obtenue en utilisant une moyenne pondérée par le volume de la cellule.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x}\right)_C \approx \frac{1}{V_C} \int \int_{\partial \Omega_C} \mathbf{w} \cdot \vec{n} dS \quad (3.86)$$

$$(\vec{\nabla} \mathbf{w})_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \bar{\mathbf{w}}_i \bar{dS}_i \quad (3.87)$$

$$(\vec{\nabla} \mathbf{w})_k = \frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} V_{\Omega_j} (\vec{\nabla} \mathbf{w})_{\Omega_j} \quad (3.88)$$

3.3.2 Schémas numériques

Les schémas numériques utilisés lors de cette thèse ne sont pas présentés en détail et le lecteur se référera aux publications originelles. Cependant, les points essentiels caractérisant ces deux schémas sont présentés :

schéma Lax-Wendroff (71) De type volumes finis, d'ordre 2 en temps avec une intégration Runge-Kutta une étape, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide

schéma TTGC (32) De type éléments finis, d'ordre 3 en temps, d'ordre 3 en espace, très précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe

3.3.3 Modèles de viscosité artificielle

Introduction

Les schémas de discrétisation spatiale utilisés sont des schémas centrés. Ces types de schémas sont connus pour être naturellement sujets à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) dans les régions de forts gradients. Une méthode efficace pour pallier à ce problème est l'utilisation d'un terme de *Viscosité Artificielle* (VA) pour adoucir les fronts trop raides et filtrer les oscillations hautes fréquences. Cette section décrit les senseurs (section 3.3.3) et les opérateurs (section 3.3.3) de la VA.

Senseurs

Un senseur ζ_{Ω_j} est un paramètre compris entre 0 et 1 défini pour chaque cellule Ω_j . Dans le cas où la solution est bien résolue, le senseur est égal à 0 alors que dans le cas où la solution a de fortes variations locales, le senseur est égal à 1 et la VA est appliquée. Ce senseur est obtenu en comparant différentes évaluations du gradient d'un scalaire comme la pression, l'énergie totale ou la fraction massique. Si les évaluations sont identiques, le senseur est fixé à 0. Par contre, si les deux évaluations donnent des valeurs différentes, le senseur est déclenché. Le point crucial est de trouver une fonction pour le senseur qui soit différente de zéro seulement dans les zones utiles. Deux fonctions de senseur sont utilisées dans ces travaux : le senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$ (76) et le senseur de Colin $\zeta_{\Omega_j}^C$ (31) qui est dérivé du senseur de Jameson.

Notation l'indice k désigne les variables liées à un sommet k de la cellule considérée et l'indice Ω_j désigne les variables liées à la cellule Ω_j .

Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$ lié à la cellule Ω_j (défini par l'Eq. 3.89) est le maximum de tous les senseurs ζ_k^J liés aux sommets k (définis par l'Eq. 3.90). S est le scalaire évalué par le senseur et (Δ_1^k, Δ_2^k) sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 3.91. Δ_1^k mesure la variation de S au sein de la cellule Ω_j . Δ_2^k est une estimation de la même grandeur en utilisant $(\vec{\nabla}S)_k$, le gradient de S au nœud k . Ce senseur varie proportionnellement à l'amplitude de la déviation par rapport à l'évolution linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique et s'applique parfaitement pour des cas quasi-stationnaires.

$$\zeta_{\Omega_j}^J = \max_{k \in \Omega_j} \zeta_k^J \quad (3.89)$$

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \quad (3.90)$$

$$\Delta_1^k = S_{\Omega_j} - S_k \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla}S)_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (3.91)$$

Senseur de Colin

Dans le cas d'écoulements turbulents fortement instationnaires, il est nécessaire de se munir d'un senseur plus précis, c'est-à-dire plus faible lorsque l'écoulement est suffisamment résolu et presque maximum dans les zones de non-linéarités fortes : le senseur de Colin, défini par les Eq. 3.92 à 3.96.

- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est très petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont petits comparés à S_{Ω_j} . Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés) ou à des faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de même signe).
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont du même signe et du même ordre de grandeur (même si cet ordre de grandeur est grand). Ceci correspond à des gradients raides bien résolus par le schéma.
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est grand lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est grand si Δ_1^k ou Δ_2^k est du même ordre de grandeur que S_{Ω_j} . Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

Il est à noter que les définitions de Ψ et ϵ^k changent pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence n'est plus S_k mais 1, valeur maximum de la fraction massique.

$$\zeta_{\Omega_j}^C = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (3.92)$$

$$\text{avec : } \Psi = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J \right) \quad (3.93)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \epsilon^k \max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|) \quad (3.94)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left(1 - \epsilon_3 \frac{\max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_k} \right) \quad (3.95)$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \epsilon_2 = 0.95 \quad \epsilon_3 = 0.5 \quad (3.96)$$

Opérateurs

Les modèles de viscosité artificielle utilisent deux opérateurs dont les propriétés sont :

2^{ème} ordre cet opérateur agit comme une viscosité classique. Il adoucit les gradients et introduit de la dissipation artificielle. Il est associé à un senseur. Ainsi, le schéma numérique garde son ordre de précision dans les zones à faible gradient et assure la stabilité et la robustesse du schéma dans les zones critiques. A l'origine, il était utilisé pour les chocs mais peut en fait adoucir n'importe quel gradient trop fort.

4^{ème} ordre cet opérateur est utilisé pour diminuer les *wiggles*.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2^{ème} ordre (Eq. 3.98) et de l'opérateur du 4^{ème} ordre (Eq. 3.99) sont reportées sur les nœuds de cette cellule Ω_j (Eq. 3.97).

$$dw_k = \sum_j R_{k \in \Omega_j}^2 + \sum_j R_{k \in \Omega_j}^4 \quad (3.97)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^2 = -\frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu2} \zeta_{\Omega_j} (w_{\Omega_j} - w_k) \quad (3.98)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^4 = \frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu4} \left[(\vec{\nabla} w)_{\Omega_j} \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) - (w_{\Omega_j} - w_k) \right] \quad (3.99)$$

Notation smu2 et smu4 sont des coefficients sans dimension fixés par l'utilisateur.

3.4 Les conditions limites

Les conditions limites sont un point crucial dans tout code de mécanique des fluides et spécialement dans des codes résolvant l'acoustique (130; 117). L'intégration temporelle Runge-Kutta multi-étapes est utilisé dans AVBP. Cependant, pour des raisons de simplicité, l'exemple illustratif décrit une intégration une étape.

Connaissant la solution w^n au temps t , la solution w^{n+1} au temps $t + \Delta t$ s'écrit pour chaque noeud i :

$$w_i^{n+1} = w_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \cdot dw_i^n \quad (3.100)$$

avec $w_i^n = w(t, \vec{x}_i)$ et $w_i^{n+1} = w(t + \Delta t, \vec{x}_i)$, \vec{x}_i étant le vecteur des coordonnées, V_i le volume autour du noeud i et dw_i^n le résidu au noeud i calculé par le schéma numérique.

L'exposant n est utilisé pour rappeler que le code explicite ne se sert que des données au temps n . L'Eq. 3.100 est utilisée à chaque noeud du domaine Ω . Afin d'imposer une valeur sur les limites du domaine de calcul $\partial\Omega$, l'Eq. 3.101 est définie.

$$\begin{cases} w_i^{n+1} = w_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \cdot (dw_i^n)_{scheme} & \forall x_i \in \Omega/\partial\Omega \\ w_i^{n+1} = w_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \cdot (dw_i^n)_{CL} & \forall x_i \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.101)$$

En chaque noeud du bord, le résidu calculé par le schéma est remplacé par un résidu imposé par la condition limite. En plus de cette méthode, l'utilisation d'un coefficient de relaxation peut être utilisé pour tendre vers la valeur cible de manière plus ou moins douce. Ensuite, les conditions limites sont classés en conditions non caractéristiques qui modifient directement les variables conservatives et en conditions caractéristiques qui effectuent une décomposition en ondes pour modifier les résidus (138). La méthode NSCBC développée par Poinot et Lele (118) est utilisé dans ce second cas.

Chapitre 4

Auto-allumage

L'auto-allumage est un domaine où plusieurs processus transitoires entrent en compétition. La cinétique chimique y est associée au transport des réactifs et de la chaleur. L'analyse de tels couplages se fait grâce à l'étude de configurations simplifiées mais de complexité croissante. Ces différentes configurations permettent de dégager un estimateur du temps d'allumage, et sa limite de validité. Les conclusions sur l'autoallumage de l'hydrogène et du méthane par un oxydant chaud font l'objet d'une publication (82) qui met en évidence la différence de comportement des deux réactifs.

4.1 Configurations de références

4.1.1 Auto-allumage homogène

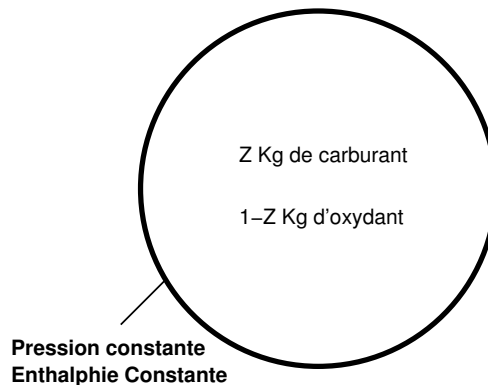


FIG. 4.1 – Configuration d'auto-allumage homogène 'HMI'

Dans cette configuration, seule la cinétique chimique est à l'œuvre. Les mélanges oxydant/réducteur sont étudiés au moyen d'une quantité scalaire normalisée, la fraction de mélange Z . Elle identifie la composition du mélange homogène et non réactif de deux fluides. Un kilogramme de mélange à la fraction Z correspond à Z Kg de fluide réducteur additionné de $1 - Z$ Kg de fluide oxydant. Ce scalaire est basé sur un bilan de masse des atomes mis en jeu, qu'ils soient dans les molécules initiales (CH_4, O_2, H_2, \dots) ou les molécules finales (H_2O, CO_2, \dots). Ainsi, la quantité Z est indépendante de la réaction. Par exemple, la fraction de mélange dans une flamme prémélangée est une constante. La température initiale $T(Z)$ se calcule avec l'équilibre adiabatique de deux fluides non réactifs. Cette configuration est notée HMI (Homogeneous Mixing Ignition) dans la suite de cette thèse. Le prémélange homogène, placé dans un réacteur adiabatique isobare (enthalpie et pression constante), va réagir en un temps t_{HMI} dépendant du mélange initial Z . Un tel dispositif se calcule rapidement au moyen de logiciels de cinétique chimique courants, tels les modules PSR ou AURORA de CHEMKIN. Dans cette configuration, on teste l'ensemble des mélanges possibles, et on évalue

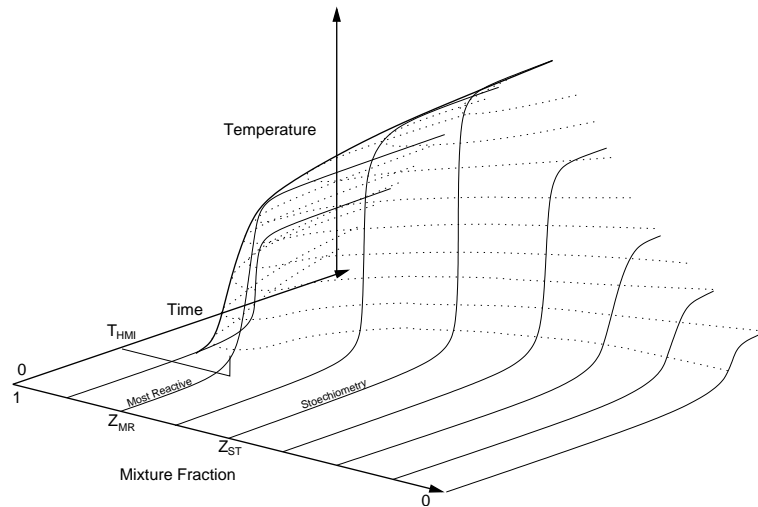


FIG. 4.2 – Evolution qualitative de la température dans des réacteurs remplis initialement de différents mélanges auto-allumants.

leurs temps d'auto-allumage. Le mélange le plus rapide à l'auto-allumage est identifié par sa fraction de mélange Z_{MR} (Most Reactive). Le mélange stœchiométrique Z_{ST} reste le plus exothermique, sans être le plus rapide, voit Fig. 4.2. Les mélanges trop pauvres ou trop riches ne donnent que des réactions faibles et lentes. Généralement, le mélange Z_{MR} se situe du côté du réactif le plus chaud. Ainsi, pour un oxydant chaud et un réducteur froid $0 \approx Z_{MR} < Z_{ST}$. Pour un réducteur chaud et un oxydant froid, $Z_{ST} < Z_{MR} \approx 1$. Les résultats obtenus pour les couples hydrogène/oxygène et méthane/oxygène sont présentés dans l'article "Comparison of computational methodologies for ignition of diffusion mixing layers" (82) intégralement reproduit ci-après. On retrouve bien dans la Fig. 4 de cette publication l'évolution du temps d'allumage décrite précédemment. Les calculs faisant intervenir le méthane sont en accord avec les mesures expérimentales, validant la procédure de calcul. Le comportement des deux carburants est qualitativement le même. On pourra cependant

noter que la fraction de mélange la plus réactive du méthane est extrêmement pauvre ($Z_{MR} = 0.002$) ce qui induit une augmentation de température de seulement 25 degrés. La dénomination 'mélange le plus réactif' devrait donc se limiter à 'mélange le plus rapide'. La chaleur dégagée est trop faible pour parler d'allumage. Ceci mène à l'étape suivante : comment les processus diffusifs propagent-ils la faible combustion des premiers sites d'allumage à l'ensemble de la flamme de diffusion ?

4.1.2 Auto-allumage en diffusion

L'effet de la diffusion est étudié dans une couche de mélange mono-dimensionnelle. Dans cette configuration, un milieu infini contient les deux ergols purs parfaitement séparés par une interface plane. Cette configuration est notée LMI (Laminar Mixing Ignition) et le temps d'auto-allumage associé est t_{LMI} . Avant d'aller plus loin, introduisons quelques définitions sur le mécanisme de diffusion.

- La diffusion thermique $D_{th}[m^2.s^{-1}]$ correspond à la conductivité thermique $\lambda[W.m^{-1}.K^{-1}]$ normalisée par la densité du milieu $\rho[Kg.m^{-3}]$ et la capacité thermique $C_p[W.Kg^{-1}.K^{-1}.s^{-1}]$.

$$D_{th} \equiv \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (4.1)$$

- La diffusion moléculaire $D_k[m^2.s^{-1}]$ évalue la vitesse de diffusion d'une espèce k dans le milieu qui l'entoure. On peut donc observer que, dans un mélange dihydrogène/dioxyde de carbone/diazote, le dihydrogène présente une diffusivité bien plus élevée que les autres composants.
- La diffusion visqueuse, ou viscosité cinématique ν mesure la résistance d'un fluide à la déformation due au cisaillement. C'est une quantité macroscopique qui modélise des interactions à l'échelle microscopique.

Pour mieux appréhender la compétition entre les différents types de diffusion, on introduit les nombres de Lewis, Prandtl et Schmidt. Lorsque l'un de ces nombres est loin de l'unité, le phénomène de diffusion différentielle apparaît.

- Le nombre de Lewis indique la prépondérance de la diffusion thermique sur la diffusion moléculaire. Les molécules petites comme le dihydrogène diffusent plus vite que la chaleur ($Le \ll 1$)

$$Le \equiv \frac{\lambda}{\rho D_k C_p} \quad (4.2)$$

- Le nombre de Prandtl indique la prépondérance de la diffusion visqueuse sur la diffusion thermique. Par exemple, un solide chaud peut réchauffer ou non le fluide qui l'entoure : radiateur ($Pr \ll 1$) ou aile d'avion ($Pr \gg 1$).

$$Pr \equiv \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (4.3)$$

- Le nombre de Schmidt indique la prépondérance de la diffusion visqueuse sur la diffusion moléculaire. Ce nombre est utile surtout dans les liquides ($1 \ll Sc \approx 1000$). Il aura peu d'intérêt dans les configurations gazeuses abordées ici ($Sc \approx 1$).

$$Sc \equiv \frac{\nu}{D_k} \quad (4.4)$$

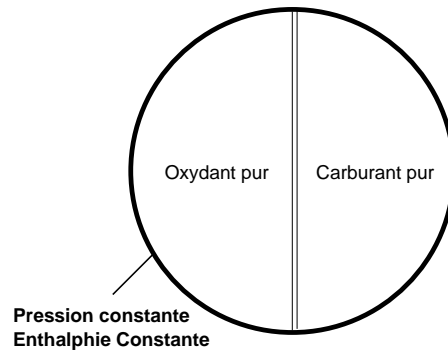


FIG. 4.3 – Configuration d’auto-allumage en diffusion ‘LMI’

On peut reconstruire qualitativement le scénario d’allumage à partir des résultats d’auto-allumage homogène. La position dans l’espace de Z des maxima locaux de réaction est tracée en fonction du temps sur la Fig. 4.4. La zone la plus rapide à réagir se situe d’abord à Z_{MR} jusqu’à t_{LMI} . Une poche d’espèces intermédiaires se forme durant cette période d’induction, de façon quasi isotherme. A l’instant t_{LMI} , la réaction s’emballe et se propage dans les prémélanges riches et pauvres créés par la diffusion moléculaire. Après avoir parcouru toute la gamme des fractions de mélanges, ces deux flammes s’éteignent rapidement. L’une d’elles, en passant par la fraction Z_{ST} , a allumé la flamme de diffusion qui se stabilise. Toujours pour une diffusion simple ($Le = Pr = Sc = 1$), le temps d’induction t_{LMI} de cette configuration est plus long que son homologue homogène t_{HMI} . Des pertes en intermédiaires réactionnels et en chaleur dans la zone de réaction créent un délai supplémentaire.

Par contre, il est difficile d’anticiper la tendance que va induire le Lewis faible de l’hydrogène. La vitesse d’allumage est favorisée par une plus grande quantité de carburant dans les hautes températures, mais elle est défavorisée par la dispersion rapide des intermédiaires réactionnels diffusifs, comme le monohydrogène.

Les simulations présentées dans l’article (82) illustrent cette analyse. Tout d’abord, les Figures 5a et 5b de ce document montrent respectivement les profils de températures des deux couches de mélanges, respectivement hydrogène/oxygène et méthane/oxygène, qui évoluent avec le temps. Vus ainsi, ces auto-allumages paraissent parfaitement semblables. Ensuite, les Figs. 10a et 10b du même document donnent la position des maxima locaux de réactions, à comparer avec l’évolution schématique présentée en Fig. 4.4. Les deux auto-allumages LMI se conforment qualitativement aux prévisions, à un détail près : lors de la phase d’induction de l’allumage LMI du méthane, en Fig.10.b de l’article, le maximum local de réaction commence loin du site prévu. Il se déplace ensuite pendant toute la phase d’induction vers les zones pauvres $t < t_{HMI}$ puis vers les zones riches $t > t_{HMI}$. Ce démarrage à $Z \gg Z_{MR}$ augmente t_{LMI} . Le processus de diffusion reste à analyser. Le calcul LMI du méthane donne $t_{LMI} \approx 2.7t_{HMI}$, celui de l’hydrogène $t_{LMI} \approx t_{HMI}$. Des simulations supplémentaires jouant sur la vitesse de diffusion moléculaire de l’espèce oxydante attestent que le

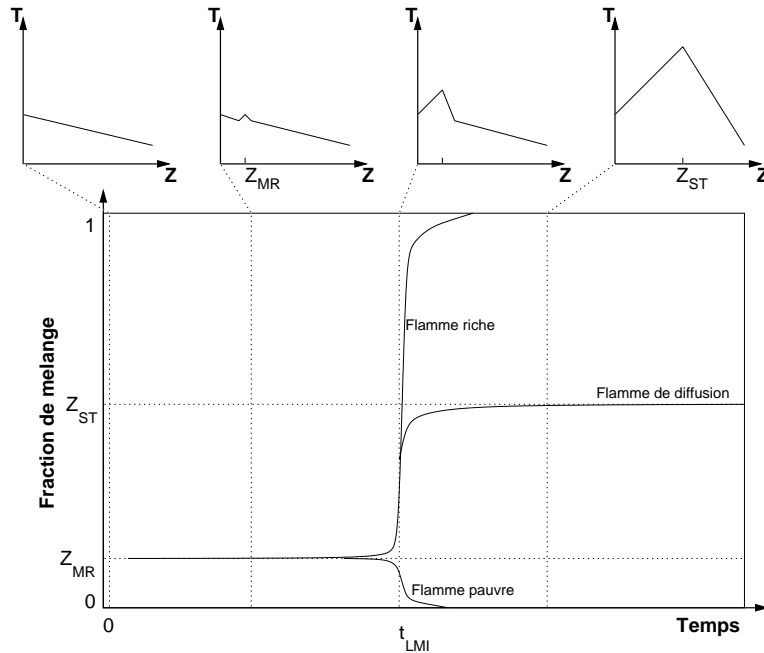


FIG. 4.4 – Auto-allumage en diffusion 'LMI'

nombre Lewis contrôle le temps d'allumage (cf. Fig.9a et 9b de l'article). Pour résumer, t_{LMI} peut majorer d'un ordre de grandeur t_{HMI} . Un mélange HMI avec un Z_{MR} suffisamment exothermique (cas de l'hydrogène) contrôle toute la phase d'induction (Fig. 10a). Un Lewis égal à un implique une diffusion qui retarde le temps d'allumage jusqu'à $t_{LMI} \approx 7t_{HMI}$ en Fig.9a. Les Lewis faibles diminuent substantiellement le temps d'allumage. Dans un mélange HMI, un Z_{MR} trop pauvre (cas du méthane) ne contrôle plus l'induction, et augmente t_{LMI} . Cette majoration ne peut être compensée par un Lewis faible, comme l'indique la Fig. 9b.

4.1.3 Turbulence

L'impact de la turbulence sur l'auto-allumage nécessite des outils de simulation plus complexes, tels que la simulation numérique directe (102; 74; 69; 53). Cette approche résout les équations de Navier-Stokes avec une précision suffisante pour se passer de toute modélisation. La puissance de calcul nécessaire limite généralement ces simulations à des nombres de Reynolds faibles (< 200) pour des milieux bidimensionnels. Les travaux sur l'auto-allumage (8; 86; 116; 151) s'intéressent à l'impact d'une turbulence homogène isotrope sur une couche de mélange réactive. Sans entrer dans les détails, on peut en retenir quelques points essentiels, illustrés par la fig. 4.5 :

1. Les premiers sites d'allumage se situent sur une iso-richesse correspondant à celle du pré-mélange parfait le plus rapide à s'allumer Z_{MR} . Sur cette iso-richesse, ils débutent là où la dissipation scalaire χ est la plus basse. Elle mesure un gradient d'espèce normalisé dans un

milieu réactif, d'après la fraction de mélange Z le nombre de Schmidt local S_c .

$$\chi = \frac{1}{S_c} \left[\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right] \quad (4.5)$$

2. Le temps d'apparition des premiers sites d'auto-allumage t_{TRB1} est peu sensible à la turbulence.
3. La turbulence réduit le temps d'auto-allumage de l'ensemble de la couche de mélange t_{TRB2} .

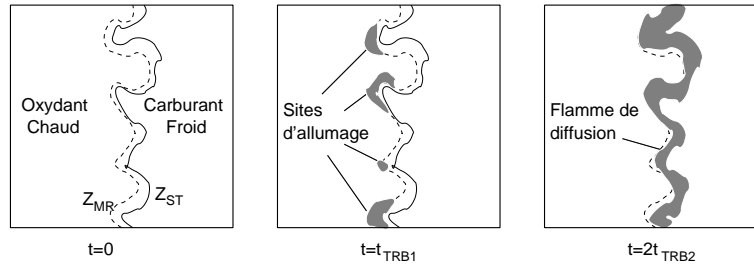


Fig. 4.5 – Configuration d'auto-allumage en diffusion soumise à la turbulence

Dans notre recherche d'un estimateur du temps d'auto-allumage, la turbulence simplifie les choses en faisant tendre le nombre Lewis global vers l'unité. En effet, le mélange par agitation turbulente agit sur la chaleur comme sur les espèces. Lorsque que ce mélange est suffisamment intense, il supplante la diffusion moléculaire et la diffusion thermique. Les effets de diffusion différentielle sont alors réduits. Au final, l'auto-allumage d'un couple de réactifs s'éloigne de la configuration *HMI* lorsque la diffusion différentielle est forte, c.a.d. le nombre de Lewis est loin de l'unité. L'écart le plus net est obtenu avec la configuration *LMI*. Enfin, la turbulence diminue globalement cet effet.

4.2 Simulations

L'auto-allumage intervient dans les brûleurs séquentiels de certaines turbines à gaz. C'est pourquoi l'étude présente à fait l'objet d'une publication conjointe parue dans le numéro 175 du journal *Combustion Science and Technology* : Le Dr. R. Knikker s'est intéressé au couple méthane/oxygène pour les applications de turbine à gaz, tandis que l'auteur s'est focalisé sur le couple hydrogène/oxygène à destination des moteurs fusées. L'article reproduit ci-après présente les calculs *HMI* et *LMI* effectués pour les deux couples, et interprète les différences de comportement. Il met en évidence une forte dépendance de l'auto-allumage devant la diffusion différentielle. Par ailleurs, les informations obtenues vont permettre de créer une cinétique de combustion réduite adaptée à l'auto-allumage (Chap.6).

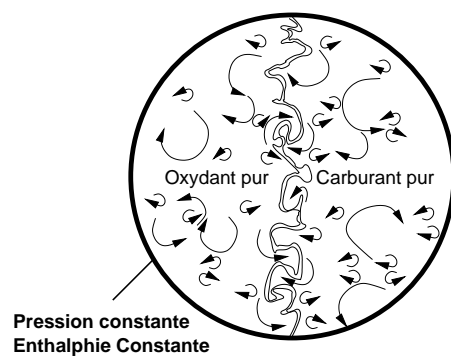


FIG. 4.6 – Configuration d'auto-allumage en diffusion soumis à la turbulence

Comparison of computational methodologies for ignition of diffusion layers

R. Knikker, A. Dauplain, B. Cuenot and T. Poinso

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
42, Avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France

Abstract

The prediction of the auto-ignition delay time of fresh fuel in hot air is studied. This problem, encountered in many combustion systems, is in practice often calculated using a simple method, hereafter called *homogeneous mixing ignition* (HMI). This method however neglects transport effects and calculates local instead of global ignition properties. A second method is therefore studied called *linear mixing ignition* (LMI) and consists of the direct simulation of a one-dimensional mixing layer. This method is tested in a hydrogen and methane fuel configuration using detailed and reduced chemistry mechanisms. The results indicate that molecular transport increases the ignition delay, for the methane fuel by almost an order of magnitude, but this effect is compensated in the hydrogen case by the small Lewis number of the fuel. Such detailed information is not provided by the HMI method and the LMI approach appears therefore as a minimum requirement for the correct estimation of the ignition delay time.

Keywords: auto-ignition, diffusion layers, computational methods

1 Introduction

The ignition of a fuel stream injected into surrounding hot oxidizer (Fig. 1) is a problem encountered in many practical situations: for example, multi-staged or sequential combustors and afterburners, where fresh fuel is injected at the outlet of the principal combustion chamber and burns in a second chamber. Auto-ignition is also found in supersonic combustion, for example in scramjets (supersonic ramjets) (Mitani 1995) where the air stream is heated by compression effects. In these devices, the auto-ignition delay time is an important parameter as it effects directly the stand-off distance of the flame from the burner nozzle. Other examples of auto-ignition are found in diesel engines (Kong et al. 1995; Kong et al. 2001; Wan et al. 1997) where the air temperature is increased by compression before fuel injection.

This ignition problem may be studied numerically in many different ways. The first and most well-known technique will be called here HMI for homogeneous mixing ignition. Its

basis (Fig. 2) is to assume that mixing between the fuel and oxidizer streams is infinitely fast and to parameterize the various mixtures produced by this instantaneous mixing process through the mixture fraction z . A hidden assumption in the HMI approach is that the flow must be ‘equi-diffusive’: all species must diffuse like temperature so that a sample containing z kg of stream 1 and $(1-z)$ kg of stream 2 has an enthalpy $z h_1 + (1-z) h_2$ and a mass fraction for species k given by $z Y_{k,1} + (1-z) Y_{k,2}$, where $Y_{k,1}$ and $Y_{k,2}$ are the mass fractions of species k in streams 1 and 2 respectively. This requires that all species diffuse at the same speed as heat: this is the case when all species Lewis numbers are unity. Each sample of this homogeneous mixing process is isolated from its neighbors and left to react until ignition. This process can then be easily calculated using a zero-dimensional code such as SENKIN (Lutz et al. 1988) and the ignition time $t_{ign}(z)$ of each sample (characterized by its mixture fraction z) can be measured and plotted as a function of z . This curve usually exhibits a minimum ignition time obtained for a value called the most reacting mixture fraction z_{mr} . It is then often assumed that a configuration like the burner displayed in Fig. 1 will ignite in a time $t_{ign}(z_{mr})$.

The HMI method is obviously a simple and fast method. However, its precision is unclear: assuming that mixing is infinitely fast is a strong simplification. The assumption of an equi-diffusive mixture is also wrong in most practical cases so that the mixture created by the process pictured in Fig. 2 would not lead to the same mass fractions and temperatures in a real mixing phenomenon. Furthermore, the ignition defined in the HMI approach is a *local* ignition which does not necessarily imply *global* ignition of the two streams: if a point ‘ignites’ in a time $t_{ign}(z_{mr})$ but raises its temperature by only 10 or 20 K, it is unclear that the neighboring points will ignite and hence that the global system will ignite. Therefore, two ingredients must be added to this type of ignition studies:

- finite rate diffusion and mixing to incorporate their effects on the ignition delay,
- *global* ignition capabilities, i.e. the propagation of a first ignition spot to neighboring points and to the overall flow.

There are many ways to construct such a simulation and all of them are more complex than HMI. The simplest one is the LMI method for linear mixing ignition. In this method, mixing is not supposed to be infinitely fast but corresponds to the mixing process observed in a one-dimensional diffusion layer (Fig. 3). The fuel and oxidizer streams are placed side to side and left to mix and react. This is also the view used in a flamelet approach or in the RIF method (Barths et al. 2002).

The LMI is not often used in practice because it requires the solution of a one-dimensional unsteady problem which is a difficult task when complex chemical schemes are used. More complex configurations can also be used, for example in DNS of turbulent mixing ignition (Hilbert and Thévenin 2002; Im et al. 1998; Mastorakos et al. 1997). But the LMI is of special interest because of its simplicity and because it satisfies the criteria mentioned above: laminar mixing is accurately predicted, no equi-diffusive assumption is required and global ignition can be studied.

This paper compares HMI and LMI results for hydrogen and methane streams injected into pure hot air. An important question is the accuracy of the HMI method. A second one is the influence of chemical schemes which are an essential parameter in such studies.

Section 2 presents the HMI results for hydrogen-air and for methane-air cases. Section 3 then describes the principle of the LMI results, while section 4 compares LMI results to HMI data.

2 Homogeneous ignition calculations (HMI)

The principle of the HMI method is illustrated in Fig. 2. A homogeneous mixture is obtained by adding z kg of fuel to $(1 - z)$ kg of hot air through an infinitely-fast mixing process without chemical reactions. Each mixture is then treated as an isolated sample and left to react up to ignition. Note that this procedure is strictly valid in case of unity Lewis numbers and an approximation to reality since Lewis numbers have different values for each species.

The properties of each homogeneous mixture are uniquely defined by the mixture fraction z . However, for detailed reaction mechanisms containing many different species there is no unique definition of the mixture fraction. We adopt the definition proposed by Bilger (1988) preserving the stoichiometric value even under differential diffusion and consistent with the mixing procedure of Fig. 2. For hydrogen flames, the mixture fraction is defined as:

$$z = \frac{Y_H/2W_H - (Y_O - Y_{O,air})/W_O}{Y_{H,fuel}/2W_H + Y_{O,air}/W_O} \quad (1)$$

and for methane flames:

$$z = \frac{2Y_C/W_C + Y_H/2W_H - (Y_O - Y_{O,air})/W_O}{2Y_{C,fuel}/W_C + Y_{H,fuel}/2W_H + Y_{O,air}/W_O} \quad (2)$$

where Y_C , Y_H and Y_O are the mass fractions of respectively the carbon, hydrogen and oxygen elements; W_C , W_H and W_O are the corresponding atomic weights and the subscripts *fuel* and *air* refer to the initial conditions in respectively the fuel and air stream. The mixture fraction according to these definitions is a passive scalar normalized to range from $z = 0$ in pure air to $z = 1$ in pure fuel.

The species mass fractions Y_k of each mixture are now given by $Y_k = z Y_{k,fuel} + (1 - z) Y_{k,air}$. Similarly, the enthalpy is calculated from $h = z h_{fuel} + (1 - z) h_{air}$. The temperature of the mixture is obtained from h , Y_k and the pressure p using an iterative Newton method.

The ignition delay of each mixture (characterized by z) is calculated with the SENKIN code (Lutz et al. 1988) using a fixed pressure. For a typical calculation, ignition is characterized by a period of radical build-up without significant heat-release, followed by an exponential increase of the temperature. Although the ignition delay time can be defined in many different ways, it is defined here as the instant of maximum heat release corresponding to the inflection point in the temperature curve.

Hydrogen flame

For the hydrogen case, the conditions of Hilbert and Thévenin (2002) are adopted allowing the comparison of their turbulent ignition results with our calculations. The oxidizer is heated air at a temperature of $T_{air} = 1100$ K composed of 21 % volume of

oxygen and 79 % of nitrogen ($X_{O_2,air} = 0.21$ and $X_{N_2,air} = 0.79$). The fuel is hydrogen diluted in nitrogen at a temperature of $T_{fuel} = 300$ K. The hydrogen and nitrogen mole fractions are respectively $X_{H_2,fuel} = 0.25$ and $X_{N_2,fuel} = 0.75$. The pressure is equal to the atmospheric pressure ($p = 1$ atm). The stoichiometric mixture fraction for these conditions is equal to $z_{st} = 0.56$. Contrary to Hilbert and Thévenin (2002), the kinetic reaction mechanism of Yetter et al. (1991) is used here for the hydrogen case. This mechanism has been used successfully in other ignition studies (see for example Im et al. 1998; Kreutz and Law 1996). The results of these HMI calculations are shown in Fig. 4a. The ignition delay is plotted over a wide range of mixture fractions and a clear minimum is found at the mixture fraction $z_{mr} = 0.059$, often called the *most reactive* mixture fraction. The minimum homogeneous ignition delay time is noted $t_{HMI} = t_{ign}(z_{mr})$ and is $t_{HMI} = 0.34$ ms. Note that for mixture fractions around z_{mr} , the ignition delay does not vary significantly as a function of the mixture fraction but remains close to t_{HMI} .

At high values of the mixture fraction, the ignition delay shows an almost exponential behavior: in this regime, the ignition delay depends mainly on the temperature of the mixture which varies almost linearly with z . The slope of the curve can be related to an activation temperature through the empirical relation $t_{ign} \propto \exp(T_{act}/T)$. Using a least-squares method, the activation temperature is estimated at $T_{act} \sim 21,300$ K, which is the order of magnitude of values found in the literature. In Fig. 4a, higher values of the mixture fraction are not plotted as they correspond to extremely long ignition delays.

Methane flame

The conditions of the methane flame are chosen to give a minimum ignition delay time of the same order of magnitude as for the hydrogen flame. The oxidizer is again heated air, although the temperature is increased to $T_{air} = 1400$ K in order to reduce the ignition delay and the computational time. The fuel is a mixture of methane and nitrogen in equal volume fractions ($X_{CH_4} = 0.5$, $X_{N_2} = 0.5$) and a temperature of $T_{fuel} = 300$ K. The pressure is $p = 5$ atm. At these conditions, the stoichiometric mixture fraction is equal to $z_{st} = 0.14$.

Homogeneous ignition delays are calculated using three different reaction mechanisms, see Fig. 4b. The GRI 3.0 mechanism is the most detailed and most recent reaction mechanism and is used here as the reference. The difference with the older version 1.2 is very small though, which justifies the use of this mechanism for this problem. Also plotted are results obtained with the reduced 12-step mechanism proposed by Sung et al. (1998), which has been developed for methane oxidation from the GRI 1.2 mechanism. It fits the original mechanism quite well and offers therefore a considerable reduction of computational costs without losing precision on major chemistry effects. For this reason, this mechanism is retained in the calculations presented below. Finally, the ignition delay results are also compared to the experimental fit (symbols in the figure) proposed by Krishnan and Ravikumar (1981), which reads:

$$t_{ign} = 2.21 \times 10^{-14} \exp(22659/T) [O_2]^{-1.05} [CH_4]^{0.33} \quad (3)$$

where t_{ign} denotes the ignition delay time, T is the temperature and $[O_2]$ and $[CH_4]$ are the molar concentrations (mol/cc) of oxygen and methane. Note that the activation temperature is of the same order of magnitude as for the hydrogen flame. The general

agreement of the experimental fit with the numerical results is very good, considering the limited range of operating conditions for which the experiments are conducted. The lean flame limit $z \rightarrow 0$, for example, is a strong extrapolation of experimental data and might explain the difference at these points with the numerical results.

In contrast to the hydrogen results in Fig. 4a, the exponential regime of the ignition delay for methane continues very far towards the lean side. The curve deviates from this exponential behavior only for very small values of the mixture fraction. Apparently, the temperature dependency on the ignition delay is much stronger than on the methane concentration. The review paper by Spadacinni and Colket III (1994) already pointed out that the ignition delay times of methane mixtures are relative insensitive to the methane concentration, in particular at very lean conditions. Methane differs at this point from other hydrocarbon fuels, due to the fact that the methyl radical CH_3 , the primary hydrocarbon radical formed from methane, is relatively stable and leads to chain-terminating reactions, rather than chain-branching reactions (Westbrook 2000). Note also in this context the positive exponential factor for the methane concentration in Eq. (3).

Nonetheless, a minimum ignition delay is observed for the numerical results in Fig. 4b. When using the 12-step mechanism, this minimum is located at a mixture fraction of $z_{mr} = 0.002$ and corresponds to an ignition delay time of $t_{HMI} = 0.49$ ms. However, the local temperature increase during ignition at this most reactive mixture fraction is only 26 K. The term *most reactive* is here clearly not adequate. Note that when pressure is increased, this mixture fraction corresponding to a minimum ignition delay shifts further towards the lean side and eventually disappears altogether. A most reactive mixture fraction does not exist in this case.

As already pointed out, the term ‘ignition’ used in the HMI context is not to be confused with *global* flame ignition. Indeed, an infinitely small concentration of methane, brought to sufficiently elevated temperature, will always react rapidly although the resulting heat release might not be sufficient to ignite a flame globally. The global ignition mechanism is governed by a balance between fast ignition and sufficient heat release. This point will be further investigated with the one-dimensional LMI calculations in the next section.

3 Laminar mixing ignition calculations (LMI)

The one-dimensional ignition problem illustrated in Fig. 3 is calculated using a direct numerical simulation (DNS) code called NTMIX (Baum 1994), which is coupled to a vectorized version of the CHEMKIN library (Kee et al. 1989). This code has been extensively used in earlier numerical studies including hydrogen and hydrocarbon premixed/diffusion flames. It solves the Navier-Stokes equations and the species equations for detailed chemistry on regular meshes. A sixth order compact finite difference scheme is used to compute first and second order derivatives on interior points, while a compact fourth order scheme is used for the boundary points (Lele 1992). Time advancement is obtained with an explicit third-order Runge-Kutta method using a low storage technique (Wray 1989). Species molecular transport is modeled using Fick’s law with diffusion velocities calculated from the binary diffusion coefficients. A correction velocity is added to guarantee mass conservation. Dufour and Soret effects are taken into account.

Boundary conditions are calculated using the Navier-Stokes characteristic boundary conditions (NSCBC) formulation (Poinsot and Lele 1992), which has been extended to handle multi-species problems (Baum et al. 1995). The left boundary is entirely non-reflecting, while a small relaxation is applied at the right boundary to avoid drift of the mean pressure in the computational domain. No relaxation is applied to the velocity, but drifting problems are not encountered.

The time step Δt is limited by the classical stability criteria defined by $CFL = c \Delta t / \Delta x < 0.6$ for the convective part and $Fo = \nu \Delta t / \Delta x^2 < 0.1$ for the diffusive part, where Δx is the distance between two grid points, c is the sound speed and ν the kinematic viscosity. It is well known that the CFL imposes a small time step limit, but for the present complex chemistry problems the chemical reaction terms impose an additional and even stricter limitation on the time step. The characteristic time scale of the chemical reactions can be much smaller than the characteristic time scales of the flow, leading to a very stiff system of equations to solve. The explicit scheme applied in this study may then not be efficient and require very small time steps to obtain a stable solution. This appears to be the case in particular when using the complex reaction mechanisms GRI 1.2 and 3.0 for the ignition of methane in hot air. On the other hand, the 12-step reduced mechanism allows much larger time steps, thereby favoring once more the use of this mechanism for the methane ignition problem.

To correctly resolve the discontinuities at the interface between fuel and hot gases, it is necessary to apply some kind of smoothing on the initial conditions. To that purpose, the one-dimensional calculations are initialized with a mixture fraction profile defined by:

$$z = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x - x_0}{d}\right) \right] \quad (4)$$

where d is a measure for the width of the error-function profile and x_0 is its mid-point position. The initial conditions (enthalpy, pressure and species mass fractions) at each grid point are now obtained from the local mixture fraction following the procedure for the homogeneous case. Eq. (4) describes the analytical solution of the diffusion problem for short times in the case of unity Lewis numbers (equal thermal and molecular diffusion) and constant diffusion coefficients. It is also assumed that no reaction takes place during the short initial diffusion phase. To obtain a solution that corresponds as well as possible to the original physical problem, i.e. initially separated fuel and hot air, the parameter d has to be chosen as small as possible.

Two different cases are again studied with operating conditions corresponding to those used for the HMI calculations. The following discussion of the LMI results will focus on the following aspects: the influence of the initial conditions, the effect of non-unity Lewis numbers and molecular transport and the relation between the first ignition spot and most reactive conditions. The goal is to explain the differences between the hydrogen and methane ignition processes and to compare the LMI and HMI results.

4 LMI Results

The temperature profiles at different time instants of the LMI simulation for hydrogen are illustrated in Fig. 5a. Between $t = 0$ and $t = 0.3$ ms, the major visual process is molecular

diffusion which transforms the steep initial profile into a much broader temperature profile. Temperature increase due to chemical reactions start around $t = 0.35$ ms, mainly on the hot lean side of the profile (i.e. for small values of z). This temperature increase activates chemical reactions in neighboring regions and the flame propagates very rapidly towards the rich side, leaving behind a region with reaction products at elevated temperature. The ignition process of the methane flame shown in Fig. 5b is very similar to the hydrogen flame at first sight, but there are some important differences as will be shown in the following analysis.

First, a suitable definition for the ignition delay time for these one-dimensional configurations must be given. A detailed discussion on this subject can be found in Hilbert and Thévenin (2002). As suggested by the authors, it is convenient to work with the total heat release, defined as:

$$\dot{q} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sum h_k \dot{\omega}_k dx \quad (5)$$

where h_k is the enthalpy of species k and $\dot{\omega}_k$ is the reaction rate of species k . A straight extension of the definition of t_{ign} used in the homogeneous calculations is then based on the maximum of the total heat release and reads:

$$\left. \frac{d\dot{q}}{dt} \right|_{t=t_{ign}} = 0 \quad (6)$$

However, as indicated by similar studies and the homogeneous calculations, the flame will first ignite at very lean conditions and then propagate towards richer regions. The heat release is much higher towards the richer side and ignition according to Eq. (6) will be longer due to the finite propagation velocity of the flame front. An alternative definition which is also tested here, giving slightly shorter ignition delays, is given by:

$$\left. \frac{d^2\dot{q}}{dt^2} \right|_{t=t_{ign}} = 0 \quad (7)$$

Fig. 6 shows the temporal evolution of the maximum temperature in the computational domain and the total heat release for the two cases. The time axis is normalized by the minimum homogeneous auto-ignition delay time t_{HMI} for the respective cases. The number of grid points used in both simulations is $N = 500$ and the stiffness parameter of the initial profile is set to $d = 0.02$ mm. As for the homogeneous calculations, a period of radical build-up with negligible heat release is followed by an exponential increase of temperature in the ignition phase. The two symbols in each figure indicate the ignition delays according to Eqs. (6) and (7): the first point (cross) corresponds to the maximum of the heat release time derivative (Eq. 7) and occurs slightly before the second point (circle) corresponding to the maximum of heat release (Eq. 6). The discussion will mainly focus on the ignition delay according to Eq. (7) as it presents a better estimate of the onset of ignition.

Influence of the initial conditions

The influence of the thickness d of the initial mixing layer on the ignition delay time is shown in Fig. 7. All simulations are performed on a $N = 500$ point grid, except for

the smallest value of d where $N = 1000$ is used. In fact, the number of grid points N is adapted in order to correctly resolve the initial profiles (d is resolved on about 5 grid points) and at the same time conserving a computational domain large enough to contain the entire ignition process ($N\Delta x > L_{min}$, where $L_{min} \sim 0.2$ cm).

As shown by Fig. 7, for both the hydrogen flame (circles) and the methane flame (squares) the ignition delay time tends toward a unique value for decreasing d . For sufficient small values, the influence of the initial conditions are negligible and the unique solution of an initially separated fuel and air ignition problem is recovered. For comparison, ignition delay times defined by both Eqs. (6) and (7) are plotted. As expected, the point of maximum heat release (Eq. 6) occurs slightly after the ignition delay time following definition (7), but both definitions show the same evolution as a function of d .

To investigate the influence on the ignition delay of the unity Lewis number assumption used for the initial condition, the simulations for hydrogen are repeated using an initialization procedure imitating non-unity Lewis numbers effects. The initial enthalpy profile is still described by an error-function with profile width d , but the profile widths for respectively the hydrogen and oxygen mass fraction are now given by $d_{H_2} = d/\sqrt{Le_{H_2}}$ and $d_{O_2} = d/\sqrt{Le_{O_2}}$. The nitrogen mass fraction is calculated from the requirement that the sum of mass fractions must be equal to unity at each grid point. In the following simulations, the hydrogen and oxygen Lewis numbers are set to $Le_{H_2} = 0.35$ and $Le_{O_2} = 1.2$, corresponding roughly to the mean of the values found on respectively the cold and hot side. Results obtained with this initialization procedure are also plotted in Fig. 7. It is observed that the limit of the ignition delay time for small values of d is exactly the same as for the unity Lewis number initialization. Of course, this simple approach neglects any coupling between the initial profiles of enthalpy and species, but it confirms nonetheless our findings that the final solution is independent of the initial conditions for sufficiently small values of d .

Effect of Lewis numbers and molecular transport

The hydrogen case is particularly interesting since the operating conditions correspond to those used in Hilbert and Thévenin (2002). In this work, LMI simulations are compared to the ignition in homogeneous isotropic turbulence. The turbulent ignition delay was found to be within less than 10 % of the laminar ignition delay and almost insensitive to the turbulent intensity and length scales. They did not however compare their results with homogeneous calculations. As shown by Fig. 6, the LMI delay of the hydrogen case is very close to the minimum value obtained in the HMI calculation. This may suggest that laminar mixing has almost no influence on the ignition delay. If so, the simple HMI calculations are sufficient to provide a very good estimate of the actual ignition delay, even in turbulent conditions. It turns out however that molecular transport plays an important role in this problem and that LMI simulations are still necessary to estimate correctly the ignition delay.

To show this, the LMI simulation for the hydrogen flame is repeated with unity Lewis numbers for all species. As a result, the ignition delay is multiplied by a factor seven with respect to the results obtained with detailed transport. This observation shows the importance of including detailed transport in the calculations, as noted by Hilbert and Thévenin (2002), but also the importance of including molecular transport in this complex

chemistry ignition problem. This is expected since molecular mixing tends to disperse radicals created at the most reactive zone. Moreover, the location at which the most reactive conditions are found propagates outwards because the thickness of the mixing layer increases with time. Hence, laminar mixing prohibits the build-up of the radical pool observed in homogeneous calculations, thereby delaying the ignition process. This is illustrated in Fig. 8, which compares HMI and LMI mass fraction evolutions of the H and O radical for the hydrogen flame. The lines in the figure correspond to mass fractions of the HMI calculation and the LMI simulation at the location of the first ignition spot. The symbols in the figure indicate the LMI mass fractions at points of maximum heat release. The difference between the HMI and LMI profiles is marked. The concentration of the radicals for LMI is orders of magnitude lower than for HMI, apart from the very start of the mixing process. Radical build-up in the LMI simulation is much slower than for HMI, but increases suddenly in the last period prior to ignition. It is also seen that the first ignition spot, being initially far away from the mixing layer, remains particularly unreactive for a long period of time. It is only in the second part of the ignition delay that this point becomes most reactive and thus coincides with the symbols in the figure.

The effect of the Lewis number of the fuel on the ignition delay is shown in Fig. 9. In these simulations, the fuel Lewis number is kept constant in the computational domain, while other species are described using detailed transport. For Lewis numbers below unity, the fuel diffuses faster than oxygen and heat and is therefore able to reach regions with high concentrations of oxygen at relative high temperature. It is then expected that decreasing the Lewis number of the fuel shortens the ignition delay. This is clearly observed in Fig. 9a for the hydrogen fuel and (although less pronounced) for methane in Fig. 9b. It is interesting to note that in previous ignition studies (Hilbert and Thévenin 2002; Im et al. 1998; Mastorakos et al. 1997), the first ignition spot in turbulent flows is often located around the mixing layers that are convex towards the fuel side. At these locations, the diffusion of hydrogen towards high temperature regions with abundance of oxygen is promoted, in the same manner as for the non-unity Lewis number effects of premixed propagating flames.

For comparison, the ignition delay times obtained with the detailed transport model and unity Lewis numbers for all species are indicated in the figure by the dashed-dotted and dashed lines respectively. For the hydrogen flame, the variable Lewis number curve intersects the detailed transport ignition delay at about $Le_{H_2} = 0.3$, which is close to the actual value of the hydrogen Lewis number. Furthermore, the curve approaches the unity Lewis number result for $Le_{H_2} = 1$. These observations suggest that the high diffusivity of hydrogen is for a large part responsible for the acceleration of the ignition process, thereby counterbalancing the delay introduced by the overall mixing process. The agreement with the homogeneous ignition delay is more or less a coincidence due to the specific value for the Lewis number. On the other hand, the Lewis number for the methane fuel is close to one. Therefore, the difference between the results obtained with the detailed transport and the unity Lewis numbers in Fig. 9b remains small. In this case, there is no other mechanism to compensate the delay of the ignition process caused by laminar mixing, resulting in a ignition delay almost three times as long as the homogeneous ignition delay. This finding can be important for practical combustion systems where the auto-ignition delay is a crucial parameter in the flame stabilization mechanism.

First ignition spot and most reactive conditions

As mentioned in § 2, the most reactive mixture fraction for methane is close to zero, which differentiates this case from hydrogen or one-step chemistry where generally this minimum is found at much richer conditions. A previous study on laminar and turbulent mixing ignition with one-step chemistry (Mastorakos et al. 1997) suggested that ignition always occurs at the most reactive mixture fraction, although their turbulent ignition delay times corresponded more closely to the LMI than the HMI results. It is therefore interesting to study the actual relation between the first ignition spot and the most reactive mixture fraction for complex hydrogen and methane chemistry, and its role on the ignition delay.

In order to investigate more closely the first occurrence of ignition, Fig. 10 shows as a function of time the mixture fractions at which a local maximum of the consumption rate of oxygen is observed. It is possible to find more than one maximum at the same time and this is generally the case after ignition has occurred. As evidenced in Fig. 10a for the hydrogen case, the ignited flame splits up in three parts: a lean premixed flame propagating towards the hot air side, a rich premixed flame propagating towards the fuel, and a diffusion flame which installs itself on the stoichiometric mixture fraction line. This situation is very similar to the triple flame structures observed in the stratification of diffusion flames (Domingo and Vervisch 1996; Kioni et al. 1993). The two premixed flames will eventually be extinguished by the lack of either fuel or oxygen. The diffusion flame survives much longer and represents the globally ignited flame in practical burners. The methane flame shown in Fig. 10b shows a similar behavior. Three flame fronts are again identified and the agreement between the mixture fraction of the diffusion flame and the stoichiometric mixture fraction, indicated by the dashed line in the figure, is very good. The mixture fraction of the lean premixed front decreases as the flame propagates towards the hot air side, in regions where methane is still available. On the other hand, the rich premixed front burns the oxygen remaining on the fuel side and propagates towards regions with higher mixture fractions.

For this ignition study, the first part of the plot before flame split-up is more interesting. In the hydrogen case, one single reaction maximum is found with a local mixture fraction close to the most reactive mixture fraction, indicated by the dashed-dotted line in Fig. 10a. A slight drift of the local mixture fraction is found at the beginning of the calculation, where reaction rates are negligible. Otherwise, the mixture fraction at maximum heat release is almost constant up to ignition. Although the value of the local mixture fraction does not exactly correspond to z_{mr} , it suggests nonetheless that this point plays an important role in the global ignition of the flame.

The methane case, Fig. 10b, shows a different pattern. The heat release remains very low even after a time period corresponding to the minimum HMI delay. If the ignition mechanism corresponded to that for hydrogen, ignition should start at the most reactive mixture fraction of $z_{mr} = 0.002$. However, due to the low concentrations of methane at this point, chemical reactions are very weak and molecular transport prevents build-up of radical species. Instead, the mixture fraction at the maximum heat release is from the beginning much higher than z_{mr} and increases steadily during the time period before ignition. Apparently, in contrast to the hydrogen flame, the most reactive mixture is not

a relevant parameter for ignition of this methane flame.

5 Conclusions

The ignition of fuel in heated air is studied with detailed and reduced chemistry. Two different methods for the calculation of ignition delay times are compared. The first and simplest method is called *homogeneous mixing ignition* (HMI). It assumes infinitely fast mixing between fuel and air and parameterizes each homogeneous mixture with a mixture fraction z . The ignition delay time for each mixture fraction z is easily calculated with readily available numerical tools. The second method is called *linear mixing ignition* (LMI) and consists of direct simulation of a one-dimensional mixing layer. Although this approach is more complicated, it adds finite mixing to the ignition problem and allows the calculation of global ignition properties.

Two test cases are considered: a hydrogen flame and a methane flame. For both flames, detailed reactions mechanisms that are adequate for these ignition problems can be found in the literature (Smith et al. ; Yetter et al. 1991). Nevertheless, a reduced reaction mechanism (Sung et al. 1998) is preferred for the methane flame to reduce the number of species and the stiffness of the chemical reaction terms. This mechanism is first compared to full schemes to check its accuracy. It is then used for the rest of the study because it allows a considerable reduction of computational time and the use of simple explicit schemes to calculate the LMI problem.

The HMI delay time of the hydrogen flame, plotted as a function of the mixture fraction z , shows a clear minimum at the so-called *most reactive* mixture fraction. For the methane flame, this minimum is less pronounced and located at very low mixture fractions corresponding to extremely lean conditions: the temperature increase during ignition at these conditions is only 26 K.

The LMI simulation of the hydrogen flame gives ignition delay times close to the HMI delay time. Contrary to what may be concluded from these observations, the mixing process plays an important role in the ignition mechanism. First of all, mixing delays the ignition process because it prohibits radicals to accumulate at the most reactive conditions. Secondly, the higher diffusivity of hydrogen with respect to heat and other species is responsible for an acceleration of the ignition process as it brings the hydrogen to regions of high temperature and high oxygen concentration. Both mechanisms counterbalance, resulting in HMI and LMI delay time of the same order of magnitude for the hydrogen flame. On the other hand, it is observed that the LMI delay for the methane flame is almost three times longer than the HMI delay. The difference can be explained by two mechanisms: the Lewis number of methane is close to unity hence the ignition accelerating mechanism is absent, and the heat release at the most reactive mixture fraction is too weak to ignite the flame globally and ignition of richer regions takes more time.

In both cases, the LMI simulation gives important information on the ignition properties of mixing layers. While several previous studies using hydrogen fuels have shown that turbulent and laminar ignition delay times are of the same order of magnitude, this study shows that significant differences can be found between homogeneous and laminar calculations. The LMI problem appears (at least for hydrogen flames) as a minimum but

sufficient method to estimate ignition delay times in practical devices. For the hydrogen chemistry, this method is relatively simple compared to more realistic simulations including for example effects of turbulence. For methane or higher hydrocarbon fuels, the additional chemical species and the stiffness of the resulting system of equations can lead to a significant increase of computational costs with respect to HMI calculations. The use of reduced reaction mechanisms and a careful selection of initial conditions is then necessary for LMI. Such an effort may be necessary since this study shows that the HMI calculation which are commonly used in most ignition times evaluation can be wrong by an order of magnitude because they neglect molecular transport effects.

Acknowledgement

The support of Alstom Power Switzerland is gratefully acknowledged. Computer time was provided by IDRIS, the supercomputer center of CNRS.

References

- Barths, H., C. Hasse, G. Bikas, and N. Peters (2002). A simulation of combustion in direct injection diesel engines using an eulerian particle flamelet model. *Proc. Combust. Instit.* 28, 1161–1168.
- Baum, M. (1994). *Etude de l'allumage et de la structure des flammes turbulentes*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale Paris.
- Baum, M., T. Poinsot, and D. Thévenin (1995). Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. *J. Comput. Phys.* 116, 247–261.
- Bilger, R. (1988). The structure of turbulent premixed flames. *Proc. Combust. Instit.* 22, 475–488.
- Domingo, P. and L. Vervisch (1996). Triple flame and partially premixed combustion in auto-ignition of non-premixed turbulent mixtures. *Proc. Combust. Instit.* 26, 233–240.
- Hilbert, R. and D. Thévenin (2002). Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulation. *Combust. Flame* 128, 22–37.
- Im, H., J. Chen, and C. Law (1998). Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows. *Proc. Combust. Instit.* 27, 1047–1056.
- Kee, R., F. Rupley, and J. Miller (1989). Chemkin II: A fortran package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. *Sandia National Laboratories, Rept SAND89-8009B*.
- Kioni, P., B. Rogg, K. Bray, and A. Liñán (1993). Flame spread in laminar mixing layers: the triple flame. *Combust. Flame* 95(3), 276–290.
- Kong, S., Z. Han, and R. Reitz (1995). The development and application of a diesel ignition and combustion model for multidimensional engine simulations. *SAE paper 950278*.
- Kong, S., C. Marriot, R. Reitz, and M. Christensen (2001). Modeling and experiments of hcci engine combustion using detailed chemical kinetics with multidimensional cfd. *SAE paper 2001-01-1026*.
- Kreutz, T. and C. Law (1996). Ignition in non-premixed counterflowing hydrogen versus heated air: computational study with detailed chemistry. *Combust. Flame* 104, 157–175.
- Krishnan, K. and R. Ravikumar (1981). *Comb. Sci. Tech.* 24, 239.
- Lele, S. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like solution. *J. Comp. Phys.* 103, 16–42.
- Lutz, A., R. Kee, and J. Miller (1988). SENKIN; A fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. Technical Report 87-8248, Sandia National Laboratories.
- Mastorakos, E., T. Baritaud, and T. Poinsot (1997). Numerical simulation of autoignition in turbulent mixing flows. *Combust. Flame* 109, 198–223.

- Mitani, T. (1995). Ignition problems in scramjets testing. *Combust. Flame* 101, 347–359.
- Poinsot, T. and S. Lele (1992). Boundary conditions for direct simulation of compressible viscous flows. *J. Comp. Phys.* 101, 104–129.
- Smith, G., D. Golden, M. Frenklach, N. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Bowman, R. Hanson, S. Song, W. Gardiner Jr., V. Lissianski, and Z. Qin. http://www.me.berkeley.edu/gr1_mech.
- Spadacinni, L. and M. Colket III (1994). Ignition delay characteristics of methane fuels. *Prog. Energy Combust. Sci.* 20, 431–460.
- Sung, C., C. Law, and J.-Y. Chen (1998). An augmented reduced mechanism for methane oxidation with comprehensive global parametric validation. *Proc. Combust. Instit.* 27, 295–304.
- Wan, Y., H. Pitsch, and N. Peters (1997). Simulation of autoignition delay and location of fuel sprays under diesel-engine relevant conditions. *SAE paper 971590*.
- Westbrook, C. (2000). Chemical kinetics of hydrocarbon ignition in practical combustion systems. *Proc. Combust. Instit.* 28, 1563–1577.
- Wray, A. (1989). Minimal storage time advanced schemes for spectral methods. Technical report, NASA Ames Research Center, M.S. 202 A-1, Moffet Field, CA94035.
- Yetter, R., F. Dryer, and H. Rabitz (1991). A comprehensive reaction mechanism for carbon monoxide/hydrogen/oxygen kinetics. *Combust. Sci. and Tech.* 79, 97–128.

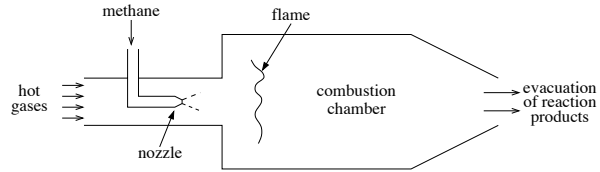


Figure 1: Industrial example involving auto-ignition: the sequential combustor. Fuel is reinjected into the burned gases coming from the principal combustion chamber (not shown) and ignites in the second chamber shown in the figure.

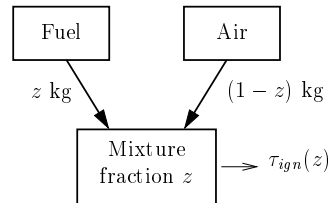


Figure 2: Principal of the homogeneous mixing ignition (HMI) problem.

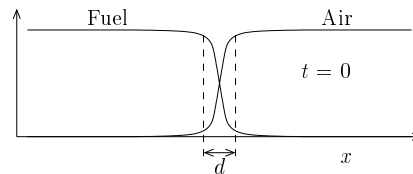


Figure 3: Schematic diagram of the initial condition for the linear mixing ignition (LMI) problem.

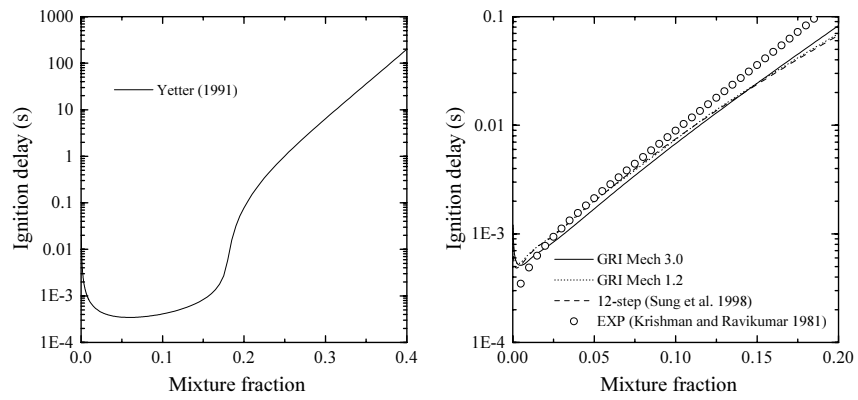
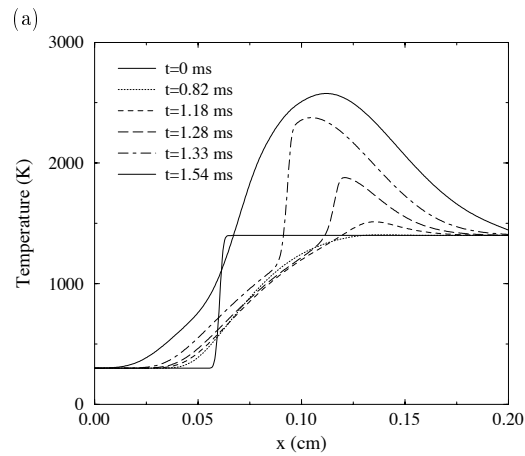
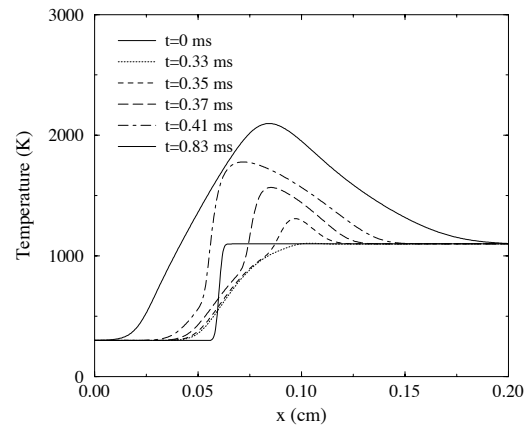
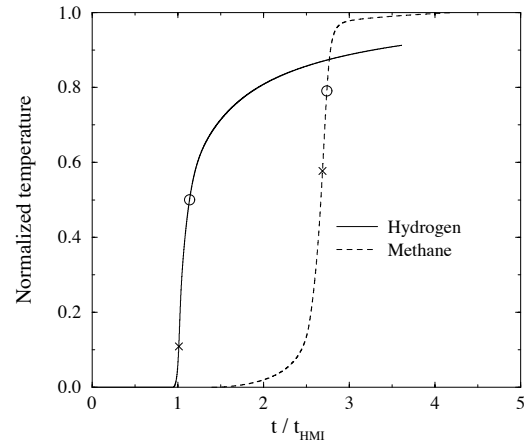


Figure 4: Homogeneous ignition delay plotted as a function of the mixture fraction. (a) $\text{H}_2/\text{N}_2\text{-Air}$, $T_{air} = 1100$ K, $T_{fuel} = 300$ K, $p = 1$ atm, (b) $\text{CH}_4/\text{N}_2\text{-Air}$, $T_{air} = 1300$ K, $T_{fuel} = 300$ K, $p = 5$ atm.

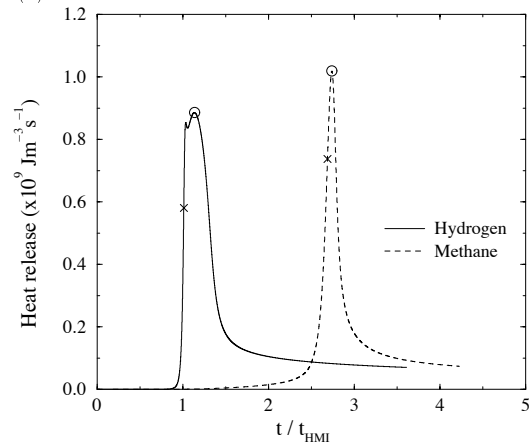


(b)

Figure 5: Temperature profiles at different time instants for (a) the hydrogen flame and (b) the methane flame. For comparison, the ignition delay time according to definition (7) is $\tau_{ign} = 0.34$ ms for the hydrogen flame and $\tau_{ign} = 0.48$ ms for the methane flame.



(a)



(b)

Figure 6: Temporal evolution of the maximum temperature in the computational domain (a) and the total heat release (b) during auto-ignition. The temperature is normalized by the maximum value before and after ignition, the time is normalized by the minimum homogeneous ignition (HMI) delay time for respectively the hydrogen and methane case. The symbols indicate the ignition times according to definitions (6: circle) and (7: cross).

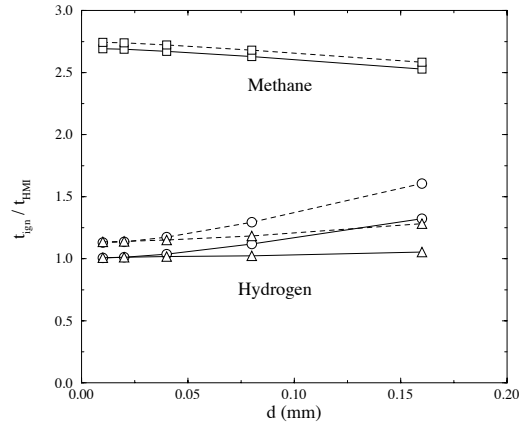


Figure 7: Laminar ignition delay times plotted as a function of the width d of the initial mixing layer. Solid and dashed lines correspond to ignition delays according to definitions (6) and (7). The hydrogen cases are indicated by circles and triangles, the latter corresponding to the non-unity Lewis number initialization, and the methane cases by squares.

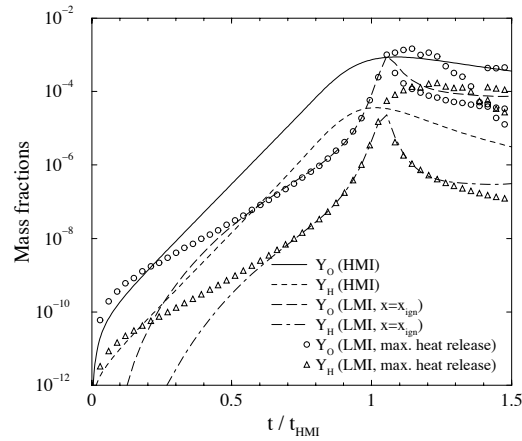


Figure 8: Temporal evolution of the concentration of the radicals O and H for the H_2/N_2 -air simulations. The lines correspond to mass fractions of the HMI simulation and LMI mass fractions at the first ignition spot. Symbols indicate LMI mass fractions at points of maximum heat release.

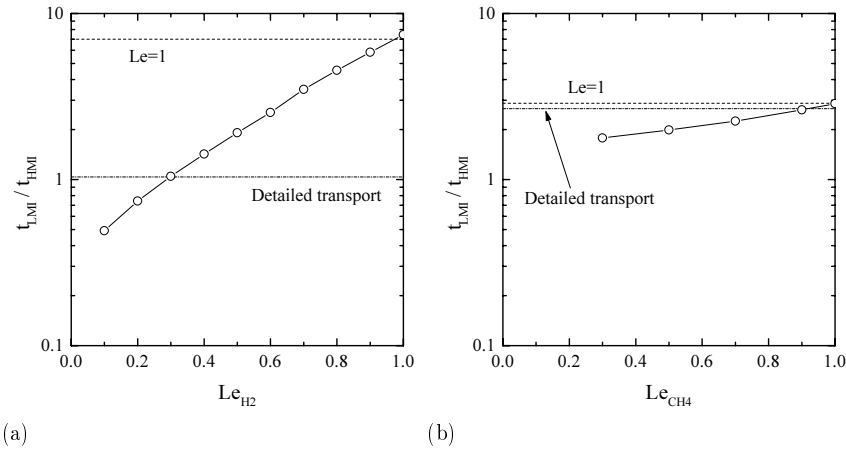


Figure 9: Influence of the Lewis number of the fuel species on the LMI results for (a) the hydrogen flame and (b) the methane flame. Remaining species are described by detailed diffusion. As a reference, dashed lines indicate the ignition delay for detailed diffusion; dot-dashed lines correspond to unity Lewis numbers for all species.

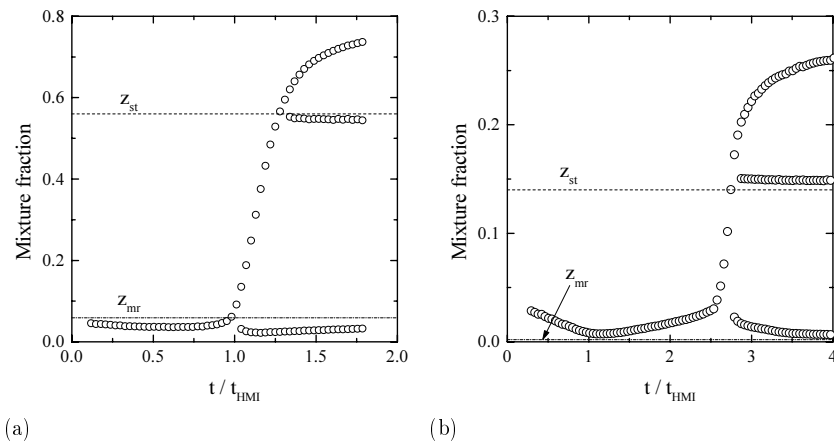


Figure 10: Mixture fraction at local maxima of the consumption rate of oxygen. Results are plotted for the hydrogen case (a) and the methane case (b) as a function of the time, normalized by the respective ignition delay times according to definition (6).

4.3 Conclusions

Ce chapitre a permis de mieux comprendre le mécanisme de l'auto-allumage dans le cas particulier des moteurs-fusées. Des simulations de type HMI et LMI réalisées pour l'hydrogène mettent en évidence l'impact de la diffusion différentielle. Dans le cas de l'hydrogène, le mélange HMI le plus réactif contrôle l'induction. Le faible Lewis du carburant diminue l'effet retardant, ce qui mène finalement à $t_{HMI} \approx t_{LMI}$. Ainsi, t_{HMI} est un bon estimateur du temps d'allumage. Cette propriété sera utilisée lors de la création de schémas réduits capables de modéliser le temps d'auto-allumage de l'hydrogène par un oxydant chaud. Cette conclusion fort arrangeante ne s'applique pas au méthane, où $t_{HMI} \approx 2.7t_{LMI}$. Au final, chaque réducteur requiert une étude préliminaire de type LMI, car la thermodynamique et le nombre de Lewis influencent substantiellement, et de plusieurs façons contradictoires, la valeur de t_{LMI} . Cette quantité peut dépasser d'un ordre de grandeur t_{HMI} , ou bien y être inférieure.

Chapitre 5

Jets supersoniques sous-détendus

5.1 Objectif

Il s'agit d'adapter la simulation aux grandes échelles telle qu'elle est calculée dans AVBP aux structures supersoniques transitoires. La technique de capture de choc est l'approche la plus utilisée actuellement, et de nombreuses recherches sont en cours pour augmenter encore son applicabilité. Cependant, l'objectif final est de calculer des jets réactifs. Dans ce cadre, il est possible de capturer la structure globale d'un jet sous-détendu avec des schémas du type de ceux implantés dans AVBP.

5.2 Description d'un jet supersonique sous-détendu

Dans un jet supersonique, les particules fluides sont soumises à trois phénomènes distincts. L'inertie extrêmement importante (dépendant de la vitesse au carré), la différence de pression qui agit comme une force de rappel, capable de modifier la vitesse et la direction des particules, et la viscosité du fluide qui amortit l'ensemble. C'est la conjonction de la force de rappel, de l'inertie et de l'amortissement du système qui dirige la dynamique particulière du jet sous-détendu.

Si l'on considère un jet supersonique injecté avec un rapport de pression $NPR = P_1/P_0$ égal à 1, avec P_1 pression statique à la sortie du jet et P_0 la pression du milieu extérieur, la force de rappel est nulle. L'énergie contenue dans le jet est simplement amortie par la viscosité moléculaire et l'agitation turbulente (Cas $NPR=1$ de la fig. 5.1).

Lorsque la pression du jet P_1 est légèrement supérieure à la pression ambiante P_0 , c.a.d. $P_1 = P_0 + \Delta P$ (Cas $NPR=1.2$ de la fig. 5.1), la force de rappel accélère la particule fluide et la dévie vers l'extérieur. Cette trajectoire centrifuge prolongée par l'inertie crée une zone de pression plus basse au centre $P_0 - \Delta P$. La particule fluide est donc ramenée par la force de rappel de la pression vers le centre du jet selon une trajectoire centripète qui lui fait retrouver sa pression initiale $P_0 + \Delta P$. L'oscillation entre les états $P_0 + \Delta P$ et $P_0 - \Delta P$ se poursuit le long de l'axe jusqu'à son amortissement complet par viscosité moléculaire et agitation turbulente.

Les jets dont le rapport de pressions statiques est encore plus élevé suivent la même loi (Cas $NPR=3$ de la fig. 5.1) tout en faisant intervenir un quatrième mécanisme extrêmement dissipatif, le choc hydrodynamique droit. Lorsque la pression devient trop faible dans le jet, une discontinuité en forme de disque analogue aux chocs de recompression des tuyères supersoniques se crée à l'aval des zones

de détente. Ce mécanisme d'amortissement est prépondérant devant la dissipation par viscosité moléculaire ou par agitation turbulente. Pour les jets fortement sous-détendus (Cas NPR=10 de la fig. 5.1), un seul choc est suffisant pour détruire toutes les oscillations.

Les jets supersoniques sous-détendus présentent donc une oscillation de pression des particules fluides autour de la pression ambiante, mettant en jeu l'inertie du fluide, la force de rappel du gradient de pression et un amortissement par viscosité moléculaire et agitation turbulente. Lorsque la pression du jet est très élevée, un choc hydrodynamique fort amortit très rapidement les oscillations. Ce dernier phénomène est difficile à modéliser numériquement.

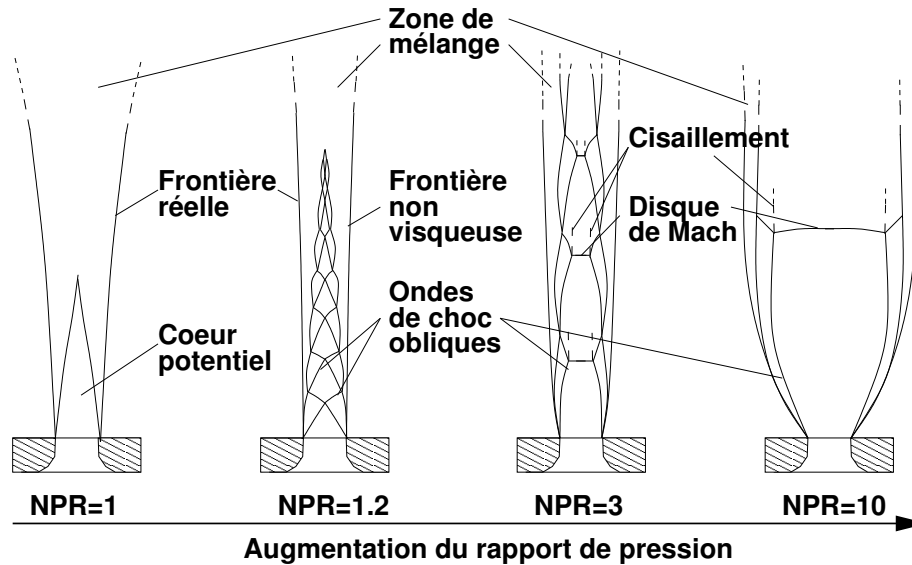


Fig. 5.1 – Formation des diverses formes de jets supersoniques sous-détendus

5.3 Approche numérique d'un écoulement supersonique

En mécanique des fluides, le système d'équations devient hyperbolique lorsque le terme de convection est prépondérant face au terme de diffusion. Les écoulements supersoniques sont particulièrement concernés, puisqu'ils présentent la plupart du temps un nombre de Reynolds élevé. Lors de la résolution numérique d'équations hyperboliques, les solutions obtenues présentent deux défauts typiques, illustrés par la convection d'une discontinuité à la vitesse U sur la Fig. 5.2.

La **dispersion**, ou erreur sur la vitesse de propagation des plus hautes fréquences, est à l'origine du phénomène de Gibbs, c.a.d. d'oscillations autour des discontinuités. Elle apparaît lorsque l'erreur produite par le schéma est d'ordre impair, c.a.d. lorsque le schéma possède un ordre de précision pair (deuxième, quatrième, sixième ordre). Les schémas centrés font tous partie de cette catégorie. On notera que les oscillations numériques créées peuvent donner des valeurs non physiques, comme une pression négative. Il existe des schémas positifs qui garantissent de rester dans le domaine physique.

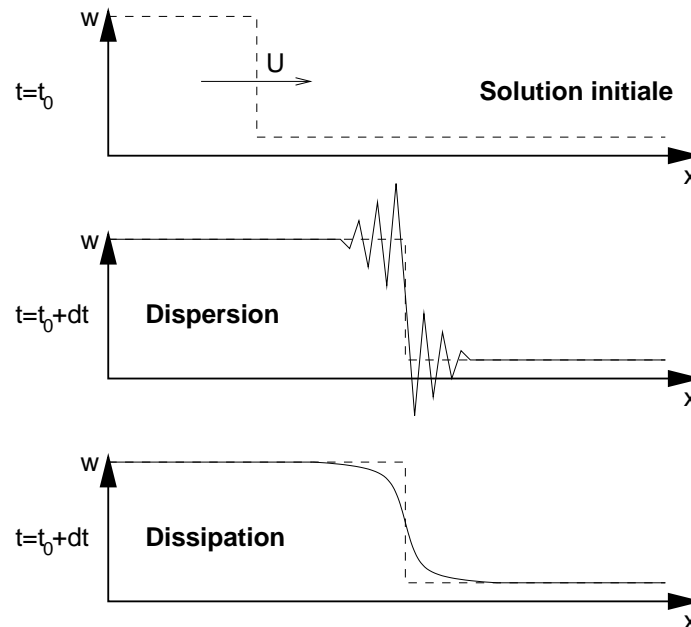


FIG. 5.2 – Erreurs numériques rencontrées lors de la convection d'une discontinuité.

La **positivité**, ou monotonie est l'aptitude d'un schéma à interdire la création de valeurs non physiques.

La **dissipation**, ou erreur de l'amortissement des hautes fréquences, apparaît lorsque l'erreur produite par le schéma est d'ordre pair, c.a.d. lorsque le schéma possède un ordre de précision impair (premier, troisième, cinquième ordre). Il faut noter que l'opérateur de diffusion, qui calcule l'effet de la viscosité du fluide, dissipe les hautes fréquences de la même manière. Ainsi, un schéma dissipatif induit une viscosité 'artificielle'.

Le contrôle de ces erreurs peut se faire suivant de nombreuses approches, que l'on choisit de réunir en deux grandes familles. L'approche de la viscosité artificielle non-linéaire vient de Von Neumann et Richtmyer (148). Elle consiste à ajouter à un schéma un terme de viscosité artificielle en volume. La diffusion supplémentaire qui en résulte doit être suffisante pour assurer la positivité de la solution près des discontinuités, tout en s'annulant dans le reste de l'écoulement.

L'approche par les solveurs de Riemann s'inspire directement de la résolution d'un problème hyperbolique par la méthode des caractéristiques. Par leur construction, ces outils doivent se restreindre strictement aux parties hyperboliques. Ces schémas sont précis. En effet une discontinuité peut être calculée à l'intérieur d'une seule cellule, sans aucune erreur d'évaluation. Cela explique l'appellation familière de 'schéma à capture de choc'. Par contre, ils contiennent implicitement l'hypothèse d'un gaz parfait non réactif. Les principales sous-familles des solveurs de Riemann sont :

- Le schéma de Godunov (67). C'est le plus exact. Il produit des solutions d'un problème de Riemann local à chaque cellule, au prix d'un temps de calcul prohibitif.
- Les 'solveurs de Riemann approchés' qui s'approchent d'un schéma de Godunov avec un temps de calcul plus acceptable, comme les schémas de Roe (126).

- La méthode MUSCL (145) (Monotonic Upwind Scheme for Conservative Laws) proposée par Van Leer permet de porter la précision des solveurs de Riemann au second ordre par reconstruction de la solution. Le second ordre implique la création d'oscillations, que l'on peut détruire à leur source par l'utilisation de limiteurs.
- Les méthodes ENO, puis WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) qui poussent un peu plus loin le concept MUSCL, en autorisant la reconstruction de la solution jusqu'au sixième ou au huitième ordre (78). L'ensemble des travaux de Shu (78) donne un bon aperçu de cette classe de méthodes.

Il est préférable de limiter l'utilisation des solveurs de Riemann aux régions avec discontinuités, et de choisir des schémas moins dissipatifs et plus rapides dans le reste de la simulation : c'est une approche hybride. Pullin et Hill ont proposé en 2004 un schéma centré adapté à la LES, le TCD (Tuned Centered-Difference) associé au schéma WENO près des chocs (70). Selon D.I. Pullin, le passage d'un schéma à l'autre est encore heuristique. Ajoutons à cela que les schéma WENO sont encore rarement utilisés en maillages non structurés tridimensionnels (162), et leurs formulation en gaz réel est encore récente (107). Dans le cadre de cette thèse, on utilisera donc une approche de type Von Neumann-Richtmyer.

5.4 Viscosité de Von Neumann-Richtmyer

Si les équations modélisées sont augmentées d'un terme qui maintient artificiellement l'épaisseur des chocs hydrodynamiques à une échelle résolue, la solution reste continue. C'est le principe de la viscosité de Von Neumann-Richtmyer. Depuis, cette approche a été profondément transformée par les travaux de Cook et Cabot en 2004 (34) et 2005 (35), puis étendue aux écoulements réactifs par Fiorina et Lele en 2006 (62). Cette nouvelle classe de méthodes appelées 'hyperviscosités', autorise la capture du choc, avec des performances comparables à la classe des solveurs de Riemann sur des maillages structurés. Le modèle simple introduit ici fut écrit et testé en 2003 :

La forme générale de l'équation de conservation du moment contient un terme représentant les contraintes du fluide. Elle peut s'écrire sous la forme de l'Eq. 5.1, où $\mathbf{f}_{k,j}$ est une force volumique appliquée à l'espèce k . Le tenseur des contraintes pour un fluide Newtonien en équilibre thermodynamique local est constitué de la pression et des viscosités de cisaillement et de compression. Le tenseur s'exprime sous la forme de l'Eq. 5.2, avec les paramètres μ et λ pour les viscosités de cisaillement et de compression.

$$\underbrace{\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i}}_{\text{Dérivée particulaire}} = \underbrace{\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}}_{\text{Contraintes}} + \underbrace{\rho \sum_{k=1,N} Y_k \mathbf{f}_{k,j}}_{\text{Forces de volume}} \quad (5.1)$$

$$\underbrace{\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij}}_{\text{Tenseur de contraintes}} = \underbrace{\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)}_{\text{Viscosité de cisaillement}} + \underbrace{\lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}}_{\text{Viscosité de compression}} - \underbrace{p \delta_{ij}}_{\text{Pression}} \quad (5.2)$$

On introduit le paramètre de viscosité de volume $\kappa = 2/3\mu + \lambda$. La théorie cinétique des gaz (72) montre que ce dernier paramètre est directement lié à l'indice de compressibilité Z par l'Eq. 5.3.

$$\kappa = 2/3\mu + \lambda = \mu 1.002 \left(\frac{P}{\rho RT} - 1 \right) = \mu 1.002 (Z - 1) \quad (\mu > 0), \quad (5.3)$$

Pour un gaz parfait, i.e. $Z = 1$, la viscosité de volume κ ainsi définie devient nulle, ce qui donne l'hypothèse de Stokes :

$$\kappa = 2/3\mu + \lambda = 0 \quad (\mu > 0) \quad (5.4)$$

On remarque que la viscosité de compression est comparable à une pression. La divergence de la vitesse est le terme source, tandis que λ dépend du fluide et peut être positif ou négatif. Dans le cas d'un choc hydrodynamique, cette viscosité influence directement l'épaisseur du choc.

En 1949, Von Neumann et Richtmyer (148) proposent une viscosité en compression localement prépondérante autour des chocs. D'un point de vue formel, un tenseur de contraintes vérifiant la relation de Stokes, avec une augmentation λ' de la viscosité en compression, est introduit (Eq. 5.5). En interprétant cette augmentation comme un supplément local de pression p' (Eq. 5.6), le tenseur des contraintes peut se ré-écrire comme dans l'Eq. 5.7.

$$\sigma_{ij \text{ modified}} = \left(-\frac{2}{3}\mu + \lambda'\right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - p \delta_{ij} \quad (5.5)$$

$$p' = -\lambda' \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (5.6)$$

$$\sigma_{ij \text{ modified}} = \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - (p + p') \delta_{ij} \quad (5.7)$$

Il reste à déterminer la valeur de λ' , ou plutôt de p' . Pour garantir une influence négligeable dès que l'on s'éloigne du choc, la viscosité artificielle de compression dépend de la divergence de vitesse au carré. L'ensemble est adimensionné par la taille de la cellule et la densité. On obtient une forme telle qu'exprimée dans l'Eq. 5.8, ajustée grâce à une constante sans dimension C_{VNRV} . Pour l'ensemble de ces travaux, $C_{VNRV} = 1$ s'est illustré comme étant la valeur optimale.

$$p' = -\lambda' \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = -C_{VNRV} \rho \Delta x^2 \sqrt{(\nabla \cdot \vec{u})^2} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (5.8)$$

Dans un code compressible à n dimensions, cette viscosité peut se calculer de plusieurs manières. On retiendra l'Eq. 5.9 qui conserve la masse par construction. Cependant, l'expression est identiquement nulle dans le cas mono-dimensionnel. On retiendra alors également l'Eq. 5.10. Ces viscosités seront désignées par l'acronyme "VNRV" pour "Von Neumann-Richtmyer Viscosity".

$$p'_i = -\lambda'_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = -C_{VNRV} (Vol_{cell})^{2/3} \max_{j=1,n} \left| \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right| \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} \quad (5.9)$$

$$p'_i = -\lambda'_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = -C_{VNRV} (Vol_{cell})^{2/3} \max_{j=1,n} \left| \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right| \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (5.10)$$

Ce modèle simple agit sur les gradients de pression avec au opérateur du deuxième ordre. Les modèles plus élaborés de l'hyperviscosité agissent sur les gradients de température et d'espèces, avec des opérateurs d'ordre élevé, comme par exemple le modèle de Fiorina et Lele en 2006 (62) sur maillage structuré.

5.4.1 Application à une onde de Riemann

L'onde de Riemann est une onde acoustique d'amplitude finie qui se propage dans un milieu infini monodimensionnel. Dans le cas linéaire (petites perturbations), cette onde est une perturbation qui se propage à la vitesse du son c , et le profil de cette perturbation conserve sa forme pendant son déplacement. Dans le cas non linéaire, les variations de la vitesse de propagation ne sont plus négligeables. Les zones de compression, avec une température plus élevée, se propagent plus vite que les zones de détente. C'est pourquoi une discontinuité apparaît. Dans l'exemple que nous étudions, de l'air à $370^\circ K$, soit une vitesse du son de $386.4m/s$, subit une perturbation non linéaire de vitesse de $100m/s$, ce qui provoque une variation de température de $40^\circ K$, soit $20m/s$ pour la vitesse du son. Avec une longueur caractéristique de $10m$, on trouve un temps convectif $t_c = 25.88ms$. Dès le premier temps convectif, une discontinuité est formée. Par la suite, la perturbation perd son intensité dans le choc, dissipateur d'énergie.

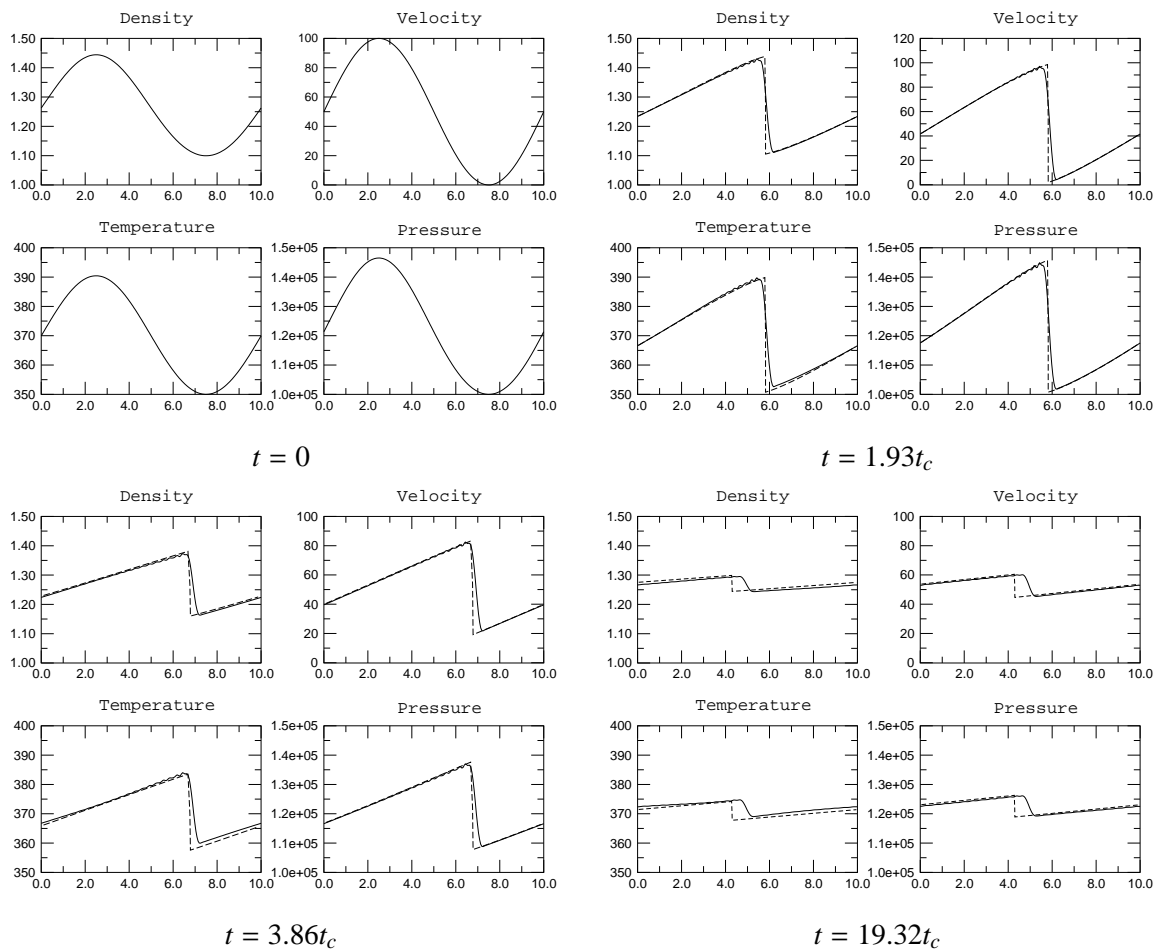


FIG. 5.3 – L'onde de Riemann. Schéma au troisième ordre avec viscosité de Von-Neumann Richtmyer. Solution analytique (trait plein), Simulation (trait interrompu)

La Fig. 5.3 montre l'évolution de l'onde de Riemann, d'après la solution analytique issue de Landau & Lifchitz (91) jusqu'à presque 20 temps convectifs. Un schéma centré de troisième ordre stabilisé par la viscosité de Von-Neumann Richtmyer suit bien la solution analytique. Un léger tremblement est visible au voisinage gauche du choc à $t = 1.93t_c$ puis diminue jusqu'à disparition complète à $t = 19.32t_c$. On note un écart de position d'environ 40cm, après avoir parcouru 200m, soit un décalage de 0.4%.

Afin de se convaincre de l'efficacité de la VNRV, le schéma a été appliqué seul à l'onde de Riemann. A $t = 19.32t_c$, le phénomène de Gibbs a totalement détruit la solution, comme le montre la Fig. 5.4.a. Avec une viscosité artificielle plus classique (76) basée sur l'augmentation directe de la viscosité cinématique, une solution stable est obtenue (cf. Fig. 5.4.b) mais des oscillations sont encore visibles à gauche du choc. Ainsi, la viscosité artificielle classique est suffisante pour stabiliser le schéma sur une solution continue, mais la qualité de la solution devient insuffisante en cas de discontinuités.

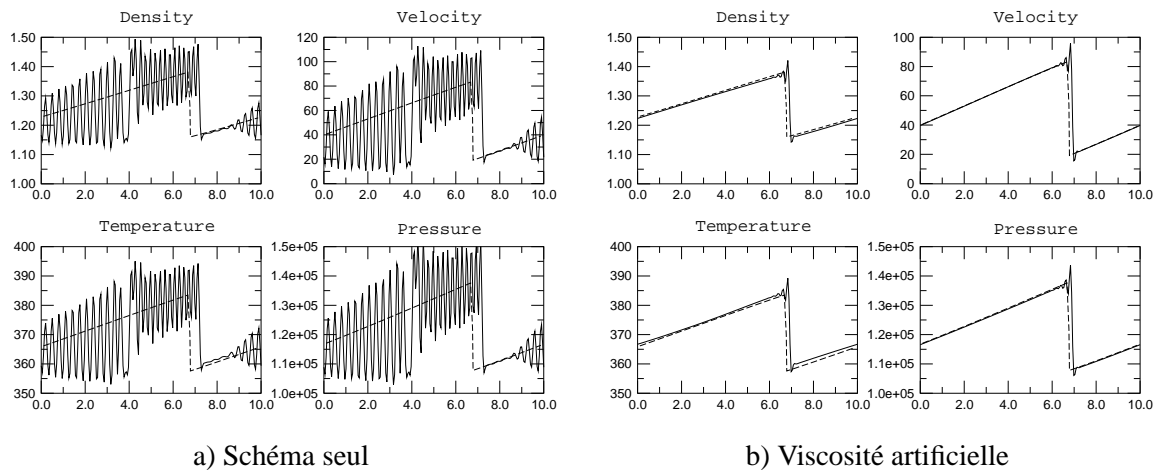


FIG. 5.4 – L'onde de Riemann. Solution analytique (trait plein), Simulation (trait interrompu), à $t = 3.86t_c$

5.4.2 Application à un tube à choc

L'onde de Riemann n'est pas reproductible expérimentalement, *a fortiori* avec une perturbation de plusieurs ordres de grandeur de pression. Le tube à choc est donc un deuxième cas test intéressant pour notre validation. L'expérience du tube à choc est un long tube où se rompt un diaphragme séparant deux volumes à des conditions initiales différentes de pression et de densité. Le demi-espace à la pression la moins élevée s'appelle l'amont, son complémentaire s'appelle l'aval. Les profils de pression, densité, vitesse et température ont une allure autosimilaire. Ils sont analytiquement connus (c.f Hirsch (71)), ce qui fait du tube à choc un excellent cas test numérique. L'évolution de ces profils est illustrée en Fig. 5.5. Cette solution fait intervenir une onde de choc, c.a.d. un saut brutal sur ρ , P , T , U se propageant vers l'amont. On y voit aussi un faisceau de détente faisant varier continûment des grandeurs de l'aval vers un état intermédiaire, et enfin une discontinuité de contact visible sur ρ , T qui sépare l'état intermédiaire de l'état choqué.

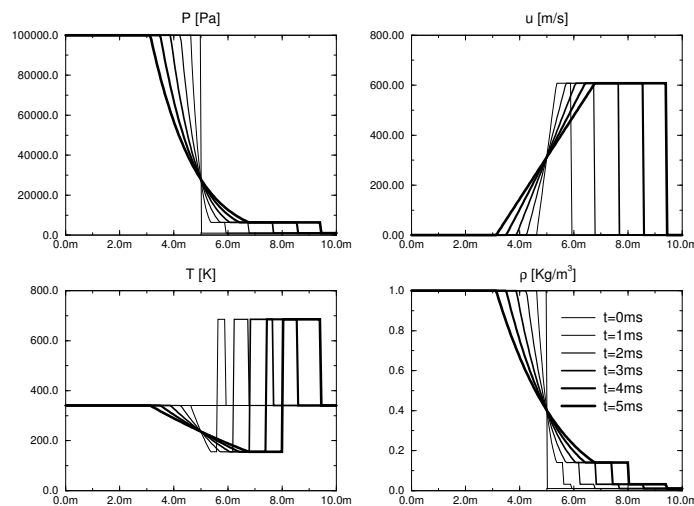


FIG. 5.5 – Evolution d'un choc dans un tube à choc, solution analytique : $P_{amont}/P_{aval} = 100$, Température initiale constante

Si l'on se concentre sur le choc mobile issu du tube à choc, on voit sur la Fig. 5.6 que l'approche de Von Neumann-Richtmyer est efficace, en maintenant une dizaine de points dans l'épaisseur du choc. Le schéma centré de troisième ordre TTGC doté d'une viscosité artificielle classique commence à osciller sérieusement autour du choc. Une fois que la viscosité VNRV remplace la viscosité artificielle classique, on peut constater la positivité de la solution.

Ainsi, l'approche de Von Neumann-Richtmyer présentée dans cette thèse fonctionne sur des chocs forts. Elle autorise l'utilisation de schémas centrés au troisième ordre sur des chocs mobiles forts. De plus la viscosité est active seulement lorsque la divergence de la vitesse est forte.

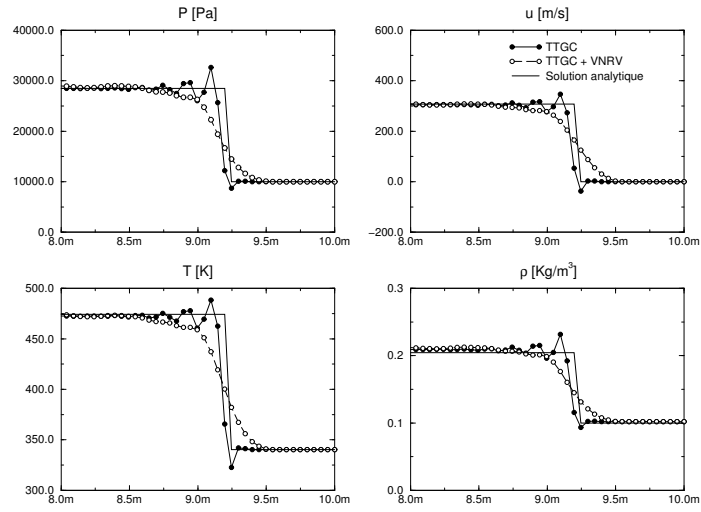
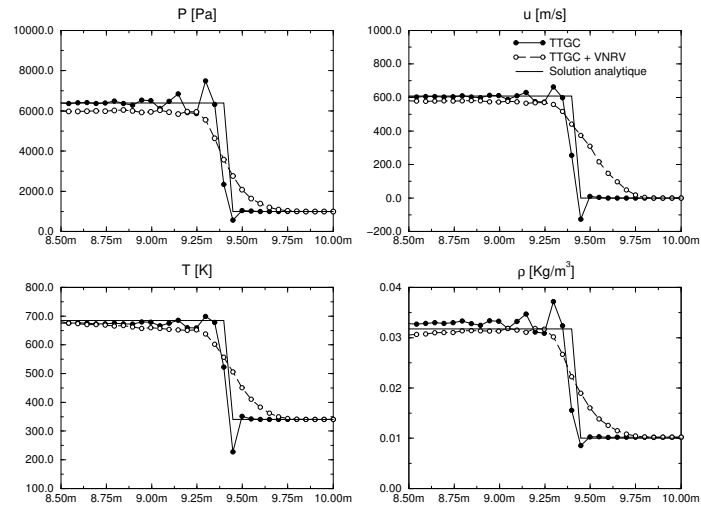
a) $P_{amont}/P_{aval} = 10$ b) $P_{amont}/P_{aval} = 100$

FIG. 5.6 – Comportement de la simulation numérique autour de chocs forts.

5.5 Outils d'analyse

La Simulation des Grandes Echelles autorise le calcul de structures instationnaires. Les techniques d'analyse issues des opérateurs de moyenne renseignent sur les quantités moyennes (Moments d'ordre 1) et les fluctuations moyennes (Moyennes RMS, moments d'ordre 2), mais ne peuvent pas rendre compte d'un caractère instationnaire organisé.

Prenons pour exemple la couche de mélange observée par Brown et Roshko (18) illustrée en Fig. 5.7. Cet écoulement génère et transporte des tourbillons très organisés. Les opérateurs de moyenne donnent par exemple la croissance de la couche de mélange, mais pas d'information sur l'organisation instationnaire.

Il est donc nécessaire d'introduire d'autres outils d'analyse pour étudier les systèmes instationnaires. Ce point est particulièrement important dans le cadre de cette thèse, car il permettra de mettre en valeur l'intérêt principal d'une simulation des grandes échelles par rapport aux méthodes RANS. Ces outils sont essentiellement basés sur l'analyse spectrale, particulièrement adaptée aux configurations instationnaires établies. Quelques outils de cette famille, sont présentés ici, en vue de leur application à l'analyse de jets sous-détendus. La thèse de L. Larchevêque (92) introduit ces outils du point de vue formel, et permet de les reconstruire intégralement. La description présente s'attache à décrire l'interprétation de ces outils, et à donner une idée de leur potentiel. Ils seront ensuite appliqués aux jets sous-détendus. On peut également observer leur application à l'écoulement de cavité par L. Larchevêque (94; 93).

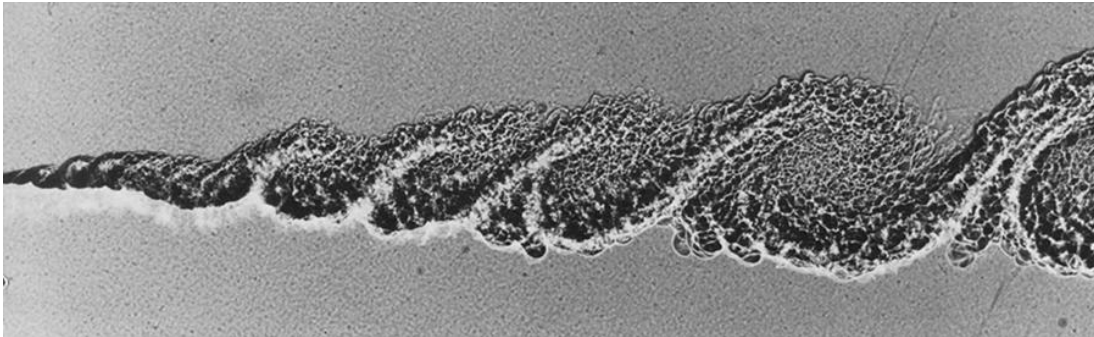


FIG. 5.7 – Couche de mélange à fort gradient de densité : Pression 8 atm., Hélium à 10.6 m/s, Azote à 4 m/s, $\rho_{N_2}/\rho_{He} = 7$.

5.5.1 Evolution spatiale de spectre

La première étape de l'étude d'un écoulement instationnaire concerne souvent la localisation spatiale des structures. Dans un écoulement comportant une direction de développement privilégiée, l'analyse sera fait selon cette direction. On calcule ainsi l'évolution spatiale du spectre. Les données nécessaires sont collectées en placant une série de 'sondes' numériques alignées sur la ligne d'analyse. Les signaux temporels de vitesse issus de chaque sonde subissent une transformée de Fourier. Il suffit ensuite de tracer la norme de cette transformée de Fourier selon deux coordonnées, la fréquence et la position spatiale de la sonde dont est issu le signal pour localiser les structures. La Fig. 5.8 illustre ce que donnerait un tel outil appliqué à un écoulement contenant une fréquence fondamentale et ses harmoniques. Le mode fondamental à un kilohertz existe dès la position initiale. Il est accompagné de tous ses harmoniques : 2,3,4,5 kHz. Chacun des modes disparaît progressivement. Plus le mode est de haute fréquence, plus la distance de dissipation est courte.

Cet outil peut se généraliser en cartes spectrales à deux ou trois dimensions spatiales et une dimension fréquentielle. Il est cependant moins parlant, car plus difficile à visualiser. On préférera alors utiliser un outil plus puissant dit P.O.D. (11) (Proper Orthogonal Decomposition) qui diminue le nombre de dimensions de l'analyse en retenant uniquement la localisation spatiale des modes les plus intenses.

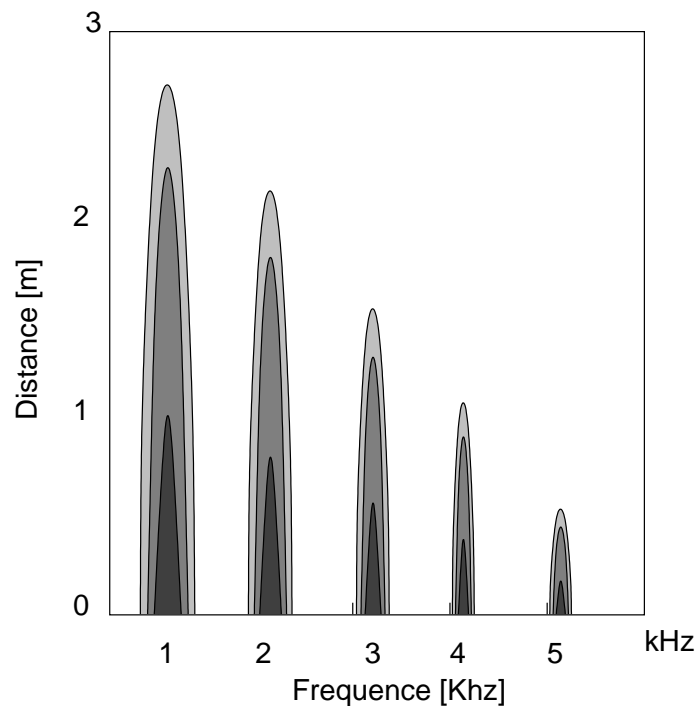


FIG. 5.8 – Evolution spatiale d'un spectre

5.5.2 Analyse Spectrale Fréquence-Nombre d'Onde

La deuxième question que l'on peut se poser sur un écoulement complexe concerne les différentes vitesses de convection et de propagation acoustique. Comment, par exemple, identifier la vitesse de deux ondes acoustiques se propageant en sens opposé malgré la présence instationnaire de grandes structures tourbillonnaires ? L'analyse fréquence-nombre d'onde introduite par Capon (20) fonctionne selon un principe proche de la PIV (Particle Image Velocimetry) : si deux signaux temporels enregistrés à des endroits différents présentent un état commun décalé en temps, on peut en déduire la vitesse de la structure associée à cet état. En PIV, cet état commun est la présence d'un traceur (particule). Dans l'analyse fréquence/nombre d'onde, c'est la modulation de fréquence, visible dans l'espace de Fourier et révélée par la magnitude de l'interspectre S_{FG} entre deux signaux F et G . Le décalage en temps est contenu dans la phase de S_{FG} .

Mathématiquement, l'interspectre S_{FG} est le produit de la transformée de Fourier (abrégée TF, notée $\hat{\cdot}$) du signal temporel F par le conjugué de la TF du signal temporel G :

$$S_{FG}(\vec{x}_F, \vec{x}_G, f) = \hat{F}(\vec{x}_F, f) \hat{G}^*(\vec{x}_G, f) \quad (5.11)$$

Ici, f est la fréquence. On obtient ainsi la matrice des interspectres $[\psi(f)]_{jl}$ obtenus sur une ligne de n sondes $X_{i=1,n}$ placées en (\vec{x}_j, \vec{x}_l) dans la direction de développement de l'écoulement :

$$[\psi(f)]_{jl} = S_{F_j, F_l}(\vec{x}_j, \vec{x}_l, f) \quad (5.12)$$

Le vecteur des nombres d'ondes k associés à chaque sonde et noté $[\vec{\eta}(k)]_j = e^{ikx_j}$: On introduit l'écart spatial entre les sondes en multipliant la matrice $[\psi(f)]$ à gauche et à droite par le vecteur des nombres d'ondes $[\vec{\eta}(k)]$. On notera en particulier que les sondes peuvent être irrégulièrement réparties :

$$FNO(f, k) = \vec{\eta}^T(k) \psi(f) \vec{\eta}(k) = \sum_{j,l} \psi(f)_{j,l} e^{ikx_j} e^{ikx_l} \quad (5.13)$$

Plus localement, l'identification d'une même sinusoïde (fréquence f , amplitude β , vitesse \vec{u}) de la forme $\beta \cos(2\pi f(x/u - t))$ dans les signaux issus d'un doublet de sondes séparés de la distance Δx , conduit à l'Eq. 5.14, qui fait intervenir u_x , projection de \vec{u} sur le support de Δx dans la direction orthogonale de propagation. Si l'onde de vitesse u se propage dans une direction faisant un angle α par rapport à la ligne de sondes, alors $u_x = u/\cos(\alpha)$, cf. Fig. 5.9.

$$\beta \cos\left(2\pi f \left(\frac{x + \Delta x}{u_x} - t\right)\right) = \beta \cos\left(2\pi f \left(\frac{x}{u_x} - t\right) + \Delta\phi\right) \quad (5.14)$$

Dans cette expression, $\Delta\phi$ représente le décalage en temps. Par définition $\Delta\phi = 2\pi f \Delta x / u_x$, soit :

$$u_x = \frac{2\pi f}{k} \quad (5.15)$$

où $k = \Delta\phi / \Delta x$. Afin d'éviter le phénomène de repliement, le nombre d'onde est limité à $2\pi / 2\Delta x$. La résolution en fréquence f_{res} est imposée par le nombre d'enregistrements n_{rec} et le pas de temps Δt selon l'Eq. 5.16, et se ramène à la moitié de l'inverse de la durée d'enregistrement t_{rec} .

$$f_{res} = \frac{f_{Nyquist}}{n_{rec}} = \frac{1}{2 * n_{rec} \Delta t} = 0.5 / t_{rec} \quad (5.16)$$

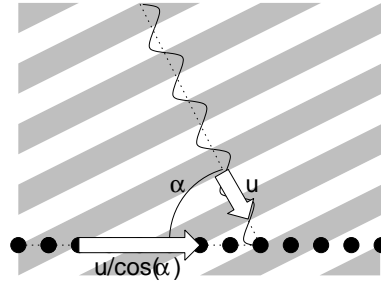


FIG. 5.9 – Onde sinusoïdale de vitesse u traversant une ligne de sondes avec un angle de déviation α .

Ainsi, la vitesse minimale observable u_{min} sur un domaine fréquentiel $[f_{res}, Nf_{res}]$ (N de l'ordre de 100) est donnée par l'Eq. 5.17

$$u_{min} = \frac{N\Delta x}{t_{rec}} \quad (5.17)$$

La vitesse minimale observable impose le temps de simulation et l'espacement des sondes. Par ailleurs, Nf_{res} doit être dans le domaine fréquentiel résolu, imposant $\Delta t < 1/(Nf_{res})$. Le choix de ces deux paramètres doit se faire avant de réaliser la simulation.

La Fig. 5.10 donne un exemple de résultat typique de l'analyse fréquence-nombre d'onde. On y voit des structures appartenant à la gamme de fréquences $[0, 3000Hz]$ convectées parallèlement aux sondes à la vitesse de $2\pi 5000/314 = 100m/s$. De la même manière, une onde à $1kHz$ et ses harmoniques à 2, 3, 4, $5kHz$ se propagent vers l'amont et l'aval aux vitesses $u \pm c = 100 \pm 360m/s$. Il est intéressant de noter que les structures de même fréquence (par ex. $1kHz$) se propageant en des sens opposés ont pu être distinguées. De plus, la présence de la structure advectée sur la gamme $[0, 3000Hz]$ ne cache pas les structures à 1, 2 et $3kHz$. L'analyse fréquence nombre d'onde décompose ainsi les signaux temporels par rapport à leur vitesse de convection. Autrement dit, cet outil permet d'identifier les vitesses de propagation de différentes structures, même si elles correspondent à une même fréquence. La direction de la ligne de sondes joue un rôle crucial.

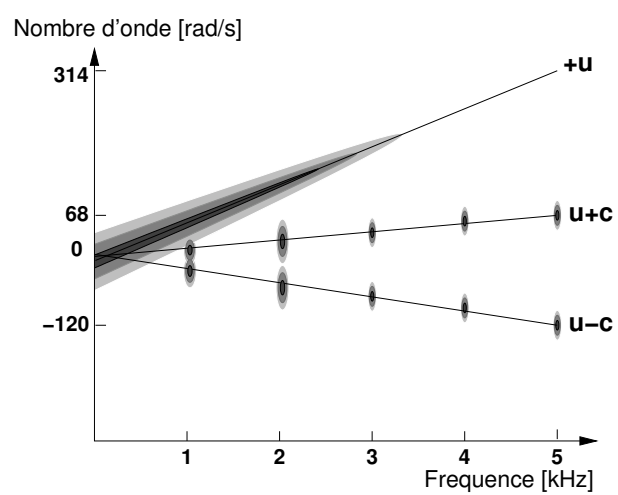


FIG. 5.10 – Analyse fréquence nombre d'onde

5.5.3 Bicohérence

Les simulations aux grandes échelles peuvent reproduire des processus complexes d'interactions non linéaires entre les phénomènes dynamiques de différentes fréquences. La bicohérence permet d'observer en détail ces processus. D'un point de vue spectral, deux fréquences sources f_1 et f_2 peuvent se combiner non linéairement pour alimenter les fréquences cibles $f_1 + f_2$ et $f_1 - f_2$. L'interspectre du produit de deux sondes sources $\hat{F}(f_1)\hat{G}(f_2)$ et du signal d'une sonde cible $\hat{H}(f_1 + f_2)$ met statistiquement en évidence ces interactions. L'Eq. 5.18 donne l'estimateur de bicohérence complet. Le numérateur comporte l'interspectre entre le produit des deux TF sources $\hat{F}(f_1)\hat{G}(f_2)$ multiplié par la TF cible $\hat{H}^*(f_1 + f_2)$ conjuguée. Cet interspectre est moyenné sur tous les triplets de sondes, une opération notée $\langle \rangle$. L'opération de moyenne conserve la norme du numérateur si son argument, i.e. le déphasage source/cible, est fortement corrélé. On garde ensuite le module du numérateur, opération notée $||$. Enfin, on effectue une normalisation d'après la moyenne du signal source et du signal cible, visibles au dénominateur.

$$Bic_{FGH}^2(f_1, f_2) = \frac{\left| \langle \hat{F}(f_1)\hat{G}(f_2)\hat{H}^*(f_1 + f_2) \rangle \right|^2}{\left\langle |\hat{F}(f_1)\hat{G}(f_2)|^2 \right\rangle \left\langle |\hat{H}(f_1 + f_2)|^2 \right\rangle} \quad (5.18)$$

L'estimateur de bicohérence est non nul si une interaction entre deux signaux sources est observée sur le signal cible, avec un déphasage constant. La normalisation permet d'observer les interactions entre des fréquences d'amplitude très variées. Par contre, l'estimateur dégénère en forme indéterminée lorsque des fréquences observées f_1 et f_2 ont des amplitudes nulles.

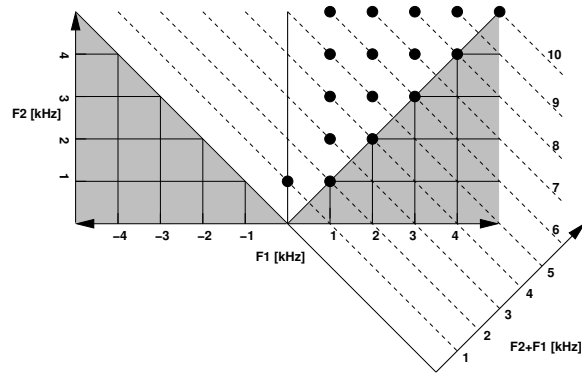
La bicohérence se représente sur une carte à deux dimensions f_1 et f_2 . Une troisième dimension implicite est présente : $f_1 + f_2$. Les interactions peuvent concerner des additions ($100 + 10 = 110Hz$) ou des soustractions ($100 - 10 = 90Hz$) dans l'espace fréquentiel. C'est pourquoi, sur un domaine fréquentiel donné $[0 - 1000Hz]$, le domaine d'évaluation de la bicohérence s'étend sur des valeurs fréquentielles algébriques : $[-1000Hz, 1000Hz] \times [-1000Hz, 1000Hz]$. On notera que la fréquence nulle correspond à la composante stationnaire, c.a.d. l'écoulement moyen. Ce domaine contient cependant deux fois les mêmes informations car $Bic(f_1, f_2) = Bic(-f_1, -f_2)$. Les positions telles que $f_1 + f_2 < 0$ sont donc ignorées. Par ailleurs, si les signaux sources f_1 et f_2 sont interchangeables, on a $Bic(f_1, f_2) = Bic(f_2, f_1)$, ce qui annule la pertinence du domaine $f_2 < f_1$.

Trois cartes de bicohérences schématiques permettent d'illustrer le propos :

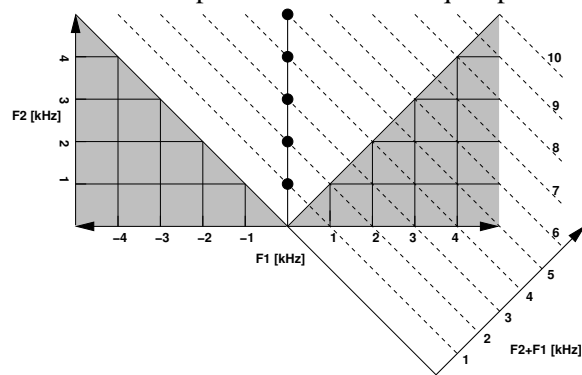
- La fig. 5.11.a montre plusieurs interactions (symbole \bullet) très localisées. La première ($0Hz + 1kHz \rightarrow 1kHz$) traduit l'alimentation d'un mode à $1kHz$ par l'écoulement moyen ($0Hz$). Ce mode fondamental interagit avec lui même pour créer le premier mode harmonique à $2kHz$ ($1kHz + 1kHz \rightarrow 2kHz$). Le deuxième mode harmonique est ensuite nourri par le fondamental et son premier harmonique ($1kHz + 2kHz \rightarrow 3kHz$), et ainsi de suite. Finalement, la bicohérence montre comment un mode interagissant non linéairement avec lui même peut créer toute une famille d'harmoniques.
- La fig. 5.11.b correspond au cas opposé. Un fondamental et ses harmoniques (1,2,3,4,5 kHz) sont alimentés par l'écoulement moyen. Comparé à cet apport d'énergie, il n'y a pas d'interaction non linéaire entre les modes.
- La fig. 5.11.c montre trois lignes d'interactions qui alimentent chacune un mode : 1, 3 et $9kHz$. Une ligne ininterrompue implique l'excitation du mode par l'ensemble du spectre. Dans ce

cas particulier, trois modes particulièrement réceptifs reçoivent de l'énergie par un signal au spectre plein (bruit blanc, dirac).

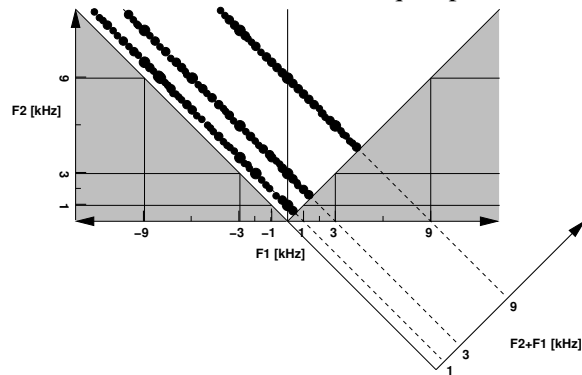
Une carte de bicohérence révèle le scénario des interactions dans son intégralité. Elle affirme ou exclut les liens entre deux phénomènes, et détermine le sens du transfert d'énergie. En un mot, elle sert de "test de parternité" parmi les modes présents.



a) Création d'un fondamental et sa réplique en harmoniques par interactions non-linéaires



b) Création d'un fondamental et ses harmoniques par l'écoulement moyen



c) Excitation de trois modes particuliers par l'ensemble du spectre (par ex. un bruit blanc)

FIG. 5.11 – Cartes de bicohérence

Le résultat de l'estimateur dépend avant tout des données qu'il traite. C'est pourquoi l'utilisation de la bicohérence se fait par rapport à une question très précise. Par exemple : "Dans cette chambre, est-ce le mode tournant acoustique à 400Hz ou le tourbillon de jet PVC de même fréquence, ou encore une combinaison des deux qui forment des fluctuations à 800Hz en sortie ?". La question impose la localisation des données sources. La Fig. 5.12 montre schématiquement où placer les sondes avec les points F pour capter l'injection, G pour le mode tournant et H pour la sortie. Une fois les signaux obtenus, on réalise une bicohérence entre le jet et lui même (FFH , Fig. 5.12.a), une bicohérence entre le jet et le mode tournant (FGH , Fig. 5.12.b) et une bicohérence entre le mode tournant et lui même (GGH , Fig. 5.12.c). On notera que dans le cas b), les sources F et G n'étant pas interchangeables, il est nécessaire de représenter $F2 < F1$.

L'interaction ① du cas a) signifie que le jet alimente seul le mode à 800Hz en sortie. L'interaction ② du cas b) révèle que c'est la conjonction entre jet et mode tournant qui alimente la sortie. L'interaction ③ du cas c) signifie enfin que le mode tournant sollicite seul la sortie. Par conséquent, si l'analyse des trois bicohérences révèle que l'on a l'interaction ① mais pas ② et ③, alors on en conclut que le mode de sortie est du aux interactions non-linéaires du jet d'injection avec lui-même. Le mode tournant ne joue aucun rôle direct (③) ou indirect (②). Cet exemple montre comment il est possible de prouver qu'un phénomène dynamique est à la source d'une instabilité à l'intérieur s'une simulation numérique. La simulation des grandes échelles devient grâce à ce type d'exploitation un outil d'investigation actif.

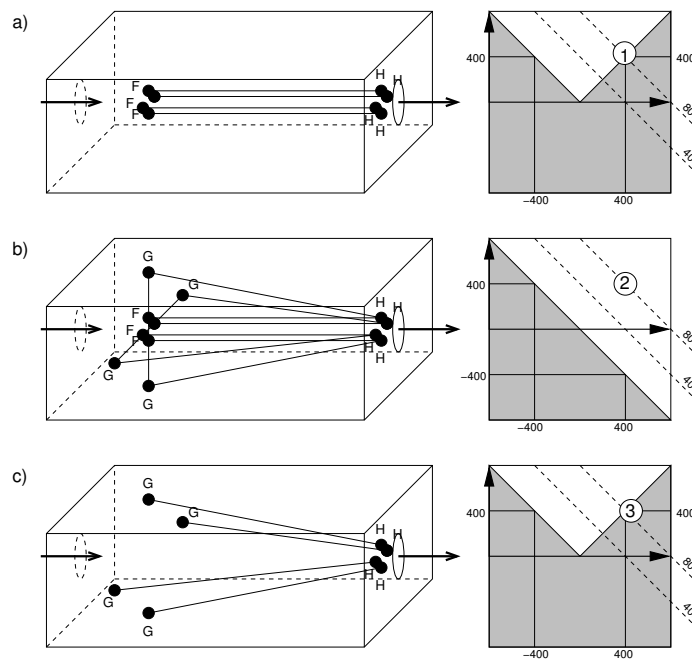


FIG. 5.12 – Choix géométrique de données sources F et G et cibles H

5.5.4 Application à la couche de mélange de Brown et Roshko

Il est indispensable de présenter ces outils dans le cadre de l'interprétation d'un écoulement fluide réel. En revenant sur l'exemple de la couche de mélange compressible observée par Brown et Roshko, ces derniers ont fourni dans leur article les trajectoires des tourbillons enregistrées par une caméra rapide à 8000 images par seconde. Ces données sont reproduites en Fig. 5.13. Le scénario que nous prendrons s'inspire de cette figure : l'écoulement moyen alimente une première classe de tourbillons situés entre 1cm et 5cm de distance aval. Cette première classe en génère une deuxième, avec des tourbillons deux fois plus gros entre 3cm et 5cm de distance aval. Cette classe génère à son tour une troisième classe de tourbillons encore deux fois plus gros, à partir de 2.5cm de distance aval. Toutes les classes de tourbillons sont convectées à une vitesse commune de 5.618m/s. Les fréquences temporelles associées aux classes I, II et III sont respectivement 1392Hz, 691Hz et 346Hz. Ce scénario contient des informations sur la génération de plusieurs classes de tourbillons, sur leur taille et sur leur transport.

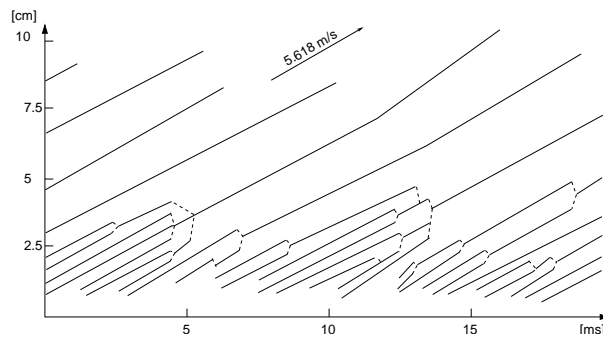


FIG. 5.13 – Trajectoire des tourbillons observés. Pression 7 atm., Hélium à 10.6 m/s, Azote à 4 m/s, $\rho_{N_2}/\rho_{He} = 7$.

Commençons par la position des différentes structures. La Fig. 5.14 montre ce que donnerait une évolution spatiale longitudinale de spectre pour la couche de mélange compressible, conformément au scénario que nous avons retenu. Elle schématise le résultat obtenu d'après les signaux de sondes placées longitudinalement dans la couche de mélange. Il est aisé d'en déduire les localisations spatiales et fréquentielles de chaque mode :

- Mode I, Fréquence 1392Hz , Position $[1\text{cm}, 5\text{cm}]$
- Mode II, Fréquence 691Hz , Position $[2.5\text{cm}, 5\text{cm}]$
- Mode III, Fréquence 346Hz , Position $[2.5\text{cm}, +\infty]$

Cela permet de délimiter la zone $[2.5\text{cm}, 5\text{cm}]$, qui pourrait être le théâtre d'échanges énergétiques entre les différents modes. C'est pourquoi l'analyse par bicohérence sera alimentée par des signaux provenant exclusivement de cette zone privilégiée.

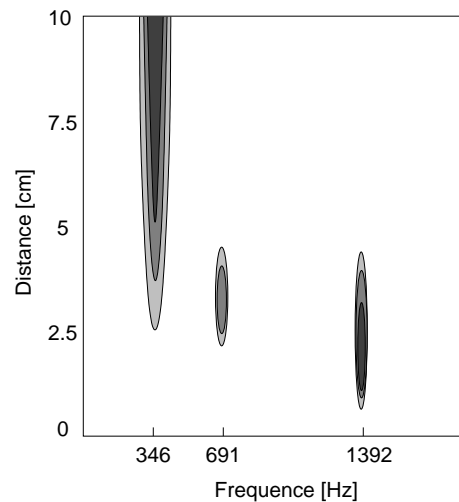


Fig. 5.14 – Schéma de l'évolution spatiale de spectre pour la couche mélange de Brown et Roshko

Poursuivons par la vitesse de déplacement des différentes structures. La Fig. 5.15 montre ce que donnerait une analyse fréquence - nombre d'onde pour la couche de mélange compressible, conformément au scénario que nous avons retenu. Cette analyse commence par le dimensionnement de la ligne de sondes à placer dans l'écoulement. La vitesse de convection minimale est $u = 4\text{m/s}$. Pour la trouver sur une fréquence de 2000Hz , il faut $3141,6\text{rad/s}$ de nombre d'onde maximal. On note au passage qu'à 2000Hz , 5.618m/s correspondent à 2236.8m/s , et 10.6m/s correspondent à 1185m/s . Le nombre d'onde maximal impose de disposer des sondes espacées de $1\text{ }10^{-3}\text{mm}$. Le résultat de l'analyse est schématisé sur la Fig. 5.15. Trois vitesses de convections se détachent nettement. Tout d'abord, les trois classes de tourbillons sont convectées à la même vitesse, 5.6m/s . Ensuite, deux vitesses de convection sont visibles sur toute la gamme des fréquences, à 4m/s et 10.6m/s , révélées par les inévitables perturbations que contiennent les flux d'azote et d'hélium. L'analyse fréquence-nombre d'onde a mis en évidence la vitesse de convection très particulière de toutes les structures générées par la couche de mélange. Malgré leurs différences de taille, des tourbillons issus du cisaillement ont la même vitesse de déplacement.

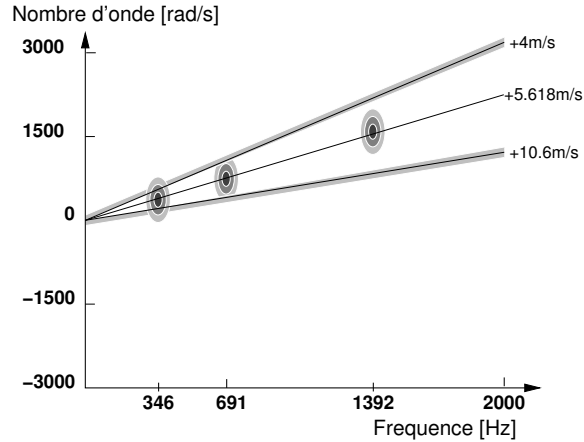


FIG. 5.15 – Schéma de l'analyse fréquence - nombre d'onde associée à la couche mélange de Brown et Roshko

Enfin, l'analyse par bicohérence est illustrée. On retrouve dans la Fig. 5.16 les trois fréquences 346, 691, 1382Hz correspondant aux trois catégories identifiées par l'évolution spatiale de spectre en Fig. 5.8. Pour plus de lisibilité, l'axe des fréquences cibles $f_1 + f_2$ est également tracé sur la figure. Chaque lieu de bicohérence non nulle contribue au mode noté sur cet axe. Les structures de la classe I présentent une interaction significative avec l'écoulement moyen : ① $\equiv 1392 + 0 \rightarrow 1392Hz$. Ensuite la classe II interagit avec la classe I : ② $\equiv 1392 - 691 \rightarrow 691Hz$. Enfin la classe III interagit avec la classe II : ③ $\equiv 691 - 346 \rightarrow 346Hz$. Cet outil met en évidence la cascade énergétique du scénario retenu : écoulement moyen \rightarrow Mode I \rightarrow Mode II \rightarrow Mode III. Le scénario de transfert énergétique apparaît sur l'analyse par bicohérence. Si il y avait eu une alimentation de tous les tourbillons par l'écoulement moyen au lieu de la cascade, les interactions ② et ③ auraient été absentes. Par contre, on aurait trouvé les interactions $(691 + 0 \rightarrow 691Hz)$ et $(346 + 0 \rightarrow 346Hz)$. La bicohérence est donc un outil puissant de compréhension des écoulements.

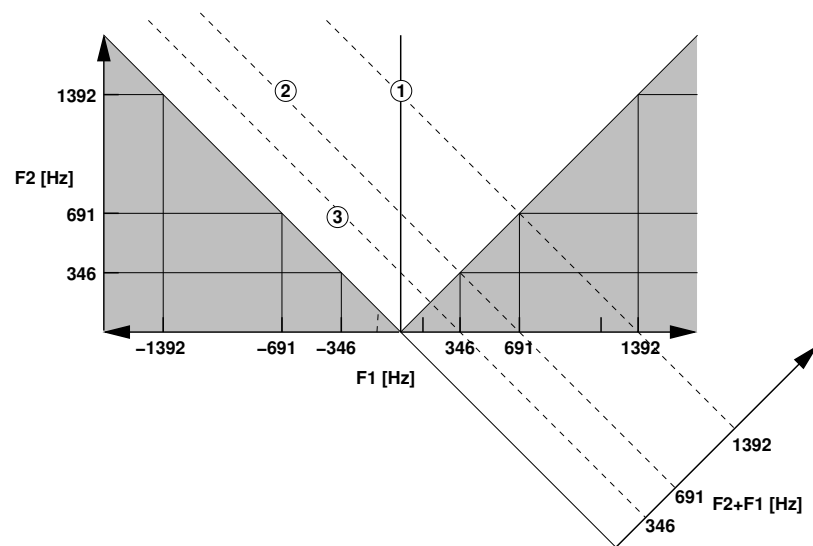


FIG. 5.16 – Bicohérence associée à la couche mélange de Brown et Roshko

5.6 Simulations

Les écoulements supersoniques sont difficiles à aborder par la simulation des grandes échelles, car on y rencontre des nombres de Reynolds très élevés. Dans ce cas, seule une petite partie du spectre de la turbulence est calculée. Cependant, l'article soumis à *Physics of Fluids* et reproduit ici montre que pour une simulation de cette courte gamme de Reynolds, une grande quantité d'information est cependant disponible. Pour mieux illustrer la difficulté du problème, une l'étude dimensionnelle en termes de nombres de Reynolds est présentée ci-dessous.

5.6.1 Analyse dimensionnelle

Le nombre de Reynolds compare l'inertie et la viscosité. Plusieurs grandeurs de référence sont possibles. $Re = UD/\nu$ caractérise un jet complet de diamètre D , de vitesse U et de viscosité ν . On peut ensuite introduire pour chaque échelle r un Reynolds turbulent $Re_t(r) = u'(r)r/\nu$. Dans une turbulence homogène isotrope, le flux d'énergie des grandes vers les petites échelles est constant dans la zone inertielle. L'énergie cinétique est dissipée aux petites échelles. La dissipation $\epsilon(r)$ à une échelle de taille caractéristique r est le ratio de l'énergie cinétique $u'^2(r)$ divisée par l'échelle de temps $r/u'(r)$: $\epsilon = u'^3(r)/r$. L'échelle de Kolmogorov η est la plus petite de l'écoulement. Elle correspond à l'équilibre entre inertie et dissipation visqueuse, i.e. $Re_t(\eta) = 1$:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (5.19)$$

Sachant que l'échelle intégrale l_t subit une dissipation identique, on a $l_t = u'^3/\epsilon$. Il vient donc la relation entre les échelles de Kolmogorov η et intégrale l_t :

$$\frac{l_t}{\eta} = \frac{u'^3/\epsilon}{(\nu^3/\epsilon)^{1/4}} = Re_t^{3/4} \quad (5.20)$$

Les résultats de l'analyse dimensionnelle pour les cas des jets supersoniques traités dans ce chapitre sont reportés dans le tableau 5.1. Les vitesses u' et tailles l_t caractéristiques sont estimées respectivement à 5% U et 30% D . L'échelle de Kolmogorov est de l'ordre de $6\mu\text{m}$ pour les deux cas. Les

Grandeur	Jet de Chuech	Jet de Seiner
$U[\text{m/s}]$	360	720
$u'[\text{m/s}]$	18 (5% U)	36 (5% U)
$D[\text{m}]$	$9.5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$
$l_t[\text{m}]$	$2.85 \cdot 10^{-3}$ (30% D)	$1.5 \cdot 10^{-2}$ (30% D)
$\eta[\text{m}]$	$6.34 \cdot 10^{-6}$	$5.71 \cdot 10^{-6}$
Re	229 530	2 416 107
$Re_t(l_t)$	3 443	36 241

Tab. 5.1 – Analyse dimensionnelle des jets de Chuech et Seiner

Reynolds Re en jeu sont très élevés, donc les grandes échelles de cet écoulement ne sont pas affectés

par la dissipation visqueuse. La turbulence du jet de Seiner se développe sur une décade de plus que celle du jet de Chuech. Les études quantitatives se feront de préférence sur ce dernier.

Concernant la compressibilité, le Mach convectif doit se calculer en tenant compte de l'accélération du fluide due à la pression d'injection, approchée par $\Delta U = \sqrt{P/\rho}$. On trouve ainsi les valeurs 0.679 et 1.39 pour les Mach convectifs respectifs des jet de Chuech et Seiner, ce qui signifie que les effets de compressibilité sont présents dans la turbulence, tout particulièrement dans le jet de Seiner. Ainsi, les deux configurations retenues sont des jets fortement turbulents et compressibles.

5.6.2 Echelle de coupure

La simulation des grandes échelles filtre les variables à une échelle de coupure. En dessous de cette échelle, les structures sont modélisées. Au-dessus, elles sont résolues. L'étude dimensionnelle de la turbulence permet d'estimer *a priori* la qualité globale de la SGE. La Fig. 5.17 trace dans un graphique Log-Log le Reynolds turbulent $Re_t(r)$ en fonction de l'échelle pour les deux jets. La borne inférieure de la gamme des Reynolds est fixée par l'échelle de Kolmogorov η . La borne supérieure est fixée par la longueur intégrale l_t . Les échelles de coupure de 0.5mm (Chuech) et 2.5mm partagent les gammes de Reynolds en parties résolues (blanches) et modélisées (grises). Elles correspondent à la taille de résolution du jet sur le maillage, prise ici à un vingtième du diamètre. On voit sur la Fig. 5.17 que dans chaque jet seule une décade est résolue. Avec la puissance actuelle des calculateurs, il est possible de baisser la coupure d'un facteur compris entre 2 et 10. Nous nous limitons ici à des simulations peu résolues, destinées à tester l'approche de la simulation des grandes échelles.

5.6.3 Publication

L'article reproduit ci-après est en cours de soumission au journal *Physics of fluids*. Il illustre l'application de la viscosité artificielle de Von Neumann-Richtmyer à un jet supersonique en SGE et les outils d'analyse spectrale introduits précédemment.

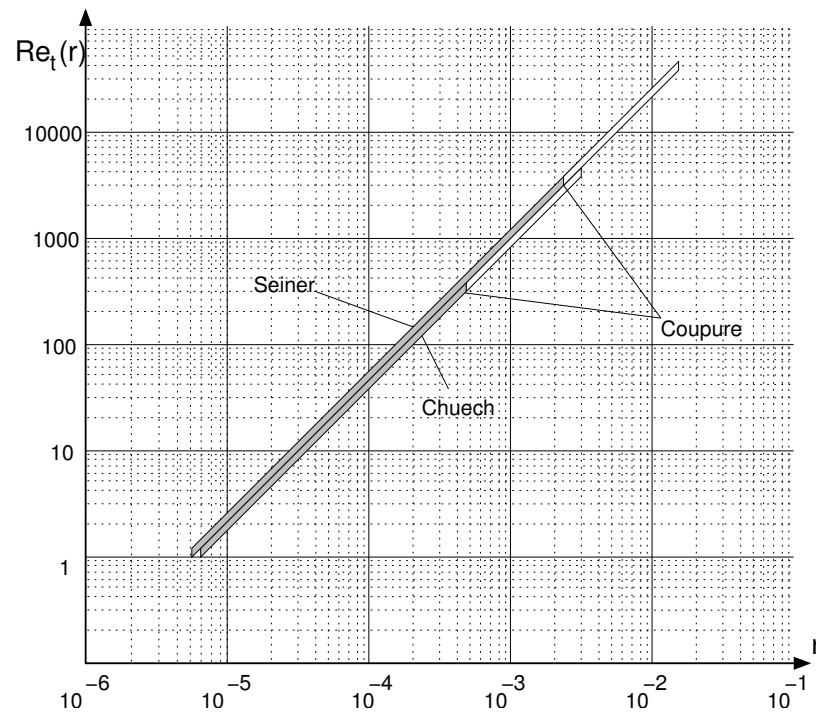


FIG. 5.17 – Gammes de Reynolds modélisées et résolues lors de la simulation des jets de Chuech et de Seiner.

LARGE EDDY SIMULATION OF A SUPERSONIC UNDEREXPANDED JET

A. Dauplain, B. Cuenot, P. Sagaut

CERFACS, 42 ave. G. Coriolis 31 057 Toulouse Cedex 1, France

T.J. Poinsot

IMFT, 1 Allée du Professeur Camille Soula 31 400 Toulouse, France

Keywords: Large Eddy Simulations, Supersonic, Underexpanded Jets

Abstract. *Weakly underexpanded jets have been investigated numerically, with a compressible explicit Large Eddy Simulation code. The study is mainly focused on the near injection zone. The LES approach gives a correct description of the flow compared to experimental results. Three types of injections has been applied to the flow: laminar, uncorrelated white noise and correlated modes. Each injection type has an impact on the shockwaves, giving insight on their acoustic activity. Spectral analysis enhances the frequency response of the flow to the pattern injected. Bicoherence statistics proves the non-linear production of harmonics. Spectral tracking of coherent structure showed the strong penetration of upstream oblique waves in the supersonic core of the jet. This work points out the critical impact of turbulence injection in such jets, in particular concerning the unsteady behaviour of the shock structure.*

I. INTRODUCTION

A. Context

An underexpanded jet is the flow resulting from the discharge of a high pressure tank. In this flow, the gases are expanded to an intermediary low pressure state, then recompressed to the ambient state. This flow is encountered in various applications. In fundamental physics, particle accelerators use strongly underexpanded jets. Indeed, a small amount of particles must be injected with the same velocity, the same direction. These requirements are obtained with the intermediary low pressure state of underexpanded jets, providing a rarefied gas with a good homogeneity of velocities [22].

In aeronautical turbines, particular care is taken of the fatigue of engines. After years of operations, some cracks appear in the walls of the engine. This concerns in particular high pressure compressor stages, combustion chamber, and high pressure turbine. Because of the pressure gap between the two sides of the wall, possible flow leaks become underexpanded jets. Like a high pressure water jet can cut plastic sheets, the resulting jets can destroy devices nearby. It is a matter of safety, and the operation or the control of the engine can be altered [15].

In rocket launchers, cryotechnic igniters starts the combustion of second stage engines (e.g. Vinci) with the auto-ignition of two reactants. Fuel and oxidizer, injected in near vacuum conditions, are mixed in the interaction of two underexpanded jets. These configurations are focused on the near-injection region, in the first diameters of the jet development.

B. Basic physics of underexpanded jets

Underexpanded jets are generated by an injector fed with a gas at a high pressure compared to the ambient pressure. After injection, the fluid is expanded through a complex pattern of expansion/recompression zones, The Nozzle Pressure Ratio (NPR), i.e. the static pressure at the nozzle divided by the ambient pressure, and the Mach number at the injection are both essential parameters. For this study, we will consider only sonic jets, i.e. without diverging nozzle at the exit.

Fig. 1 shows a typical sonic underexpanded jet at NPR 4.7 [34], with a Schlieren visualization done at the Institute of Theoretical and Applied Mechanics (ITAM) of Novosibirsk. A first cell of expansion is clearly visible, but the flow is blurred downstream by the growth of turbulent motion. This picture illustrates distinctly the struggle between inviscid structures and turbulence.

In Case of sonic jets with a NPR slightly superior to unity, the jet is said weakly underexpanded (Fig. 2, $NPR \approx 1.2$), showing typical series of several expansion/compression cells often referred as 'diamond shock pattern'. For higher pressure ratios, the cells become barrel shaped [5, 28] because of the reflection of the expansion fan on the slip line (Fig. 2, $NPR \approx 3$) [4]. These structures can be commonly observed on the exhaust of jet engines, especially in afterburner regime. The strongest compression zones lie in the downstream tip of compression bundles. For weakly

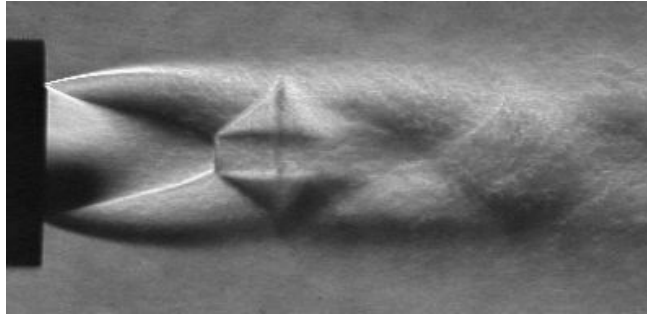


FIG. 1: 1/30 sec. Schlieren picture of a sonic jet, $NPR=4.7$ (Courtesy of ITAM, Novosibirsk [34])

underexpanded jet, these discontinuities are located at the end of each 'barrel', and the extremum of the compression occurs at the downstream rim of the barrel.

For pressure ratios higher than 4, the jet is said highly underexpanded (Fig. 2, $NPR \approx 10$), and presents an intense expansion zone limited by a barrel shaped weak shock, itself ended by a strong disc-shaped shock [6, 9, 16]. This shock pattern, sometimes referred to the 'Mach Bottle' is the inner side of the compression zone surrounding the jet. A thin and intense mixing layer makes the outer side of the unique expansion cell. Turbulence is created in a convective curved zone through the development of longitudinal vortices by the Goertler instability [35]. For NPR rising from 2 to 4 [7], the barrels become thicker, the disc shaped shocks appear at their bottom, and their number decreases to one.

These flows contain strong discontinuities with huge pressure jumps in the shocks, and 'slip lines', i.e. curved and narrow mixing layers, between supersonic flow and fluid at rest. The balance between the mixing effect of turbulence and the inviscid segregated flow controls the development of the plume. The inviscid compressible flow near the injection becomes downstream a nearly incompressible viscous flow. Such jets generate strong acoustic noise near the injection. The Screech phenomenon, first observed by Powell [24] corresponds to a coupling between structures convected downstream by the jet and acoustics travelling upstream outside of the jet [25]. This particular feature, critical for the acoustic fatigue in high speed aircraft, has been experimentally [21] and numerically [19] analysed.

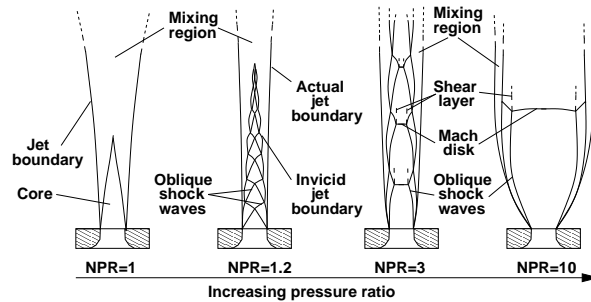


FIG. 2: Evolution of under-expanded jets plumes for an increasing pressure ratio

Supersonic jets have been numerically investigated very early in the 1950s with the Method of Characteristics [4, 9]. This Euler-based method gave the inviscid parameters of plumes such as the length and diameter of the barrel shock. Finite differences schemes with shock capturing techniques allowed to capture stationary viscous flow properties [1, 7, 8], with good matching of the plume development compared to experiments. Recently, Large Eddy Simulation gave more quantitative results on noise generated by adapted and weakly under-expanded supersonic jets [2]. The impact

of turbulence is difficult to take into account in RANS as no turbulent model is available for the curved supersonic mixing layer.

The screech phenomenon is commonly simulated with Unsteady RANS approaches [29] associated to specific turbulent models [32], bidimensional [12, 14, 18] and three dimensional LES [13] and finally DNS [20] in a simplified framework.

LES is usually applied to supersonic flows through a Riemann Solver Approach. The numerical schemes involved (MUSCL, WENO) are accurate but CPU-time consuming, and often limit simulations to small and/or structured grids. The Flux Corrected Transport (FCT) approach uses compact centered schemes and artificial viscosity. This last strategy is rarely encountered in the bibliography, but shows some advantages. Compact centered schemes are compatible with unstructured grids, which is useful in complex geometries. Riemann solvers approach is built upon a gas law, and assumes that the fluid is non reactive. FCT approach avoid these hypothesis, allowing easier developments towards combustion and real gas applications. In this frame, this paper presents the results of a FCT approach on two under-expanded jets. The analysis of steady and unsteady features resolved shows the informations available through these computations.

C. Organization of the paper

The paper is organized as follows. Sec.II presents the numerical method, clarifying the advantages and drawbacks of the explicit fully compressible approach. The simulations are validated in Sec. III. Calculated profiles of mean and fluctuating values calculated are compared to experimental profiles of Seiner [28] and Chuech [5] on Pressure and Velocity field. Sec. IV shows observations of a fluctuating diamond-shock pattern. It starts with the temporal evolution of the profile of pressure on jet axis. The localization of acoustic activity for three different excitations of the jets follows, preparing the spectral part of the paper. Then, Sec. V gathers the acoustic analysis of the jet. It begins with the spatial evolution of frequency spectrum with downstream distance. A bicoherence analysis follows, proving any non linear coupling between main modes. In the end, a coherent structure tracking isolates the main acoustic fluxes and their direction of propagation.

II. NUMERICAL METHODS

A. Governing equations

LES involves the spatial filtering operation:

$$\overline{f(x,t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x',t)\mathcal{G}(x',x)dx' \quad (1)$$

where \mathcal{G} denotes the filter function and $\overline{f(x,t)}$ is the filtered value of the variable $f(x,t)$. The filter function is defined as $\mathcal{G}(x',x) \equiv g(x' - x)$ with properties $g(x) = g(-x)$ and $\int_{-\infty}^{+\infty} g(x)dx = 1$. In the mathematical description of compressible turbulent flows, the primary variables are the density $\rho(x,t)$, the velocity vector $u_i(x,t)$ and the total energy $E(x,t)$. The application of the filtering operation to the instantaneous transport equations yields [23].

$$\begin{aligned} \text{a) } & \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \\ \text{b) } & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{\tau_{jk}}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{T}_{ij}) \\ \text{c) } & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{E}) = -\frac{\partial \bar{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{(\tau_{ij} - p \delta_{ij}) u_i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Q}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{T}_{ij} \tilde{u}_i) \end{aligned} \quad (2)$$

In 2, one uses the Favre-filtered variable [10] $\tilde{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$. The fluid follows the ideal gas law $p = \rho RT$ and $e_s = C_v T$ where T stands for temperature. The tensors of viscosity and Von Neumann-Richtmyer artificial viscosity, and the heat diffusion vector read respectively

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \\ q_i &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (3)$$

In 3, μ is the fluid viscosity following Sutherland's law and λ is the heat diffusion coefficient following Fourier's law. The objective of LES is to compute the largest structures of the flow (these structures are typically larger

than the computational mesh size), whereas the effects of the smaller scales are modelled. This scale separation is obtained through the filtering operation 1, and the unknowns $\tilde{T}_{ij}, \tilde{Q}_i$ correspond to the so-called subgrid scale (SGS) (c.f. [11, 26]). The unresolved SGS stress tensor \tilde{T}_{ij} requires a sub-grid turbulence model. Introducing the concept of SGS turbulent viscosity most models read [30]:

$$\tilde{T}_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -2\nu_t \tilde{S}_{ij} + \frac{1}{3} \tilde{T}_{ll} \delta_{ij} \quad (4)$$

with

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (5)$$

In equations 4 and 5, \tilde{S}_{ij} is the resolved strain tensor and ν_t the SGS turbulent viscosity. Dimensional analysis yields $\nu_t \propto l_{SGS} \times \sqrt{q_{SGS}}$, where l_{SGS} is the length scale of the unresolved motion and $\sqrt{q_{SGS}}$ its velocity scale. In the Smagorinsky model [30] used here, the expression of ν_t follows:

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (6)$$

In 6, Δ denotes the filter characteristic length and is approximated by the cubic root of the cell volume, and $C_S = (0.1 - 0.18)$ is the model constant. The SGS energy flux $\tilde{Q}_i = C_p (T u_i - \tilde{T} \tilde{u}_i)$ is modelled by the use of the eddy diffusivity concept with a turbulent Prandtl number $Pr_t = 0.9$, so that $\kappa_t = \nu_t C_p / Pr_t$ and

$$\tilde{Q}_i = -\kappa_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (7)$$

Note that \tilde{T} is the modified filtered temperature and satisfies the modeled filtered state equation $\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T}$.

The description does not intend to be comprehensive and for further information the reader is referred to [26]. The numerical implementation of LES in the computer code AVBP is also given. Further information about AVBP is found in [27].

B. General description of the code

The LES code (AVBP) solves the LES transport equations on structured, unstructured or hybrids grids (cf: <http://www.cerfacs.fr>). The numerical approach is based on finite volumes schemes using the cell-vertex method [27] and offers third-order spatial and temporal accuracies. Variations in the filter sizes due to non-uniform meshes are not directly accounted for in the LES models. Changes in the cell topologies and sizes are only accounted for through the use of the local cell volume, i.e. $\Delta = V_{cell}^{1/3}$. Grid refinement needs therefore to be carefully controlled for the LES model to operate efficiently. Such effects are beyond of the scope this work although great care has been taken to minimize the consequences on the predictions.

Concerning artificial viscosity aspects, the Jameson formulation, with the second order and fourth order coefficients set respectively to 1/40 and 1/256 is used, triggered on by sensors on strong gradients. The Von Neumann-Richtmyer viscosity [33] is also used to handle shocks. The right hand side of the momentum transport equation receives the term $\partial p_{ij}^{VNR} / \partial x_i$. It performs a local perturbation of the pressure field triggered by the velocity divergence, which thickens shocks. This tensor is expressed as

$$p_{ij}^{VNR} = -\Delta^2 \left| \max_{k=1,n} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} \delta_{kl} \right) \right| \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (8)$$

A dimension analysis of this term shows a negligible effect on acoustic perturbations. Indeed, using subscript $_0$ for reference state, subscript ac for quantities related to acoustics and F for the frequency of acoustic perturbations, the Von Neumann-Richtmyer term related to acoustics sizes:

$$\begin{aligned} [p_{ij}^{VNR}]_{ac} &\approx \rho_0 \Delta^2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{ac}^2 \\ &\approx \frac{\Delta^2}{\rho_0 c_0^2} \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{ac} \\ &\approx \rho_0 c_0^2 \frac{\Delta P_{ac}^2}{(\rho_0 c_0^2)^2} \frac{\Delta^2 F_{ac}^2}{c_0^2} \end{aligned} \quad (9)$$

I
II
III

Term I is the size of Euler terms in Eq. 2.b. For acoustic features, term II is negligible. Hence, the VNR term is negligible as long as term III is lower than unity, i.e. $F < c_0/\Delta$. This last condition is always verified, since the maximal frequency reachable in an explicit code is c_0/Δ .

C. Inlet conditions

The inlet is a Dirichlet supersonic inlet. Three versions are tested. Case 1 is a laminar supersonic inlet. In Case 2, a random noise is added to the velocity at each node. The amplitude of the perturbation is about 5%. In Case 3, several coherent perturbations are added on the velocity field, following the approach of Smirnov [31]. The strength and scale are set assuming an homogeneous isotropic turbulence spectrum. The local amplitude of the coherent perturbations follows approximately the fully developed RMS velocity profile of a turbulent duct. A constant pressure outlet is set downstream with an NSCBC weak formulation allowing small inflows.

The serie of cases investigated begins with the jet described in Chuech [5] ($M_i = 1$; $NPR = 1.2$). Cases 1,2 and 3 are all related to this jet, differing by their respective injection conditions. Case 1 injects a sonic under-expanded laminar, i.e. without any temporal perturbation of the mean profile. In Case 2, the injected velocity receives a perturbation $\delta v(\vec{x}, t)$ of random magnitude and direction. The random step is estimated at each iteration for each node and shows a flat power spectral density. The perturbation is then considered as a white noise spatially and temporally non-correlated. Case 3 uses the turbulence injection previously presented, with the RMS profile on velocity inspired from fully developed flows (FDF) : 5% to 7% from the axis to the rim, with a circumferential layer, $1/10D$ thick, reaching 15% at the rim. Case 4 is the jet studied by Seiner and Norum [28] ($M_i = 1.99$; $NPR = 1.47$), with the same turbulent injection.

Case	M_i	NPR	D	Experiment	Injection	Magnitude of pert. [% of U_i]
1	1	1.2	9.5mm	Chuech [5]	Laminar	-
2	1	1.2	9.5mm	Chuech	White noise	15%
3	1	1.2	9.5mm	Chuech	Turbulent	FDF-like profile
4	1.99	1.47	50mm	Seiner [28]	Turbulent	FDF-like profile

TABLE I: Parameters of the four cases simulated

III. VALIDATIONS

A. Inviscid phenomenas

The diamond shock pattern is a repetition of expansion and compression zones. In the comparison of two similar jets, the small differences on these compressions/expansions accumulate over the downstream distance. Hence the longitudinal pressure profile is a rough test for the validation of simulations.

The experiment of Seiner gave the longitudinal pressure profile of a Mach 1.88 weakly underexpanded jet ($NPR = 1.47$). These conditions give a long diamond shock pattern with ten compression/expansion cells visible down to $x = 25D$. The simulation of this jet is compared to this experimental data. To set up the plot of Fig. 3, a hundred of probes are distributed on the jet axis, for $0 < x < 20D$. No interpolation is used. The mean pressure profile is displayed, with error bars giving the minimum and the maximum pressure recorded at each location.

The cell length observed is $2.5D$ in the simulation, to be compared with $2.6D$ in the experiment. The oscillations vanishes at $x = 20D$ in the simulation, and $x = 25D$ in the experiment, while the difference of extremas is growing downstream, reaching the amplitude of the mean signal oscillations around $x = 15D$. One can note that the oscillations of minimas are slightly decayed downstream.

This LES proved a fair agreement between experiments and simulations concerning the inviscid structure. However, the simulation overestimates dissipation. The fluctuating nature of the flow must now be investigated.

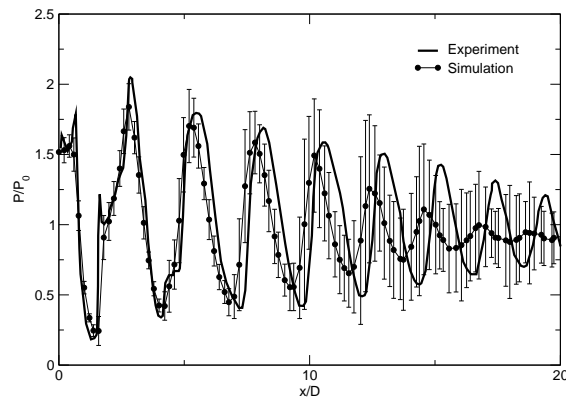


FIG. 3: Seiner jet and Case 4 : Mach 1.99 and pressure ratio 1.47 (verifer si resultats meilleurs avec turb FDF)

B. Viscous phenomenas

Turbulence is visible through the development of the jet plume. The fluctuations can be measured at the first order with averaged quantities of velocity \bar{u} , and at the second order with the Root Mean Squared velocity $u_{RMS} = \sqrt{u^2 - \bar{u}^2}$. Chuech held experimental measurements of this nature on a sonic weakly underexpanded jet ($NPR = 1.2$), both on longitudinal and radial locations. The simulation of this jet is profiled the same way with a hundred of probes in the jet axis for $x < 20D$ and four orthogonal rakes of ten probes. The unstructured grid imposed slightly staggered probes, but no interpolation was necessary. Mean and fluctuating quantities has been averaged according to the Reynolds definition, from $8.25ms$ to $10.5ms$. This time must be compared to the convective time, i.e $0.65ms$ for a particle travelling the twenty first diameters.

The comparison between simulation and to Chuech's data is displayed in Fig. 4 for longitudinal results and in Fig. 5 for radial results. Fig. 4.a points out the longitudinal segregation between the potential core (0 to $5D$) and the turbulent decay of the plume ($7D$ and downstream). Simulated velocity profiles oscillate in the potential core, as expected by theory. Experimental measurements are steady but give a spatially averaged profile where the global increase of the velocity is visible. Concerning the different injections, the transition zone of Case 3 is located around $5D$, like in the experiments, at least $3D$ upstream of the transition zones found for Cases 1 and 2. In Fig. 4.b, the RMS values are normalised by the centerline velocity. Case 1 begins with a low fluctuating level around 4%, kept until $10D$. The fluctuations jumps up to 30%. Case 2 start with 15% of RMS velocity, but this is quickly damped down to 3%. Then it rises up around $8D$, reaching the level of 25%. Case 3 starts with 5% of RMS fluctuations, and keep this level until $4 - 5D$ where the profile rises up to 20%. Longitudinal profiles shows then that the turbulence develops a correct jet concerning the fluctuations level. The transition zone is slightly underestimated.

Fig. 5 shows the spreading of the jet for the three cases. The first plane $x/D = 0.2$ confirm the accuracy of the injected profile on mean velocity. Fluctuations are negligible for Case 1, and lower than 3% for Case 2, while the imposed level was 15% $0.2D$ upstream. Case 3 shows the correct level of fluctuations in the core of the jet. High magnitude of RMS in the turbulent layer are damped down to 10%. Profiles of mean velocity for the three planes $x/D = 5, 10, 20$ follow the autosimilar classic behavior of free jets.

These results show again a good agreement between simulations and experiments concerning the viscous part of the flow. The injection of coherent structure, i.e. Case 3, shows the best performances, especially at the beginning of the jet. The two other injections underestimates the spreading of the jet. The differences fade out with the development of the jet. The hierarchy of performances for the three injections is conform to intuition: Turbulent like injection is the best choice, followed by the white noise injection. The inner processes leading of these differences may be investigated with the analysis of the exhaustive data produced by these numerical simulations.

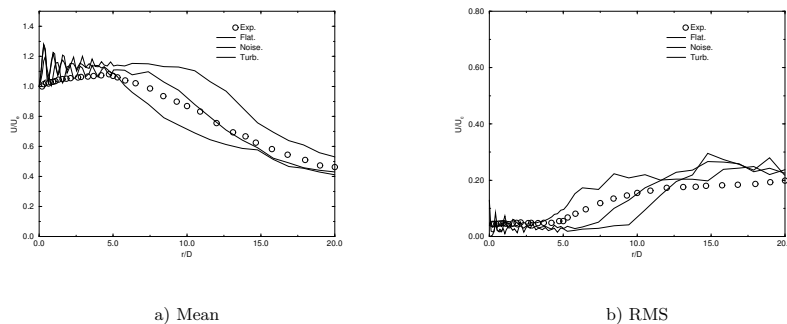


FIG. 4: Mean and RMS values of longitudinal velocity for Cases 1,2,and 3 compared to experiments

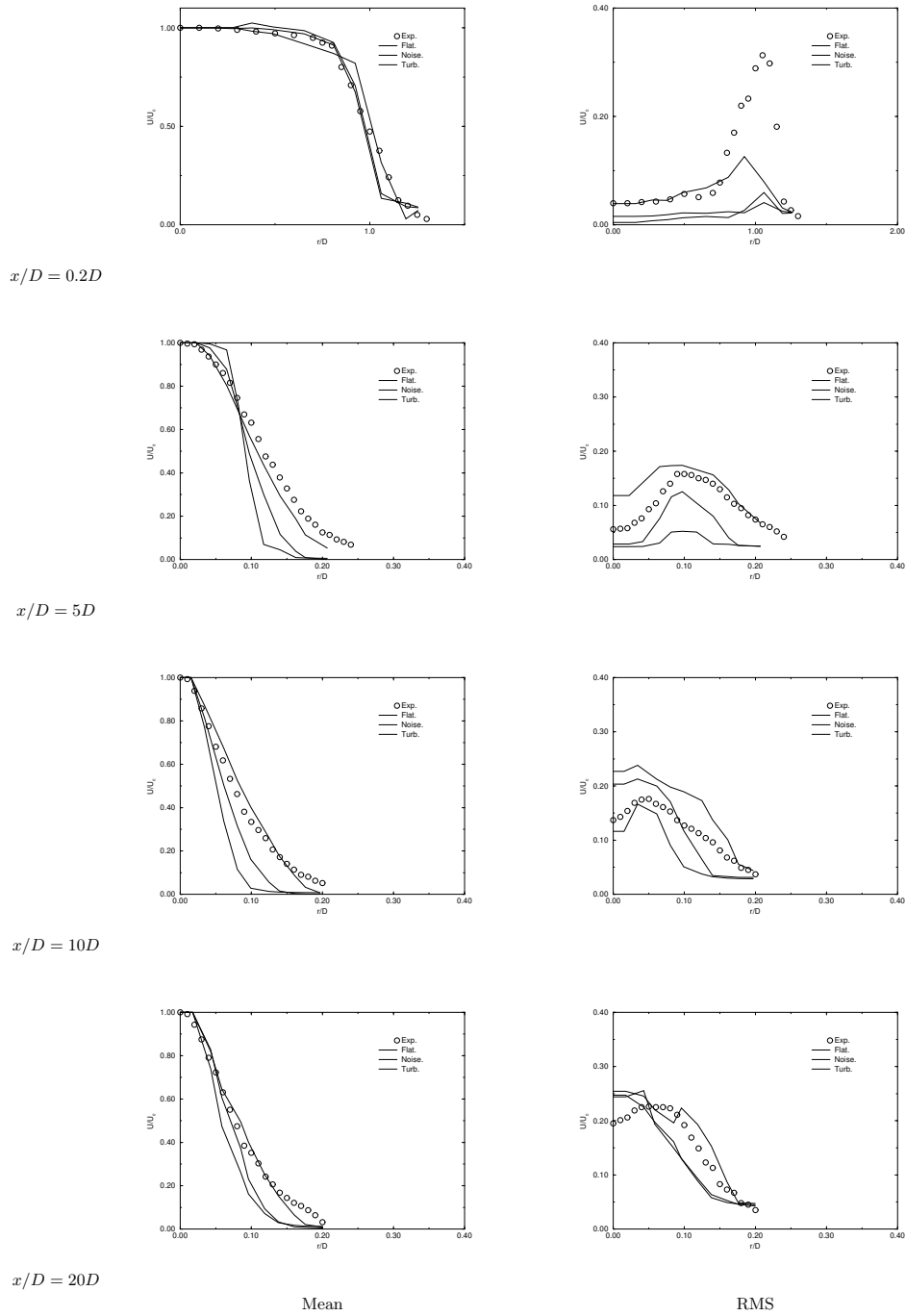


FIG. 5: Mean and RMS values of velocity for Cases 1,2,and 3 compared to experiments

IV. RESULTS

A. Temporal evolution of pressure along the axis

The diamond shock pattern is not steady, as observed in Fig. 3. This unsteadiness must be investigated from a temporal point of view. Previous numerical investigation has been focused on shock motion, in order to study the receptivity of a screeching jet [17]. The simulated jets are not screeching, but the same mechanisms are present.

The jet of Seiner (Mach=2, NPR=1.47) is used here, with the pressure records of a hundred of probes on the jet axis. The local pressure is mapped versus time in the range [9, 11.5ms] and centerline location for $x < 20D$ on Fig. 6. The averaged local velocity $\bar{u}(x)$ and the speed of sound c are computed from the dataset, and are represented with lines on the pressure map. Sound speed slopes lines (white) going upstream and downstream are placed on each alignment of three pressure minima.

For $x < 7D$, the vertical stripes of the pressure map show three quasi-steady compression expansion cells. For $7D < x < 15$, the cells are more and more staggered. Beyond $x = 15D$, coherent cells are not visible anymore. In the staggered region, several peaks are visible both for both maximas and minimas. These peaks travel downstream at the sonic speed, according to the reference slope $+c$. The locations of these peaks are also aligned with the reference slope of upstream sonic speed $-c$. The reference slope u proves that these peaks are definitely not advected.

Fig. 6 shows that the peaks observed on pressure extremas are at the crossroads of structures travelling downstream and upstream at the sound speed. The advected coherent signal does not affect directly the diamond shock structure, a more complex process is in action.

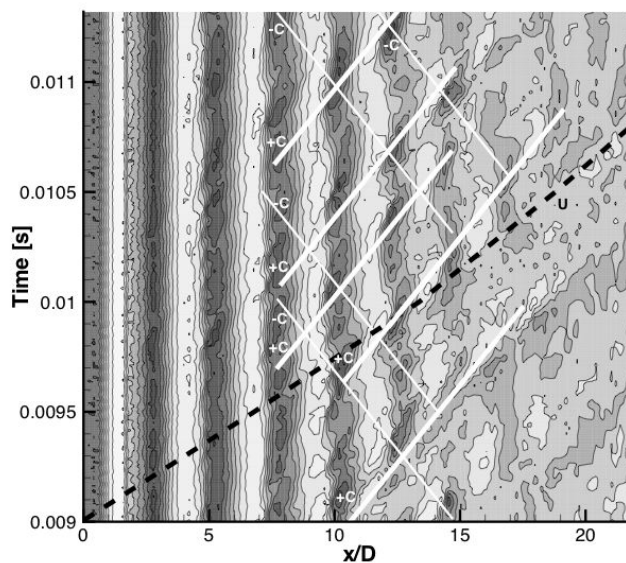


FIG. 6: Temporal evolution of the Pressure on the Seiner jet

B. Distribution of acoustic sources

The fluctuations observed on Fig. 6 were measured on the centerline, but strong unsteady processes also take place in the mixing layer. The RMS value of the density gradient norm is used as an acoustic activity indicator on Fig. 7, showing $|\nabla\bar{\rho}|_{RMS}$ on longitudinal planes for the three types in injection used in the simulation of the Seiner's Jet (Mach 1, $NPR = 1.2$). These planes are direct cuts, i.e. without azimuthal averaging.

The spreading of the jet increases from Case 1 to Case 3: $\simeq 5^\circ$ for laminar injection, $\simeq 7^\circ$ for white noise injection, $\simeq 9^\circ$ for turbulent-like injection. The acoustic activity zone is concentrated closer to the injection in Case 3, compared to Case 1 and 2. Close to the injection, Case 1 is very quiet, excepted on the diamond shock structure. Narrow zones of activity are located on the end of each expansion/compression cell for all simulations. The zoomed views displayed on the left hand side show that peaks are higher but lose their strenght quicker for Case 3, compared to Cases 1 and 2. A regular and intense activity is visible in the mixing layer of Case 3 ($x < 7D$), with peaks at the crossing of compression zone with the mixing layer. On the opposite, the mixing layer of Case 1 and 2 are quiet with transient high peaks on the same spots.

To summarize, each of the three cases simulated has its own scenario of development. Compared to Case 2, Case 1 starts with a quiet cell and develops slower. On the opposite, Case 3 simulation is quickly developed. Compared to centerline shock, the mixing layer is almost inactive for Cases 1 and 2, while it is preponderant for Case 3.

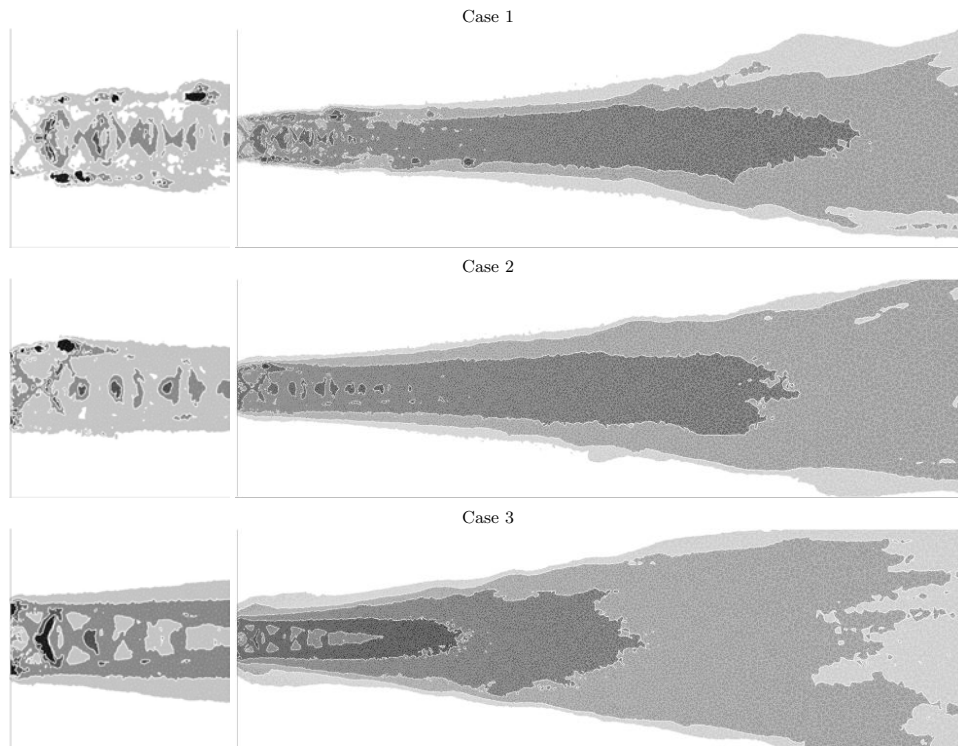


FIG. 7: Acoustic sources indicated by Density gradient fluctuations $|\nabla\bar{\rho}|_{RMS}$. Left: Near injection close up ($3D \times 3D$), Right: overall aspect ($20D \times 6D$)

C. Longitudinal evolution of spectrums

In order to identify the three different scenarii, it is usefull to evaluate the energy distribution between the scales, and its evolution over the jet development. A temporal Fourier transform gives this information. Velocity records of forty probes in the mixing layer ($x < 10D$) are available for a temporal range long enough to perform a Fast Fourier Transformation (16384 samples). The frequency resolution is $465Hz$. The left hand side of Fig. 8 is a mapping of the FFT Power Spectral Density (PSD) versus frequency (abscissa) and probe location (ordinates). The left hand side plots are the FFT results for five equidistant positions $x/D = 0, 2.5, 5, 7.5, 10$. Scale is logarithmic for Frequencies and PSD. A running average over five consecutive points has been applied to clean up the spectrums.

The spectral map of Case 1 shows the progressive filling of the spectrum from low frequencies. From an empty energy spectra, the successive FFT grow up smoothly to a developed spectrum. The only exception is the brutal growth of the 20000 Hz mode, at $x/D = 6$, followed by a broad 16000 Hz mode, at $x/D = 8$. The main part of the growth occurs in the zone $0 < x < 2.5D$.

The white noise of Case 2 is visible on the first profile ($x/D = 0$). High frequencies are quickly damped while low frequencies are growing up. For $x/D = 7$, the flow reaches a developed spectrum. The map traduces the apparition and disparition of several peaks, roughly corresponding to 15000, 21000, 28000 and 34000 Hz for the range $0.5D < x < 3D$. Then, a complex distribution of energy is rising beyond $x > 3.5D$ for the frequency range $[0, 30000Hz]$. The main part of the evolution occurs again in the zone $0 < x < 2.5D$.

The turbulent-like injection of Case 3 leads to a initial spectrum already developed at high frequencies. The energy of low frequencies $[0, 40000Hz]$ at $x = 0D$ is as low as in Case 2, excepted for the modes 10000 and 14000 Hz. The other visible modes are 57000, 120000, 180000 and 340000 Hz. The spectral map shows a continuous evolution from the first spectrum to the developed one, the energy concentrating toward low frequencies. Developed spectrum is almost reached at $x/D = 4$.

Fig. 8 is giving information about the development of each case. The simulation of Case 1 fills up the energy spectrum with the lowest frequencies, i.e. the largest structures and the mean flow. Case 2 proved a selection of several modes by the white noise in the very first diameters, followed by the growth of low frequency modes $[0, 30000Hz]$. Case 3 develops straightly the same low frequency growth $[0, 30000Hz]$ closer to the injection. All cases lead to developed spectra similar in shape and amplitude, but the three scenarii are very different from a spectral point of view. The most discriminant behavior is probably visible in the first diameters, where the variations of energy distribution are the highest for all cases.

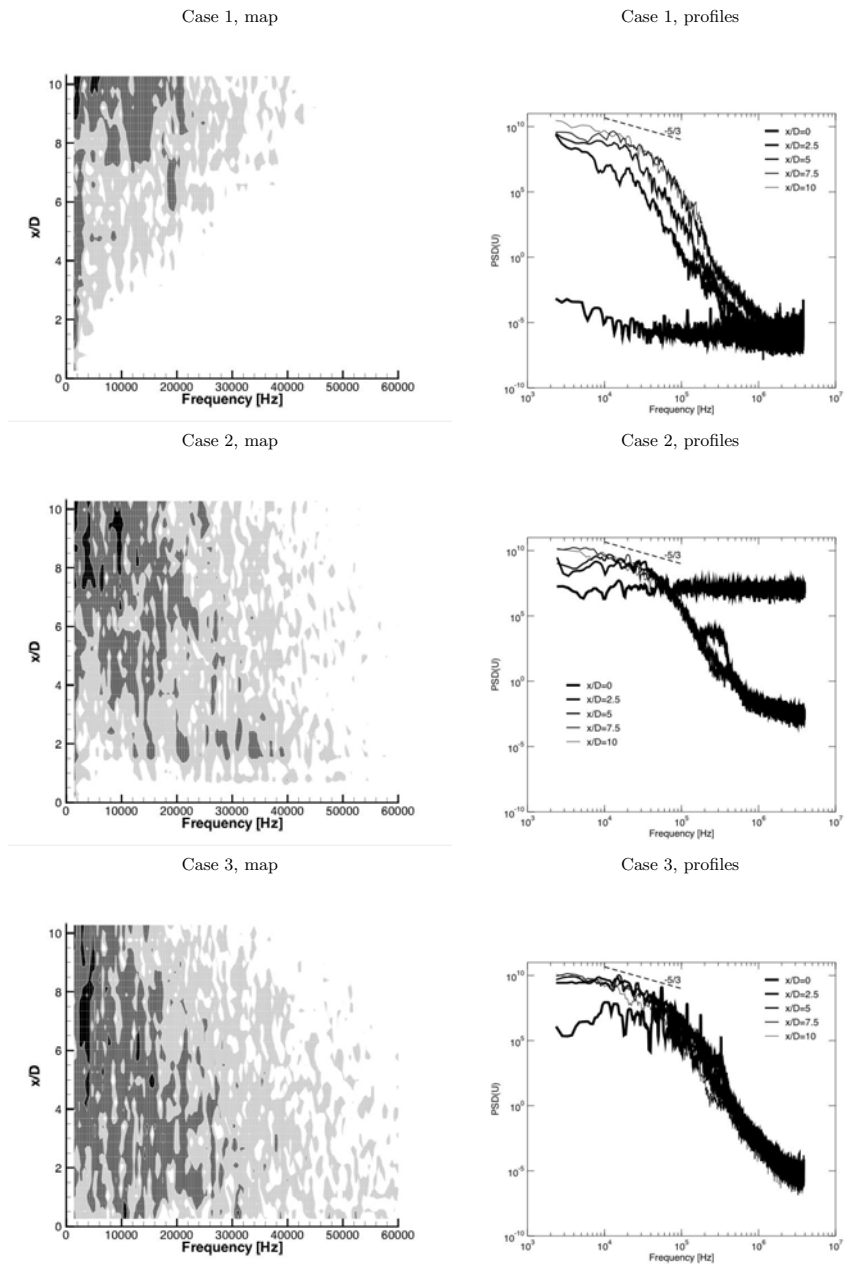


FIG. 8: Power Spectral Density along the mixing layer (FFT estimation)

D. Bicoherence Spectrum Analysis

Fig. 8 indicated that a spectral analysis focused between $x/D = 1$ and $x/D = 2$ would allow to investigate further the differences between the three scenarii of jet development. As this is a restriction to a small region, simple energy transfers might be reachable. Bicoherence analysis is designed to identify the energy transfers between the frequencies. The quantity Bic_{FGH}^2 is defined in Eq. 10 where $\hat{F}, \hat{G}, \hat{H}$ are the Fourier transforms of the velocity signal recorded at the location F, G, H , a longitudinal triplet of probes separated by a tenth of diameter. In this equation $*$ is used for the conjugate form, and $\langle \rangle$ is the averaging on 32 triplets spread in the mixing layer. Quantity Bic_{FGH}^2 is then mapped in the Fig. 9 for Case 1,2 and 3. A peak in the right half ($F1 > 0$) means that modes $F1$ and $F2$ feeds the mode $F1 + F2$. A peak in the left half ($F1 < 0$) means that modes $F1$ and $F2$ feeds the mode $F2 - F1$. All peaks over the threshold 0.35 are circled.

$$Bic_{FGH}^2(f_1, f_2) = \frac{\left| \left\langle \hat{F}(f_1) \hat{G}(f_2) \hat{H}^*(f_1 + f_2) \right\rangle \right|^2}{\left\langle \left| \hat{F}(f_1) \hat{G}(f_2) \right|^2 \right\rangle \left\langle \left| \hat{H}(f_1 + f_2) \right|^2 \right\rangle} \quad (10)$$

To ease the understanding of this tool, the initial $x/D = 1$ and final $x/D = 2$ spectra are displayed on the right hand side of the figure.

Concerning Case 1, the vertical alignment of correlations ($F1 > 2000Hz, F2 \simeq 0Hz$) means that the mean flow feeds all the range of frequencies. The diagonal ($F2 - F1 \simeq 0$) means that all the frequencies feeds the lowest one, i.e. the extreme left of the spectrum.

Case 2 gives several diagonal alignments of correlations ($F1 + F2 \simeq 15000, 21000, 28000, 34000, 40000, etc...$) meaning that all $F1$ frequencies feed several modes, as a white noise is expected to do. The same analysis on higher frequencies ($F1, F2 > 100000Hz$) showed no bicoherence, indicating that the high frequencies injected are simply damped, not redirected to low frequencies.

Case 3 contained an intense 10000Hz mode in the near injection region. The peak 0-10000Hz on the Fig. 9 proves that this mode is still fed by low frequencies, one diameter after injection. A broad concentration of significant 10000-100000Hz interactions are also revealed by the bicoherence analysis, feeding the 20000 Hz mode. Then, a last concentration of peaks in the region $[-6000 < F1 < 6000, 20000 < F2 < 26000]$ explains the broad energy stripe in the range $[20000, 26000Hz]$ by a two-ways transfer from 20000Hz to 26000Hz ($F1 > 0$ peaks), and back ($F1 < 0$ peaks). No significative correlation can be seen beyond 30000Hz.

Fig. 9 enhances the contrast between the three scenarii. The laminar injection (Case 1) leads to a development feeded by the low frequencies, i.e. the largest structures. The white noise injection excites several modes in the jet. The evolution of spectrum, in Fig. 8 shows that these singular modes are quickly replaced by the developed spectrum. The turbulent-like injection excites only the $[0, 30000Hz]$ range, leading sooner than Case 2 to the developed spectrum.

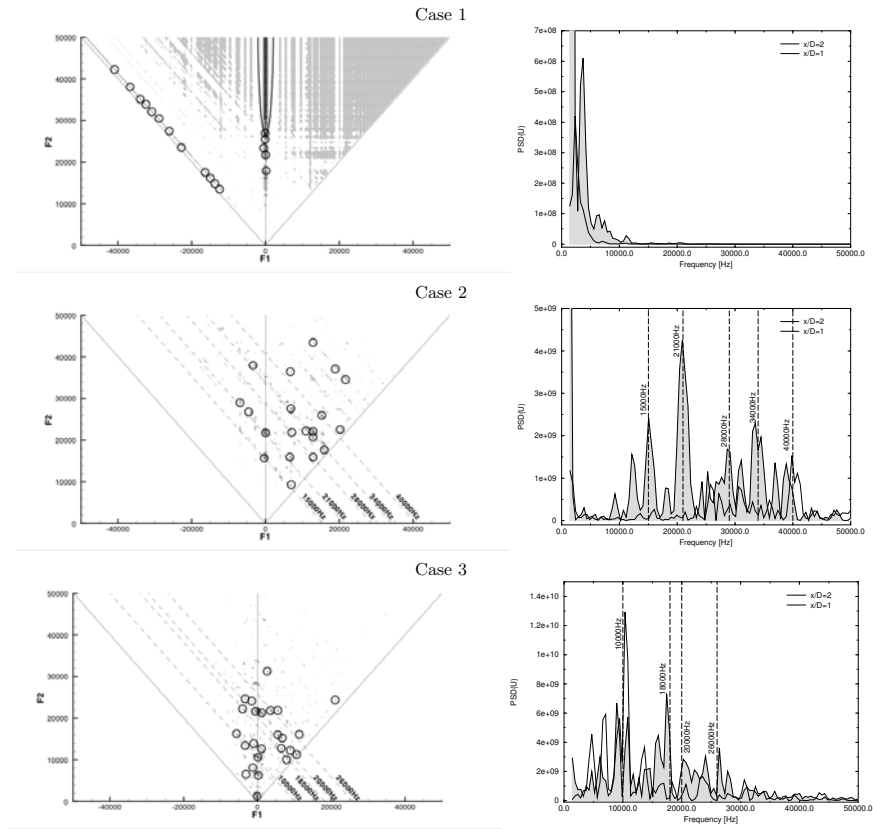


FIG. 9: Bicoherence of the mixing layer velocity signal

E. Frequency-Wavenumber Spectrum Analysis

The previous analysis enlightened the development of the jet downstream. The temporal evolution of the pressure waves along the axis (Fig. 6) revealed that both upstream and downstream sonic velocity carried the fluctuations. The frequency-wavenumber analysis allows to track the advection velocity of coherent structure, giving the energy balance between upstream and downstream directions. This is particularly interesting in the near injection region, where the receptivity of the jet is important.

Nine rakes of ten probes are placed longitudinally at $[D < x < 2D], 2r/D = 0; \pm 0.3; \pm 0.4; \pm 0.5; \pm 0.6$ in the simulations of Cases 1, 2 and 3. Each rake gives the necessary data to perform a Frequency-Wavenumber Spectrum Analysis (FWSA), using the interspectra between all the probes, as introduced by Capon [3]. The distance between probes being Δx , the phase decay $\Delta\Phi(f)$ observed between two signals of frequency f is interpreted in the wavenumber form $\lambda(f) = \Delta\phi(f)/\Delta x = 2\pi\Delta\phi(f)/\Delta t$. A peak on the FWSA map, located at the position (f, λ) indicates that a coherent signal of frequency f is travelling through the probes at the speed $2\pi f/\lambda$. Fig. 10 gives on the right hand side the results at the center line, referring to the central rake ($r = 0$), and on the left hand side the mixing layer results, referring to the other rakes. Concerning the mixing layer, the data recorded at the outer side of the jet gave the same FWSA results as the inner side data. Hence, all mixing layer results are averaged. As all the spectra are fading out with the high frequencies, the FWSA coherence must be normalized. Fig. 10.a and .b gives the norm $n_{FWSA}(f)$ used for each case, taken as the coherence of frequency f averaged over all the wavenumbers.

The convective speed expected inside the sonic jet is $+c$. The related acoustic speeds are then 0 and $+2c$. However acoustic waves propagate also in the still air surrounding the jet, leading to the acoustic speeds $-c$ and $+c$. Consequently, FWSA may capture the velocities $-c$ (external upstream acoustic), $+c$ (external downstream acoustic, internal convection) and $+2c$ (internal downstream acoustic)

First, the norm $n_{FWSA}(f)$ profiles confirm the coherence fading out for high frequencies in both centerline and mixing layer region, in particular for Case 1 (Fig. 10.a,b). The laminar injection of Case 1 has shown a spectrum limited to low frequencies. FWSA finds out these frequencies travelling downstream ($+c$) in the mixing layer ($f < 40000Hz$). A large range of structures is also identified, that travels upstream ($-c$) in both regions. Due to the normalization, the upstream of waves for $f < 40000Hz$ is hidden by the downstream traveling part. White noise injection of Case 2 and Turbulent noise of Case 3 show only downstream travelling structures. Their velocity matches ($+c$) excepted in the mixing layer of Case 2, where the velocities are observed between $+0.6c$ and $+c$.

The large structures created in Case 1, and the injected structures in Case 2 and 3 are all captured by FWSA and convected by the jet at the velocity $+c$. However, the laminar injection being very quiet, some upstream travelling acoustic structures are observed, and should be linked to the feedback process occurring in screeching jets.

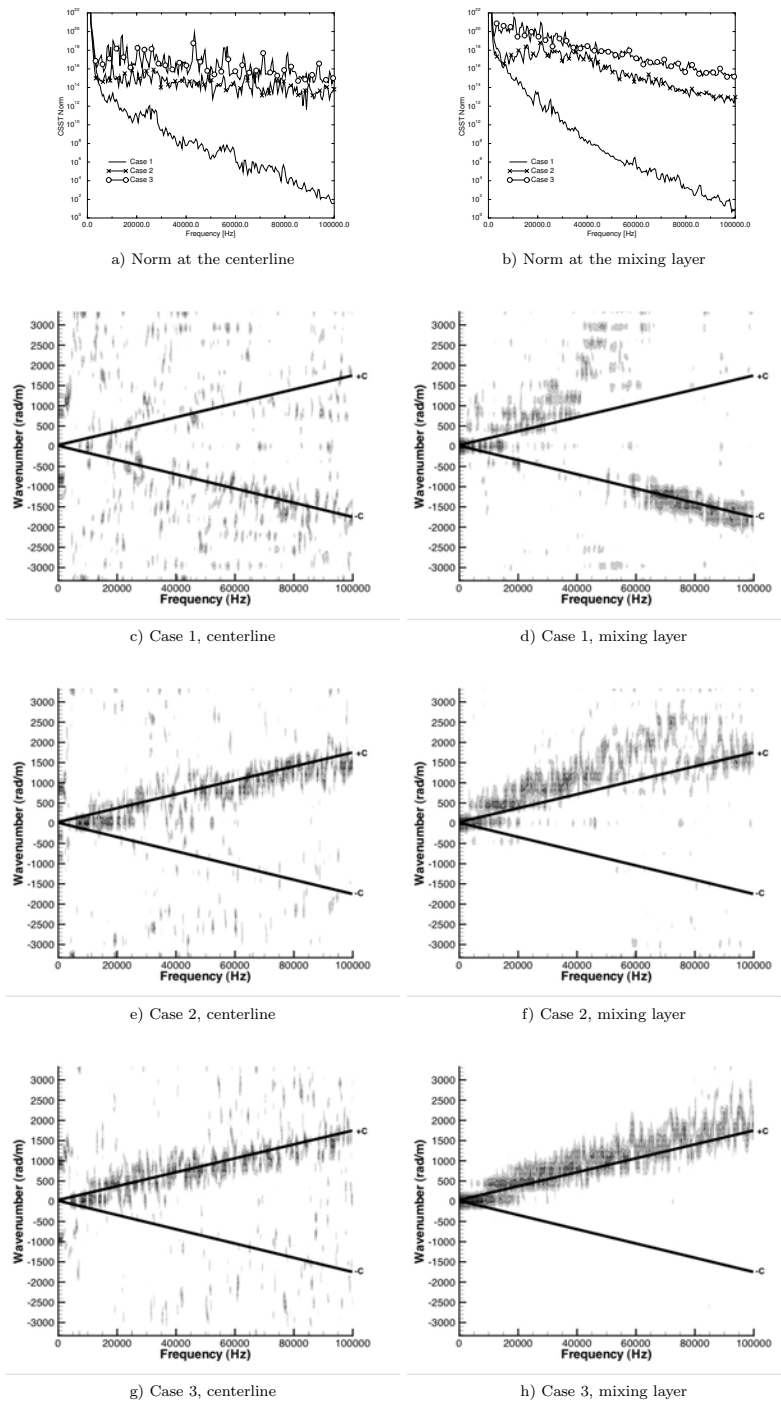


FIG. 10: Coherent Structure Spectral Tracking applied in the region $1 < x/D < 2$ at the centerline and at the mixing layer.

-
- [1] Abdol-Hamid, K. S., and R. G. Wilmoth, 1989, *AIAA Journal* **27**(3), 315.
 - [2] Bogey, C., C. Bailly, and D. Juvé, 2003, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* **16**(4), 273.
 - [3] Capon, J., 1969, in *IEEE*, volume 57, pp. 1408–1418.
 - [4] Chang, I.-S., 1945, *Mach Reflection, Mach Disc, and the Associated Nozzle Free Jet Flows*, Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign.
 - [5] Chuech, S. G., M. C. Lai, and G. M. Faeth, 1989, *AIAA Journal* **27**, 549.
 - [6] Crist, S., D. R. Glass, and P. M. Sherman, 1966, *AIAA Journal* **4**, 68.
 - [7] Cumber, P., M. Fairweather, S. Falle, and J. Giddings, 1995, *Journal of Fluids Engineering* **117**, 599.
 - [8] Dash, S. M., and D. E. Wolf, 1985, *AIAA Journal* **23**(4), 505.
 - [9] Eastman, D., and P. Radtke, 1963, *AIAA Journal* **1**, 918.
 - [10] Favre, A., 1969, in *Problems of hydrodynamics and continuum mechanics* (SIAM, Philadelphia), pp. 231–266.
 - [11] Ferziger, J., 1997, in *New tools in turbulence modelling*, edited by O. Métais and J. Ferziger (Les Editions de Physique - Springer Verlag), pp. 29 – 47.
 - [12] Imamoglu, B., and P. Balakumar, 2002, *AIAA Paper 2002-2527*.
 - [13] Imamoglu, B., and P. Balakumar, 2003, in *9th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference and Exhibit; Hilton Head, SC*.
 - [14] Jorgenson, P., and C. Loh, 2002, *AIAA Paper 2002-3889*.
 - [15] Lehnasch, G., 2005, *Contribution à l'étude numérique des jets supersoniques sous-détendus*, Ph.D. thesis, Université de Poitiers.
 - [16] Lewis, C., and D. Carlson, 1964, *AIAA Journal* **2**(4), 776.
 - [17] Li, X., and J. Gao, 2005, *Phys. Fluids* **17**(085105).
 - [18] Loh, C., H. S.C., and P. Jorgenson, 2001, *AIAA Paper 2001-2252*.
 - [19] Manning, T., 2000, *A numerical investigation of sound generation in supersonic jet screech*, Ph.D. thesis, Stanford University.
 - [20] Manning, T., and L. S. K., 1998, *AIAA paper 1998-0282*.
 - [21] Norum, T. D., 1982, in *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 20th, Orlando*.
 - [22] Palmer, J., and R. Hanson, 1998, *AIAA Journal* **36**(2), 193.
 - [23] Poinot, T., and D. Veynante, 2001, *Theoretical and numerical combustion* (R.T. Edwards).
 - [24] Powell, A., 1953, *Aeronaut. Quart.* **4**(103-122).
 - [25] Raman, G., 1998, *Prog. Aerosp. Sci.* **34**(1), 45.
 - [26] Sagaut, P., 2000, *Large Eddy Simulation for incompressible flows*, Scientific computation series (Springer-Verlag).
 - [27] Schönfeld, T., and M. Rudgyard, 1999, *AIAA Journal* **37**(11), 1378.
 - [28] Seiner, J. M., and T. D. Norum, 1980, *AIAA Paper 1980-965*.
 - [29] Shen, H., and C. K. W. Tam, 1998, *AIAA Journal* **36**(10), 1801.
 - [30] Smagorinsky, J., 1963, *Mon. Weather Rev.* **91**, 99.
 - [31] Smirnov, A., S. Shi, and I. Celik, 2001, *J. Fluid Eng.* **123**(2), 359.
 - [32] Thies, A., and C. K. W. Tam, 1996, *AIAA Journal* **34**(2), 309.
 - [33] VonNeumann, J., and R. Richtmyer, 1950, *Journal of Applied Physics* **21**(3), 232.
 - [34] Zapryagaev, V., V. Pickalov, N. Kiselev, and A. Nepomnyashchiy, 2004, *Theor. Comput. Fluid Dynamics* **18**(2-4), 301.
 - [35] Zapryagaev, V. I., N. P. Kiselev, and A. A. Pavlov, 2004, *J. of Applied Mechanics and Technical Physics(Russia)* **45**(3), 335.

5.6.4 Analyse de l'instabilité du jet

La simulation des grandes échelles crée des structures instationnaires sur lesquelles une validation est nécessaire. Les spectres fréquentiels d'analyse sont absents des résultats expérimentaux de S.G. Chuech *et al.* (29). C'est pourquoi un travail de recherche parallèle sur l'instabilité du jet a été engagé pour cette thèse entre le CERFACS et le SINUMEF¹.

En effet, Z. Mazen a effectué une étude de stabilité linéaire à partir d'un champ de base fourni par la simulation des grandes échelles. Ces travaux ont été encadrés par le Pr. J.C. Robinet au laboratoire SINUMEF de l'ENSAM² de Paris, dans le cadre du stage de Master de Recherche de l'Ecole Polytechnique, du 1^{er} mars au 12 juillet 2005. Il s'agit d'une méthode de collocation spectrale qui montre la croissance de modes normaux dans les équations aux petites perturbations d'Euler simplifiées (équations de Rayleigh (123)). Le rapport complet (104) détaille l'établissement des équations, discute l'hypothèse forte d'un jet parallèle, et présente les résultats. Les modes normaux utilisés comme petites perturbations sont de la forme $X = \hat{X}(r) \exp^{i(\alpha x + q\theta - \omega t)}$ dans des coordonnées cylindriques x, r, θ, t . Ainsi, le mode $q = 0$ correspond au vortex axisymétrique visible par un "ronde de fumée", tandis que le mode $q = 1$ est le vortex incliné à 45° vers l'aval entre les directions azimutales et longitudinales. En fixant le mode azimuthal, les résultats d'amplification spatiale de chaque mode sont obtenus. Le tableau 5.2 recense les modes les plus instables, c.a.d. les grandes valeurs de $\Im(-\alpha_0)$, prouvant que le mode $q = 1$ est le plus amplifié, suivi par $q = 0$, $q = 2$ et $q = 3$.

La simulation aux grandes échelles de ce même jet excité par un bruit blanc montre que la perturbation alimente plusieurs modes, comme l'illustre les spectre basse fréquences pris à $x/D = 1$ et $x/D = 2$ de la Fig. 5.18. On remarque notamment la croissance de pics autour de 15 kHz , 12.5 kHz et enfin 17.5 kHz , des fréquences tout à fait comparables aux résultats de l'analyse linéaire.

L'angle des structures principales β dans la couche de mélange par rapport au mode $q = 0$ est connu par la relation $\beta = \arccos(0.58/M_c)$ établie par N.D. Sandham et W.C. Reynolds (129) en analyse linéaire, puis confirmée par les DNS de D.J. Risha (124). Cette relation donne dans le cas de Chuech $\beta = 33^\circ$, et dans celui de Seiner $\beta = 66^\circ$. Les premières structures turbulentes observables dans les deux simulations montrent sur la Fig. 5.19 un accord satisfaisant avec cette théorie.

Ce travail de comparaison s'avère concluant : la SGE excite des modes propres du jet qui correspondent aux résultats d'une analyse linéaire de l'instabilité non-visqueuse du jet. Ces modes peuvent ensuite interagir non linéairement entre eux, ce qui alimente de nouveaux modes de fréquence plus élevée révélés par l'analyse de bicohérence spectrale.

¹Laboratoire de Simulation Numérique en Mécanique des Fluides

²Ecole Nationale Supérieure d'Art et Métiers

Nombre d'onde azimuthal	Facteur d'amplification		Fréquence la plus instable
	spatial	temporelle	
$q = 0$	$\alpha_0 = 4.65714 - 1.37481i$	$\omega_0 = 2.49$	17.3 kHz
$q = 1$	$\alpha_0 = 4.45556 - 1.43825i$	$\omega_0 = 2.27$	15.8 kHz
$q = 2$	$\alpha_0 = 4.40144 - 1.27974i$	$\omega_0 = 2.08$	14.48 kHz
$q = 3$	$\alpha_0 = 4.15484 - 0.94270i$	$\omega_0 = 1.85$	12.88 kHz

TAB. 5.2 – Résultats d'une l'analyse de stabilité linéaire effectué sur un champ de base obtenu par SGE du jet de S.G. Chuech (29).

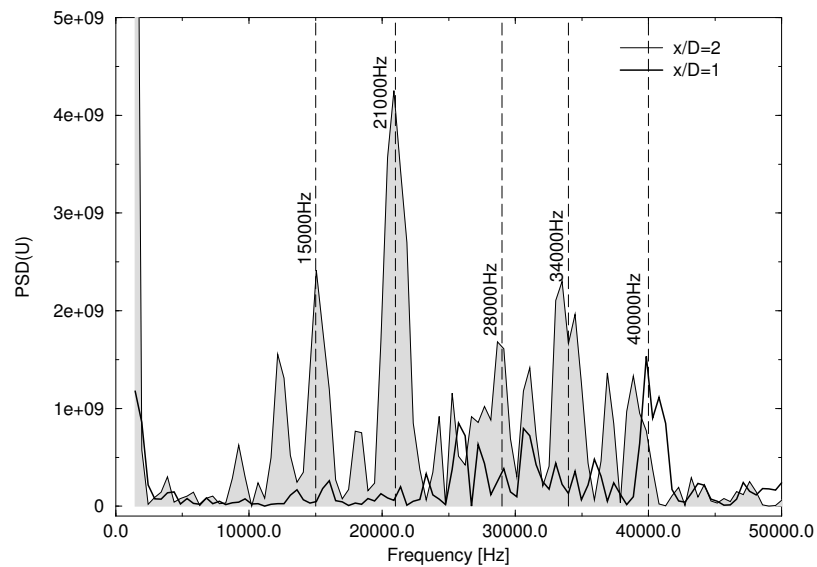


FIG. 5.18 – Spectres basses fréquences d'un jet sous-détendu excité par un bruit blanc. Coupes à un et deux diamètres

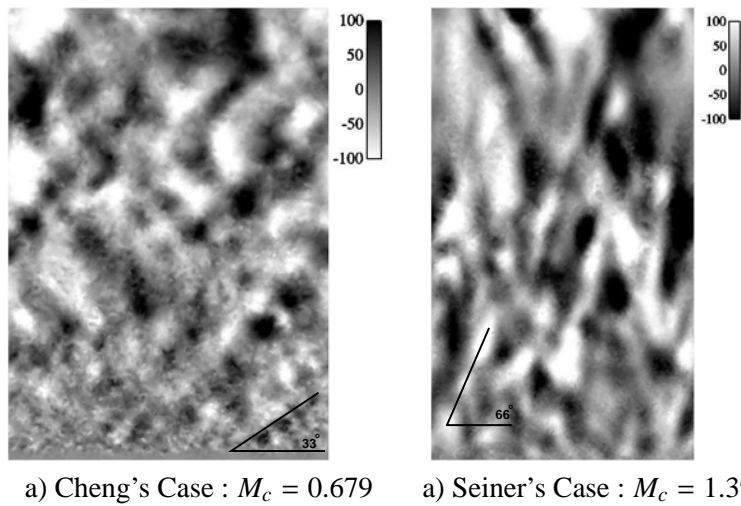


FIG. 5.19 – Vitesse longitudinale observée sur le cylindre $r/D = 0.55$, et angle des premières structures turbulente obtenues par analyse linéaire de l'instabilité.

5.7 Elements particuliers au calcul de jets supersoniques

5.7.1 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont des frontières artificielles que l'on choisit pour étudier un domaine de calcul fini. Afin de diminuer leur influence, on peut les imposer en augmentant la précision de leur formulation, ou bien les éloigner significativement du domaine d'intérêt. Les calculs présentés ici utilisent la deuxième option grâce au maillage non structuré. Une zone tampon entoure la zone utile de calcul. La grande liberté de déraffinement du maillage autorise une zone tampon très grande, et rend les perturbations issues du domaine d'intérêt infinitésimales. La formulation NSCBC des conditions limites (118) est utilisé en sortie de domaine, mais sa précision est superflue : des résultats identiques sont obtenus avec des parois solides. Pour un écoulement externe supersonique comme un jet libre, illustré en Fig. 5.20.a, le bruit de jet disparaît avant d'avoir pu traverser la zone tampon. Enfin, le jet se dilue complètement avant de toucher une condition aux limites de sortie. Pour un écoulement interne comme une chambre à haute pression se vidant par une tuyère, illustrée en Fig. 5.20.b, la zone tampon représente un réservoir infini. Ainsi, la tuyère peut s'amorcer et se désamorcer au cours de la simulation sans qu'il soit nécessaire d'adapter la condition limite de sortie. A l'usage, la zone tampon diminue l'impact des conditions aux limites. Son interaction avec la zone utile de calcul revient à une condition aux limites très absorbante, tout en maintenant la pression comme le ferait un réservoir infini. Cette stratégie demande cependant de suivre quelques règles de mise en place.

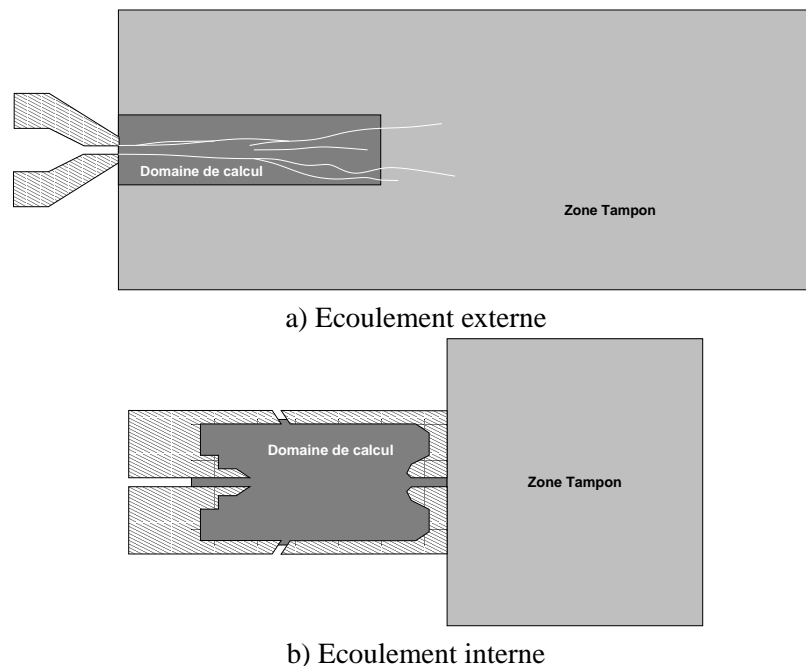


FIG. 5.20 – Deux façons d'utiliser une zone tampon en supersonique.

Le passage du domaine de calcul à la zone tampon exige une variation faible et continue des

mailles. Dans le cas contraire, la zone tampon crée des perturbations parasites dans la solution : elle est "bruyante". Cette contrainte se traduit par un ratio maximal entre le volume de deux cellules adjacentes. L'ordre de grandeur du ratio volumique est de 2 pour un maillage de bonne qualité, soit un ratio de 1.25 sur les cotés des cellules. Les zones tampons utilisent conjointement une augmentation de la taille des cellules avec une augmentation de la viscosité artificielle. On prendra soin de placer le gradient de viscosité à l'aval dans une zone à pas de maillage constant, comme sur la Fig. 5.21. En effet, l'addition des deux variations (maille et viscosité) peut rendre la simulation bruyante localement. Avec une zone tampon qui respecte les règles énoncées précédemment, le gain en robustesse est substantiel. Par contre, le faible ratio entre les cellules peut se révéler coûteux en terme de maillage. Cette technique est utilisée dans tous les travaux présentés dans cette thèse faisant intervenir un jet supersonique.

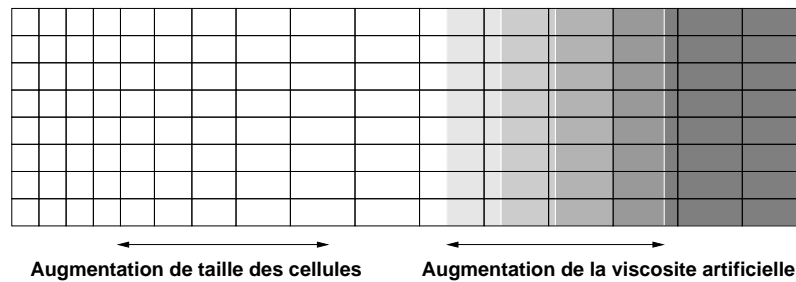


FIG. 5.21 – Ségrégation du gradient de maille (quadrillage) et du gradient de viscosité artificielle (dégradé de gris)

5.7.2 Quelques précisions sur des calculs en supersoniques

Nombre de Mach sur une condition aux limites

Le traitement des conditions aux limites est construit d'après des hypothèses faites sur l'extérieur du domaine de calcul. Le cas d'un écoulement supersonique sortant du calcul est simple. Par sa nature hyperbolique, la solution proche de la frontière ne dépend pas du milieu extérieur. Il est utile de mentionner un contre exemple subtil où l'écoulement est supersonique mais dépend du milieu extérieur. Soit une chambre de combustion suivie d'un distributeur transsonique à aubes inclinées à 45 degrés, accélérant le fluide à $Mach = 1.1$. Dans le domaine de calcul donné en Fig. 5.22, le nombre de Mach vaut 1.1 sur toute la condition de sortie, mais le Mach local associé aux conditions aux limites vaut $1.1 \times \cos(45) = 0.77$. Ainsi, le domaine de calcul ne profite pas du caractère hyperbolique de l'écoulement. Il faut lui préférer un domaine se terminant par des frontières orthogonales aux lignes de courant, illustré par la Fig. 5.23. Malgré l'apparente simplicité de ce propos, il est nécessaire d'insister sur le caractère directionnel du nombre de Mach.

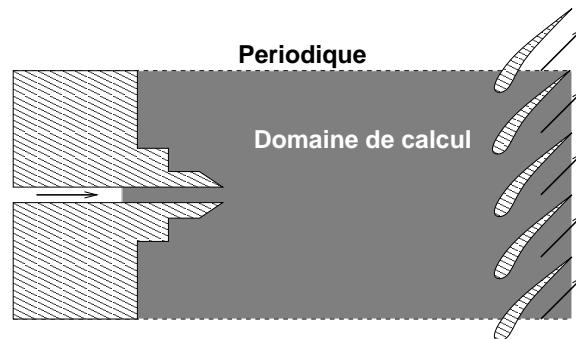


FIG. 5.22 – Domaine de calcul d'une chambre de combustion suivie d'un distributeur transsonique

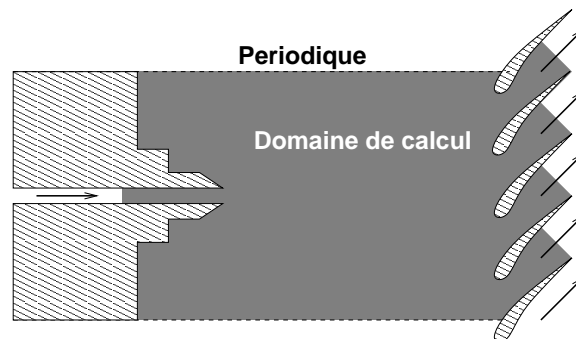


FIG. 5.23 – Domaine de calcul corrigé d'une chambre de combustion suivie d'un distributeur transsonique

Les jet supersoniques adaptés

Un jet supersonique est dit 'adapté' si sa pression est égale à la pression du milieu ambiant. L'expansion de Prandtl-Meyer initiale est donc quasi-inexistante. Par conséquent, les jet 'adaptés' sont vierges de toute structure supersonique. Cependant, si le jet est légèrement divergent (demi angle de quelques degrés), la quantité de mouvement radial contenue dans l'expansion suffit à modifier substantiellement la pression du fluide. Cette subtilité est confirmée par le Dr. Zapryagaev :

Avis du Dr. Zapryagaev sur les jets adaptés non-parallèles, Février 2006

"Dear Antoine,

(...)About your question : "In other words, does an adapted non parallel jet can develop diamond shock structures?" I think it is possible. Term "adapted" is characteristics of one from some gasdynamic parameters of supersonic jet in local region (nozzle exit only). Therefore if only one from jet parameters is adapted to ambient condition ($P_{jet} = P_{ambient}$) but angle of velocity vector α is nonparallel of axis you have diamond structure. If you have $P_{jet} = P_{ambient}$ and $\alpha = 0$, the jet (without viscosity) is a parallel flow without any structures. For your case, how I understand, for $M_{exit} = 1$ any disturbance ($P_{jet} \neq P_{ambient}$ or $\alpha \neq 0$ i.e boundary is nonparallel) is a cause for appearance of diamond structure. You can see a likewise phenomena - pseudoshock which corresponds to transform supersonic flow to subsonic flow in channel. (...)

Best regards

Valery Zapryagaev"

Dr. Valery Ivanovich Zapryagaev, Lecturer, Russian Academy of Sciences Siberian Division ;

Institutskaya Str. 4/1, Novosibirsk 630090, Russia

Il faut donc noter qu'un jet supersonique dont la pression est adaptée sur la section de sortie peut présenter des structures de compression/expansion si il n'est pas strictement parallèle à l'injection.

Il est fort probable que les expérimentateurs aient été les premiers spectateurs du paradoxe jet adapté / écoulement en diamants. En effet, un jet fortement supersonique ($Mach = 2$ par exemple) doit être accéléré au moyen d'un écoulement divergent. Cependant, il faut réaliser une augmentation de section tout en minimisant l'encombrement du dispositif. La comparaison de deux injecteurs coaxiaux montre l'évolution de la solution technologique. La Fig. 5.24.a montre une coupe de l'injecteur utilisé par Cheng et Wehrmeyer (28) en 1994. Dans cette géométrie, le fluide subit une divergence centrifuge. Au contraire, dans l'injecteur choisi par Cutler (41) en 2001 illustré en Fig. 5.24.b, la divergence est centripète. Les lignes de courant extérieures sont rigoureusement parallèles à l'axe du jet. La géométrie choisie par Cutler permet d'obtenir un jet fortement supersonique en concentrant les perturbations de parallélisme à l'intérieur. Les expérimentateurs ont adapté leur installations pour réaliser un écoulement peu perturbé par les phénomènes supersoniques. Afin de suivre au plus près les résultats expérimentaux, les simulations numériques doivent également prendre en compte la composante radiale des vitesses imposées par les géométries de chaque injecteur.

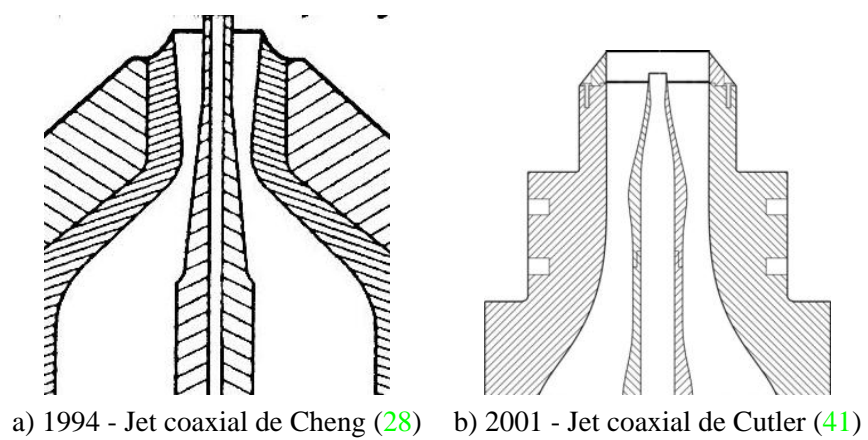
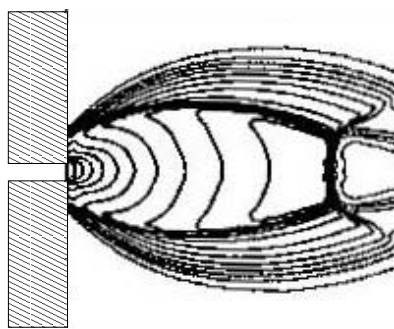


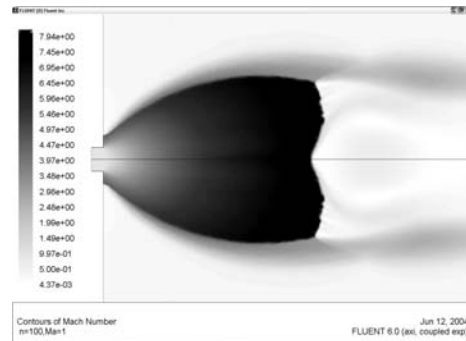
FIG. 5.24 – Deux types de divergents montés sur des jets coaxiaux

Écoulement proche des bords d'un injecteur supersonique.

Les bords d'un injecteur supersonique posent un problème numérique : la ligne sonique est décalée du bord sur certaines simulations. La Fig. 5.25 montre la solution numérique donnée par deux codes. Les deux utilisent des solveurs de Roe. Le premier est un code de recherche développé lors de la thèse de D. Chargy (22). Le second est un code commercial bien connu, FLUENT 6.0. Les contours de Mach permettent d'identifier clairement une structure de jet fortement sous-détendu, avec un disque de Mach nettement marqué. On observe dans les deux cas un décalage très net de la ligne sonique marquant les bords du jet sur le plan d'injection. Cette figure met donc en évidence un comportement imprévu des simulations par différences, éléments, ou volume finis, comparé à une résolution par la méthode des caractéristiques qui suppose une expansion centrée sur le coin. Il faut donc analyser le décalage observé dans ces simulations.



a) D.Chargy, Solveur de Roe,1981



b) Y. Ducret, FLUENT 6.0, 2004

FIG. 5.25 – Contournement observé dans des simulations de jets sous-détendus, Contours du nombre de Mach

Cependant, il est étonnamment difficile de prouver théoriquement que cette ligne de glissement doit correspondre au bord :

Extrait de discussions électroniques avec le professeur G. Mungal et le docteur D. Chargy sur l'apparition de contournements, Février 2004

Dear Antoine, (...) Concerning your final point about the slip line, I do not see why it could not be possible (to observe a decayed slip line), but we never looked there experimentally. Sincerely
Godfrey

Godfrey Mungal, Professor Mechanical Engineering Department Stanford University, Stanford, CA 94305-3032

(...)Une chose est sûre : il est numériquement très difficile de calculer les écoulements d'arrière corps. Il y a des effets numériques que l'on contrôle difficilement

Le modèle de Prandtl Meyer est effectivement un modèle idéal avec attachement du choc sur l'arête. Et le second modèle (ligne décalée) ne me choque pas, Numériquement on observe des vitesses qui glissent le long de la paroi : la recirculation "n'arrive pas au coin", ce qui justifie la solution obtenue. Je ne sais pas dire si cela est physique ou non : La nature ne connaît pas les "coins" !

Merci de me tenir informer car le sujet est intéressant.

Dr. Didier Chargy INCKA-Simulog - Groupe Robinson Agence de Cannes

Lorsque l'on observe l'écoulement réel près d'une injection supersonique, il existe une échelle en dessous de laquelle le bord de l'injection ne peut plus être considéré comme géométriquement parfait, c'est à dire formant un angle droit. Prenons un écoulement de coin contenant une expansion de Prandtl-Meyer centrée sur ce coin, situation illustrée par la Fig. 5.26.a. A une échelle beaucoup plus petite, c.a.d. en dessous de la précision d'usinage de l'injecteur, ce coin ne forme plus un angle droit parfait. Supposons que la forme de ce bord d'injection soit arrondie, comme illustré en Fig. 5.26.b. L'expansion de Prandtl Meyer existe toujours, mais la ligne $Mach = 1$ est décalée vers l'extérieur. Le fluide rampe le long de la paroi, s'accélère puis se recomprime rapidement, formant une petite ligne de choc contre le plan d'injection, qui se transforme en ligne de glissement plus loin en aval. Ainsi, la ligne sonique marquant la frontière du jet est légèrement décalée vers l'extérieur lorsque l'on regarde suffisamment près. Cette observation mène à la réflexion suivante : L'expansion de Prandtl-Meyer centrée sur un coin orthogonal est une approximation qui permet de simplifier le problème de l'écoulement de coin. Cependant, choisir un point géométrique présentant plusieurs états physiques est une singularité mathématique.

Le décalage que nous avons décrit ne remet pas en cause la présence d'une expansion de Prandtl-Meyer. C'est grâce à cette propriété que le Dr. Katanoda, professeur à l'université de Kyoto, établit le test permettant de différencier un décalage physique d'une aberration numérique. Suite à une conversation par courrier électronique sur ce sujet, il propose simplement de vérifier la conservation de l'entropie à l'intérieur de l'expansion. Une expansion de Prandtl-Meyer étant rigoureusement isentropique le long des lignes de courant, si une variation de l'entropie apparaît, la solution est non physique. Ce test est utilisable sur le champ d'entropie donné en Fig. 5.27 correspondant au jet illustré en Fig. 5.25.a. La ligne de courant la plus proche de la paroi traverse trois contours d'entropie au niveau du coin. Le contournement observé est donc non-physique, d'après le critère du Dr. Katanoda. Lorsqu'un décalage apparaît dans une solution, le test de l'entropie permet ainsi de vérifier la validité de la solution à cet endroit.

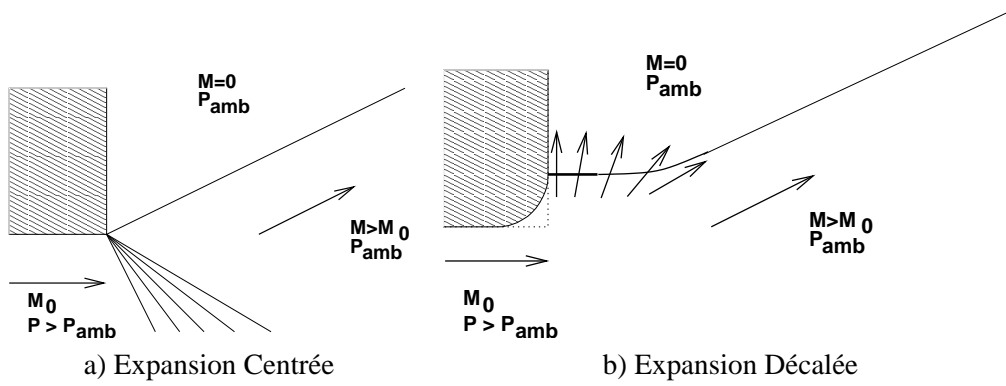


FIG. 5.26 – Expansion de Prandtl Meyer

Conseils du Dr. Katanoda sur l'apparition de contournements, Mars 2004

"Dear Antoine

Thank you for an interesting inquiry. I have never seen underexpanded jets flowing (with a decayed slip line) in both of my experimental and computational work.

Solution similar to (the decayed configuration) can be seen at around the starting iterations in computation if you put atmospheric condition as initial one. However, I have never seen (a decayed configuration) in steady state. In steady state, when air-flow of Mach number 1 turns 90 degrees it has to be accelerated to nearly Mach 7.0. I wonder if your computational result is like that or not. I recommend to check entropy distribution along stream-line around the nozzle lip.

Regards,

Hiroshi Katanoda

*Dr. H. Katanoda, Lecturer, Department of Mechanical Systems and Environmental Engineering ;
The University of Kitakyushu*

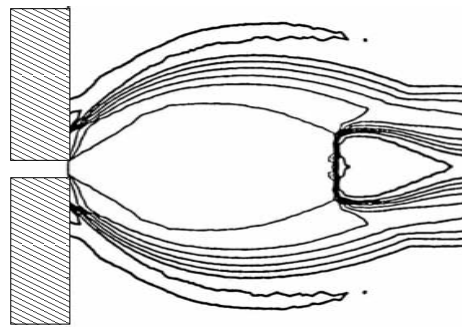


FIG. 5.27 – Isolignes d'entropie sur un jet sous-détendu. D. Chargy

Calcul de jets fortement sous-détendus

Nous avons vu dans la section précédente que le calcul de l'écoulement proche de l'injecteur peut faire apparaître un contournement non physique. Lorsque l'on augmente le rapport de pression, la difficulté s'aggrave, menant à un échec du calcul vers $NPR = 3$. Afin d'éviter ce problème, il est possible d'utiliser une injection décalée. Inspirée de la stratégie des lois de parois pour la turbulence, cette injection calcule *a priori* l'état du fluide près de l'injection par la résolution de l'expansion de Prandtl-Meyer. Le schéma de la Fig. 5.28 montre un domaine de calcul séparé du plan d'injection, et les profils d'entrée qui lui sont associés. Cette stratégie augmente la taille du profil d'entrée, tout particulièrement pour les grands rapports de pression. Par conséquent, l'injection est mieux discrétisée.

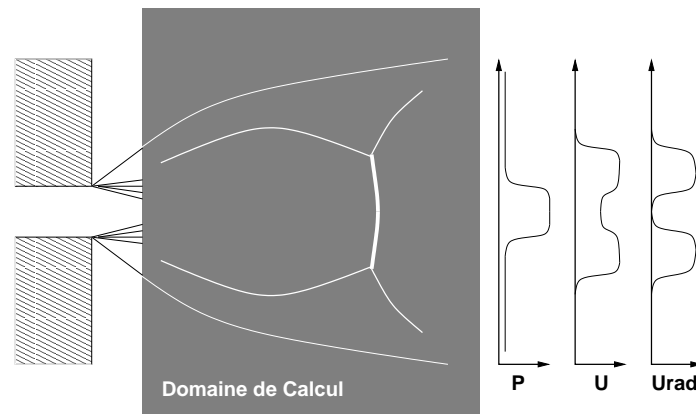


FIG. 5.28 – Injection décalée

La méthode de l'injection décalée a permis de traiter avec succès un jet sonique présentant un rapport de pression de 3. Cette simulation a été opérée sur un maillage de 500000 tétraèdres. Le diamètre du jet vaut 10mm , le côté d'un tétraèdre 0.5mm . Le calcul commence par un jet sonique adapté dont la pression augmente de 1 bar chaque milliseconde. Les contours de Mach sont illustrés sur la Fig. 5.29. Il montre clairement un disque de mach intense, et la présence d'une deuxième cellule de détente et compression. Ce calcul démontre l'efficacité de la stratégie d'injection décalée pour la simulation de jets fortement sous-détendus.

Dans cette simulation, les variations des quantités dans la couche de mélange sont dues principalement à du bruit numérique. Il est en effet impossible de distinguer une structure nette dans cette zone, même au moyen d'un critère Q (73) par exemple. Ce défaut implique que cette simulation ne peut être considérée comme une simulation aux grandes échelles. Malgré cela, le calcul montre un phénomène intéressant. La figure Fig. 5.30 montre l'isosurface $M = 1$. Cette surface se plisse en allant vers l'aval, et les plis ainsi formés sont instationnaires. Une telle observation prouve que le calcul ainsi posé développe une vorticit  longitudinale, avec des vortex alternés et alignés dans la couche de mélange parallèlement au jet. Il s'agit du premier pas vers l'instabilité de Görtler, présente dans la couche de mélange courbe des jets sous-détendus.

En parallèle, des calculs effectués par le Dr. A. Beer en 2005 ont repoussé les limites des simulations. Tout d'abord, un jet sonique fortement sous-détendu avec un rapport de pression $NPR = 10$

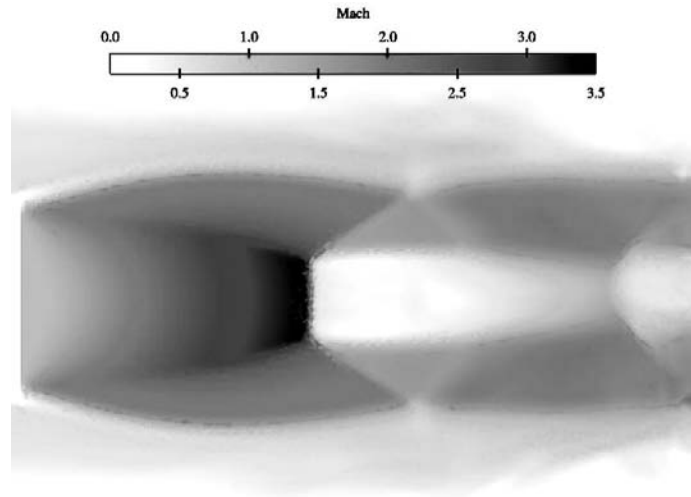


FIG. 5.29 – Contours de Mach d’un jet sous-détendu $NPR = 3$, $Mach = 1$. Code AVBP.

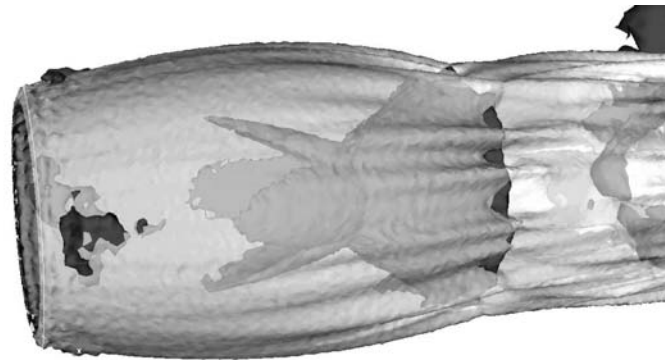


FIG. 5.30 – Isosurfaces Mach 1 (blanc) et gradients de densité (gris) d’un jet sous-détendu $NPR = 3$, $Mach = 1$. Code AVBP.

est simulé avec un maillage de seulement 250000 nœuds. On peut observer l’allure caractéristique de ce jet sur la Fig. 5.32, avec une seule cellule de détente terminée par un disque de Mach. Pour les rapports de pression supérieurs, la couche de cisaillement exige une plus grande densité de points, et donc un maillage plus lourd.

Ensuite, une configuration plus complexe est étudiée : deux jets fortement sous-détendus ($NPR = 5$, $Mach = 1$) entrent en collision avec un angle de 60° . La simulation montre une jonction des deux jets en un seul, plus étroit dans le plan d’impact, qui contient encore des cellules de détente et

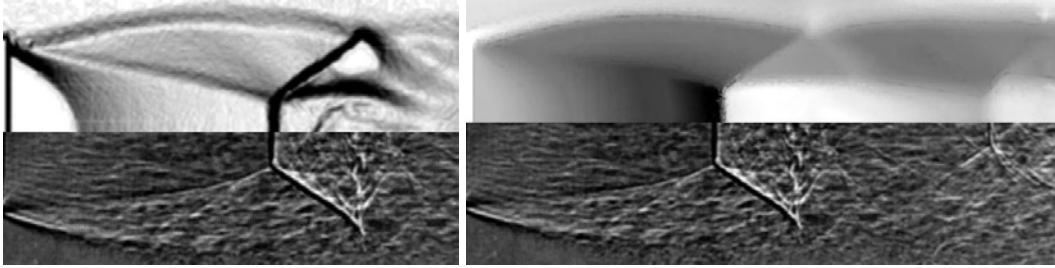


FIG. 5.31 – Comparaison entre le gradient de densité ou le nombre de Mach de la simulation, et la strioscopie d'un jet analogue issue de Thompson (143)

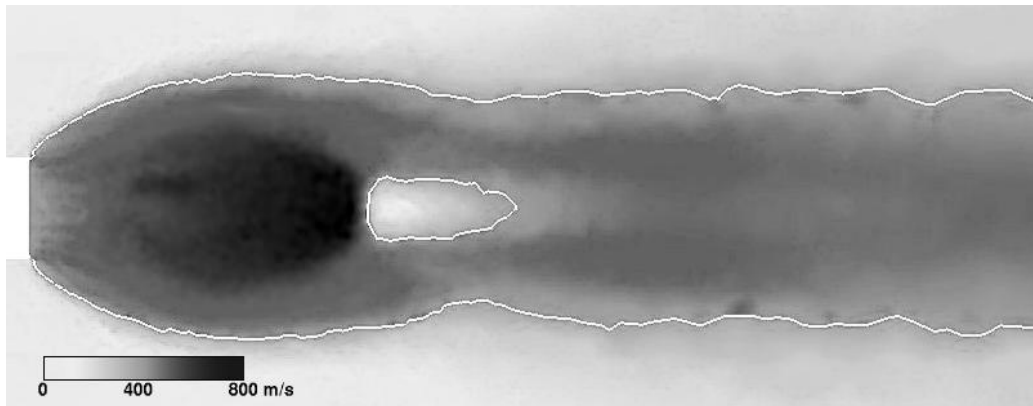


FIG. 5.32 – Contours de vitesse longitudinale et ligne sonique d'un jet fortement sous-détendu $NPR = 10$, $Mach = 1$. Avec l'aimable autorisation d'A. Beer. Code AVBP.

compression (Cf. Fig. 5.33). Ce comportement est comparé à celui observé sur les strioscopies de l'université de Kinki sur des jets présentant un rapport de pression et un angle légèrement différent, respectivement $NPR \equiv 2$ et $Angle = 30^\circ$. Le calcul n'ayant pas été réalisé dans ce but, il n'y a pas de comparaison quantitative avec l'expérience de Kinki.

L'impact de deux jets est généralement réalisé dans le but d'augmenter le mélange entre les deux jets. La SGE montre avec la Fig. 5.34 l'écoulement complexe instationnaire et le mélange efficace mais inhomogène créé par cette interaction sur un maillage de 800000 nœuds. La morphologie pour le moins 'originale' de la zone d'intérêt profite pleinement des avantages d'un maillage non-structuré. Ainsi, les travaux de A. Beer prouvent que l'approche proposée autorise la simulation de configurations complexes.

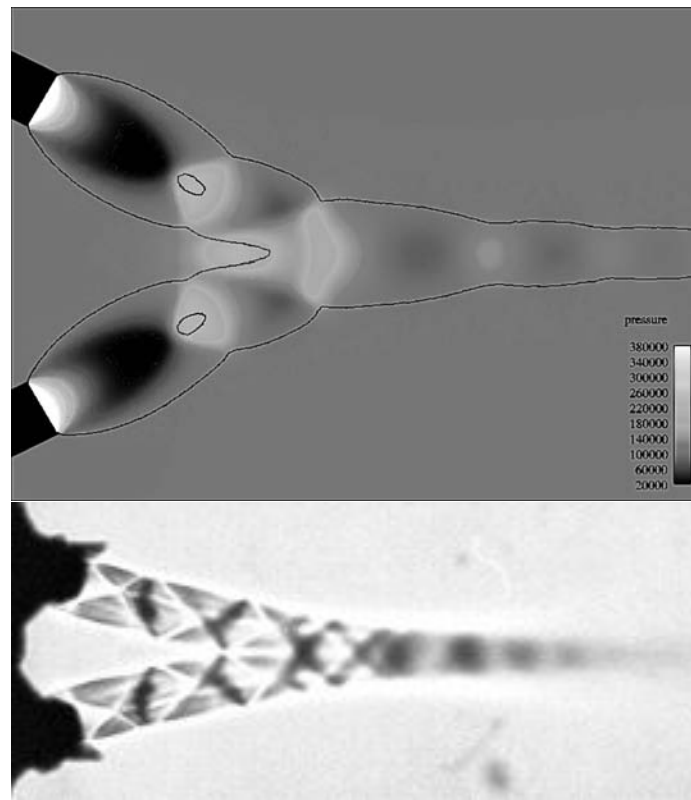


FIG. 5.33 – Calcul de l’impact de deux jets fortement sous-détendus : $NPR = 5$, $Mach = 1$, $Angle = 60^\circ$. En haut : contours de pression et ligne sonique (noir) de la simulation. En bas strioscopie de deux jets sous-détendus réalisée à l’université de Kinki. Avec l’aimable autorisation d’A. Beer. Code AVBP.

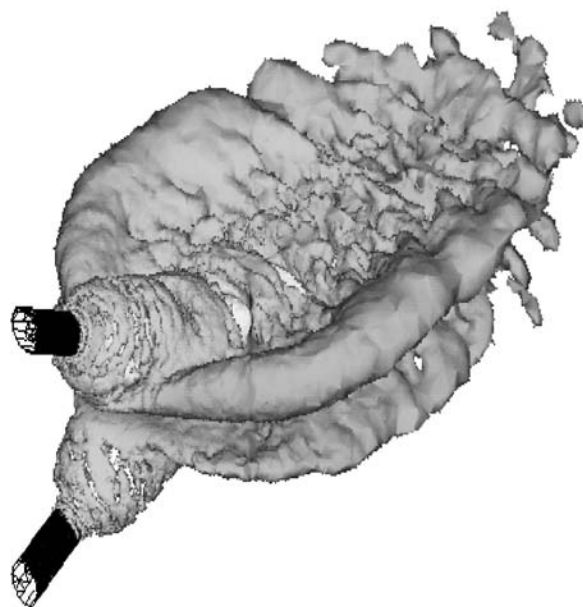


FIG. 5.34 – Calcul de l'impact de deux jets fortement sous-détendus : $NPR = 5$, $Mach = 1$, $Angle = 60^\circ$. Isosurface de critère Q (73). Avec l'aimable autorisation d'A. Beer. Code AVBP.

Chapitre 6

Combustion Supersonique

6.1 Objectif

La combustion utilise conjointement les processus de mélange hydrodynamique et de réaction chimique. Les SGE réactives sont largement appliquées à des systèmes à combustion subsonique où le mélange hydrodynamique est bien plus lent que la réaction. Le fort rapport d'échelles donne lieu à différentes approches de la combustion, telles que la flamme épaissie, ou encore le suivi de flamme. Pour une combustion supersonique, les mélanges hydrodynamiques sont aussi rapides que la combustion. Le travail de simulation se focalise alors sur la compétition entre les deux phénomènes.

La simulation de la combustion supersonique a été relativement peu étudiée. La modélisation de l'impact direct sur la chimie de la turbulence compressible d'écoulement supersonique n'est pas encore très développée. La tendance actuelle consiste à augmenter la résolution des simulations tout en gardant une chimie laminaire. Un article de Jeung (77) illustre bien cette tendance : il étudie la géométrie de scramjets par une série de simulations Unsteady-RANS au deuxième ordre (Schema MUSCL) sur des grilles structurées (384000 cellules en 2D) avec un schéma cinétique complet pour l'hydrogène (8 espèces, 25 réactions).

L'approche proposée dans ce chapitre poursuit cette tendance. La simulation des grandes échelles implique un maillage fin et tridimensionnel. Une chimie simplifiée compense le coût supplémentaire en terme de calcul. L'outil final s'applique dans ce chapitre à un jet coaxial stationnaire en situation d'autoallumage. Outre sa ressemblance avec un allumeur cryotechnique de moteur fusée, elle exige une chimie simplifiée d'autoallumage, réalisée grâce aux résultats du Chapitre 4. Ce chapitre permet d'éprouver l'approche actuellement observée dans la bibliographie pour des simulations au grandes échelles, et identifie les difficultés et points délicats d'une SGE d'allumage d'un moteur fusée.

6.2 Description de la flamme de Cheng

Le brûleur de Cheng (28) est, tout comme un allumeur de moteur fusée cryotechnique, un jet coaxial supersonique d'hydrogène et d'oxygène s'enflammant par auto-allumage. Cette expérience a été construite pour comprendre la combustion à cinétique chimique finie utilisée en propulsion supersonique, principalement les (sc)ramjets. Le brûleur coaxial, illustré et détaillé en Fig. 6.1, produit la flamme d'étude. Le jet central sonique d'hydrogène froid ($540^{\circ}K$) fournit le carburant.

Un large jet coaxial chaud ($1250^{\circ}K$, Mach 2) riche en oxygène apporte l'oxydant et la chaleur. Ce gaz est chauffé par une combustion préalable pauvre ($\phi = 0.364$). Pour information, en prenant pour l'hydrogène un pouvoir calorifique inférieur de $120MJ/kg$, le préchauffage dégage $207kW$. La flamme externe est en régime pauvre ($\phi = 0.123$), ce qui assure la consommation complète de l'hydrogène, dégageant au passage une puissance de $43kW$. La flamme extérieure est photographiée dans le domaine visible sur la Fig. 6.2. Le dégagement de lumière de la flamme se fait au delà de 25 diamètres en aval de l'injection. Un faible dégagement de lumière transitoire se produit autour de 13 diamètres. Le jet turbulent est visible sur la photographie de type schlieren de la Fig. 6.3. L'agitation de l'écoulement et l'angle du flash cachent les structures supersoniques internes telles que le cône de sillage de l'injecteur d'hydrogène.

La configuration retenue regroupe donc les thèmes du jet supersonique coaxial, et de la combustion supersonique en auto-allumage. Driscoll a proposé un dimensionnement de flammes supersoniques (48) qui donne dans le cas de Cheng une flamme atteignant 300 diamètres. Seule la partie amont de cette flamme nous intéresse ici, dans les 50 premiers diamètres. La couche de mélange interne hydrogène-oxygène y joue un rôle central. La couche de mélange externe oxygène-extérieur a un rôle secondaire, car elle peut autoriser un écoulement en diamant. Pour une première étude, sa simulation détaillée n'est pas nécessaire.

On notera que la flamme a une apparence de flamme détachée. Cependant, le mode de stabilisation est l'auto-allumage, non la propagation. Dans ce mode, le contact entre les deux réactifs est suivi obligatoirement d'une combustion. On ne parlera donc pas de flamme attachée ou détachée mais de flamme auto-allumée.

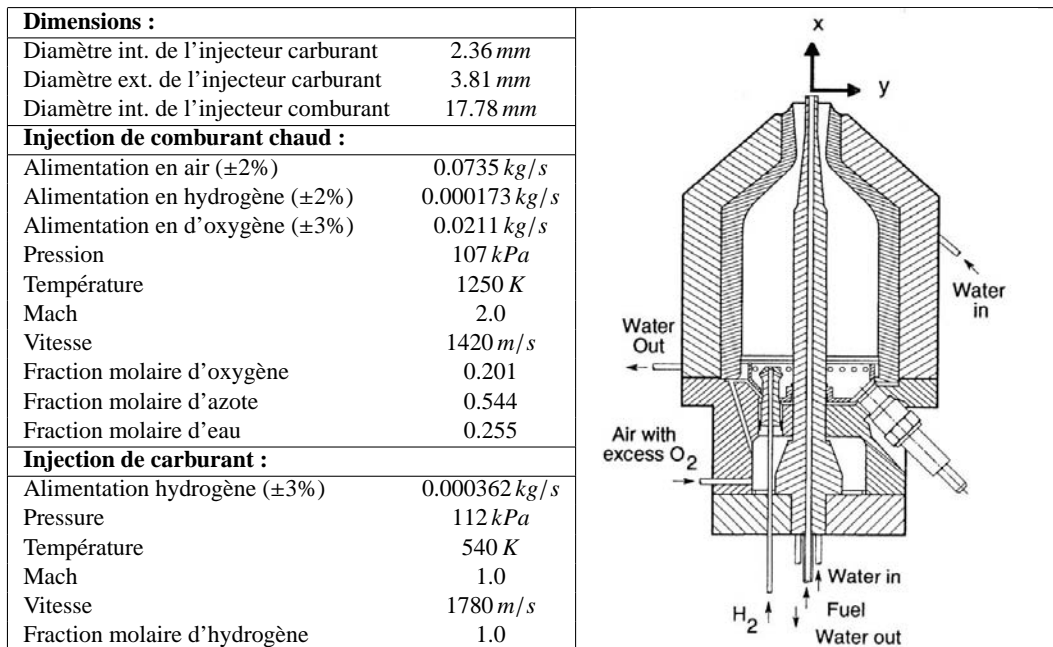


FIG. 6.1 – Coupe et détails du brûleur de Cheng.

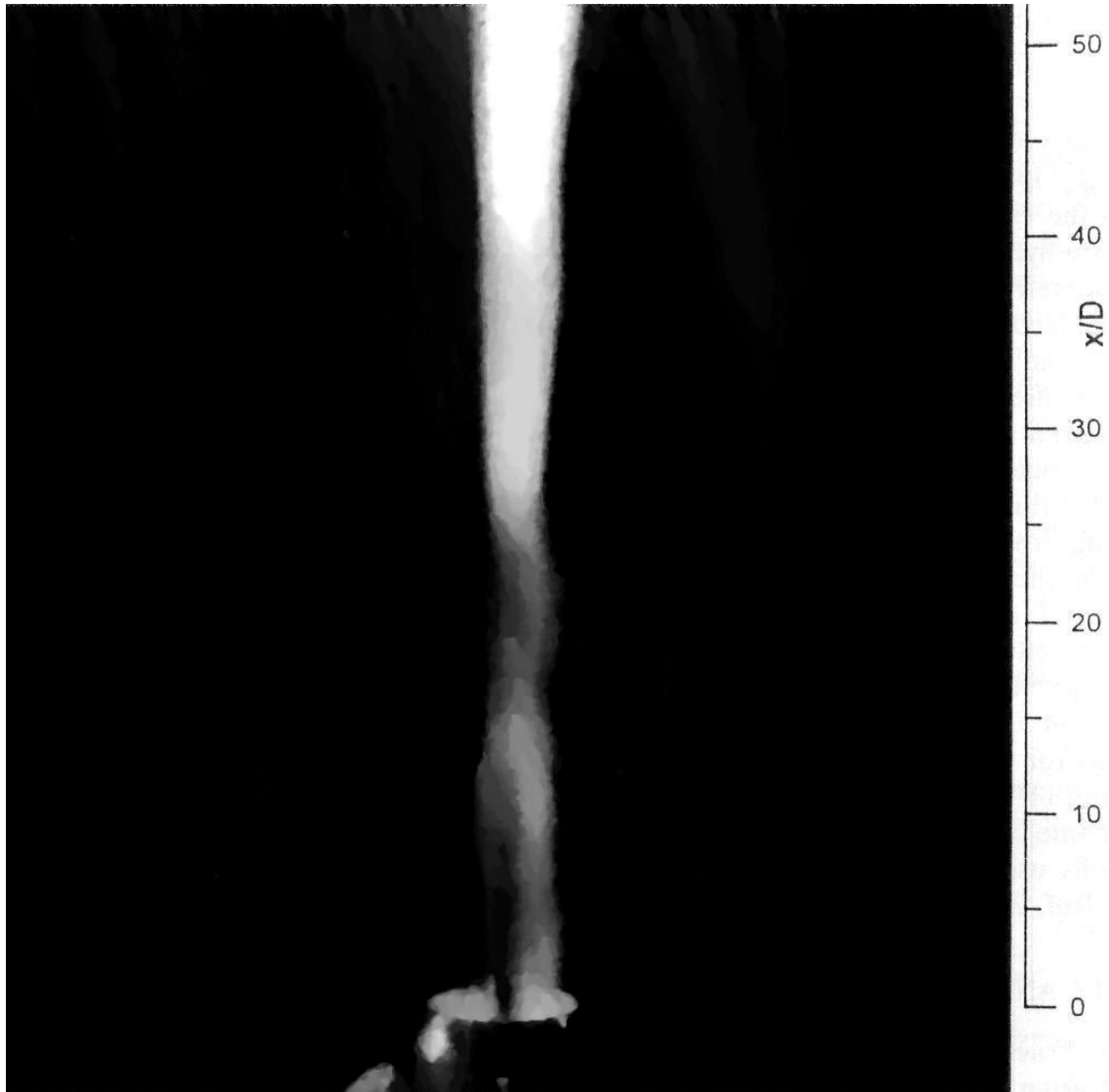


FIG. 6.2 – Photographie dans le domaine visible de la flamme de Cheng (28)

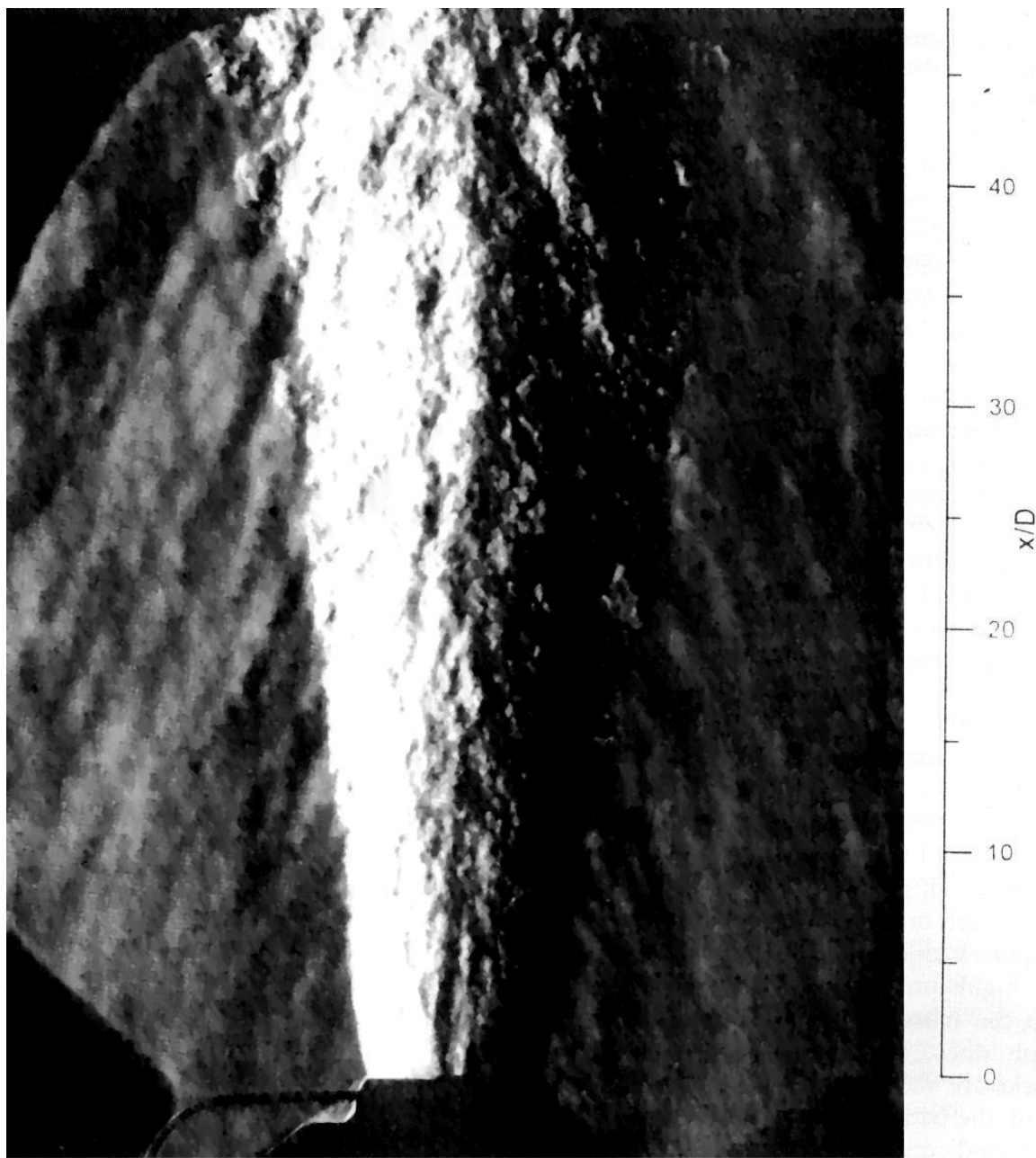


FIG. 6.3 – Photographie type Schlieren de la flamme de Cheng (28)

6.3 Etude dimensionnelle

6.3.1 Turbulence

Bien que turbulence de la configuration de Cheng soit éloignée de la turbulence homogène isotrope (THI), l'hypothèse de THI donne un cadre d'analyse pour une première estimation des échelles caractéristiques.

Les mêmes paramètres que dans le Chap. 5 sont reportés dans le Tableau 6.1. La viscosité est calculée par les outils du National Institute of Standards and Technology. Dans la simulation, une loi puissance unique $\nu_{simu} = 1.788 \cdot 10^{-5} T^{0.686}$ est utilisée. Le Reynolds principal du jet est proche de 140 000. Le jet d'hydrogène a un Reynolds dix fois plus faible. Les vitesses u' et tailles l_t caractéristique sont estimée respectivement à 20% U (conformément au choix de Cheng (28)) et 10% D (d'après la Fig. 6.3). L'échelle de Kolmogorov est de l'ordre de $4\mu m$.

Grandeur	Jet Oxydant	Jet Hydrogène
$\nu [Kg.m^{-1}.s^{-1}]$	$1.818 \cdot 10^{-4}$	$2.697 \cdot 10^{-4}$
$\nu_{PL} [Kg.m^{-1}.s^{-1}]$	$1.763 \cdot 10^{-4}$	$5.463 \cdot 10^{-4}$
$U [m/s]$	1420	1780
$u' [m/s]$	284(20% U)	356(20% U)
$D [m]$	$17.78 \cdot 10^{-3}$	$2.36 \cdot 10^{-3}$
$l_t [m]$	$1.78 \cdot 10^{-3}$ (10% D)	$2.36 \cdot 10^{-4}$ (10% D)
$\eta [m]$	$4.64 \cdot 10^{-6}$	$3.18 \cdot 10^{-6}$
Re	138878	15575
$Re_t(l_t)$	2778	311

TAB. 6.1 – Analyse dimensionnelle de la dynamique de la flamme de Cheng

Les Reynolds Re observés sont élevés, donc les grandes échelles de cet écoulement ne sont pas affectées par la dissipation visqueuse. La turbulence issue du jet d'hydrogène est bien plus faible que l'oxydant. De plus, la viscosité y est largement surévaluée (+103%) bien qu'elle soit correcte pour l'oxydant (-3%). Cependant, le débit massique de carburant représente 0.4% du débit total, ce qui permet de négliger la turbulence émise par ce dernier.

La gamme de Reynolds [15 000, 150 000] est à la portée de la simulation des grandes échelles. Il convient de préciser les échelles présentes, et de les comparer aux échelles de résolution pour anticiper la qualité des calculs.

6.3.2 Echelle de coupure

La Fig. 6.4 trace dans un graphique Log-Log le Reynolds turbulent $Re_t(r)$ en fonction de l'échelle pour le jet de carburant et le jet d'oxydant. La borne inférieure de la gamme de Reynolds est fixée par l'échelle de Kolmogorov η . La borne supérieure est fixée par la longueur intégrale l_j . L'échelle 0.1mm est choisie pour partager les gammes de Reynolds en parties résolues (blanches) et modélisées (grises).

La Fig. 6.4 montre la différence de traitement des deux jets. Le jet de carburant présente une décade et demie modélisée pour moins d'une décade résolue. Au contraire, le jet d'oxydant possède autant d'échelles résolues que modélisées sur une décade et demie.

En prenant une échelle de coupure de 0.1mm, la turbulence du jet d'oxydant est correctement calculée par la simulation des grandes échelles. La turbulence du jet de carburant est calculée avec moins de précision, mais son influence est négligeable comparée à celle de l'oxydant.

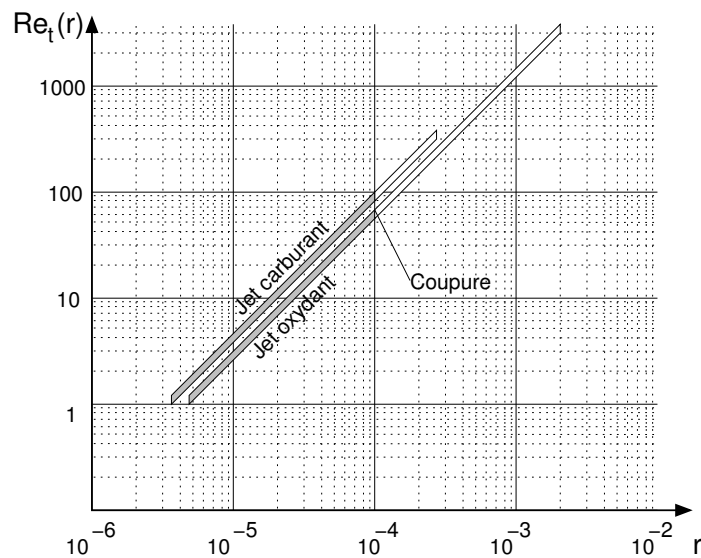


FIG. 6.4 – Gamme des échelles couvertes par les jets de carburant et d'oxydant, et choix d'une échelle de coupure à $1 \cdot 10^{-4}$ m

6.3.3 Compressibilité

Le brûleur de Cheng utilisant un jet coaxial supersonique, des effets de compressibilité sont probablement présents dans la dynamique, induisant une turbulence compressible. Cela pourrait exiger l'utilisation de modèles de turbulence compressibles. L'importance des effets de compressibilité peut être évaluée par une nouvelle analyse dimensionnelle.

Une couche de cisaillement entre deux fluides 1 et 2 produit de la turbulence compressible si le cisaillement est suffisamment élevé. Pour l'évaluer, il faut d'abord avoir une vitesse de convection U_c qui dépend des caractéristiques de chaque fluide : vitesse $U_{1,2}$, vitesse du son $C_{1,2}$, rapport des chaleurs massiques $\gamma_{1,2}$. Cette vitesse donne pour chaque fluide un Mach convectif $M_{c,1,2} = U_c/C_{1,2}$ indiquant l'impact de la couche limite sur le fluide. La 'pression convective' P_c doit être équivalente dans les deux fluides, ce qui mène à l'Eq. 6.1 :

$$\left(1 - \frac{\gamma_1 - 1}{2} * M_{c,1}^2\right)^{\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1}\right)} = \left(1 - \frac{\gamma_2 - 1}{2} * M_{c,2}^2\right)^{\left(\frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1}\right)} \quad (6.1)$$

Cette relation détermine U_c et permet d'en déduire $M_{c,1}$ et $M_{c,2}$. Le Mach convectif indique le degré de compressibilité pour le fluide. Pour $M_c \ll 0.3$, la turbulence générée est incompressible. Pour $M_c \gg 0.3$, la turbulence générée est compressible.

Pour la couche de mélange carburant/oxydant, le calcul de U_c donne 1527 m/s. Cela implique un Mach convectif valant 0.149 pour l'oxydant et 0.143 pour le carburant. Pour la couche de mélange oxydant/extérieur, le calcul de U_c donne 456.85 m/s. Cela implique un Mach convective valant 1.35 pour l'oxydant et 1.27 pour l'extérieur.

Ainsi, le mélange entre hydrogène et oxydant chaud qui nous intéresse est soumis à une turbulence faiblement compressible. La turbulence de la couche de mélange extérieure est très fortement compressible, mais n'a pas d'influence majeure sur les premiers stades de la combustion.

Dans le cadre de notre étude, les modèles de combustion et de turbulence qui ne prennent pas en compte de turbulence compressible sont donc suffisants.

6.3.4 Mélange réactif

Par définition, la partie du mélange par agitation turbulente aux petites échelles est en dessous de la résolution de la SGE. Or l'auto-allumage commence dès la mise en contact des deux réactifs, c.a.d. au début de la couche de mélange annulaire qui sépare l'hydrogène de l'oxygène. C'est dans cet endroit que le manque de résolution est le plus critique.

Cela se traduit par une surestimation du taux de réaction chimique. En effet, les zones à gradients très forts contiennent peu de mélange, donc peu de taux de réaction, comme illustré dans la Fig. 6.5. Si les gradients sont diminués par manque de discrétisation, le mélange, donc la réaction, sont plus intenses. Il est possible d'introduire des modèles de mélange de sous-maille qui diminuent la combustion lorsque le gradient se rapproche de la taille du maillage, comme Villasenor *et al.* (146).

Nous verrons plus loin que la flamme supersonique présente une combustion très hétérogène, avec de fortes variations locales de mélange. Si l'on souhaite résoudre ces variations locales, Le modèle de sous-maille ne peut pas créer l'instationnarité très forte de la couche de mélange.

La temps chimique caractéristique t_c de la réaction en jeu dans la flamme de Cheng est proche de $t_c = 5 \cdot 10^{-6} s$. Le temps caractéristique de la turbulence t_t se situe autour de $t_t = 1 \cdot 10^{-8} s$, d'après

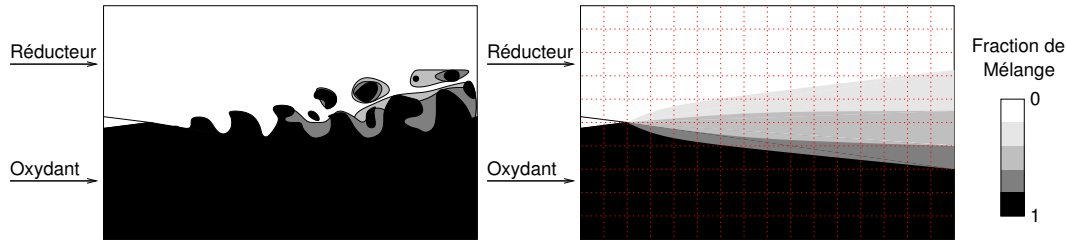


FIG. 6.5 – Ségrégation réelle de sous-maille

le Tableau 6.1. L'impact de la turbulence sur le temps de réaction se mesure avec le nombre de Damköhler $Da = t_t/t_c$, et vaut ici $Da = 2 \cdot 10^{-3}$. Par conséquent, la chimie est complètement pilotée par la turbulence. Cela se traduit par une très grande hétérogénéité dans l'avancement de la réaction : statistiquement, on peut trouver en tout point de la couche de mélange, toutes les fractions de mélanges associée à un avancement de réaction allant de l'absence de réaction à la réaction complète.

L'utilisation de fonctions de densités de probabilité (PDF) est sans doute la meilleure méthode actuelle pour étudier une combustion aussi hétérogène. Une fonction statistique peut représenter la diversité des mélanges et des taux d'avancement de la réaction, au moyen d'hypothèses faites sur la loi de micro-mélange. Les différentes manières d'utiliser cette technique ont été testées par Mobus *et al.* (106), précisément sur la flamme de Cheng, en utilisant un code RANS pour résoudre la dynamique. Notons au passage que la diffusion différentielle, essentielle pour l'autoallumage, complique sérieusement le calcul de la combustion par PDF. Les techniques de PDF sont également utilisables en LES, au détriment de la prédictivité : dans une approche LES idéale, l'hétérogénéité d'un écoulement devrait être résolue, pas modélisée.

Dans le souci d'aborder progressivement ce point difficile, les simulations présentées ici se limitent à une combustion 'laminaire', sans prendre en compte l'impact de la turbulence ou de la ségrégation dans un modèle de combustion de sous-maille. Ce choix permet d'observer la résolution de l'hétérogénéité de la combustion supersonique par la simulation des grandes échelles. Il faut s'attendre à une surestimation du mélange, et donc de la vitesse de réaction.

6.4 Création d'un schéma cinétique simplifié

6.4.1 Thermodynamique

Les détails du brûleur en Fig. 6.1 donnent une description précise des réactifs avant combustion. La thermodynamique permet une description tout aussi précise de l'état d'équilibre de ces gaz après combustion. L'étude est focalisée sur le début de la flamme, donc l'équilibre n'est pas encore atteint dans tout le jet. Chaque particule fluide du jet est dans un état situé entre l'état initial, connu, et l'état d'équilibre final déduit de la thermodynamique.

La composition moléculaire d'un mélange d'atomes tend vers un état d'équilibre pour une énergie (pression et température) donnée. Cette composition s'obtient par le calcul en minimisant la fonction de Gibbs (66) qui dépend des propriétés thermodynamiques de chaque molécule (enthalpie de formation et enthalpie sensible). Ces propriétés sont disponibles dans des tables (Ex : tables JANAF (23)). Les calculs présents sont faits avec le module EQUIL de la chaîne CHEMKIN II (81). Comme la flamme de Cheng est une flamme de diffusion (les réactifs sont initialement séparés) seul le mélange stœchiométrique est calculé. La température du mélange initial est choisie proche de celle du comburant largement majoritaire, à 1200°K. Le mélange stœchimétrique initial est détaillé dans le Tableau 6.2.

La composition des produits de combustion obtenue est détaillée dans le Tableau 6.3. Bien que l'eau soit le produit principal de la réaction hydrogène/oxygène (80% de la masse), on trouve encore de l'oxygène (9%) et du monoxyde d'hydrogène (8.5%) dont la formation est endothermique.

Dans la flamme que nous étudions, cet état d'équilibre correspond à l'extrême limite que chaque particule fluide réactive peut atteindre. Aucun point ne pourra être plus chaud que 2643.9°K. La combustion d'un mélange stœchiométrique d'hydrogène et d'oxygène purs initialement à 1200°K, mène à une température de fin de combustion de 3183°K. La flamme est globalement très pauvre ($\phi = 0.123$), donc le mélange entre les gaz brûlés et l'oxydant en excès donne en aval à une température de combustion globale très inférieure.

Espèces	Fractions molaires	Fractions massiques
H_2	0.2867	0.0299
O_2	0.1434	0.2376
N_2	0.3880	0.5628
H_2O	0.1819	0.1697

Température d'équilibre	1200°K
Masse molaire moyenne	19.3[g/mol]

Tab. 6.2 – Mélange stœchiométrique initial

Pour simplifier la construction de la cinétique chimique, il est intéressant de se ramener à la production/consommation d'espèces fictives. Ces espèces fictives représentent chacune un mélange précis d'espèces. Leur utilisation réduit significativement le nombre de paramètres, un avantage indispensable pour le réglage de la cinétique d'autoallumage.

Le bilan thermodynamique précédent part du principe que l'oxydant est un mélange d'oxygène

Espèces	Fractions molaires	Fractions massiques
H_2	0.0453	0.0042
O_2	0.0161	0.0238
N_2	0.4350	0.5629
H_2O	0.4605	0.3832
OH	0.0288	0.0226
H	0.0104	0.0005
O	0.0039	0.0029
Température d'équilibre		2643.9 °K
Masse molaire moyenne		21.65[g/mol]
Enthalpie de formation moyenne		-105755[Kj/mol]

TAB. 6.3 – Mélange Final

(0.201 moles) dilué dans de l'azote (0.544 moles) et de l'eau (0.255 moles). Cependant, l'oxygène de l'air ambiant peut participer à la combustion. Pour prendre en compte ce deuxième oxydant, il faut raisonner sur une réaction entre hydrogène et oxygène non dilués : 0.8903 moles d'hydrogène réagissant avec 0.4451 moles d'oxygène, à 1200°K. La description du produit de cette réaction non diluée est donnée dans le Tableau 6.4. On y remarque que ce mélange *P* contient toujours les espèces minoritaires *OH*, *O* et *H*. Par ailleurs, son enthalpie de formation est inférieure de 34% aux -238922Kj/mol de l'eau pure. on verra par la suite que ce mélange *P* pourra être utilisé pour la cinétique d'auto-allumage.

Espèces	Fractions molaires	Fractions massiques
H_2	0.1254	0.0158
O_2	0.0446	0.0890
H_2O	0.7107	0.7982
OH	0.0797	0.0845
H	0.0289	0.0018
O	0.0107	0.0107
Masse molaire moyenne		16.04[g/mol]
Enthalpie de formation moyenne		-157966[Kj/mol]

TAB. 6.4 – Mélange produit *P*

Le chapitre 4 a prouvé que, en situation d'auto-allumage, la réaction commençait par une phase d'induction, suivie d'un emballement thermique. L'induction crée un ensemble d'espèces intermédiaires sans augmentation de température. Lors de l'emballement, ces intermédiaires se transforment rapidement en produits finaux tout en dégageant de la chaleur. Cet état intermédiaire est pris en compte pour modéliser un auto-allumage en deux étapes : induction puis emballement.

Le mélange d'espèces intermédiaires dépend de la température et du mélange initial. Par contre, sa production ne dégage presque pas de chaleur, ce qui signifie qu'il a une enthalpie de formation très faible. Nous choisissons un mélange intermédiaire I inspiré du mélange à l'équilibre P , lui-même produit de la réaction H_2/O_2 purs. Une partie de l'eau présente dans P est re-dissociée en hydrogène et oxygène, afin de rendre l'enthalpie de formation moyenne négligeable, tout en conservant les atomes.

Le Tableau 6.5 décrit le mélange intermédiaire arbitraire. L'enthalpie de formation moyenne vaut $-210[Kj/mol]$, limitant le dégagement de chaleur à 0.1% de la chaleur globale dégagée. Le mélange contient une très forte proportion d'hydrogène et d'oxygène. Au contraire, la proportion d'eau est faible, plus faible même que le monoxyde d'hydrogène. Ce mélange nommé I est produit de façon quasi isotherme. Lors de sa formation, il y a génération d'eau d'une part (exothermique) et d'intermédiaires réactionnels OH, O, H d'autre part (endothermique). Par construction, il contient la même proportion d'atomes H et O , et peut générer les produits P sans apport d'hydrogène ou d'oxygène supplémentaire.

Espèces	Fractions molaires	Fractions massiques
H_2	0.5905	0.0987
O_2	0.2817	0.7473
H_2O	0.0381	0.0569
OH	0.0599	0.0845
H	0.0021	0.0018
O	0.0008	0.0107

Masse molaire	12.06[g/mol]
Enthalpie de formation	-210[Kj/mol]

Tab. 6.5 – Mélange intermédiaire arbitraire I

6.4.2 Cinétique chimique

L'étude thermodynamique précédente a conduit à la définition de deux espèces fictives I et P . Elles vont être utiles pour construire une cinétique chimique. Deux étapes irréversibles, une étape d'induction (Eq. 6.2), et une d'emballlement (Eq. 6.3) constituent l'approche la plus simple.

La cinétique chimique utilise une loi d'Arrhénius pour chaque étape. La variable d'avancement Q_1 de l'induction utilise les fractions massiques Y_{H_2} et Y_{O_2} , la densité ρ et la température T , avec les paramètres $A_{f,1}$, $E_{a,1}$, ν'_{H_2} , ν'_{O_2} (cf. Eq. 6.4). La variable d'avancement Q_2 de l'emballlement thermique utilise pour variables les fractions massiques Y_I , la densité ρ et la température T , avec les paramètres $A_{f,2}$, $E_{a,2}$, ν'_I (cf. Eq. 6.5).

Dans cette approche à deux étapes simplifiées, la cinétique est déterminée par 7 paramètres. Il reste donc à déterminer le jeu de paramètres qui conduit à deux étapes consécutives d'induction et d'emballlement comme illustré en Fig. 6.6. De plus, à la lumière du Chap. 4, l'emballlement thermique doit démarrer à $t_{all} = t_{HMI}$.

Ce modèle cinétique est appliqué à une configuration d'auto-allumage HMI (cf. chapitre allumage). Il est comparable à un schéma cinétique complet du point de vue thermodynamique, dès que le mélange des 6 espèces H_2 , O_2 , N_2 , H_2O , P , I est converti en mélange H_2 , O_2 , N_2 , H_2O , OH , O , H grace aux tableaux 6.4 et 6.5.

Les critères utilisés pour établir cette cinétique favorisent la simplicité du schéma, à la seule condition d'observer le comportement induction/emballlement. D'autres choix utilisant plus de paramètres ont été envisagés : étapes réversibles, dépendance en température, dépendance à un troisième corps. Chacune de ces voies a été explorée puis écartée. Le nombre de paramètres augmente la difficulté de mise au point sans gain appréciable sur la précision finale du schéma.



$$Q_1 = A_{f,1} \exp\left(-\frac{E_{a,1}}{\mathcal{R}T}\right) \left(\frac{\rho Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right)^{\nu'_{H_2}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{\nu'_{O_2}} \quad (6.4)$$

$$Q_2 = A_{f,2} \exp\left(-\frac{E_{a,2}}{\mathcal{R}T}\right) \left(\frac{\rho Y_I}{W_I}\right)^{\nu'_I} \quad (6.5)$$

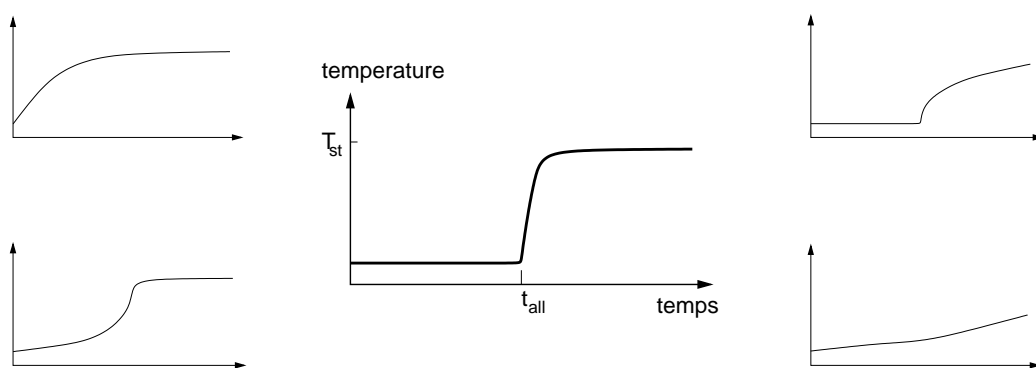


FIG. 6.6 – Modèle de combustion

Le jeu de paramètres retenus favorise largement la première étape. Ainsi, le fait que les deux étapes soient successives et que seule la deuxième soit exothermique implique un emballement thermique brutal :

$$Q_1 = 1 \cdot 10^{15} \exp\left(-\frac{20000}{RT}\right) \left(\frac{\rho Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right)^1 \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^1 \quad (6.6)$$

$$Q_2 = 1 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{27000}{RT}\right) \left(\frac{\rho Y_I}{W_I}\right)^1 \quad (6.7)$$

FIG. 6.7 – Schéma *PI*

Les exposants des espèces sont tous fixés à l'unité. Dans la formulation Arrhénius, ils sont égaux aux coefficients stœchiométriques, mais le rapport $\nu'_{H_2} = 2 \times \nu'_{O_2}$ fixe une forte dépendance en hydrogène. Cela entraînerait une réaction trop brutale. La dépendance linéaire sur chaque réactif entraîne une réaction associée plus progressive, c.a.d. plus de robustesse pour le calcul.

Les temps d'auto-allumages observés en configuration HMI sont tracés sur la Fig. 6.8 en fonction de la fraction de mélange. Les cinétiques utilisées sont les schémas de Yetter (155) de Baurle (10) et le schéma PI, avec une thermodynamique complète (JANAF (139)). On observe que le temps d'allumage le plus court est d'environ $t_{HMI} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ sec}$. Le schéma *PI* ne reproduit naturellement pas la dépendance en fraction de mélange. Au contraire, il effectue un allumage en bloc de l'ensemble des mélanges.

Si l'on regarde la montée en température de la couche de mélange HMI cf. Fig. 6.9, on observe une bonne correspondance entre la cinétique complète de Yetter et la cinétique simplifiée du schéma PI. D'après ce test d'autoallumage *HMI*, le schéma *PI* réalise un auto-allumage similaire au schéma complet de Yetter du point de vue de l'évolution en température. La dépendance envers le mélange n'est pas capturée par le schéma *PI*. Pour retrouver une dépendance correcte, on prendra le schéma de Baurle.

6.5 Simulations

Ces simulations ont fait l'objet d'une session plénière lors de la conférence internationale *CY-LES, complex effects in large eddy simulation* tenue à Limassol en septembre 2005. L'article qui l'accompagne est destiné à paraître dans un journal, et est intégralement reproduit ci-après :

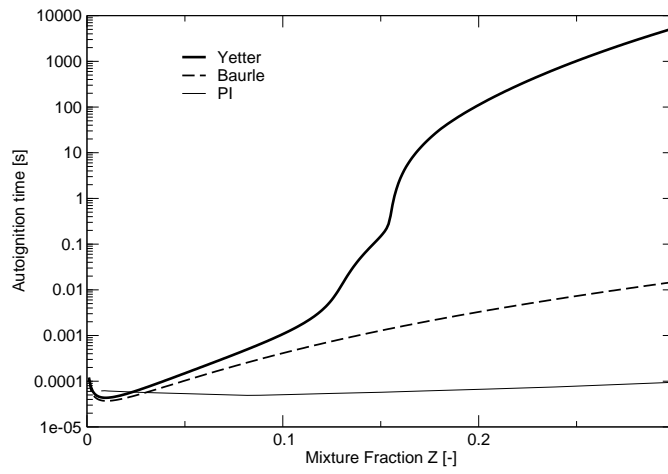


FIG. 6.8 – Comparaison de l’autoallumage HMI réalisé par le schéma complet de Yetter , le schéma semi réduit de Baurle et le schéma PI

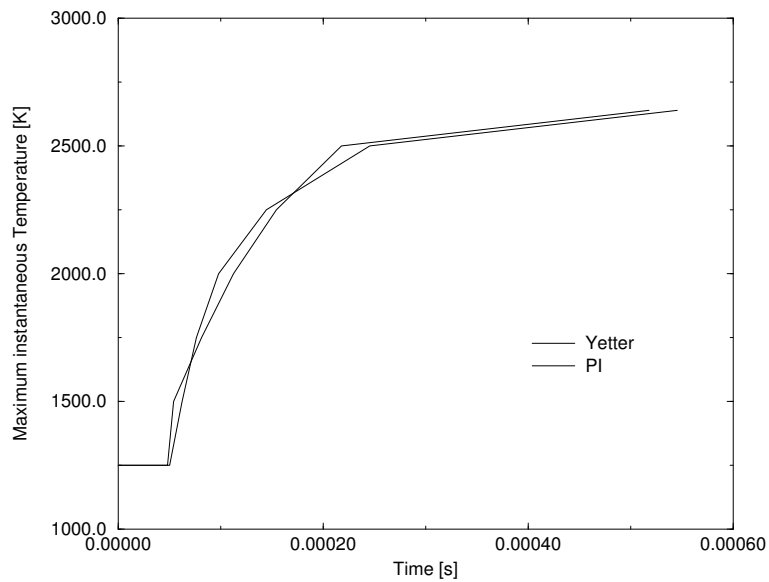


FIG. 6.9 – Comparaison des montées en température dans la couche HMI entre le schéma complet de Yetter et le schéma PI

Large Eddy Simulation of Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame

A. Dauplain¹, B. Cuenot², T.J. Poinso³, and S. Zurbach⁴

¹ CERFACS, 42 ave. G. Coriolis 31 057 Toulouse Cedex 1, France.
dauplain@cerfacs.fr

² CERFACS, 42 ave. G. Coriolis 31 057 Toulouse Cedex 1, France.
cuenot@cerfacs.fr

³ IMFT, 1 Allée du Professeur Camille Soula 31 400 Toulouse, France.
poinso@imft.fr

⁴ Snecma Moteurs, Division Moteurs-fusées, Forêt de Vernon - BP 802, 27208 Vernon, France. Stephan.ZURBACH@sneema.fr

1 Introduction

Supersonic combustion is a promising field of investigation. It is involved in supersonic ramjets (scramjets) or in rocket engine devices. The extreme operating conditions of these applications, such as Mach 7 airflow for scramjets or ambient vacuum for rocket engine ignition, induce expensive and non-realistic ground based experiments. The use of CFD may help to fill the gap between affordable test devices and the final design.

The work of Cheng and Wehrmeyer [1] with the supersonic burner (SSB) at the NASA Langley Research Center (LaRC) provided accurate experimental data about the dynamics, the mixing and the combustion conditions at various locations downstream the injector.

Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) simulations already successfully predicted the mean flow properties, using a turbulent combustion model based on Probability Density Functions (Toone *et al.* [2]; Mobus *et al.* [3]). Large Eddy Simulation can use a similar approach, the Filtered Density Functions (Pope and Givi [4, 5]) with a high computational cost. The computations can be optimized for steady configurations with the *in situ* adaptive tabulation (ISAT) [6]. The present work is a first attempt to apply Large Eddy Simulation (LES) to this configuration, in order to predict fluctuation levels and investigate the unsteady behavior of the flame. In the frame of developing a tool able to simulate various combustion regimes (propagating and auto-igniting flames) in complex geometries, the FDF approach requires an unaffordable computational cost. Hence, the present work observes a LES where combustion is fully controlled by the resolved scales.

2 A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinso, and S. Zurbach

2 Experiment Description

The SSB sketched in Fig. 1 produces an axi-symmetric flame from a sonic pure hydrogen cold jet (Diameter $D = 2.36\text{mm}$) surrounded by a largely supersonic (Mach 2) jet of hot products generated by a lean combustor. It gives an auto-ignited flame, i.e. fuel and oxidizer are reacting as soon as they are mixed. However, photographs of the experiment [1] showed that there is no emission of light for $0 < x/D < 25$. The SSB global equivalence ratio is close to 0.1. The Reynolds number is 100 000 and the convective mach number is 0.12.

Cheng and Wehrmeyer measured temperature, oxygen and nitrogen concentrations and velocity with coherent anti-Stokes Raman spectroscopy and laser Doppler velocimetry. They obtained simultaneous measurements of temperature and concentration of major species (H_2, O_2, N_2, H_2O) and OH radicals with ultraviolet spontaneous vibrational Raman scattering combined with laser induced predissociative fluorescence. Measurements were made in the radial direction at the downstream locations $x/D = 0.85, 10.8, 21.5, 32.3$ and 43.1 , x being the downstream distance and $D = 2.36\text{mm}$ the inside diameter of the fuel jet.

Dimensions	
Nozzle exit inner diameter	17.78 mm
Fuel injector inner diameter	2.36 mm
Fuel injector outer diameter	3.81 mm
Vitiated Air Exit Conditions	
Pressure	107 kPa
Temperature	1250 K
Mach number	2.0
Velocity	1420 m/s
O_2 mole fraction	0.201
N_2 mole fraction	0.544
H_2O mole fraction	0.255
Fuel Exit Conditions	
Pressure	112 kPa
Temperature	540 K
Mach number	1.0
Velocity	1780 m/s
H_2 mole fraction	1.0

Table 1. Experimental parameters.

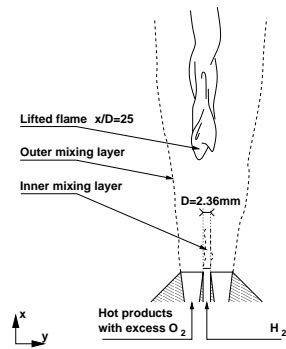


Fig. 1. Sketch of Supersonic Burner installed at NASA Langley Research Center

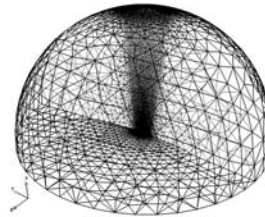


Fig. 2. Skin and middle plane of the unstructured mesh

3 Computational Domain

The computed domain is a half sphere of radius $70D$ shown in Fig. 2. The plane boundary is set as a tri coaxial inlet. At the center, a sonic fuel inlet is specified with a turbulence injection. It is surrounded by an oxidizer inlet with a second turbulence injection. The turbulence injected in the fuel has an integral scale of $0.8mm$ and a RMS velocity of $180m/s$, while in the oxidizer the integral scale is $6mm$ and the RMS velocity is $125m/s$. A co-flow of $20m/s$ is finally imposed on the outer ring. The convex boundary on the sphere is a freestream outlet for subsonic zones. All boundary conditions are set with the NSCBC method [7].

The mesh contains 807 520 tetrahedras for 139 560 nodes, allowing a resolution of 25 to 30 nodes in the diameter of both fuel an oxidizer jets. It is designed to resolve the main structures occuring around the cylindrical mixing layer between oxidizer and fuel in the first ten diameters.

4 Models

Simulations were performed with the code AVBP developed at CERFACS. The multi-species fluid dynamics solver involves a Third order Taylor Galerkin Compact (TTGC) scheme for space direction, and a third order Runge-Kutta scheme for explicit time advancement. A specificity of the present flow is the necessity of handling chemistry and turbulence but also shocks: LES is not well established for non-reacting flows with shocks and is still exploratory

4 A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinso, and S. Zurbach

when combustion must also be taken into account as it is the case here. For the present computation, the following strategy was used:

1. a penalty method on Euler fluxes based on the Von-Neumann Richtmyer viscosity [8] was employed to capture the shocks.
2. local sensors were used to add artificial viscosity in strong gradient zones (typically near the inlet conditions).
3. chemistry was modeled explicitly by using Arrhenius rates. The focus is on the resolved impact of turbulence on combustion.
4. Subgrid stresses are modeled with a Smagorinsky model.

In a very first approach, the chemistry model is a two-step scheme (Table 2). The produced species pool \mathbf{P} results from the equilibrium mixture reached after a stoichiometric combustion between Oxydant and Fuel. The induction step is mimicked through the non-exothermic formation of an intermediate species pool \mathbf{I} .

Chemical kinetics are fitted on autoignition. According to the work of R. Knikker *et al.* [9], the ignition time of a mixing layer between hot oxidizer and cold fuel can be estimated from the homogeneous mixing ignition time. Simulation performed with the CHEMKIN package and the 9 species - 19 reactions scheme of Yetter *et al.* [10] predict the minimum ignition time $t_{ign}^{HMI} = 5.6 \cdot 10^{-5} s$. The simplified chemistry model detailed in Table 2 is designed to give the same minimal ignition time for a one-dimensional auto-igniting mixing layer.

Step	reaction	A	β	E_0
Induction	$0.68H_2 + 0.34O_2 \Rightarrow I$	$1.0 \cdot 10^{15}$	0	20000
Run off	$I \Rightarrow 0.73P$	$1.0 \cdot 10^9$	0	27000

Table 2. The two-steps auto-ignition scheme based upon the ignition time

5 Results

The simulation leads to a lifted flame as in experiment. Fig. 3.a shows the abrupt rise of temperature of $1500K$ around $x/D = 15$ on the instantaneous image. This rise is smoothed downstream over $5D$ on the time averaged image. The lift-off length is then around $x/D = 17$, to be compared with the experimental value of $x/D = 25$. The fluctuating nature of the reactive mixing layer is illustrated on Fig. 3.b where the production of \mathbf{P} is plotted. Strong large structures comparable to Kelvin-Helmoltz eddies can be seen in the lift-off region $0 < x/D < 15$. The pressure field in Fig. 3.c presents two diamond-shock patterns relative to Oxidizer and Fuel injection. The shock pattern relative to the fuel moves in response to the turbulence injected so it vanishes quickly on the average field before $x/D = 2.5$. The shock pattern relative to the Oxidizer gets stronger from the injected static pressure ratio of 1.05 up to 1.3. The pressure oscillation, which reaches $0.6Bars$, is strongly coupled with the reaction zones (See Driscoll *et al.* [11]).

5.1 Longitudinal evolution

Along the longitudinal axis, the mean velocity, temperature, water concentration and mixture fractions are compared to experimental data. In Fig. 4.a, the axial velocity decreases from hydrogen to hot products bulk velocity (1780 to 1420 m/s) in the first ten diameters. An acceleration about $200m/s$ occur because of the diamond-shock pattern. The mean inlet velocity is slightly higher than the experimental one because of mesh requirements, to keep the correct mass flow rate

The mean temperature and water concentration show similar behaviors (Figs. 4.b and 4.c), reaching their maximum around $x/D = 17$, then decreasing slowly to 50% of the maximum value at $x/D \sim 60$. An induction zone is visible up to $x/D \sim 10$ then the equilibrium is reached as fast as the experiment. This too fast combustion is due to the simplified kinetic model of Table 2. Finally, the slow decrease is the result of diffusion that is too fast in the range $20 < x/D < 70$, where the Smagorinsky model is active on an under-resolved grid. This effect is also visible on the mixture fraction longitudinal (Fig. 4.d) and transversal profiles (Fig. 5.d).

5.2 Transverse evolution

The mean profiles of velocity, temperature and water concentration on Fig. 5 show a fair agreement with experimental data. Fig. 5.a shows that the simulated jet spreads radially over $10D$, as in the the experimental evolution. Temperature and water concentration profiles of Figs. 5.b and 5.c present the correct evolution but the main ignition occurs before $x/D = 21.5$, much closer to the injector than in the experiment.

6 A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinso, and S. Zurbach

The RMS profiles of velocity, temperature and water concentration are plotted on Fig. 6. The injected coherent structures give strong velocity fluctuations (Fig. 6.a). The first profile at $x/D = 0.85$ shows clearly the difference between fluctuations of the fuel and the oxidizer jets. These fluctuations are weakly damped during their convection downstream in spite of the diffusion by the Smagorinsky subgrid scale model on the coarse mesh. Temperature and water concentration fluctuation levels are similar to the experimental measurements, with the same discrepancy already observed on the mean profiles due to the advanced ignition.

6 Conclusion

A first attempt to simulate the supersonic flame experiment of Cheng and Wehrmeyer [12, 1] with a Large Eddy Simulation approach has been performed and obtained some agreement with the experiment. The lifted flame is clearly captured with a two-step chemistry. The simulation reproduced the fluctuating mixing layer between oxidizer and fuel developed 15 diameter downstream to the injection, and the complex diamond-shock pattern coupled with combustion as observed by Driscoll *et al.* [11]. Despite a very coarse mesh leading to over-diffusion by the Smagorinsky subgrid-scale model, the mean quantities of velocity and temperature are reasonably predicted in terms of shape, amplitude, and evolution. The level of fluctuations are of the order of the experimental values. These first results are very encouraging and prove that a LES based only on resolved scales is already an efficient tool to study the main features of supersonic reactive flows.

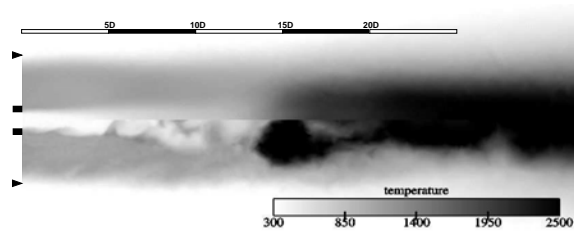
Acknowledgements

The authors are grateful to Snecma company, member of the SAFRAN group, and CNES for their financial support (CIFRE grant 450/2002). The authors wishes to thank CINES computer center for computational resources.

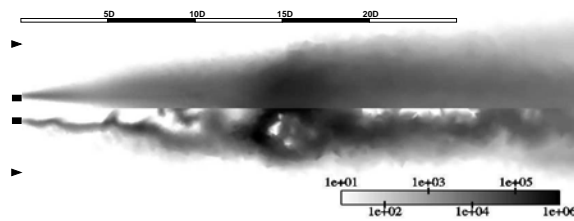
References

1. T.S. Cheng, J.A. Wehrmeyer, R.W. Pitz, O. Jarrett, G.B. Northam: *Combustion and Flame* **99**, 157–173 (1994)
2. P. Toone: (2002), “A computation fluid dynamic model of a supersonic axisymmetric jet using a beta probability function combustion model”, Tech. rep., Departement of Mechanical Engineering, Purdue University
3. H. Mobus, P. Gerlinger, D. Bruggemann: *Comb. Flame* **132**(1), 3–24 (2003)
4. P. Colucci, F. Jaber, P. Givi, S.B. Pope: *Phys. Fluids* (1998)
5. F. Jaber, P. Colucci, S. James, S.B. Pope: *J. Fluid Mech.* **401**, 85–121 (1999)

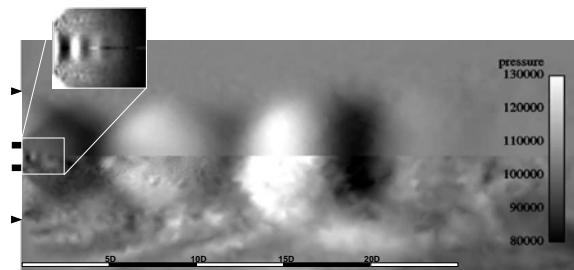
Large Eddy Simulation of Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame 7



a) Mean (top) and instantaneous (bottom) temperature in K .



b) Mean (top) and instantaneous (bottom) production of products P in $mol.m^{-3}.s^{-1}$.



c) Mean (top) and instantaneous (bottom) pressure in Pa .

The mean pressure of the central jet is enlarged and enhanced.

Fig. 3. Longitudinal cuts of temperature, production of species P and pressure.

6. C.J. Montgomery, W. Zhao, B.R. Adams: "Supersonic combustion simulations using reduced chemical kinetics mechanisms and ISAT", in *24th Fluid Dynamics*

8 A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinsot, and S. Zurbach

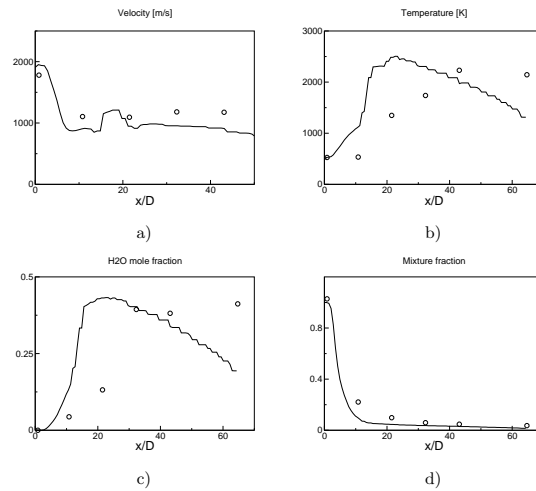
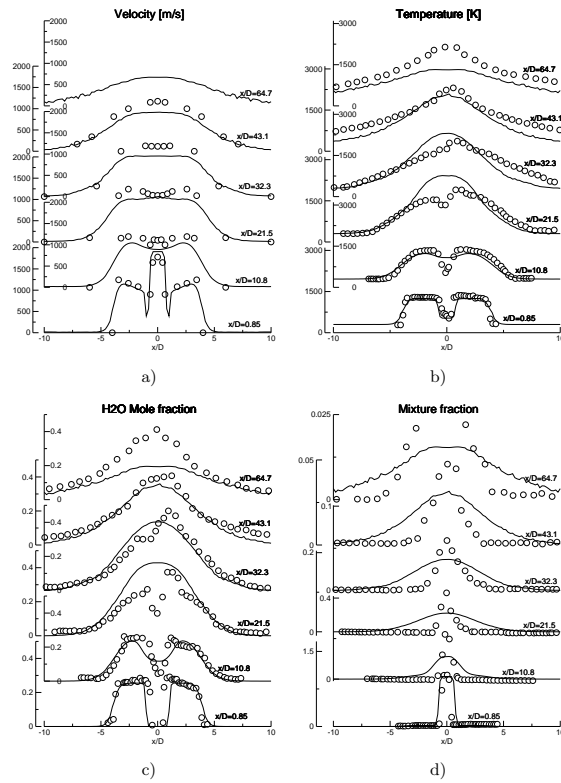


Fig. 4. Mean profiles on the longitudinal axis. Symbols: expt, line: LES.

- meeting, Orlando, Florida, U.S.A.* Vol. AIAA Paper 2003-3547 (2003)
7. T. Poinsot, S. Lele: *Journal of Computational Physics* **101**(1), 104–129 (1992)
 8. J. VonNeumann, R. Richmyer: *Journal of Applied Physics* **21** (1950)
 9. R. Knikker, A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinsot: *Combustion Science and Technology* **175**(10), 1783–1806 (2003)
 10. R. Yetter, F. Dryer, H. Rabitz: *Combustion Science and Technology* **79**, 97–128 (1991)
 11. J. Driscoll, H. Huh, Y. Yoon, J.M. Donbar: *Combustion and Flame* **107**, 176–186 (1996)
 12. T.S. Cheng, J.A. Wehrmeyer, R.W. Pitz: *Combustion and Flame* **91**, 323–345 (1992)

Large Eddy Simulation of Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame

9

**Fig. 5.** Mean profiles for six transversal planes. Symbols: expt, line: LES.

10 A. Dauplain, B. Cuenot, T.J. Poinot, and S. Zurbach

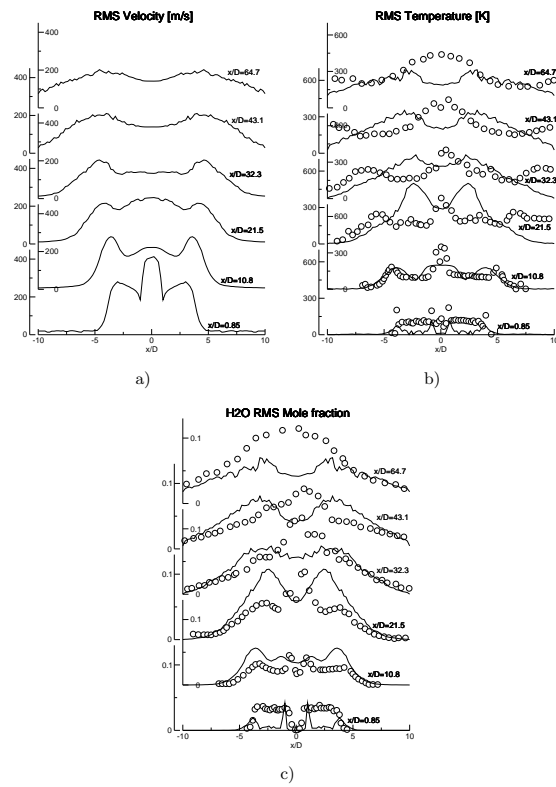


Fig. 6. Root Mean Square profiles for six transversal planes. Symbols: expt; line: LES.

6.6 Analyse de l'hétérogénéité

L'intérêt de l'expérience de T.S. Cheng vient en grande partie des mesures simultanées de la température et de la concentration des espèces H_2 , O_2 , OH , H_2O , à plusieurs positions sur l'axe de la flamme. Ces informations indiquent le mélange dans la flamme (riche/pauvre) et l'avancement de la réaction (induction/dégagement de chaleur). L'accumulation des mesures sur une longue période donne aussi la fluctuation de ces deux grandeurs. La simulation numérique aux grandes échelles produit une solution instationnaire, dont les variations peuvent être comparées à l'expérience. Pour réaliser la comparaison, des sondes placées aux points de mesure expérimentaux enregistrent les fractions massiques et la température. Les données obtenues sont directement comparables aux observations de T.S. Cheng. La simplicité de la cinétique chimique et du maillage utilisés dans cette simulation va être visible sur ces comparaisons. Nous saurons donc quel biais est introduit par l'utilisation d'un schéma à deux étapes. Le premier point de mesure, $x/D = 0.85$ et $r/D = 0.65$, se situe dans le sillage annulaire du séparateur des jets coaxiaux. A cet endroit, la couche de mélange est encore fine, ce qui implique une grande sensibilité du résultat par rapport à la position de la sonde. L'ensemble des observations expérimentales de la Fig. 6.10 (\circ), se regroupent sur la ligne en pointillés correspondant au mélange sans réaction (trait interrompu). Les ions hydroxydes (Fig. 6.10.c) sont inexistantes, montrant que la réaction d'induction n'est pas encore initiée. On remarque que les points sont dispersés autour de la stœchiométrie au voisinage des températures et concentrations initiales. En particulier, la température du mélange varie avant combustion entre 1000 et 1500 °K.

Les observations numériques (\bullet) trahissent un début de réaction d'induction significatif (Fig. 6.10.c), bien que les réactifs principaux n'aient pas encore été vraiment touchés, comme le prouve la courbe de l'hydrogène (trait interrompu, Fig. 6.10.a). Le sillage du séparateur coaxial est initialisé avec de l'azote pur, ce qui induit un biais sur les courbes de l'hydrogène, de l'oxygène et de l'eau (Fig. 6.10.a,b,d) : comparé à l'air, c.a.d. mélange oxydant de référence, l'azote pur diminue la fraction de mélange observé, et décale donc tous les points de mesure vers la gauche.

A cette position, la phase d'induction est significative dans la simulation alors qu'elle est toujours négligeable dans l'expérience. Ceci est le fait de la surestimation du mélange par le calcul. L'utilisation d'un modèle de ségrégation, ou bien plus sûrement l'augmentation de la résolution du maillage, permettrait de diminuer cet effet.

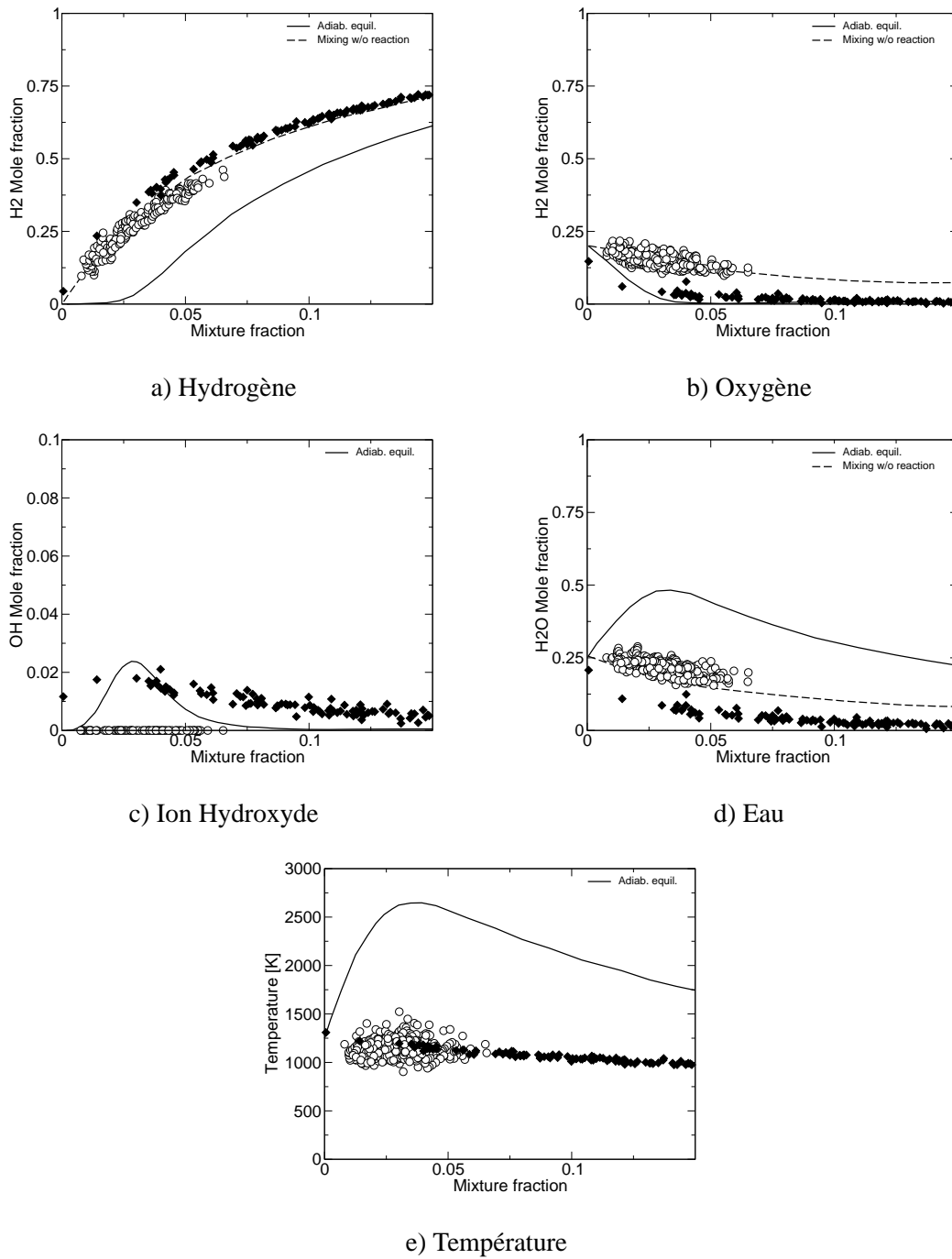
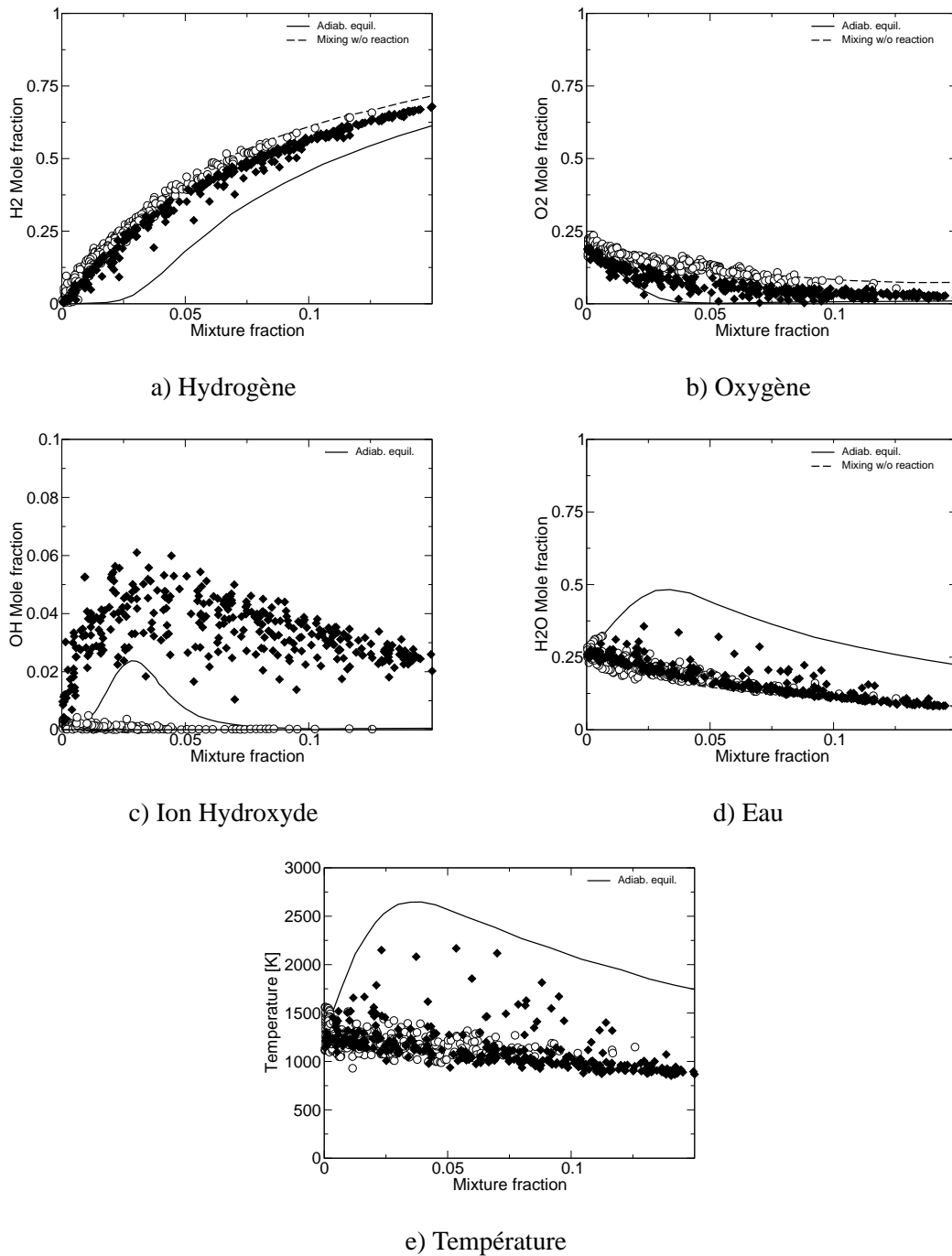


FIG. 6.10 – Répartition du mélange à $x/D = 0.85$ et $r/D = 0.65$. \circ expérience, \bullet simulation.

Le second point de mesure, $x/D = 10.8$ et $r/D = 0.65$, se situe au milieu de la zone d'induction, dans la couche de mélange instationnaire des deux jets coaxiaux. Les observations expérimentales (○) de la Fig. 6.11, sont toujours sur la ligne de mélange sans réaction (trait interrompu). La dispersion des points de mesure a augmenté du fait du mélange. La dispersion de la température reste entre 1000 et 1500 °K.

Les points de la simulation numérique (●) montrent une réaction d'induction en plein essor. En effet la masse molaire des radicaux OH atteint son maximum, 0.06 (Fig. 6.10.c). Les réactifs sont en partie consommés, au vu des quelques points qui s'éloignent de la courbe mélange sans réaction (trait interrompu), comme le prouve la courbe de l'hydrogène (Fig. 6.10.a,b). Enfin, quelques points concernant la fraction molaire de l'eau ou la température se sont dispersés vers la courbe d'équilibre adiabatique (trait plein, Fig. 6.10.d,e), prouvant que quelques poches de fluides sont passées par cet endroit en ayant complètement réagi.

La surestimation du mélange est encore en cause. Cependant, le calcul montre une grande dispersion des points de mesure, illustrant la capacité de la SGE à reproduire une réaction très hétérogène : des particules fluides à différents stades de la réaction (non-réactives, en phase d'induction, en phase d'emballement thermique) passent par le même endroit.

FIG. 6.11 – Répartition du mélange à $x/D = 10.8$ et $r/D = 0.65$. \circ expérience, \bullet simulation.

Le troisième point de mesure, $x/D = 21.5$ et $r/D = 1.1$, est placé en amont de la flamme visible sur la photographie de l'expérience, Fig. 6.2. Les observations expérimentales (\circ) de la Fig. 6.12, sont dispersées de façon presque homogène entre les courbes d'équilibre adiabatique (trait plein) et de mélange sans réaction (trait interrompu). Le nuage de points de la température est néanmoins plus proche de l'état non-réagi (Fig. 6.12.c,e), indiquant encore une prépondérance de la phase d'induction. On note également l'accumulation des points vers les zones les plus pauvres ($Z = 0$) causée par la combustion globalement pauvre.

Les points de la simulation numérique (\bullet) sont tous regroupés près l'équilibre adiabatique, ce qui signifie que la réaction a atteint son terme. Le choix d'une thermodynamique simplifiée réglée sur la stœchiométrie explique les décalages visibles entre l'équilibre atteint par le calcul et l'équilibre obtenu avec une chimie détaillée, particulièrement visibles sur l'eau et l'ion hydroxyde (Fig. 6.12.c,d) dans les zones riches $Z > 0.05$. Enfin, le domaine de dispersion du mélange $0 < Z < 0.1$ correspond à la diversité observée dans l'expérience.

Ainsi, la comparaison calcul/expérience montre que la thermodynamique simplifiée s'approche de façon satisfaisante de l'équilibre adiabatique. De plus, la SGE est en mesure de reproduire l'hétérogénéité du mélange. Il faudra à l'avenir une analyse plus quantitative de la dispersion des points pour préciser cette tendance. En revanche, la combustion hétérogène simulée atteint son terme trop tôt, toujours en raison de la surestimation du mélange.

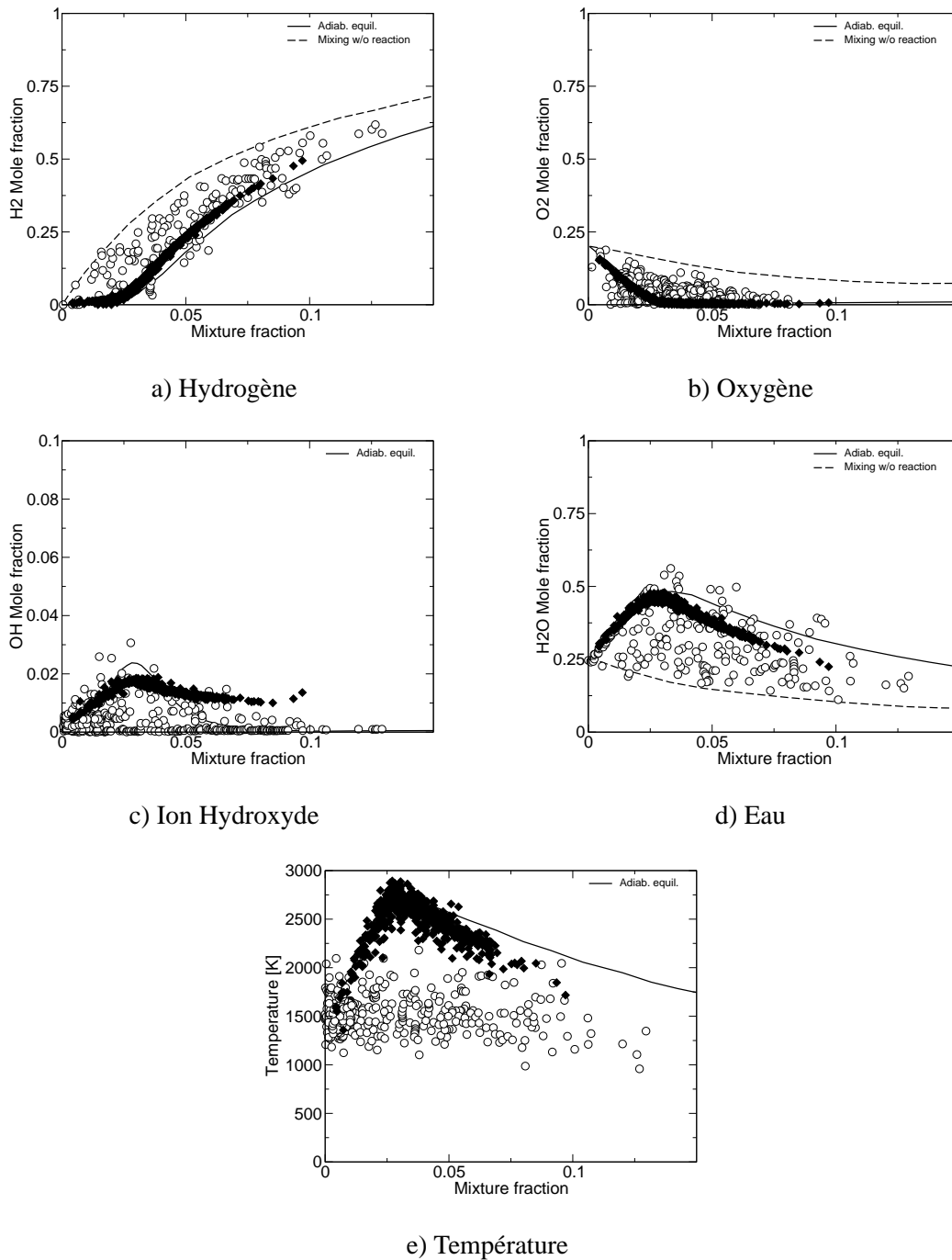


FIG. 6.12 – Répartition du mélange à $x/D = 21.5$ et $r/D = 1.1$. \circ expérience, \bullet simulation.

Le quatrième point de mesure, $x/D = 32.3$ et $r/D = 1.1$, se situe à l'intérieur de la flamme. Les observations expérimentales (\circ) de la Fig. 6.13 sont toujours très dispersées. La concentration d'ion hydroxyde atteint son maximum (Fig. 6.13.c), ce qui implique que les réactions intermédiaires d'induction sont toujours présentes. La concentration d'eau dépasse même l'équilibre adiabatique (Fig. 6.13.d) du côté riche, tandis que les réactifs sont en dessous de leur courbe d'équilibre (Fig. 6.13.a,b). Enfin, la concentration en eau varie entre les courbes de mélange non-réagi, et de mélange à l'équilibre (Fig. 6.13.d).

Les points de la simulation numérique (\bullet) s'accumulent vers les zones pauvres. L'eau ne dépasse pas la concentration d'équilibre (Fig. 6.13.d) conformément à la cinétique et la thermodynamique retenue : l'espèce intermédiaire I est pauvre en eau, donc la concentration locale ne peut dépasser celle de l'espèce des produits P.

Cette position est le lieu le plus hétérogène dans l'expérience, avec des concentrations en ions hydroxyde et en eau qui dépassent largement l'équilibre adiabatique. Les choix thermodynamiques et cinétiques présents pour la combustion ne reproduisent pas ces phénomènes. Le dépassement des concentrations d'équilibre adiabatique dans l'expérience peut bien sûr être reproduit en utilisant une thermodynamique et une cinétique chimique complète.

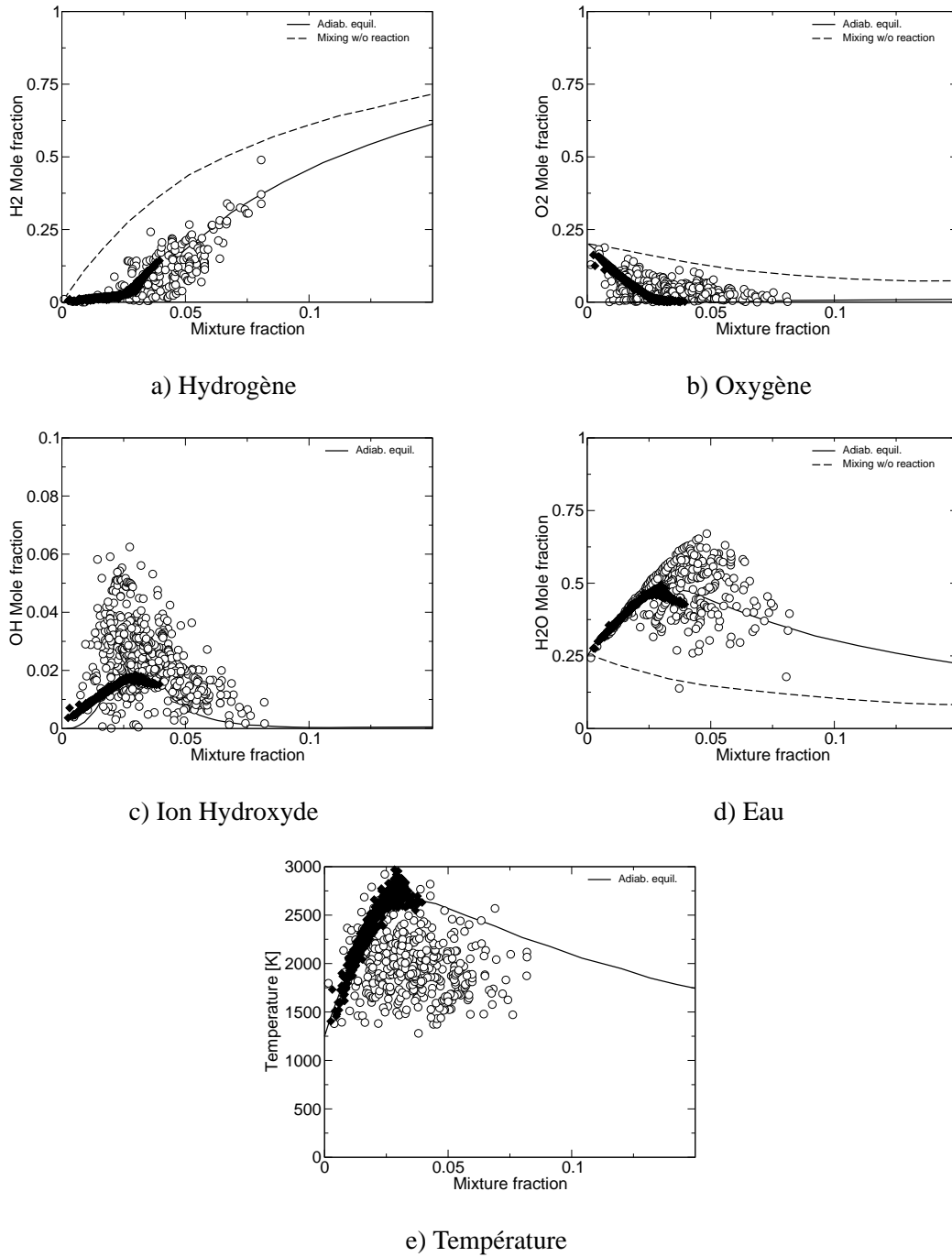


FIG. 6.13 – Répartition du mélange à $x/D = 32.3$ et $r/D = 1.1$. \circ expérience, \bullet simulation.

Le cinquième et dernier point de mesure, $x/D = 43.1$ et $r/D = 0$, est plus en aval à l'intérieur de la flamme. Les observations expérimentales (\circ) de la Fig. 6.14 lorsqu'elles sont comparées aux positions plus en amont (Fig. 6.13, Fig. 6.12) commencent à se concentrer vers l'équilibre. La combustion reste très hétérogène, avec des concentrations en ions OH toujours élevées, entre 0.02 et 0.06. Par ailleurs, on trouve encore beaucoup de mélanges riches $0.025 < Z < 0.1$ à plus de quarante diamètres d'injection en aval, alors que la flamme globale est pauvre. Cela signifie que le jet central ne s'est pas encore complètement mélangé à cette position

Au contraire, les points de la simulation numérique (\bullet) sont entièrement limités aux zones pauvres (Fig. 6.14.e). Cette observation signifie que la position $x/D = 43.1$ est hors de la zone utile du calcul. La région centrale est insuffisamment résolue pour conserver des poches riches convectées dans l'écoulement.

La dispersion du mélange est un bon indicateur de l'hétérogénéité locale. La Fig. 6.14 montre que le domaine utile de la simulation est bien inférieur à quarante diamètres en aval, puisqu'aucune poche de mélange riche n'apparaît aussi loin, contrairement à l'expérience.

L'analyse présente montre que la SGE appliquée à la flamme de Cheng reproduit une longue phase d'induction, suivie d'un emballement thermique brutal. Par ailleurs, les zones les plus résolues autorisent la combustion hétérogène qui a lieu dans ce type de flamme. Une augmentation significative de la finesse du maillage permettrait de diminuer la combustion initiale, trop rapide par rapport à l'expérience, et de conserver l'hétérogénéité de l'écoulement réel plus loin en aval. La thermodynamique et la cinétique chimique simplifiée reproduisent le comportement global de la flamme au premier ordre. Des progrès sont encore possibles sur les quatre paramètres du schéma cinétique PI, actuellement trop brutal lors de la transition induction/emballement thermique. Concernant les phénomènes de dépassement d'équilibre, il est préférable d'attendre la puissance de calcul nécessaire pour un schéma complet (schéma de Yetter (155)), car les schémas simplifiés soulèvent plus de questions qu'ils n'en règlent.

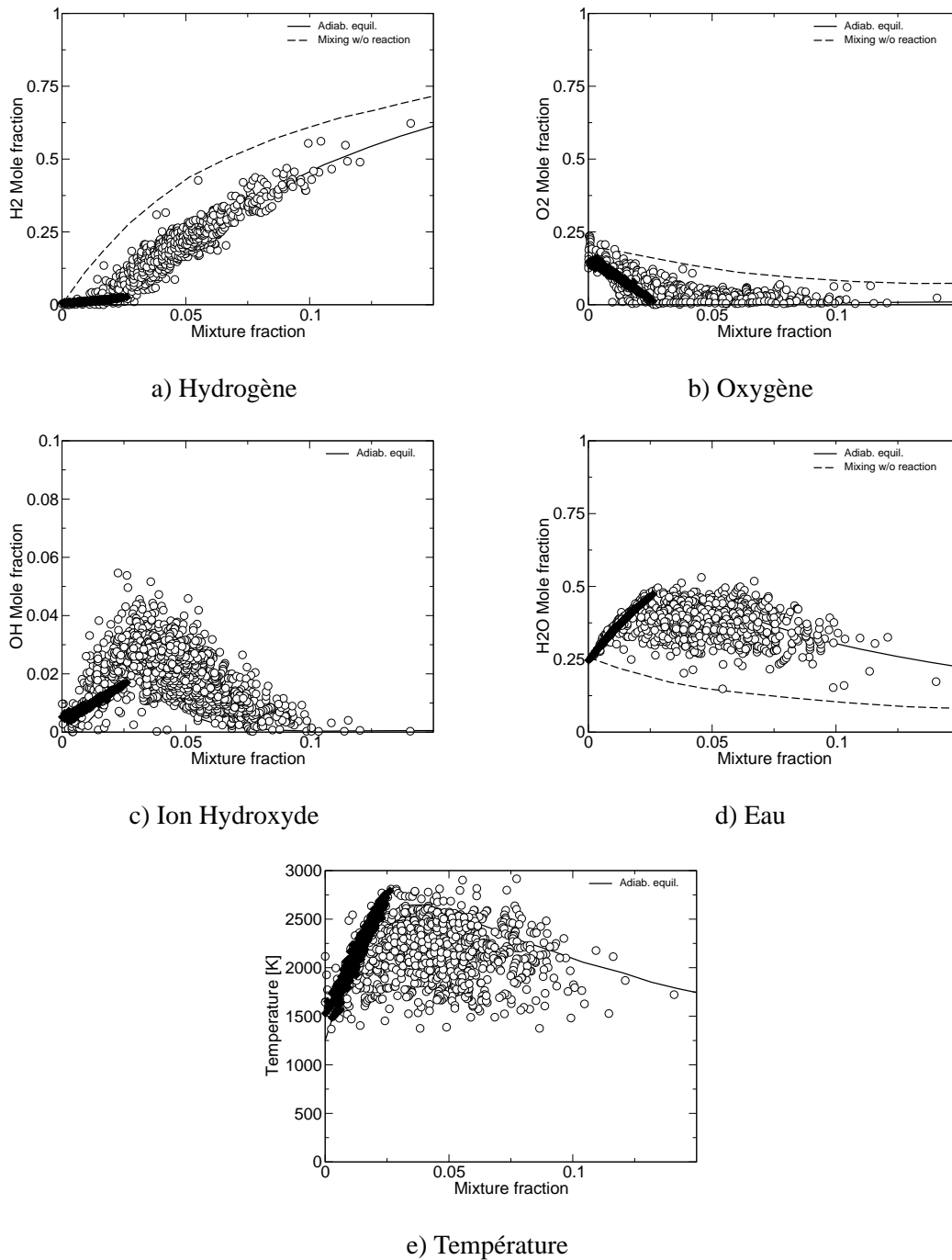


FIG. 6.14 – Répartition du mélange à $x/D = 43.1$ et $r/D = 0$. \circ expérience, \bullet simulation.

Chapitre 7

Conclusion

7.1 Récapitulation

Pour commencer la conclusion, voici la récapitulation du contenu scientifique de cette thèse. L'auto-allumage, les jets supersoniques sous-détendus et la combustion supersonique en sont les trois thèmes principaux. L'état de l'art (Chap.2) a défini un angle de recherche pour chacun de ces thèmes. Après introduction des équations résolues et de la méthode numérique employée (Chap.3), les travaux présentés ci-avant ont mené aux résultats suivants :

Le phénomène d'auto-allumage a montré au chapitre 4 un comportement complexe en présence de diffusion différentielle. Le couple méthane/oxygène s'auto-allume plus lentement lorsque les réactifs sont initialement séparés (LMI), comparé au cas idéal d'une configuration prémélangée (HMI), avec un retard de 100% sur le temps d'allumage. A l'opposé, le temps d'auto-allumage du couple hydrogène/oxygène ne varie presque pas entre les deux configurations. Il s'agit d'un cas particulier où le mécanisme de diffusion différentielle compense le délai de l'allumage dû à la ségrégation des réactifs.

Le chapitre 5 montre comment un code de simulation des grandes échelles utilisant un schéma centré de troisième ordre peut être adapté aux écoulements supersoniques. La méthode utilise principalement la viscosité artificielle de Von Neumann- Richtmyer (148) pour calculer des chocs sans modifier le schéma numérique et le maillage. Outre les cas test du tube à choc et de l'onde de Riemann, cet approche a permis de traiter avec succès les chocs des jets sous-détendus. L'analyse poussée de ces simulations valide cette approche, et montre la richesse des informations créées par une SGE.

Le chapitre 6 décrit une simulation de flamme supersonique auto-allumée. Cette flamme est un cas test de la NASA destinée à l'étude de la cinétique chimique intervenant dans les super-statoréacteurs. La simulation utilise une cinétique chimique simplifiée grâce aux résultats du chapitre 4, et reproduit clairement la longue zone d'induction endothermique caractéristique de cette flamme.

Cette somme d'information ouvre de nouvelles possibilités. D'un point de vue industriel, les configurations de géométrie complexe présentant des phénomènes transitoires sont désormais à portée. D'un point de vue scientifique, l'outil développé peut directement prendre en compte une thermodynamique de gaz réels, en vue de configurations supercritiques. En résumé, cette thèse a

produit des avancées notables sur le chemin de la simulation des moteurs-fusées cryotechniques par la SGE, et les communications scientifiques qui assurent la légitimité de l'ensemble.

7.2 Analyse

Il est utile d'ajouter une analyse des options prises durant cette thèse. L'ensemble de ces travaux est destiné à s'approcher de la simulation de phénomènes supersoniques réactifs dans des géométries complexes. Par la suite, ces simulations seront étendues à des phénomènes transitoires et supercritiques. Ainsi, les techniques les plus évoluées observés dans l'état de l'art ne peuvent être retenues :

En premier lieu, l'étude du chapitre 4 prouve que l'hypothèse très commune d'un nombre de Lewis pris égal à un est définitivement inutilisable dans une combustion par auto-allumage. Les résultats de l'auto-allumage du couple hydrogène/oxygène, comparés au couple méthane/oxygène, ont fait l'objet d'une session plénière au *Quatrième colloque international sur la technologie des lanceurs : propulsion liquide pour lanceurs spatiaux* à Liège en décembre 2002, puis d'une publication dans *Combustion Science and Technology* en 2003 (82) en collaboration avec le Dr R. Knikker.

En second lieu, l'état de l'art montre que les écoulements supersoniques ont toujours été abordé dans la simulation des grandes échelles par des techniques de solveurs de Riemann. Le besoin d'un maillage non structuré et d'un fluide réactif suivant une loi de gaz réels rend ce choix technique inapproprié. Cette constatation a dirigé les travaux du chapitre 5. Un article destiné au journal *Physics of fluids* présente la simulation de plusieurs jets sous détendus, puis l'exploitation intensive de leurs résultats.

Enfin, l'étude de combustion supersonique du chapitre 6 montre la création d'une cinétique chimique simplifiée destinée au processus d'auto-allumage, un point qui n'existait pas dans la littérature. Les résultats d'une simulation utilisant cette cinétique ont fait l'objet d'une session plénière lors de la conférence internationale *CY-LES, complex effects in large eddy simulation* tenue à Limassol en septembre 2005. Un article, destiné à terme au journal *Combustion and Flame*, reprend l'ensemble de ces travaux et termine ce chapitre.

Ainsi, par trois fois ces travaux ont privilégié des techniques simples comparées aux standards actuels. Il est amusant de constater que le retour à la 'sobriété' face à un problème plus complexe suit l'un des obscurs préceptes du célèbre maître de stratégie chinois Sun Bin : "C'est par son aspect fort qu'une chose perceptible l'emporte sur une autre. Néanmoins, il est impossible d'utiliser l'aspect fort d'une chose pour venir à bout de tout. C'est pourquoi les raisons pour lesquelles une chose l'emporte sur une autre sont toujours les mêmes, mais les choses qui peuvent l'emporter sur d'autres diffèrent les unes des autres." *L'art de la Guerre, IV^e siècle avant J.-C.* Cette citation légèrè mise à part, nous retiendrons que la stratégie utilisée nous permet de continuer le développement de l'approche SGE vers des configurations plus réalistes des points de vue scientifique et industriel.

7.3 Perspectives

Pour terminer, voici les travaux actuellement en cours qui découlent directement de cette thèse. Deux nouvelles thèses se déroulent au CERFACS depuis le mois de Novembre 2005, toujours dans le cadre de l'allumage des moteurs fusées cryotechniques, soutenues par la SNECMA et le CNES.

La première est menée par Guilhem Lacaze. Son objectif final est de réaliser des simulations d'écoulements réactifs transitoires puis de jets fortement sous-détendus comprenant de la combustion supersonique et une injection diphasique. Le premier point est largement entamé aujourd'hui, avec la simulation de l'allumage "dur" d'une chambre de combustion expérimentale. Dans ce dispositif installé au DLR de Lampoldhausen, une chambre initialement pleine d'azote est progressivement remplie d'hydrogène et d'oxygène. Un allumage par laser déclenche la combustion brutale du prémélange, faisant augmenter la pression jusqu'à 8 bars. La présence d'un jet supersonique coaxial en injection, d'une tuyère amorcée en sortie de chambre, et d'une phase de remplissage non réactive extrêmement longues font de ce cas test un calcul particulièrement difficile. Des résultats concrets sont déjà disponibles, et ont fait l'objet d'une session plénière à l'atelier organisé par la SNECMA "Third International Workshop on Rocket Combustion Modeling" tenu à Versailles en Mars 2006.

La seconde thèse est conduite par Thomas Schmitt. Elle se focalise sur les phénomènes supercritiques. En effet, lors de l'allumage les températures et pressions atteintes font que les gaz ne suivent plus une loi de gaz parfaits. Il faut donc étudier les conséquences d'une telle perturbation du système déquations habituellement étudié, puis adapter en conséquence le code de SGE voulu, ici AVBP. Le travail initial consiste à choisir une nouvelle équation d'état, puis de générer la thermodynamique qui lui est associée. Par la suite, les lois de transports d'espèces et de chaleur devraient évoluer. Pour finir, les simulations d'écoulement supercritiques devront s'accommoder de gradients de densités au comportement numérique aussi critique que des chocs hydrodynamiques.

Au terme de la thèse présente, "Allumage des moteurs fusées cryotechniques", l'effort de recherche dans ce domaine continue en prise directe avec les résultats présentés dans ce document. D'ici peu, de nouvelles simulations vont voir le jour, prenant en compte de nouveaux phénomènes physiques et profitant de l'augmentation continue de la puissance de calcul. Peut être pourront-elles conforter un peu plus l'idée que la simulation numérique est un outil d'investigation scientifique à part entière, mais comme dirait R. Kipling, "ceci est une autre histoire..."

Chapitre 8

Remerciements

Cette thèse est la somme de multiples contributions. En premier lieu, plusieurs points précis ont bénéficié du travail de personnes extérieures à l'équipe initiale :

- La première partie de l'introduction, c.a.d. le résumé épistémologique de l'histoire des moteurs fusées, doit beaucoup aux entretiens électroniques et téléphoniques avec Marie Catherine Rey (Musée Guimet, Conservateur section Chine bouddhique) et Gérard Emptoz (Université de Nantes, Professeur émérite d'histoire et techniques).
- La réalité des problèmes techniques posés par les moteurs fusées m'a été révélée par l'équipe FLTC de la Snecma Division Grosse Propulsion Liquide. En plus de l'apport fondamental de Stéphan Zurbach, je remercie Didier Saucereau pour ses lumières sur les simulations RANS.
- Les conditions exceptionnelles des écoulements supersoniques ont soulevé de multiples questions ouvertes. Je remercie tous ceux qui ont pris le temps d'y répondre par voie électronique, notamment le Dr. Jean Louis Estivalèzes (Toulouse, ONERA), le Pr. G. Mungal (Stanford, Faculty of thermosciences group), le Pr. Olivier Chazot (Bruxelles, Von Karman Institute), le Dr. Hiroshi Katanoda (Fukuoka, University of Kitakyushu) et le Pr. Valery Zapryagaev (Novossibirsk, ITAM).
- L'emploi de la méthode de Von Neumann-Richtmyer au lieu de méthodes plus classiques a soulevé une discussion intéressante. Je remercie le Pr. Dale Pullin (California Institute of technology), le Dr. Benoît Fiorina (Stanford, Center for Turbulence Research) et le Pr. Andrew Cook (Lawrence Livermore National Laboratory) pour leurs réponses rapides et décisives sur le sujet.
- L'analyse linéaire de stabilité est un domaine scientifique à part entière. La collaboration de plusieurs mois avec le Pr. Jean Christophe Robinet (Paris, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Lab. SINUMEF) a dégagé des résultats tout à fait passionnants. Le stage de Master de Zaki Mazen fut entièrement dédiée à l'étude du jet de Seiner d'après les résultats de simulation présents. Pour cet apport inespéré, je souhaite signifier ma reconnaissance au Pr. Robinet.
- Des travaux importants ont été effectués sur l'expérience d'allumage "dur" installée par le DLR à Lampoldshausen, en collaboration avec Guilhem Lacaze. Les résultats seront détaillés dans le manuscrit de sa thèse. En attendant, je remercie le Dr. Michael Oswald (Lampoldshausen, DLR) pour ses réponses précises, et Guilhem Lacaze, pour sa ténacité face à un

problème très 'relevé'.

Ensuite, beaucoup de personnes ont contribué à ce travail. Je remercie sincèrement mes collaborateurs du CERFACS pour leur apport indéniable à tous les niveaux d'un travail de thèse. Il y a au premier chef toute l'équipe 'combustion' emmenée par le Pr. Thierry Poinsoot entre les années 2002 et 2006. La collaboration que l'on y trouve entre doctorants est une chance exceptionnelle pour mener des recherches. Il y a ensuite l'aide des documentalistes Jenny Collin et Séverine Toulouse, le support technique exceptionnel de Gérard Dejean, Isabelle d'Ast, Fabrice Fleury, Patrick Laporte et Nicolas Monnier, les contributions de Thilo Schönfeld et Jens Müller, et le soutien indispensable de l'administration, tout spécialement celui de Marie Labadens.

Je remercie également l'aide indirecte mais essentielle de Gabriel Staffelbach, Matthieu Boileau, Stéphane Pascaud, David Seigneuric, Vincent Hennebert, Amélie Baudon, Pierre Crovisier et, tout particulièrement, Guenaëlle Mesthé durant ces trois années.

Pour finir, je remercie le Dr. Stéphan Zurbach, à l'origine de cette thèse, et le Dr. Bénédicte Cuenot, qui a su m'épauler au long de cette recherche.

Chapitre 9

Annexe 1 : Lois du vol spatial

Konstatin E. Tsiolkovski (1857-1935), Robert Goddard (1882-1945) et Hermann J. Oberth proposent les lois régissant le vol des fusées au début du vingtième siècle. Leurs travaux sont des développements de la mécanique générale. Nous allons ici retrouver les relations principales, et réaliser quelques dimensionnements de fusées simples. Nous en déduisons les contraintes principales de la construction des fusées.

9.1 Lois du mouvement

Sir Isaac Newton a présenté les trois lois du mouvement et la loi de la gravitation universelle, dans "Principia Mathematica Philosophiae Naturalis." en 1686 :

1. Tout objet ayant un mouvement uniforme conserve ce mouvement, sauf si une force extérieure lui est appliquée.
2. La relation entre la masse m d'un objet, son accélération \vec{a} et la force \vec{F} qui lui est appliquée est $\vec{F} = m\vec{a}$; dans cette loi, la direction du vecteur force est la même que la direction du vecteur accélération.
3. Pour toute action, il y a une réaction égale et opposée.
4. Tout objet dans l'univers attire tout autre objet avec une force dirigée sur la ligne des centres des objets, proportionnelle au produit de leurs masses et inversement proportionnelle au carré de la distance les séparant. La constante de la gravitation k , également approchée par I. Newton, vaut $6.6732 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 / (\text{kg} \cdot \text{s}^2)$.

9.1.1 Mouvement dans le champ gravitationnel terrestre loin du sol

Un corps de masse m placé à une distance d du centre de la Terre, avec M désignant la masse de la Terre et d grand devant le rayon de la Terre, subit la force :

$$F_{\text{terre}} = \frac{m \times 4.002 \cdot 10^{14}}{d^2} \quad (9.1)$$

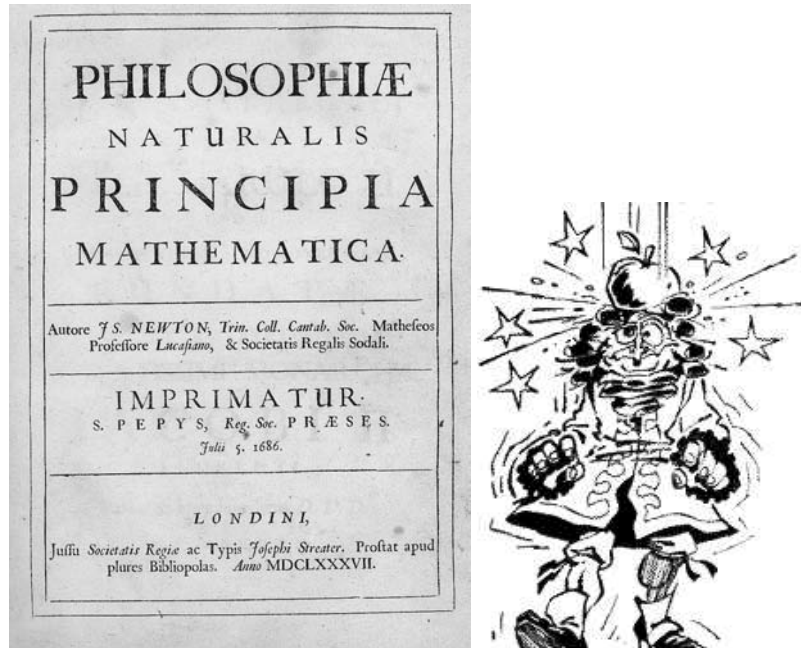


FIG. 9.1 – Isaac Newton est à l'origine, entre autres, des lois régissant le vol spatial

Le travail T_{lib} nécessaire pour emmener ce corps de sa distance initiale d_0 à l'infini, c'est à dire de le libérer du champ gravitationnel, s'écrit :

$$T_{lib} = \int_{d_0}^{\infty} k \frac{Mm}{d^2} = kMm \left[-\frac{1}{d} \right]_{d_0}^{\infty} = \frac{KMm}{d_0} \quad (9.2)$$

On peut donc en déduire la vitesse à donner à ce corps au départ de la surface de la terre (i.e. $d_0 = 6.37 \cdot 10^6 m$), pour que son énergie cinétique corresponde au travail de libération :

$$\frac{mV_{lib}^2}{2} = \frac{KMm}{d_0} \Rightarrow V_{lib} = \sqrt{\frac{2kM}{d_0}} = 11\,200 m/s \quad (9.3)$$

En poussant plus loin les développements des lois du mouvement de Newton, on peut retrouver les trois lois de Kepler (1605) :

1. *Le mobile décrit une orbite elliptique dont le point d'attraction est un foyer ;*
2. *La droite mobile-point d'attraction balaye des surfaces proportionnelles au temps qu'elle met à les balayer ;*
3. *Le carré du temps de révolution est proportionnel au cube du demi-grand axe a de l'ellipse.*

Le paramètre principal d'un mobile dans un champ gravitationnel est la vitesse radiale $V_r(r)$. Comparée à la vitesse de libération locale $V_{lib}(r)$, elle détermine si le mobile est captif, c.a.d. satellisé, ou s'il est libre. Par exemple, les comètes peuvent être sur une orbite terrestre, solaire ou extra-solaire. Par conséquent, l'incrément de vitesse qu'un lanceur peut donner à son projectile détermine l'essentiel de la performance du lanceur.

9.1.2 Mouvement dans le champ gravitationnel terrestre près du sol

Près du sol, le champ gravitationnel se réduit une force verticale constante. Avec la deuxième loi de Newton intégrée sur le temps de l'instant t_0 à l'instant t_1 , on connaît le mouvement vertical du mobile au travers de son accélération $a_z(t)$ (Eq. 9.4), sa vitesse $V_z(t)$ (Eq. 9.5) et son altitude $z(t)$ (Eq. 9.6).

$$F = -mg \Leftrightarrow -mg = ma_z(t) = m\dot{V}_z(t) = mz''(t) \quad (9.4)$$

$$V_z(t) = z'(t) = -gt + V_z(t_0) \Leftrightarrow \Delta V_z = g(t_1 - t_0) \quad (9.5)$$

$$z(t) = -gt^2/2 + V_z(t_0)t + z(t_0) \quad (9.6)$$

Ces équations sont la base de la balistique. On en déduit entre autres qu'au premier ordre, un projectile de vitesse initiale V_{init} et d'angle α a une apogée $z_{apo} = \frac{(\sin(\alpha)V_{init})^2}{2g}$, et une portée $x = \sin(2\alpha)V_{init}^2/g$. Un modèle plus précis prendra en compte si besoin les frottements du milieu, proportionnels au carré de la vitesse et qui réduisent la portée, ou encore la force de Coriolis qui crée une déviation latérale,

9.2 Loi du vol d'une fusée

Dans un moteur fusée, deux forces motrices sont à l'œuvre. Tout d'abord, la troisième loi de Newton implique que si un système éjecte une masse à un taux $q[Kg/s]$ et à une vitesse relative d'éjection $V_e[m/s]$, il subit en retour une force opposée $F_{eject} = qV_e$. Ensuite, la pression P_{mot} régnant dans un moteur fusée étant différente de la pression extérieure P_{ext} , le moteur subit une force de pression $F_{press} = (P_{mot} - P_{ext})A_e$, A_e étant une section d'éjection des gaz de l'ordre du diamètre maximal de la tuyère. On notera que cette force est d'autant plus efficace que la pression extérieure diminue, c.a.d. que l'air se raréfie¹. La variation de cette force explique la variation des performances d'un moteur suivant qu'il se situe au sol ou dans le vide spatial. Par exemple, le premier étage de la fusée lunaire américaine *Saturn V* perd au décollage 12% de son efficacité par rapport au vide.

Afin de gauger l'efficacité de chaque moteur fusée, on le compare à un moteur équivalent idéal de poussée constante F_{equiv} et de consommation constante $q_{equiv} = \frac{dm(t)}{dt}$ pendant le temps de vol t_0 à t_1 .

$$F_{equiv} = m(t)V'(t) \quad (9.7)$$

$$\int_{t_0}^{t_1} \frac{F_{equiv}}{m(t)} \partial t = \int_{t_0}^{t_1} V'(t) \partial t \quad (9.8)$$

$$\frac{F_{equiv}}{q_{equiv}} [\ln(m(t))]_{t_0}^{t_1} = V(t_1) - V(t_0) \quad (9.9)$$

¹Cette caractéristique rendue publique notamment par R. Goddard, fit un petit scandale au début du vingtième siècle, quand le bon sens considérait que la présence d'un milieu matériel sur lequel s'appuyer était forcément préférable. Ce contre-sens vient de la propulsion par hélice qui évoque plus facilement un tire-bouchon dans du liège qu'une éjection de matière. Une hélice reste cependant un moteur à réaction, pouvant fonctionner efficacement dans un fluide non visqueux.

$$\frac{F_{equiv}}{q_{equiv}} \ln\left(\frac{m(t_1)}{m(t_0)}\right) = \Delta V \quad (9.10)$$

L'équation finale du moteur idéal, Eq. 9.10, montre que les deux paramètres essentiels d'un moteur fusée sont la force équivalente d'une part et le rapport entre masses initiales et finales d'autre part. Cette approche fut introduite en 1900 par le russe Tsiolkovsky. Il introduisit les quantité Isp dite 'impulsion spécifique', et le rapport de masse R_m , ce qui mène à l'Eq. 9.11.

$$Isp \times g \times \ln(R_m) = \Delta V = \int_{t_0}^{t_1} \frac{[F_{eject}(t) + F_{press}(t)]}{m(t)} dt \quad (9.11)$$

Ces deux paramètres sont les deux clefs des nouveaux moteurs fusées. Le rapport de masse devient le paramètre principal de construction. Il donne en premier lieu l'intérêt des fusées multi-étages. L'application numérique montre par exemple que la fusée lunaire *Saturn V* dans une version mono-étage verrait sa masse multipliée par 2.38, comme indiqué dans le Tableau 9.2. Un tel engin est beaucoup plus difficile à mettre au point du point de vue de la résistance des matériaux. L'impulsion spécifique est une quantité plus abstraite : $\frac{F_{equiv}}{q_{equiv}} = Isp \times g$. Multipliée par l'accélération de la pesanteur, elle donne une vitesse légèrement supérieure à la vitesse déjection des gaz propulsifs, mais l'intérêt est ailleurs. L'impulsion spécifique est donnée au premier ordre par la nature des carburants, et seulement au second ordre par l'optimisation technique du moteur. Ainsi, connaissant la charge utile et l'incrément de vitesse à donner, on déduit des travaux de Tsiolkovsky la nature des carburants et la masse du lanceur. Le nombre d'étages dépend alors d'une optimisation entre efficacité de la propulsion et contraintes structurelles.

Pour vérifier la pertinence de ces outils, voici l'exemple exemple précis du V2. Le cahier des charges se résume ainsi : "une arme de type missile balistique capable d'envoyer une charge militaire d'une tonne à 300 km de distance". Le tir optimal étant réalisé à 45 degrés, on trouve une vitesse initiale de 1715 m/s. Un calcul ballistique plus complet prenant en compte la résistance de l'air augmente cette vitesse initiale de 25%, soit environ 2300m/s. Le couple Oxygène/Alcool est le mélange le plus performant utilisable, et permet d'espérer une impulsion spécifique proche de 200s. Il vient alors le rapport de masse $R_m = \exp(V_{init}/(Isp.g)) = 3.23$. Il reste donc à construire une structure de fusée capable de résister à la masse totale $M_{tot} = 3.23 * (M_{charge} + M_{struct} + M_{mot})$ et le moteur correspondant, capable de soulever cette masse totale. La solution de ce problème en 1944 est une structure de 1 tonne équipée d'un moteur de 2 tonnes, soit une masse au décollage de presque 13 tonnes, comme indiqué dans le Tableau 9.1.

TAB. 9.1 – Caractéristiques du V2/A4

Charge utile	900 Kg
R_m	3.2
Vitesse finale	2317 m/s (300km)
Masse étage à vide	11 905 Kg 3 100 Kg
Masse totale à vide	12 805 Kg 4 000 Kg
Isp	203 s

TAB. 9.2 – Caractéristiques de *Saturn V*

	Charge utile	47 000 Kg			
	Vitesse finale	10 886 m/s (Lune)			
		Etage 1	Etage 2	Etage 3	Mono-étage
Masse étage à vide		2 286 217 Kg 135 218 Kg	490 779 Kg 39 048 Kg	119 000 Kg 13 300 Kg	6 960 000 Kg 135 218 Kg
Masse totale à vide		2 942 996 Kg 791 997 Kg	656 779 Kg 205 048 Kg	166 000 Kg 98 300 Kg	7 007 000 Kg 791 997 Kg
R_m		3.71	3.2	1.69	38.45
Isp		304 s	421 s	421 s	304 s
ΔV		3 914.57 m/s	4 807.76 m/s	2 163.98 m/s	10 883 m/s



Chapitre 10

Annexe 2 : Jets supersoniques sous-détendus

10.1 Méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques est la plus ancienne technique utilisée pour résoudre les équations d'Euler dans la configuration d'un jet supersonique. On remarque tout particulièrement la thèse de I.S. Chang (21) parue en 1945 et dédiée spécifiquement aux jets supersoniques sous-détendus. Cette méthode profite du caractère hyperbolique des équations d'Euler dans un écoulement supersonique dans un cas stationnaire bidimensionnel. Elle est présentée et discutée dans de nombreux ouvrages (132; 143; 4).

Dans le livre *Compressible Fluid Dynamics* de P.A. Thompson (143), cette méthode est appliquée à un jet sonique sous-détendu par un rapport de pression statique $NPR = 2$. Le résultat du calcul est reproduit dans la Fig. 10.1, avec 8 lignes caractéristiques pour décrire l'expansion initiale et 5 lignes caractéristiques pour calculer le reste du champ. Un calcul identique est réalisé avec une routine écrite en FORTRAN 90 utilisant 20 lignes caractéristiques, avec pour résultat la Fig. 10.2. On y observe clairement le faisceau de détente de Prandtl-Meyer et sa première 'réflexion' sur l'axe de symétrie. Il interagit ensuite avec la ligne de glissement : il se transforme en faisceau de compression tandis que la ligne de glissement se courbe vers le centre. Le faisceau de compression se 'réfléchit' sur l'axe de symétrie, avant de se concentrer à l'approche de la ligne de glissement. Cette coalescence montre précisément que les caractéristiques les plus en aval se croisent, c.a.d. qu'un choc faible a lieu à cet endroit.

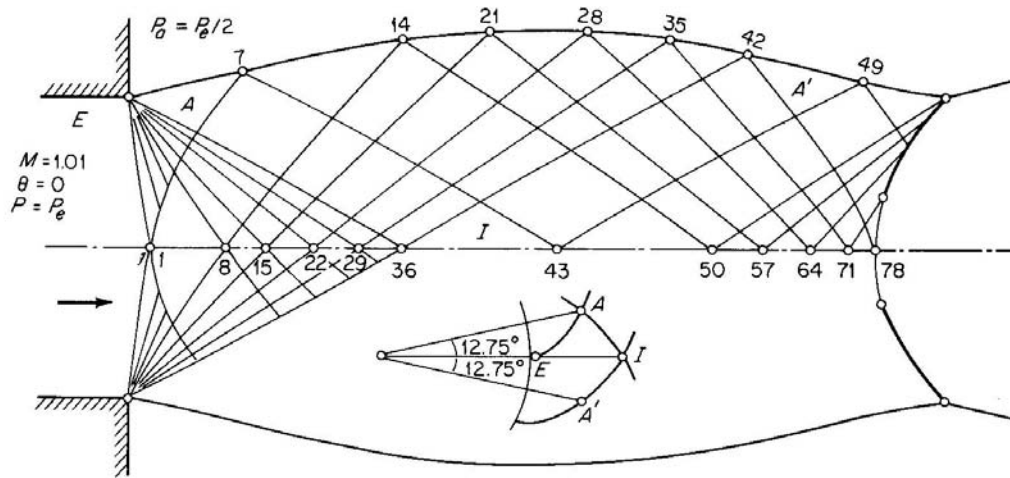


FIG. 10.1 – Réseau de lignes caractéristiques pour un jet sous-détendu obtenu par Thompson (143) avec 5 lignes caractéristiques (8 pour l'expansion initiale), $Mach = 1$, $NPR = 2$

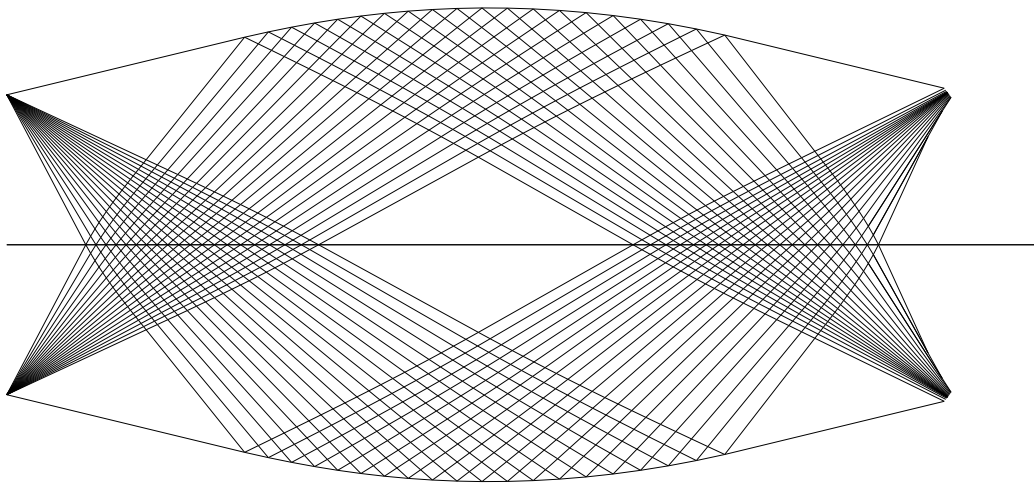


FIG. 10.2 – Réseau de lignes caractéristiques pour un jet sous-détendu obtenu avec 20 lignes caractéristiques, $Mach = 1$, $NPR = 2$

Cette routine est réutilisée pour étudier le comportement du réseau de caractéristiques pour différents rapports de pression. Afin de prolonger le calcul, si deux caractéristiques se croisent, celle du coté aval est stoppée. Par ailleurs, le calcul fait apparaître un choc droit (ligne verticale) dès que les rapports de pression et de densité entre l'axe et l'extérieur permettent de vérifier la relation de Rankine-Hugoniot. Les équations utilisées correspondent à un écoulement bidimensionnel plan. Un autre jeu d'équations accompagné d'un algorithme plus complexe permet de résoudre les cas axisymétriques.

Dans le cas d'un jet faiblement sous-détendu (Fig. 10.3,a), la structure en diamant semble pouvoir se répéter à l'infini. Dans un écoulement visqueux, la turbulence et la viscosité dissipent cette structure. Pour un rapport de pression un peu plus élevé (Fig. 10.3,b) des cellules ovoïdes ont remplacé les cellules en diamant. La structure est encore répétitive. Des lignes caractéristiques disparaissent à chaque fin de cellule, diminuant la précision du calcul, c'est pourquoi on ne tient pas compte de la dilatation des cellules vers l'aval. Un jet fortement sous-détendu possède un réseau de caractéristiques plus complexe (Fig. 10.3,c). En effet, le faisceau de détente commence à coalescer depuis l'intérieur du jet dès la réflexion sur la ligne de glissement. Cette coalescence se traduit par un choc faible à l'intérieur de la cellule de détente. Ce choc faible s'intensifie vers l'aval, avant d'être terminé par un choc droit, ce qui délimite un volume ovoïde fermé que l'on appelle parfois "bouteille de Mach". La même structure est visible pour les jets très fortement sous-détendus (Fig. 10.3,d). Le choc faible remonte jusqu'à l'injection lorsque l'on augmente le rapport de pression.

La méthode des caractéristiques reproduit explicitement dans un temps très faible les principaux éléments non-visqueux d'un jet sous-détendu. Elle donne par ailleurs des informations utiles sur l'origine de chaque élément non-visqueux présent dans un jet sous-détendu. Cet outil est aujourd'hui utilisé pour calculer très précisément l'intérieur de la cellule de détente (112). Ce type d'étude permet de régler l'alimentation en gaz raréfié d'un accélérateur de particules.

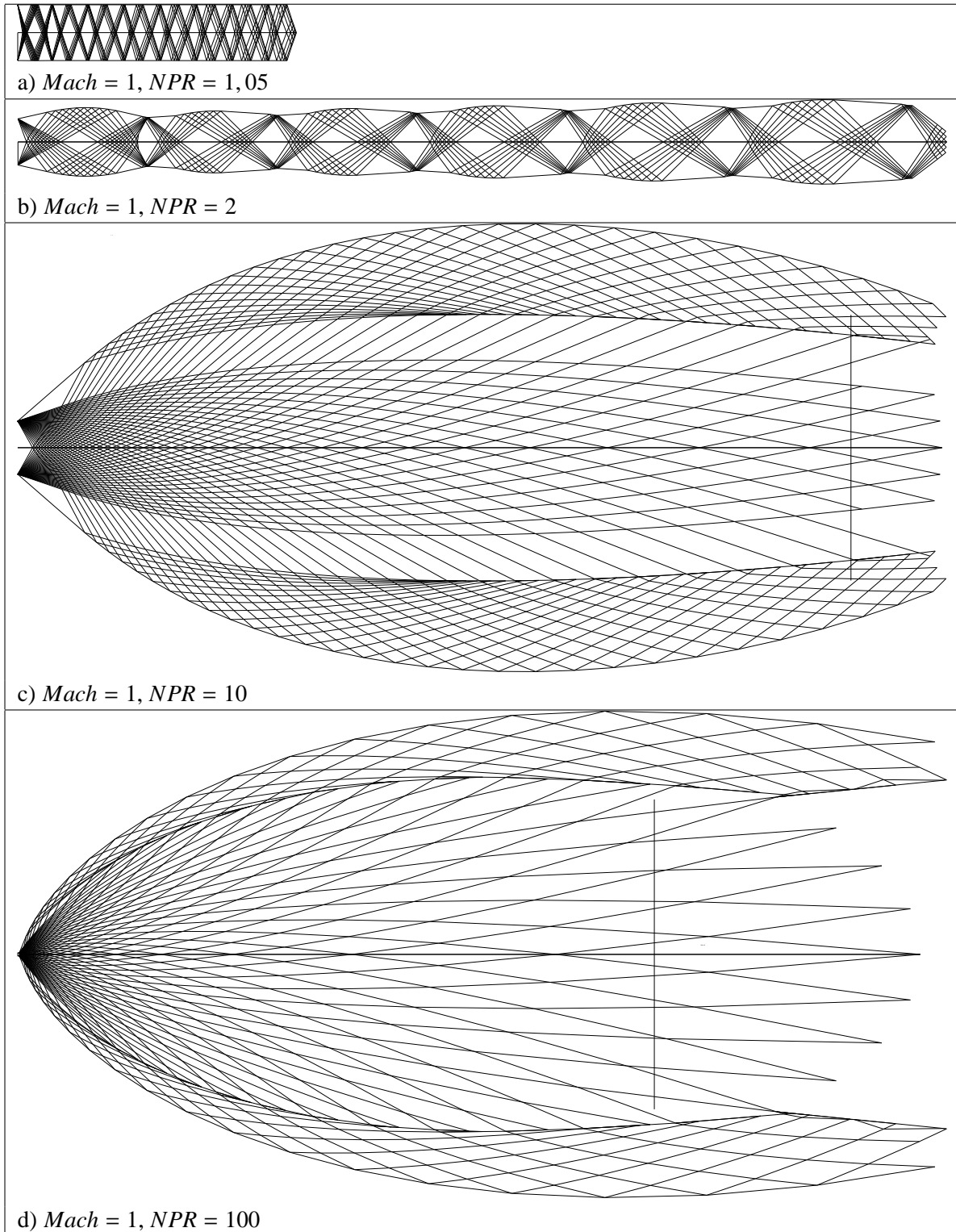


FIG. 10.3 – Réseaux de lignes caractéristiques de jets sous-détendus

10.2 Taille des bouteilles de Mach

Il est utile de connaître la taille de la cellule de détente avant même d'en faire le calcul, d'après le rapport de pression statique et le Mach d'injection. Les expérimentations, théories et simulations variées permettent de déduire des lois qui donnent cette information. Avant de commencer la revue des résultats expérimentaux et numériques, on note que les équations d'Euler ne dépendent plus de la viscosité. Ce détail entraîne que la solution est indépendante de l'échelle de longueur. C'est pourquoi les corrélations suivantes sont adimensionnées par le diamètre d'injection D .

Trois paramètres sont essentiels :

- **Le Mach de sortie** M_e , c.a.d. le nombre de Mach moyen dans la section de sortie du jet.
- **le rapport des chaleurs spécifiques** γ , également moyenné sur la section de sortie du jet.
- **le rapport de pression** NPR (Nozzle Pressure Ratio), soit la pression statique moyenne dans la section de sortie du jet divisée par la pression statique du fluide entourant le jet. Dans certaines études, c'est le rapport de pression totale NPR_{tot} qui est utilisé, égal au précédent multiplié par le facteur $1 + \frac{M^2\gamma}{2}$, soit 1.7 pour un jet d'air sonique. Ce facteur est obtenu par l'Eq. 10.1 :

$$NPR_{tot} = \frac{P_{stat} + \frac{\rho U^2}{2}}{P_{stat\infty}} = \left(1 + \frac{M^2\gamma}{2}\right) NPR \quad (10.1)$$

La longueur de ces bouteilles c.a.d. la position normalisée x_M/D dépend de ces trois paramètres de la façon suivante : $\frac{x_M}{D} \propto (M_e)^{-1}(\gamma)^{-0.5}(NPR)^{-0.5}$. Trois grandes classes de méthodes permettent d'obtenir ce résultat. Il y a tout d'abord, de multiples corrélations expérimentales, comme celle de Lewis & Carlson (97), donnée en Eq. 10.2, valide sur la plage $NPR \in [1, 100]$, d'une précision de 10%, avec un écart maximum de 31% par rapport aux expériences de l'époque.

$$\frac{x}{D} = 0.69 M_e (\gamma NPR)^{0.5} \quad (10.2)$$

Ensuite on trouve les méthodes de calculs aux caractéristiques comme celle de Hanson & Palmer (112) qui profitent du caractère hyperbolique des équations de Naviers-Stokes en écoulement supersonique. Sur la plage $NPR \in [1, 1000]$, un code de calcul prédit la position du disque (Corrélation Eq. 10.3) avec une erreur inférieure à la dispersion des résultats expérimentaux.

$$\frac{x}{D} = 0.8736 (NPR)^{0.52069} \quad (10.3)$$

Enfin, des simulations plus classiques de volumes finis peuvent être utilisées, comme l'ont fait Cumber (38). Un code volume finis RANS, avec un schéma du deuxième ordre, un modèle de turbulence type $k - \epsilon$ et une correction du taux de dissipation proposée par Sarkar, fonctionne sur la plage $\frac{P_t}{P_\infty} \in [1, 40]$. Malgré la dispersion des résultats expérimentaux proposés, le code semble sur-estimer jusqu'à 30% les dimensions des bouteilles de Mach. Son comportement est représenté par la corrélation Eq. 10.4.

$$\frac{x}{D} = 1.2182 (NPR)^{0.4236} \quad (10.4)$$

L'ensemble des sources menant à ces résultats est listé de manière non exhaustive dans le tableau 10.1, puis représenté sur le graphique 10.4. Le graphique supérieur de la Fig. 10.4 montre

Date	Auteurs	Type	Plage NPR	Approximation $x_M/D = A (NPR)^B$
1953	NACA	Expériences	[4, 100]	$A = 0.9857, B = 0.4584$
1958	A.P.L.	Expériences	[6, 80]	$A = 0.8846, B = 0.5278$
1958	Adamson & Nichols (3)	Calculs	[2, 100]	$A = 0.986, B = 0.5025$
1962	Love & al.	Expériences	[7, 25]	$A = 0.8034, B = 0.4021$
1962	Eastman & Radtke (52)	Calculs M.O.C.	[7, 25]	$A = 0.7035, B = 0.4525$
1962	Crist & al. (37)	Expériences	[2, 40]	$A = 1.049, B = 0.4644$
1964	Lewis & Carlson (97)	Corrélation	[1, 100]	$A = 0.69 M_e \gamma^{0.5}, B = 0.5$
1981	Addy & al.	Expériences	[2, 5]	$A = 1.231, B = 0.38495$
1985	Ewan & Moodie (57)	Expériences	[2, 12]	$A = 0.6964, B = 0.5846$
1998	Hanson & Palmer (112)	Calculs M.O.C.	[1, 1000]	$A = 0.8736, B = 0.52069$
2002	Cumber & al. (38)	Calculs F.V.	[1, 40]	$A = 1.2182, B = 0.4236$

TAB. 10.1 – Compilation des différentes sources concernant le rapport x_M/D . M.O.C : Méthodes aux caractéristiques, F.V. Méthodes Volumes Finis

des résultats peu dispersés, donnant une erreur de 20% maximum sur l'ensemble des rapports de pression. Cette dispersion est d'abord présente dans les résultats expérimentaux, notamment avec les observations de Ewan & Moodie (57), inférieures de 10% aux autres expériences et corrélations. La tendance globale des expériences montre une légère accumulation des résultats vers l'enveloppe supérieure du nuage de points. La corrélation de Lewis (97) est en bon accord avec résultats expérimentaux. On note également un bon accord entre les deux simulations aux caractéristiques, dites "M.O.C." (Method Of Characteristics) : Eastman & Radtke vs. Hanson & Palmer. La méthode de calcul du disque de Mach n'est pas exactement la même. De plus, 38 années séparent ces deux simulations et cette méthode est très sensible à la puissance de calcul mise en œuvre. Malgré cela, les résultats de Eastman sont tout à fait corrects, ce qui prouve l'excellent rapport Précision/Coût Calcul des méthodes M.O.C. Les méthodes volumes finis dites "F.V." (Finite Volumes) ont fait leurs preuves dans les écoulements supersoniques. Ici, les simulations de Cumber & al. s'approchent de l'enveloppe supérieure des résultats précédents. De la même manière, des expériences, corrélations, et simulations concernent le diamètre du disque de Mach. L'ensemble des sources menant à ces résultats est listé de manière non exhaustive dans le tableau 10.2, puis représenté sur le graphique 10.4. Dans le tableau, on voit une très grande disparité dans les corrélations, avec un exposant sur le paramètre NPR (Exposant B) variant de 0.6 à 1.7. Le graphique inférieur de la fig Fig. 10.4 montre à nouveau une faible dispersion des résultats, donnant une erreur de 10% maximum, exception faite des résultats de Crist, sur l'ensemble des rapports de pression. Les résultats expérimentaux de Crist s'éloignent des autres résultats de plus de 30%. On notera cependant que cette série d'expériences est la plus ancienne de l'ensemble bibliographique présenté ici concernant les tailles de disques de Mach. Les simulations F.V. de Cumber & al., ainsi que les simulations M.O.C. de Hanson et Eastman se placent au milieu des résultats expérimentaux.

Date	Auteurs	Type	Plage	Approximation $d_M/D = A (NPR)^B$
1962	Crist & al (37).	Expériences	[2, 40]	$A = 0.3306, B = 0.59021$
1980	Antsupov & al. (5)	Exp.& Corr.	[2, 40]	$A = 0.05106, B = 1.731661$
1980	Lamkin & al.	Correlation	[1, 6]	$A = 0.1955, B = 0.6769741$
1985	Ewan & Moodie (57)	Expériences	[2, 14]	$A = 0.08905, B = 1.263585$
1998	Hanson & Palmer (112)	Calculs M.O.C.	[1, 1000]	$A = 0.273, B = 0.6769741$
2002	Cumber & al. (38)	Calculs F.V.	[1, 40]	$A = 0.2517, B = 0.7729036$

Tab. 10.2 – Compilation des différentes sources concernant le rapport d_M/D . M.O.C : Méthodes aux caractéristiques, F.V. Méthodes Volumes Finis

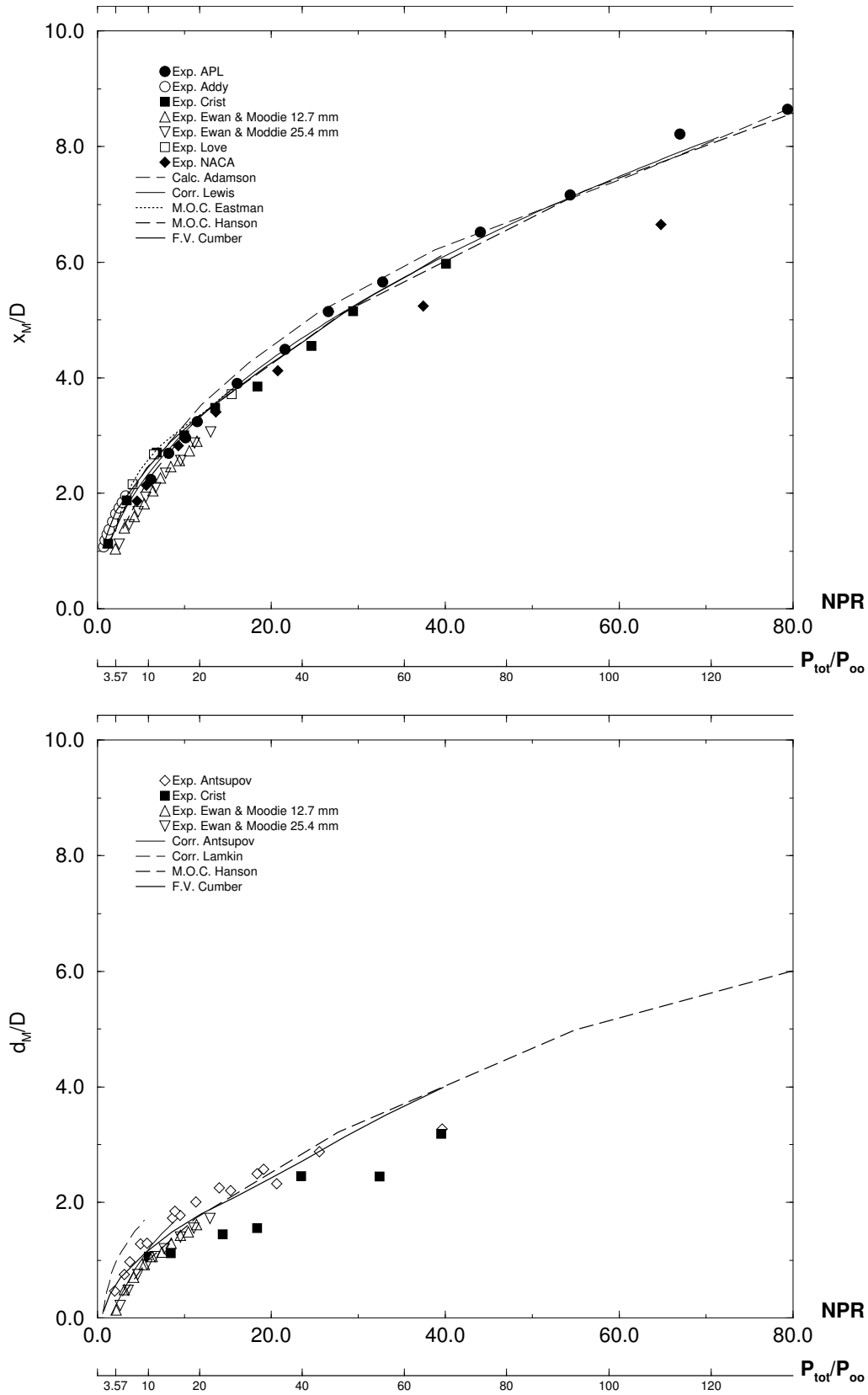


FIG. 10.4 – Position x_M/D et diamètre du disque de Mach d_M/D en fonction du rapport de pression normalisé NPR c.a.d. le rapport de pression totale, dans le cas $M_e = 1$ (Jet Sonique) et $\gamma = 1.4$ (Fluide proche de l'air).

10.3 Analyse du champ lointain d'un jet sous-détendu

Le concept d'autosimilarité est utilisé dans les jets de fluide à Reynolds élevé. Birch & al. étendent ce concept aux jets sous-détendus dans deux articles traitant respectivement des décroissances axiales de concentration (14) et de vitesse (15). La section présente rappelle brièvement les résultats de cet outil.

10.3.1 Diamètre virtuel du jet

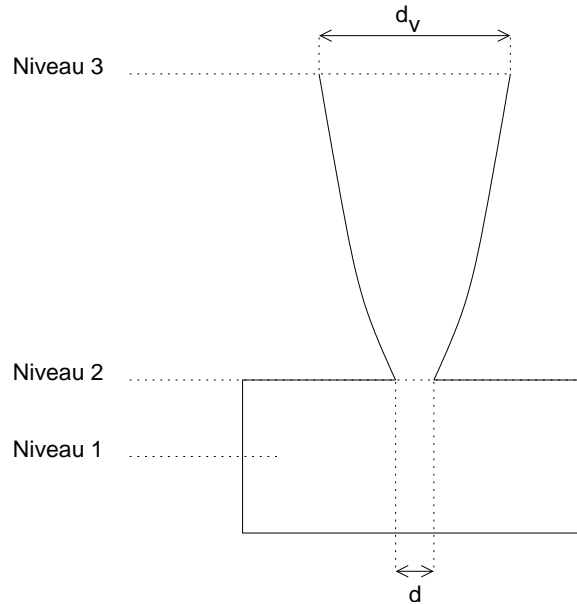


FIG. 10.5 – Jet de fluide modèle : Niveau 1, conditions dans le réservoir ; Niveau 2, conditions à l'orifice ; Niveau 3, conditions après détente

En supposant d'abord que les forces visqueuses sont négligeables dans la zone de détente (du niveau 2 au niveau 3), puis qu'il n'y a pas d'entraînement du fluide ambiant, on peut écrire la conservation de la masse et du moment sous la forme des Eq. 10.5 et Eq. 10.6 :

$$\rho_3 V_3 A_3 = \rho_2 V_2 A_2 C_D \quad (10.5)$$

$$\rho_3 V_3^2 A_3 = \rho_2 V_2^2 A_2 C_D^2 + A_2 (P_2 - P_3) \quad (10.6)$$

Au passage, les aires $A_2 = \pi d^2/4$ et $A_2 = \pi d_v^2/4$ sont introduites. Un coefficient de perte de charge C_D est ajouté au niveau 2. Les grandeurs A_3 et V_3 sont alors données par les Eq. 10.7 et Eq. 10.8

$$A_3 = \frac{\rho_2 V_2^2 A_2 C_D^2}{P_2 - P_3 + \rho_2 V_2^2 C_D^2} \quad (10.7)$$

$$V_3 = V_2 C_D + \frac{P_2 - P_3}{\rho_2 V_2 C_D} \quad (10.8)$$

Ce jeu d'équations a été établi par Hess & al. (1973). En utilisant les relations isentropiques (Shapiro, 1953), on peut relier le niveau 1 au niveau 2 :

$$P_2 = P_1 \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (10.9)$$

$$\rho_2 = P_1 \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \frac{W}{RT_1} \quad (10.10)$$

$$V_2 = \sqrt{\frac{RT_1}{W} \left(\frac{2\gamma}{\gamma + 1} \right)} \quad (10.11)$$

Sachant que le fluide retrouve sa température totale après le disque de Mach, on a la relation $T_3 \sim T_1$. Ainsi, la vitesse V_3 et le diamètre virtuel d_v du jet s'expriment en fonction des grandeurs du niveau 1 par les Eq. 10.12 et Eq. 10.13.

$$V_3 = V_2 \left(C_D + \frac{\left(1 - \frac{P_3}{P_1} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}} \right)}{\gamma C_D} \right) \quad (10.12)$$

$$\frac{d_v}{d} = \sqrt{C_D \frac{P_1}{P_3} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \frac{V_2}{V_3}} \quad (10.13)$$

Dans le cas des jets fortement sous-détendus, c.a.d. dans le cas de l'Eq. 10.14, l'équation Eq. 10.13 se simplifie vers la forme de l'équation Eq. 10.15

$$\frac{P_3}{P_1} = NPR \gg \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}} \quad (10.14)$$

$$\frac{d_v}{d} = NPR^{1/2} C_D \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \frac{1}{\gamma C_D^2 + 1}} \quad (10.15)$$

L'important dans cette relation est que le diamètre virtuel d_v dépend du rapport de pression totale NPR selon une loi du type : $\frac{d_v}{d} \propto NPR^{1/2}$. Ce résultat peut être comparé avec les différentes corrélations donnant les tailles des bouteilles de Mach. En supposant un diamètre de disque de Mach $\frac{d_M}{d}$ proportionnel à la longueur de la bouteille de Mach $\frac{x_M}{d}$ et au diamètre virtuel du jet équivalent $\frac{d_v}{d}$, on obtient la relation de l'Eq. 10.16, qui est tout à fait compatible avec l'ensemble des résultats expérimentaux.

$$\frac{d_v}{d} \propto \frac{d_M}{d} \propto \frac{x_M}{d} \propto NPR^{1/2} \quad (10.16)$$

10.3.2 Vitesses et concentrations axiales

Les décroissances de vitesse axiale $U_x/U_0(x/d_v)$ et de concentration axiale $C_x/C_0(x/d_v)$ sont décrites par des lois hyperboliques, Eq. 10.17 et Eq. 10.18, valables loin de l'orifice, c.a.d. $\frac{x-x_{ov}}{d_v} \gg 1$.

$$\frac{U_{axe}(x)}{U_0} = \frac{kd_v}{x - x_{ov}} \quad (10.17)$$

$$\frac{C_{axe}(x)}{C_0} = \frac{kd_v}{x - x_{ov}} \left(\frac{\rho_a}{\rho_g} \right)^{1/2} \quad (10.18)$$

Dans ces équations, la concentration de référence C_0 est la concentration moyenne du réactif dans la section de sortie du jet, et la vitesse de référence U_0 est la vitesse virtuelle V_3 issue de l'équation Eq. 10.12 avec $C_D = 1.0$. Une constante de déviation hyperbolique k et une origine virtuelle x_{ov} apparaissent, communs aux deux lois. Ils sont introduits tels que la grandeur présentée devient infinie si $x - x_{ov} = kd_v$.

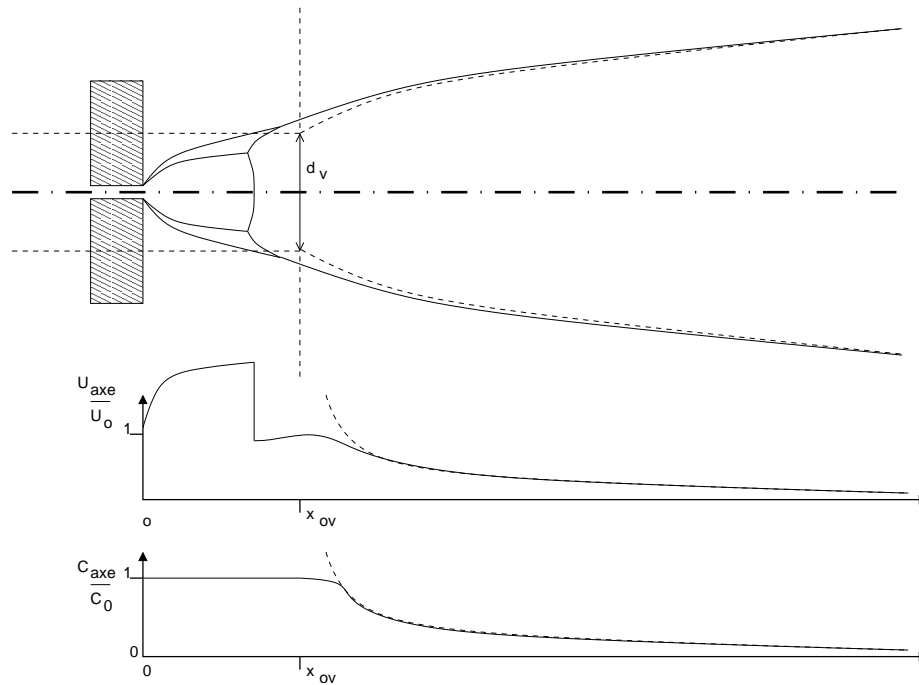


FIG. 10.6 – Jet sonique sous-détendu (Trait plein) et son jet sonique adapté équivalent (Trait interrompu). En champ lointain, les décroissances de vitesse et de concentrations sont hyperboliques.

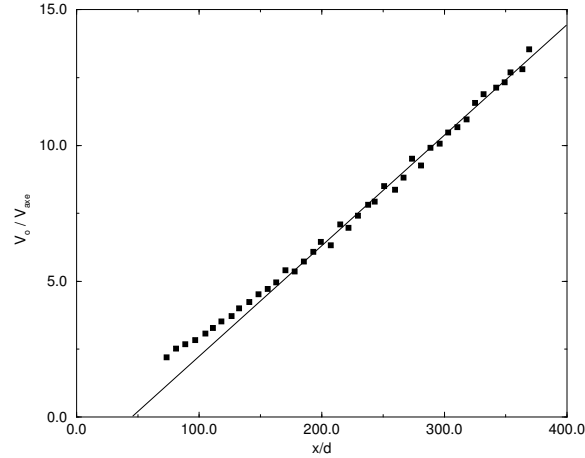


FIG. 10.7 – Données expérimentales de vitesse axiale pour un jet sonique fortement sous-détendu ($NPR=31$). L'abscisse est normalisée par le diamètre de l'orifice d . La vitesse est normalisée par la vitesse du son à la pression extérieure (zone détendue) et à la température totale du jet (température du réservoir).

La Fig. 10.7 montre le profil de vitesse axiale d'un jet sonique fortement sous-détendu. Comme c'est inverse de la vitesse qui est tracé, une évolution hyperbolique se traduit par une droite. On observe donc une évolution hyperbolique pour $x/d > 200$. Dans la zone proche de l'orifice $x \in [0, 200]$ apparaît une forte déviation, qui marque l'éloignement d'un régime hyperbolique.

L'Eq. 10.17 peut aussi s'écrire sous la forme affine de l'Eq. 10.19. La Fig. 10.7 permet donc de calculer à partir de résultats expérimentaux les inconnues x_{ov} et k .

$$\frac{U_0}{U_{axe}(x)} = \frac{x}{d} \frac{d}{kd_v} - \frac{x_{ov}}{d} \frac{d}{kd_v} = \alpha x + \beta \quad (10.19)$$

Le résultat du calcul des deux inconnues x_{ov} et k à partir de résultats expérimentaux est présenté dans la Fig. 10.8 pour des NPR allant de 1 à 80. Le facteur de déviation est toujours croissant. Par contre, l'origine virtuelle x_{ov} tend vers une limite aux alentours de $50d$, atteinte à 20% près dès les NPR supérieurs à 20. Les Eq. 10.20 et Eq. 10.21 donnent des corrélations qui permettent de retrouver ces évolutions.

$$kd_v/d = 3.956(NPR)^{0.529} \quad (10.20)$$

$$\frac{x_{ov}}{d} = 17.1971 + 7.43486 \ln(NPR) \quad (10.21)$$

Les profils de concentrations et de vitesses axiales, une fois corrigés avec ces deux paramètres, permettent la coalescence des résultats expérimentaux des jets sous-détendus, quelque soit le rapport de pression NPR . La constante de déviation hyperbolique k ne dépend pas du rapport de pression. On trouve expérimentalement $k = 4.83$, ce qui est proche de la valeur de cette constante pour les jets subsoniques : $k = 4.89$.

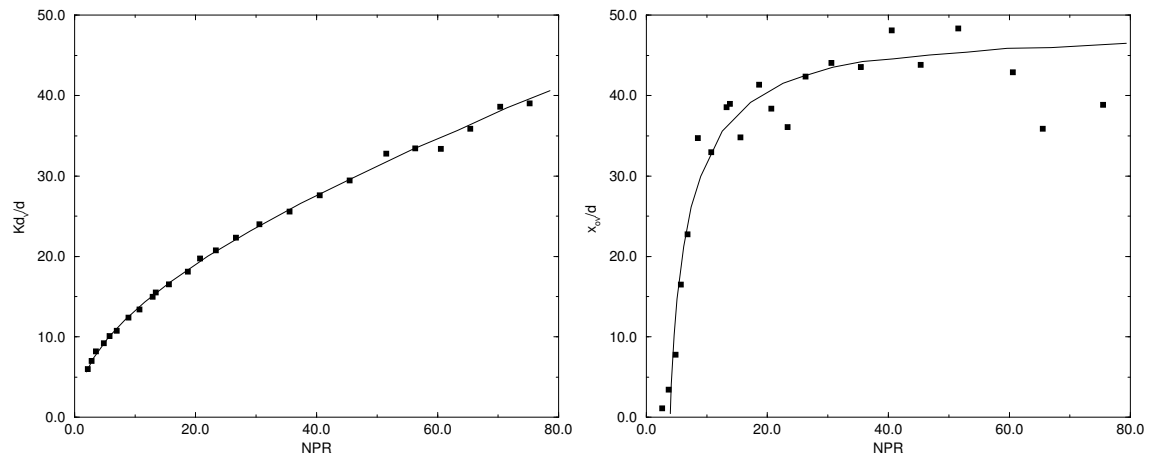


FIG. 10.8 – Evolution du facteur déviation k et de l'origine virtuelle x_{ov} en fonction du rapport de pression NPR

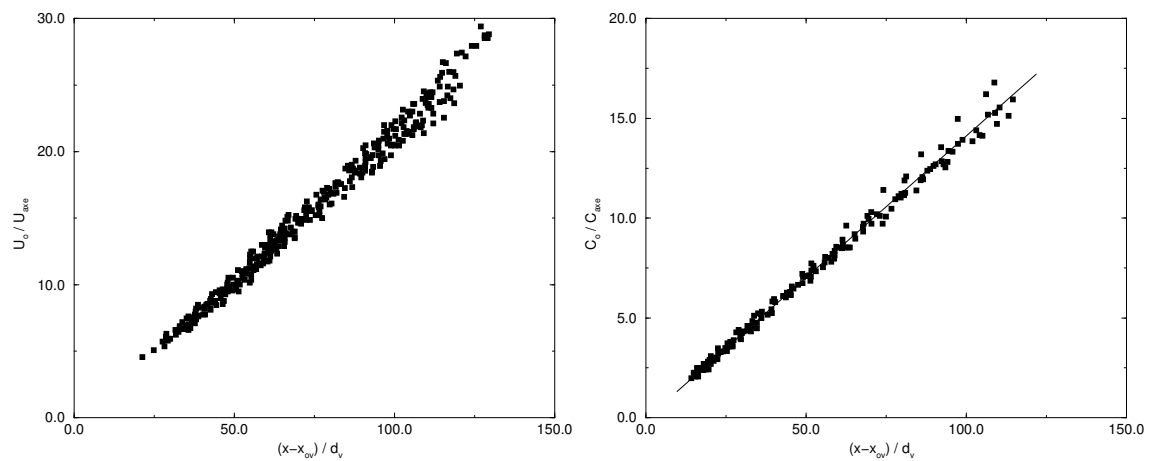


FIG. 10.9 – Données expérimentales de vitesse axiale et de concentration axiale pour 26 jets soniques fortement sous-détendus ($NPR \in [2.47, 75.92]$). L'abscisse est normalisée par le diamètre virtuel du jet. La vitesse est normalisée par la vitesse virtuelle V_3 issue de l'équation Eq. 10.12 avec $C_D = 1.0$

Chapitre 11

Annexe 3 : Coût de calcul

11.1 Contrainte du coût de calcul

La contrainte du coût de calcul est essentielle dans la simulation numérique. Cette annexe donne un aperçu des moyens de calculs actuellement disponibles. Les observations et perspectives qui suivent sont tirées du rapport au ministre de l'éducation nationale, de l'enseignement supérieur et de la recherche, intitulé *La politique française dans le domaine du calcul scientifique* daté de Mars 2005 et rédigé par Mr. E. Sartorius et Mr. M. Héon. Les données quantitatives concernant les supercalculateurs suivent la loi de Moore¹ et se périment en quelques semaines. Cependant, les tendances et politiques de calculs évoluent bien plus lentement, et il faut plusieurs années avant de voir des mutations effectives dans les moyens de calculs d'un pays donné. Avant d'aller plus loin, voici les grandeurs qui permettent de comparer les supercalculateurs entre eux.

La puissance de calcul d'un supercalculateur est mesurée en *flops* i.e. *floating point operation per second* (opérations à virgule flottante par seconde). La puissance mentionnée est dite 'puissance de crête', de 5 à 10 fois supérieure à la puissance de production nominale. Il faut noter que la mesure dépend de l'application. Les *flops* et leurs multiples² sont adaptés aux calculs de nombres réels. La puissance de stockage d'un supercalculateur peut également intervenir dans son évaluation globale. Celle ci se mesure en *octets*.

11.2 Panorama des moyens de calculs

En France, quatre structures hébergent les supercalculateurs : Le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur), l'IDRIS (Institut du Développement des Ressources en Informatique Scientifique - Direction des Applications Militaires), le département Sciences et simulation de l'information du CEA-DAM (Commissariat à l'Energie Atomique) et l'IN2P3 (Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules). Les moyens de calcul de Météo

¹la puissance des calculateurs double tous les 18 mois à 2 ans. En termes mathématiques, si Δt est le temps de doublement de la puissance de calcul P_{calc} , cette loi s'écrit : $P_{calc}(t) \propto (2^{1/\Delta t})^t$

²Rappel des préfixes grecs utilisés : *kilo (K)* : 10^3 *mega (M)* : 10^6 *giga (G)* : 10^9 *tera (T)* : 10^{12} *peta (P)* : 10^{15}

France ne sont pas mentionnés ici, car ils sont exclusivement dédiés aux prévisions. On notera également que le l'IN2P3 se distingue par sa puissance de stockage, bientôt de l'ordre du *Poctets*, bien plus que par la la puissance de calcul dégagée par ses fermes de calculateurs. Ces structures sont présentées dans le Tableau 11.1.

Centre	CINES	IDRIS	CEA	IN2P3
Personnel	50	50	190	60
Localisation	Montpellier	Orsay	Bruyères le Châtel	Villeurbanne
Coût total	5.4 M EUR/an	9.2 M EUR/an	10 M EUR/an	8.8 M EUR/an
Principaux Calculateurs	IBM-SP4 :1.85Tflops SGI-O3800 :0.8Tflops	IBM-SP4 :6.5Tflops NEC-SX5 :0.3Tflops	HP-SC45 :2.4Tflops NEC-SX6 :0.4Tflops	654 biprocesseurs IBM,NEC,SUN :1.8Tflops

TAB. 11.1 – Descriptif des structures accueillant les supercalculateurs ouverts au calcul scientifique en France en Nov. 2005.

On trouve également des centres de calculs de taille intermédiaire, ou mésocentres. Ils mettent en commun des moyens de calculs à l'échelon régional, dégageant des puissances de l'ordre de 0.1 à 1Tflops. Il y a enfin des moyens de calculs locaux installés pour les besoins spécifiques d'une équipe industrielle, militaire, ou de recherche. Le rapport ministériel 2005 fait remarquer que dans l'idéal l'essentiel des calculs devraient être traités dans les mésocentres, tandis que les calculs de très grande ampleur seraient installés sur les grands supercalculateurs. C'est pourquoi les rapporteurs pointent du doigt le fractionnement des calculateurs. En effet, sur l'IBM-SP4 du CINES, 10% de la production utilise au moins la moitié de la puissance de la machine (128 processeurs sur 256), 31% utilise le quart (64 processeurs), 54% le huitième (32 processeurs). Inversement, plus de la moitié de la production pourrait se faire sur une machine de 0.23 Tflops.

La conclusion fondamentale du rapport ministériel 2005 concerne le retard de la France dans le paysage européen et mondial du calcul à hautes performances. Les statistiques de l'organisation ARCADE³ montrent que la puissance de calcul de la France, même ramenée au produit intérieur brut ou à la population, se situe aux toutes dernières places de l'union européenne. A l'échelle mondiale, la liste du 'top 500' est éloquent. Ce classement des 500 supercalculateurs les plus puissants, établi par les universités de Mannheim et du Tennessee, est une référence mondiale. Dans le classement de novembre 2005, la France n'y fait apparaître que 8 machines, dont la première de situe à la 62^e place.

11.3 Coût des codes de calculs

Un code de calcul performant est par définition un programme qui profite efficacement des capacités du supercalculateur qui l'exécute. Or les supercalculateurs ont des architectures variées. L'architecture parallèle distribue des morceaux du problème à des processeurs traitant les opérations une par une. L'architecture vectorielle confie le problème à un processeur capable d'exécuter simultanément une grande quantité d'opérations identiques. Chaque architecture impose un algorithme

³<http://www.arcade-eu.info/index.html> Organisation européenne non-gouvernemental à but non lucratif destinée à favoriser les échanges de savoir et d'informations sur les politiques et les infrastructures en matière de calcul intensif

Rang au top500	Nom/Institut	Pays	Puissance
1	Blue Gene	U.S.A	280.6 Tflops
7	Earth Simulator	Japon	35.9 Tflops
8	Mare Nostrum	Espagne	27.9 Tflops
9	Stella	Pays-Bas	27.4 Tflops
13	EPFL	Suisse	18.2 Tflops
16	Météo	Corée du sud	15.7 Tflops
26	Météo	Chine	10.3 Tflops
33-34	ECMWF	Royaume-uni	9.2 Tflops
36	APAC	Australie	9 Tflops
37	HWU-U. Stuttgart	Allemagne	9 Tflops
51	U. Sherbrooke	Canada	6.9 Tflops
62	CEA-DAM	France	5.8 Tflops

TAB. 11.2 – Extrait du classement 'top 500' des supercalculateurs en activité en Nov. 2005. La puissance mentionnée est celle dégagée avec le banc d'essai numérique LINPACK

de programmation spécifique. Cette contrainte augmente avec la taille du calcul.

Ainsi, faire migrer un code pensé pour une architecture vers une autre architecture entraîne une perte significative de performances. De plus, la maintenance et le développement augmente en complexité, ce qui grève le coût humain du code. C'est pourquoi les performances d'un code de calcul à hautes performances dépendent bien plus de la politique de son développement que de la qualité de ses programmeurs.

Un algorithme idéalement optimisé prend en compte les opérations et la gestion de la mémoire de toute la chaîne de calcul. Or, trop souvent, les programmes précédents (maillage, partitionnement) ou suivants (stockage et analyse des données) ne bénéficient pas du même effort 'politique'. En effet le calcul parallèle réalisé au début de l'été 2005 sur le supercalculateur IBM Blue Gene du T.J. Watson Research Center avec le code AVBP, l'absence d'un partitionnement parallélisé a compliqué sérieusement le problème. Au delà des contraintes techniques, c'est le travail humain qui pose problème lors de simulations de grande ampleur. Si le système de stockage et d'accès aux produits de simulation n'est pas pensé à base pour traiter des masses de données, les outils d'analyse deviennent inutilement complexes.

11.4 Coût des SGE présentées

Cette section explique comment estimer *a priori* le coût de calcul d'une simulation effectuée par AVBP. Prenons un problème physique quelconque. Son volume de calcul est discrétisé par N points, et contient des volumes de calculs de taille supérieure ou égale à Δx , longueur de la plus petite structure qui sera simulée. La vitesse maximale U présente dans le calcul (vitesse maximale convective en supersonique, vitesse maximale acoustique en subsonique) donne une estimation du pas de temps maximal pour un code explicite comme AVBP : $\Delta t < \Delta x/U$. Le pas de temps réel est pris 30% plus faible ($CFL = 0.7$) pour stabiliser le calcul. Enfin, le temps caractéristique maximal du phénomène étudié t_{max} permet de donner le nombre d'itérations requises $n_{it} = t_{max} \cdot U / (CFL \cdot \Delta x)$.

Le produit $N.n_{it}$ donne une estimation de la taille numérique T_n du problème étudié.

$$T_n = N.t_{max}.U/(CFL.\Delta x) \quad (11.1)$$

Du point de vue du supercalculateur, seule une fraction de la puissance P_{crete} de crête est développée lors de l'exécution du code. Les pertes sont de plusieurs origines. Il y a tout d'abord l'accélération SU (*Speed-up*) due exclusivement au parallélisme⁴. Ensuite, on trouve l'efficacité E Code/Calculateur. Pour un code idéalement parallèle, un supercalculateur affichant $10Tflops$ de puissance de crête ne développera que $1Tflops$ effectif ($E=10\%$). Enfin, l'utilisateur ne demande qu'un nombre limité de processeurs n_p par rapport au nombre total n_p^{tot} . La puissance effective est donc donnée par la relation

$$P_{eff} = n_p/n_p^{tot} * E * SU(n_p) * P_{crete} \quad (11.2)$$

Paramètre	Jet de Chuech, Chap.5	Flamme de Cheng, Chap.6
Points (N)	507 337	139 560
Taille min. (Δx)	$1.17 \cdot 10^{-4}m$	$4.8 \cdot 10^{-5}m$
Vitesse max (U)	$360m/s$	$1650m/s$
Pas de temps (Δt)	$1.20 \cdot 10^{-7}s$	$1 \cdot 10^{-8}s$
Temps carac. (t_{max})	$1ms$	$1ms$
Iterations (n_{it})	8330	100000
Taille num. (T_n)	$4.23 \cdot 10^9$	$1.40 \cdot 10^{10}$
Puis. crête (P_{crete})	$80Gflops$	$80Gflops$
Total Processeurs (n_p^{tot})	40	40
Processeurs demandés (n_p)	16	16
Accélération ($SU(16)$)	1	1
Efficacité (E)	15%	15%
Puis. effective (P_{eff})	$4.8Gflops$	$4.8Gflops$
Efficacité	$100\mu s/proc/it./noeuds$	$155\mu s/proc/it./noeuds$
Durée	$89500s/25h$	$452000s/125h$
Heures CPU	400	2000
Coût	$4000EUR$	$20000EUR$

TAB. 11.3 – Estimation du coût de deux simulations numériques présentées

⁴Un code parallèle idéal $SU = 1$ demande une seconde d'exécution sur 10 processeurs lorsque dix secondes sont nécessaires sur un seul.

Bibliographie

- [1] ABDOL-HAMID, K. S. Three-dimensional calculations for underexpanded and over expanded supersonic jet flows. *AIAA paper*, 2196 (1989).
- [2] ABDOL-HAMID, K. S., AND WILMOTH, R. G. Multiscale turbulence effects in underexpanded supersonic jets. *AIAA Journal* 27, 3 (1989), 315–322.
- [3] ADAMSON, T., AND NICHOLLS, J. On the structure of jets from highly underexpanded nozzles into still air. *Journal of Aerospace Science* 26 (1959), 16–24.
- [4] ANDERSON, J. *Modern Compressible Flow*. McGraw-Hill, 1982.
- [5] ANTSUPOV, A. V. Properties of underexpanded and overexpanded supersonic gas jets. *Soviet Physics : Technical Physics* 19 (1974), 234–238.
- [6] ARNETTE, S., SAMIMY, M., AND ELLIOTT, G. On streamwise vortices in high reynolds number supersonic axisymmetric jets. *Phys. of Fluids* 5, 1 (1993), 187–202.
- [7] ARRHENIUS, S. Ueber die reaktionsgeschwindigkeit bei der inversion von rohrzucker durch saeuren. *Z. Phys. Chem*, 4 (1889), 226–248.
- [8] BARITAUD, T. A., HEINZE, T. A., AND LE COZ, J.-F. Spray and self-ignition visualisation in a DI diesel engine. *SAE Paper 940681* (1994).
- [9] BAURLE, R. A., ALEXOPOULOS, G. A., AND HASSAN, H. A. Assumed joint probability density function approach for supersonic turbulent combustion. *J. Propul. Power* 10, 4 (1994), 473–483.
- [10] BAURLE, R. A., ALEXOPOULOS, G. A., HASSAN, H. A., AND DRUMMOND, J. P. An assumed joint-beta PDF approach for supersonic turbulent combustion. In *AIAA, SAE, ASME, and ASEE, Joint Propulsion Conference and Exhibit, 28th, Nashville* (1992).
- [11] BERKOOZ, G., HOLMES, P., AND LUMLEY, J. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 25 (1993), 539–575.
- [12] BILLIG, F. S. Research on supersonic combustion. *J. Propul. Power* 9, 4 (1993), 499–514.
- [13] BIRCH, A. D., BROWN, D. R., COOK, D. K., AND HARGRAVE, G. K. Flame stability in underexpanded natural gas jets. *Combust. Sci. and Tech.* 58 (1988), 267.
- [14] BIRCH, A. D., BROWN, D. R., DODSON, M. G., AND SWAFFIELD, F. The structure and concentration decay of high pressure jets of natural gas. *Combust. Sci. and Tech.* 36 (1984), 249–261.
- [15] BIRCH, A. D., HUGHES, D. J., AND SWAFFIELD, F. Velocity decay of high pressure jets. *Combust. Sci. and Tech.* 52 (1987), 161–171.

- [16] BIRD, R., STEWART, W., AND LIGHFOOT, E. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960.
- [17] BOGEY, C., BAILLY, C., AND JUVÉ, D. Noise investigation of a high subsonic, moderate reynolds number jet using a compressible large eddy simulation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 16, 4 (2003), 273–297.
- [18] BROWN, G. L., AND ROSHKO, A. On density effects and large structure in turbulent mixing layers. *J. of Fluid Mech.* 64 (1974), 775–816.
- [19] BURROWS, M. C., AND KURKOV, A. P. An analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in vitiated air stream. *AIAA Journal* 11, 9 (1973), 1217–1218.
- [20] CAPON, J. High resolution frequency-wavenumber spectrum analysis. In *IEEE* (1969), vol. 57, pp. 1408–1418.
- [21] CHANG, I.-S. *Mach Reflection, Mach Disc, and the Associated Nozzle Free Jet Flows*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1945.
- [22] CHARGY, D. *Simulation numérique d'écoulements réactifs transsoniques*. PhD thesis, Université de Nice, 1991.
- [23] CHASE, M. J., DAVIES, C., AND DOWNEY, J. J. Janaf thermochemical tables. third edition. i, al–co. ii, cf–zr. *J. Phys. Chem.* 14 (1985).
- [24] CHASSAING, P. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès Editions, 2000.
- [25] CHENG, R. K., AND OPPENHEIM, A. K. Autoignition in methane-hydrogen mixtures. *Comb. and Flame* 58 (1984), 125–139.
- [26] CHENG, T. S., AND LEE, K. S. Numerical simulations of underexpanded supersonic jet and free shear layer using WENO schemes. *Int. J. Heat Fluid Fl.* 26, 6 (2005), 755–770.
- [27] CHENG, T. S., WEHRMEYER, J. A., AND PITZ, R. W. Simultaneous temperature and multispecies measurement in a lifted hydrogen diffusion flame. *Comb. and Flame* 91 (1992), 323–345.
- [28] CHENG, T. S., WEHRMEYER, J. A., PITZ, R. W., JARRETT, O., AND NORTHAM, G. B. Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame. *Comb. and Flame* 99 (1994), 157–173.
- [29] CHUECH, S. G., LAI, M. C., AND FAETH, G. M. Structure of turbulent sonic underexpanded free jets. *AIAA Journal* 27 (1989), 549–559.
- [30] CLEMENS, N. T., AND MUNGAL, M. G. Large-scale structure and entrainment in the supersonic mixing layer. *J. of Fluid Mech.* 284 (1995), 171–216.
- [31] COLIN, O. *Simulation aux Grandes Echelles de la Combustion Turbulente Prémélangée dans les Statoréacteurs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000.

- [32] COLIN, O., AND RUDGYARD, M. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. of Comp. Phys.* 162, 2 (2000), 338–371.
- [33] COLKET, M.B., I., AND SPADACCINI, L. Scramjet fuels autoignition study. *Journal of Propulsion and Power* 17, 2 (2001), 315–323.
- [34] COOK, A., AND CABOT, W. A high-wavenumber viscosity for high-resolution numerical methods. *J. of Comp. Phys.* , 195 (VNR hyperviscosity 2004), 594–601.
- [35] COOK, A., AND CABOT, W. Hyperviscosity for shock-turbulence interactions. *J. of Comp. Phys.* , 203 (2005), 379–385.
- [36] COX, R., AND COLE, J. A. Chemical aspects of the autoignition of hydrocarbon-air mixtures. *Comb. and Flame* 60 (1985), 109–123.
- [37] CRIST, S., GLASS, D. R., AND SHERMAN, P. M. Study of the highly underexpanded sonic jet. *AIAA Journal* 4 (1966), 68–71.
- [38] CUMBER, P., FAIRWEATHER, M., FALLE, S., AND GIDDINGS, J. Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets. *Journal of Fluids Engineering* 117 (1995), 599–604.
- [39] CURRAN, E. T., AND MURTHY, S., Eds. *Scramjet propulsion*. No. ISBN 1563473224 in V-189. AIAA American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2000.
- [40] CURRAN, T. Scramjet engines : The first forty years. *J. Propul. Power* 17, 6 (2001), 1138–1148.
- [41] CUTLER, A. D., AND WHITE, J. A. An experimental study of a supersonic coaxial jet. *AIAA Paper*, 143 (2001).
- [42] DA CRUZ, A. P., BARITAUD, T. A., AND POINSOT, T. Self-ignition and combustion modeling of initially nonpremixed turbulent systems. *Comb. and Flame* 124, 1 (2001), 65–81.
- [43] DASH, S. M., AND WOLF, D. E. Analysis of turbulent underexpanded jets. i - parabolized navier-stokes model, SCIPVIS. *AIAA Journal* 23, 4 (1985), 505–514.
- [44] DAY, M., REYNOLDS, W. C., AND MANSOUR, N. N. The structure of the compressible reacting mixing layer : Insights from linear stability analysis. *Phys. of Fluids* 10, 4 (1998), 993–1007.
- [45] DEL ROSSI, A., INGENITO, A., BRUNO, C., PARISI, V., AND GIACOMAZZI, E. Les of supersonic combustion of H₂/vitiated air. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit ; Fort Lauderdale* (2004).
- [46] DEVAUD, C. B., KELMAN, J. B., MOSS, J. B., AND STEWART, C. D. Stability of underexpanded supersonic jet flames burning H₂-CO mixtures. *Shock Waves* 12 (2002), 241–249.
- [47] DON, W. S., AND GOTTLIEB, D. Spectral simulation of supersonic reactive flows. *SIAM J. Numer. Anal* 35, 6 (1998), 2370–2384.

- [48] DRISCOLL, J., HUH, H., YOON, Y., AND DONBAR, J. M. Measured lengths of supersonic hydrogen-air jet flames compared to subsonic flame lengths and analysis. *Comb. and Flame* 107 (1996), 176–186.
- [49] DRUMMOND, J. P. A two-dimensional numerical simulation of a supersonic, chemically reacting mixing layer. Tech. Rep. TM 4055, NASA, 1988.
- [50] DRUMMOND, J. P., ROGERS, R. C., AND HUSSAINI, M. Y. A detailed numerical model of a supersonic reacting mixing layer. In *AIAA, ASME, SAE, and ASEE, Joint Propulsion Conference, 22nd, Huntsville* (1986).
- [51] DUCROS, F., COMTE, P., AND LESIEUR, M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate layer developing spatially over a flat plate. *J. of Fluid Mech.* 326 (1996), 1–36.
- [52] EASTMAN, D., AND RADTKE, P. Location of the normal shock wave in the exhaust plume of a jet. *AIAA Journal* 1 (1963), 918–919.
- [53] ECHEKKI, T., AND CHEN, J. Direct numerical simulation of autoignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures. *Comb. and Flame* 134, 3 (2003), 169–191.
- [54] EKLUND, D. R., BAURLE, R. A., AND GRUBER, M. R. Numerical study of a scramjet combustor fueled by an aerodynamic ramp injector in dual-mode combustion. In *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 39th, Reno* (2001).
- [55] EVANS, J. S., AND SCHEXNAYDER JR., C. J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames. *AIAA Journal* 18, 2 (1980), 188–193.
- [56] EVANS, J. S., SCHEXNAYDER JR., C. J., AND BEACH, H. Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows. Tech. Rep. 1169, NASA, 1978.
- [57] EWAN, B., AND MOODIE, K. Structure and velocity measurements in underexpanded jets. *Combus. Sci. and Tech.* 45 (1986), 275–288.
- [58] FERRI, A. *Elements Of Aerodynamics Of Supersonic Flows*. 0486442802. Dover Publications, 1949.
- [59] FERRI, A. *General Teory of High Speed Aerodynamics*. Princeton, NJ, 1954, ch. Supersonic Flows with Shock Waves.
- [60] FERRI, A. Review of problems in application of supersonic combustion. *J. Roy. Aeronaut. Soc.* 69, 645 (1964), 575–595.
- [61] FERRI, A. Review of scramjet propulsion technology. *J. Aircraft* 5, 1 (1968), 3–10.
- [62] FIORINA, B., AND K., L. S. Numerical investigation of a transverse jet in a supersonic crossflow using large eddy simulation. *AIAA Paper*, 2006-3712 (2006).

- [63] FREUND, J. B., K., L. S., AND MOIN, P. Numerical simulation of a mach 1.92 turbulent jet and its sound field. *AIAA Journal* 38, 11 (2000), 2023–2031.
- [64] GENIN, F., AND MENON, S. Les of supersonic combustion of hydrocarbon spray in a scramjet. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit ; Fort Lauderdale* (2004).
- [65] GERLINGER, P., STOLL, P., AND BRÜGGEMANN, D. An implicit multigrid method for the simulation of chemically reacting flows. *J. of Comp. Phys.* 146, 1 (1998), 322–345.
- [66] GIBBS, J. *On the equilibrium of heterogeneous substances*. New Haven, 1875.
- [67] GODUNOV, S. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik* 47 (1959), 271–306.
- [68] HALSTEAD, M., KIRSCH, L., AND QUINN, C. The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures-fitting of a mathematical model. *Comb. and Flame* 30 (1977), 45–60.
- [69] HILBERT, R., AND THÉVENIN, D. Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulations. *Comb. and Flame* 128, 1/2 (2002), 22–37.
- [70] HILL, D., AND PULLIN, D. Hybrid tuned center-difference-weno method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *J. Comput. Phys.* 194, 2 (2004), 435–450.
- [71] HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons, 1989.
- [72] HIRSCHFELDER, J., CURTISS, C., AND BYRD, R. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1964.
- [73] HUNT, J., WRAY, A., AND MOIN, P. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. In *Summer Program* (1988), vol. SEE N89-24538 18-34, NASA, pp. 193–208.
- [74] IM, H., CHEN, J., AND LAW, C. Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows. In *27th Symp. (Int.) on Combustion* (1998), pp. 1047–1056.
- [75] JACHIMOWSKI, C. J. An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to. scramjet combustion. Tech. Rep. TP-2791, NASA, 1988.
- [76] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical solution of the euler squations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference* (Palo Alto, 1981), A. p. 81-1259, Ed.
- [77] JEUNG, I.-S., AND CHOI, J.-Y. Numerical simulation of supersonic combustion for hypersonic propulsion. In *5th Asia-Pacific Conference on Combustion ; Adelaide, Australia* (2005).
- [78] JIANG, G.-S., AND SHU, C.-W. Efficient implementation of weighted eno schemes. *J. Comput. Phys.* 126, 202-226 (1996).

- [79] JONES, W., AND KAKHI, M. Pdf modeling of finite-rate chemistry effects in turbulent nonpremixed jet flames - a general calculation procedure. *Comb. Flame* 115, 1 (1998), 210–229.
- [80] KANDA, T., HIRAIWA, T., MITANI, T., TOMIOKA, S., AND CHINZEI, N. Mach 6 testing of a scramjet engine model. *J. Propul. Power* 13, 4 (1997), 543–551.
- [81] KEE, R., RUPLEY, F., AND MILLER, J. CHEMKIN II, a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Tech. Rep. SAND89-8009, Sandia, 1989.
- [82] KNIKKER, R., DAUPTAIN, A., CUENOT, B., AND POINSOT, T. Comparison of computational methodologies for ignition of diffusion layers. *Combust. Sci. and Tech.* 175, 10 (2003), 1783 – 1806.
- [83] KODERA, M., NAKAHASHI, K., HIRAIWA, T., KANDA, T., AND MITANI, T. Scramjet inlet flow computations by hybrid grid method. In *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 36th, Reno* (1998).
- [84] KODERA, M., SUNAMI, T., AND NAKAHASHI, K. Numerical analysis of scramjet combustor flows by unstructured hybrid grid method. In *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 38th, Reno* (2000).
- [85] KOLMOGOROV, A. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR* 30 (1941), 301.
- [86] KONG, S., HAN, Z., AND REITZ, R. The development and application of a diesel ignition and combustion model for multidimensional engine simulations. *SAE paper 950278* (1995).
- [87] KONG, S., MARRIOT, C., AND REITZ, R. Modeling and experiments of HCCI engine combustion using detailed chemical kinetics with multidimensional CFD. *SAE paper 2001-01-1026* (2001).
- [88] KOURTA, A., AND SAUVAGE, R. Computation of supersonic mixing layers. *Phys. of Fluids* 14, 11 (2002), 3790–3797.
- [89] KUMAR, A. Numerical simulation of scramjet inlet flow fields. Tech. Rep. TP-2517, NASA, 1986.
- [90] KUO, K. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
- [91] LANDAU, L. D., AND LIFSHITZ, E. M. *Course of theoretical physics : Fluid mechanics*. Oxford : Pergamon Press, 1959.
- [92] LARCHEVÊQUE, L. *Simulation des grandes échelles de l'écoulement au-dessus d'une cavité*. PhD thesis, Université Paris 6, 2003.
- [93] LARCHEVÊQUE, L., SAGAUT, P., LÊ, T.-H., AND COMTE, P. Large-eddy simulation of a compressible flow in a three-dimensional open cavity at high reynolds number. *J. Fluid Mech.* 516 (2004), 265–301.

- [94] LARCHEVÊQUE, L., SAGAUT, P., MARY, I., AND LABBE, O. Large-eddy simulation of a compressible flow past a deep cavity. *Phys. Fluids* 15, 1 (2003), 193–210.
- [95] LEE, S., LELE, S., AND MOIN, P. Interaction of isotropic turbulence with shock waves : effect of shock strength. *J. of Fluid Mech.* 340 (1997), 225–247.
- [96] LELE, S. Compressibility effects on turbulence. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 26 (1994), 211–254.
- [97] LEWIS, C., AND CARLSON, D. Normal shock location in underexpanded gas and gas-particle jets. *AIAA Journal* 2, 4 (1964), 776–777.
- [98] LI, J., YU, G., ZHANG, Y., LI, Y., AND QIAN, D. Experimental studies on self-ignition of hydrogen/air supersonic combustion. *Journal of Propulsion and Power* 13, 4 (1997), 538–542.
- [99] LOVE, E. S., GRISBY, C. E., LEE, L. P., AND WOODLING, M. J. Experimental and theoretical studies of axisymmetric free jets. *NASA*, 19980228067 (1959).
- [100] LUO, K. H. Combustion effects on turbulence in a partially premixed supersonic diffusion flame. *Comb. and Flame* 119, 4 (1999), 417–435.
- [101] MANKBADI, R. R., HAYDER, M. E., AND POVINELLI, L. A. Structure of supersonic jet flow and its radiated sound. *AIAA Journal* 32, 5 (1994), 897–906.
- [102] MASTORAKOS, E., BARITAUD, T., AND POINSOT, T. J. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. *Comb. and Flame* 109, 1/2 (1997), 198–223.
- [103] MASTORAKOS, E., DA CRUZ, A. P., BARITAUD, T. A., AND POINSOT, T. A model for the effects of mixing on the autoignition of turbulent flows. *Combust. Sci. and Tech.* 125, 1/6 (1997), 243–282.
- [104] MAZEN, Z. Instabilité linéaire d’un jet rond supersonique. Master’s thesis, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers de Paris, France, 2005.
- [105] MERCIER, M. *Le Feu Grégeois*. Geuthner, 1952.
- [106] MOBUS, H., GERLINGER, P., AND BRUGGEMANN, D. Scalar and joint scalar-velocity-frequency monte carlo pdf simulation of supersonic combustion. *Comb. Flame* 132, 1 (2003), 3–24.
- [107] MONTARNAL, P., AND SHU, C.-W. Real gas computation using an energy relaxation method and high-order weno schemes. *ICASE Report*, 98-42 (1998).
- [108] MONTGOMERY, C. J., ZHAO, W., AND ADAMS, B. R. Supersonic combustion simulations using reduced chemical kinetics mechanisms and ISAT. In *24th Fluid Dynamics meeting, Orlando* (2003), vol. AIAA Paper 2003-3547.
- [109] NICOUD, F., AND DUCROS, F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turbul. Combust.* 62, 3 (1999), 183–200.

- [110] NORRIS, J. W., AND EDWARDS, J. R. Large-eddy simulation of high-speed, turbulent diffusion flames with detailed chemistry. In *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 35th, Reno* (1997).
- [111] OLBY, R., CANTOR, G., CHRISTIE, J., AND HODGE, M. *Companion to the History of Modern Science*. Routledge, 1996, ch. Science and War, by D.E.H. Edgerton, pp. 934–945.
- [112] PALMER, J., AND HANSON, R. Application of method of characteristics to underexpanded, freejet flows with vibrational nonequilibrium. *AIAA Journal* 36, 2 (1998), 193–200.
- [113] PAN, J. On the origin of rockets. *T'oung Pao LXXIII* (1987), 2–15.
- [114] PANDA, J., AND SEASHOLTZ, R. G. Measurement of shock structure and shock–vortex interaction in underexpanded jets using rayleigh scattering. *Phys. of Fluids* 11, 12 (1999), 3761–3777.
- [115] PAPAMOSCHOU, D., AND BUNYAJITRADULYA, A. Evolution of large eddies in compressible shear layers. *Phys. of Fluids* 9, 3 (1997), 756–765.
- [116] PFAHL, U., FIEWEGER, K., AND ADOMEIT, G. Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions. In *26th Symp. (Int.) on Combustion* (1996), p. 781.
- [117] POINSOT, T., ANGELBERGER, C., EGOLFPOPOULOS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of combustion instabilities. In *1st Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena* (Santa Barbara, Sept 12-15., 1999), pp. 1–6.
- [118] POINSOT, T., AND LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. of Comp. Phys.* 101 (1992), 104–129.
- [119] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion, second edition*. R.T. Edwards, 2005.
- [120] POPE, S. B. A monte carlo method for the pdf equations of turbulent reactive flow. *Combust. Sci. and Tech.* 25 (1981), 159–174.
- [121] POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [122] RATNER, A., DRISCOLL, J., HUH, H., AND BRYANT, R. A. Combustion efficiencies of supersonic flames. *J. Propul. Power* 17, 2 (2001), 301–307.
- [123] RAYLEIGH, L. Analytic solutions of the rayleigh equation for linear density profiles. In *Proc. London. Math. Soc.* (1883).
- [124] RISHA, D. Analysis of growth rates in three-dimensional, air-to-air supersonic shear layers using direct numerical simulation. In *AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 33rd, Reno* (1995).
- [125] ROCK, K. E., VOLAND, R. T., ROGERS, R. C., AND HUEBNER, L. D. NASA's hyper-X scramjet engine ground test program. In *ISABE - International Symposium on Air Breathing Engines, 14th, Florence, Italy* (1999).

- [126] ROE, P. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *J. Comput. Phys.* 43 (1981), 357–372.
- [127] ROY, C. J., AND EDWARDS, J. R. Numerical simulation of a three-dimensional flame/shock wave interaction. *AIAA Journal* 38, 5 (2000), 745–754.
- [128] SAGAUT, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements fluides incompressibles*. Springer, 1998.
- [129] SANDHAM, N. D., AND REYNOLDS, W. C. Three-dimensional simulations of large eddies in the compressible mixing layer. *J. of Fluid Mech.* 224 (1991), 133–158.
- [130] SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Initial and boundary conditions for large eddy simulation of combustion instabilities. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999, pp. 73–84.
- [131] SEINER, J. M., AND NORUM, T. D. Aerodynamic aspects of shock containing jet plumes. *AIAA Paper*, 90-0217 (1980).
- [132] SHAPIRO, A. *The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow*. New York : Ronald Press, 1953.
- [133] SHEN, H., AND TAM, C. K. W. Numerical simulation of the generation of axisymmetric mode jet screech tones. *AIAA Journal* 36, 10 (1998), 1801–1807.
- [134] SINGER, J., HOLMYARD, E., AND HALL, A. *A History of Technology*. London : Oxford U. Press, 1958.
- [135] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review* 91, 3 (1963), 99–164.
- [136] SPADACCINI, L., AND COLKET, M.B., I. Ignition delay characteristics of methane fuels. *Progress in Energy and Combustion Science* 20 (1994), 431–460.
- [137] SPADACCINI, L., AND TEVELDE, J. Autoignition characteristics of aircraft-type fuels. *Comb. and Flame* 46 (1982), 283–300.
- [138] STRUIJS, R. *A multi-dimensional upwind discretization method for the Euler equations on unstructured grids*. PhD thesis, TU Delft, 1994.
- [139] STULL, D., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Tech. Rep. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.
- [140] SUNG, C. J., LI, J., YU, G., AND LAW, C. K. Chemical kinetics and self-ignition in a model supersonic hydrogen–air combustor. *AIAA Journal* 37, 2 (1999), 208–214.
- [141] SUTTROP, F. Ignition of gaseous hydrocarbon fuels in hypersonic ramjets. In *ISABE, Marseille* (1972).

- [142] TAM, C. K. W. Supersonic jet noise. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 27 (1995), 17–43.
- [143] THOMPSON, P. *Compressible Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, 1972.
- [144] TOONE, P. A computation fluid dynamic model of a supersonic axi-symmetric jet using a beta probability function combustion model. Tech. rep., Departement of Mechanical Engineering, Purdue University, 2002.
- [145] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme v. *J. Comput. Phys.* 32 (1979), 101–136.
- [146] VILLASENOR, R., CHEN, J. H., AND PITZ, R. W. Modeling ideally expanded supersonic turbulent jet flows with nonpremixed H₂-air combustion. *AIAA Journal* 30, 2 (1992), 395–402.
- [147] VON LAVANTE, E., AND KALLENBERG, M. High resolution simulation of supersonic combustion. In *ASME, SAE, and ASEE, Joint Propulsion Conference and Exhibit, 32nd, Lake Buena Vista* (1996).
- [148] VONNEUMANN, J., AND RICHTMYER, R. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics* 21(3) (1950), 232–237.
- [149] VUILLERMOZ, P. *Modeling and simulation of transport and combustion phenomena in a supersonic mixing layer*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 1992.
- [150] WALTRUP, P. J. Liquid-fueled supersonic combustion ramjets - a research perspective. *J. Propul. Power* 3, 6 (1987), 515–524.
- [151] WAN, C., PITSCH, H., AND PETERS, N. Simulation of autoignition delay and location of fuel sprays under diesel-engine relevant conditions. *SAE paper 97590* (1997).
- [152] WHITE, J. A., AND MORRISON, J. A pseudo-temporal multi-grid relaxation scheme for solving the parabolized navier-stokes equations. *AIAA Paper*, 99-3360 (1999).
- [153] WILSON, G., AND McCORMACK, R. Modeling supersonic combustion using a fully implicit numerical method. *AIAA Journal* 30, 4 (1992), 1008–1015.
- [154] XU, J., AND POPE, S. B. Pdf calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction. *Comb. Flame* 123 (2000), 281–307.
- [155] YETTER, R., DRYER, F., AND RABITZ, H. A comprehensive reaction mechanism for applications in combustion systems. *Combust. Sci. and Tech.* 79 (1991), 97–128.
- [156] YIP, B., LYONS, K., LONG, M., MUNGAL, M., BARLOW, R., AND DIBBLE, R. Visualization of a supersonic underexpanded jet by planar rayleigh scattering. *Phys. Fluids A* 1, 9 (1989), 1449.
- [157] YOON, Y., DONBAR, J. M., AND DRISCOLL, J. F. Blowout stability limits of a hydrogen jet flame in a supersonic, heated, coflowing air stream. *Combust. Sci. and Tech.* 97, 1/3 (1994), 137–156.

- [158] YOSHIZAWA, A. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. of Fluids* 29, 7 (1986), 2152–2164.
- [159] ZAPRYAGAEV, V., KORNILOV, V. I., AND LOKOTKO, A. V. Experimental investigation of shock wave structure and streamwise vortices in supersonic jet. In *4th Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles* (2001), pp. 603–610.
- [160] ZAPRYAGAEV, V., AND SOLOTCHIN, A. Spatial structure of flow in the initial section of a supersonic underexpanded jet. Preprint no. 23-88, udk 533.6.011, Academy of Sciences USSR, Siberian section, Institute of Theoretical and Applied Mechanics, 1988.
- [161] ZAPRYAGAEV, V. I., KISELEV, N. P., AND PAVLOV, A. A. Effect of streamline curvature on intensity of streamwise vortices in the mixing layer of supersonic jets. *J. of Applied Mechanics and Technical Physics(Russia)* 45, 3 (2004), 335–343.
- [162] ZHANG, Y.-T., AND SHU, C.-W. High-order weno schemes for hamilton-jacobi equations on triangular meshes. *SIAM J. Sci. Comput.* 24, 3 (2003), 1005–1030.
- [163] ZHANG, Z. C., AND YU, S. T. Shock capturing without riemann solver- a modified space-time CE/SE method for conservation laws. *AIAA paper*, 99-0904 (1999).
- [164] ZHENG, L. L., AND BRAY, K. N. C. The application of new combustion and turbulence models to H₂ - air non-premixed supersonic combustion. *Comb. and Flame* 99 (1994), 440–448.

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Doctorat d'université, spécialité dynamique des fluides

16 juin 2006

Antoine Dauplain

Résumé

Les lanceurs spatiaux ont aujourd'hui besoin de moteurs-fusées cryotechniques capables de s'allumer plusieurs fois au cours du même vol. L'allumage étant un mécanisme extrêmement délicat dans les conditions en vol, il est nécessaire de développer et d'utiliser des outils précis et fiables pour aider au développement de cette technologie. Cette thèse développe la simulation des grandes échelles (SGE) pour traiter les écoulements transitoires supersoniques réactifs. Différents aspects sont abordés : cinétique chimique de l'auto-allumage et diffusion différentielle, traitement numérique des écoulements supersoniques, combustion. Des comparaisons avec des données expérimentales sur des configurations académiques permettent de valider les développements réalisés et de comprendre en détail le mécanisme d'auto-allumage. Sur la base de ces résultats, des simulations SGE de configurations industrielles sont maintenant envisageables, afin d'étudier les différents régimes transitoires d'allumage.

Mots clefs : **Simulation des grandes échelles, combustion, auto-allumage, supersonique**

Abstract

Today, space launchers require cryotechnic rocket engines able to reignite during flight. The ignition phases in flight conditions are particularly critical and the development of restartable engines needs accurate and reliable tools. The present thesis develops a Large Eddy Simulation approach (LES) for the study of unsteady supersonic reactive flows. Several aspects are treated : chemical kinetics, auto-ignition and differential diffusion, numerical methods suited to supersonic flows and their discontinuities, combustion. Comparisons with experimental data on academic test cases validate the models, and give detailed insights into the auto-ignition process. Based on these achievements, LES of industrial configurations may be now envisaged, allowing the study of unsteady ignition regimes and the optimization of devices.

Key words : **Large eddy simulation, combustion, auto-ignition, supersonic**

CERFACS

42, Avenue Gaspard Coriolis. 31057 Toulouse Cedex 01. France.