

Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques

Guilhem Lacaze

▶ **To cite this version:**

Guilhem Lacaze. Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques. Modélisation et simulation. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2009. Français. NNT : . tel-00429666

HAL Id: tel-00429666

https://theses.hal.science/tel-00429666

Submitted on 3 Nov 2009

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

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



Ref. CERFACS : *TH-CFD-09-27*

THESE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *Institut National Polytechnique de Toulouse*
Discipline ou spécialité : *Dynamique des fluides*

Présentée et soutenue par *Guilhem LACAZE*
Le *20 mai 2009*

Titre : *Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques*

JURY

E.MASTORAKOS	*Prof. à l'Université de Cambridge*	*Rapporteur*
J. RÉVEILLON	*Prof. à l'Université de Rouen*	*Rapporteur*
M. OSCHWALD	*Chargé de recherche au DLR, Hardthause*	*Examinateur*
S. DUCRUIX	*Chargé de recherche à l'EM2C, Paris*	*Examinateur*
D. SAUCEREAU	*Ingénieur à la SNECMA, Vernon*	*Examinateur*
M. THERON	*Ingénieur au CNES, Evry*	*Membre invité*
T. POINSOT	*Directeur de recherche à l'IMFT, Toulouse*	*Directeur de thèse*

Ecole doctorale : *Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés*
Unité de recherche : *CERFACS*
Directeur de Thèse : *Thierry POINSOT*
Co-Directeur de Thèse : *Bénédicte CUENOT*

.

s'il n'y a pas de solution, c'est qu'il n'y a pas de problème

Jacques Rouxel

Table des matières

Table des matières **3**

Remerciements **9**

Liste des symboles **11**

1 Introduction générale **17**

1.1 Contexte historique 17

1.2 Le contexte spatial mondial et l'Europe 19

1.3 VINCI : les enjeux d'un moteur rallumable 20

1.4 Objectifs de l'étude et choix méthodologiques 22

1.5 Organisation du manuscrit 27

I Équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques réactifs **29**

2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs **35**

2.1 Équations et variables conservatives 35

2.2 Variables thermodynamiques 37

2.3 Équation d'état des gaz parfaits 37

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces 38

2.5 Diffusion de la chaleur 39

2.6 Coefficients de transport diffusif 39

2.7 Cinétique chimique 40

3 Équations de conservation pour la phase dispersée 43

3.1 Introduction 43

3.2 Equations de conservation eulériennes 45

3.3 Modèles de fermeture 52

4 Équations pour la LES diphasique réactive 59

4.1 Équations LES pour la phase gazeuse 59

4.2 Modèles de sous-maille 63

4.3 Équations LES pour la phase dispersée 65

4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée 68

4.5 Modèle de combustion turbulente 68

5 Approche numérique 77

5.1 Discrétisation *Cell-Vertex* 77

5.2 Schémas numériques 79

5.3 Modèles de viscosité artificielle 80

5.4 Traitement des chocs 82

5.5 Conditions aux limites 88

6 Cinétique chimique hydrogène-oxygène 91

6.1 Les trois cinétiques testées 92

6.2 Températures de fin de combustion 94

6.3 Vitesse de flamme laminaire 95

6.4 Dépendance en pression 96

6.5 Délais d'auto-allumage 99

6.6 Structure de flamme prémélangée 100

6.7 Structure de la flamme de diffusion 103

6.8 Epaississement dynamique et cinétique chimique 106

II Allumage par dépôt d'énergie 111

7 Phénoménologie et théorie 113

7.1 Introduction 113

7.2 Systèmes d'allumage 114

7.3 Phénoménologie de l'allumage par dépôt d'énergie 116

7.4 Paramètres influençant l'allumage 122

7.5 Conclusion 128

8 Modélisation de l'allumage 131

8.1 Introduction 131

8.2 Model de dépôt d'énergie 132

8.3 Validation 134

8.4 Couplage avec le modèle de combustion de flamme épaissie 144

8.5 Conclusions 150

III Allumage d'un jet turbulent non prémélangé 151

Introduction 153

LES of spark ignitions in a turbulent non-premixed jet 153

Compléments 197

Evaluation des modèles LES 197

Modèle TFLES et flamme triple 202

Conclusions 205

IV Séquence d'allumage d'un moteur fusée expérimental **207**

Introduction **209**

LES of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration **210**

Compléments **247**

Déroulement de l'étude 247

Condition d'injection de l'oxygène 249

Influence du raffinement aux murs 255

Conclusions 256

V Allumage moteur VINCI **259**

9 Introduction **261**

10 Procédure d'allumage du moteur VINCI **263**

11 Temps caractéristiques de la combustion dans les moteurs fusées **267**

12 Atomisation d'un jet liquide par un jet gazeux coaxial **269**

12.1 Mécanismes d'atomisation 269

12.2 Atomisation primaire 270

12.3 Atomisation secondaire 273

12.4 Autres paramètres importants pour la modélisation 274

12.5 Dard liquide 274

12.6 Angle du spray 274

12.7 Conclusion 275

13 Modèle de l'injection coaxiale **277**

13.1 Détermination des caractéristiques d'écoulement dans un injecteur VINCI 278

13.2 Injection d'hydrogène 278
13.3 Injection de l'oxygène liquide 278
13.4 Paramètres du modèle d'injection d'oxygène liquide 278

14 Cas tests 2D **279**

14.1 Domaine et maillage 281
14.2 Paramètres numériques 281
14.3 Résultats non réactifs 282
14.4 Résultats réactifs 284
14.5 Conclusion 286

15 Allumage 3D en configuration simplifiée **287**

15.1 Géométrie et maillage 287
15.2 Paramètres numériques 288
15.3 Conditions initiales, séquence d'injection et conditions aux limites 288
15.4 Analyse de la séquence d'allumage 290
15.5 Analyse globale 290
15.6 Description générale de la séquence d'allumage 291
15.7 Position de la zone de réaction 294
15.8 Régimes de combustion et interaction flamme/jet liquide 298
15.9 Mécanismes de propagation 303
15.10 Stabilisation 310
15.11 Coût d'un calcul plus complexe 311

16 Conclusions et perspectives **313**

Conclusion générale **317**

Bibliographie **319**

Annexes **337**

A Termes du modèles de dépôt d'énergie **337**

A.1 Intégrale du dépôt de densité de puissance dans un cas 3D 337

A.2 Définition de σ_s et σ_t 337

B Procédure 0D pour le calcul de l'allumage du banc M3 **339**

B.1 Calcul de la variation de la masse et de l'énergie 340

C Validation des paramètres diphasiques du Lox **343**

D Traitement du jet sous-détendu de l'allumeur de VINCI **345**

Résumé **347**

Remerciements

Ce manuscrit ne reflète que la partie tangible de mes travaux de recherche. D'un point de vue personnel, la grande richesse de cette thèse provient surtout des rencontres et des amitiés qui se sont liées pendant les trois années passées au Cerfacs. Je tiens donc à remercier toutes les personnes avec qui j'ai eu le grand plaisir de travailler et de profiter de la vie toulousaine.

Je remercie Bénédicte Cuenot et Thierry Poinsot pour leur disponibilité, leur dynamisme et pour les discussions passionnantes et passionnées sur la combustion.

Je remercie Didier Saucereau pour son intérêt pour mes travaux et sa constante implication dans les activités de coopération entre la Snecma et le Cerfacs.

Je souhaite remercier Michael Oschwald de m'avoir accueilli au centre du DLR de Lampoldshausen et de toujours avoir pris le temps de discuter et de répondre à mes questions concernant la propulsion spatiale. je lui suis très reconnaissant d'avoir accepté de travailler avec moi sur le projet de l'ouvrage intitulé *Alternative Ignition systems*.

Ma gratitude va aussi à Epaminondas Mastorakos ainsi qu'à Edward Richardson avec qui j'ai eu beaucoup de plaisir à parler d'allumage.

Je remercie chaleureusement toutes les personnes du Cerfacs qui permettent que nos thèses se déroulent dans les meilleurs conditions : Jean-Claude André directeur du Cerfacs, les "fées" de l'administration et les "magiciens" de l'ordre CSG qui veillent à la sérénité et à la stabilité de la Sphère Informatique.

J'exprime mon amitié à tous les thésards et stagiaires du Cerfacs d'abord parce que la qualité de la recherche du Cerfacs repose sur les interactions fortes entre tous ces individus et ensuite parce qu'un certain nombre d'entre eux sont devenus des amis. Mes amitiés à Thomas Schmitt, Anthony Roux, Florent Duchaine, Matthieu Leyko, Nicolas Lamarque, Jean-Mathieu Sénoner, Olivier Cabrit et Claude Sansiau pour les grands moments de philosophie, de poésie et autre rouboulesqueries. Je salue la sagesse des anciens : Matthieu Boileau, Eléonore Riber, Olivier Vermomo et Simon Mendez. Sans les anciens on ne serait rien ! Je salue aussi la fraîcheur cosmopolite des p'tits jeunes : Marlène Sanjose, Kerstine Wieczorek, Benedetta Giulia Franzelli, Felix Jaegle et notre cher Baby-soupape Benoît Enaux.

Enfin je remercie la Famille, les petits Frères, Martial et Christiane et Cécile, pour leur soutien et leurs encouragements.

Liste des symboles

Lettres romaines

$\alpha_{k,j}$	efficacité de troisième corps de l'espèce k dans la réaction j
$\dot{m}$	débit massique
$\dot{Q}$	terme source du modèle d'allumage ED par dépôt d'énergie
$\mathbb{C}$	variation par les collisions particulaires
$\mathbb{T}$	transport par la vitesse décorrélée
$\mathcal{M}_{kj}$	réactif ou produit k de la réaction j
$\mathcal{Q}_j$	taux d'avancement
$\mathcal{R}$	constante universelle des gaz parfaits
$\overline{S}_T$	vitesse de flamme turbulente
A	constante pré-exponentielle
A_l	surface de la flamme laminaire
A_t	surface de la flamme turbulente
a_T , a	taux d'étirement
c	vitesse du son
C_k	Concentration molaire de l'espèce k
$C_{p,l}$	capacité calorifique liquide
C_p	capacité calorifique à pression constante
C_S	constante du modèle de Smagorinsky
C_v	capacité calorifique à volume constant
C_w	constante du modèle WALE
Cd	coefficient de décharge
d	diamètre de goutte
d_{10}	diamètre arithmétique moyen des gouttes
D_{ij}	coefficient de diffusion binaire
D_k	diffusivité moléculaire dans le mélange
D_{th}	diffusivité thermique
E	fonction d'efficacité (section 4.5)
E	énergie totale massique (non chimique)
E_i	énergie interne
E_a	énergie d'activation
e_s	énergie sensible
E_{tot}	énergie totale de l'allumeur
F	facteur d'épaississement
f_p	fonction densité de présence de particules
g_{ij}	gradient de vitesse résolu
$h_{s,corr}$	terme de correction d'enthalpie
$h_{s,l}$	enthalpie sensible liquide
h_s	enthalpie sensible du mélange
I_o	facteur d'étirement
k	énergie cinétique turbulente gazeuse
K_{eq}	constante d'équilibre
$K_{f,j}$	constante de la réaction directe
$K_{r,j}$	constante de la réaction inverse
L	longueur du dard d'un jet liquide
L_v	enthalpie latente d'évaporation
l_t	échelle intégrale de la turbulence
M	nombre de réactions

N	nombre d'espèces
n_l	densité volumique de particules
P	pression
P_c, P_{cc}	pression chambre
P_i	pression totale ou pression génératrice
P_{cc}	pression de Clausius-Clapeyron
P_k	pression partielle de l'espèce k
q_p	énergie cinétique turbulente des particules
r	constante du gaz
S	senseur du modèle d'épaississement dynamique (section 4.5)
s	entropie sensible (chapitre 2)
s	rapport stœchiométrique
S_c	vitesse de consommation
$S_{i,j}$	tenseur des vitesses de déformation
S_L, S_L^0	vitesse de flamme laminaire
T	température
t	temps
T_i	température totale ou température génératrice
T_{wb}	température d'équilibre (humide)
T_{cc}	température de Clausius-Clapeyron
T_{eb}	température d'ébullition
T_{ref}	température de référence pour l'enthalpie liquide
u	1ère composante de vitesse
v	2ème composante de vitesse
V_{cell}	volume de la cellule
W	masse molaire
w	3ème composante de vitesse
X	fraction molaire
Y	fraction massique
z	fraction de mélange
z_{st}	fraction de mélange stœchiométrique
$\mathbf{c}_p$	vitesse dans l'espace des phases
$\mathbf{F}$	tenseur des flux
$\mathbf{f}$	1ère composante du tenseur des flux
$\mathbf{F}_d$	terme de traînée eulérien
$\mathbf{F}_p$	force de traînée particulaire
$\mathbf{g}$	2ème composante du tenseur des flux
$\mathbf{h}$	3ème composante du tenseur des flux
$\mathbf{J}_k$	flux diffusif de l'espèce k
$\mathbf{q}$	flux de chaleur
$\mathbf{s}$	vecteur des termes sources gazeux
$\mathbf{s}_c$	vecteur du terme source chimique
$\mathbf{s}_{g\text{-}l}$	vecteur du terme source du gaz vers le liquide
$\mathbf{s}_{l\text{-}g}$	vecteur du terme source du liquide vers le gaz
$\mathbf{u}$	vecteur vitesse
$\mathbf{u}_s$	vecteur vitesse relative gaz-particule
$\mathbf{V}^c$	vitesse de diffusion corrective
$\mathbf{V}^k$	vitesse de diffusion de l'espèce k
$\mathbf{w}$	vecteur des variables conservatives
$\mathbf{x}$	position dans l'espace des phases
$\dot{m}_p$	taux d'évaporation particulaire

Lettres grecques

α	constante de la fonction d'efficacité
α_l	fraction volumique de liquide
β	constante de la fonction d'efficacité
χ	taux de dissipation scalaire

Δ_e taille du filtre utilisé dans le modèle TFLES

δ_i épaisseur de la couche limite gazeuse

Δ_s diamètre du noyau de dépôt d'énergie (modèle ED)

δ_s distance moyenne inter-gouttes

Δ_t durée du dépôt d'énergie (modèle ED)

$\delta_{i,j}$ symbole de Kronecker

δ_L, δ_L^0 épaisseur thermique de la flamme

δ_L^1 épaisseur de la flamme épaissie

$\dot{\Omega}_F$ taux de réaction intégral du carburant

$\dot{\omega}_{kj}$ taux de réaction de l'espèce k dans la réaction j

$\dot{\omega}_k$ taux de réaction de l'espèce k

$\dot{\omega}_T$ taux de dégagement de chaleur

η_K échelle de Kolmogorov

Γ taux d'évaporation eulérien

Γ étirement de sous-maille (section 4.5)

γ rapport des capacités calorifiques

Γ_u variation de quantité de mouvement mésoscopique par évaporation

κ charge massique de liquide

κ viscosité de volume

Λ flux thermique eulérien par évaporation

λ conductivité thermique

λ_l longueur d'onde de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

λ_{rt} longueur d'onde de l'instabilité de Rayleigh-Taylor

μ viscosité dynamique

μ_p masse dans l'espace des phases

ν viscosité cinématique

ν''_{kj} coefficient stœchiométrique des produits

ν'_{kj} coefficient stœchiométrique des réactifs

ν_{kj} coefficient stœchiométrique global

ν_t viscosité turbulente de sous-maille

Ω fonction de présence du modèle TFLES (section 4.5)

Ω paramètre de mélange diphasique

Φ flux thermique eulérien par conduction

ϕ richesse

ϕ_i flux thermique particulaire dans la phase i

ρ masse volumique

Σ densité de surface de flamme

σ tenseur des contraintes

σ tension de surface liquide/gaz

τ_c, τ_{chem} temps caractéristique chimique

τ_p temps de relaxation particulaire

τ_ε échelle de temps des grandes structures

τ_{ev}, τ_v temps d'évaporation

τ_e temps global d'évaporation

$\tau_{i,j}$ tenseur des contraintes

τ_{mel} temps caractéristique de mélange

Θ variable d'avancement

θ angle d'injection des gouttes

$\triangle$ taille du maillage et du filtre LES

ε taux de dissipation

ε_i énergie totale déposée par le modèle d'allumage ED

Ξ facteur de plissement

ζ_p température dans l'espace des phases

Nombres sans dimension

B_M nombre de Spalding

Da	nombre de Damköhler
J	rapport des flux de quantité de mouvement
Le	nombre de Lewis
M	nombre de Mach
Nu	nombre de Nusselt
Pr	nombre de Prandtl
Pr_t	nombre de Prandtl turbulent
Re	nombre de Reynolds
Re_d	nombre de Reynolds moyen des gouttes
Re_l	nombre de Reynolds liquide
Re_p	nombre de Reynolds particulaire
Re_t	nombre de Reynolds turbulent
Sc_k	nombre de Schmidt de l'espèce k
Sc_k^t	nombre de Schmidt turbulent
Sh	nombre de Sherwood
St	nombre de Stokes
We	nombre de Weber

Opérateurs de moyenne / filtrage

$\langle\cdot\rangle_\Omega$	moyenne spatiale sur le volume Ω
$\langle\cdot\rangle_l$	moyenne d'ensemble massique sur les réalisations particulaires (moyenne mésoscopique)
$\{\cdot\}_l$	moyenne d'ensemble sur les réalisations particulaires
$\breve{f}$	idem $\langle\cdot\rangle_l$
$\overline{f}$	filtrage LES au sens de Reynolds
$\widehat{f}$	filtrage LES au sens de Favre pour la phase dispersée
$\widetilde{f}$	filtrage LES au sens de Favre pour le gaz

Indices

0	état initial
1	valeur dans les gaz frais
2	valeur dans les gaz brûlés
∞	à une distance infinie de la goutte
ζ	à la surface de la goutte
F	relatif au carburant
i	composante dans la direction i
j	relatif à la réaction j
k	relatif à l'espèce k
l	relatif à la phase liquide (grandeur eulérienne mésoscopique)
O	relatif à l'oxydant
p	relatif à la particule (grandeur lagrangienne)
ev	relatif à l'évaporation
rms	écart-type des fluctuations *(root mean square)*

Exposants

$'$	relatif à la fluctuation
$''$	relatif au mouvement décorrélé
0	état de référence
c	relatif à la conduction thermique
I	partie non diffusive
M	relatif au mouvement mésoscopique
m	valeur molaire
sat	état saturé
t	contribution de sous-maille
U	relatif au mouvement décorrélé
V	partie diffusive
ev	relatif à l'évaporation
~	valeur tabulée

Abréviations

DNS Direct Numerical Simulation

DTF Dynamically Thickened Flame

ED Energy Deposition modèle

FDP Fonction Densité de Présence

LES Large Eddy Simulation

LW Lax-Wendroff

NSCBC Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition

PDF Probability Density Function

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

SGE Simulation aux Grandes Echelles (synonyme de LES)

SGS Sub-Grid Scale

TF Thickened Flame

TFLES TF model for LES

THI Turbulence Homogène Isotrope

TP-TFLES TFLES model for Two-Phase flames

TTGC Two-step Taylor-Galerkin version C

Chapitre 1

Introduction générale

Ce travail de recherche est consacré à la simulation numérique de la phase d'allumage du moteur fusée cryotechnique VINCI alimenté en oxygène et hydrogène liquides. Avant de présenter l'étude scientifique, il est intéressant de comprendre le contexte et les enjeux de l'activité spatiale actuelle qui déterminent les axes de recherches et les besoins techniques pour le futur.
Cette introduction présente d'abord un historique bref de l'ingénierie spatiale, mettant en relief les motivations de l'industrie de la propulsion, ses acquis, ses méthodes ainsi que les politiques de recherche d'aujourd'hui.
Vient ensuite une description du contexte géopolitique de l'industrie spatiale qui montre que la concurrence est de plus en plus forte sur le marché des lanceurs et que l'Europe doit innover et concevoir de nouveaux moteurs pour rester compétitive.
Pour des raisons de coût et d'efficacité, ces évolutions technologiques doivent être menées en faisant interagir trois champs de recherche : l'expérimental, le théorique et le numérique. C'est dans ce contexte que cette étude a été financée.
Enfin, la dernière partie de cette introduction se recentre sur les problématiques scientifiques en présentant les questions qu'il faut explorer, les objectifs de ce travail de recherche ainsi que la méthodologie choisie pour y répondre.

1.1 Contexte historique

L'origine des premières fusées est mal connue mais c'est probablement en Chine que la "flèche de feu" fut inventée vers 200 av. J.C. [48, 210]. Des tubes en bambou remplis de poudre noire servaient de divertissement lors des fêtes mais aussi d'arme de guerre contre les envahisseurs japonais. Plus tard, les marchands arabes et mongols ont apporté ces fusées en Europe.

Ce n'est qu'au début du XXème siècle que de réelles avancées sont réalisées en matière de propulsion spatiale. Les théories sur les vols spatiaux sont développées de façon indépendante par trois scientifiques

Russe, Américain et Allemand. Le premier est *Konstantin Tsiolkovski* (1857-1935) : ce professeur de mathématiques russe publie en 1903 un article décrivant en détail les rapports entre la vitesse d'une fusée, sa masse et la nature du carburant à employer, pour l'arracher de l'attraction terrestre. Un peu plus tard il décrit les concepts théoriques des fusées à ergols liquides, les satellites artificiels et les fusées à étages sans toutefois avoir recours aux expériences.
Aux Etats-Unis, *Robert Goddard* (1882-1945), professeur de physique dépose plusieurs brevets en 1914 sur des prototypes de fusées à carburants liquides, des chambres de combustion et des tuyères. Il lance le 16 mars 1926 la première fusée (5 kg) alimentée en carburants liquides (oxygène liquide et kérosène) [210]. En 1919, il publie l'article "*A method of reaching extreme altitudes*", dans lequel il développe très précisément la théorie de la propulsion spatiale ainsi que les principaux résultats des ses expériences.
Le troisième scientifique et peut être le plus influent est *Hermann Oberth* (1894-1989). Cet Allemand d'adoption qui voit sa thèse de doctorat portant sur les fusées rejetée par l'Université de Heidelberg, décide de la publier comme ouvrage. Ce livre devient rapidement très populaire et contribue à la formation de plusieurs associations de modélisme sur les fusées comme la *Verein für Raumschifffahrt* dont fut membre *Wernher von Braun*. En 1929, *Hermann Oberth* met au point un modèle réduit de fusée pour le film "Une femme sur la Lune" (*Frau im Mond*). Le succès du film conduit la compagnie cinématographique UFA à financer les expériences d'*Hermann Oberth* sur les fusées à propulsion liquide permettant des avancées technologiques conséquentes.

A la fin de la Première Guerre Mondiale, le Traité de Versailles interdit l'Allemagne d'utiliser des canons longue portée. Les dirigeants militaires prennent conscience du potentiel qu'offrent les fusées pour contourner cette interdiction. N'ayant aucune connaissance dans le domaine, l'armée contacte en 1932 *Wernher von Braun* (alors assistant d'*Hermann Oberth*) pour développer un missile longue portée. L'équipe menée par *von Braun* finit par mettre au point le tristement célèbre V2 (*Vergeltungswaffe 2*). A la fin de la Seconde Guerre Mondiale, Les Russes et les Américains se ruent sur le centre de recherche allemand pour capturer les scientifiques et prendre possession des fusées et des différents moyens d'essais. *Von Braun* et la majeure partie de son équipe immigrent de force aux Etats Unis où tout le matériel nécessaire leur est fourni pour poursuivre leurs recherches. Le centre de recherche allemand est démonté et remonté en Russie permettant à l'équipe supervisée par *Sergei Korolev* et *Valentin Gushko* d'envoyer en 1957 le premier satellite (*Sputnik*) en orbite. La course à l'espace est lancée. En 1961, *Yuri Gagarin* est le premier homme dans l'espace mais l'URSS perd la course à la Lune (sans doute à cause de la mort de *Sergei Korolev* en 1966) et l'équipe de la NASA conduite par *Wernher von Braun* met au point la fusée Saturn V qui permet à *Neil Armstrong* de marcher sur la Lune en 1969 lors de la 11ème mission *Apollo*.

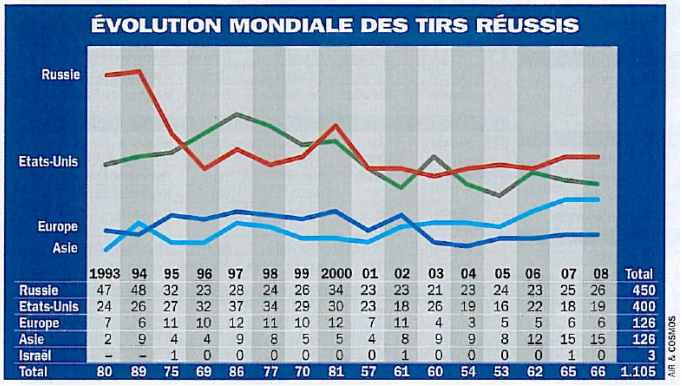
Deux décennies plus tard, la fin de la Guerre Froide et la chute du Bloc Soviétique, mettent un terme définitif à l'escalade des exploits spatiaux (la *Navette* spatiale américaine en 1981 et *Mir* en 1986). Les lancements se poursuivent mais à un rythme différent, non plus animé par l'élan héroïque des années 1970 mais principalement par l'émergence de la télécommunication par satellite. Aujourd'hui (2009) près de 3200 satellites gravitent autour de la Terre. Moins de 500 sont opérationnels : ils remplissent des tâches variées de télétransmission, d'observation météorologique, de positionnement, d'écoute et d'observation militaire. Une fraction plus faible de ces objets spatiaux est destinée à des observations et

expériences scientifiques comme la station orbitale internationale *ISS* ou le télescope *Hubble*.

1.2 Le contexte spatial mondial et l'Europe

1.2.1 Contexte spatial mondial

En 2008 un total de 69 lancements spatiaux (contre 66 en 2006) ont été effectués à travers le monde [102]. En termes de nombre de lancements, la Russie reste la première puissance spatiale avec 26 lancements réussis (Fig. 1.1). Au second rang se trouvent les Etats-Unis avec 19 lancements puis vient la Chine avec 11 tirs. L'Europe n'est qu'en quatrième position avec 6 lancements d'Arianespace. La fin du peloton est constitué de l'Inde, du Japon et d'Israël. Ce bilan révèle une tendance majeure : depuis 2003 l'Asie (Chine, Inde, Japon) comptabilise plus de lancements que l'Europe et l'écart se creuse en 2008 (15 tirs pour l'Asie contre 6 pour l'Europe).



	1993	94	95	96	97	98	99	2000	01	02	03	04	05	06	07	08	Total
Russie	47	48	32	23	28	24	26	34	23	23	21	23	24	23	25	26	450
Etats-Unis	24	26	27	32	37	34	29	30	23	18	26	19	16	22	18	19	400
Europe	7	6	11	10	12	11	10	12	7	11	4	3	5	5	6	6	126
Asie	2	9	4	4	9	8	5	5	4	8	9	9	8	12	15	15	126
Israël	–	–	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	3
Total	80	89	75	69	86	77	70	81	57	61	60	54	53	62	65	66	1.105

Air & COSMOS

FIG. 1.1 - *Bilan des lancements effectués par les différentes puissances spatiales [102].*

La Chine en particulier possède une politique spatiale très ambitieuse. Elle réussit son premier vol habité en 2003 (Yang Liwei), se lance dans l'exploration planétaire en 2007 avec l'envoi de la sonde lunaire Chang'e1, réalise sa première sortie extra-véhiculaire le 28 septembre 2008 et prévoit d'assembler sa propre station orbitale type Mir vers 2020 [105]. Les avancées concrètes réalisées par la Chine semblent indiquer qu'elle va devenir dans les prochaines décennies un acteur majeur de la scène spatiale internationale. L'Inde aidée comme la chine par une très forte croissance économique débute un programme de vol habité pour un premier lancement en 2014.

Par ailleurs, les Etats-Unis continuent d'occuper une place centrale dans le domaine spatial international avec de nombreux projets scientifiques d'observation de la Terre, du Cosmos et d'envois de sondes sur la Lune et sur Mars. Une part importante des lancements sera tout de même dédiée à la mise sur orbite de différents satellites militaires et commerciaux en 2009. Bien que l'arrêt de l'exploitation de la *Navette* soit programmé fin 2010, les Etats-Unis sont en train de développer de nouveaux lanceurs (Ares I et V)

et une capsule habitable (Orion) pour relancer vers 2020 la "conquête" de la Lune avec le programme *Constellation* dont le but est d'installer une base lunaire permanente [27]. En parallèle, la station orbitale ISS est mise à contribution pour étudier l'effet de l'apesanteur sur le corps humain en préparation de missions habitées vers Mars.

La Russie, bien qu'étant la première puissance en nombre de tirs ne possède pas de politique spatiale aussi "ambitieuse" que la Chine et les Etats-Unis. Son nombre de lancements diminue depuis le début des années 1990 et son calendrier de tirs pour les prochaines années est principalement constitué de lancements de satellites civils et militaires [101].

1.2.2 Position de l'Union européenne

Les deux dernières années (2007-2008) sont synonymes de succès pour l'Europe spatiale d'abord parce que plus de la moitié des lancements de satellites commerciaux ont été réalisés par Ariane-V [101]. A cela s'ajoute le lancement du laboratoire européen *Columbs* (par la *Navette* américaine) qui a été rattaché à la station orbitale (*ISS*) ainsi que le succès du lancement le plus complexe jamais réalisé avec une fusée Ariane-V : celui de l'*ATV* (*Automated Transfer Vehicle* en anglais). L'*ATV* est un module automatique de plus de 19 tonnes, permettant notamment de ravitailler la station orbitale. Ce lancement est particulier, d'abord parce que c'est la première fois que la station *ISS* est desservie par le lanceur européen, et ensuite parce que l'étage supérieur est propulsé par un moteur rallumable : le moteur *Aestus*. Ce moteur fournit une poussée d'environ 3 tonnes grâce à la combustion du couple hypergolique N_2O_4/MMH (hypergolique signifie que la combustion se déclenche dès que les deux molécules sont en contact).
Pour le futur, Arianespace compte pérenniser le programme de lancements en direction de la station orbitale internationale et étendre ses capacités de lancement en termes de masse embarquée (il a été constaté que la masse des charges utiles augmentait de 125 kg par an en moyenne [103]) et de nombre de satellites par tir [103] pour notamment mettre en place la constellation de satellites de géopositionnement *Galileo*. Les améliorations du lanceur européen sont donc nécessaires. Il y a besoin en particulier de mettre au point un nouveau moteur pour l'étage supérieur : le moteur *VINCI*.

1.3 VINCI : les enjeux d'un moteur rallumable

Le programme *VINCI*, piloté par la SNECMA, a débuté en 1999 pour une mise en service vers 2015 [103]. Le but est de concevoir un nouveau moteur d'une poussée de 18 tonnes, possédant la capacité de se rallumer. L'intérêt du rallumage est d'abord de pouvoir embarquer plusieurs charges utiles mais aussi de placer les satellites sur des orbites plus proches de leurs orbites finales permettant ainsi de supprimer les systèmes de propulsion chimique des satellites et de les remplacer par des dispositifs électriques moins lourds et moins volumineux [103].
La maîtrise des phases d'allumage et de rallumage reste une tâche délicate qui peut causer la perte du lanceur complet ou de la charge utile. Un retard d'allumage peut conduire à l'accumulation de combustibles dans la chambre et donc à une violente surpression une fois la combustion initiée. Cette forte élévation

de pression peut détruire la chambre ou générer des instabilités de combustion dégradant fortement les performances du moteur (Fig. 1.2). A l'inverse une avance à l'allumage peut par exemple perturber la



FIG. 1.2 - *Chambre détruite suite à une instabilité de combustion (avec la permission de la NASA).*

séquence globale d'une mise à poste d'un satellite et entraîner sa perte. Le 18ème vol d'Ariane s'est soldé par un échec suite à un problème d'allumage du moteur de l'étage supérieur HM7 [67]. Plus récemment (le 15 mars 2008) l'étage supérieur d'une fusée Proton n'est pas parvenu à placer son satellite sur l'orbite désirée après une anomalie dans la séquence de rallumage [104].

Pour palier le manque de connaissances dans le domaine de l'allumage et plus globalement de la combustion dans les moteurs cryotechniques (utilisant des ergols liquides stockés à très basses températures), le CNES, l'ONERA, la SNECMA et le CNRS ont formé en 1993 un groupe de recherche "combustion dans les moteurs fusées" dont les résultats finaux ont été publiés en 2001 [39]. Ce groupement de recherche visait à développer les trois axes théorique, expérimental et numérique. Les résultats de ces travaux ont permis de nombreuses avancées dans la compréhension de l'atomisation, de la combustion, des transferts thermiques et des phénomènes haute pression [39]. Actuellement, le programme *VINCI* en est à la moitié de son développement. Les essais de la phase de démonstration de rallumage se sont terminés en 2008 [103]. Les travaux présentés dans cette thèse sont dans la continuité de ces recherches. Les différents objectifs fixés pour ce projet sont présentés dans la section suivante.

1.4 Objectifs de l'étude et choix méthodologiques

1.4.1 Contexte expérience / numérique

En Allemagne, le site du DLR (Agence spatiale allemande) de Lampoldshausen possède dix bancs moteurs fusées permettant d'effectuer un panel très large de diagnostics sur des moteurs cryogéniques ou à ergols solides dans des conditions terrestres (pression atmosphérique) ou de haute altitude (faibles pressions). Dans le même centre, le banc M3 permet d'étudier les phénomènes d'injection, d'allumage et de combustion dans une micro chambre de combustion qui posséde de larges fenêtres en quartz permettant une analyse optique de la combustion (cf. Partie IV). Ce dispositif expérimental a fait l'objet de nombreuses publications [179, 181, 76, 49, 130, 129]. En France, le banc Mascotte de l'ONERA est dédié à l'étude de la combustion dans les moteurs cryotechniques à des pressions sub- et supercritiques et a aussi permis de multiples contributions scientifiques [199, 28, 89, 29, 194].
Les tests expérimentaux dans le domaine de la propulsion spatiale sont très onéreux et relativement complexes à instrumentaliser. Le développement d'outils numériques parallèlement aux expériences permet d'accroître les connaissances fondamentales et de converger plus rapidement vers des solutions techniques appropriées.

Les différentes approches numériques

En mécanique des fluides numérique, trois approches principales peuvent être identifiées : la méthode RANS (pour *Reynolds averaged Navier-Stokes* en anglais) dans laquelle l'impact de toutes les échelles de la turbulence est modélisé. Le résultat d'une simulation RANS correspond à une moyenne sur un nombre important de réalisations du champ fluide [36, 158]. Cette approche est communément utilisée dans l'industrie car elle permet des temps de restitution courts. En revanche, elle ne permet pas de simuler des phénomènes instationnaires ou transitoires.
La seconde méthodologie est la simulation aux grandes échelles (SGE) [158, 176] (ou LES, pour *large eddy simulation* en anglais). Le concept de cette approche est différente de la première dans le sens ou le filtrage des équations de Navier-Stokes est spatial et non temporel. Ce type de simulation résout explicitement les grosses structures de l'écoulement alors que l'effet des petits tourbillons est modélisé (Fig. 1.3). Cette approche couplée à des algorithmes performants de parallélisation est très prometteuse pour simuler des phénomènes instationnaires comme l'allumage ou les instabilités de combustion dans des géométries complexes. Son coût de calcul important fait qu'elle ne supplante pas l'approche RANS classique dans de nombreuses situations.
L'approche DNS (pour *Direct Numerical Simulation* en anglais) n'a besoins d'aucun modèle et toutes les échelles de la turbulence sont résolues. Cette approche permet d'atteindre des niveaux de précision supérieurs à toute expérience (les calculs DNS sont parfois appelés "expériences numériques") mais son domaine d'application se limite à des configurations simples pour des raisons de coût de calcul.

Dans de nombreuses applications industrielles, le comportement macroscopique du fluide est piloté par les grosses structures de l'écoulement. La formulation LES présente l'avantage de ne pas faire d'hy-

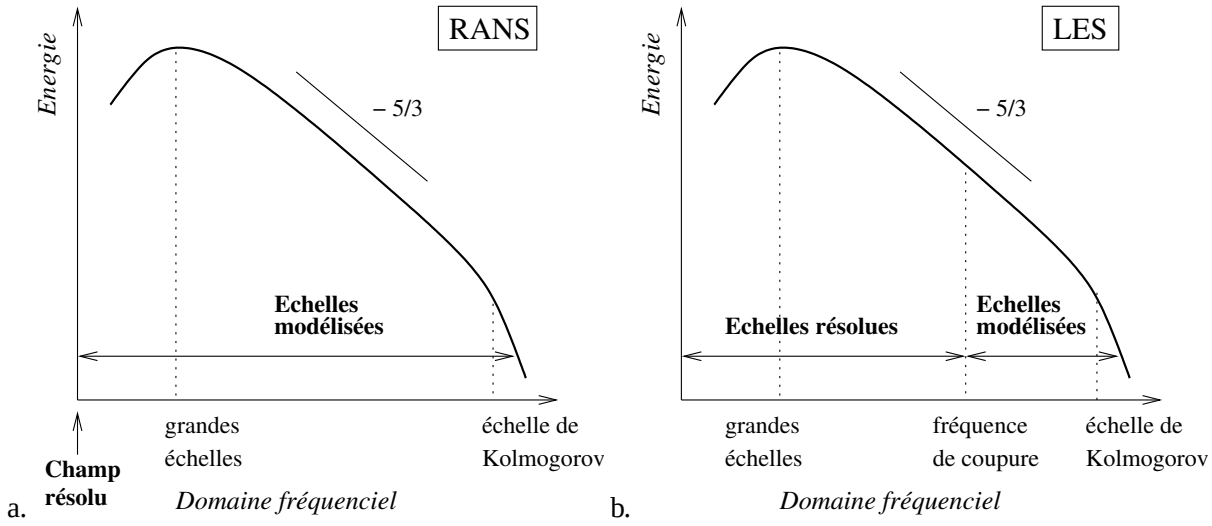


FIG. 1.3 - *Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et LES (b.) appliquées à une turbulence homogène isotrope*

pothèse sur ces échelles contrairement à la méthode RANS qui les modélise.
Des approches hybrides ont été développées comme l'approche DES (pour *Detached-Eddy Simulation* en anglais) qui permet de combiner les avantages des méthodes RANS et LES pour simuler des écoulements fortement décollés (à très haut nombre Reynolds) sur des configurations complexes comme des profils d'avion ou d'automobile [204]. Les zones de proche paroi sont simulées par l'approche RANS et les autres régions de l'écoulement, par méthode LES.

Les principaux travaux numériques pour la combustion dans les moteurs fusées

Pour des raisons de maturité des méthodes numériques, la plupart des travaux de simulation sur les moteurs fusées a été réalisée avec l'approche RANS. Une part importante de ces études a été consacrée à la modélisation de l'atomisation du jet d'oxygène liquide et de son évaporation [73, 15, 195], à la combustion diphasique [160, 161, 226, 8, 159, 86], à la modélisation des effets gaz réels et la combustion à hautes pressions [140, 86, 51, 236]. L'intérêt majeur de l'approche RANS est son coût de calcul raisonnable. Cependant, dans un contexte de prédiction de phénomènes instationnaires comme l'allumage ou les instabilités de combustion, la méthodologie RANS est mal adaptée.
La simulation par approche LES des écoulements réactifs dans les moteurs fusées n'est que très récente. Les complexités numériques et physiques de ces configurations expliquent qu'aujourd'hui peu de travaux ont été entrepris [143, 144, 127] et que de nombreuses améliorations sont encore à réaliser.

Les travaux présentés dans ce manuscrit sur l'allumage des moteurs fusées cryotechiques et en particulier sur le moteur VINCI ont été réalisés avec le code de calcul (AVBP) du CERFACS. Ce code parallèle est basé sur l'approche LES résolvant les équations de Navier-Stokes compressibles réactives.

1.4.2 Difficultés de modélisation

Un moteur fusée cryotechnique se compose d'une chambre de combustion avec à l'extrémité avale la tuyère de sortie, et à l'autre extrémité la plaque d'injection composée de nombreux injecteurs coaxiaux (plus d'une centaine pour le moteur VINCI) et d'un allumeur qui fournit la source de chaleur nécessaire pour déclencher la combustion (Fig. 1.4). Au niveau des injecteurs, l'oxygène liquide est atomisé par l'hydrogène gazeux très rapide. Dans le cas du VINCI, l'allumeur est une petite chambre de combustion à haute pression située en amont, qui produit un jet sous-détendu de gaz brûlés contenant un réseau de chocs.

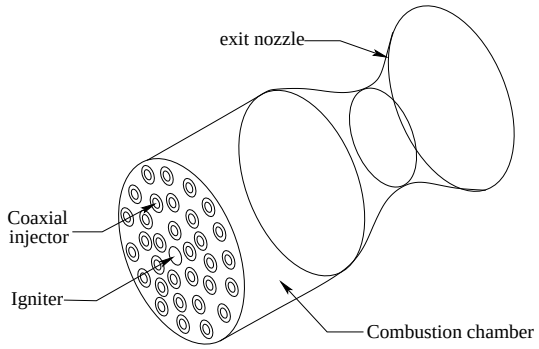


FIG. 1.4 - *Schéma d'un moteur fusée cryotechnique.*

Les difficultés en terme de modélisation peuvent être répertoriées de la façon suivante :
- Combustion turbulente dans différents régimes (prémélangé/partiellement prémélangé/diffusion) ;
- Cinétique chimique hydrogène/oxygène ;
- Effets diphasiques à basses pressions et effets supercritiques à hautes pressions ;
- Mélange et dynamique de jet turbulent ;
- Traitement des écoulements supersoniques ;
- Modélisation de l'allumeur.

Certains de ces aspects de modélisation ont déjà fait l'objet d'études au CERFACS.

1.4.3 Etat des connaissances du CERFACS

Depuis plusieurs années, le CERFACS, en collaboration avec l'IFP, développe le code de calcul AVBP qui a fait l'objet de plusieurs applications en combustion turbulente gazeuse sur des géométries complexes [69, 175, 186, 187, 188]. Le modèle de combustion (modèle de flamme épaissie) a été ultérieurement adapté pour la combustion turbulente partiellement prémélangée [183, 125, 114].
En 2004, les travaux de thèse de A. Kaufmann [90] ont permis d'implanter un module diphasique (appelé TPF) capable de traiter les écoulements à phase dispersée dans un contexte de simulation numérique directe. En 2008, la thèse de M. Boileau [17, 18] montre la capacité de l'outil AVBP TPF à traiter la combustion diphasique en configuration réaliste dans un cas d'allumage d'un foyer aéronautique.

En 2006, la thèse de A. Dauptain [48] consacrée à la combustion dans les moteurs fusées, a permis de mettre en place une méthode de traitement des chocs et des écoulements supersoniques.
Enfin en parallèle de la présente thèse, les travaux de T. Schmitt [184] sont consacrés à l'adaptation du code AVBP aux conditions supercritiques. L'introduction d'une thermo-chimie de gaz réels a permis de simuler plusieurs régimes de combustion du banc Mascotte (hydrogène gazeux et oxygène dense) à des pressions supérieures à 60 bar (la pression critique de l'oxygène est de l'ordre de 50 bar).

Les questions toujours ouvertes au début de cette thèse concernent donc :

1. La cinétique chimique hydrogène/oxygène ;
2. La modélisation de l'allumage ;
3. Le mélange et la dynamique de jet turbulent ;
4. Les effets diphasiques de l'oxygène pendant la phase d'allumage.

1.4.4 Objectifs de l'étude

L'objectif final de ces travaux est de simuler avec le code AVBP l'allumage du moteur cryotechnique VINCI. Pour cela, les quatre questions restées ouvertes de la section précédente sont étudiées, les adaptations numériques nécessaires sont réalisées et testées et une méthodologie de calcul optimale est établie.

1.4.5 Stratégie et méthodes

La méthode la plus efficace pour répondre aux questions précédentes est de simplifier les problèmes pour en isoler les différents aspects. La première étape de ce travail de thèse a donc consisté à choisir des cas tests expérimentaux bien documentés permettant d'évaluer chacun des quatre points que sont : (1) la cinétique hydrogène/oxygène, (2) la modélisation de l'allumage, (3) la capture de jet turbulent non-prémélangé et (4) l'impact du diphasique sur l'allumage.

Quatre expériences ont été choisies pour valider les points (1), (2) et (3). La stratégie employée dans ce travail de thèse a été d'utiliser le code AVBP pour reproduire chacun de ces cas de référence en partant de la configuration la plus simple à valider et en augmentant progressivement la complexité pour terminer l'étude par une simulation d'allumage du moteur VINCI.

La première étape consiste à définir une cinétique réduite hydrogène/oxygène et à la valider par comparaison à des cinétiques complexes comme celle de O'Conaire et al. [42] sur des cas tests laminaires.

Dans un second temps, un modèle d'allumage est défini et validé sur le cas de l'expérience de Erard et al. [57] dans laquelle un mélange homogène propane/air laminaire est allumé par une étincelle électrique conduisant à la formation d'une flamme sphérique.

La troisième étape est caractérisée par la simulation d'allumage d'un jet turbulent de méthane débouchant dans un co-courant d'air, permettant la validation des points (2) et (3). Cette configuration a été étudiée expérimentalement par Ahmed et Mastorakos [3].

Dans une quatrième partie, le calcul du régime transitoire d'allumage du banc expérimental M3 [180] permet de réaliser une validation comportant les trois aspects (1), (2) et (3). La chambre M3, consacrée à l'étude optique de l'allumage dans les moteurs fusées est composée d'un unique injecteur coaxial injectant l'hydrogène et l'oxygène sous forme gazeuse (similaire aux injecteurs du moteur VINCI), allumé par un laser. Deux vitres de quartz permettent un accès optique au volume complet de la chambre rendant possible l'analyse de la propagation de la flamme par caméra rapide.

Enfin, la simulation d'allumage du moteur VINCI intègre les quatre points (1), (2), (3) et (4). L'impact des effets diphasiques sur l'allumage n'a pas fait l'objet d'une validation aussi poussée que les trois premiers aspects mais des comparaisons qualitatives ont été entreprises avec les visualisations expérimentales effectuées sur le banc M3 en configuration Lox/GH_2 [181, 76, 49] et sur le banc Mascotte en fonctionnement sub-critique [199].

Les différents moyens de validation sont résumés dans le tableau 1.1.

Simulations	Cinétique H_2/O_2	Modèle d'allumage	Mélange et dynamique de jet	Diphasique	Références de validation
0D et Laminaire 1D	X				[43]
Laminaire 3D		X			[57]
Allumage jet turbulent		X	X		[3]
Allumage M3	X	X	X		[180]
Allumage VINCI	X	X	X	X	[181, 76, 49, 199]

TAB. 1.1 - *Les différents cas de validation choisis.*

Les cinq étapes de simulation marquant le déroulement de la thèse sont présentées Fig. 1.5.

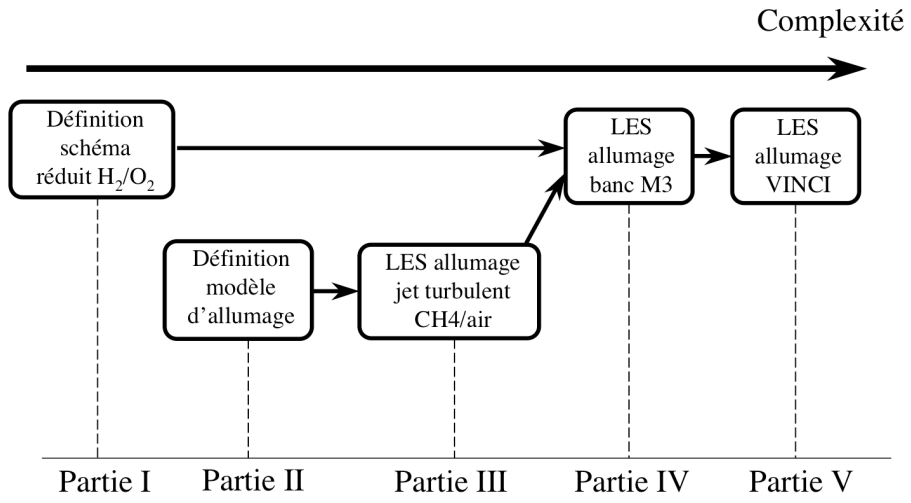


FIG. 1.5 - *Déroulement de la thèse.*

1.5 Organisation du manuscrit

La première partie décrit les approches théorique et numérique employées pendant cette thèse. Les équations de conservation pour la phase gazeuse et la phase liquide sont présentées dans un contexte d'écoulements diphasiques, compressibles et réactifs. Ces équations sont ensuite filtrées pour aboutir aux relations LES, les différentes fermetures des termes non résolus sont présentées ainsi que la validation d'un schéma cinétique réduit pour la combustion hydrogène/oxygène. Enfin, la dernière section décrit l'approche numérique de façon générale.

La seconde partie est dédiée à la mise en place d'un modèle d'allumage par dépôt d'énergie pour simuler les allumages par laser ou par bougie électrique. Après une introduction phénoménologique, le modèle est défini puis validé dans un cas de DNS reproduisant l'expérience de Erard et al. [57]. Le modèle est ensuite couplé au modèle de combustion turbulente pour pouvoir être appliqué dans un contexte LES.

La troisième partie présente la simulation LES de l'allumage du jet de méthane turbulent étudié expérimentalement par Ahmed et Mastorakos [3]. Cette troisième partie montre que les différentes étapes de l'allumage d'un jet, identifiées à partir des résultats numériques, sont en très bon accord avec les observations expérimentales.

La quatrième partie est consacrée à l'allumage de la chambre expérimentale M3 dans le cas d'un allumage retardé conduisant à une violente élévation de pression. Le but de cette partie est de rassembler les différents aspects validés dans les parties précédentes dans une configuration proche d'un moteur fusée réel. Cette étude montre notamment que les résultats LES permettent une analyse critique des résultats expérimentaux et conduisent à une interprétation différente du scénario d'allumage.

La cinquième et dernière partie présente la simulation d'une séquence d'allumage du moteur VINCI dans une configuration simplifiée. Les résultats numériques soulignent l'importance des effets diphasiques sur l'initiation de la combustion et la phase de propagation de la flamme avant la stabilisation.

Première partie

Équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques réactifs

Table des Matières

2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs 35
2.1 Équations et variables conservatives . . . 35
2.2 Variables thermodynamiques . . . 37
2.3 Équation d'état des gaz parfaits . . . 37
2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces . . . 38
2.5 Diffusion de la chaleur . . . 39
2.6 Coefficients de transport diffusif . . . 39
2.7 Cinétique chimique . . . 40

3 Équations de conservation pour la phase dispersée 43
3.1 Introduction . . . 43
3.1.1 Approche lagrangienne . . . 43
3.1.2 Approche eulérienne . . . 44
3.2 Equations de conservation eulériennes . . . 45
3.2.1 Fonction densité de présence . . . 45
3.2.2 Moyenne de phase et mouvement mésoscopique . . . 46
Moyenne d'ensemble . . . 46
Moyenne d'ensemble massique . . . 46
Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorrélées . . . 47
3.2.3 Équation générale d'Enskog . . . 48
3.2.4 Équations de conservation . . . 48
Conservation de la densité de particules . . . 48
Conservation de la fraction volumique . . . 49
Conservation de la quantité de mouvement . . . 49
Conservation de l'enthalpie sensible . . . 49
3.2.5 Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée . 50
Hypothèses simplificatrices . . . 50
Équations de conservation . . . 51
3.3 Modèles de fermeture . . . 52
3.3.1 Traînée . . . 52
3.3.2 Évaporation . . . 53

Description du modèle . . . 53
Taux de transfert de masse . . . 54
Taux de transfert de chaleur . . . 55
Valeur de référence pour l'enthalpie liquide . . . 57
Coefficients de transport diffusif . . . 57

4 Équations pour la LES diphasique réactive 59
4.1 Équations LES pour la phase gazeuse . . . 59
4.1.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes . . . 59
4.1.2 Flux convectifs résolus . . . 60
4.1.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif . . . 61
4.1.4 Termes de sous-maille . . . 62
4.2 Modèles de sous-maille . . . 63
4.2.1 Modèle de Smagorinsky . . . 63
4.2.2 Modèle de Smagorinsky filtré . . . 64
4.2.3 Modèle WALE . . . 64
4.3 Équations LES pour la phase dispersée . . . 65
4.3.1 Filtrage LES des équations de conservation . . . 65
4.3.2 Flux mésoscopiques résolus . . . 66
4.3.3 Flux de sous-maille . . . 66
4.3.4 Termes sources filtrés . . . 66
4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée . . . 68
4.5 Modèle de combustion turbulente . . . 68
4.5.1 Modélisation de la combustion turbulente . . . 68
4.5.2 Flamme laminaire épaissie (TF) . . . 69
4.5.3 Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES) . . . 70
Fonction d'efficacité E . . . 71
Estimation de la constante α . . . 72
4.5.4 Modèle de flamme épaissie dynamique . . . 73
Principe de fonctionnement . . . 73
Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale . . . 75

5 Approche numérique 77
5.1 Discrétisation *Cell-Vertex* . . . 77
5.1.1 Approche des résidus pondérés . . . 77
5.1.2 Calcul du pas de temps . . . 79
5.1.3 Calcul des gradients . . . 79
5.2 Schémas numériques . . . 79
5.3 Modèles de viscosité artificielle . . . 80

5.3.1 Introduction 80
5.3.2 Senseurs 80
Senseur de Jameson 80
Senseur de Colin 81
5.3.3 Opérateurs 82
5.4 Traitement des chocs 82
5.4.1 Position du problème 83
5.4.2 Méthodes numériques 84
5.4.3 Viscosité de volume 84
Modèle de Von Neumann et Richtmeyer 85
Modèle de Cook et Cabot 85
Application à un tube à choc 86
5.5 Conditions aux limites 88

6 Cinétique chimique hydrogène-oxygène **91**
6.1 Les trois cinétiques testées 92
6.2 Températures de fin de combustion 94
6.3 Vitesse de flamme laminaire 95
6.4 Dépendance en pression 96
6.5 Délais d'auto-allumage 99
6.6 Structure de flamme prémélangée 100
6.7 Structure de la flamme de diffusion 103
6.8 Epaississement dynamique et cinétique chimique 106

Chapitre 2

Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Cette section présente les équations de conservation dites de Navier-Stokes établies pour des mélanges gazeux compressibles et réactifs, ainsi que les différents modèles et hypothèses concernant la thermodynamique, la diffusion et la cinétique réactionnelle.

2.1 Équations et variables conservatives

On écrit les équations de conservation d'un écoulement multi-espèces réactif sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \; = \; \mathbf{s} \tag{2.1}$$

$\mathbf{w} = (\, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables transportées avec respectivement ρ, u, v, w, E et ρ_k, la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, $E = E_i + \frac{1}{2}\mathbf{uu}$ l'énergie totale non chimique (E_i est l'énergie interne) 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. $\mathbf{F}$ est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non diffusive et une partie diffusive :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \tag{2.2}$$

$\mathbf{s}$ est le vecteur des termes sources qui se compose de deux parties :

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_c + \mathbf{s}_{l\text{-}g} \tag{2.3}$$

où $\mathbf{s}_c$ est le terme source lié à la réaction chimique (cf. section 2.7) et $\mathbf{s}_{l\text{-}g}$ est le terme source dû aux effets de la phase liquide sur la phase gazeuse (cf. section 3.2.5).

Les trois composantes du tenseur des flux non diffusifs $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \ \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \ \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.16).

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{g}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

$$\mathbf{h}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix}$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, μ est la viscosité dynamique (cf. section 2.6), $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i (cf. section 2.4) et q_i est le flux diffusif de chaleur (cf. section 2.5). τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right) \tag{2.6}$$

$$\text{avec :} \quad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{2.7}$$

où S_{ij} est le tenseur des vitesses de déformation.

Note : Par la suite, en l'absence de précision, les indices i, j et l désignent l'une des trois directions de l'espace. Leur répétition implique une sommation sur ces trois directions (notation d'Einstein). Dans tout ce document, l'indice k représente uniquement la $k^{\text{ième}}$ espèce et ne suit pas la règle de sommation (sauf dans les cas mentionnés).

2.2 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 respectivement par les Eq. 2.8 et 2.9. Le symbole ~ correspond à la valeur tabulée d'indice i et l'exposant m représente une valeur molaire. $\tilde{h}^m_{s,k}$, $\tilde{s}^m_k$ et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF [209]. Enfin, l'énergie sensible de l'espèce k est donnée par l'Eq. 2.10 où r_k est fourni par l'Eq. 2.18.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{\tilde{h}^m_{s,k}(T_i) - \tilde{h}^m_{s,k}(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1, 51 \tag{2.8}$$

$$\tilde{s}_k(T_i) = \frac{\tilde{s}^m_k(T_i) - \tilde{s}^m_k(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1, 51 \tag{2.9}$$

$$\tilde{e}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = \tilde{h}_{s,k}(T_i) - r_k T_i \qquad i = 1, 51 \tag{2.10}$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100\ K$. Elles sont respectivement déterminées par les Eq. 2.11 et 2.12. L'énergie sensible de l'espèce k est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 2.13). L'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eq. 2.14 et 2.15.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \tag{2.11}$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \tag{2.12}$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_i) + (T - T_i)\frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{i+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \tag{2.13}$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k e_{s,k} \tag{2.14}$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k h_{s,k} \tag{2.15}$$

2.3 Équation d'état des gaz parfaits

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

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} T \tag{2.16}$$

$$\text{avec :} \qquad \frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \tag{2.17}$$

où $\overline{W}$ est la masse molaire du mélange. La constante du mélange $\overline{r}$ et les capacités calorifiques $\overline{C_p}$ et $\overline{C_v}$ dépendent des fractions massiques :

$$\overline{r} = \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k}\mathcal{R} = \sum_{k=1}^{N} Y_k r_k \tag{2.18}$$

$$\overline{C_p} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{p,k} \tag{2.19}$$

$$\overline{C_v} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{v,k} \tag{2.20}$$

où $\mathcal{R} = 8.3143\ J.mol^{-1}.K^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\gamma = \overline{C_p}/\overline{C_v}$. La constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition locale du mélange définie par les fractions massiques $Y_k(x,t)$. Elles sont donc dépendantes de l'espace et du temps :

$$\overline{r} = \overline{r}(x,t), \qquad \overline{C_p} = \overline{C_p}(x,t), \qquad \overline{C_v} = \overline{C_v}(x,t), \qquad \text{et} \qquad \gamma = \gamma(x,t) \tag{2.21}$$

À partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.13 et 2.14. Enfin, les conditions limites (cf. section 5.5) nécessitent le calcul de la vitesse du son du mélange c définie par :

$$c^2 = \gamma \overline{r} T \tag{2.22}$$

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'Eq. 2.23 soit satisfaite. $\mathbf{V}^k$ représente la vitesse de diffusion de l'espèce k $(k = 1, ..., N)$ et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (Eq. 2.24). L'Eq. 2.24 fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \overline{W}/W_k$. Exprimée en terme de fractions massiques, l'Eq. 2.24 devient l'Eq. 2.25.

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k\, V_i^k = 0 \tag{2.23}$$

$$X_k\, V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.24}$$

$$Y_k\, V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.25}$$

Si on somme les k Eq. 2.25, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.23 n'est pas nécessairement respectée. On ajoute alors la contribution d'une vitesse de diffusion corrective $\mathbf{V}^c$ pour assurer

la conservation de la masse totale de gaz (Eq. 2.26) [157]. Le flux de diffusion des espèces $\mathbf{J}_k$ qui prend en compte cette correction est défini par l'Eq. 2.27.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N} D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.26}$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k \left(V_i^k + V_i^c \right) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \tag{2.27}$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange définie en section 2.6.

2.5 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total $\mathbf{q}$ est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces (cf. section 2.4). Ces deux termes sont détaillés dans l'Eq. 2.29.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k} h_{s,k} \tag{2.28}$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} \quad \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^{N} \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \tag{2.29}$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie en section 2.6.

2.6 Coefficients de transport diffusif

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[1]. La loi puissance (Eq. 2.31) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \tag{2.30}$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} généralement dans le mélange de gaz frais. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0. Pour un mélange d'hydrogène et d'oxygène à la stoechiométrie, la loi puissance pour la viscosité dynamique est donnée par la relation :

$$\mu = 1,79.10^{-5} \left(\frac{T}{300} \right)^{0,686} \tag{2.31}$$

[1] Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est un gaz parfait

La conductivité thermique du mélange est définie par l'Eq. 2.32 qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. 2.33.

$$\lambda = \frac{\mu\overline{C_p}}{Pr} \tag{2.32}$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \tag{2.33}$$

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 [80]. La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.34 [14].

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^{N} X_j / D_{jk}} \tag{2.34}$$

Les coefficients binaires D_{ij} sont des fonctions complexes dépendant des intégrales de collision et des variables thermodynamiques. Dans un code DNS utilisant une chimie complexe, utiliser l'Eq. 2.34 a un sens. À l'inverse, les codes LES qui utilisent un schéma cinétique simplifié ne nécessitent pas une modélisation aussi précise. On adopte donc une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho\, Sc_k} \tag{2.35}$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant.

P_r et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide des librairies de CHEMKIN2 (Transfit) [92], en calculant leur valeur dans les gaz brûlés issus de la mise en équilibre d'un mélange inflammable. Un exemple est donné Tab. 2.1 pour un mélange à sept espèces (H, H2, O, O2, OH, H2O) ne comportant initialement que de l'hydrogène et de l'oxygène à une richesse de 4 et à 300 K.

	H	H2	O	O2	OH	H2O
Sc_k	0,17	0,28	0,64	0,99	0,65	0,77
P_r = 0,64						

TAB. 2.1 - *Nombres de Schmidt pour les différentes espèces et nombre de Prandtl du mélange.*

2.7 Cinétique chimique

Le terme source $\mathbf{s}_c$ de l'Eq. 2.1 est défini par : $\mathbf{s}_c = (0, 0, 0, \dot{\omega}_T, \dot{\omega}_k)^T$ avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k. 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. 2.36. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. 2.37 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ de l'espèce k dans chaque réaction j, j variant de 1 à m. Les coefficients stoechiométriques

des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$. $\mathcal{Q}_j$ est le taux d'avancement de la réaction j définie par l'Eq. 2.38. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par les Eq. 2.39 et 2.40. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ est imposé par l'hypothèse d'équilibre thermodynamique.

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \qquad j = 1, m \tag{2.36}$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \tag{2.37}$$

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \tag{2.38}$$

$$K_{f,j} = A_{f,j}\, T^{\beta} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T} \right) \tag{2.39}$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \tag{2.40}$$

Dans l'Eq. 2.40, K_{eq} est la constante d'équilibre [97] définie par l'Eq. 2.41. La pression de référence est égale à $P_0 = 1\ bar$. ΔH^0_j est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.42 et ΔS^0_j la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 2.43. $\Delta h^0_{f,k}$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0\ K$. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est donné par l'Eq. 2.44.

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S^0_j}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H^0_j}{\mathcal{R}T} \right) \tag{2.41}$$

$$\Delta H^0_j = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} \left(h_{s,k}(T) + \Delta h^0_{f,k} \right) \tag{2.42}$$

$$\Delta S^0_j = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} s_k(T) \tag{2.43}$$

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N} \dot{\omega}_k \Delta h^0_{f,k} \tag{2.44}$$

Dans l'Eq. 2.39, le terme $A_{f,j}\ T^{\beta}$ modélise le nombre de collisions entre les réactifs par unité de volume et par unité de temps ainsi que l'effet de leurs géométries sur la collision. Le paramètre $A_{f,j}$ est appelé facteur pré-exponnetiel (unité : cgs) et la partie en T^{β} permet de prendre en compte les effets de la température sur la fréquence des collisions. La probabilité que ces collisions déclenchent une réaction chimique est quantifiée par le terme $\exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T} \right)$, où $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation de la réaction j.

Dans le cas de réactions chimiques faisant intervenir des troisièmes corps M telle que la réaction : $H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$ où la molécule M peut être n'importe quelle molécule du mélange réactif

$(O, H, H_2, OH, \dots)$, le taux de réaction Q_j a une écriture différente de celle de l'Eq. 2.38 :

$$\mathcal{Q}_j = \gamma_M \left(K_{f,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \right) \tag{2.45}$$

$$\gamma_M = \sum_{k=1}^{N} \alpha_{k,j} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right) \tag{2.46}$$

$$\tag{2.47}$$

où $\alpha_{k,j}$ est appelé efficacité du corps k dans la réaction j.
Dans les réactions du type $H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$, la molécule M apporte l'énergie suffisante pour créer l'espèce H_2O et extrait ensuite le surplus d'énergie qui aurait conduit sa désintégration.

Chapitre 3

Équations de conservation pour la phase dispersée

3.1 Introduction

Contrairement aux écoulements de fluides newtoniens qui sont majoritairement décrits par une théorie des milieux continus avec un point de vue eulérien, la dynamique des sprays peut être abordée sous différentes approches théoriques. Dans l'approche lagrangienne (notée L), on considère la phase dispersée comme un ensemble de particules discrètes de petites tailles chacune d'elles étant suivie de façon individuelle par un jeu d'équation de la mécanique du point. Dans l'approche eulérienne (notée E), le spray est vu comme un milieu continu analogue à un fluide et constitué des propriétés moyennes locales de l'ensemble des particules. Afin de comprendre le choix fait dans cette étude, les approches lagrangienne et eulériennes sont présentées de manière succinte dans les sections 3.1.1 et 3.1.2. La suite de ce chapitre (sections 3.2 à 3.3) est consacrée à la description du formalisme eulérien statistique.

Note : Par la suite, on parle indifféremment de phase dispersée ou de phase liquide pour définir le spray de gouttelettes (appelées particules dans le formalisme eulérien statistique). Par opposition, l'écoulement gazeux est appelé phase continue, phase porteuse ou phase gazeuse.

3.1.1 Approche lagrangienne

La description Euler-Lagrange (EL) du spray consiste à suivre la trajectoire lagrangienne (L) de chaque gouttelette en lui appliquant les transferts de quantité de mouvement, de masse et de chaleur avec le gaz porteur dont l'écoulement est décrit du point de vue eulérien (E). D'après les travaux de Boivin [19], cette approche n'est valable que pour les écoulements à faible charge ($\alpha_l \leq 0,001$) avec des temps de réponse du liquide supérieur au temps caractéristique de la turbulence (du gaz) de sous-maille.

À chaque instant, on résout le système suivant pour chaque gouttelette (k) présente dans l'écoulement :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \tag{3.1}$$

$$\frac{d}{dt}\left(m_p^{(k)} V_{p,i}^{(k)}\right) = F_{p,i}^{(k)} \tag{3.2}$$

$$\frac{dm_p^{(k)}}{dt} = \dot{m}_p^{(k)} \tag{3.3}$$

$$\frac{d}{dt}\left(m_p^{(k)} C_p^{(k)} T_p^{(k)}\right) = \dot{Q}_p^{(k)} \tag{3.4}$$

avec $\vec{X}_p^{(k)}$ la position de la goutte, $\vec{V}_p^{(k)}$ sa vitesse, $m_p^{(k)}$ sa masse, $C_p^{(k)}$ sa chaleur spécifique à pression constante, $T_p^{(k)}$ sa température, $\mathbf{F}_p^{(k)}$ les forces extérieures agissant sur la goutte, $\dot{m}_p^{(k)}$ le taux d'évaporation et $\dot{Q}_p^{(k)}$ le taux de transfert de chaleur avec le gaz porteur.

Le principal avantage de la méthode EL est l'absence de modélisation nécessaire pour traiter des problèmes tels que les effets de polydispersion (particules de différents diamètres). Ainsi, elle est couramment employée dans les codes RANS et son potentiel en LES a été démontré [120, 126, 146]. Sur le plan numérique, la localisation des particules sur la grille eulérienne nécessite des algorithmes performants. Dans le cas de calculs parallèles par décomposition de domaine, l'échange de particules entre processeurs est une tâche délicate [66]. Une fois les particules repérées, des interpolations sont nécessaires pour transférer les termes de couplage de la grille eulérienne aux particules et inversement. Si l'on souhaite éviter une diffusion numérique importante lors de ces interpolations, des schémas d'ordre élevé donc coûteux en temps de calcul sont requis.

D'autre part, le nombre de gouttes utilisable est limité par les ressources en mémoire des calculateurs et l'efficacité globale d'une simulation dépend fortement de la stratégie de parallèlisation [169, 65].

3.1.2 Approche eulérienne

Les difficultés numériques et informatiques de l'approche EL ont motivé la modélisation des sprays par des approches Euler-Euler (EE). Dans ce cas, on ne s'intéresse pas à l'histoire de chaque particule mais à leurs propriétés moyennes en regardant le spray comme un fluide continu. Deux types de moyenne sont classiquement utilisés : la moyenne volumique et la moyenne statistique.

Le filtrage volumique (décrit en détail par Simonin [192] et Kaufmann [90] et résumé par Boileau [16]) consiste à considérer que la phase liquide comme la phase gazeuse est régie par les équations de Navier-Stokes. Une fonction indicatrice de phase, appliquée aux équations permet de définir les ensembles de relations de conservation pour les deux phases. Ces deux ensembles d'équations sont ensuite filtrés par un opérateur volumique. L'inconvénient de cette méthode est de négliger les échelles inférieures à la taille caractéristique du volume de contrôle. Contrairement à la LES pour l'écoulement gazeux, il n'existe pas d'approche claire pour modéliser les effets de ces petites échelles [90] et l'hypothèse de milieu continu limite la taille minimale de ce volume en y imposant un nombre suffisant de particules.

le filtrage statistique (employé dans AVBP), permet de contourner ces problèmes. Février et al. [63]

proposent une approche basée sur une fonction densité de présence (FDP) pour la phase liquide (la détermination de la FDP est décrite dans la section suivante). Cette FDP est utilisée pour définir une moyenne et un ensemble d'équations de transport à partir de la théorie cinétique des gaz de Boltzmann [34]. Une fois que ces équations sont établies, on recherche des modèles de fermeture pour les termes inconnus du système (mouvement décorrélé et termes d'échange avec la phase porteuse). Contrairement au filtrage volumique, la méthode basée sur la moyenne statistique n'a besoin d'aucune hypothèse sur la taille du filtre et le mouvement non résolu des particules peut être modélisé [63, 193]. C'est pour ces raisons que cette approche a été choisie dans le code AVBP.

Contrairement à l'approche EL, les équations obtenues par la méthode EE sont proches des équations de la phase gazeuse, ce qui permet d'utiliser les mêmes algorithmes informatiques que le solveur gazeux et de profiter pleinement des capacités de parallélisme. De plus, aucune interpolation n'est nécessaire pour coupler les deux phases car les informations liquide et gazeuse sont stockées sur les mêmes noeuds de maillage. En d'autres termes, le code de calcul résolvant l'écoulement diphasique en Euler-Euler n'est qu'une extension du code gazeux auquel on ajoute un jeu de variables à transporter ainsi que des modèles pour les termes de fermeture et de couplage. Le temps de calcul n'est alors plus lié aux nombres de particules à transporter mais au nombre d'équations eulériennes décrivant la phase dispersée et la complexité des modèles de fermeture. En général, il ne dépasse pas le double du temps requis pour un calcul monophasique équivalent.

La principale difficulté rencontrée avec la formulation EE est le calcul de jets faisant intervenir des gouttes de tailles différentes ou de jets multiples (qui se croisent éventuellement) car cela implique l'introduction de moments statistiques d'ordre plus élevé. L'approche EE multi-disperse [108, 109] permet de représenter un spray avec plusieurs classes de gouttes ("familles" de gouttes de différents diamètres) chacune possédant son propre jeu d'équations euleriennes. Dans sa thèse, Mossa [138] propose un modèle où la distribution des tailles est présumée et où une équation de transport pour la densité de surface de gouttes permet de prendre en compte les effets polydisperses sur la dynamique du spray. D'autres approches, basées par exemple sur les travaux de Vallet et al. [221], permettent de modéliser les milieux liquides denses avec une équation de transport de la densité de surface de liquide prenant en compte les effets d'atomisation primaire.

3.2 Equations de conservation eulériennes

3.2.1 Fonction densité de présence

L'approche EE adoptée dans AVBP repose sur la définition d'une fonction de densité de présence f_p. Le concept de cette fonction est construit de la façon suivante : Un écoulement gazeux $\mathcal{H}_f$ est ensemencé de façon aléatoire avec des particules à un instant t_0. L'ensemble évolue jusqu'à un instant t_1 en supposant que la phase liquide n'a pas d'impact sur la phase gazeuse, pour donner une réalisation i de la phase liquide. En tout point et à tout instant, on mesure le nombre de particules possédant à la fois une vitesse égale à $\mathbf{c}_p$, une masse égale à μ_p et une température égale à ζ_p. Ce nombre est

noté $f_p^i(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t, \mathcal{H}_f)$. La FDP est obtenue en moyennant l'opération sur un grand nombre $\mathcal{N}_p$ de réalisations liquides (la réalisation gazeuse $\mathcal{H}_f$ est toujours la même) : $f_p = \frac{1}{\mathcal{N}_p}\Sigma_{i=1}^{\mathcal{N}_p} f_p^i$. Cette fonction f_p n'est donc pas une FDP classique (dont l'intégrale sur le domaine de phase est égale à 1) : $f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t, \mathcal{H}_f)$ est le nombre probable de particules au point $\mathbf{x}$ et à l'instant t dont la vitesse $\mathbf{u}_p$, la température T_p et la masse m_p vérifient : $\mathbf{c}_p \leq \mathbf{u}_p < \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p$, $\zeta_p \leq T_p < \zeta_p + d\zeta_p$ et $\mu_p \leq m_p < \mu_p + d\mu_p$.

3.2.2 Moyenne de phase et mouvement mésoscopique

Moyenne d'ensemble

La moyenne de phase d'une fonction particulaire quelconque $\Psi(\mathbf{u}_p, T_p, m_p)$ correspond à la moyenne de la grandeur Ψ sur l'ensemble des réalisations particulaires possibles. Elle est obtenue par intégration sur l'espace des phases — c'est-à-dire l'espace des propriétés des particules — pondérée par la fonction densité de présence :

$$\{\Psi\}_l = \frac{1}{\breve{n}_l} \int \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f)\ d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.5}$$

où $\breve{n}_l$ est le nombre moyen de particules par unité de volume appelé aussi densité de particules et défini par :

$$\breve{n}_l(\mathbf{x}, t) = \int f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f)\ d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.6}$$

Moyenne d'ensemble massique

De même que la moyenne de Fabre est plus adaptée dans les écoulements turbulents compressibles gazeux (cf. section 4.1.1), il est pratique de définir une moyenne de phase pondérée par la masse de la particule lorsque celle-ci varie (par évaporation, par exemple) :

$$\breve{\Psi} = \langle\Psi\rangle_l = \frac{1}{\rho_l \breve{\alpha}_l} \int \mu_p \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f)\ d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.7}$$

où ρ_l est la masse volumique du liquide et $\breve{\alpha}_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée dans le mélange diphasique définie par :

$$\rho_l \breve{\alpha}_l = \breve{n}_l \{m_p\}_p = \int \mu_p f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f)\ d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.8}$$

On note la relation suivante utile pour les développements ultérieurs :

$$\rho_l \breve{\alpha}_l \langle\Psi\rangle_l = \breve{n}_l \{m_p \Psi\}_l \tag{3.9}$$

$$\text{avec :} \quad m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 \tag{3.10}$$

où d est le diamètre de particule. Dans le cas d'un spray monodisperse, on a $m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 = cste$ à la position $\mathbf{x}$ et à l'instant t. Les deux moyennes sont alors équivalentes :

$$\langle \Psi \rangle_l = \{\Psi\}_l \tag{3.11}$$

et $\breve{\alpha}_l$ et $\breve{n}_l$ sont liés par la relation suivante :

$$\breve{\alpha}_l = \frac{\pi}{6} \breve{n}_l d^3 \tag{3.12}$$

où d représente le diamètre local instantané commun à toutes les particules présentes à cet endroit. Ainsi, dans les développements ulérieurs où l'hypothèse de spray monodisperse sera utilisée, d pourra aussi bien désigner une propriété de la particule lagrangienne qu'une grandeur eulérienne du spray.

Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorrélées

Lorsqu'on remplace Ψ par la vitesse de particulaire $\mathbf{u}_p$ dans l'Eq. 3.7, on obtient la vitesse moyenne locale instantanée du spray liquide conditionnée par la réalisation $\mathcal{H}_f$ de l'écoulement gazeux :

$$\breve{\mathbf{u}}_l\,(\mathbf{x},\, t|\mathcal{H}_f) = \langle \mathbf{u}_p \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \breve{\alpha}_l} \int \mu_p \mathbf{c}_p f_p \, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.13}$$

$\breve{\mathbf{u}}_l$ est une vitesse moyenne eulérienne appelée *vitesse mésoscopique*. Pour toute particule individuelle située en $\mathbf{x}$ à l'instant t, on peut exprimer la vitesse propre $\mathbf{u}_p$ de cette particule comme la somme de cette *vitesse mésoscopique* et d'une composante résiduelle $\mathbf{u}''_p$ appelée *vitesse décorrélée* :

$$\mathbf{u}_p = \breve{\mathbf{u}}_l + \mathbf{u}''_p \qquad \text{avec} \quad \left\langle \mathbf{u}''_p \right\rangle_l = 0 \tag{3.14}$$

Cette décomposition permet de voir le spray comme un ensemble de particules mues par un mouvement de groupe appelé *mouvement mésoscopique* où chaque particule se distingue de ce mouvement par sa *vitesse décorrélée* (cf. Fig. 3.1).

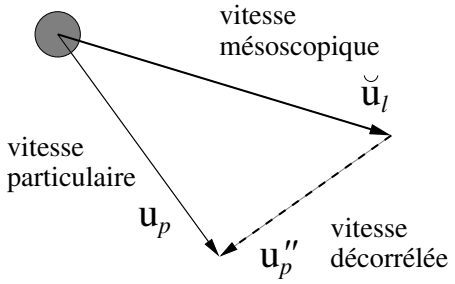


FIG. 3.1 - *Décomposition de la vitesse particulaire lagrangienne $\mathbf{u}_p$ en une partie mésoscopique $\breve{\mathbf{u}}_l$ et une partie décorrélée $\mathbf{u}''_p$*

Les effets des grandeurs décorrélées ont été négligés dans ces travaux de thèse. La modélisation des effets du mouvement décorrélé n'est qu'à ses débuts et Riber a montré que les modèles actuels étaient pertinents dans le cas d'une turbulence homogène isotrope [167] mais possédaient des lacunes dans le cas de jets diphasiques turbulents et confinés dans lesquels de forts gradients de vitesses mésoscopiques apparaissent. Cependant, négliger le mouvement décorrélé a peu d'effet sur les grandeurs moyennes et agit essentiellement sur les fluctuations.

3.2.3 Équation générale d'Enskog

La fonction f_p est une FDP eulérienne qui vérifie une équation de transport de type Boltzmann représentant les effets des forces extérieurs sur les particules et les interactions inter-particules (voir la thèse de Boileau [16] pour un développement plus détaillé). En multipliant l'équation de Boltzmann par une fonction particulaire quelconque Ψ et en l'intégrant par partie sur l'espace des phases (opérateur $\int \cdot \, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$), on obtient *l'équation générale d'Enskog* pour la fonction Ψ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{\Psi} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} \breve{\Psi} &= \mathbb{T}(\Psi) + \mathbb{C}(m_p \Psi) \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_l + \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dT_p}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial T_p} \right\rangle_l \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dm_p}{dt}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_p} + \frac{\Psi}{m_p}\right) \right\rangle_l \end{aligned} \tag{3.15}$$

où $\mathbb{T}(\Psi)$ est l'opérateur de flux décorrélé défini par :

$$\mathbb{T}(\Psi) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle u''_{p,i} \Psi \right\rangle_l \tag{3.16}$$

$\mathbb{T}(\Psi)$ sera négligé dans la suite de l'exposé.

3.2.4 Équations de conservation

Les équations de conservations eulériennes pour la phase dispersée sont obtenues en appliquant l'équation générale d'Enskog (Eq. 3.15) à différentes fonctions particulaires.

Conservation de la densité de particules

En prenant $\Psi = \frac{1}{m_p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\breve{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\breve{n}_l \breve{u}_{l,i} = \mathbb{C}(1) \tag{3.17}$$

Conservation de la fraction volumique

En prenant $\Psi = 1$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} = \mathbb{C}\left(m_p\right) + \Gamma_l \tag{3.18}$$

où $\Gamma_l = -\Gamma = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est le taux de variation de masse par changement de phase (évaporation).

Conservation de la quantité de mouvement

En prenant $\Psi = \mathbf{u}_p$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} \breve{u}_{l,j} = +\mathbb{C}\left(m_p \mathbf{u}_p\right) + F_{d,i} + \Gamma_{u,i} \tag{3.19}$$

$\mathbb{C}\left(m_p \mathbf{u}_p\right)$ est l'échange de quantité de mouvement entre particules (collisions, rupture, coalescence, etc.). $F_{d,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{F_{p,i}\right\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse via la force de traînée $\mathbf{F}_p$ exercée sur chaque particule. $\Gamma_{u,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{u_{p,i}}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ u_{p,i}\frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse par changement de phase. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes ayant localement le même diamètre (spray monodisperse) et la même température, on a : $\Gamma_{u,i} = \Gamma_l \breve{u}_{l,i}$.

Conservation de l'enthalpie sensible

L'enthalpie sensible est définie par : $h_{s,p} = C_{p,l}\left(T_l - T_{l,ref}\right)$, où $C_{p,l}$ est la chaleur massique à pression constante du liquide, T_l est la température de la particule et $T_{l,ref}$ est une température de référence fixée à une valeur proche de T_l de sorte que $C_{p,l}$ puisse être supposée constante entre T_l et $T_{l,ref}$.

En prenant $\Psi = h_{s,p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,j} \breve{h}_{s,l} = +\mathbb{C}\left(m_p h_{s,p}\right) + \Lambda_l + \Phi_l \tag{3.20}$$

$\mathbb{C}\left(m_p \mathbf{u}_p\right)$ est l'échange d'enthalpie sensible entre particules. $\Phi_l = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de chaleur par conduction dans la phase liquide. $\Lambda_l = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{h_{s,p}}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ h_{s,p}\frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de masse avec la phase gazeuse.

3.2.5 Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée

Hypothèses simplificatrices

H1 - Les particules sont des gouttes sphériques indéformables[1]

H2 - Le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz permet de supposer que la seule force exercée par le fluide porteur sur les gouttes est la traînée.

H3 - La température (donc l'enthalpie sensible) est homogène à l'intérieur de chaque goutte. Cela revient à supposer une conductivité infinie dans la phase liquide.

H4 - L'effet de la gravité est négligeable[2].

H5 - L'écoulement est dilué ($\breve{\alpha}_l < 0.01$). Par conséquent, les effets d'encombrement volumique de la phase dispersée sur la phase porteuse sont négligeables : la fraction volumique gazeuse vaut $1 - \breve{\alpha}_l \equiv 1$.

H6 - En vertu de l'hypothèse H5, les interactions goutte-goutte sont négligeables : $\mathbb{C} \equiv 0$.

H7 - En vertu de l'hypothèse H5, la phase porteuse est faiblement altérée par la présence du spray ce qui permet d'utiliser une FDP conditionnée par une réalisation unique de la phase porteuse[3].

H8 - Toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est dit monodisperse [4].

H9 - Toutes les gouttes possèdent localement la même température. Les hypothèses H8 et H9 autorisent une expression simplifiée des termes Γ_l, $\Gamma_{u,i}$, Γ_θ, Λ_l et Φ_l (cf. section 3.3.2).

[1] Cette hypothèse revient à supposer que les phases d'atomisation primaire et secondaire sont achevées. Dans un spray, le phénomène de rupture de goutte est caractérisé par le nombre de Weber $We = \rho|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|^2 d/\sigma$ où σ est la tension superficielle du liquide. Les gouttes sont stables en-dessous d'une valeur critique $We_c \approx 12$. Pour $We < 5$, les déformations de l'interface sont négligeables et l'hypothèse de sphéricité est vérifiée [195].

[2] Cette hypothèse peut être facilement relaxée par l'ajout d'un terme source dans l'équation de quantité de mouvement (Eq. 3.19) [168]

[3] Sa validité devra toutefois être discutée dans le cadre de la combustion diphasique où la présence de la flamme crée des échanges importants de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre le gaz porteur et le spray.

[4] Pour l'extension de cette méthode aux sprays polydisperses, se rapporter à la thèse de Mossa [138].

Équations de conservation

Sous les hypothèses énoncées ci-dessus, les équations de conservation eulériennes qui régissent la phase dispersée se résument ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial t}\breve{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j}\breve{n}_l\breve{u}_{l,j} = 0 \tag{3.21}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,j} = -\Gamma \tag{3.22}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i}\breve{u}_{l,j} = \Gamma\breve{u}_{l,i} + F_{d,i} \tag{3.23}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i}\breve{h}_{s,l} = -\Gamma\breve{h}_{s,l} + \Phi_l \tag{3.24}$$

temporel + mvt mésocopique = évaporation + traînée + conduction

On regroupe les Eq. 3.21–3.24 sous la forme compacte utilisée pour la phase gazeuse (cf. section 2.1) :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_l = \mathbf{s}_{g\text{-}l} \tag{3.25}$$

où $\mathbf{w}_l = (\breve{n}_l,\ \rho_l\breve{\alpha}_l,\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l,\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l,\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l,\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{h}_{s,l}\ )^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec $\breve{u}_l$, $\breve{v}_l$ et $\breve{w}_l$ les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\breve{\mathbf{u}}_l = (\breve{u}_l, \breve{v}_l, \breve{w}_l)^T$. $\mathbf{F}_l$ est le tenseur des flux de la phase liquide :

$$\mathbf{F}_l = \left(\mathbf{f}_l^M, \mathbf{g}_l^M, \mathbf{h}_l^M\right)^T \tag{3.26}$$

$$\tag{3.27}$$

Les trois composantes $\mathbf{f}_l^M$, $\mathbf{g}_l^M$ et $\mathbf{h}_l^M$ sont définies par :

$$\mathbf{f}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{u}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix},\ \mathbf{g}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix},\ \mathbf{h}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix} \tag{3.28}$$

$\mathbf{s}_{g\text{-}l}$ regroupe les termes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase gazeuse :

$$\mathbf{s}_{g\text{-}l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\Gamma \\ -\Gamma\breve{u}_l + F_{d,x} \\ -\Gamma\breve{v}_l + F_{d,y} \\ -\Gamma\breve{w}_l + F_{d,z} \\ -\Gamma\breve{h}_{s,l} + \Phi_l \end{pmatrix} \tag{3.29}$$

Les différentes composantes du vecteur $\mathbf{s}_{g\text{-}l}$ nécessitent des modèles de fermeture qui sont présentés dans la section 3.3. Finalement, par conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à l'interface, on peut écrire le terme source des équations gazeuses dû aux effets de la phase liquide :

$$\mathbf{s}_{l\text{-}g} = \begin{pmatrix} \Gamma\breve{u}_l - F_{d,x} \\ \Gamma\breve{v}_l - F_{d,y} \\ \Gamma\breve{w}_l - F_{d,z} \\ \Lambda + \Phi + u_i\left(\Gamma\breve{u}_{l,i} - F_{d,i}\right) \\ \Gamma\delta_{k,F} \end{pmatrix} \tag{3.30}$$

$u_i\Gamma\breve{u}_{l,i}$ et $-u_iF_{d,i}$ représentent respectivement les effets de l'évaporation et de la traînée sur l'énergie cinétique gazeuse. Λ et Φ correspondent au transfert d'énergie interne sensible par évaporation et par conduction thermique gaz-liquide respectivement (cf. section 3.3).

Remarque : Pour obtenir les termes d'échange $gaz \rightarrow liquide$ (couplage direct) qui composent $\mathbf{s}_{g\text{-}l}$, on a fait l'hypothèse que le filtrage statistique de la phase dispersée est basé sur une réalisation unique de la phase gazeuse (cf. section 3.2.5, H7). Or, chaque réalisation particulaire introduit une perturbation de la phase gazeuse via ces échanges interfaciaux. L'effet de ce couplage inverse est d'autant plus important que la charge massique liquide est élevée. De façon rigoureuse, il faudrait recourir à la probabilité jointe fluide-particules pour définir la fonction densité de présence de particule intervenant dans l'équation de Boltzmann du spray [62].

3.3 Modèles de fermeture

3.3.1 Traînée

On rappelle que le terme $\mathbf{F}_d$ dans l'Eq. 3.23 s'exprime en fonction de la force $\mathbf{F}_p$ exercée sur une goutte individuelle :

$$F_{d,i} = \rho_l\breve{\alpha}_l\left\langle\frac{F_{p,i}}{m_p}\right\rangle_l \tag{3.31}$$

Pour des particules denses $(\rho_l \gg \rho_{gaz})$ et de petits diamètres $(d \leq 50\ \mu m)$, toutes les forces autres que la traînée peuvent être négligées (cf. section 3.2.5, H2) [90]. La force de traînée exercée par le gaz ayant une vitesse $\mathbf{u}$ sur une particule sphérique isolée de masse m_p et de vitesse $\mathbf{u}_p$ est telle que :

$$\frac{F_{p,i}}{m_p} = \frac{1}{\tau_p'}\left(u_i - u_{p,i}\right) \tag{3.32}$$

où τ_p' est le temps de relaxation de la particule exprimé par :

$$\tau_p' = \left(1 + 0.15Re_p^{0.687}\right)\tau_p \tag{3.33}$$

$$\text{avec} \qquad \tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu} \tag{3.34}$$

où Re_p est le Reynolds de goutte défini par :

$$Re_p = \frac{\rho|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|d}{\mu} \tag{3.35}$$

L'Eq. 3.33 est une corrélation empirique proposée par Schiller et Naumann [178] permettant de corriger le temps de relaxation prédit par le modèle de traînée de Stokes (Eq. 3.34) lorsque Re_p n'est pas petit devant l'unité. Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le temps de relaxation est le même pour toutes les particules à la position $\mathbf{x}$ et au temps t. D'après la moyenne définie par l'Eq. 3.31, le terme de traînée $\mathbf{F}_d$ s'exprime alors en fonction de la vitesse mésoscopique de la façon suivante :

$$F_{d,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \frac{u_i - \breve{u}_{l,i}}{\tau_p} \tag{3.36}$$

Afin d'évaluer les effets de la traînée sur la phase dispersée, on définit le nombre de Stokes comparant le temps caractéristique de la traînée τ_p au temps caractéristique de l'écoulement :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_L} \tag{3.37}$$

où $\tau_L = L/|\mathbf{u}|$ avec L une échelle caractéristique de l'écoulement gazeux. St est un indicateur de la réponse de la particule aux variations de vitesse de l'écoulement. Pour $St \ll 1$, la particule se comporte comme un traceur vis-à-vis de l'écoulement gazeux. Pour $St \gg 1$, la particule suit une trajectoire de type « boulet de canon » et ne voit pas les perturbations du gaz. Enfin, pour des Stokes de l'ordre de l'unité, les effets de concentration préférentielle des gouttes dans certaines régions de l'écoulement sont maximaux [62, 61, 228].

3.3.2 Évaporation

Cette section décrit le modèle d'évaporation utilisé dans AVBP. Le taux d'évaporation du spray Γ intervenant dans les Eq. 3.21 à 3.24 s'exprime en fonction du taux de variation de masse lagrangien $\dot{m}_p = dm_p/dt$ de la façon suivante :

$$\Gamma = -\breve{n}_l \left\{\dot{m}_p\right\}_l \tag{3.38}$$

Description du modèle

De nombreux modèles de complexité variable existe dans la littérature (une revue est effectuée dans la thèse de Boileau [16]). L'approche choisie dans AVBP est une déclinaison du modèle de Spalding [200, 201] avec hypothèse de température uniforme à l'intérieur de la goutte. Ce modèle représente un compromis satisfaisant entre un faible coût de calcul et la prise en compte du phénomène de dépendance entre la température des gouttes et le taux d'évaporation. Ce phénomène physique est important dans le cas de la combustion où les variations de température importantes induisent des effets de préchauffage du liquide qui conditionnent le temps d'évaporation [83] donc de combustion.

Les trois hypothèses principales de ce modèle sont les suivantes :

– les gouttes sont sphériques et isolées ;
– la conductivité thermique de la phase liquide est infinie d'où une température uniforme au sein de chaque goutte ;
– l'interface liquide/gaz est à l'équilibre thermodynamique ce qui permet d'utiliser la loi de Clausius-Clapeyron.

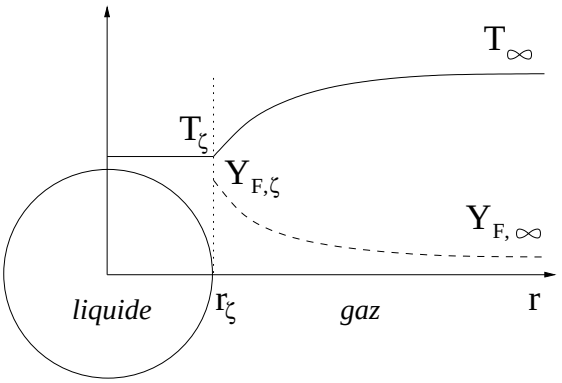


FIG. 3.2 - *Schéma d'une goutte isolée à la température T_ζ qui s'évapore dans un gaz possédant une température T_∞ et une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$*

Taux de transfert de masse

Kuo [97] décrit comment obtenir le taux d'évaporation $\dot{m}_p$ d'une gouttelette isolée (Fig. 3.2) en intégrant l'équation de conservation de la fraction massique de carburant gazeux (indice F) entre le rayon d'interface r_ζ et un rayon infini. Cette méthode aboutit à une expression de $\dot{m}_p$ qui ne dépend que des variables en $r = r_\zeta$ et en $r \to \infty$:

$$\dot{m}_p = -\pi d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \tag{3.39}$$

Sh est le nombre de Sherwood donné par la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3} \tag{3.40}$$

où $0.55 Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3}$ est la correction traduisant les effets convectifs liés à la vitesse relative entre la goutte et le gaz porteur.
Le produit $[\rho D_F]$ s'obtient à partir du nombre de Schmidt du carburant Sc_F :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu}{Sc_F} \tag{3.41}$$

B_M est le nombre de Spalding de masse qui fait apparaître la différence de fraction massique de carburant gazeux entre l'interface et l'infini :

$$B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \tag{3.42}$$

$Y_{F,\zeta}$ peut s'écrire en fonction de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$:

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + (1 - X_{F,\zeta}) \overline{W}_{nF,\zeta}} \tag{3.43}$$

où $\overline{W}_{nF,\zeta}$ est la masse molaire moyenne du *pseudo*-mélange constitué d'espèces autres que le carburant. En supposant que la composition de ce mélange est la même entre ζ et ∞, on a :

$$\overline{W}_{nF,\zeta} = \overline{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{\overline{W}}{W_F}} \overline{W} \tag{3.44}$$

$X_{F,\zeta}$ est fourni par la loi de Dalton pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \tag{3.45}$$

où $P_{F,\zeta}$ est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc}\, exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \tag{3.46}$$

P_{cc} et T_{cc} sont respectivement la pression et la température de référence qui correspondent à un point de la courbe de saturation du carburant. L_v est la chaleur latente massique d'évaporation qui représente la différence entre l'enthalpie gazeuse et liquide du carburant à la température de référence T_{ref} :

$$L_v = \Delta h_{s,F}\left(T_{ref}\right) = h_{s,F}\left(T_{ref}\right) - h_{s,p}\left(T_{ref}\right) \tag{3.47}$$

Dans l'Eq. 3.46, la variable manquante est la température de l'interface T_ζ que l'on suppose égale à celle de la goutte : $T_\zeta = T_p$ (cf. section 3.2.5, H3). Dans les Eq. 3.42 et 3.44, la condition ∞ correspond à l'état du gaz non pertubé par la présence de la goutte. Dans le cadre des écoulements dilués (cf. section 3.2.5, H5), on suppose que la distance inter-gouttes est suffisamment grande pour que les gouttes ne s'influencent pas mutuellement. Par conséquent, l'état ∞ est représenté par la valeur locale eulérienne dans la phase gazeuse.

D'après l'hypothèse H9 (cf. section 3.2.5), à la position $\mathbf{x}$ et à l'instant t, toutes les gouttes possèdent la même température T_p donc le même nombre de Spalding B_M. Par ailleurs, malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le nombre de Sherwood (Eq. 3.40) est également constant à $\mathbf{x}$ et t donnés. En rappelant que le spray est supposé monodisperse (cf. section 3.2.5, H8), le taux d'évaporation moyen du spray Γ est finalement obtenu à partir du taux d'évaporation lagrangien $\dot{m}_p$ donné par l'Eq. 3.39 en appliquant la moyenne définie par l'Eq. 3.38 :

$$\Gamma = \pi \breve{n}_l d\, Sh\, [\rho D_F] \ln\left(1 + B_M\right) \tag{3.48}$$

Taux de transfert de chaleur

Le taux de transfert de masse $\dot{m}_p$ étant connu, on cherche à déterminer le taux de transfert de chaleur entre phases. On estime le flux conductif gazeux à l'interface à partir de la loi de Stefan dérivée pour une

particule en l'absence de changement de phase :

$$\phi_g^c = \left(-4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr}\right)_{\zeta^+} = \pi d Nu \lambda \left(T_\zeta - T_\infty\right) \frac{ln(B_T+1)}{B_T} \tag{3.49}$$

Nu est le nombre de Nusselt que l'on exprime de façon analogue au nombre de Sherwood (Eq. 3.40) en utilisant la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \tag{3.50}$$

La conductivité thermique du gaz λ est obtenue à partir du nombre de Prandtl Pr :

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \tag{3.51}$$

B_T est le coefficient e Spalding pour la température défini par :

$$B_T = (1 + B_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1 \tag{3.52}$$

où le nombre de Lewis pour l'espèce évaporante est : $Le_F = Sc_F/Pr$.

Le bilan d'énergie à l'interface s'écrit :

$$\phi_p^t + \phi_g^t = 0 \tag{3.53}$$

$$\text{soit :} \quad \phi_p^{\text{ev}} + \phi_p^c + \phi_g^{\text{ev}} + \phi_g^c = 0 \tag{3.54}$$

$$\text{avec :} \quad \phi_p^{\text{ev}} = \dot{m}_p h_{s,p}(T_\zeta) \quad \text{et} \quad \phi_g^{\text{ev}} = -\dot{m}_p h_{s,F}(T_\zeta) \tag{3.55}$$

ϕ_p^t et ϕ_g^t sont les flux totaux d'enthalpie entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^c et ϕ_g^c sont les flux conductifs entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^{ev} et ϕ_g^{ev} sont les flux d'enthalpie par changement de phase dans la goutte et dans le gaz respectivement, dont la somme vaut ϕ^{ev} :

$$\phi^{\text{ev}} = \dot{m}_p \left(h_{s,p}(T_\zeta) - h_{s,F}(T_\zeta)\right) = \dot{m}_p \Delta h_{s,F}\left(T_\zeta\right) = \phi_g^c + \phi_p^c \tag{3.56}$$

L'Eq. 3.56 signifie que l'enthalpie absorbée par évaporation ($\phi^{\text{ev}} < 0$) imposée par la loi de Spalding (Eq. 3.39) est puisée dans le gaz via le flux conductif ϕ_g^c (généralement, le gaz est plus chaud que la goutte d'où : $\phi_g^c < 0$). L'excès/le défaut d'enthalpie est fourni/prélevé à la phase liquide via le flux conductif ϕ_p^c.

Les différents taux de variation d'énergie dans le spray et dans le gaz sont notés de la façon suivante :

Taux de transfert de chaleur	*vers le gaz*	*vers le liquide*
par changement de phase	Λ	Λ_l
par conduction thermique	Φ	Φ_l
total	$\Pi = \Lambda + \Phi$	$\Pi_l = \Lambda_l + \Phi_l$

À partir de la moyenne d'ensemble $\{\cdot\}_l$ des flux d'enthalpie par conduction et évaporation d'une goutte isolée, on exprime les taux de transferts de chaleur du spray Λ, Λ_l, Φ et Φ_l en fonction des variables

lagrangiennes, soit respectivement :

$$\Lambda = \breve{n}_l \left\{-\dot{m}_p h_{s,F}\left(T_\zeta = T_p\right)\right\}_l \tag{3.57}$$
$$\Lambda_l = \breve{n}_l \left\{\dot{m}_p \left(h_{s,p}\left(T_\zeta = T_p\right) + h_{s,corr}\right)\right\}_l \tag{3.58}$$
$$\Phi = \breve{n}_l \left\{\phi_g^c\right\}_l \tag{3.59}$$
$$\Phi_l = \breve{n}_l \left\{\phi_p^c\right\}_l \tag{3.60}$$

La signification de la correction de référence de l'enthalpie $h_{s,corr}$ dans l'Eq. 3.58 est précisée dans la sous-section suivante. Le bilan interfacial d'enthalpie à l'échelle du spray s'écrit de la façon suivante :

$$\Pi + \Pi_l = \Lambda + \Phi + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \tag{3.61}$$

Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le nombre de Nusselt (Eq. 3.40) est constant pour toutes les particules à la position $\mathbf{x}$ et au temps t. On obtient alors les taux de transfert de chaleur du spray en fonction des variables moyennes liquides et des variables gazeuses :

$$\Lambda = \Gamma h_{s,F}(\breve{T}_l) \tag{3.62}$$
$$\Lambda_l = -\Gamma\left(\breve{h}_{s,l} - h_{s,corr}\right) \tag{3.63}$$
$$\Phi = \pi \breve{n}_l d Nu \lambda \left(\breve{T}_l - T_\infty\right) \frac{ln(B_T + 1)}{B_T} \tag{3.64}$$
$$\Phi_l = -\left(\Lambda + \Phi + \Lambda_l\right) \tag{3.65}$$

Valeur de référence pour l'enthalpie liquide

Une précaution est nécessaire lorsqu'on calcule le flux d'enthalpie dans la phase liquide via le bilan interfacique faisant intervenir les enthalpies gazeuses (Eq. 3.55). En effet, l'enthalpie liquide $h_{s,p}\left(T_\zeta\right)$ est définie à partir d'une valeur de référence différente de celle de l'enthalpie gazeuse $h_{s,F}\left(T_\zeta\right)$. Pour tenir compte de cet écart de référence, on ajoute le terme suivant au flux d'enthalpie dans la phase liquide :

$$+\dot{m}_p h_{s,corr} \qquad \text{avec} \quad h_{s,corr} = h_{s,F}\left(T_{l,ref}\right) - L_v \tag{3.66}$$

L'Eq. 3.66 assure que le saut interfacial d'enthalpie sensible est bien égal à l'enthalpie latente d'évaporation.

Coefficients de transport diffusif

Dans les Eq. 3.39 et 3.49, les propriétés de transport diffusif sont supposées constantes lors de l'intégration des équations de conservation. En réalité, les coefficients $[\rho D_F]$ et λ varient du fait du changement de composition et de température entre r_ζ et l'infini. Cette variation peut être prise en compte en choisissant judicieusement les valeurs de référence pour le calcul de ces coefficients :

$$T_{ref} = (1-a)\, T_\zeta + a T_\infty \tag{3.67}$$
$$Y_{k,ref} = (1-a)\, Y_{k,\zeta} + a Y_{k,\infty} \tag{3.68}$$

où $a = 1/3$ comme préconisé par Hubbard *et al.* [83] et Versaevel [224].

Chapitre 4

Équations pour la LES diphasique réactive

Dans ce chapitre, on présente tout d'abord les équations de conservation pour le gaz (section 4.1) puis les modèles de sous-maille correspondants (section 4.2). Le filtrage LES des équations de la phase liquide est décrit dans la section 4.3 et la modélisation du mouvement de sous-maille liquide est détaillée dans la section 4.4. La section 4.5 présente le modèle de combustion turbulente choisi dans cette étude : le modèle de flamme épaissie. Enfin, dans la section 6, une étude détaillée d'une cinétique chimique réduite pour le couple H_2/O_2 est proposée.

4.1 Équations LES pour la phase gazeuse

4.1.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage consiste à définir la quantité filtrée $\overline{f}$ comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial $G_\triangle$ de taille caractéristique $\triangle$:

$$\overline{f}\left(x\right) = \int f\left(x\right) G_\triangle\left(x' - x\right) dx' \tag{4.1}$$

Le filtre $G_\triangle$ est classiquement de type boîte ou gaussien [177]. La quantité filtrée $\overline{f}$ est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \overline{f}$. Pour les écoulements à masse volumique variable, il est pratique d'utiliser une moyenne pondérée par la masse volumique ou *moyenne de Favre*, définie par :

$$\overline{\rho}\widetilde{f} = \overline{\rho f} \tag{4.2}$$

On obtient les équations de conservation de type LES en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 2.1) :

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}} \; = \; \overline{\mathbf{s}} \tag{4.3}$$

où $\overline{\mathbf{s}}$ est le terme source filtré et $\overline{\mathbf{F}}$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions :

$$\overline{\mathbf{F}} = \overline{\mathbf{F}}^I + \overline{\mathbf{F}}^V + \overline{\mathbf{F}}^t \tag{4.4}$$

avec

tenseur des flux convectifs résolus :
$$\overline{\mathbf{F}}^I = \left(\overline{\mathbf{f}}^I, \overline{\mathbf{g}}^I, \overline{\mathbf{h}}^I\right)^T \tag{4.5}$$

tenseur des flux diffusifs résolus :
$$\overline{\mathbf{F}}^V = \left(\overline{\mathbf{f}}^V, \overline{\mathbf{g}}^V, \overline{\mathbf{h}}^V\right)^T \tag{4.6}$$

tenseur des flux de sous-maille :
$$\overline{\mathbf{F}}^t = \left(\overline{\mathbf{f}}^t, \overline{\mathbf{g}}^t, \overline{\mathbf{h}}^t\right)^T \tag{4.7}$$

L'échelle de coupure est fixée par la taille de la maille (filtrage implicite). De manière classique, on suppose qu'il y a commutation entre l'opérateur de filtrage et les opérateurs de dérivée partielle.

4.1.2 Flux convectifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux convectifs résolus $\overline{\mathbf{F}}^I$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u} + \overline{P\,u} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{u} \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{v} + \overline{P\,v} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{v} \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{w}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{w} + \overline{P\,w} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{w} \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

4.1.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs résolus $\overline{\mathbf{F}}^V$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xx}} + \overline{v\,\tau_{xy}} + \overline{w\,\tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix}$$

$$\overline{\mathbf{g}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xy}} + \overline{v\,\tau_{yy}} + \overline{w\,\tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

$$\overline{\mathbf{h}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xz}} + \overline{v\,\tau_{yz}} + \overline{w\,\tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}$$

D'après Poinsot et Veynante [157] Chap. 4, les termes de diffusion en LES s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right)} \tag{4.10}$$

approximation :
$$\overline{\tau_{ij}} \approx 2\overline{\mu}\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}\right) \tag{4.11}$$

avec :
$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}\right) \tag{4.12}$$

$$\overline{\mu} \approx \mu(\widetilde{T}) \tag{4.13}$$

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

en non réactif :
$$\overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho\left(D_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c\right)} \tag{4.14}$$

approximation :
$$\overline{J_{i,k}} \approx -\overline{\rho}\left(\overline{D}_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i}^c\right) \tag{4.15}$$

avec :
$$\widetilde{V_i}^c = \sum_{k=1}^{N}\overline{D}_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.16}$$

$$\overline{D}_k \approx \frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho}\,Sc_k} \tag{4.17}$$

Fux de chaleur $\overline{q_i}$

$$\text{en non réactif :} \quad \overline{q_i} = -\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \tag{4.18}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{q_i} \approx -\overline{\lambda} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k}}\, \widetilde{h}_{s,k} \tag{4.19}$$

$$\text{avec :} \quad \overline{\lambda} \approx \frac{\overline{\mu}\, \overline{C}_p(\widetilde{T})}{Pr} \tag{4.20}$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont considérées comme suffisamment faibles pour être évaluées par un modèle de type gradient. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille dont la modélisation est présentée dans la section 4.1.4.

4.1.4 Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \; \overline{\mathbf{g}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \; \overline{\mathbf{h}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix} \tag{4.21}$$

Les différents termes s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}\,(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j) \tag{4.22}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll} \right) \tag{4.23}$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par le modèle de sous-maille et détaillée en section 4.2.

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

$$\overline{J_{i,k}}^t = \overline{\rho} \left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k \right) \tag{4.24}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{J_{i,k}}^t = -\overline{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V}_i^{c,t} \right) \tag{4.25}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^{N} D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.26}$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \tag{4.27}$$

De manière usuelle, le nombre de Schmidt turbulent est fixé à $Sc_k^t = 1$ pour toutes les espèces.

Flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u}_i \widetilde{E}\right) \tag{4.28}$$

$$\textit{modèle :} \qquad \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k}}^t \, \widetilde{h}_{s,k} \tag{4.29}$$

$$\text{avec :} \qquad \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \tag{4.30}$$

Dans les simulations présentées ici, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.7$, valeur classique en RANS. Pour la LES, on trouve dans la littérature des valeurs pouvant varier de 0.2 à plus de 1 en fonction de l'application.

4.2 Modèles de sous-maille

L'effet du mouvement de sous-maille sur le mouvement résolu est représenté par le tenseur des flux de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ dont la modélisation est requise. Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (notée SGS pour *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. Une telle approche suppose que les effets de sous-maille soient uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse est valide si l'on applique la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov [94]. En introduisant la notion de viscosité turbulente, on définit la forme générale suivante pour les modèles SGS :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}\ (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j) \tag{4.31}$$

$$\textit{modèle :} \qquad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\,\overline{\tau_{ll}}^t\,\delta_{ij} \tag{4.32}$$

$$\text{avec :} \qquad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\,\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij} \tag{4.33}$$

où $\overline{\tau_{ij}}^t$ 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 différents modèles se distinguent par la définition et le calcul de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t.

4.2.1 Modèle de Smagorinsky

Dans le modèle de Smagorinsky classique, la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_S \triangle)^2 \sqrt{2\,\widetilde{S}_{ij}\,\widetilde{S}_{ij}} \tag{4.34}$$

$$\text{avec :} \qquad C_S = (0.1 - 0.18) \qquad \text{suivant la configuration} \tag{4.35}$$

Développé dans les années 1960, le modèle de Smagorinsky [197] fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur de divers types d'écoulement. Il est très répandu du fait de sa simplicité. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, il fournit le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Toutefois, ce modèle est connu pour être trop dissipatif, particulièrement près des parois, et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée [176].

4.2.2 Modèle de Smagorinsky filtré

Dans le modèle Smagorinsky filtré [54], la viscosité turbulente s'ecrit :

$$\nu_t = (C_{S_F}\triangle)^2\sqrt{2\,HP(\widetilde{S}_{ij})\,HP(\widetilde{S}_{ij})} \tag{4.36}$$

$$\text{avec :} \quad C_{S_F} = 0.37 \tag{4.37}$$

Dans l'Eq. 4.36, $HP(\widetilde{S}_{ij})$ est le tenseur des déformations résolu obtenu à partir d'un champ de vitesse filtré à travers un filtre passe-haut. Ce modèle a été développé afin d'améliorer la représentation de phénomènes locaux typiques des écoulements turbulents [54]. Avec le modèle de Smagorinsky filtré, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

4.2.3 Modèle WALE

Le modèle WALE (pour *Wall-Adapting Local Eddy-viscosity*) a été développé par Nicoud et Ducros [141] afin de pallier le défaut du modèle de Smagorinsky classique (cf. section 4.2.1) concernant les écoulements en proche paroi. Dans ce modèle, la viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w\triangle)^2\frac{(s^d_{ij}s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2}+(s^d_{ij}s^d_{ij})^{5/4}} \tag{4.38}$$

C_w est la constante du modèle de Smagorinsky dont la valeur est fixée à : $C_w = 0.4929$. s^d_{ij} est la partie déviatrice du taux de déformations résolu :

$$s^d_{ij} = \frac{1}{2}\,(\widetilde{g}^2_{ij} + \widetilde{g}^2_{ji}) - \frac{1}{3}\,\widetilde{g}^2_{kk}\,\delta_{ij} \tag{4.39}$$

où $\widetilde{g}_{ij}$ est la partie irrotationnelle du tenseur des contraintes résolu.

D'autres modèles plus complexes existent. On peut citer notamment le modèle de dynamique de Germano [68] et les modèles à fonction de structure développés par Lesieur et ses collaborateurs [115, 116]. Dans le cadre du calcul réactif, l'utilisation des modèles complexes développés pour le non-réactif est encore à mettre au point et on se limite dans cette étude aux modèles simples. Dans la présente étude, le modèle WALE a été préféré au modèle de Smagorinsky car il permet de réduire l'effet de l'absence de traitement aux parois (cf. Thobois [217]).

4.3 Équations LES pour la phase dispersée

4.3.1 Filtrage LES des équations de conservation

Le filtrage LES de la phase dispersée est analogue à celui de la phase gazeuse. La moyenne de Favre d'une fonction eulérienne mésoscopique $\breve{f}_l$ de la phase dispersée est similaire à celle d'une fonction f de la phase gazeuse et s'obtient en remplaçant la masse volumique gazeuse ρ par la fraction volumique liquide mésoscopique $\breve{\alpha}_l$ dans l'Eq. 4.2 :

$$\overline{\alpha}_l \widehat{f}_l = \overline{\breve{\alpha}_l \breve{f}_l} \tag{4.40}$$

où $\overline{\alpha}_l$ est la fraction volumique de liquide filtrée au sens de la LES. Pour alléger les notations, on omet l'indice $\breve{}$ dans la mesure où le filtrage LES de la phase dispersée ne s'applique que sur des quantités initialement produites par le filtrage statistique mésoscopique.

Afin d'avoir une équivalence entre la moyenne de Favre basée sur la fraction volumique et la densité de gouttes, on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle de la taille du filtre. Cela revient à négliger les effets de variance de sous-maille du diamètre des gouttes : $\overline{d} \approx d$. On a alors :

$$\overline{\breve{n}_l \breve{f}_l} = \overline{\frac{6\breve{\alpha}_l}{\pi d^3} \breve{f}_l} = \frac{6}{\pi d^3} \overline{\alpha}_l \widehat{f}_l = \overline{n}_l \widehat{f}_l \tag{4.41}$$

où $\overline{n}_l$ est la densité de goutte filtrée.

En appliquant la procédure de filtrage aux équations de conservation eulériennes de la phase dispersée, on obtient les équations de conservation LES pour le spray :

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}}_l \; = \; \overline{\mathbf{s}}_l \tag{4.42}$$

où $\overline{\mathbf{w}}_l = (\,\overline{n}_l,\, \rho_l \overline{\alpha}_l,\, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l,\, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l,\, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l,\, \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{h}_l\,)^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec $\hat{u}_l$, $\hat{v}_l$ et $\hat{w}_l$ les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\widehat{\mathbf{u}}_l = (\hat{u}_l, \hat{v}_l, \hat{w}_l)^T$. $\overline{\mathbf{s}}_l$ est le terme source filtré et $\overline{\mathbf{F}}_l$ est le tenseur des flux filtrés composé de deux contributions :

$$\overline{\mathbf{F}}_l \;=\; \overline{\mathbf{F}}_l^M + \overline{\mathbf{F}}_l^t \tag{4.43}$$

avec

$$\text{tenseur des flux mésoscopiques résolus :} \quad \overline{\mathbf{F}}_l^M \;=\; \left(\overline{\mathbf{f}}_l^M, \overline{\mathbf{g}}_l^M, \overline{\mathbf{h}}_l^M\right)^T \tag{4.44}$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille :} \quad \overline{\mathbf{F}}_l^t \;=\; \left(\overline{\mathbf{f}}_l^t, \overline{\mathbf{g}}_l^t, \overline{\mathbf{h}}_l^t\right)^T \tag{4.45}$$

4.3.2 Flux mésoscopiques résolus

Les trois composantes du tenseur des flux mésoscopiques résolus $\overline{\mathbf{F}}_l^M$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l\hat{u}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l^2 \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l\hat{v}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l\hat{w}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l\widehat{h}_l \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l\hat{v}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{v}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l\hat{v}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{v}_l^2 \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{v}_l\hat{w}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{v}_l\widehat{h}_l \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l\hat{w}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{w}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_l\hat{w}_l \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{v}_l\widehat{w} \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{w}_l^2 \\ \rho_l\overline{\alpha}_l\hat{w}_l\widehat{h}_l \end{pmatrix} \tag{4.46}$$

4.3.3 Flux de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}_l^t$ s'écrivent :

$$\overline{\mathbf{f}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xx}^t \\ -\overline{\tau}_{l,xy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,xz}^t \\ \overline{q}_{h,x}^t \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yz}^t \\ \overline{q}_{h,y}^t \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xz}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yz}^t \\ -\overline{\tau}_{l,zz}^t \\ \overline{q}_{h,z}^t \end{pmatrix} \tag{4.47}$$

$\overline{\tau}_l^t$ est le tenseur des contraintes de sous-maille de la phase dispersée défini par :

$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}u_{l,j}} - \widehat{u}_{l,i}\widehat{u}_{l,j}\right) \tag{4.48}$$

$\overline{\mathbf{q}}_h^t$ est le flux de sous-maille de l'enthalpie sensible liquide défini par :

$$\overline{q}_{h,i}^t = \rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}h_{s,l}} - \widehat{u}_{l,i}\widehat{h}_l\right) \tag{4.49}$$

Par la suite, on suppose que les effets de sous-maille sur l'enthalpie liquide résolue sont négligeables : $\overline{\mathbf{q}}_h^t = 0$. La modélisation du terme $\overline{\tau}_l^t$ est décrite dans la section 4.4.

4.3.4 Termes sources filtrés

Le terme source filtré $\overline{\mathbf{s}}_l$ représente les échange filtrés avec la phase gazeuse et s'écrit :

$$\overline{\mathbf{s}}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ -\overline{\Gamma} \\ \overline{\Gamma}_{u,x} + \overline{F}_{d,x} \\ \overline{\Gamma}_{u,y} + \overline{F}_{d,y} \\ \overline{\Gamma}_{u,z} + \overline{F}_{d,z} \\ \overline{\Lambda}_l + \overline{\Phi}_l \end{pmatrix} \tag{4.50}$$

Les composantes de $\overline{\mathbf{s}}_{g\text{-}l}$ sont modélisées de la façon suivante :

Taux d'évaporation $\overline{\Gamma}$

$$\overline{\Gamma} = -\overline{\breve{n}_l \{\dot{m}_p\}_l} \tag{4.51}$$

$$= \overline{\pi \breve{n}_l d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1+B_M)} \tag{4.52}$$

approximation :
$$\overline{\Gamma} \approx \pi \overline{n}_l d\, \overline{Sh} \frac{\overline{\mu}}{Sc_F} \ln\left(1+\overline{B}_M\right) \tag{4.53}$$

avec :
$$\overline{Sh} \approx 2 + 0.55 \overline{Re}_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3} \tag{4.54}$$

$$\overline{B}_M \approx \frac{Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l) - \widetilde{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l)} \tag{4.55}$$

Taux de variation de quantité de mouvement par évaporation $\overline{\mathbf{\Gamma}}_u$

$$\overline{\Gamma}_{u,i} = -\overline{\Gamma \breve{u}_{l,i}} \tag{4.56}$$

approximation :
$$\overline{\Gamma}_{u,i} \approx -\overline{\Gamma} \widehat{u}_{l,i} \tag{4.57}$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par évaporation $\overline{\Lambda}_l$

$$\overline{\Lambda}_l = -\overline{\Gamma \left(\breve{h}_{s,l} - h_{s,corr}\right)} \tag{4.58}$$

approximation :
$$\overline{\Lambda}_l \approx -\overline{\Gamma} \left(\widehat{h}_l - h_{s,corr}\right) \tag{4.59}$$

Taux de variation de quantité de mouvement par la traînée $\overline{\mathbf{F}}_d$

$$\overline{F}_{d,i} = \overline{\frac{\rho_l \overline{\alpha}_l}{\tau_p} (u_i - \breve{u}_{l,i})} \tag{4.60}$$

approximation :
$$\overline{F}_{d,i} \approx \frac{\rho_l \overline{\alpha}_l}{\overline{\tau}_p} (\widetilde{u}_i - \widehat{u}_{l,i}) \tag{4.61}$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par conduction thermique $\overline{\Phi}_l$

$$\overline{\Phi}_l = -\overline{\Lambda}_l - \overline{\Lambda} - \overline{\Phi} \tag{4.62}$$

avec :
$$\overline{\Lambda} = \overline{\Gamma h_{s,F}} \tag{4.63}$$

$$\overline{\Phi} = \overline{\breve{n}_l \{\pi d\, Nu\, \lambda\, (T_\zeta - T_\infty)\}_l} \tag{4.64}$$

approximés par :
$$\overline{\Lambda} \approx \overline{\Gamma} h_{s,F}(\widehat{T}_l) \tag{4.65}$$

$$\overline{\Phi} \approx \pi \overline{n}_l d\, \overline{Nu}\, \overline{\lambda} \left(\widehat{T}_l - \widetilde{T}\right) \frac{ln(\overline{B}_T + 1)}{\overline{B}_T} \tag{4.66}$$

On obtient finalement :

$$\overline{\Phi}_l \approx \overline{\Gamma} \left(\widehat{h}_l - h_{s,corr} - h_{s,F}(\widehat{T}_l)\right) - \pi \overline{n}_l d\, \overline{Nu}\, \overline{\lambda} \left(\widehat{T}_l - \widetilde{T}\right) \frac{ln(\overline{B}_T + 1)}{\overline{B}_T} \tag{4.67}$$

avec :
$$\overline{Nu} \approx 2 + 0.55 \overline{Re}_p^{1/2} Pr^{1/3} \tag{4.68}$$

et :
$$\overline{\overline{B}_T} \approx (1 + \overline{B}_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1 \tag{4.69}$$

où
$$\overline{Le_F} = Sc_F / Pr \tag{4.70}$$

Connaissant le terme source $gaz \rightarrow liquide$ filtré $\overline{\mathbf{s}}_{g\text{-}l}$, on en déduit le terme source $liquide \rightarrow gaz$ filtré $\overline{\mathbf{s}}_{l\text{-}g}$:

$$\overline{\mathbf{s}}_{l\text{-}g} = \begin{pmatrix} \overline{\Gamma}\widehat{u}_{l,x} - \overline{F}_{d,x} \\ \overline{\Gamma}\widehat{u}_{l,y} - \overline{F}_{d,y} \\ \overline{\Gamma}\widehat{u}_{l,z} - \overline{F}_{d,z} \\ \overline{\Lambda} + \overline{\Phi} + \widetilde{u}_i \left(\overline{\Gamma}\widehat{u}_{l,i} - \overline{F}_{d,i}\right) \\ \overline{\Gamma}\delta_{k,F} \end{pmatrix} \tag{4.71}$$

où $\overline{\Lambda}$ et $\overline{\Phi}$ sont donnés par les Eq. 4.65 et 4.66 respectivement.

4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée

Moreau [136] a montré que la modélisation du mouvement mésoscopique de sous-maille de la phase dispersée nécessitait de prendre en compte les effets de compressibilité. Riber *et al.* [168] proposent d'utiliser un modèle de type Smagorinsky [197] pour la partie déviatorique du tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques $\overline{\tau}_l^t$. Les effets compressibles sont représentés par la partie diagonale de ce tenseur dont l'estimation est donnée par un modèle de Yoshizawa [233] :

$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \overline{\alpha}_l \left(\widehat{u_{l,i}u_{l,j}} - \widehat{u}_{l,i}\widehat{u}_{l,j}\right) \tag{4.72}$$

modèle :
$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = 2\rho_l \overline{\alpha}_l \nu_{l,t} \left(\widehat{S}_{l,ij} - \frac{1}{3}\widehat{S}_{l,kk}\delta_{ij}\right) + 2\rho_l \overline{\alpha}_l \kappa_{l,t} \widehat{S}_{l,ij}\delta_{ij} \tag{4.73}$$

avec :
$$\widehat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{l,j}}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\frac{\partial \widehat{u}_{l,k}}{\partial x_k}\,\delta_{ij} \tag{4.74}$$

modèle de Smagorinsky :
$$\nu_{l,t} = (C_{S,l}\triangle)^2 \sqrt{2\,\widehat{S}_{l,ij}\,\widehat{S}_{l,ij}} \tag{4.75}$$

modèle de Yoshizawa :
$$\kappa_{l,t} = 2C_{V,l}\triangle^2 \widehat{S}_{l,ij} \tag{4.76}$$

Les constantes du modèle sont fixées à partir de tests *a priori* [137] : $C_{S,l} = 0.16$ et $C_{V,l} = 0.012$.

4.5 Modèle de combustion turbulente

4.5.1 Modélisation de la combustion turbulente

Les travaux portant sur la modélisation de l'interaction entre la turbulence et la combustion ont débuté il y a plus de trente ans avec les recherches de Spalding [202] pour la simulation RANS. Les études consacrées à la combustion turbulente pour la LES n'ont commencé que dans les années 90 et de nombreuses questions restent encore ouvertes.

La difficulté de la simulation en combustion turbulente est liée en particulier au rapport d'échelle entre l'épaisseur de la zone réactive (dans le cas où le régime de *flamelet* est valable) et la dimension des mailles de la grille de calcul. Pour les LES réactives dans les moteurs fusée, la taille des mailles

est de l'ordre du dixième de millimètre alors que l'épaisseur du front de flamme est inférieure au centième de millimètre pour la combustion hydrogène-oxygène. Dans la modélisation de la combustion, on fait généralement une distinction entre les modèles pour les régimes de prémélange, les régimes non prémélangés et partiellement prémélangés. On trouve une description de l'ensemble de ces modèles RANS et LES dans la revue de Veynante et Vervisch [225]. Une revue plus récente de Bilger et al. [12] fait état des différentes théories et modèles pour les trois régimes de combustion turbulente. Pitsch [154] fait également une revue des modèles spécifiques à la LES.

Dans la plupart des applications industrielles, le régime de combustion est rarement purement prémélangé ou non-prémélangé. La raison principale est que le carburant est généralement injecté sous forme liquide, et les processus d'évaporation couplés aux effets turbulents induisent des stratifications ou inhomogénéités de mélange. Dans ces conditions, la combustion est pilotée par les mécanismes du régime partiellement prémélangé.

Les études de Légier *et al.* [114], Truffin [219], Sengissen *et al.* [188] et Boileau [18] ont montré les capacités du modèle de flamme épaissie à traiter des problèmes de combustion partiellement prémélangée en configurations complexes et avec des effets diphasiques [18]. Dans la présente étude, l'objectif est d'utiliser le modèle de flamme épaissie implanté dans AVBP dans des simulations d'allumages moteurs fusées, faisant intervenir les trois régimes de combustion.

Les sections suivantes décrivent les différentes déclinaisons du modèle de flamme épaissie : modèle de flamme épaissie en DNS (TF, section 4.5.2), modèle de flamme épaissie en LES (TFLES, section 4.5.3) et enfin le modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES, section 4.5.4) permettant son extension aux cas partiellement prémélangés.

4.5.2 Flamme laminaire épaissie (TF)

Le concept du modèle TF (pour *Thickened Flame* en anglais) est d'augment l'épaisseur de la flamme de manière à pouvoir la résoudre sur les maillages LES tout en s'assurant que la vitesse de flamme épaissie reste égale à la vitesse de flamme DNS. Butler et O'Rourke [26] sont les premiers à avoir proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange pour la propager sur un maillage grossier. Une analyse dimensionnelle classique [231] montre que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et la constante pré-exponentielle A (cf. section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \tag{4.77}$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \tag{4.78}$$

En se basant sur les équations Eq. 4.77 et 4.78, il est possible d'épaissir une flamme prémélangée sans altérer sa vitesse de propagation. En effet en multipliant les coefficients de diffusion par un facteur F (facteur d'épaississement) et en divisant le taux de réaction de la flamme par ce même facteur, on obtient une flamme d'épaisseur $\delta_L^1 = F\delta_L^0$ dont la vitesse de consommation est préservée par rapport à la DNS :

$S_L^1 = \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{F}} S_L^0$. Le modèle de flamme épaissie conduit aux modifications suivantes :

$$\begin{array}{ccc} & \text{épaississement} & \\ D_{th} & \longrightarrow & F D_{th} \quad (4.79) \\ D_k & \longrightarrow & F D_k \quad (4.80) \\ \dot{\omega}_T & \longrightarrow & \dot{\omega}_T / F \quad (4.81) \\ \dot{\omega}_k & \longrightarrow & \dot{\omega}_k / F \quad (4.82) \end{array}$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont prédits par le schéma cinétique qui utilise une loi d'Arrhénius (cf. Eq. 2.38).

Toutefois, dans le cas d'écoulements turbulents, l'épaississement a pour effet de modifier le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme. Pour les études en LES, le modèle doit donc être complété afin de corriger ces effets. Le modèle complet TF en LES est décrit dans la section 4.5.3.

4.5.3 Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES)

La modification artificielle de l'épaisseur d'une flamme conduit à la modification de son nombre de Damköhler : $Da = \tau_t/\tau_c = (l_t S_l^0)/(u' \delta_l^0)$, d'un facteur F. Il y a donc tout un ensemble de tourbillons qui n'a plus d'effet sur la flamme LES alors que la flamme DNS y était sensible (les échelles comprises entre δ_l^0 et $F\delta_l^0$).

Le but du modèle TFLES est de corriger la perte de sensibilité à la turbulence de la flamme due à l'épaississement. Une des hypothèses principales du modèle est que l'épaisseur de la flamme est à tout instant plus petite que toutes les échelles de la turbulence auxquelles elle est sensible (le régime de flamme se situe en dessous de la limite de Klimov-Williams). Ce régime est dit de *flamelet* (du diagramme de combustion de Peters [149]). Dans un tel régime, la turbulence modifie la structure de la flamme en augmentant son plissement et son étirement local. Sous ces hypothèses la vitesse de flamme turbulente (S_T) est liée à la vitesse laminaire (S_l) par la relation [25] :

$$\frac{S_T}{S_l} = I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Sigma \, d\eta \; = \; I_0 \frac{A_T}{A_l} \tag{4.83}$$

où I_0 est le facteur d'étirement (Eq. 4.84), Σ la densité de surface de flamme, η la coordonnée normale au plan moyen de flamme et le rapport des surfaces de flammes turbulente et laminaire : A_T/A_l représente le **plissement de la flamme** (Fig. 4.1). Bray et Cant [25] définissent le facteur d'étirement par la relation suivante :

$$I_0 = \frac{\overline{S}_c}{S_l} \qquad \text{avec} \qquad S_c = \frac{1}{\rho_R} \int \dot{\omega}_R \, d\xi \tag{4.84}$$

où $\overline{S}_c$ est la moyenne temporelle de la vitesse locale de consommation S_c, ρ_R est la densité des gaz non brûlés, $\dot{\omega}_R$ le taux de consommation local de la flamme et ξ est la direction normale au front de flamme. L'épaississement d'une flamme turbulente a donc pour effet de modifier son plissement ainsi que son étirement local (cf. Fig. 4.2).

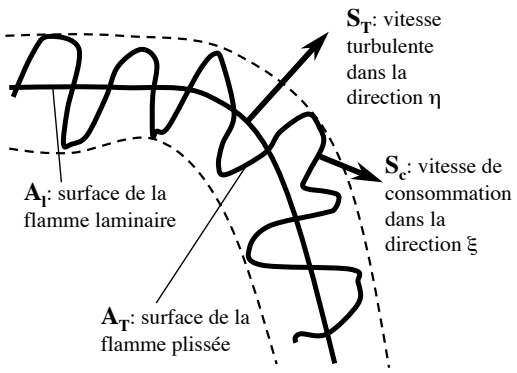


FIG. 4.1 - *Schéma d'une flamme plissée turbulente dans le régime de "flamelet".*

Colin et al. [40] proposent un modèle introduisant une fonction d'efficacité E construite à partir de calculs DNS d'interaction flamme/vortex pour corriger la perte des effets de plissement induite par l'épaississement. **Une hypothèse de ce modèle [40] est que l'étirement dû à la turbulence, augmente la surface de flamme mais son effet sur la vitesse de consommation locale est négligeable**. La vitesse de consommation locale est donc égale à la vitesse d'une flamme laminaire.

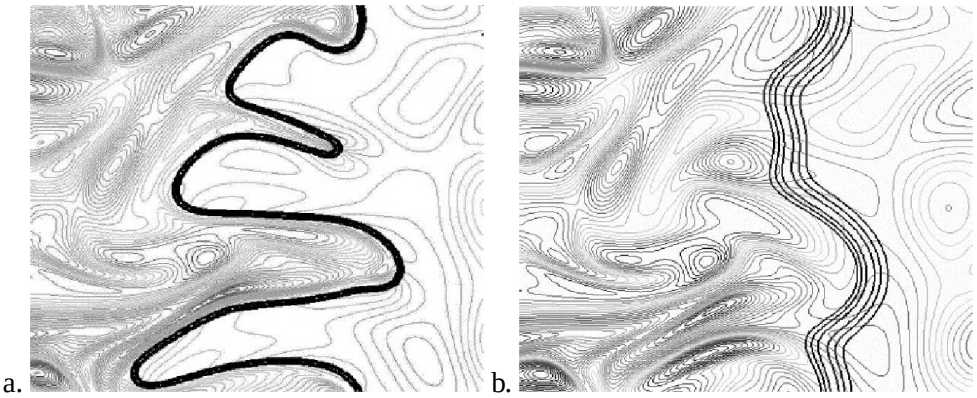


FIG. 4.2 - *DNS d'interaction flamme/turbulence [4, 157]. Flamme non épaissie (a.), flamme épaissie d'un facteur* $F = 5$ *(b.)*

Fonction d'efficacité E

On trouve une description complète de la fonction d'efficacité E dans l'article de Colin et al. [40]. Cette fonction a ensuite été améliorée par Charlette et al. [35]. L'étude menée par Colin et al. repose sur l'analyse de l'équation de transport de la densité de surface de flamme. En supposant qu'au niveau du front de flamme il y a un équilibre entre les termes de production et de destruction de la densité de

surface de flamme [40, 35], le coefficient de plissement $\Xi = A_T/A_l$ est lié à la vitesse turbulente locale de sous-maille par la relation :

$$\Xi(\delta_l^0) \simeq 1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0}\right)\frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \tag{4.85}$$

où α est une constante du modèle (son calcul est présenté plus bas) et la fonction Γ permet de prendre en compte le taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, dépendant de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e}, de la taille du filtre Δ_e et des caractéristiques de la flamme (Fig. 4.3).

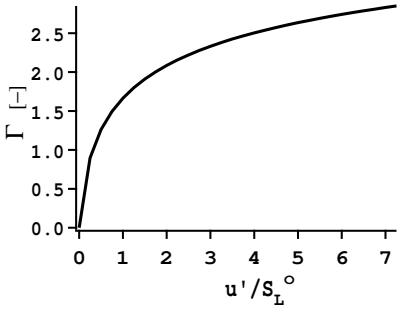


FIG. 4.3 - *Evolution de* Γ *en fonction du rapport de vitesse* u'_{Δ_e}/S_l^0 *pour* $\Delta_e/\delta_l^0 = 20$

Finalement la vitesse locale S_{LES} de la flamme LES corrigée est donnée par la relation liant la vitesse de flamme laminaire S_l^0 et la fonction d'efficacité E :

$$\frac{S_{LES}}{S_l^0} = \frac{A_{LES}}{A_l} = \frac{A_{LES}}{A_T}\frac{A_T}{A_l} = \frac{\Xi(\delta_l^1)}{\Xi(\delta_l^0)} = E \tag{4.86}$$

où $\Xi(\delta_l^1)$ est le coefficient de plissement de la flamme épaissie : $\delta_l^1 = F\delta_l^0$.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver la théorie de Damköhler : $S_T/S_L^0 \approx 1 + \beta u'/S_L^0$ (valable pour les faibles valeurs de u' [157]) Sous l'hypothèse des flammes minces et que Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t, le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 4.87 [40]. L'Eq. 4.88 qui définit α se déduit de l'Eq. 4.87.

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u'/S_l^0 = 1 + \alpha\Gamma_{l_t}\, u'/S_l^0 \tag{4.87}$$

$$\alpha = \beta\frac{2\ln(2)}{3c_{ms}\left(Re_t^{1/2} - 1\right)} \tag{4.88}$$

$$\text{avec :} \qquad Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \qquad \text{et} \qquad c_{ms} = 0.28 \tag{4.89}$$

La constante β est supposée proche de l'unité par Colin *et al.* [40].

4.5.4 Modèle de flamme épaissie dynamique

Principe de fonctionnement

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la section 4.5.3 est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées. Pour les flammes partiellement prémélangées, en revanche, ce modèle doit être ajusté pour ne pas perturber les processus de mélange en dehors de la zone de réaction.

Le modèle de flamme épaissie dynamique [114] (DTF pour *dynamically thickened flame* en anglais) a été développé de manière à ce que l'épaississement soit égale à F_{max} dans la zone réactive et $F = 1$ ailleurs (Fig. 4.4).

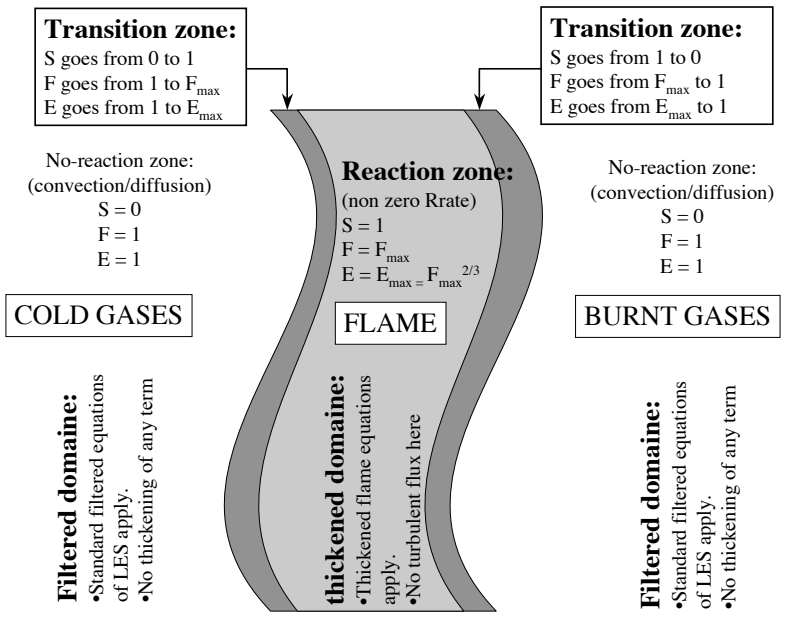


FIG. 4.4 - *Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF.*

L'épaississement dynamique F est défini par l'Eq. 4.90. Le senseur S défini par l'Eq. 4.91 évalue si la zone est réactive $(S = 1)$ ou non $(S = 0)$ à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant des paramètres du schéma cinétique : E_a, ν'_F et ν'_O.

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\, S \tag{4.90}$$

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \qquad \text{avec :} \quad \beta' = 500 \tag{4.91}$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}\right) \tag{4.92}$$

Un schéma de l'application du modèle DTF est présenté Fig. 4.5.

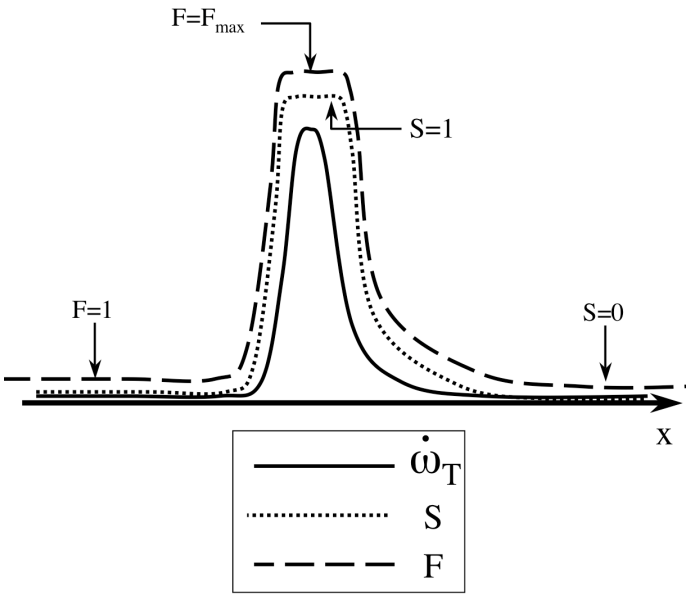


FIG. 4.5 - *Positionnement du senseur S et de l'épaississement F par rapport à la flamme $\dot{\omega}_T$.*

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement : $\Gamma_T = 0.5$. Une illustration de l'influence des paramètres Γ_T et β' est présentée Fig. 4.6. Ω_0

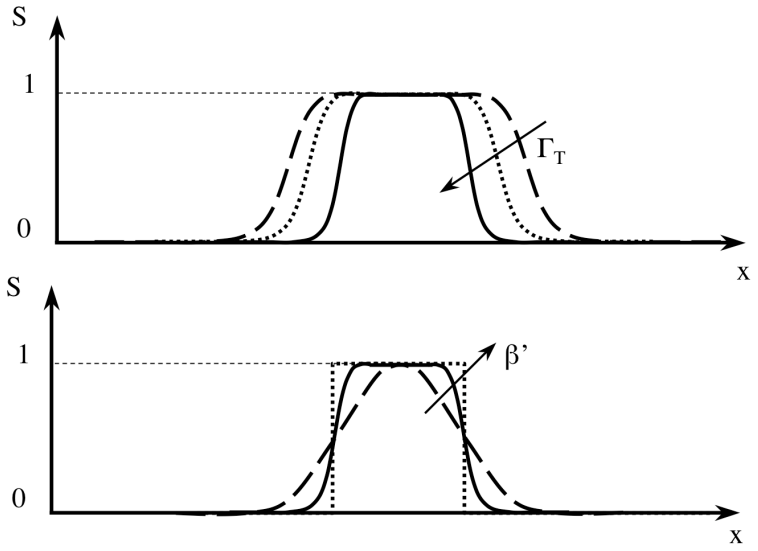


FIG. 4.6 - *Impacts des paramètres Γ_T et β' sur le senseur S.*

est déterminé en calculant le maximum de Ω dans une flamme laminaire prémélangée 1D non épaissie.

Il est à noter que la définition du senseur S basé sur la fonction Ω est défini ici pour une cinétique chimique à une seule réaction. Il sera montré dans la section suivante que son écriture sera modifiée pour le cas de la cinétique hydrogène-oxygène comportant plusieurs réactions (cf. section 6.8).

Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

Dans les calculs LES où la taille des mailles peut varier beaucoup, il est pratique d'adapter le facteur d'épaississement au maillage local. Pour ce faire, on évalue F_{max} selon l'expression suivante :

$$F_{max} = n\frac{\Delta x}{\delta_L^0} \tag{4.93}$$

où Δx est la taille locale de la maille et n est le nombre de cellules contenues dans l'épaisseur du front de flamme épaissi. La valeur $n = 5$ est généralement suffisante pour résoudre correctement le front de flamme en évitant les erreurs numériques dues à des gradients mal résolus.

Chapitre 5

Approche numérique

5.1 Discrétisation *Cell-Vertex*

Dans le cadre de la discrétisation par volumes finis des équations de Navier-Stokes compressible, trois approches sont principalement utilisées :

1. la formulation *Cell-Centered* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées au centre des cellules du maillage et les valeurs des éléments voisins sont moyennées au travers des limites de la cellule pour calculer les flux. Cette méthode a l'inconvénient de faire apparaître des oscillations numériques ;
2. la formulation *Vertex-Centered* : les variables sont stockées sur les noeuds du maillage et les lois de conservation sont appliquées sur des cellules *duales* ayant pour centres les noeuds du maillage ;
3. la formulation *Cell-Vertex* : les variables sont stockées sur les noeuds du maillage mais les lois de conservation sont réalisées sur les arrêtes entre deux noeuds. Cette méthode nécessite donc de distribuer l'information des noeuds vers les centres des cellules et réciproquement (cf. section suivante). Il a été montré théoriquement que cette approche garantissait une meilleur précision que les deux autres dans le cas de maillages non-structurés déformés.

Plus de détails sur ces méthodes de discrétisation sont accessibles dans la thèse de N. Lamarque [100].

5.1.1 Approche des résidus pondérés

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

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0} \tag{5.1}$$

où $\mathbf{w}$ est le vecteur des variables conservatives et $\mathbf{F}$ est le tenseur des flux de $\mathbf{w}$. Ce tenseur est composé d'une partie non visqueuse (indice I) et d'une partie visqueuse (indice V) :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I\left(\mathbf{w}\right) + \mathbf{F}^V\left(\mathbf{w}, \vec{\nabla}\mathbf{w}\right) \tag{5.2}$$

Les flux sont approchés dans chaque volume de contrôle pour en déduire le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par :

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \mathbf{F} \cdot \vec{n} d\mathcal{S} \tag{5.3}$$

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 hybrides. Le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.2 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. 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. Si l'on écrit le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.2 au travers d'une cellule quelconque, l'Eq. 5.2 devient :

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \mathbf{F}_i \cdot \vec{dS}_i, \tag{5.4}$$

où $\mathbf{F}_i$ est une approximation de $\mathbf{F}$ 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 dans les termes $\vec{dS}_i$ qui sont associés aux nœuds individuels de la cellule et non à ses faces. $\vec{dS}_i$ 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, $\sum_{i\in\Omega_j} \vec{dS}_i = \vec{0}$. La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume V_{Ω_j} est défini par :

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot \vec{dS}_i, \qquad \text{avec} \qquad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \tag{5.5}$$

Une fois les résidus calculés, on définit le schéma semi-discret par :

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k\in\Omega_j} D^k_{\Omega_j} V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \tag{5.6}$$

où $D^k_{\Omega_j}$ 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 $\sum_{k\in\Omega_j} D^k_{\Omega_j} = I$. L'Eq. 5.6 est résolue en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps.
La matrice de distribution est définie par :

$$D^k_{\Omega_j} = \frac{1}{n_n}(I + C\frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \vec{\mathcal{A}}_{\Omega_j} \cdot \vec{dS}_k), \tag{5.7}$$

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 : $C = n_n^2/2N_d$.

5.1.2 Calcul du pas de temps

Lorsqu'on fait l'intégration temporelle explicite de l'Eq. 5.6, le pas de temps est déterminé par le minimum, sur l'ensemble du domaine de calcul, du pas de temps acoustico-convectif Δt_{min} donné par la condition de Courant-Friedrichs-Levy (CFL) :

$$\Delta t_{min} = CFL \frac{\Delta x}{\|\vec{u}\| + c} \tag{5.8}$$

où Δx est la taille de la cellule, $\|\vec{u}\|$ est la norme de la vitesse, c est la vitesse locale du son et le nombre de CFL est fixé égal à 0.7. Dans la pratique, la contrainte imposée par l'Eq. 5.8 est essentielle puisqu'elle détermine le nombre d'itérations donc le temps de calcul nécessaire pour simuler un temps physique.

5.1.3 Calcul des gradients

Afin de déterminer les valeurs des gradients $\vec{\nabla}\mathbf{w}$ aux nœuds, on calcule d'abord sa valeur à la cellule Ω_j puis on la distribue aux nœuds k. Le gradient à la cellule, défini par l'Eq. 5.9, suit une description identique à celle utilisée pour définir la divergence (Eq. 5.4). Une approximation de ce gradient à la cellule est ainsi obtenue et définie par l'Eq. 5.10. On obtient enfin une approximation de ce gradient au nœud (Eq. 5.11) en utilisant une moyenne pondérée par le volume de la cellule.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x}\right)_C \approx \frac{1}{V_C} \iint_{\partial\Omega_C} \mathbf{w} \cdot \vec{n} \partial S \tag{5.9}$$

$$\left(\vec{\nabla}\mathbf{w}\right)_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \overline{\mathbf{w}}_i \overline{\vec{dS}_i} \tag{5.10}$$

$$\left(\vec{\nabla}\mathbf{w}\right)_k = \frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} V_{\Omega_j} (\vec{\nabla}\mathbf{w})_{\Omega_j} \tag{5.11}$$

5.2 Schémas numériques

Seules les caractéristiques principales des schémas numériques utilisés dans cette étude sont présentées ici. On trouvera une description détaillée de ces schémas dans la thèse de N. Lamarque [100] et les références indiquées.

schéma Lax-Wendroff [110] de type volumes finis, combinant discrétisations temporelle et spatiale. L'intégration temporelle de type Euler est stabilisée par l'ajout d'un terme diffusif. Dans AVBP ce schéma est centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide ;

schéma TTG4A ce schéma de type Taylor Galerkin à deux étapes possède une précision d'ordre 3 en temps et en espace. Ce schéma est plus diffusif que le schéma TTGC mais aussi plus stable, pour un coût de calcul comparable ;

schéma TTGC [41] 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.

5.3 Modèles de viscosité artificielle

5.3.1 Introduction

Les schémas de discrétisation spatiale disponibles dans AVBP sont des schémas centrés (cf. section 5.2). Ce type de schémas est connu pour être naturellement sujet à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) générées dans les régions de forts gradients. On peut limiter efficacement ce problème en introduisant un terme de *viscosité artificielle*[1] (VA) pour adoucir les fronts trop raides qui génèrent ces oscillations. Cette section décrit les senseurs (section 5.3.2) et les opérateurs (section 5.3.3) de la VA.

5.3.2 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 comporte de fortes variations spatiales, le senseur vaut 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. En revanche, si les deux évaluations donnent des valeurs différentes, le senseur se déclenche. Le choix du scalaire dépend de la difficulté numérique du problème. Pour la phase gazeuse, on choisit généralement la pression, l'énergie totale voire les fractions massiques. Pour la phase liquide, la relation pression/vitesse n'existe pas ce qui peut conduire à une forte décorrélation entre les gradients de densité de gouttes et les gradients de vitesse mésoscopique. Ainsi, le senseur pour la phase liquide se base sur ces deux variables. Dans tous les cas, il est crucial de trouver une fonction pour le senseur qui soit différente de zéro seulement dans les zones utiles. Deux senseurs différents sont disponibles dans AVBP : le senseur de Jameson $\zeta^J_{\Omega_j}$ [85] et le senseur de Colin $\zeta^C_{\Omega_j}$ [41], dérivé du senseur de Jameson. Dans la suite de cette section, 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 $\zeta^J_{\Omega_j}$ lié à la cellule Ω_j (défini par l'Eq. 5.12) est le maximum de tous les senseurs ζ^J_k liés aux sommets k (définis par l'Eq. 5.13). S est le scalaire évalué par le senseur et (Δ^k_1, Δ^k_2) sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 5.14. Δ^k_1 mesure la variation de S au sein de la cellule Ω_j. Δ^k_2 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

[1] Bien que le terme de viscosité artificielle soit couramment employé, il serait plus correct de parler de diffusion artificielle dans la mesure où on ne l'applique pas seulement à l'équation de quantité de mouvement.

linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique particulièrement adaptée aux cas quasi-stationnaires. Lorsqu'il s'applique aux variables gazeuses (pression, énergie ou fraction massique), le senseur de Jameson se présente sous la forme suivante :

$$\zeta^J_{\Omega_j} = \max_{k\in\Omega_j} \zeta^J_k \tag{5.12}$$

$$\zeta^J_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + |S_k|} \tag{5.13}$$

$$\Delta^k_1 = S_{\Omega_j} - S_k \qquad \Delta^k_2 = (\vec{\nabla} S)_k.(\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \tag{5.14}$$

Lorsqu'on cherche à appliquer ce senseur aux variables liquides (cf. ci-dessus), le conditionnement par $|S_k|$ pose problème car la phase dispersée est sujette à de fortes variations locales de densité de goutte et de vitesse. Afin d'éviter la saturation du senseur dans les zones qui présentent naturellement de forts gradients, le senseur de Jameson pour la phase liquide ζ^J_{l,Ω_j} est défini de la façon suivante :

$$\zeta^J_{l,\Omega_j} = \max\left(\zeta^J_{\breve{\mathbf{u}}_l,\Omega_j}, \zeta^J_{\breve{n}_l,\Omega_j}\right) \tag{5.15}$$

$$\zeta^J_{\breve{\mathbf{u}}_l,k} = \max_{k\in\Omega_j}\left(\frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + c_j}\right) \tag{5.16}$$

$$\zeta^J_{\breve{n}_l,k} = \max_{k\in\Omega_j}\left(\left(\frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + \breve{n}_l}\right)^2\right) \tag{5.17}$$

$$\tag{5.18}$$

où c_j est une mesure locale de la vitesse du son estimée par : $c_j = V^{1/3}_{\Omega_j}/\Delta t$. Pour la densité de gouttes, la difficulté de définir une valeur de référence est résolue simplement en prenant le carré de la fonction conditionnée par $\breve{n}_l$.

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 maximum dans les zones de fortes non-linéarités. Le senseur de Colin a été conçu dans ce but (cf. Eq. 5.19 à 5.23) :

- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est très petit lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 sont petits comparés à S_{Ω_j}. Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de signes opposés) ou à de faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de même signe).
- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est petit lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de 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.
- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est grand lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 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.
- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est grand si Δ^k_1 ou Δ^k_2 est du même ordre de grandeur que S_{Ω_j}. Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

On note 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 possible de la fraction massique.

$$\zeta^C_{\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{5.19}$$

$$\text{avec :} \quad \Psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k|+\epsilon_1 S_k}\zeta^J_k\right) \tag{5.20}$$

$$\Delta^k = |\Delta^k_1 - \Delta^k_2| - \epsilon^k \max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right) \tag{5.21}$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2\left(1-\epsilon_3\frac{\max\left(|\Delta^k_1|,|\Delta^k_2|\right)}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+S_k}\right) \tag{5.22}$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \qquad \delta = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_2 = 0.95 \qquad \epsilon_3 = 0.5 \tag{5.23}$$

5.3.3 Opérateurs

Les modèles de viscosité artificielle utilisent deux opérateurs qui ont les propriétés suivantes :

2ème ordre. Cet opérateur agit comme une viscosité classique. Associé à un senseur (cf. section 5.3.2), il adoucit les gradients et introduit de la dissipation artificielle. Ainsi, le schéma numérique garde son ordre de précision dans les zones à faible gradient et sa stabilité et sa robustesse sont assurées dans les zones critiques. À l'origine utilisé pour les chocs, il peut agir sur n'importe quel gradient trop fort.

4ème ordre. Cet opérateur est utilisé pour diminuer les oscillations haute fréquence.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2ème ordre (Eq. 5.25) et de l'opérateur du 4ème ordre (Eq. 5.26) sont reportées sur les nœuds de cette cellule Ω_j (Eq. 5.24).

$$dw_k = \sum_j R^2_{k\in\Omega_j} + \sum_j R^4_{k\in\Omega_j} \tag{5.24}$$

$$\text{avec :} \quad R^2_{k\in\Omega_j} = -\frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\mathsf{smu2}\;\zeta_{\Omega_j}(w_{\Omega_j}-w_k) \tag{5.25}$$

$$\text{avec :} \quad R^4_{k\in\Omega_j} = \frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\mathsf{smu4}\left[(\vec{\nabla}w)_{\Omega_j}\cdot(\vec{x}_{\Omega_j}-\vec{x}_k) - (w_{\Omega_j}-w_k)\right] \tag{5.26}$$

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

5.4 Traitement des chocs

Le but de cette section est de présenter les méthodes utilisées dans AVBP pour traiter le problème de la résolution des discontinuités de choc. Une première sous section décrit brièvement l'origine du problème de la résolution des chocs dans les écoulements supersoniques, ensuite deux méthodes de traitement de ces discontinuités sont proposées et comparées sur un cas de tube à choc 1D.

5.4.1 Position du problème

Un choc dans un fluide compressible est une discontinuité qui apparaît dans les zones où la vitesse de l'écoulement devient supérieure à la vitesse de propagation de l'information acoustique (choc droit) ou dans les zones où les directions de propagation de l'information convergent (choc oblique faible). Ces discontinuités séparent des écoulements d'entropies constantes mais différentes. Elles se caractérisent par une transition brutale en température, vitesse et pression sur une distance de l'ordre du libre parcours des molécules (quelques Angströms) qu'il est impossible de résoudre explicitement sur un maillage.

Trois situations particulières d'écoulement font apparaître des chocs :
– écoulement supersonique autour d'un obstacle solide ou en conduite ;
– explosions et dépôt local d'énergie (bougie électrique, laser) ;
– jets sous- ou sur-détendus (Fig. 5.1).

Dans le cas particulier des moteurs fusées, l'hydrogène gazeux peut atteindre à la sortie des injecteurs des régimes d'écoulements supersoniques. En effet, au début de la phase d'allumage le rapport de pression entre le dôme d'injection et la chambre peut être suffisamment élevé pour qu'un tel régime apparaisse. De la même façon, la torche de gaz chauds utilisée pour initier la combustion produit un jet sous-détendu (Fig. 5.1) générant un choc droit fort et un réseau de chocs faibles (plus de détail sur les jets sous-détendus se trouvent dans la thèse de A. Dauptain [48]). Et enfin, l'écoulement en sortie de chambre se détend dans la tuyère et devient supersonique induisant en régime nominal un jet fortement sous-détendu.

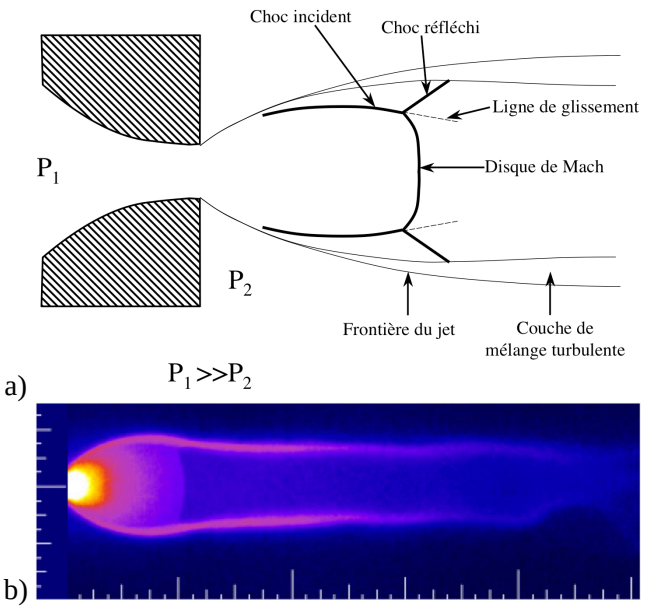


FIG. 5.1 - *Jet sous détendu : a) schéma d'un jet sous détendu ; b) visualisation expérimentale basée sur la fluorescence induite par tranche laser (PLIF) de la molécule NO pour $P_1 = 36 \cdot P_2$ [230].*

5.4.2 Méthodes numériques

Dans un écoulement supersonique, les effets de viscosité sont négligeables (hors zone de glissement) et le problème de la résolution des équations de conservation devient hyperboliques. Les méthodes les plus adaptées pour ce type de problème sont les méthodes dites *à capture de chocs* ou *solveurs de Riemann* inspirées de la méthode des caractéristiques pour la résolution des problèmes hyperboliques. Certaines de ces méthodes sont très précises comme le schéma de Godunov [71] mais nécessitent un coût de calcul trop important. Des méthodes moins coûteuses ont été mises en place comme les schémas MUSCL (*Monotonic Upwind Scheme for Conservative Laws* en anglais) [222] ou les schémas WENO (*Weighted Essentially Non Oscillatory* en anglais) [87]. Une nouvelle approche hybride, consiste à appliquer un schéma type Riemann dans les zones de chocs et un autre schéma adapté à la résolution des équations de Navier-Stokes "classiques" loin des discontinuités. Ces techniques hybrides sont encore en cours de développement et sont difficilement applicables dans le cas de maillage non structurés [234]. Dans la présente étude, une approche plus simple, basée sur une viscosité de volume, a été choisie pour traiter le problème des chocs.

5.4.3 Viscosité de volume

La forme générale de l'équation de conservation du moment contient un terme σ représentant les contraintes subies par le fluide. Dans le cas d'un fluide Newtonien, il se décompose sous la forme de l'Eq. 5.27 entre un terme de pression et le tenseur des contraintes visqueuses τ rapellé par l'Eq. 5.28 où interviennent les viscosités de cisaillement et de compression. Ce dernier terme peut se récrire sous la forme de l'Eq. 5.30 où le tenseur se décompose entre sa partie déviatrice (à coefficients diagonaux nuls) et sa partie diagonale. On a alors introduit le coefficient de viscosité de volume $\kappa = \lambda + \frac{2}{3}\mu$.

$$\sigma = \tau - p.\delta \tag{5.27}$$

$$\tau = \underbrace{2\mu S}_{\text{Viscosité de cisaillement}} + \underbrace{\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}}_{\text{Viscosité de compression}} \tag{5.28}$$

Où S représente la partie symétrique du tenseur des contraintes visqueuses :

$$S = \frac{1}{2}\left(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla\right) \tag{5.29}$$

$$\tau = \underbrace{2\mu S - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u}}_{\text{Partie déviatrice}} + \underbrace{\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right) \nabla \cdot \mathbf{u}}_{\text{Partie diagonale}} \tag{5.30}$$

Pour des conditions de pression et de températures proches des conditions standards, l'hypothèse de Stokes est appplquée et la viscosité de volume est nulle : $\kappa = 0$.

Modèle de Von Neumann et Richtmeyer

L'idée développée dans les années 50 par J. Von Neumann et R. D. Richtmeyer [227] est d'épaissir le choc de manière à pouvoir le résoudre explicitement sur le maillage sans avoir à changer localement de méthode numérique. Ils se sont rendu compte que le terme de viscosité de volume permettait, s'il était modifié, d'augmenter artificiellement l'épaisseur d'un choc.

Ils ont alors modifié le tenseur des contraintes visqueuses (τ_{modif}), par l'ajout d'un terme κ_{VNR} :

$$\tau_{modif} = (\kappa_{VNR} - \frac{2}{3}\mu)\ \nabla.\mathbf{u}\ \delta + 2\mu S \tag{5.31}$$

La viscosité de volume modifiée introduit un terme de pression p_{VNR} :

$$p_{VNR} = -\kappa_{VNR}\nabla \cdot \mathbf{u} \tag{5.32}$$

Ce modèle permet de conserver une précision globale du code de calcul si la viscosité de volume n'est appliquée que dans les zones de discontinuité, où la divergence de la vitesse est importante. L'estimation de κ_{VNR} dépend de $\mathbf{u}$, de la taille de la cellule et la densité :

$$\kappa_{VNR} = Cte\,(Vol)^{2/3}\,\rho\sqrt{(\bigtriangledown \cdot \vec{u})^2} \tag{5.33}$$

La valeur optimale de la constante Cte est 1.

Modèle de Cook et Cabot

En 2005, Cook et Cabot [44] ont proposé un modèle de viscosité de volume permettant de traiter les chocs avec une approche comparable à celle de Von Neumann et Richtmeyer. La différence majeure est la manière de calculer le coefficient de viscosité de volume κ_{Cook} :

$$\kappa_{Cook} = Cte\,(Vol)^{4/3}\,\rho\widetilde{|\nabla^2 S|} \tag{5.34}$$

où S est la partie symétrique du tenseur des contraintes visqueuses, l'opérateur $\widetilde{}$ représente un filtre gaussien tronqué (approximé dans AVBP par une moyenne sur les cellules) éliminant les oscillations hautes fréquences dues à la valeur absolue et la constante Cte est fixée à 5 [44]. Il est à noter qu'avec l'approche de Cook et Cabot, la correction s'applique lorsque le tenseur des contraintes varie fortement alors qu'avec celle de Von Neumann et Richtmeyer, elle s'applique lorsque la divergence de la vitesse est grande.

Application à un tube à choc

Le test du tube à choc est relativement simple à mettre en place et présente l'avantage d'avoir une solution analytique [79]. Le principe du tube à choc est de séparer deux compartiments de pressions différentes par un diaphragme que l'on retire brutalement. Une onde de choc est alors produite, se propageant dans l'enceinte de plus faible pression (Fig. 5.2).

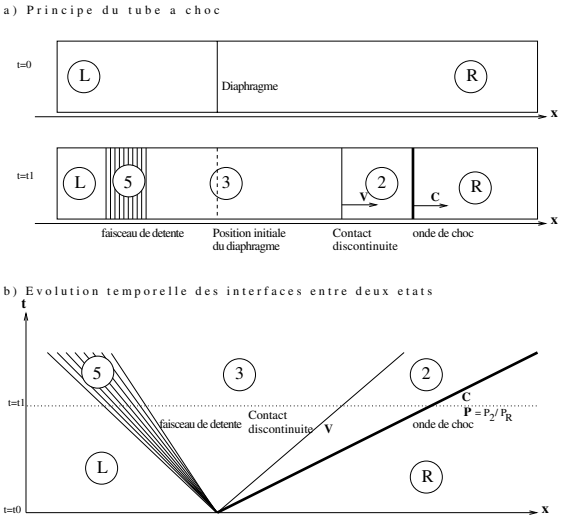


FIG. 5.2 - *Le problème de Riemann*

Les calculs ont été réalisés avec le schéma TTG4A, une viscosité artificielle du quatrième ordre de 0.01 basé sur le senseur de Jameson. La pression à gauche est de 1 bar et à droite 0.1 bar. Le maillage 1D est composé de 500 cellules rectangulaires avec des périodicités dans la direction transverse. Sans viscosité artificielle, le calcul diverge.

Un exemple de profils des grandeurs caractéristiques de l'écoulement calculés avec AVBP sont présentés Fig. 5.3, à $t = 5\,ms$ après la rupture du diaphragme.

Trois types de viscosités artificielles ont été comparés sur ce problème : la viscosité de Jameson utilisée dans AVBP pour stabiliser le calcul (cf. section 5.3) et les viscosités de Von Neumann et al. et de Cook et al. Les résultats obtenus sont comparés à une solution analytique dite de Riemann [79].

Dans la zone du choc (Fig. 5.4), l'utilisation des deux méthodes basées sur la viscosité de volume li-

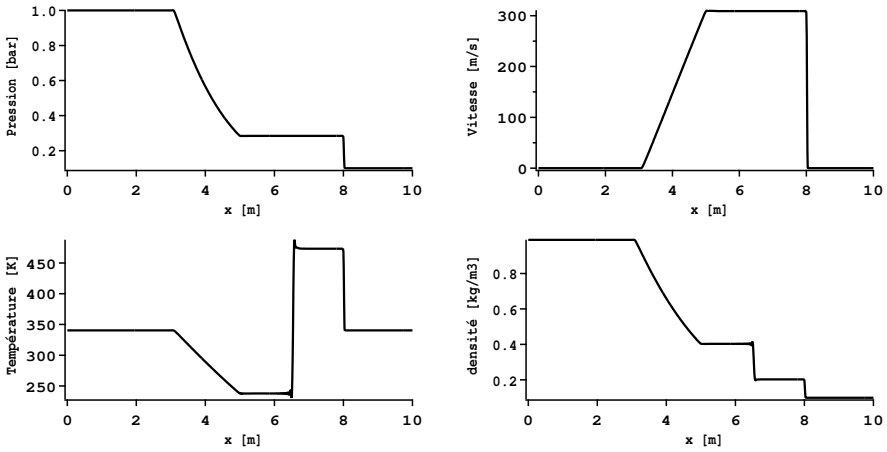


FIG. 5.3 - *Profils de la pression, vitesse, température et densité 5ms après la disparition du diaphragme.*

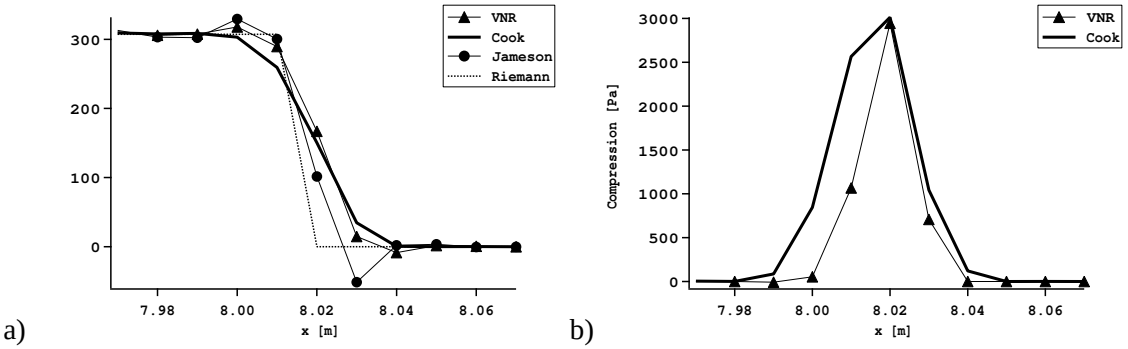


FIG. 5.4 - *Comparaison des méthode dans la zone de choc : a) vitesse, b) pression résultant des hyper-viscosités de Von Neumann et al. et de Cook et al.*

mite les problèmes de dispersion et la méthode de Cook et al. donne de meilleurs résultats que l'approche de Von Neumann. La Figure 5.4b montre que le terme correctif de la méthode de Cook et al. est toujours supérieur au terme de Von Neumann et al. et appliquée sur une zone plus large. Cela explique que sur la Fig. 5.4a, aucune valeur non physique de la vitesse n'apparaît. Un autre défaut de la méthode de Von Neumann et al. est que dans la zone de détente, la correction est non nulle comme le montre la Fig. 5.5. Au regard de ces résultats, seule la viscosité de Cook et Cabot sera utilisée dans la suite de l'étude.

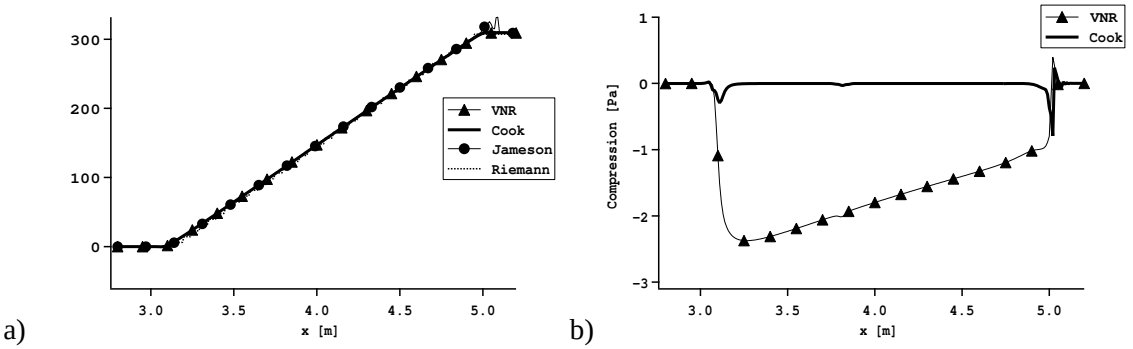


FIG. 5.5 - *Comparaison des méthode dans la zone de détente : a) vitesse, b) pression résultant des hyper-viscosités de Von Nuemann et al. et de Cook et al.*

5.5 Conditions aux limites

Les conditions limites sont un point crucial dans tout code de mécanique des fluides. C'est particulièrement le cas pour le code AVBP, dont le but est de résoudre des écoulements réactifs dans les milieux confinés des chambres de combustion, où la géométrie a un fort impact sur l'écoulement et où l'acoustique dépend principalement des entrées et sorties [155, 185].

Dans AVBP, l'intégration temporelle est effectuée par méthode Runge-Kutta à une ou plusieurs étapes. Dans le cas d'un avancement à une étape, le vecteur solution $\mathbf{w}^{n+1}$ au temps $t+\Delta t$, dépend de la solution $\mathbf{w}^n$ au temps t de la façon suivante :

$$\mathbf{w}^{n+1} = \mathbf{w}^n - \mathcal{R}\Delta t \tag{5.35}$$

L'exposant n est utilisé pour rappeler que le code explicite n'utilise que des données à l'itération n.

Au milieu du domaine, de résidu $\mathcal{R}$ est déterminé par le schéma alors que sur les nœuds du bord du domaine, il est corrigé par les conditions aux limites. Le problème de conditions aux limites peut être abordé suivant deux approches différentes :

Méthode non caractéristique : le résidu est modifié en agissant directement sur les variables conservatives.

Méthode caractéristique : le résidu est modifié en traduisant le problème au bord par un problème de propagation d'ondes caractéristiques [208].

La seconde méthode permet de prendre en compte les effets acoustiques des entrées et sorties (ainsi que des murs) en imposant des impédances. Le problème est ensuite retraduit en variable conservatives pour déterminer les nouveaux résidus. Cette approche, communément appelée NSCBC (pour *Navier-Stokes characteristic boundary condition*), a été développée par Poinsot et Lele [156] et étendue aux écoulements multi-espèces par Moureau et Lartigue [139].

Au niveau des parois, la résolution spatiale du maillage LES n'est généralement pas suffisante pour prédire le frottement imposé par la condition d'adhérence. Schmitt [182, 183] a montré que le frottement

à la paroi peut être modélisé par une loi de paroi adaptée à la formulation LES. Différentes lois de paroi sont disponibles dans le code AVBP permettant notamment de modéliser des flux thermiques pariétaux.

Contrairement à la phase gazeuse, on n'observe pas de comportement propagatif de type acoustique au sein d'un spray. Sur le plan numérique, de simples conditions aux limites de type Dirichlet sont donc suffisantes pour imposer les flux des différentes variables transportées (cf. Eq. 3.21 à 3.24) et les parois sont représentées par une condition de glissement.

Chapitre 6

Cinétique chimique hydrogène-oxygène

La poussée fournie par le moteur VINCI provient de la réaction chimique du couple hydrogène-oxygène qui a les deux avantages d'avoir une densité moyenne faible par rapport aux autres systèmes réactifs (méthane-oxygène ou kérosène-oxygène) et une impulsion spécifique[1] importante de l'ordre de 450 s contre par exemple 350 s pour l'ensemble kérosène-oxygène.

Dans le cadre de la simulation d'allumage de moteur fusée cryotechnique Lox/GH2 (oxygène liquide et hydrogène gazeux), une attention particulière doit être portée sur la description de la cinétique chimique. Trois caractéristiques majeures doivent être correctement prédites par le schéma cinétique : la température de flamme, la vitesse de propagation en régime de flamme de prémélange et le délai d'auto-allumage pour des conditions thermodynamiques et de mélange très variées. En particulier, la pression peut varier de façon significative pendant l'allumage. Le modèle cinétique basé sur une formulation d'Arrhenius doit par conséquent être suffisamment complet pour prendre en compte ces effets mais suffisamment simple pour ne pas être pénalisant en terme de coût de calcul et de complexité numérique.

Ce chapitre est dédié à la mise en place d'une cinétique chimique H_2/O_2 permettant de répondre aux précédentes exigences. Trois schémas cinétiques ont été définis et sont présentés dans une première section. L'étude de ces différentes cinétiques réduites s'articule ensuite de la façon suivante : nous verrons d'abord que les résultats portant sur la température de fin de combustion et de vitesse de flamme permettent de rejeter deux des trois cinétiques testées, dans le contexte d'allumage de moteurs fusées. Le dernier schéma fait ensuite l'objet d'une étude plus poussée sur les délais d'auto-allumage et sur l'impact de la pression. Enfin, ce schéma est implanté dans AVBP et couplé au modèle de combustion DTFLES.

[1] l'impulsion spécifique (I_{sp}) est le rapport entre la poussée du moteur fusée F et le débit des gaz éjectes $\dot{m}_{gb}$ multiplié par l'accélération de pesanteur g : $I_{sp} = F/(\dot{m}_{gb}g)$. L'impulsion spécifique peut être vue comme la durée pendant laquelle 1kg d'ergols produit 1kg-force de poussée.

6.1 Les trois cinétiques testées

Pendant cette thèse, trois schémas cinétiques de complexités croissantes ont été ajustés et testés : un schéma à une étape issu du schéma de Marinov [122] (appelé par la suite Marinov-1) (Tab. 6.1), un schéma à deux étapes (appelé Marinov-2), correspond au schéma Marinov-1, avec une étape additionnelle de dissociation du radical OH (Tab. 6.2) et un schéma à sept réactions (nommé H2O2-GL7-1) et six espèces (H, O, OH, H2, O2, H2O), adapté des travaux de Baurle [10] (Tab. 6.3).

n°	**Réaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** $[\mathbf{cal/mole}]$
1	$h2 + 0.5o2 => h2o$	2.560E+013	0.000	4.0E+004

TAB. 6.1 - *Cinétique réduite Marinov-1, adaptée des travaux de Marinov [122].*

n°	**Réaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** $[\mathbf{cal/mole}]$
1	$h2 + 0.5o2 => h2o$	2.493E+013	0.000	3.500E+004
	FORD : $h2$ 1.25			
	FORD : $o2$ 0.4			
2	$h2o = 0.5h2 + oh$	4.000E+009	0.000	5.000E+002

TAB. 6.2 - *Cinétique réduite à deux étapes : Marinov-2.*

n°	**Réaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** $[\mathbf{cal/mole}]$
1	$h + o_2 = o + oh$	3.62E+17	-0.91	1.653E+4
2	$o + h_2 = h + oh$	1.53E+5	2.67	6.296E+3
3	$o_2 + h_2 = oh + oh$	5.13E+13	0.00	4.805E+4
4	$oh + h_2 = h_2o + h$	6.64E+13	0.00	5.155E+3
5	$oh + oh = h_2o + o$	1.90E+13	0.00	1.091E+3
6	$h + oh + m = h_2o + m$	6.67E+22	-2.00	0.000
7	$h + h + m = h_2 + m$	2.20E+18	-1.00	0.000
	efficacité des troisièmes corps :			
	2.5 pour h_2, 16 pour h_2o et 1.0 pour les autres m			

TAB. 6.3 - *Cinétique réduite H2-O2 utilisée pour les calculs LES (H2O2-GL7-1).*

Pour mettre au point ces différentes cinétiques, le logiciel commercial Cosilab développé par Softpredict (http ://www.SoftPredict.com) a été utilisé. Cosilab permet notamment de résoudre la structure de flammes laminaires prémélangées 1D, ainsi que de réaliser des auto-allumages.
Le schéma cinétique de O'Conaire et al. [42] (Tab. 6.4) a été choisi comme schéma de référence car c'est l'un des schémas les plus récents et les plus complets pour la cinétique H_2/O_2. La Fig. 6.1 montre la comparaison de ce schéma complexe avec des mesures expérimentales, pour la vitesse de flamme laminaire et la température de fin de combustion. Les résultats de température adiabatique de flamme sont en

bon accord avec l'expérience de Zitoun et al. [235] avec une erreur maximum de 4%. Pour la vitesse de flamme laminaire, la dispersion des résultats est plus importante, autant pour les données expérimentales (basées sur des méthodes de brûleur Bunsen) de Jahn et al. [84] et de Zitoun et al. [235] que pour les valeurs numériques de Warnatz et al. [229] et de Dixon-Lewis et al. [53]. On note cependant que les vitesses de flamme obtenues avec le schéma de O'Conaire et al. [42] sont cohérentes par rapport aux autres résultats (Fig. 6.1b).

n°	**Réaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** $[\mathbf{cal/mole}]$
1	$h+o2=o+oh$	1.915E+14	0.00	1.644E+04
2	$o+h2=h+oh$	5.080E+04	2.67	6.292E+03
3	$oh+h2=h+h2o$	2.160E+08	1.51	3.430E+03
4	$o+h2o=oh+oh$	2.970E+06	2.02	1.340E+04
5	$h2+m=h+h+m$	4.577E+19	-1.40	1.044E+05
	efficacité $h2$:2,5 et $h2o$: 12			
6	$o2+m=o+o+m$	4.515E+17	-0.64	1.189E+05
	efficacité $h2$:2,5 et $h2o$: 12			
7	$oh+m=o+h+m$	9.880E+17	-0.74	1.021E+05
	efficacité $h2$:2,5 et $h2o$: 12			
8	$h2o+m=h+oh+m$	1.912E+23	-1.83	1.185E+05
	efficacité $h2$:0,73 et $h2o$: 12			
9	$h+o2(+m)=ho2(+m)$	1.475E+12	0.60	0.000E+00
	low	3.4820E+16	-4.1100E-01	-1.1150E+03
	troe 0.5	1.0000E-30	1.0000E+30	1.0000E+100
	efficacité $h2$:1,3 et $h2o$: 14			
10	$ho2+h=h2+o2$	1.660E+13	0.00	8.230E+02
11	$ho2+h=oh+oh$	7.079E+13	0.00	2.950E+02
12	$ho2+o=oh+o2$	3.250E+13	0.00	0.000E+00
13	$ho2+oh=h2o+o2$	2.890E+13	0.00	-4.970E+02
14	$h2o2+o2=ho2+ho2$	4.634E+16	-0.35	5.067E+04
15	$h2o2+o2=ho2+ho2$	1.434E+13	-0.35	3.706E+04
16	$h2o2(+m)=oh+oh(+m)$	2.951E+14	0.00	4.843E+04
	low	1.202E+17	0.00	45500
	troe 0.5	1.0e-30	1.0e+30	1.0e+100
	efficacité $h2$:2,5 et $h2o$: 12			
17	$h2o2+h=h2o+oh$	2.410E+13	0.00	3.970E+03
18	$h2o2+h=h2+ho2$	6.025E+13	0.00	7.950E+03
19	$h2o2+o=oh+ho2$	9.550E+06	2.00	3.970E+03
20	$h2o2+oh=h2o+ho2$	1.000E+12	0.00	0.000E+00
21	$h2o2+oh=h2o+ho2$	5.800E+14	0.00	9.557E+03

TAB. 6.4 - *Cinétique complexe de O'Conaire et al. [42].*

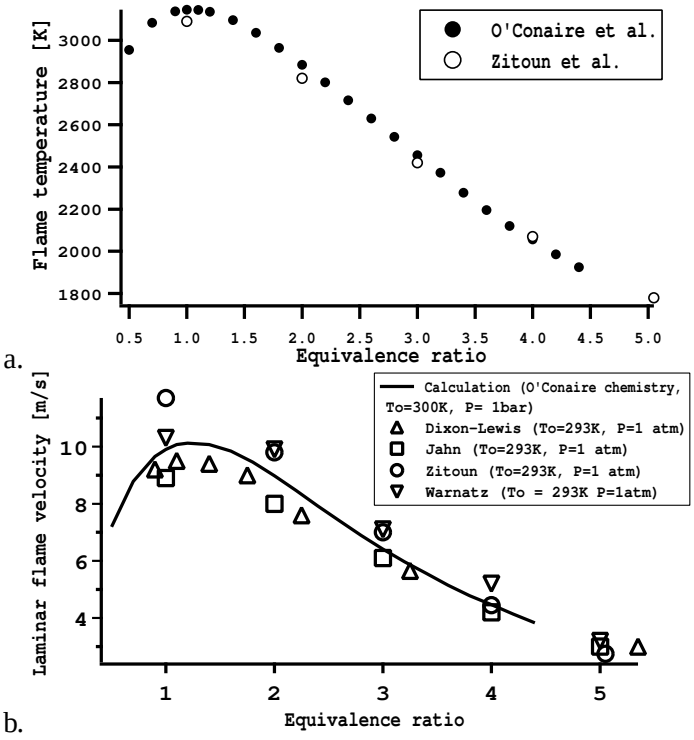


FIG. 6.1 - *Comparaison du schéma complexe de O'Conaire et al. à 21 étapes [42] avec les résultats expérimentaux de Jahn et al. [84] et Zitoun et al. [235] et les résultats numériques de Dixon-Lewis et al. [53] et Warnatz et al. [229]. a. température adiabatique de flamme, b. vitesse laminaire de flamme.*

6.2 Températures de fin de combustion

Lors d'un allumage dans un moteur fusée, la flamme peut rencontrer des mélanges inhomogènes, il est donc important de correctement prédire la température de la flamme sur toute la gamme de richesses du domaine de flammabilité. Cette température dépend uniquement du mélange, de sa température initiale et de la pression. Il est possible de la déterminer par un calcul simple d'équilibre thermo-chimique. La Fig. 6.2 présente la température adiabatique de flamme pour des richesses de 0,5 à 4 et pour les différents schémas (Tab. 6.5).

Schéma	Espèces
Marinov-1	H_2, O_2, H_2O
Marinov-2	H_2, O_2, OH, H_2O
H2O2-GL7-1	H_2, O_2, OH, H, O, H_2O
O'Conaire [42]	H_2, O_2, OH, H, O, H_2O, HO_2, H_2O_2

TAB. 6.5 - *Les espèces intervenant dans les différentes cinétiques.*

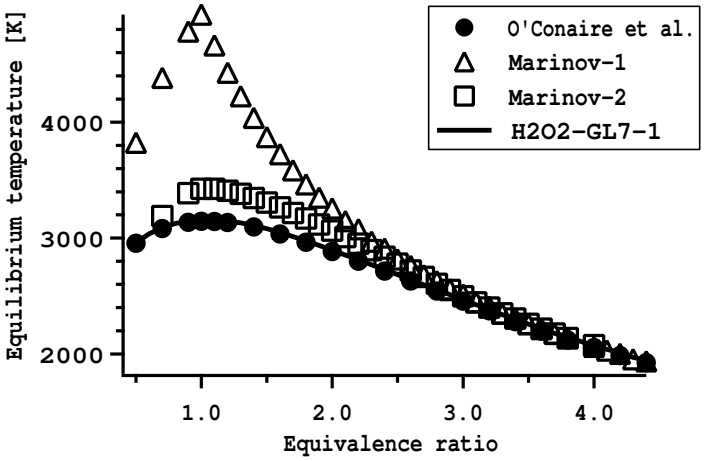


FIG. 6.2 - *Température de fin de combustion pour différents mélanges correspondant à différents schémas cinétiques ($P = 1,87\,bar$ et $To = 300\,K$).*

La Fig. 6.2 montre que pour des richesses supérieures à 3, il y a peu de dissociation et les résultats donnés par les quatre mélanges sont très proches. Cependant, autour de la stoechiométrie, les différences sont très importantes. La comparaison des résultats obtenus avec les schémas Marinov-1 et Marinov-2, montre que l'ajout du radical OH dans le mélange permet de sensiblement diminuer l'erreur sur la température d'équilibre. Cette première analyse montre que la cinétique à une étape (Marinov-1) n'est pas appropriée dans le contexte présent de la thèse.

6.3 Vitesse de flamme laminaire

Les trois schémas cinétiques réduits ont été développés pour réaliser l'allumage d'un moteur fusée expérimental dont la richesse globale d'injection est égale à $\phi = 4$ (cf. partie IV). Les trois cinétiques ont donc été adaptées pour donner la bonne vitesse de flamme dans ces conditions.

A l'origine le schéma de Baurle [10] a été développé pour la combustion de l'hydrogène dans l'air. Il a donc été nécessaire de le transposer à la combustion hydrogène-oxygène. Une manière simple d'adapter ce schéma pour la combustion H_2/O_2, est de multiplier toutes les constantes pré-exponentielles par un même facteur (égal à 3,017) en se basant sur la relation [157] : $S_l \propto \sqrt{A}$. La Fig.6.3 donne les vitesses de flammes laminaires obtenues par les trois schémas réduits en fonction de la richesse. On remarque que pour les schémas Marinov-1 et Marinov-2, l'erreur sur la vitesse est supérieure à 100% dans la région proche de la stoechiométrie, alors que le schéma à sept étapes (H2O2-GL7-1) prédit la vitesse de flamme avec une erreur inférieure à 10%. La cinétique H2O2-GL7-1 sera donc utilisée dans tout le reste de l'étude.

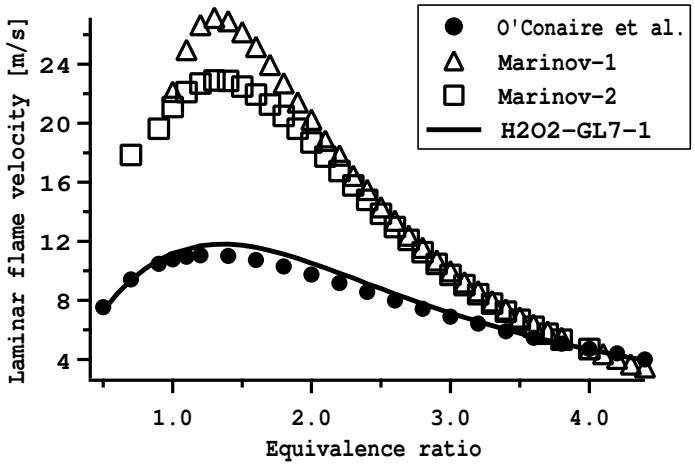


FIG. 6.3 - *Vitesses de flammes laminaires prémélangées en fonction de la richesse pour les différents schémas cinétiques ($P = 1,87\,bar$ et $To = 300\,K$).*

6.4 Dépendance en pression

Pendant une séquence d'allumage, la pression dans la chambre augmente (surtout dans le cas d'allumage retardé où la pression peut varier de 2bar à 11bar, cf. partie IV). Il est donc important de vérifier que le schéma cinétique a un comportement réaliste à haute pression. La vitesse de flamme laminaire est liée à la pression par une relation simple [157] :

$$\frac{S_l^0(P)}{S_l^0(P_0)} \propto \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\alpha_P} \tag{6.1}$$

Le coefficient α_p est le plus souvent négatif, comme pour le méthane [74] ou le propane [134] dans de l'air. Pour le cas de la combustion H_2/O_2, le coefficient α_P est positif [1] ce qui a pour effet d'augmenter la vitesse de flamme lorsque la pression monte. L'impact de le pression sur la vitesse de flamme se répercute aussi sur son épaisseur δ_l, puisque pour une flamme prémélangée [157] : $\delta_l \propto D_{th}/S_l^0$, avec $D_{th} = \lambda/(\rho Cp) \propto 1/P$.

$$\frac{\delta_l(P)}{\delta_l(P_0)} \propto \left(\frac{P}{P_0}\right)^{-(\alpha_P+1)} \tag{6.2}$$

Cette évolution en pression a des répercussions sur le modèle de flamme épaissie utilisé dans AVBP, qui devra prendre en compte l'amincissement de la flamme lorsque la pression augmente.

La validation expérimentale de la chimie est délicate pour des pressions supérieures à quelques atmosphères [220]. Si le mélange oxygène-hydrogène n'est pas dilué avec un gaz inerte (hélium par exemple), des instabilités thermo-diffusives et hydrodynamiques apparaissent induisant un fort plissement du front flamme et une augmentation de sa vitesse de propagation [220, 231]. En effet, les instabilités thermo-diffusives apparaissent lorsque le nombre de Lewis ($Le = D_{th}/D_k$, avec D_k le coefficient de diffusion de l'espèce k) est plus petit que 1. Dans ce cas, les réactifs diffusent plus rapidement que la chaleur,

accentuant les courbures locales de la flamme conduisant à la formation de cellules à sa surface [231]. Cette instabilité est sensible à la pression, car le nombre de Lewis est proportionnel à l'inverse de P ($D_{th} \propto 1/P$). Il n'existe donc pas de résultats expérimentaux de S_l^0 en fonction de P, et le seul test possible est de comparer la chimie réduite avec des cinétiques complexes. On compare sur la Fig. 6.4, les vitesses de flamme obtenues avec le schéma H2O2-GL7-1 et les schémas complexes de O'Conaire et al. [42], de Smooke [198] et de Kee [91], pour différentes valeurs de P allant de 1 à 12 bar et pour une richesse de 1.

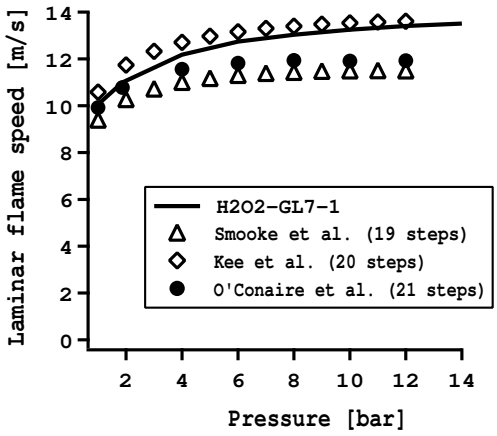


FIG. 6.4 - *Vitesse de flamme H2-O2 laminaire à $\phi = 1$ en fonction de la pression. Comparaison avec les schémas de O'Conaire et al. [42], de Smooke [198] et de Kee [91] (T_{init}=300K).*

On note d'abord que les quatre schémas ont un comportement global similaire et reproduisent tous une augmentation de la vitesse de flamme lorsque P augmente. Cependant, même les schémas complexes montrent une forte dispersion, avec un écart allant de 1m/s à 1bar à 2,5m/s à 10bar. Le schéma réduit se situe à un niveau intermédiaire, avec une vitesse de flamme 11% plus importante que celle du schéma complet de O'Conaire et al. mais 4% plus faible que celui de Kee. Le paramètre α_P de la loi puissance (6.1) vaut 0.12 pour ce schéma réduit.
Compte tenu des incertitudes sur la dépendance en pression et l'absence de références expérimentales, il est considéré que le schéma H2O2-GL7-1 a un comportement acceptable.

La variation de l'épaisseur de flamme pour le schéma réduit en fonction de la pression et pour deux richesses représentatives, est présentée Fig. 6.5. L'épaisseur de flamme diminue d'un facteur d'environ 7 à 8 entre 2 et 12 bar. Durant un allumage, l'amincissement de la flamme est significatif et l'épaississement initial peut ne pas être suffisant. Le calcul du facteur d'épaississement doit donc prendre en compte la pression de manière à ce que le front de flamme soit toujours bien résolu.

Le calcul du paramètre α_P de la loi puissance (Eq. 6.2) correspondant, donne $\alpha_P = 0,13$ pour $\phi = 1$ (on retrouve la valeur obtenue à partir de S_l^0) et $\alpha_P = 0,16$ pour $\phi = 4$. La Fig. 6.6 montre que la loi puissance se superpose parfaitement avec les résultats du schéma réduit pour une richesse de $\phi = 4$ et pour $\alpha_P = 0,16$.

Pour le calcul LES d'un transitoire d'allumage, l'épaisseur de flamme est donc épaissie d'un facteur

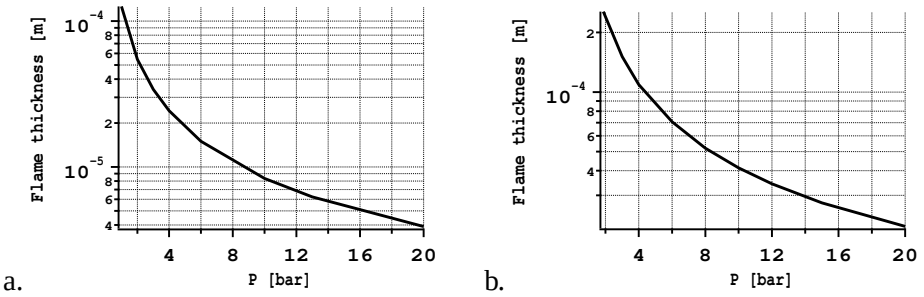


FIG. 6.5 - *Epaisseur de flamme laminaire en fonction de la pression pour le schéma H2O2-GL7-1. a.* $\phi = 1$. *b.* $\phi = 4$.

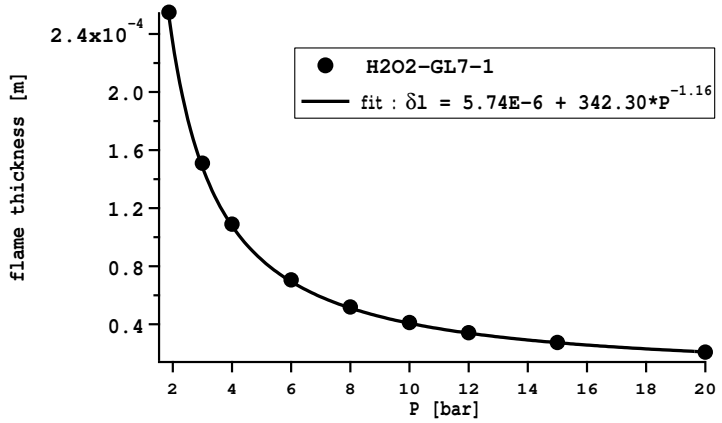


FIG. 6.6 - *Dépendance en loi puissance de l'épaisseur de flamme en fonction de la pression (phi = 4,* T_{init}*=300K).*

$F = \frac{\Delta_x}{\delta_l(P)}.n_{thick}$ (fc. section 4.5.4), ou Δ_x est la taille caractéristique locale du maillage, $\delta_l(P)$ est l'épaisseur de la flamme et n_{thick} le nombre de points choisi pour résoudre le front (généralement 5). La dépendance du facteur d'épaississement peut donc s'écrire :

$$F(x,y,z,t) = \frac{\Delta_x(x,y,z)}{5,74.10^{-6} + 342,3.P(x,y,z,t)^{-1.16}} \cdot n_{thick} \tag{6.3}$$

6.5 Délais d'auto-allumage

En auto-allumage ou en allumage forcé (avec un laser ou une bougie électrique), la cinétique réduite doit reproduire correctement le temps d'allumage. Le schéma complexe de O'Conaire et al. [42] a été validé en terme de délai d'allumage par comparaison avec de nombreux résultats expérimentaux de Hidaka et al. [78], de Slack [196], de Fujimoto et al. [64] et de Petersen et al. [150]. Pour comparer les temps d'allumage donnés par le schéma réduit H2O2-GL7-1 et le schéma complet de O'Conaire et al. [42], des calculs 0D de réacteurs parfaitement mélangés, à volume constant, ont été réalisés. A l'instant initial, le mélange ne contient que de l'oxygène et de l'hydrogène à une température et une pression données puis la cinétique est activée et l'évolution temporelle de la température permet de déterminer le temps d'allumage t_{allum}. Ce temps d'allumage est défini comme le temps nécessaire pour atteindre la température critique Tc définie par Williams [231] :

$$Tc = \left(1 - \frac{{T_2}^2}{T_a(T_2 - T_1)}\right)(T_2 - T_1) + T_1 \tag{6.4}$$

où T_1 est la température du mélange frais, T_2 la température adiabatique de fin de combustion et T_a la température d'activation de l'étape d'initiation $H_2 + O_2 \leftrightarrow 2OH$. La Fig. 6.7 présente l'évolution temporelle de la température pour le cas d'un mélange initial à ϕ=1, température T_1=1000 K et pression de 1 bar. La température finale $T_2 = 3400\ K$ et la température d'activation T_a de $2,4.10^4$ K. Le calcul de la température critique donne Tc=2975 K.

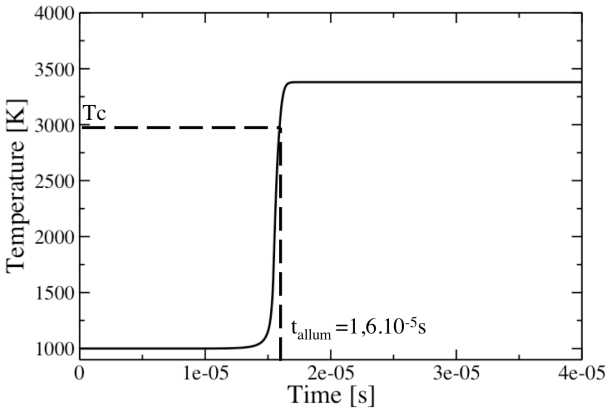


FIG. 6.7 - *Evolution temporelle de la température dans un réacteur à volume constant, pour un mélange H_2/O_2 à ϕ=1 et une température initiale de 1000 K (cinétique H2O2-GL7-1).*

Les délais d'allumage en fonction de la température initiale sont présentés Fig. 6.8 pour le schéma H2O2-GL7-1 et la cinétique complexe de O'Conaire. La cinétique H2O2-GL7-1 s'emballe toujours plus tôt que la chimie complexe, avec un rapport de délai d'allumage allant de 10 à 1000K à seulement 2 à 2000K. Il faut rappeler que dans le cadre d'un allumage par laser ou par étincelle, la température du mélange après le dépôt d'énergie est élevée ($> 2000\ K$). Dans ces conditions, les temps d'allumage sont de l'ordre de la micro-seconde et les différences observées entre les cinétiques réduite et complexe ont

des conséquences négligeables sur l'allumage. En effet, le léger retard de l'ordre de la micro-seconde observé Fig. 6.8 est négligeable devant les temps de formation du noyau de flamme et de sa croissance qui sont de l'ordre de la milli-seconde.

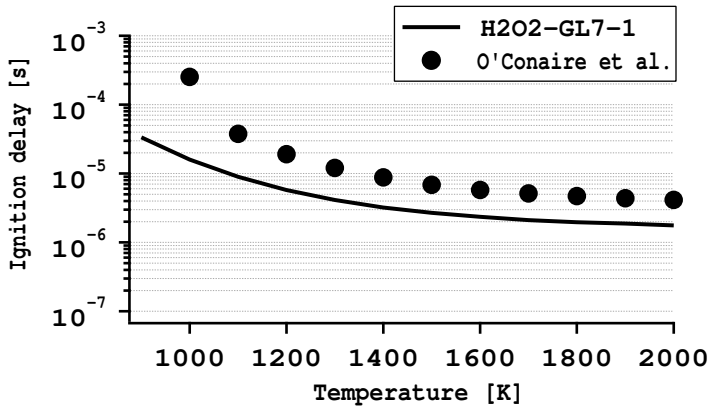


FIG. 6.8 - *Délais d'allumage en fonction de la température initiale du mélange pour la cinétique complète de O'Conaire et al. [42] et la cinétique réduite H2O2-GL7-1 (pression initiale de 1 bar et mélange à la stoechiométrie).*

6.6 Structure de flamme prémélangée

Pour étudier la structure de flamme, des flammes prémélangées 1D ont été réalisées avec Cosilab pour la chimie complexe de O'Conaire et al. et la chimie réduite H2O2-GL7-1. La structure de la flamme obtenue avec AVBP est comparée à celles obtenues avec Cosilab, de manière à valider son implantation dans le code. Les calculs AVBP sont réalisés en DNS avec la même discrétisation que celle utilisée dans Cosilab.

Les propriétés de mélange comme le nombre de Prandtl $P_r = 0,64$, les nombres de Schmidt des différentes espèces k : Sc_k et les paramètres de la loi puissance pour la viscosité dynamique μ (Eq. 6.5) ont été déterminées grâce à la librairie de CHEMKIN2 (Transfit) [92]. Les mêmes paramètres ont été utilisés pour tous les calculs et correspondent au mélange à l'équilibre $H_2 - O_2$ à ϕ = 4 et T = 2100 K (Tab. 6.6).

	H	H2	O	O2	OH	H2O
Sc	0,17	0,28	0,64	0,99	0,65	0,77

TAB. 6.6 - *Nombres de Schmidt pour les différentes espèces.*

La viscosité dynamique est modélisée par la loi puissance suivante :

$$\mu(T) = 1,79.10^{-5} \left(\frac{T}{300}\right)^{0},686 \tag{6.5}$$

Les profils spatiaux de température, de densité, de vitesse et d'espèces à travers la flamme sont présentés Fig. 6.9 et 6.10.

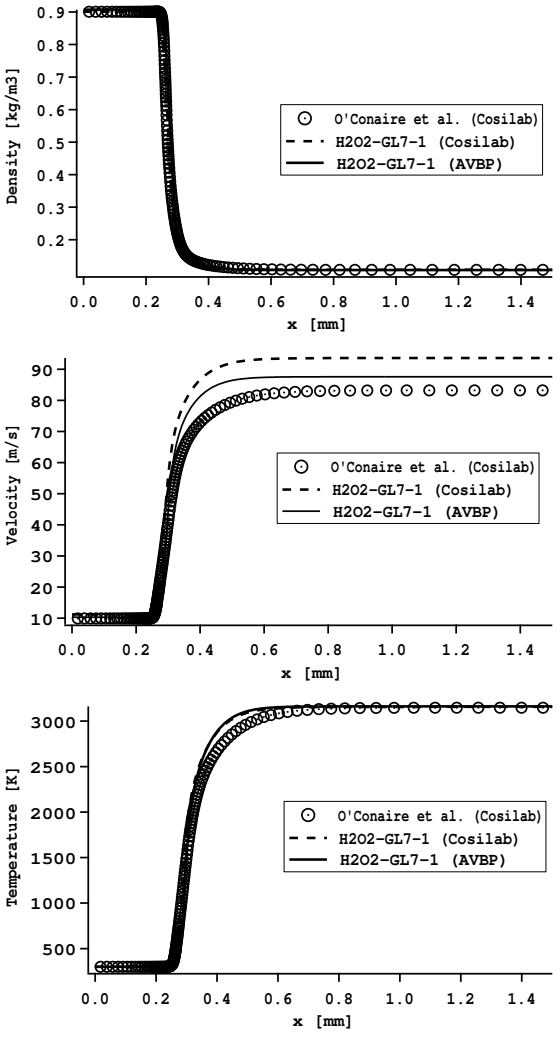


FIG. 6.9 - *Profils de la densité, la vitesse et la température à travers la flamme, obtenus avec la cinétique complexe de O'Conaire et al. [42] (Cosilab) et la cinétique réduite H2O2-GL7-1 (ϕ=1.0, To=300K, Po=1.87bar. ⊙ O'Conaire et al. ; - - - H2O2-GL7-1 (Cosilab) ; ── H2O2-GL7-1 (*AVBP*)).*

Ces deux figures (Fig. 6.9 et 6.10) montrent tout d'abord que la structure de la flamme obtenue avec le schéma réduit H2O2-GL7-1 est très proche de celle du schéma complexe de O'Conaire et al. La seule différence notable est que l'épaisseur de flamme de la chimie complexe est légèrement plus importante que celle obtenue avec le schéma réduit. D'autre part, la flamme calculée avec AVBP est quasiment identique à celle obtenue avec Cosilab pour la cinétique réduite. Les paramètres de mélange (nombres de Prandtl, Schmidt et viscosité moléculaire) permettent donc de modéliser correctement les différents flux diffusifs et la cinétique à sept réaction du schéma H2O2-GL7-1 est bien prise en compte dans le code AVBP.

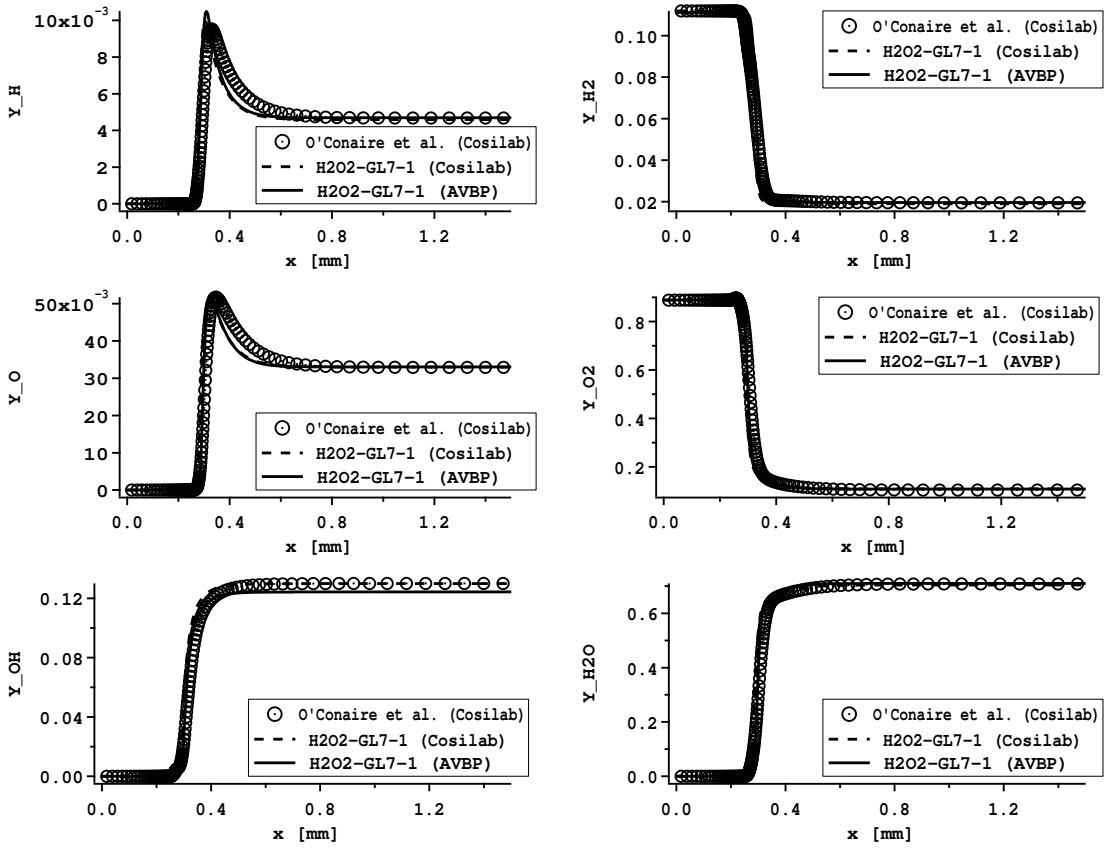


FIG. 6.10 - *Profils des fractions massiques à travers la flamme, obtenus avec la cinétique complexe de O'Conaire et al. [42] (Cosilab) et la cinétique réduite H2O2-GL7-1 (ϕ=1.0, To=300K, Po=1.87bar. $\odot$ O'Conaire et al. ; - - - H2O2-GL7-1 (Cosilab) ; ── H2O2-GL7-1 (*AVBP*)).*

La Figure 6.11 montre une comparaison entre les résultats d'AVBP et de Cosilab, en termes de température d'équilibre et de vitesse de flamme, pour le schéma H2O2-GL7-1. Les températures d'équilibre sont parfaitement reproduites par AVBP car elles ne dépendent que des propriétés thermodynamiques. Les résultats en termes de vitesse sont aussi très proches entre Cosilab et AVBP sur toute la gamme de richesses considérée ($0.5 < \phi < 4$). Ce dernier résultat montre que les paramètres de diffusion et de cinétique permettent de capturer correctement le comportement global de la flamme.

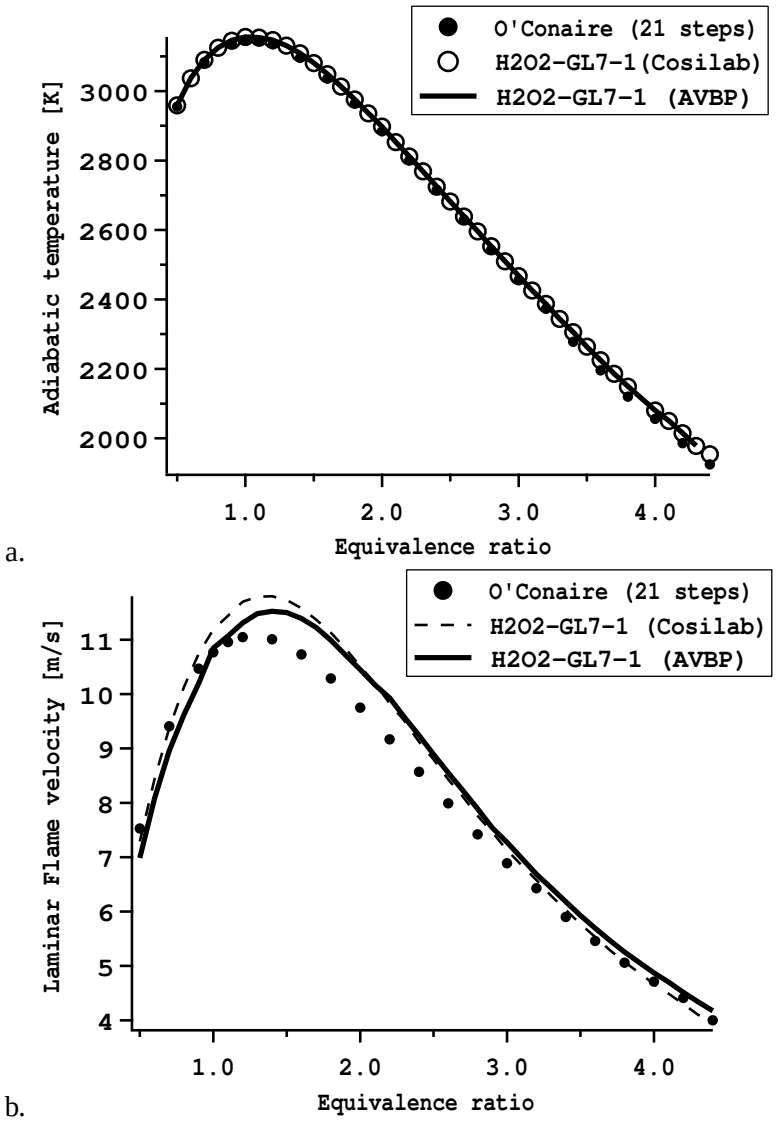


FIG. 6.11 - *Comparaison d'*AVBP *et de Cosilab pour la prédiction des températures d'équilibre (a.) et des vitesses de flamme (b.) en fonction de la richesse (chimie de référence : O'Conaire et al. [42]) ($P = 1,0\,bar$ et $To = 300\,K$).*

6.7 Structure de la flamme de diffusion

Une fois le moteur fusée allumé, la combustion s'effectue en mode de diffusion avec une flamme stabilisée dans la couche de mélange de chaque injecteur. Il est par conséquent important de valider la cinétique ainsi que les paramètres de diffusion sur un cas de flamme de diffusion pure. La configuration choisie est celle de l'écoulement potentiel plan de stagnation (Fig. 6.12). Pour simplifier les conditions limites, les frontières du domaine de calcul suivent les lignes de courant définies dans ce cas précis par

des hyperboles décrites par :

$$xy = cte \tag{6.6}$$

où x et y sont les coordonnées cartésiennes et cte est une constante. Ainsi les limites sont soit des entrées, soit des sorties ou soit des parois glissantes. L'oxygène et l'hydrogène gazeux sont injectés suivant la direction x et les gaz sortent du domaine dans la direction y (Fig 6.12).

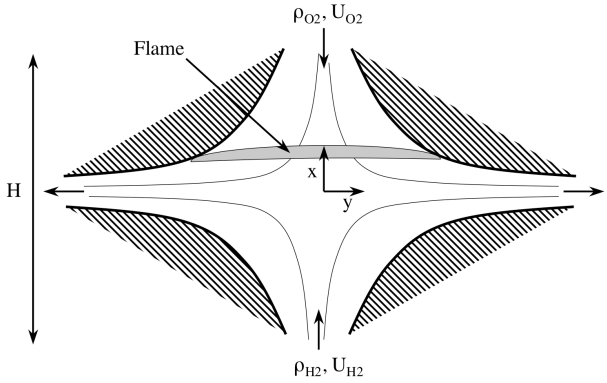


FIG. 6.12 - *Schéma du domaine de calcul 2D de la flamme à contre courant.*

Les valeurs des vitesses sur les surfaces d'injection ont été définies de la façon suivante :
1- de manière à localiser le point d'arrêt de l'écoulement au centre du domaine les flux de quantité de mouvement de l'hydrogène et de l'oxygène doivent être égaux : $\rho_{H_2} \cdot U^2_{H_2}(y) = \rho_{O_2} \cdot U^2_{O_2}(y)$,
2- l'étirement a (approché) est défini par la relation : $a = (|U_{O_2}| + |U_{H_2}|)/H$, où H est la distance entre les deux injecteurs,
3- sur la condition limite d'injection, les vecteurs vitesses doivent être parallèles aux lignes de courant donc $U/x = -V/y \Rightarrow V_{O_2} = -2/H \cdot U_{O_2} y$ et $V_{H_2} = +2/H \cdot U_{H_2} y$.
d'où :

$$U_{H_2}(y) = +\frac{aH}{1+\sqrt{\rho_{H_2}/\rho_{O_2}}} = +\frac{4}{5}aH \tag{6.7}$$

$$V_{H_2}(y) = +\frac{8}{5}ay \tag{6.8}$$

$$U_{O_2}(y) = -\frac{aH}{1+\sqrt{\rho_{O_2}/\rho_{H_2}}} = -\frac{1}{5}aH \tag{6.9}$$

$$V_{O_2}(y) = +\frac{2}{5}ay \tag{6.10}$$

La hauteur H du domaine a été choisie égale à 10 cm et l'étirement a été pris égal à $10\ s^{-1}$ (pour l'étirement considéré, l'épaisseur de la flamme est d'environ 4cm et pour comparaison, l'étirement d'extinction est de l'ordre de $10^5\ s^{-1}$ [88]). L'oxygène et l'hydrogène sont injectés purs à 300K et la pression de sortie est imposée à 1bar, avec $|U_{H_2}| = 0.8\,m/s$ et $|U_{O_2}| = 0.2\,m/s$.

Les résultats obtenus avec AVBP et le schéma réduit H2O2-GL7-1 sont comparés Fig. 6.13 aux calculs de Ribert et al. [170] et de Daguse et al. [46] réalisés dans des conditions identiques avec des

modèles cinétiques et de transport complexes. Etant donné que dans AVBP la diffusion des espèces est basée sur l'approximation de Hirschfelder et Curtis que la diffusion de la chaleur est obtenue par la loi de Fourier et que les effets Soret et Dufour sont négligés, on s'attend à avoir des différences de structure de flamme entre AVBP et les deux cas de référence. Dans le calcul effectué par Ribert et al. [170], la flamme subit un étirement de 20 s^{-1} alors que celle de Daguse et al. [46] est contrainte par un étirement de 10 s^{-1}.

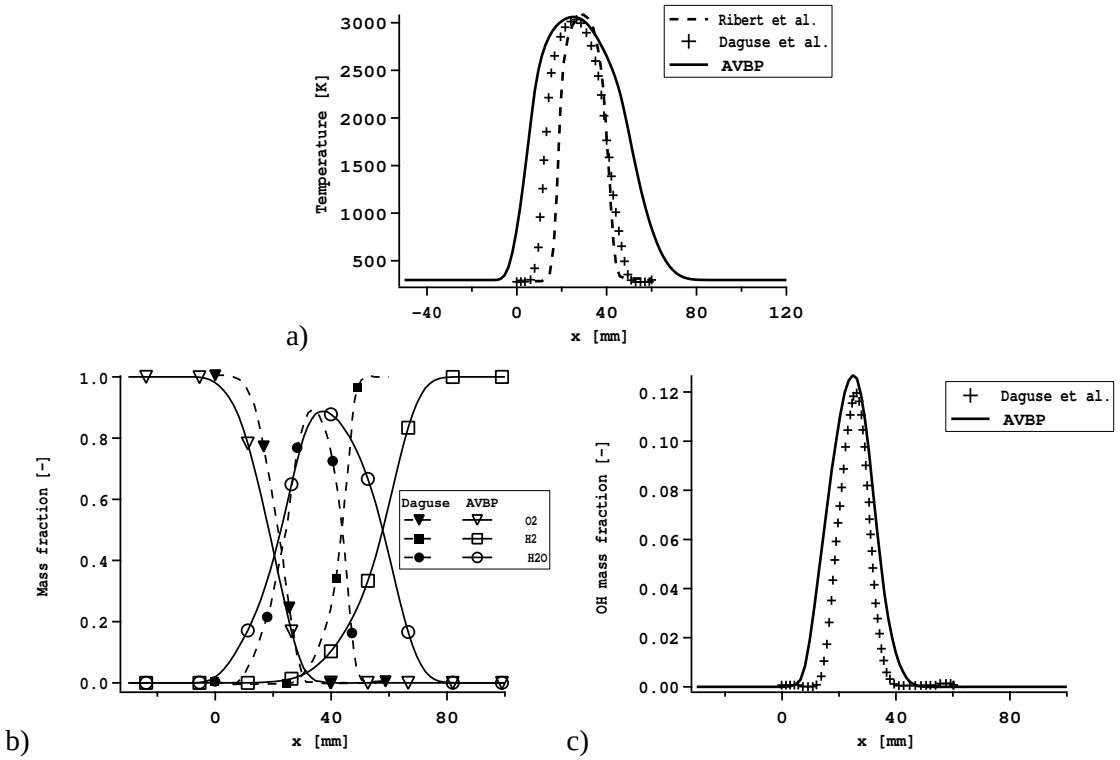


FIG. 6.13 - *Comparaison des résultats d'*AVBP *et les données numériques obtenues par Ribert et al. [170] et Daguse et al. [46] ($P = 1,0\,bar$ et $To = 300\,K$). (a) Profils de température à travers la flamme. (b) Profils des fractions massiques de O_2, H_2 et H_2O dans la flamme (les symboles pleins sont les résultats de Daguse et al. [46] et les symboles vides sont les résultats obtenus avec* AVBP*). (c) Profils de la fraction massique de OH dans la flamme.*

Les valeurs maximum de température et de fractions massiques d'espèces obtenues avec AVBP sont très proches des résultats obtenus par Ribert et al. [170] et Daguse et al. [46] et proches des valeurs à l'équilibre (voir Fig. 6.9 et Fig. 6.10). Ce premier résultat permet de confirmer que la cinétique est plus rapide que les processus d'alimentation de la flamme : diffusion et étirement (dans ce cas d'étirement faible).

Ce résultat peut se généraliser à la combustion dans les moteurs fusées où les étirements sont beaucoup plus importants. Il est possible de définir un nombre de Damköhler pour la flamme à contre courant [157] : $Da = \frac{\tau_f}{\tau_c}$ où $\tau_f \approx \chi_f^{-1}$ (χ_f est le taux de dissipation scalaire au niveau de la flamme) est le temps caractéristique de l'écoulement alimentant la flamme et $\tau_c \approx min\left(\frac{\rho Y_k}{\dot{\omega}_k W_k}\right)$ est le temps carac-

téristique de la chimie. Le taux de dissipation scalaire au niveau de la flamme dépend uniquement de l'étirement :

$$\chi_f = \frac{a}{\pi} exp\left[-2\left(erf^{-1}\left(\frac{\phi-1}{\phi+1}\right)\right)^2\right] \tag{6.11}$$

où ϕ est homogène à une richesse et définie par : $\phi = \frac{sY_{H_2,inj}}{Y_{O_2,inj}} = 8$ dans le cas de la combustion $H_2 - O_2$ (s étant le rapport stoechiometrique). Un développement limité au premier ordre de la fonction erreur inverse ($erf^{-1}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}x + \circ(x^2)$) permet de simplifier la relation :

$$\chi_f \approx \frac{a}{\pi} exp\left[-\frac{\pi}{2}\left(\frac{\phi-1}{\phi+1}\right)^2\right] \approx 0.1\, a \tag{6.12}$$

Finalement, pour les étirement rencontrés dans les moteurs fusées [170] ($a \approx 10^5\, s^{-1}$), $\tau_f \approx 10^{-4}$ et $\tau_c \approx 10^{-8} s$ pour la combustion $H_2 - O_2$ ce qui donne $Da \approx 10^4 s$ justifiant l'hypothèse de chimie infiniment rapide.

L'épaisseur de la zone réactive obtenue avec AVBP ($\approx 6cm$) est cependant plus importante que dans les cas de référence ($\approx 4cm$). Sachant que l'épaisseur d'une flamme étirée δ_{cc} suit la relation [157] : $\delta_{cc} \propto \sqrt{\frac{D}{a}}$ (où D est un coefficient de diffusion), l'erreur sur l'épaisseur de la zone réactive provient soit des paramètres de diffusion soit de l'estimation de l'étirement subi par la flamme. Les nombres de Schmidt des espèces et le nombre de Prandtl présentés section 6.6 sont entre 20 et 30% supérieurs à ceux utilisés par Ribert et al. [170] (la sensibilité de ces paramètres n'a pas été testée).

6.8 Epaississement dynamique et cinétique chimique

Il a été montré dans la section 4.5 que pour ne pas perturber le mélange et les flux thermiques dans les zones non réactives, l'épaississement du front de flamme doit être appliqué de façon dynamique uniquement dans la zone de réaction. Dans le cas du schéma réduit H2O2-GL7-1, sept réactions composent le front de combustion avec des positionnements différents selon leur rôle dans la chaîne réactionnelle (Fig. 6.14). On constate par exemple que la réaction 7 : $H2 + M \leftrightarrow 2H + M$ qui est une réaction de dissociation de l'hydrogène est en "amont" du front de flamme, que les étapes 1 et 2 qui sont des réactions de chaînage sont au centre de la zone réactive et que la réaction 6 de terminaison : $H + OH + M \leftrightarrow H2O + M$ se positionne en "aval".

Il n'est donc pas possible d'utiliser une seule réaction pour détecter la zone dans laquelle l'épaississement doit être appliqué. Le senseur de détection de flamme présenté section 4.5 doit donc être modifié pour prendre en compte toutes les étapes réactionnelles :

$$S = tanh(\beta' B) \tag{6.13}$$

avec β' = 500 et B une fonction locale permettant de prendre en compte le positionnement de toutes les

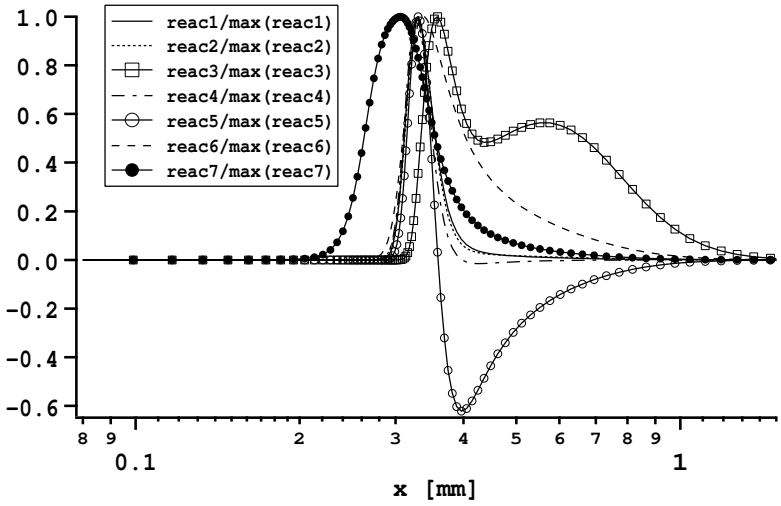


FIG. 6.14 - *Positionnement des différentes réactions (taux nets normalisés) de la cinétique réduite H2O2-GL7-1 (To=300 K, P=1 bar et ϕ=1.0).*

réactions :

$$B(C_k) = max\left(\frac{\Omega_j(C_k)}{\Omega_j^0(C_k)}\right),\ j = 1, m \tag{6.14}$$

$$\Omega_j(C_k) = \left(\frac{\rho Y_k}{W_k}\right)^{\nu'_{kj}} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \tag{6.15}$$

$$\Omega_j^0(C_k) = max(\Omega_j(C_k)) \tag{6.16}$$

$$\Gamma_T = 0.5 \tag{6.17}$$

Les valeurs des Ω_j^0 (pour un cas à $\phi = 1$, $T = 300\,K$ et $P = 1\,bar$) pour les sept réactions sont données dans la table 6.7 :

TAB. 6.7 - *Valeurs des différents Ω_j^0 ($\phi = 1$, $T = 300\,K$ et $P = 1\,bar$)*

Réaction j	Ω_j^0
1	0.453
2	0.699
3	0.008
4	0.679
5	0.681
6	1.279
7	0.005

Ces valeurs des Ω_j^0 changent avec le mélange. Des tests sur des flammes 1D montrent que l'utilisation des valeurs de la table Tab. 6.7 donne des résultats acceptables pour une large gamme de richesse ($0.5 < \phi < 4$).

La formulation de Ω utilisée communément pour les cinétiques à une seule étape est rappelée ci-après :

$$\Omega_j(Y_k) = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}\right) \tag{6.18}$$

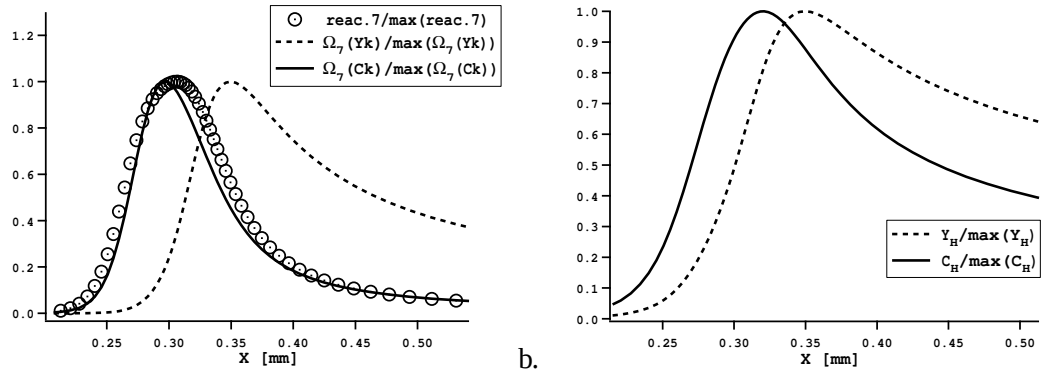
Comme pour la relation 6.14, il est possible de définir une fonction $B(Y_k)$:

$$B(Y_k) = max\left(\frac{\Omega_j(Y_k)}{\Omega_j^0(Y_k)}\right) \ , \ j = 1, m \tag{6.19}$$

$$\Omega_j^0(Y_k) = max(\Omega_j(Y_k)) \tag{6.20}$$

$$\Gamma_T = 0.5 \tag{6.21}$$

Dans la relation Eq. 6.15 la fonction Ω_j calculée pour la réaction j n'est plus basée sur les fractions massiques des réactifs comme dans l'Eq. 6.18 mais sur les concentrations molaires. Cette modification est liée à la présence d'espèces légères (H et H_2) et permet de mieux localiser les réactions faisant intervenir les espèces H et H2 (exemple Fig. 6.15a.) dont les maxima de concentration et de fraction massique peuvent ne pas coïncider (Fig. 6.15b.).



a. b.

FIG. 6.15 - *a. Comparaison des fonctions $\Omega(C_k)$ et $\Omega(Y_k)$ pour le cas de la réaction 7 : $2H + M \leftrightarrow H2 + M$. b. position des maxima de concentration (C_h) et de fraction massique (Y_h) pour l'espèce H.*

On constate Fig. 6.16 que la localisation de la zone réactive par la nouvelle fonction $\Omega(C_k)$ est correcte contrairement à celle donnée par la fonction standard $\Omega(Y_k)$. Il est à souligner que les fonctions $\Omega_j(C_k)$ servant au calcul de Ω ont la forme de taux de réaction dans le sens direct (*forward* en englais) et non de taux de réaction nets (comprenant aussi le sens inverse ou *backward*). En effet, même si dans les gaz brûlés les taux de réaction nets sont nuls (équilibre chimique), les taux *forward* et *backward* ne le sont pas (Fig. 6.17). Une résolution insuffisante des taux rf et rb même en zone d'équilibre peut conduire à des instabilités numériques et il est donc nécessaire d'épaissir ces régions en plus du front de flamme.

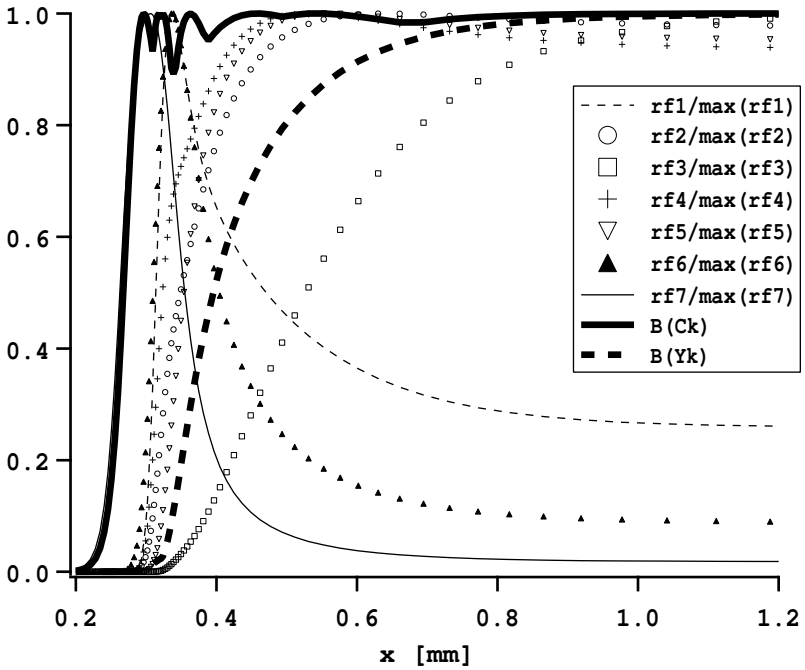


FIG. 6.16 - *Positionnement de la fonction $B(C_k)$ (Eq. 6.14) par rapport aux taux "forward" (rf) des sept réactions du schéma. Comparaison avec la fonction $B(Y_k)$ (Eq. 6.19).*

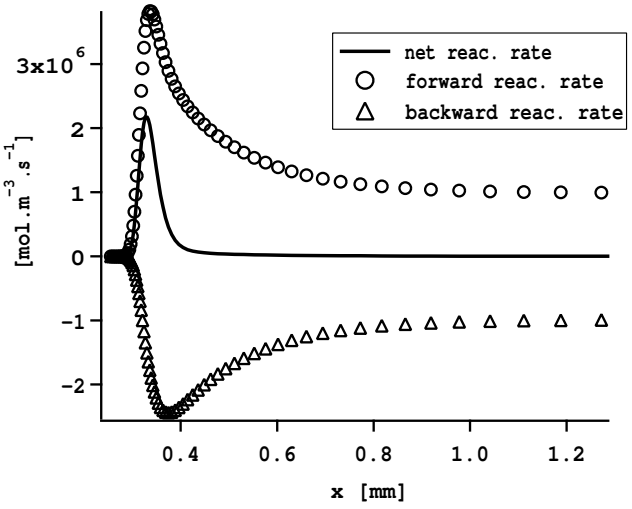


FIG. 6.17 - *Taux de réaction net, forward et backward pour l'étape 1.*

Les tests de flamme mono-dimensionnelle (Fig. 6.18) réalisés avec AVBP ont montré que le senseur localisait bien le front de flamme et les zones d'équilibre.

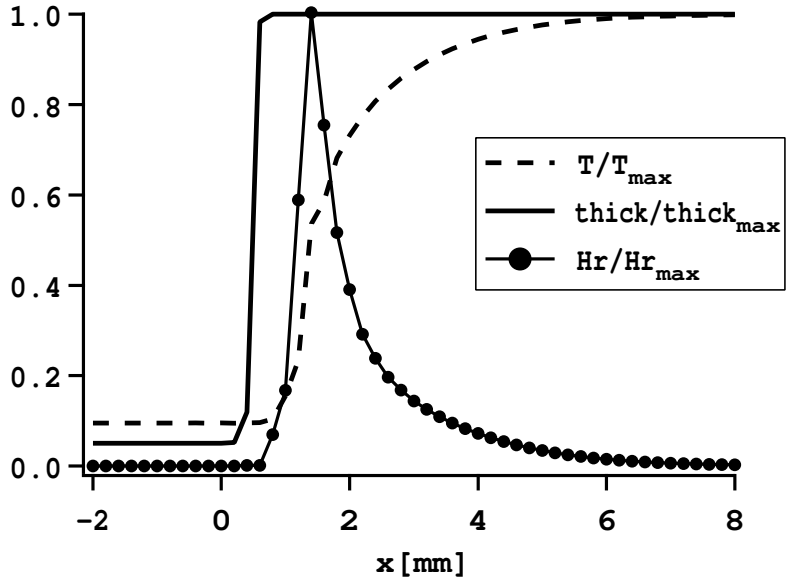


FIG. 6.18 - *Profils de Température (T), d'épaississement (thick) et de dégagement de chaleur (Hr) dans une flamme prémélangée calculée avec* AVBP *(ϕ = 1 et P=2 bar).*

Deuxième partie

Allumage par dépôt d’énergie

Chapitre 7

Phénoménologie et théorie

7.1 Introduction

L'allumage d'un système convertissant une énergie potentielle chimique en travail mécanique est la phase transitoire entre son état inerte (mais potentiellement réactif) et un de ses états réactifs. Les caractéristiques souhaitées de cette phase sont les suivantes : être contrôlable, posséder un temps caractéristique le plus court possible, être reproductible, nécessiter un apport énergétique minimum et être réalisable par un dispositif d'encombrement et de masse faible. En effet, dans le cas des moteurs à combustion interne l'allumage commandé doit atteindre des taux de ratés minimums avec une grande précision du calage du déclenchement de l'étincelle par rapport à la position du piston. Pour les turbines aéronautiques le ré-allumage d'un moteur suite à son extinction accidentelle doit s'effectuer rapidement malgré les conditions de haute altitude (pression et température faibles) ou les conditions climatiques défavorables (pluie, neige). L'allumage des moteurs fusées est aussi une étape délicate car les puissances mises en jeu et le coût de la charge utile sont très importants. Dans le cas d'un moteur cryotechnique, le déclenchement de la combustion intervient dans une séquence complexe d'injection qui ne tolère ni les avances ni les retards d'allumage.
Même si les processus physiques intervenant dans une séquence d'allumage commencent à être bien connus pour des cas simples et académiques, la mise au point des système d'initiation de la combustion, dans le cas de moteurs réels, reste relativement empirique. Un des points critique est le tout début de la phase d'allumage, c'est-à-dire le transfert d'énergie du système d'allumage au mélange réactif encore inerte.
Ce chapitre est dédié à la présentation et la validation d'un modèle simple pour décrire cette phase dans le cas d'un allumage par dépôt d'énergie, de type étincelle électrique ou laser. Dans un premier temps, différents systèmes d'allumeurs seront décrits et évalués face aux exigences énoncées précédemment puis une phénoménologie des allumages par bougie électrique et par laser sera donnée. Dans une troisième section, les paramètres prépondérants d'un allumage par dépôt d'énergie seront identifiés, et enfin, le modèle sera présenté ainsi que les tests qui ont permis de le valider.

7.2 Systèmes d'allumage

Les contraintes citées précédemment ont motivé de nombreuses recherches et développement sur les différentes techniques d'allumage. Certaines de ces méthodes sont présentées ci-après.

7.2.1 Bougie électrique

La bougie électrique est le type d'allumeur le plus commun du fait de sa facilité de mise en place, sa simplicité, sa fiabilité et son coût de fabrication. Son mode de fonctionnement est relativement simple : une tension importante ($\approx 30\ kV$) est créée entre une cathode et une anode (par un système inductif ou capacitif) et lorsque la tension est suffisante, une ionisation du gaz a lieu entre les deux électrodes générant un plasma chaud ($\approx 10000\ K$) qui initie la combustion du mélange avoisinant [113].
L'intérêt d'un tel dispositif est d'avoir un temps de réponse court ce qui permet notamment d'effectuer plusieurs claquages successifs rapprochés, dans le cas d'un ré-allumage de foyer aéronautique par exemple. Un des désavantages majeur est que ce système doit être disposé sur une des parois de la chambre de combustion, ce qui est généralement défavorable à la croissance du noyau de flamme à cause des pertes thermiques dans le métal.
La phénoménologie de l'allumage par étincelle est présentée dans la section 7.3.

7.2.2 Laser

L'idée d'utiliser un laser pour initier une combustion remonte aux années 70 [113]. Le principe est très proche de celui de l'étincelle électrique. Un rayon laser à haute énergie est focalisé dans un mélange gazeux inflammable. Le gaz, bombardé par l'intense flux de photons se ionise induisant la formation d'un plasma suffisamment chaud pour déclencher un noyau de flamme. Ce dispositif présente plusieurs avantages par rapport aux bougies conventionnelles : d'abord le lieu d'initiation de la combustion peut être choisi à condition d'avoir un accès optique, ensuite le noyau de flamme généré ne souffre pas des pertes thermiques induites par la présence des électrodes et des murs de la chambre. Néanmoins, les problèmes de volume et de poids des lasers ainsi que la nécessité d'un accès optique n'ont pas encore été résolus, limitant leur application à des cas expérimentaux.
Une description des phénomènes intervenant dans l'allumage par laser est présentée dans la section 7.3.

7.2.3 Torche de gaz chauds

Ce dispositif est généralement utilisé pour les moteurs fusées cryotechniques ainsi que pour quelques applications aéronautiques. L'allumage est ici déclenché par un jet de gaz brûlés à haute température débouchant dans la chambre de combustion et généré par un foyer amont de faible dimension. La probabilité d'allumage est en principe très élevée puisque la surface de contact entre les gaz chauds et les gaz frais est importante. Les principaux inconvénients sont que ce système est complexe et encombrant avec un temps de réponse long ce qui n'est pas favorable à son utilisation dans l'aéronautique [113].

7.2.4 Allumeur plasma

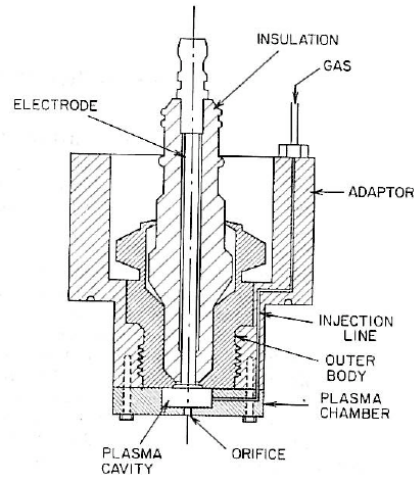


FIG. 7.1 - *Schéma d'un allumeur à jet plasmique [135].*

Le concept de ce système est proche de celui d'une bougie électrique mais son fonctionnement est basé sur deux claquages très rapprochés dans le temps. Lors du premier, le gaz contenu dans la cavité de l'allumeur (*plasma cavity*) se ionise (Fig.7.1). La seconde décharge électrique (de plus forte intensité) provoque une surpression à l'intérieur de cette petite enceinte et un jet de plasma est alors éjecté dans la chambre. Clements et al. [38] ont montré que ce type d'allumeur était plus efficace qu'une bougie électrique du fait qu'il génère un jet de plasma chaud qui initie la combustion loin des parois de la chambre diminuant ainsi les pertes thermiques subi par le noyau initial de flamme. Ces dispositifs sont tout de même sujets à d'importants problèmes d'érosion de la cavité, ce qui pour l'instant empêche leur utilisation dans les moteurs à combustion interne et aéronautiques.

7.2.5 Allumage chimique

Certaines substances chimiques ont la particularité de s'enflammer spontanément dès qu'elles sont en contact avec l'air produisant un dégagement de chaleur important. L'injection dans une chambre de combustion d'une très faible quantité de ce type de substance, telle que le triméthyle d'aluminium permet de déclencher un allumage de façon efficace [113]. Les problèmes de stockage et de sûreté en cas d'accident limitent leur utilisation à des applications militaires et aux lanceurs spatiaux.

Cette liste non exhaustive des différents dispositifs d'allumage montre que l'initiation de la combustion dans un système réactif n'est pas un problème simple et que le type d'allumeur à utiliser dépend de la configuration. De façon générale, l'allumage par étincelle électrique est le plus répandu car son contrôle, sa fiabilité et sa mise en place sont adaptés aux contraintes de l'aéronautique et de l'industrie automobile. Les autres systèmes sont en développement ou utilisés dans un cadre expérimental comme on le verra dans le chapitre IV où la combustion est initiée par laser dans un banc moteur fusée de laboratoire.

7.3 Phénoménologie de l'allumage par dépôt d'énergie

Dans cette section deux types d'allumages par dépôt d'énergie sont décrits : l'initiation de la combustion par une bougie électrique puis par laser.

7.3.1 Allumage par bougie électrique

Maly et Vogel proposent dès 1978 une description en quatre phases de l'allumage par bougie [121] : la phase de pré-claquage, la phase de claquage, la création de l'arc et enfin la phase de décharge (Fig. 7.2).

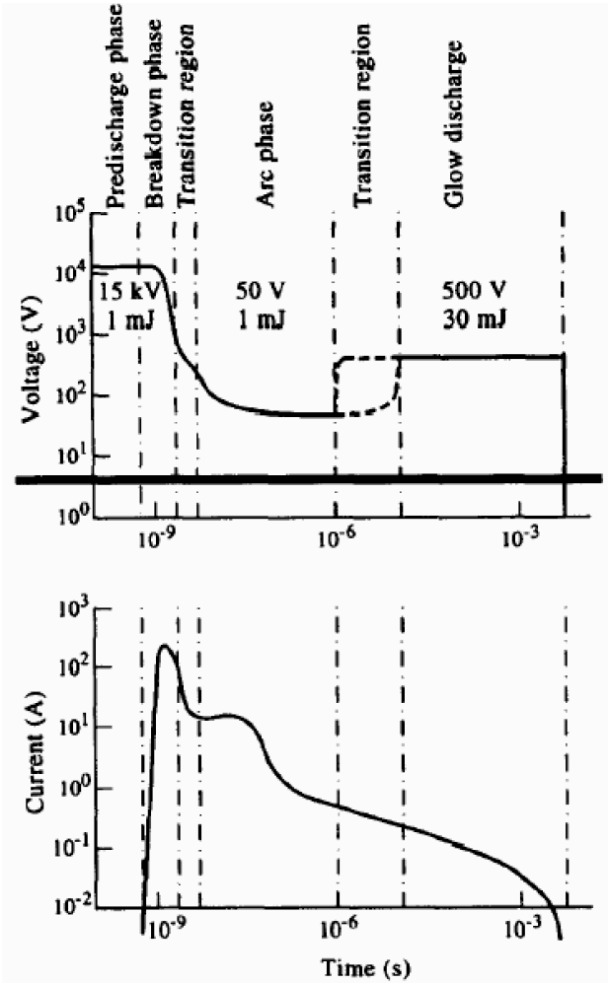


FIG. 7.2 - *Evolutions temporelles de la tension et de l'intensité aux bornes des électrodes lors du claquage électrique [121].*

Phase de pré-claquage (*Pre-breakdown* : $0 < t < 1\,ns$)
Cette phase précurseur de l'étincelle électrique intervient dès que la tension entre les électrodes atteint sa valeur maximum ($\approx 15\ kV$) (Fig. 7.2). Sous ce puissant champ électrique, les électrons libres, naturellement présents en très faible concentration dans le mélange ($10^3\ cm^{-3}$) (causés par la radioactivité naturelle et les rayons cosmiques), sont fortement accélérés vers l'anode. Au cours de leur déplacement, ces électrons percutent des molécules de gaz ; si leur énergie cinétique est suffisante, ces collisions vont générer des ions et d'autres électrons libres. Ces nouveaux ions et électrons vont à leur tour être accélérés (respectivement vers la cathode et vers l'anode) ce qui produit une augmentation du nombre de collisions que l'on appelle cascade électronique [112]. On observe alors la formation de décharges filamentaires (*streamers* en anglais) induisant un courant très faible entre les deux électrodes. A la fin de cette phase, l'ionisation du gaz commence à s'accélérer, accompagnée d'une augmentation de l'intensité du courant entre les électrodes. La température du gaz est peu élevée ($\approx 1000\ K$) constituant un plasma froid hors équilibre [121].

Phase de claquage (*Breakdown* : $1\,ns < t < 30\,ns$)
Lorsque le phénomène de ionisation s'emballe, l'intensité du courant augmente de façon exponentielle en quelques dizaines de nanosecondes, s'accompagnant d'une chute de tension [121] (Fig. 7.2). La circulation du courant s'établit dans le tunnel ionisé opposant le moins de résistance [214] (Fig. 7.3). Le nombre de collisions électroniques devient alors très important, conduisant à un échauffement du milieu qui évolue vers un état de plasma chaud ($40000 - 60000\ K$) [121]. L'élévation brutale de la température produit une dilatation soudaine du gaz et la génération d'une onde de pression.

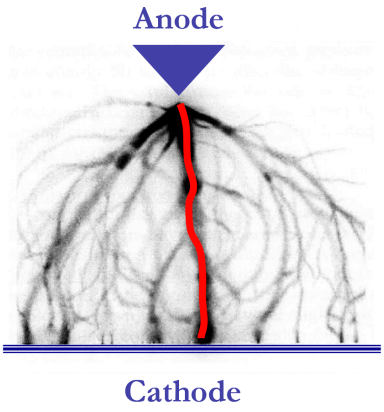


FIG. 7.3 - *Phase de claquage : les streamers deviennent des tunnels conducteurs [214].*

Phase d'arc (*Arc phase* : $30\,ns < t < 1\,\mu s$)
Le gaz, rendu conducteur lors de la phase de claquage, va permettre le passage d'un courant relativement faible ($\approx\ 100\ mA$) sur une durée de l'ordre de la micro-seconde. Ce flux d'électrons va entretenir le plasma chaud, visible sous la forme d'une étincelle. Au fur et à mesure que le volume de plasma augmente, sa température diminue pour atteindre une valeur de l'ordre de $8000\ K$ [121].
C'est pendant cette phase que les très hautes températures du plasma et la présence de radicaux vont

déclencher les premières réactions chimiques. L'état d'excitation du milieu à l'intérieur du tunnel plasmique est tel qu'aucune réaction chimique ne peut y avoir lieu. C'est seulement à la surface du plasma, où le gaz n'est pas ionisé mais où la température est de l'ordre de $5000\ K$, que l'emballement chimique peut débuter [121].

Phase de décharge luminescente (*Glow phase* : $1\,\mu s < t < 2\,ms$)
Cette dernière phase de l'étincelle se caractérise par un refroidissement ($3000\ K$) du plasma et une diminution de sa conductivité. L'intensité du courant étant maintenue, la tension aux bornes des électrodes tend à augmenter pour atteindre environ 500 V [121]. Même si la tension et l'intensité du courant sont faibles, la majeur partie de l'énergie électrique du système d'allumage est transmise ($> 90\%$) lors de cette phase dont la durée est de l'ordre de la milliseconde. Le noyau de flamme généré lors de la phase d'arc reçoit ainsi l'énergie nécessaire pour se développer.

Le tableau suivant (Tab. 7.1) évalue les pertes et le taux de transfert de l'énergie du système électrique au plasma.

	Claquage	Arc	Décharge luminescente
Part de l'énergie totale	3%	3%	94%
Perte radiative	$< 1\%$	$\approx 5\%$	$< 1\%$
Perte par conduction (électrodes)	$\approx 5\%$	$\approx 45\%$	$\approx 70\%$
Part de l'énergie totale disponible pour l'allumage	**$\approx$ 3%**	**$\approx$ 1,5%**	**$\approx$ 28%**

TAB. 7.1 - *Bilan énergétique d'une étincelle électrique [121].*

Une étude plus récente menée par Teets et al. [213] montre que l'onde de choc générée par la dilatation soudaine du plasma chaud est responsable d'une part significative des pertes énergétiques. Dans cette étude, l'énergie transmise au gaz est estimée à 10% de l'énergie de l'allumeur.

7.3.2 Allumage par laser

Ronney [173] a réalisé une revue des applications potentielles des laser pour l'allumage ainsi qu'une comparaison avec des systèmes conventionnels comme des bougies électriques. Il est possible d'identifier trois mécanismes induisant un allumage par laser : l'initiation thermique, l'allumage par effet photochimique et l'initiation par plasma chaud [151].
Dans le cas d'un allumage par initiation thermique, le laser est utilisé comme source chaude, produisant localement une élévation de température sans pour autant générer un plasma. L'efficacité de cette méthode peut être augmentée en focalisant le laser sur une cible comme l'extrémité d'une aiguille ou un fil métallique très fin [212]. L'élévation de température permet la création de radicaux et l'initiation de la combustion. Ce procédé à l'avantage de nécessiter peu d'énergie et d'être bien adapté à l'allumage de combustible solide. Son application pour l'allumage de mélange gazeux requiert néanmoins que le milieu soit fortement absorbant ce qui peut être amélioré par l'ajout d'additifs [151].

Le but de l'allumage photochimique (incluant les méthodes d'allumages par claquage résonnant et par ionisation multiphoton) est de ioniser une molécule précise du mélange. Des ions excités sont alors produits, pouvant à leur tour initier une combustion. Il faut pour cela choisir une espèce cible, dont une fréquence d'excitation est connue, et régler précisément le laser sur cette fréquence pour pouvoir la dissocier [151]. Le désavantage de cette technique est que le mélange doit être suffisamment homogène pour que l'espèce considérée soit en concentration suffisante au point focal du laser, ce qui n'est pas être garanti dans la plupart des brûleurs industriels.
Enfin, l'allumage par plasma chaud (détaillé ci-après), est proche d'un allumage par arc électrique. Dans ce cas le laser est suffisamment puissant pour ioniser totalement le gaz qui transitionne vers un plasma chaud ($\approx 100000\ K$). L'énergie transmise au gaz conduit ensuite à l'initiation de la combustion. Cette méthode a fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales [111, 203, 151, 152, 11, 24, 13] dont les différents résultats ont été utilisés pour réaliser la description phénoménologique présentée ci-après.

Génération du plasma chaud

Initialement, le gaz est pratiquement transparent pour le laser. Le bombardement photonique intense permet de ioniser quelques molécules qui vont alors libérer des électrons (Fig. 7.4). Comme pour le cas d'un arc électrique, ces premiers électrons vont être accélérés, entraînant une cascade électronique [151, 24]. L'accélération des électrons est due à un phénomène appelé *Bremsstrahlung inverse* : leur énergie cinétique augmente lorsqu'ils rencontrent un photon (Fig. 7.5). Ces électrons induisent alors des collisions suffisamment énergétiques pour ioniser d'autres molécules. Le milieu devient alors de plus en plus opaque au laser, à cause de l'augmentation de la concentration en électrons libres et l'efficacité du transfert énergétique est alors maximum avec 80% de l'énergie du laser absorbée par le plasma [203, 11, 13]. La création de ce plasma chaud est très rapide ($\approx\ 10\ ns$), la température et la pression à l'intérieur du volume ionisé sont alors respectivement de l'ordre de 100000 K et 1000 atm [24, 151, 152, 203]. Ces conditions extrêmes, atteintes dans des temps caractéristiques très courts, conduisent à la formation d'une puissante onde de choc [13, 24, 11, 111, 151, 152, 203].

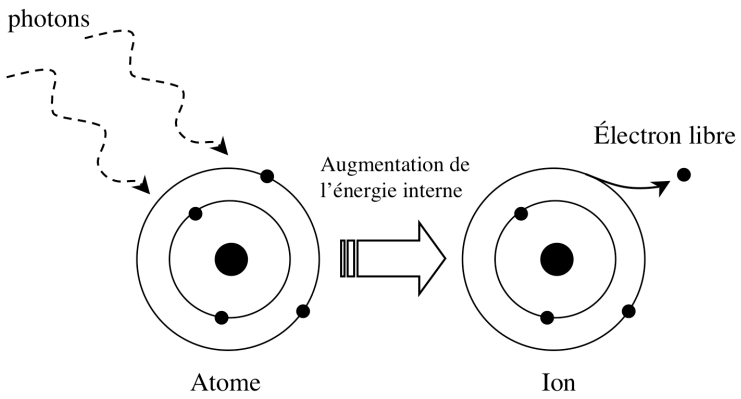


FIG. 7.4 - *Ionisation par bombardement de photons.*

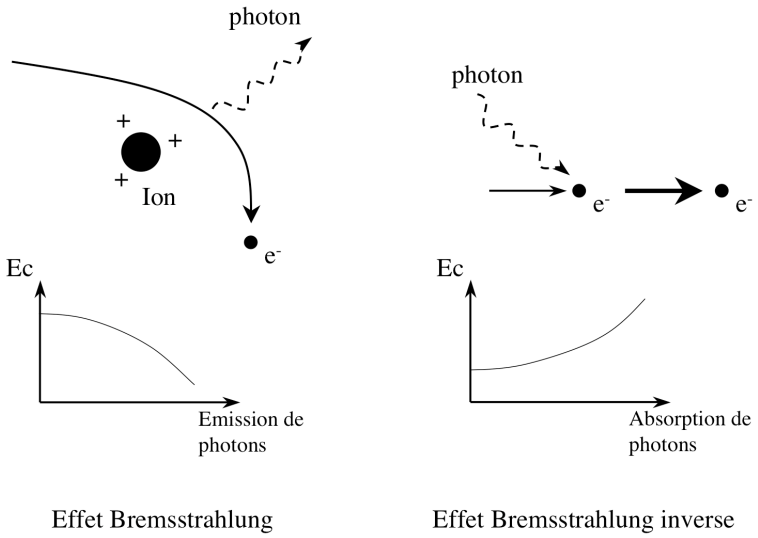


FIG. 7.5 - *Schéma des effets Bremsstrahlung et Bremsstrahlung inverse. Lors de l'effet Bremsstrahlung, la perte d'énergie cinétique par un électron libre, causée par une modification de trajectoire, se traduit par l'émission d'un photon. Le phénomène opposé est l'effet Bremsstrahlung inverse qui se caractérise par un gain d'énergie cinétique par bombardement photonique.*

Propagation de l'onde de choc

Dans certains cas, cette onde sphérique se propageant vers l'extérieur du point de focalisation (Fig. 7.6) peut conduire à l'allumage du gaz avoisinant [111, 151, 152]. Généralement, les délais d'allumage étant de l'ordre de la milliseconde, cette onde, dont le temps caractéristique inférieur à la microseconde, ne permet pas d'initier une combustion. L'énergie de ce choc est donc considérée comme perdue. Phuoc et White [152] ont mesuré l'énergie dissipée par l'onde par une méthode optique dans le cas d'un claquage laser dans de l'air. Ils ont montré que les pertes dues au chocs sont de l'ordre de 57 à 70% de l'énergie du laser soit près de 70 à 85% de l'énergie transmise au plasma. Ce résultat a été confirmé par Bradley et al. [24].

Initiation de la flamme

Dans le même temps le plasma transmet de l'énergie et des radicaux au gaz environnant conduisant à l'activation des premières réactions chimiques. Une fois que l'onde de choc a quitté le noyau plasmique, les seules pertes énergétiques sont dues au rayonnement et à la recomposition des ions et électrons libres en espèces stables [152]. Phuoc et White ont calculé que ces pertes représentent 22 à 34% de l'énergie du laser [152]. Si l'énergie résiduelle est suffisante, un noyau de flamme auto-entretenu est créé.

Du point de vue de la dynamique de l'écoulement, un tel allumage est différent d'un allumage par bougie. En effet, l'onde de choc conduit à une perturbation importante de l'écoulement proche du point focal modifiant la topologie de la flamme dans ses premiers instants. Bradley et al. [24] ont étudié la dynamique de l'écoulement par imagerie Schlieren rapide, avec et sans combustion et en faisant varier l'intensité de la turbulence. La dilatation due à l'onde de choc sphérique conduit à la formation d'une

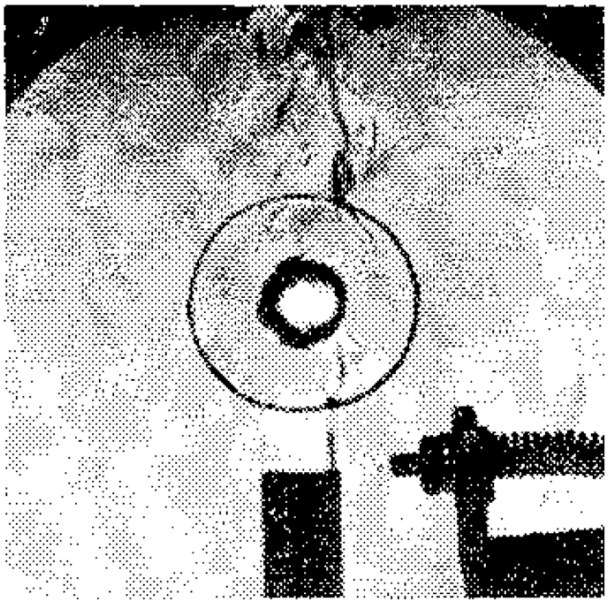


FIG. 7.6 - *Image Schlieren prise par Lee [111] dans les premiers instants de l'allumage par laser d'un jet de propane-air à la stoechiométrie : l'onde de choc vient de sortir du noyau plasmique.*

zone de raréfaction au centre de la sphère qui tend à créer une aspiration centripète. Cette aspiration couplée à une dissymétrie du champs de densité dans cette région conduit à la formation d'un tourbillon torique puis à un "troisième lobe". Dans son travail de thèse Ternel [214] montre que pour un allumage d'un mélange dans une enceinte au repos, cette perturbation a un impact sur la forme de la flamme pendant les premières 10 ms (Fig. 7.7). Bradley et al. [24] montrent que cette modification de l'écoulement est défavorable dans le cas d'allumage d'un mélange dont la richesse est proche de sa limite d'extinction pauvre, car l'augmentation de la surface du plasma induit une augmentation des pertes thermiques. Cependant pour des allumages de mélanges proches de la stoechiométrie ou riches, le plissement généré par le tourbillon et le lobe tendent à favoriser son développement.

Le tableau suivant (Tab. 7.2) évalue les pertes et le taux de transfert de l'énergie du laser au gaz.

Part de l'énergie totale perdue par le choc	$\approx$ 57 - 70%
Part de l'énergie totale perdue par rayonnement	$\approx$ 22 - 34%
Part de l'énergie totale disponible pour l'allumage	$\approx$ **7 - 9%**

TAB. 7.2 - *Bilan énergétique d'un allumage laser par plasma chaud [152].*

Il est à noter que le transfert énergétique d'un laser ($\approx 10\%$ de l'énergie totale) est moins efficace que pour une bougie électrique ($\approx 10 - 30\%$ de l'énergie totale).

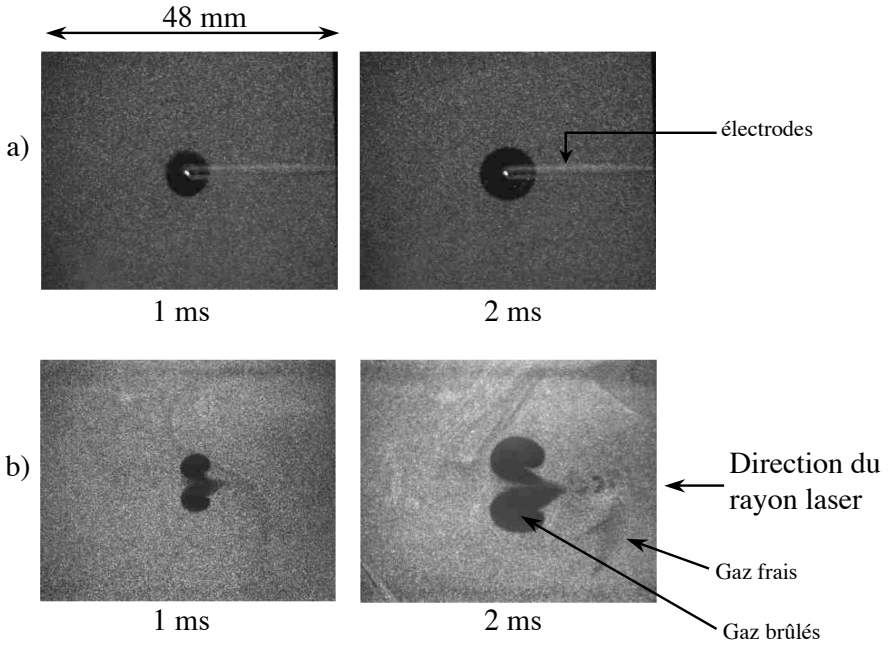


FIG. 7.7 - *Visualisation par tomographie du noyau de flamme dans les instants qui suivent le dépôt d'énergie (mélange isooctane-air à une richesse de 0,8 ensemencé par des gouttes d'huile) [214]. a) allumage par bougie électrique, b) allumage par laser (30 mJ) (le temps sous chaque image correspond au temps écoulé depuis le dépôt).*

7.4 Paramètres influençant l'allumage

Le succès d'un allumage par dépôt d'énergie (laser ou bougie électrique) dépend à la fois de la manière dont est déposée l'énergie (quantité d'énergie déposée et volume et durée de dépôt) et des conditions d'écoulement dans la région de l'allumage (pression et température, vitesse de l'écoulement, intensité turbulente, mélange, etc). Il est proposé dans cette section une revue des caractéristiques de l'allumeur et de l'écoulement ayant une influence importante sur l'allumage.

7.4.1 Influence des caractéristiques de l'allumeur

Energie minimum d'allumage

De nombreuses mesures expérimentales [117, 151, 11, 98] et calculs analytiques [52, 33, 32, 98] montrent qu'il existe une énergie en-dessous de laquelle un allumage conduisant à une flamme auto-entretenue est impossible. Si l'énergie déposée n'est pas suffisante, le noyau de flamme se dissipe rapidement : la production de chaleur par la chimie ne compense pas les pertes thermiques par effets

diffusifs, conductifs et convectifs. Cette énergie minimum (que l'on appellera MIE pour l'anglais *Minimum Ignition Energy*) dépend principalement du mélange, des conditions thermodynamiques, du volume et du temps de dépôt, des conditions d'écoulement (vitesse et niveau de turbulence) et du type d'allumeur (diamètre des électrodes, distance entre l'anode et la cathode, longueur d'onde du laser, etc). Glassman [70] donne une relation simple pour déterminer cette énergie minimum pour un mélange gazeux : $MIE = (4/3\pi r_c^3)\rho C_p(T_b - T_0)$, où r_c est le rayon minimum du dépôt, ρ, C_p et T_0 sont respectivement la densité, la capacité calorifique à pression constante et la température des gaz frais, T_b la température d'équilibre de flamme. La question du rayon minimum ou rayon critique de dépôt est traitée dans la section suivante. Phuoc et al. [151] ont mesuré que la valeur de la MIE est de l'ordre de 4 à 5 mJ, dans le cas d'un allumage par laser d'un mélange méthane-air sous conditions atmosphériques et sans écoulement. Ce résultat est un ordre au dessus de celui obtenu par Lewis et Von Elbe ($\approx 0,4\ mJ$) [117] qui ont réalisé la même mesure mais avec une bougie électrique. L'explication donnée par Phuoc et al. [151] est que dans le cas de leurs tests, les durées de dépôts sont beaucoup plus courtes que dans le cas d'un allumage par arc électrique et que la topologie de la flamme dans les premiers instants diffère dans les deux cas (voir section 7.3.2).

Rayon minimum du dépôt

Le volume initial du dépôt est aussi un paramètre important. Pour une énergie et un temps de dépôt donnés, si le rayon initial est trop petit la chaleur du noyau est dissipée par conduction plus rapidement qu'elle n'est produite par la chimie. Dans le cas inverse, si le volume est trop important (toujours à énergie et à durée de dépôt données), la puissance locale fournie n'est alors plus suffisante pour que la température dépasse la température d'allumage. Une détermination analytique de ce rayon critique est possible en supposant que le dégagement de chaleur produit par la flamme compense exactement les pertes thermiques. Champion et al. [33] ont comparé leurs résultats analytiques à des mesures expérimentales dans le cas d'allumage par étincelle de mélanges propane-air. La relation trouvée par Champion et ses collaborateurs montre que le rayon critique dépend entre autre de l'épaisseur de flamme laminaire et du nombre de Lewis [33]. Une bonne approximation souvent rencontrée dans la littérature est : $r_c \approx 3\delta_l$ où δ_l est l'épaisseur de flamme laminaire.

Durée minimum du dépôt

Comme pour le rayon, la durée de l'apport d'énergie par l'allumeur est déterminante pour le succès d'un allumage. En effet, à une énergie et un rayon de dépôt donnés, il existe un temps critique en-dessous duquel le temps caractéristique chimique devient inférieur au temps caractéristique de diffusion de la chaleur, conduisant à un échec de l'allumage. D'une façon similaire au calcul du rayon critique, Champion et al. [33] ont déterminé une relation pour le temps critique : $t_c \propto r_c^2/D_{th}$ où $D_{th} = \lambda/(\rho C_p)$ est le coefficient de diffusion thermique dans les gaz brûlés.

Les trois paramètres qui viennent d'être présentés sont les trois paramètres principaux communs aux allumeurs par bougie et par laser. Il existe d'autres caractéristiques de second ordre propres à chaque système. Dans le cas d'une bougie on peut citer la fréquence des étincelles, la forme des électrodes, la position de l'allumeur relativement aux parois et pour les laser, la longueur d'onde, le profil énergétique du faisceau.

7.4.2 Influence des conditions d'écoulement

Pression

La pression joue un rôle important dans deux étapes successives d'un allumage : d'abord lors du transfert de l'énergie de l'allumeur vers le gaz puis lors de la phase d'emballement chimique.
Dans le cas d'un allumage par arc, la pression a un effet défavorable sur la génération du plasma chaud. Paschen et al. [148] ont établi une relation entre la tension de claquage et la pression, la température et l'espacement inter-électrodes : $V \propto Pe/T$ où V est la tension, P, e et T respectivement la pression, l'espacement inter-électrode et la température. La génération d'un plasma est d'autant plus difficile que la pression est élevée (ce qui est observé dans [214] : Fig.7.8a). En effet, plus la pression augmente, plus le libre parcours moyen des électrons libres est faible et plus le champs électrique doit être important pour pouvoir les accélérer suffisamment entre deux collisions et conduire ainsi au déclenchement d'une cascade électronique (voir section 7.3).

Pour un allumage par plasma, il a été observé expérimentalement par Phuoc et White [151] et par Bradley et al. [24] que plus la pression augmente plus l'énergie nécessaire à la création d'un plasma diminue (Fig.7.8b). Dans ce cas, la diminution de la distance entre deux collisions avec l'augmentation de la pression a un effet de second ordre face à l'augmentation de leur fréquence. La relation trouvée par Phuoc et White pour des allumages de mélanges méthane-air est la suivante : $E_{thr} \propto P^{-2/n}$ avec $n = 4$ et où E_{thr} est l'énergie nécessaire pour créer un plasma.

L'impact de la pression sur l'initiation de la flamme a été étudiée expérimentalement par Ballal et Lefebvre [7]. Les résultats expérimentaux montrent globalement que la MIE diminue lorsque la pression augmente car le coefficient de diffusion thermique diminue ($D_{th} = \mu/(\rho P_r) \propto 1/P$). Pour des mélanges purement gazeux, où le succès de l'initiation d'une flamme "robuste" dépend principalement de la chimie et des pertes par conduction, il a été mesuré que $MIE \propto P^{-2}$ pour des mélanges propane-air [7]. Dans le cas d'allumage d'un spray de gouttes, les effets d'évaporation conduisent à une dépendance plus faible : $MIE \propto P^{-0,5}$. De façon générale, l'exposant de la loi puissance liant l'énergie minimum d'allumage à la pression semble toujours compris entre $-0,5$ et -2 [113].

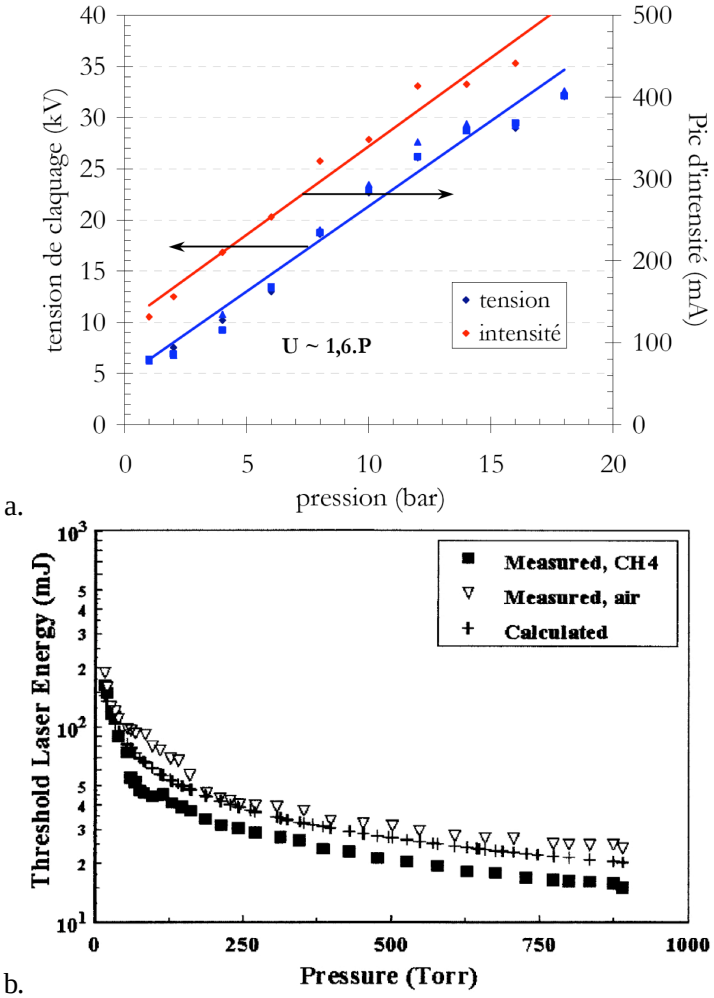


FIG. 7.8 - *Influence de la pression sur l'initiation du plasma : a. étincelle électrique : tension minimum de claquage mesurée par Ternel [214], b. laser : Energie minimum de ionisation mesurée par Phuoc et White [151].*

Température

Contrairement à la pression, l'effet de la température est surtout sensible lors de l'induction chimique. L'augmentation de la température du milieu tend à diminuer les pertes thermiques et à augmenter la vitesse de flamme ce qui induit une diminution de la MIE. On retrouve cette dépendance directe dans l'expression de la MIE établie par Champion [33] : $MIE = (4/3\pi r_c^3)\rho C_p(T_b - T_0)$, où T_0 est la température du milieu avant allumage.

Mélange

Dans un cas prémélangé, deux caractéristiques du mélange ont un impact sur l'allumage : la richesse et la dilution. La dilution tend à augmenter l'énergie nécessaire pour produire une flamme auto-entretenue. L'effet de la richesse est directement lié à la vitesse de flamme laminaire. Les résultats expérimentaux

de Phuoc et White [151] montrent clairement que pour un mélange méthane-air la MIE est minimale autour de la stœchiométrie et augmente de façon très importante pour des mélanges proches des limites d'extinction riche et pauvre (Fig. 7.9). Cette tendance est observée dans les études expérimentales de Lewis et Von Elbe [117] qui ont utilisé une bougie électrique et celles de Ternel [214] et de Beduneau [11] qui ont réalisé des allumages par laser.

Dans un cas non-prémélangé laminaire, le succès d'un allumage dépend fortement de la distance entre le dépôt d'énergie et la ligne stoechiométrique comme l'ont montré Rashkovsky et al. [163] et Richardson et al. [172] par simulations numériques directes.

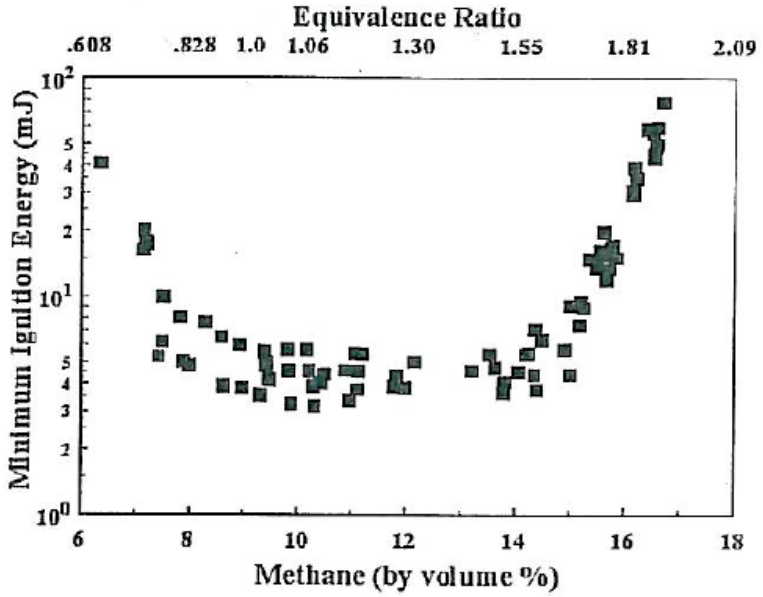


FIG. 7.9 - *Impact de la richesse sur la MIE dans le cas de mélange méthane-air allumé par étincelle [151].*

Vitesse de convection

D'un point de vue théorique, les pertes thermiques subies par un noyau d'allumage sont plus importantes lorsque celui-ci est initié dans un écoulement que dans une atmosphère au repos. Baum et Poinsot [9] ont montré par Simulation Numérique Directe que la MIE dépendait de façon quasi linéaire de la vitesse de l'écoulement sauf pour les très faibles vitesses (Fig. 7.10).
D'un point de vue pratique, la présence d'un écoulement au point de dépôt peut avoir l'effet positif de convecter le noyau loin des électrodes et de diminuer les pertes thermiques dans le métal.

Intensité turbulente

Dans le cas d'un écoulement turbulent, les pertes thermiques sont amplifiées par l'augmentation du mélange et les effets d'étirement. Il a en effet été observé expérimentalement par Bradley et Lung [23] et par Huang et al. [82] que la MIE augmente lorsque l'intensité de la turbulence augmente. Les données expérimentales portant sur ce problème sont cruciales pour les motoristes, afin notamment de comprendre les variations cycle à cycle dans les moteurs automobiles, ou les causes d'échec d'allumage dans

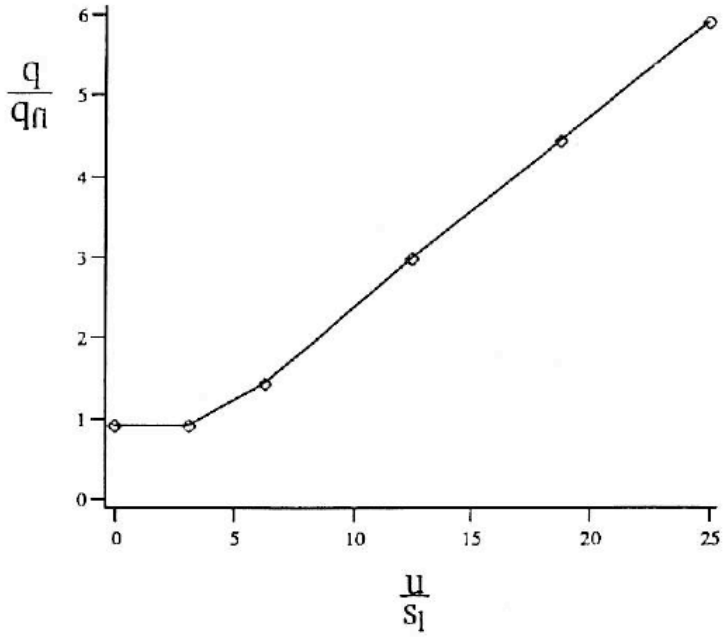


FIG. 7.10 - *Effet de la vitesse de l'écoulement sur la MIE, résultats obtenus par Baum et Poinsot par Simulation Numérique Directe [9] (q : puissance minimum d'allumage, q_{fl} puissance de la flamme laminaire, u vitesse de l'écoulement et S_l vitesse de flamme).*

les moteurs aéronautiques. Huang et al. [82] ont mesuré la MIE d'un mélange méthane-air soumis à des intensités turbulentes variables (générées par des mélangeurs contra-rotatifs) dans un écoulement à vitesse moyenne nulle. Cette étude, réalisée avec un allumeur à étincelle, montre que dans le cas où $0 < u'/S_l < 23$ une relation simple peut être établie entre l'énergie minimum d'allumage et l'intensité de la turbulence : $MIE \propto (u'/S_l)^{0,7}$ avec une MIE augmentant de 2,14 mJ à 10,15 mJ. Pour des niveaux de turbulence supérieurs ($u'/S_l > 23$) la dépendance de la MIE à la turbulence change brutalement : $MIE \propto (u'/S_l)^7$ (Fig. 7.11). Huang et al. expliquent cette variation par un changement de régime de combustion. Pour $u'/S_l < 23$ (ce qui correspond à un nombre de Karlovitz : $Ka < 8$) le régime de combustion est un régime de flammelette turbulente avec une épaisseur de réaction proche de l'épaisseur de flamme laminaire. Pour un nombre de Karlovitz : $Ka > 8$, on assiste à une transition vers un régime de flamme plissée épaissie, la zone de réaction est alors beaucoup plus étendue. On a vu précédement (section 7.4.1) que $MIE \propto r_c^3 \propto \delta^3$ où δ est l'épaisseur de réaction, ce qui d'après Huang et al. expliquerait la rupture de pente (Fig. 7.11).

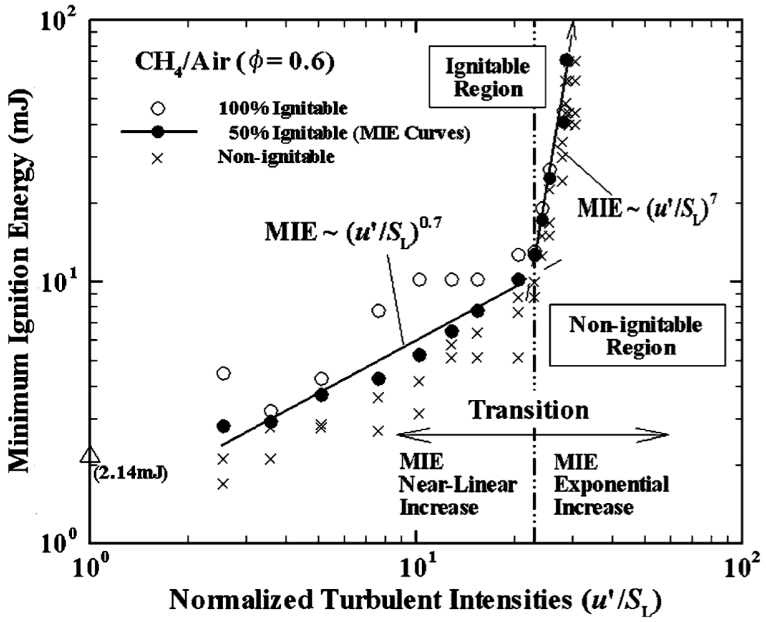


FIG. 7.11 - *Influence de l'intensité turbulente sur la MIE pour un mélange homogène méthane-air à une richesse de 0,6 [82].*

7.5 Conclusion

Les performances d'un allumeur sont évaluées par rapport à sa facilité de contrôle, sa fiabilité, son temps de réponse, son caractère reproductible, son coût de fabrication et son encombrement. On a vu dans cette section que de nombreux systèmes d'allumages ont été développés, chacun ayant des avantages et des inconvénients selon leurs conditions d'utilisation. Pour la plupart des applications industrielles, l'allumage par bougie électrique reste la solution optimale du fait de sa robustesse, de sa simplicité et de son faible coût de fabrication. L'allumage par laser est aussi une solution intéressante puisque le point d'initiation de la combustion peut être choisi sans modifier la géométrie du brûleur, cependant son cadre d'utilisation se restreint à des applications expérimentales de laboratoire. La contrainte de taille et de robustesse des lasers ainsi que le problème de l'accès optique ne permettent pas pour l'instant de l'étendre à l'industrie.

L'étude phénoménologique de l'allumage montre que les phénomènes physiques, pour ces deux dispositifs, sont relativement proches. Dans chacun des cas, un plasma chaud est généré, permettant le transfert d'énergie vers le gaz. Pour les allumages par arc électrique, 10 à 30% de l'énergie totale du système est transférée au gaz, contre 10% dans le cas d'un laser.

Il a aussi été vu que le succès d'un allumage dépend fortement des trois paramètres de l'allumeur, que sont la durée et le temps du dépôt ainsi que la quantité d'énergie déposée. Les conditions d'écoulement dans lequel de dépôt est réalisé ont aussi un impact important. Les pertes thermiques subies par le noyau sont sensiblement augmentées dans le cas où la vitesse de convection est non nulle ou lorsque les fluctuations de vitesse causées par la turbulence sont importantes.

La compréhension des processus d'allumage dans le cas d'un dépôt d'énergie va permettre dans la section suivante de définir un modèle simple reproduisant l'effet d'une bougie ou d'un laser sur l'écoulement d'une chambre de combustion.

Chapitre 8

Modélisation de l'allumage

8.1 Introduction

De nombreux modèles relativement complexes ont été mis au point pour reproduire fidèlement l'onde de choc puis la dynamique de l'écoulement induite par le dépôt d'énergie comme ceux de Kono et al. [95], de Thiele et al. [215, 216], de Sher [191] et de Kravchik et al. [96]. Dans les références [215, 216, 191, 96], la phase de plasma est calculée en utilisant des méthodes thermodynamiques statistiques, les dissociations moléculaires et ionisations sont considérées et les coefficients de transport sont évalués d'après des théories moléculaires. Ces calculs permettent de déterminer la structure interne du plasma, de déterminer le taux de production des ions et radicaux et de comprendre comment l'énergie est ensuite transférée au gaz. Cependant leur complexité ne permet pas de les utiliser dans un contexte LES, et la prise en compte de ces phénomènes complexes n'est pas nécessaire pour reproduire l'allumage d'un brûleur industriel.
Dans le cadre de calcul d'allumage dans des configurations à géométries complexes, une variété importante de modèles simples peut être trouvée dans le littérature [22, 153, 171, 47]. Il existe deux méthodes principales pour modéliser un allumage par dépôt d'énergie : le modèle de Dépôt de Flamme (DF) et le modèle de Dépôt d'énergie (DE ou ED *en anglais*). La méthode DF consiste à calculer la croissance du noyau en dehors de la simulation, par des méthodes 0D ou 1D plus ou moins complexes. Lorsque la flamme a atteint un volume suffisant, elle est réincorporée dans la simulation. La seconde méthode (DE) consiste à injecter directement l'énergie du laser ou de l'arc électrique dans la simulation [23, 223, 31]. L'emballement chimique a lieu par auto-allumage, suite à la forte élévation de la température au point de dépôt.
L'approche DF décrite dans [153, 171] présente l'avantage de pouvoir inclure des notions complexes de physique comme les pertes énergétiques par l'onde de choc, les effets thermiques des électrodes, le comportement du circuit électriques, la chimie complexe,etc. L'inconvénient majeur est que l'instant auquel la flamme est ré-injectée dans le calcul est difficile à déterminer et a un impact important sur la phase de propagation et de croissance du noyau.
La méthode DE simplifie fortement la physique, mais la croissance du noyau est entièrement calculée ce qui permet de prendre en compte les effets d'inhomogénéité de mélange ou de coincement dus à la

turbulence. C'est la méthode choisie pour cette thèse.
Un modèle basé sur l'approche DE et couplé au modèle TFLES de flamme épaissie a donc été développé et est décrit ci-dessous. La première partie est consacrée à la présentation du modèle et au choix de ses paramètres en fonction des caractéristiques de l'allumeur. Dans la seconde partie, des tests DNS 1D et 3D permettent de comprendre le processus d'allumage dans une simulation. Une validation du modèle par comparaison avec les résultats expérimentaux de Erard [57] est ensuite présentée. La troisième partie décrit le couplage entre le modèle de dépôt d'énergie et le modèle de flamme épaissie.

8.2 Model de dépôt d'énergie

Le modèle d'allumage par dépôt d'énergie reproduit les effets d'un arc électrique ou d'un laser à partir du moment où la température du point d'allumage est retombée sous la température d'ionisation (Fig. 8.1). L'impact de la phase de plasma sur l'allumage est pris en compte par les effets de premier ordre conduisant aux différentes pertes d'énergie présentées chapitre 7. La phase ionisée influence l'allumage par d'autres processus comme les effets complexes chimiques, mais ces considérations sortent du cadre de cette étude.

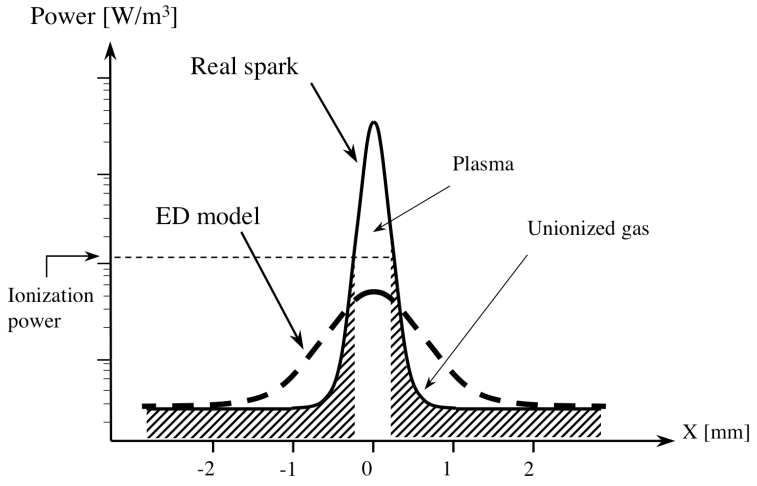
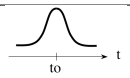
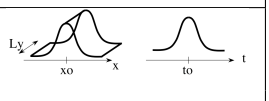
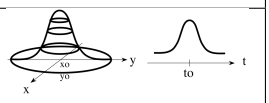
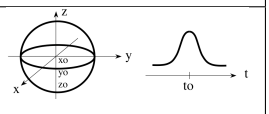


FIG. 8.1 - *Schéma de comparaison entre le modèle DE et une étincelle réelle.*

Le modèle DE se traduit par l'ajout d'un terme source $\dot{Q}$ (en W/m^3) dans l'équation de transport de l'énergie :

$$\rho\frac{DE}{Dt} = \dot{\omega_T} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\sum_{k=1}^{N} h_{s,k}Y_kV_{k,i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}u_i) + \dot{Q} \tag{8.1}$$

Il a été choisi de répartir la densité de puissance sous forme de gaussiennes en espace et en temps. La formulation diffère selon qu'on l'écrive en 0D, 1D, 2D ou 3D (Tab. 8.1) :

Dimension	Expression	Forme
0D	$\dot{Q}(t) = \frac{\varepsilon_i}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2}$	
1D	$\dot{Q}(x,t) = \frac{\varepsilon_i}{2\pi\sigma_s\sigma_t.Ly} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-x_0}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2}$	
2D	$\dot{Q}(x,y,t) = \frac{\varepsilon_i}{(2\pi)^{3/2}\sigma_s^2\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2}$	
3D	$\dot{Q}(x,y,z,t) = \frac{\varepsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2}$	

TAB. 8.1 - *Expression du dépôt d'énergie selon la dimension du problème considéré.*

Dans le cas d'un allumage dans une configuration en trois dimensions, le dépôt d'énergie a la forme suivante :

$$\dot{Q}(x,y,z,t) = \frac{\varepsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2} \tag{8.2}$$

où ε_i est l'énergie transmise de l'allumeur au gaz, r est la distance entre tout point du domaine (x, y, z) et le point de dépôt(x_0, y_0, z_0) : $r = \left((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2\right)^{1/2}$, t le temps, t_0 l'instant du dépôt et σ_s et σ_t respectivement la taille et la durée caractéristiques du terme source. Il a été vu dans la section 7.3 que les processus occasionnant les pertes d'énergie sont différents selon le type d'allumeur utilisé. Il en résulte que la quantité d'énergie reçue par le gaz varie entre un laser et une bougie électrique (Tab. 8.2).

Allumeur	ε_i/E_{tot}
bougie électrique	≈10-30%
laser	≈ 10%

TAB. 8.2 - *Fraction de l'énergie totale (E_{tot}) transmise ε_i en fonction du type d'allumeur utilisé.*

Note : de manière à ce que $\dot{Q}$ soit en $W.m^{-3}$, la dimension de ε_i varie en fonction de la dimension du problème : l'énergie déposée est en $J.m^{-3}$ en 0D, en $J.m^{-1}$ en 1D et 2D (les simulations 1D sont effectuées sur des maillages 2D avec une seule cellule dans la direction transverse) et en J en 3D.

Les définitions de σ_s et σ_t sont données par les relations suivantes :

$$\sigma_s = \frac{\Delta_s}{a} \tag{8.3}$$

$$\sigma_t = \frac{\Delta_t}{a} \tag{8.4}$$

$$a = 2\sqrt{ln(10^4)} \tag{8.5}$$

Δ_s est le diamètre de la sphère de dépôt et Δ_t est la durée de l'allumage. Le dénominateur a est choisi de manière à ce que 98% de l'énergie totale soit contenue dans le volume spatio-temporel $\Delta_s^3\Delta_t$ (voir la démonstration en annexe A).

La durée de dépôt Δ_t est égale à la durée réelle de l'allumage. Il est possible de déterminer le diamètre Δ_s de dépôt en fonction de l'énergie totale déposée ε_i et de la température obtenue au centre du dépôt T_{k_max}. En supposant que les pertes par conduction sont négligeables, on peut écrire en première approximation :

$$T_{k_max} \approx \frac{1}{\rho C_p}\int_{-\infty}^{+\infty}\dot{Q}(r=0)dt + T_0 = \frac{1}{\rho C_p}\frac{\varepsilon_i}{(2\pi)^{3/2}\sigma_s^3} + T_0 \tag{8.6}$$

où ρ et C_p sont respectivement la densité et la capacité calorifique à pression constante des gaz frais où le dépôt a été réalisé, Vol est le volume de dépôt ($Vol = (2\pi)^{3/2}\sigma_s^3$ pour un dépôt 3D gaussien) et T_0 est la température des gaz frais. La table 8.3 donne les différentes expressions de Δ_s en fonction de la dimension du problème considéré.

Dimension	Δ_s
1D	$\left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2}\frac{1}{Ly}\left(\frac{\varepsilon_i}{\rho C_p(T_{k_max}-T_0)}\right)$
2D	$\left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{\varepsilon_i}{\rho C_p(T_{k_max}-T_0)}\right)^{1/2}$
3D	$\left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{\varepsilon_i}{\rho C_p(T_{k_max}-T_0)}\right)^{1/3}$

TAB. 8.3 - *Détermination du diamètre de dépôt en fonction de la dimension du problème considéré.*

Considérons par exemple un allumeur dont l'écartement des électrodes est de 1 mm, possédant une énergie totale de 100 mJ et effectuant un dépôt d'énergie dans de l'air. Il est supposé que la température initiale de l'air est de 300 K, que sa densité est de 1,2 kg/m^3 et que sa capacité calorifique est de 1007 $J/kg/K$. L'énergie reçue par le gaz est de l'ordre de 10 % de l'énergie totale soit environ 10 mJ. Le diamètre du dépôt correspondant à une température de noyau de 3500 K, calculé grâce à la formule de la Tab. 8.3, vaut Δ_s= 3,2 mm, qui est de l'ordre de l'écartement des électrodes.

8.3 Validation

Dans cette section, des calculs d'allumages sont effectués dans des mélanges initialement au repos. La zone de réaction chimique est entièrement résolue sur le maillage, permettant de décrire précisément

les différentes phases d'allumage déjà mentionnées dans la section 8.2 et de présenter l'impact de la quantité de l'énergie déposée sur le délai d'allumage.

8.3.1 Description des cas tests 1D

Les allumages étudiés ici sont effectués sur des domaines 1D (Fig. 8.2) et le terme source du dépôt d'énergie est défini par l'expression valable en 1D de la Tab. 8.1.

Le mélange dans lequel le dépôt est effectué est un mélange d'hydrogène et d'oxygène à une richesse de 4 et initialement à 1,87 bar et 300 K. Ces conditions correspondent à celles du calcul présenté dans la partie IV.

La cinétique chimique employée pour réaliser l'allumage est le schéma H2O2-GL7-1 présenté section 6. Cette cinétique comporte 7 réactions et 6 espèces et donne des résultats corrects en terme de vitesse de flamme, température d'équilibre et délai d'allumage.

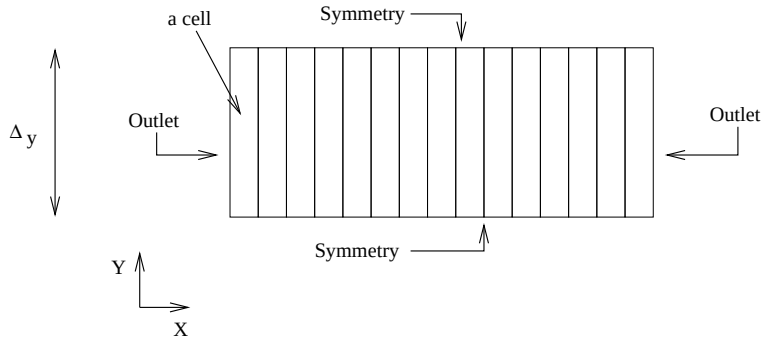


FIG. 8.2 - *Domaine de calcul 1D ($\Delta_y = 1mm$ étant la largeur du maillage).*

L'épaisseur de la flamme étant de $\delta_l^0 = 0,12\,mm$, la résolution du maillage choisie pour résoudre le front est de $\Delta_x = 0,01$ mm.

Les caractéristiques des différents dépôts d'énergie testés sont présentées dans Tab. 8.4. Seule l'énergie totale déposée varie de 1 à 5 J/m :

Δ_s [mm]	6
Δ_t [ns]	500
ε_i [J/m]	1 ; 4 ; 4,5 ; 5

TAB. 8.4 - *Paramètres d'allumage des cas tests DNS 1D.*

Note : dans ce cas précis, les paramètres d'allumages ont été choisis de manière à ce que la température du noyau à la fin du dépôt soit relativement faible pour pouvoir discerner les différentes phases de l'allumage.

La Fig. 8.3a. présente l'évolution temporelle de la densité de puissance maximum dans le dépôt et la Fig. 8.3b. sa forme spatiale. La Fig 8.4 montre que le dépôt d'énergie est suffisamment bien résolu sur le maillage. La question de la résolution spatiale se posera pour les calculs LES comme on le verra dans la section suivante.

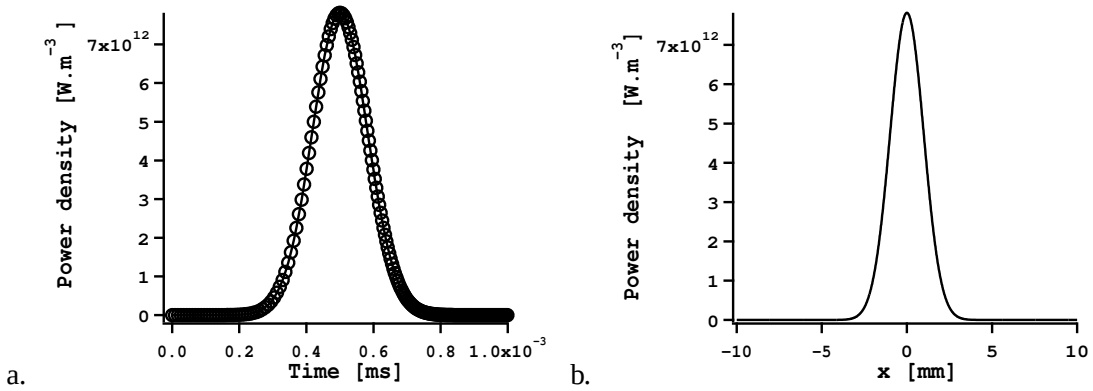


FIG. 8.3 - *Profils temporel (a) et spatial (b) d'un dépôt d'une énergie totale de 4 J/m.*

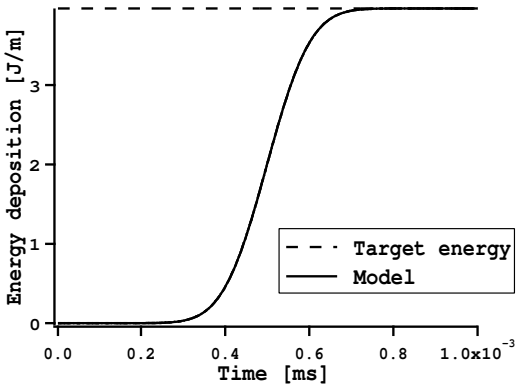


FIG. 8.4 - *Evolution temporelle de l'intégrale spatiale de la densité de puissance sur le domaine.*

8.3.2 Processus d'allumage par le modèle DE

La Figure 8.5 présente les différentes phases d'un allumage réalisé dans un mélange parfait H_2/O_2. Suite au dépôt d'énergie, la température du milieu augmente. Lorsque cette température est suffisante, la réaction d'initiation ($H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2OH$) se déclenche pour produire les premières espèces intermédiaires (Fig. 8.5b). Pour $2\,\mu s < t < 6\,\mu s$, la chaleur produite par la réaction ne compense pas les pertes thermiques par conduction, entraînant une diminution de la température du noyau. En même temps, les réactions de branchement et de terminaison s'activent, pour finalement induire l'emballement chimique vers $t = 8\,\mu s$. L'initiation de la combustion s'accompagne de la création du noyau de flamme, puis d'une flamme propagative consommant le mélange à la vitesse d'une flamme laminaire.

La Fig. 8.6 présente les évolutions temporelles de 4 des 6 espèces du schéma cinétique H2O2-GL7-1 au centre du dépôt. Après le dépôt d'énergie, l'évolution des fractions massiques est d'abord lente puis s'accélère de façon exponentielle jusqu'à atteindre l'emballement chimique environ 8 μs après le début du calcul. Le temps compris entre le dépôt et l'emballement réactionnel est appelé temps d'induction chimique. Cette durée dépend de la température maximale obtenue dans le volume d'allumage, du temps d'auto-allumage de la cinétique, de la durée du dépôt, des conditions de mélange, de pression et de température initiales ainsi que de la présence ou non d'écoulement.

La Fig. 8.7 montre des profils spatiaux de température, de dégagement de chaleur et de puissance déposée à six instants après le début du calcul. Sur cette figure on retrouve les cinq phases d'allumage : Fig. 8.7a : élévation locale de la température au cours du dépôt, Fig. 8.7b : fin de la période d'induction, les réactions exothermiques commencent à avoir une influence sur la température du milieu, Fig. 8.7c : emballement de la chimie qui réagit en premier lieu au centre du dépôt, où la température est initialement la plus élevée, Fig. 8.7d et e : création du noyau de flamme qui en 1D se traduit par l'apparition de deux fronts de réaction et enfin Fig. 8.7f : phase de propagation, les deux fronts de flamme indépendants se propagent à la vitesse de flamme laminaire.

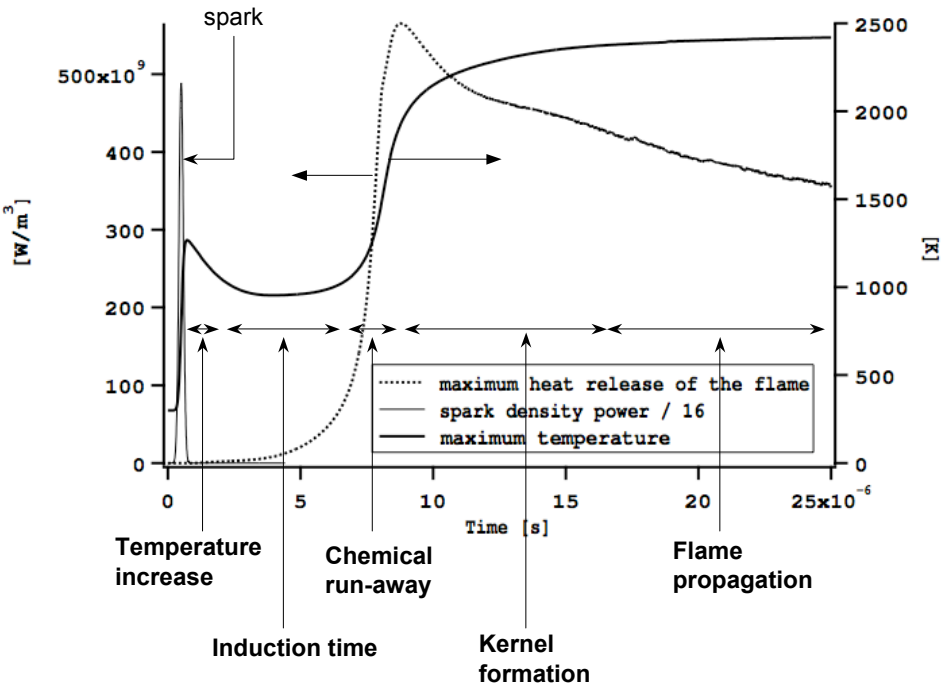
Dans les instants qui suivent l'emballement chimique, les hautes températures du noyau font que le taux de consommation de la zone de réaction est plus élevé que celui d'une flamme laminaire. Ce phénomène, dit de sur-adiabaticité, peut être mis en évidence en comparant la vitesse de consommation de la flamme S_c à la vitesse de flamme laminaire. La vitesse de consommation est calculée par la relation suivante :

$$S_c = \frac{1}{\rho^u {Y_{Ox}}^u} \int_0^{+\infty} |\dot{\omega}_{Ox}| dx \tag{8.7}$$

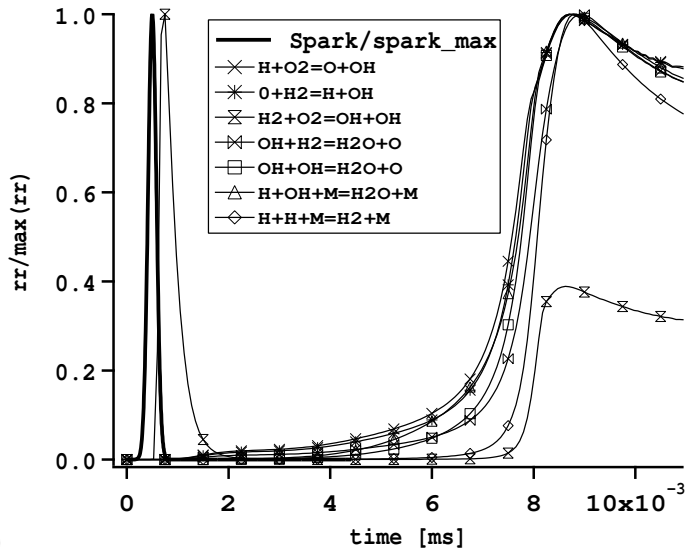
Dans l'Eq. 8.7, la vitesse de consommation est basée sur le taux de consommation d'oxygène $\dot{\omega}_{Ox}$ qui est l'espèce limitante car le mélange est riche. ρ^u et ${Y_{Ox}}^u$ sont respectivement la densité et la fraction massique d'oxygène dans les gaz frais.

La Fig. 8.8 montre qu'au moment de l'emballement de la chimie la vitesse de consommation atteint 13 fois la vitesse de flamme laminaire et ce n'est qu'après 100 μs que les deux vitesses sont comparables. Il faut cependant noter que le phénomène de sur-adiabaticité ne dure que sur une période de l'ordre de la micro-seconde après l'emballement chimique.

Enfin, la Fig. 8.9 montre l'effet de la quantité totale d'énergie déposée sur l'évolution de la tempé-



a)



b)

FIG. 8.5 - *Evolutions temporelles : a) température et dégagement de chaleur et b) taux de réactions (*forward*) du schéma cintétique H2O2-GL7-1 normalisés par leurs valeurs maximum respectives dans le cas d'un allumage 1D d'un mélange* H_2/O_2 *(*$\varepsilon_i = 4J/m$, $\Delta_{spark} = 6mm$ *et* $\Delta_t = 500ns$*).*

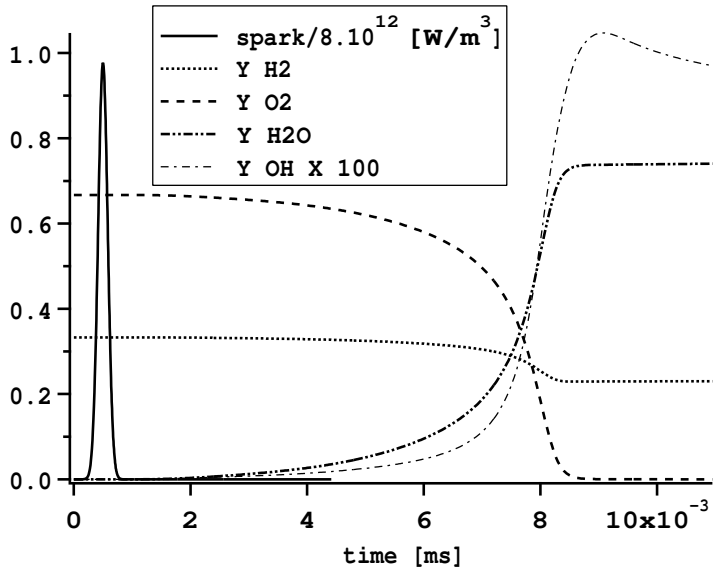


FIG. 8.6 - *Evolutions temporelles des fractions massiques des espèces dans le volume de dépôt pour un allumage 1D d'un mélange H_2/O_2 ($\varepsilon_i = 4J/m$, $\Delta_{spark} = 6mm$ et $\Delta_t = 500ns$).*

rature maximum dans le domaine. Lorsque l'énergie déposée n'est pas suffisante comme pour le cas à 1 J/m, l'allumage échoue. Il est constaté que pour une énergie déposée de 5 J/m, le temps d'induction, clairement observé pour 4 J/m, a pratiquement disparu. La température maximum passe alors au dessus de la température adiabatique de flamme (2200 K pour un mélange H_2/O_2 à une richesse de 4 et à une température initiale de 300 K).

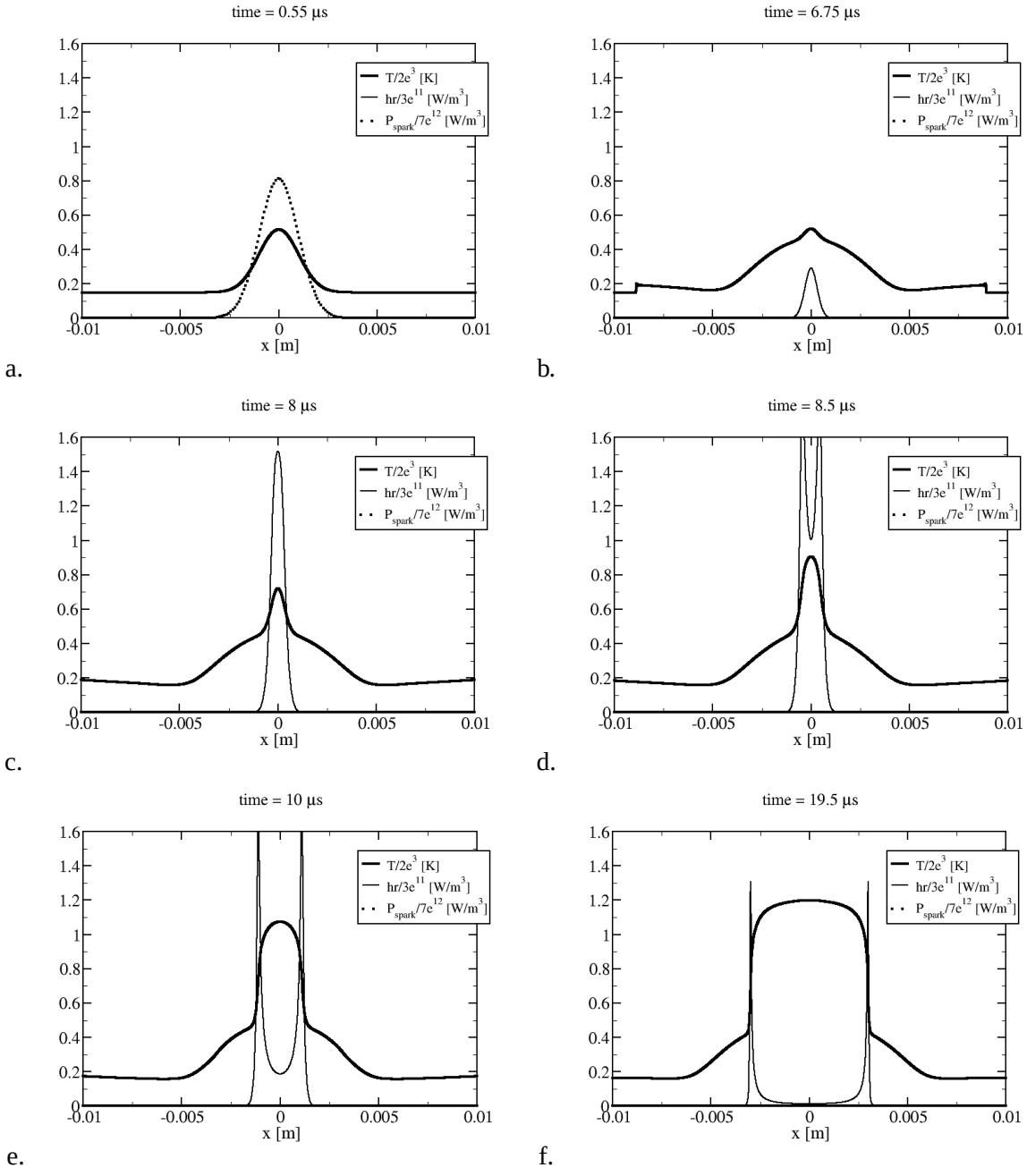


FIG. 8.7 - *Profils de température, de dégagement de chaleur et de la puissance déposée à six instants après le début du calcul ($\varepsilon_i = 4J/m$, $\Delta_{spark} = 6mm$ et $\Delta_t = 500ns$).*

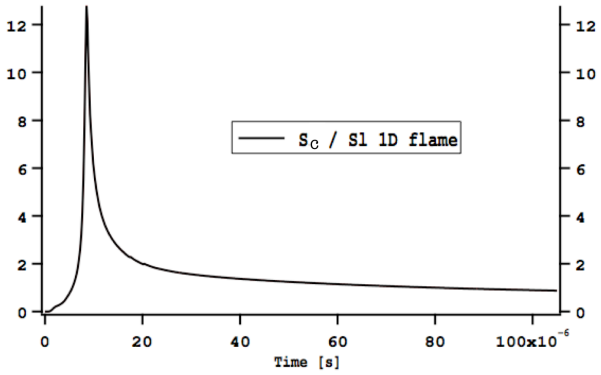


FIG. 8.8 - *Vitesse de consommation de la flamme S_c comparée à sa vitesse de flamme laminaire S_l ($\varepsilon_i = 4J/m$, $\Delta_{spark} = 6mm$ et $\Delta_t = 500ns$).*

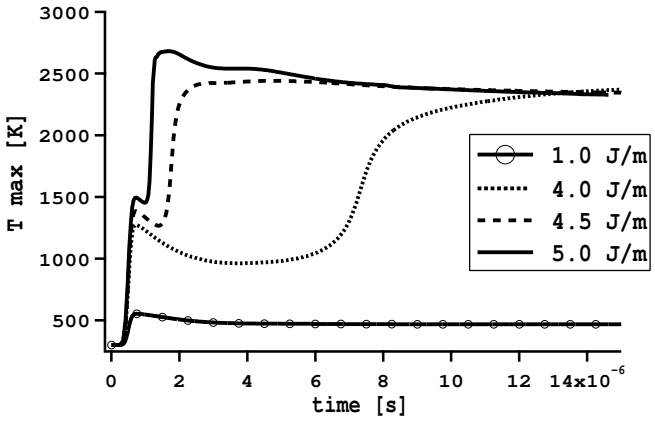


FIG. 8.9 - *Evolution temporelle de la température maximum pour trois différentes valeurs de l'énergie déposée ($\Delta_s = 6mm$ et $\Delta_t = 500ns$).*

8.3.3 Validation du modèle DE dans le cas d'un allumage sphérique expérimental

Cette première étape de validation a été réalisée par Benoît Enaux au Cerfacs. Le modèle de dépôt d'énergie est testé dans le cas d'un allumage par étincelle électrique d'un mélange propane-air dans une configuration 3D laminaire. La validation repose sur la comparaison des résultats numériques avec les mesures expérimentales de Erard [57] réalisées en 1996. Une partie de cette étude expérimentale est consacrée à l'observation et à la mesure de la croissance d'une flamme sphérique laminaire. Le mélange propane-air, à la stoechiométrie, s'écoule dans un canal rectangulaire à une vitesse moyenne de 4 m/s sans turbulence. Ce mélange est ensuite allumé par une étincelle formée entre deux électrodes très fines. Une fois la flamme initiée, elle est convectée par l'écoulement moyen de façon à ce qu'elle n'interagisse pas avec les électrodes. Le banc expérimental est décrit Fig. 8.10a. Le temps de dépôt ($120\,\mu s$) étant petit devant le temps caractéristique de convection ($\tau_{conv} \approx \Delta_s / U_{conv} = 500\,\mu s$), la croissance de la flamme reste à symétrie sphérique. La simulation ne représente pas la chambre mais seulement la flamme sphérique dans son référentiel (donc au repos). Le domaine de calcul est réduit à 1/8 de sphère (Fig. 8.10b). Le rayon de ce huitième de sphère mesure 6 mm (le rayon du noyau est de 1 mm) et le volume de calcul est constitué de 2.500.000 tetrahèdres.

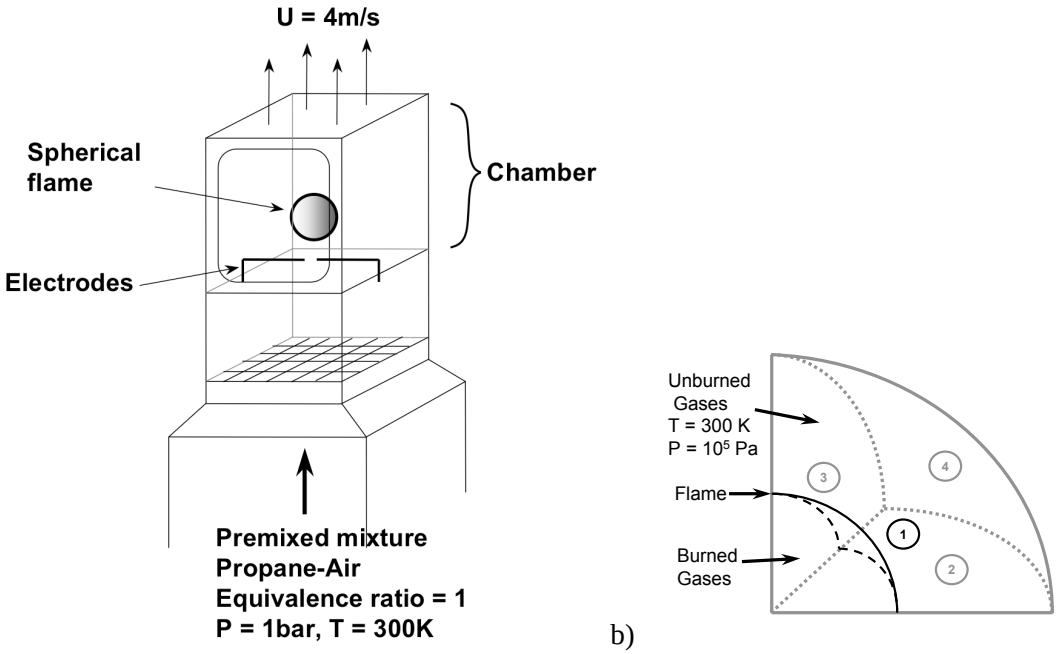


FIG. 8.10 - *Schéma du banc expérimental (a) utilisé par Erard pour l'étude des flammes sphériques [57] et du domaine de calcul (b) pour réaliser l'allumage.*

Les conditions aux limites de la simulation sont présentées Tab. 8.3.3 et les paramètres d'allumage de l'expérience et du calcul sont présentés Tab. 8.6.

Comme dans l'expérience, le mélange propane-air dans la simulation est initialement à température et pression ambiantes ($P_0 = 10^5$ Pa et $T_0 = 300$ K). Un modèle d'Arrhénius à deux réactions est utilisé pour modéliser la cinétique chimique (Tab. 8.7). Ce schéma cinétique a été développé [56] pour

numéro de la frontière	Paramètre imposé	Coefficient de relaxation
1	SYMMETRY	NA
2	SYMMETRY	NA
3	SYMMETRY	NA
4	$P = 10^5$ Pa	$\sigma_P = 0$

TAB. 8.5 - *Conditions aux limites de l'allumage laminaire 3D.*

	Expérience et Simulation
Δ_{spark} [mm]	2
ε_i[mJ]	2,5
$\Delta_t[\mu s]$	120

TAB. 8.6 - *Paramètres d'allumage de l'expérience de Erard [57] et du calcul.*

reproduire correctement la vitesse de flamme laminaire à la stoechiométrie ($S_l^0(\phi = 1) = 40.4\ cm/s$) obtenue expérimentalement par Metghalchi et Keck [134].

n°	**Reaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** $[\mathbf{cal/mole}]$
1	$C_3H_8 + 3.5O_2 \rightarrow 3CO + 4H_2O$	1.23E+12	0.0	33000
	ordres : 0.9028 for C_3H_8 and 0.6855 for O_2			
2	$CO + 0.5O_2 \Leftrightarrow CO_2$	4.51E+10	0.0	12000
	ordres : 1 for CO and 0.5 for O_2			
	nombres de Schmidt :			
	C_3H_8 : 1.26 ; O_2 : 0.74 ; H_2O : 0.55 ; N_2 : 0.71 ; CO : 0.75			

TAB. 8.7 - *Paramètres du schéma cinétique Propane-Air [56].*

Afin d'évaluer les performances du modèle d'allumage DE couplé à une chimie simple, les évolutions temporelles du rayon moyen de la flamme et de sa vitesse de consommation sont comparées aux mesures sur la Fig. 8.11. Le rayon R de la flamme dans la simulation a été calculé à partir du volume V_b de gaz brûlés extrait directement du calcul : $R = \left(\frac{3}{4\pi}V_b\right)^{1/3}$ et la vitesse de consommation est définie ici par :

$$S_c = \frac{1}{\rho^u {Y_F}^u} \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\omega_F}| d\mathbf{n} \tag{8.8}$$

où ω_F est le taux de consommation du propane et ρ^u et ${Y_F}^u$ sont respectivement la densité et la fraction massique de propane dans les gaz frais.

La Fig. 8.11a. montre que l'évolution temporelle du rayon de la flamme sphérique est correctement prédite. La vitesse de consommation est aussi correctement reproduite (Fig. 8.11b) après que les effets de sur-adiabaticité ont disparu ($t \geq 5\ \ ms$). Les vitesses de consommation sont inférieures à la vitesse de flamme laminaire ($S_l^0 = 40.4\ cm/s$) à cause des effets de courbure du front de flamme.

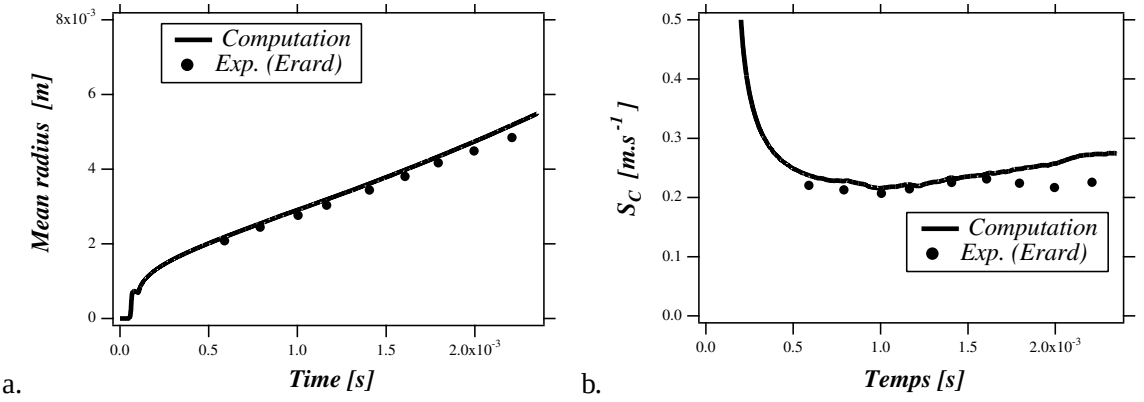


FIG. 8.11 - *Comparaison des résultats expérimentaux [57] et numériques : (a) évolution temporelle du rayon de la flamme et (b) évolution temporelle de la vitesse de consommation.*

Les résultats obtenus sur des configuration laminaire sont encourageants mais ne sont pourtant pas suffisants pour conclure de l'efficacité du modèle DE dans un cas d'un écoulement turbulent calculé en LES, dans lequel l'interaction de la turbulence sur la flamme est modélisée par le modèle de flamme épaissie. Dans la section suivante, le modèle DE est donc couplé au modèle de combustion turbulente et évalué sur des cas 1D.

8.4 Couplage avec le modèle de combustion de flamme épaissie

Dans le cadre de la LES, le problème de la résolution du volume de dépôt se pose au même titre que celle du front de flamme. Dans une première sous-section, il est montré que le modèle de flamme épaissie doit être légèrement modifié pour pouvoir être utilisé avec le modèle de dépôt d'énergie. On verra ensuite comment la résolution spatiale du noyau initial peut influencer l'allumage.

8.4.1 Méthode de couplage

Rappelons d'abord que le principe du modèle de flamme épaissie (TF) consiste à artificiellement épaissir le front de flamme en multipliant dans la zone de réaction, les coefficients de diffusion (thermique et moléculaire) par un même facteur F et en divisant les taux de réactions par ce même facteur (voir section 4.5). Le modèle DE ne peut donc pas être utilisé si le modèle TF est activé, car l'augmentation artificielle de la diffusion thermique par le modèle de combustion modifie les temps d'allumage.

A cause de cette incompatibilité, le modèle de combustion a été modifié pour ne s'activer qu'après l'emballement de la chimie et ainsi minimiser l'impact de F sur la diffusion et les taux de réactions. L'épaississement est déclenché après que la valeur maximum Y_{max} de fraction massique de l'une des espèces produite, ait dépassé la valeur seuil Y_c de 90% de sa valeur d'équilibre chimique. L'expression

de ce nouveau facteur F^* est :

$$F^*(x,t) = F(x,t).\frac{1}{2}\left(1 + tanh\left(\frac{Y_{max} - Y_c}{\Delta_Y}\right)\right) \tag{8.9}$$

où Δ_Y contrôle la raideur du senseur (fixée dans cette étude à 0,1).

De cette manière, tant que la valeur maximum de la fraction massique de l'une des espèces produites par la réaction (par exemple l'eau ou le dioxyde de carbone) est inférieure à la valeur critique Y_c l'épaississement reste égal à 1. Des tests ont été effectués pour évaluer l'impact de la valeur de Y_c : pour des valeurs de coupure comprises entre 70 et 95% de la fraction massique d'équilibre, l'erreur induite sur le temps d'allumage est en-dessous de 5%.

Pour illustrer la nécessité de modifier l'épaississement et valider la modification de l'Eq. 8.9, les calculs 1D réalisés dans la section 8.3 avec un front de flamme bien résolu sur le maillage ont été reproduits sur des maillages plus grossiers nécessitant l'utilisation du modèle TF (la taille caractéristique du maillage Δ_x est égale à l'épaisseur de la flamme laminaire δ_l^0). Dans ce cas précis, l'espèce utilisée pour le senseur (Eq. 8.9) est l'eau.

La Fig. 8.12 présente l'évolution temporelle de la température maximum et du facteur d'épaississement avec ($F*$) et sans senseur (F). On remarque que pour une formulation d'épaississement standard (F), l'épaississement est supérieur à 1 pendant le temps d'induction chimique, conduisant à l'échec de l'allumage. Dans le cas où la correction est utilisée, l'épaississement ne se déclenche que lorsque l'emballement cinétique a lieu et l'allumage se déroule correctement.

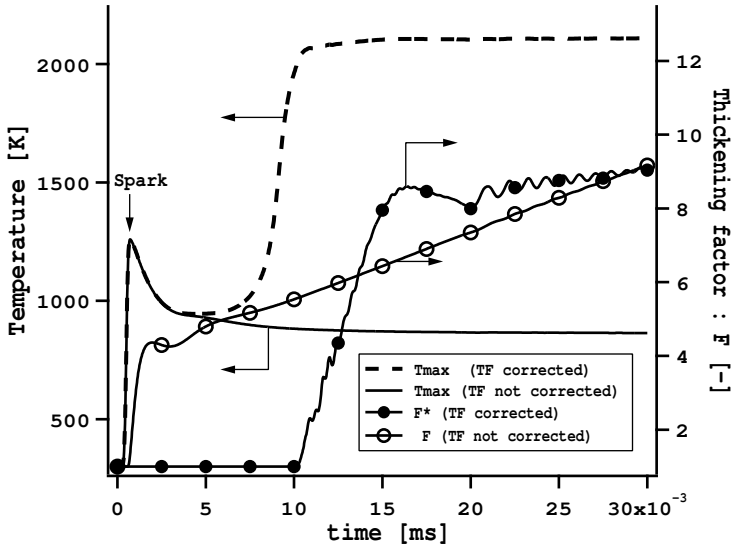


FIG. 8.12 - *Evolutions temporelles de la température maximum et de l'épaississement avec et sans la correction de la relation 8.9 (mélange H_2/O_2 à une richesse de 4 et initialement à 300K, allumé par un dépôt de 4 J/m sur 6 mm et pendant 500 ns).*

Comme les périodes de dépôt d'énergie et d'induction chimique ne sont pas affectées par le modèle

de flamme épaissie, les temps d'allumages en LES sont bien retrouvés (Fig 8.13).

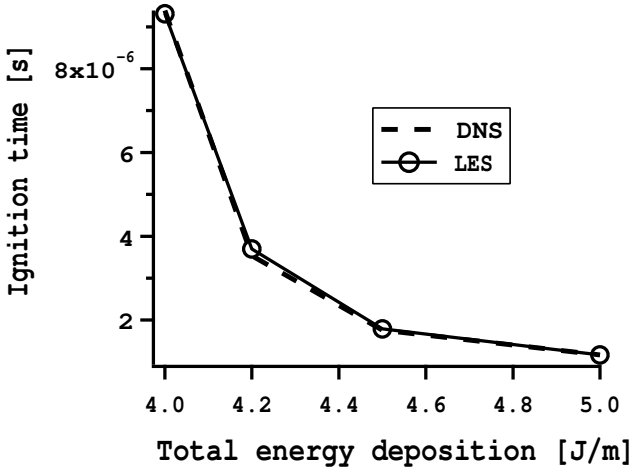


FIG. 8.13 - *Temps d'allumages DNS (référence) et LES (avec un facteur d'épaississement de F=10) pour différentes valeurs d'énergie totale déposée.*

Si les temps d'allumage ne sont pas modifiés par la LES, l'épaississement a un impact notable sur le phénomène de sur-adiabaticité décrit section 8.3. En effet, le fait d'activer l'épaississement conduit à une diffusion rapide des hautes températures du noyau qui ne dépassent plus la température adiabatique de flamme comme c'était le cas en DNS. Ce phénomène a un effet direct sur la vitesse de consommation (Fig. 8.14) qui dépasse la vitesse de flamme laminaire pendant une période beaucoup plus courte que pour les cas de référence. On notera cependant que les vitesses DNS et LES redeviennent égales lorsque la flamme entre dans sa phase de propagation (ici après 100 μs). Cela montre que les phases d'allumage en DNS et LES ne sont pas exactement semblables mais que les flammes générées se propagent ensuite à la même vitesse. Il faut ajouter que les différences de vitesses dans la période de sur-adiabaticité induisent un retard dans la phase de croissance du noyau et conduisent donc à des rayons différents (Fig. 8.15). Cependant ce léger retard, dont le temps caractéristique est de l'ordre de la micro-seconde a une influence négligeable sur la propagation de la flamme dont les temps caractéristiques sont généralement de l'ordre de la milli-seconde [113].

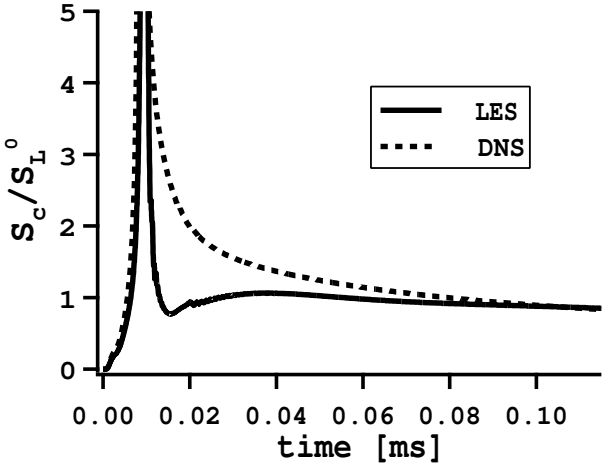


FIG. 8.14 - *Comparaisons des évolutions temporelles des vitesses de consommations dans les cas DNS et LES.*

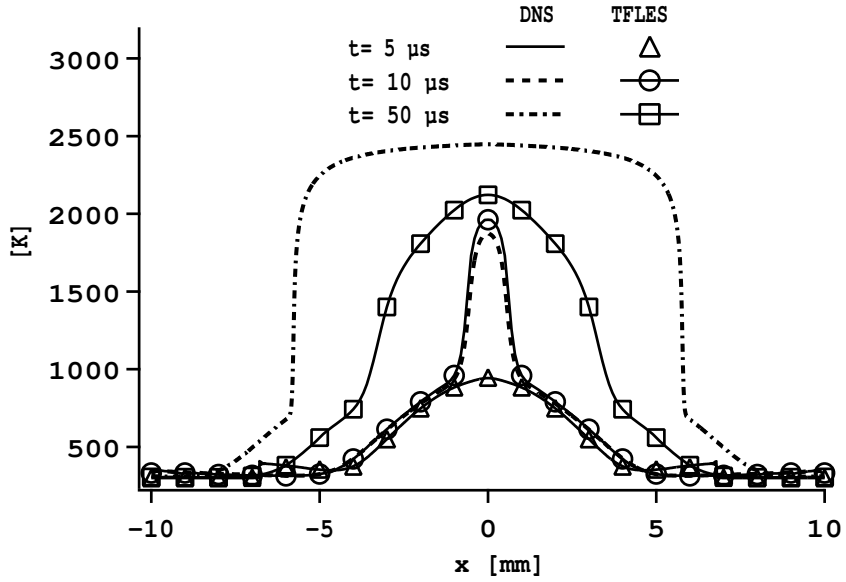
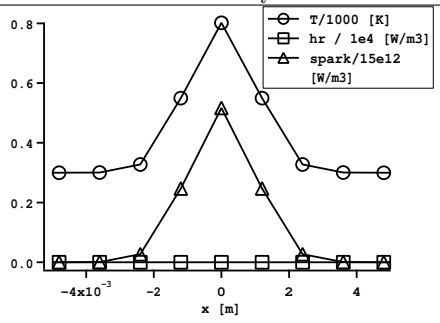
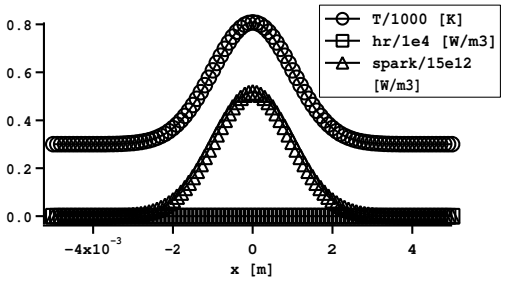
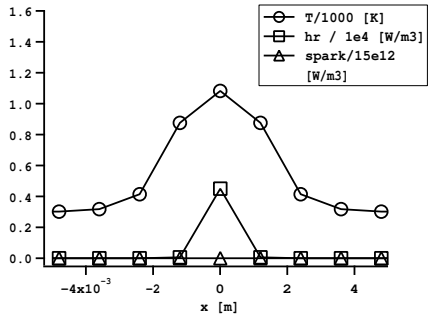
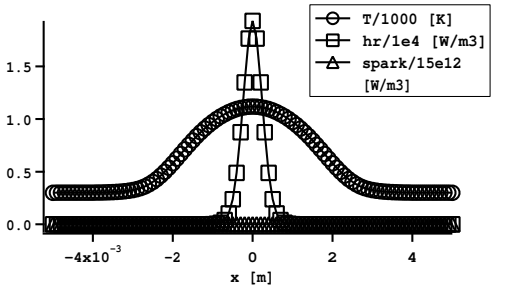
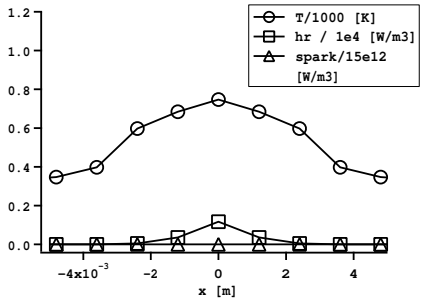
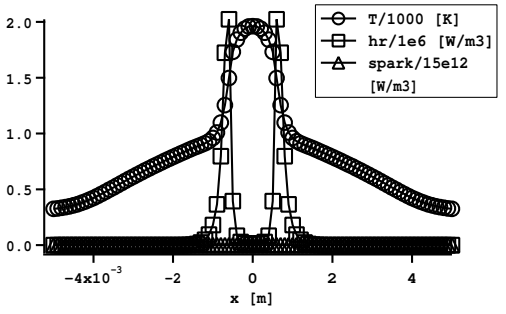
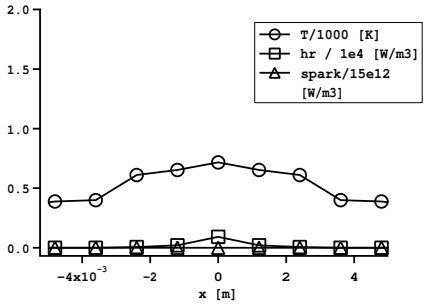
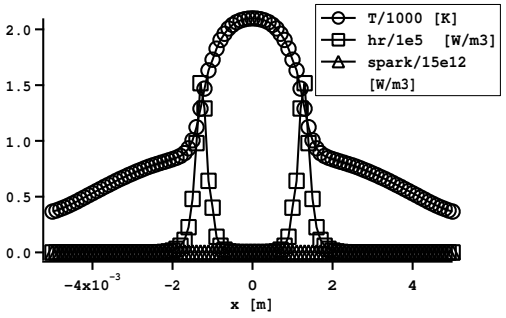


FIG. 8.15 - *Profils de température pour des cas DNS et LES à différents instants après allumage (mélange H_2/O_2 à une richesse de 4 et initialement à 300K, allumé par un dépôt de 4 J/m sur 6 mm et pendant 500 ns).*

8.4.2 Impact de la résolution spatiale du volume de dépôt

Un allumage déclenché par le modèle DE ne peut réussir que si la résolution spatiale du volume de dépôt est suffisante. Ce critère est relativement important pour la LES car un raffinement spécial du maillage est souvent nécessaire dans la zone de dépôt. La Tab. 8.4.2 montre un même allumage réalisé sur deux maillages LES de résolutions différentes ($\Delta_x = 13\delta_l^o$ pour le maillage grossier et $\Delta_x = \delta_l^o$ pour le plus fin).

	$\Delta_x = 13\delta_l^o$	$\Delta_x = \delta_l^o$
$5\mu s$		
$15\mu s$		
$100\mu s$		
$150\mu s$		

TAB. 8.8 - *Impact de la résolution spatiale du dépôt sur le succès de l'allumage. Les mêmes paramètres d'allumage et de simulation sont utilisés sur deux maillages de résolutions différentes (indiquées dans la première ligne du tableau).*

L'allumage est réussi sur le maillage fin mais échoue sur le maillage grossier. Dans ce dernier cas, seuls trois points montent en température au moment du dépôt. 15 μs après le début de l'allumage, le dégagement de chaleur n'est significatif que pour le point central, les flux de chaleurs subit par ce noeud sont beaucoup plus importants que dans le cas plus raffiné ce qui conduit à l'échec de l'emballement chimique.
Des tests sur des maillages plus ou moins raffinés ont montré que en dessous de 5 points dans le dépôt d'énergie l'allumage est impossible. Par mesure de précaution, il est conseillé d'avoir au moins 10 noeuds de maillage dans le diamètre du dépôt.

La stratégie à suivre pour réussir un allumage avec le modèle DE dans une configuration LES est la suivante :

1. Déterminer l'énergie ε_i à déposer dans le calcul (voir section 8.2) et le temps de dépôt (qui est la durée réelle de l'étincelle) en fonction des paramètres de l'allumeur à modéliser
2. Calculer le rayon de dépôt en fonction de la température de noyau souhaitée (voir section 8.2)
3. Vérifier que le maillage permet d'avoir au moins dix points dans le diamètre de dépôt. Si ce n'est pas le cas, il faut refaire le maillage en introduisant une petite sphère suffisament raffinée au point d'allumage.

8.5 Conclusions

La combustion initiée par le modèle DE est déclenchée par auto-allumage suite à l'élévation importante de la température dans le noyau. Lorsque la durée du dépôt est inférieure au délai d'allumage, un temps d'induction chimique précède l'emballement réactionnel. Pendant ce laps de temps, le succès de l'allumage dépend de la compétition entre la chaleur dégagée par la chimie et les pertes thermiques subit par le noyau. Lorsque le bilan est favorable à la chimie, la température augmente au centre du noyau jusqu'à aboutir à l'emballement chimique. La zone centrale du dépôt se met alors à réagir de façon très intense, conduisant à la formation d'un noyau de flamme sphérique. La vitesse de consommation du front de flamme est d'abord très supérieur à la vitesse de consommation d'une flamme laminaire, puis après quelques milli-secondes, la phase propagative débute et la vitesse de consommation tend vers la vitesse de flamme laminaire.
Les tests de validation menés sur la configuration de Erard [57] ont montré que dans un cas 3D laminaire dans lequel le front de flamme est résolu sur le maillage, le modèle DE couplé à une chimie simple est capable de correctement prédire l'évolution temporelle d'une flamme initiée dans un mélange homogène par une étincelle électrique.
Dans le cas où le modèle d'allumage doit être couplé au modèle de flamme épaissie (TF), une légère modification de l'épaississement est nécessaire. Le modèle TF doit en effet être désactivé pendant le dépôt d'énergie car l'augmentation des coefficients de diffusion par le modèle de combustion modifie les temps d'allumage. Il est possible de déclencher l'épaississement uniquement lorsque l'emballement chimique a eu lieu, en basant la correction sur la fraction massique d'une des espèces produite par la chimie. Le couplage DE-TF ne modifie pas les temps d'allumage mais diminue les effets de sur-adiabaticité. Cette dernière observation induit un très faible retard de la croissance du noyau de l'ordre de quelques micro-secondes qui est bien inférieur au temps caractéristique de propagation qui est de l'ordre de la milli-seconde.

Les tests effectués dans cette section ont été réalisés pour des mélanges homogènes au repos. La problématique globale de la thèse étant l'allumage des moteurs fusées cryotechniques, dans lesquels les écoulements sont non-prémélangés et très turbulents, l'étape suivante consiste à valider le modèle ED-TF et le code AVBP dans le cas d'un allumage de jet.

Troisième partie

Allumage d’un jet turbulent non prémélangé

Introduction

Cette section se présente sous forme d'un article accepté pour publication dans le journal *Combustion and Flame* suivi de compléments portant sur certains points particuliers de modélisation. La problématique de l'allumage est cruciale pour les moteurs fusée mais aussi pour de nombreuses autres applications industrielles. La compréhension des processus d'allumage, l'impact des différentes caractéristiques de l'écoulement comme la turbulence et la répartition du mélange sont des notions très intéressantes sur les plans scientifiques et techniques.
Dans cette partie, différentes simulations d'allumage (utilisant le modèle ED) d'un jet turbulent de méthane s'écoulant dans un co-courant d'air sont présentées. Cette configuration a été expérimentalement étudié par Ahmed et Mastorakos [3] au moyen d'une caméra rapide et de visualisation OH-PLIF (Fluorescence du radical OH induite par un plan laser), fournissant une base de données précise et bien adaptée à la validation de code de calcul. Dans le cadre de la thèse, cette étude a pour objectif de tester le code AVBP sur un cas d'allumage de jet dans des conditions simples : écoulement purement gazeux à pression atmosphérique (et constante) et à nombre de Reynolds modéré ($Re = 5800$). Dans un cadre scientifique plus général, la confrontation de résultats LES et expérimentaux sur le cas d'une configuration "simple" où les conditions aux limites sont bien définies, est très intéressante et permet d'identifier les différents processus impliqués dans la naissance de la flamme, sa propagation et sa stabilisation.
Les compléments présentent l'évaluation préliminaire des modèles LES disponibles dans AVBP dans le cas d'un jet turbulent non-réactif. Cette étude a permis de choisir le meilleur modèle de turbulence pour réaliser les calculs d'allumage. L'influence du modèle de combustion TFLES sur la flamme triple stabilisée fait aussi l'objet d'une section dans les compléments.

Large Eddy Simulation of spark ignition in a turbulent methane jet

G. Lacaze [a], E. Richardson [b] and T. Poinsot [c]

[a] *CERFACS, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse cedex, France*

[b] *Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, P.O. Box 969 MS 9051, Livermore, CA 94551-0969.*

[c] *Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, CNRS, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

Large Eddy Simulation (LES) is used to compute the spark ignition in a turbulent methane jet flowing into air. Full ignition sequences are calculated for a series of ignition locations using a one-step chemical scheme for methane combustion coupled with the thickened flame model. The spark ignition is modeled in the LES as an energy deposition term added to the energy equation. Flame kernel formation, the progress and topology of the flame propagating upstream, and stabilization as a tubular edge flame are analyzed in detail and compared to experimental data for a range of ignition parameters. In addition to ignition simulations, statistical analysis of non-reacting LES solutions are carried out to discuss the ignition probability map established experimentally.

Key words: IGNITION, NUMERICAL COMBUSTION

1 Introduction

Ignition is a crucial phase in many practical applications where the transition from a non-reacting state to a stable burning regime is required to be fast and repeatable. The spark-ignition engine, the relight of an aircraft gas-turbine at high-altitude, and the ignition of a rocket engine are examples where ignition is critical and depends significantly on turbulence and mixture inhomogeneity effects [1].

Successful ignition may be divided into four steps: (1) efficient energy transfer from the ignition device to the gas, (2) formation of a flame kernel, (3) flame

growth and propagation and (4) stabilization.
In the context of laser and electrical spark ignition (which is the scope of the present study), many experimental and numerical investigations have been carried out to understand processes involved in spark generation following a local energy deposition. Maly and Vogel [2] and Teets et al. [3] proposed a description of the formation of the hot plasma by an electrical spark and quantified the amount of energy transmitted to the gas: 70 to 90% of the initial energy is lost by thermal conduction to the electrodes, shock wave and radiative effects. Ronney [4] made a review of the potential applications of laser ignition and comparison with standard spark plug devices. Phuoc et al. [5] present the main mechanisms leading to a flame kernel following the energy deposition by a laser (complementary studies are available in Ref. [6–8]). A more recent study of Phuoc et al. [9] shows that around 10% of the laser energy is actually transferred to the gas, energy loss is caused by shock wave expansion and radiative emission.

The generation of a viable flame kernel has been extensively studied numerically and experimentally in premixed mixtures at rest or in laminar flows [10–16]. In turbulent premixed flows, kernel initiation may fail due to excessive strain rate [17–19] and in laminar non-premixed flow, the kernel formation depends significantly on spark location [20,21]. In a turbulent non-premixed flow, the kernel initiation depends on turbulent strain rate and transport as well as on spark location [1]. Birch et al. [22] and Smith at al. [23] analyzed experimentally the probability P_{ker} of obtaining a flame kernel after a spark in a town gas jet flowing into air. They also measured the probability of having a flammable mixture at a given location: P_f. They first observed that $P_{ker} \approx P_f$ on the axis of the jet and that the zone where $P_f > 0$ extended further than the statistical region where the mixture is flammable due to mixing fluctuations. Another experimental study of Ahmed et al. [24] show that in a bluff-body configuration, $P_{ker} < P_f$ in the recirculation zones which are well-mixed. Velocity measurements suggest that in these regions, flame kernels quench due to excessive strain rate.

A successful flame kernel initiation does not lead to a successful ignition necessarily. This information is of prime importance for industrial applications. Ahmed and Mastorakos [25] and Ahmed et al. [24] have established ignition statistics in a jet and a bluff-body configurations and measured the probability of having a successful ignition following a spark: P_{ig}. These studies show that at many locations, a flame kernel is formed but is then blown-off because it fails to propagate into a region where the flame can be stabilized. The flame propagation and stabilization phases are then key processes of a successful ignition. In combustion systems where the fuel is injected as a fuel-rich mixture, the flame propagates by partially premixed and turbulent triple flame

processes [1]. Various studies of triple flames are reviewed by Lyons [26]. Triple flame stabilization is still not well understood but numerical and experimental studies suggest that a triple flame is less sensitive to strain than a pure diffusion flame and that triple flame displacement speeds can be several times greater than the laminar flame speed at stoichiometry [26].

The establishment of an ignition probability map for a real industrial burner by experimental means is both practically challenging and expensive. Few numerical studies address the problem of ignition of turbulent diffusion flames in complex configurations. Such simulations require treatment of both premixed and non-premixed combustion modes [27–30]. Richardson [31] and Richardson and Mastorakos [32] have discussed ignition of turbulent diffusion flames using a Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) - Conditional Moment Closure (CMC) modeling: results suggest that the first order CMC reaction rate closure seems inadequate for such configurations. Additionally the probabilistic nature of the ignition process is not accessible through RANS analysis. Large Eddy Simulation (LES) computations of non-premixed turbulent flames are numerous [33–37] but only a few studies concern forced ignition of such flames [38,39] and further validation is required in this field.

The objective of this study is to present the LES of a spark ignition in a turbulent non-premixed jet studied experimentally by Ahmed and Mastorakos [25]. Several aspects of the flame position, flame topology and behavior obtained in the LES are compared to experimental data and discussed.

This paper proceeds with a presentation of the numerical approach used in the study (section 2). The ignition model and its coupling with the combustion model are described in section 3. Section 4 presents the computed configuration based on the experimental setup operated by Ahmed and Mastorakos [25]. The LES is validated for cold flow conditions in section 5 and finally, the ignition sequences obtained with LES are compared to experimental data and analyzed in section 6.

2 Numerical approach

The LES solver computes the compressible Navier-Stokes equations in a multi-species formulation [40–42]. For the present study, a two-step Taylor Galerkin numerical scheme [43] is used, which provides a third order accuracy in space and time. Explicit time-advancement is employed to minimize numerical dissipation.

LES for reacting flows involves the spatial Favre filtering operation that reduces for spatially, temporally invariant and localised filter functions [44], to:

$$\widetilde{f}\left(x\right) = \frac{1}{\overline{\rho}(x,t)} \int \rho(x',t) f\left(x\right) G_{\triangle}\left(x'-x\right) dx' \tag{1}$$

where $G_{\triangle}$ denotes the filter function and ρ the density.

The compressible LES equations solved by the code can be written [45]:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}} \;=\; \overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}} \tag{2}$$

where $\overline{\mathbf{w}}$ is the vector of transported variables, $\overline{\mathbf{F}}$ is the flux tensor composed of viscous, inviscid and Sub-Grid Scale (SGS) components and $\overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}}$ is the chemical source term. $\overline{\mathbf{w}}$ and $\overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}}$ are given respectively by:

$$\mathbf{w} = (\overline{\rho}\widetilde{u}, \overline{\rho}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{E}, \overline{\rho}\widetilde{Y_k})^T \;\text{ and }\; \overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}} = (0,0,0,\overline{\dot{\omega}_T} + \dot{Q}, \overline{\dot{\omega}_k})^T \tag{3}$$

where $\mathbf{u} = (u,v,w)^T$ the velocity vector, the total energy per unit mass is defined by $E = 1/2\mathbf{u}\cdot\mathbf{u} + E_i$ where E_i is the internal energy and Y_k is the mass fraction of species k.

The models for the chemical production rates $\dot{\omega}_k$ and the heat release $\dot{\omega}_T$ (Eq. 3) are described later and the $\dot{Q}$ term is the ignition source term (section 3).

The LES solver takes into account changes of heat capacity with temperature and composition through tabulated thermodynamics. The multispecies fluid follows the ideal gas law: $P = \rho r T$ where P is the pressure, r the mixture gas constant and T the temperature. Viscous transport uses the classical gradient approach: the fluid viscosity follows Sutherland's law, the heat diffusion coefficient is derived from Fourier's law and the species molecular transport coefficients are obtained using a species Schmidt number along with the Hirschfelder and Curtiss approximation [45].

Application of the filtering operation to the instantaneous set of compressible Navier-Stokes transport equations with chemical reactions yields the LES transport equations [45]. The LES equations contain SGS quantities that are closed using the WALE model [46] by introducing a local turbulent viscosity ν_t. The unresolved SGS stress tensor $\overline{\tau_{ij}}^t$ is modeled using the Boussinesq approximation [47–49]:

$$\overline{\tau_{ij}}^t - \frac{1}{3}\overline{\tau_{kk}}^t \delta_{ij} = -2\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij} \tag{4}$$

where $\widetilde{S}_{ij}$ is the resolved strain rate tensor.

The SGS species fluxes $\overline{J_i^k}^t$ are modeled using a species SGS turbulent diffusivity $D_k^t = \nu^t / Sc_k^t$, where Sc_k^t is the turbulent Schmidt number ($Sc_k^t = 0.7$ for all species):

$$\overline{J_i^k}^t = -\overline{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y}_k V_i^c \right) \tag{5}$$

where W and W_k are the molecular weights of the mixture and of the species k respectively. X_k is the molar fraction of species k and V_i^c is the diffusion correction velocity (to ensure global mass conservation) resulting from the Hirschfelder and Curtiss approximation [45].

The SGS energy flux $\overline{q_i}^t$ is modeled:

$$\overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_i^k}^t \, \widetilde{h}_s^k \tag{6}$$

where the SGS turbulent thermal conductivity $\lambda_{th}^t = \overline{\rho}\, \nu^t \, C_p / Pr^t$ with Pr^t a turbulent Prandtl number ($Pr^t = 0.7$) and C_p the heat capacity at constant pressure of the mixture. $\widetilde{h}_s^k$ stands for the sensible enthalpy of species k.

The chemical source terms are modeled using the Arrhenius law via a global one-step chemical scheme (Table 1) (called MP1 in the rest of the text):

$$\dot{\omega}_{CH_4} = A \, T^{\beta} \, Y_{CH_4}^{\gamma_{CH_4}} \, Y_{O_2}^{\gamma_{O_2}} \exp\left(-\frac{Ea}{RT} \right) \tag{7}$$

Reaction	**A [cm^3/mole.sec]**	β	**Ea [cal/mole]**
$CH_4 + 2O_2 \Rightarrow CO_2 + 2H_2O$	6.9E+14	0.0	31.588E+3
forward reaction orders: γ_{CH_4}= 1.0 and γ_{O_2}= 1.0			

Table 1
Arrhenius parameters of the one-step chemical scheme MP1.

Premixed one-dimensional flames have been computed to compare the MP1 scheme with a complex scheme (325 reactions and 53 species) established by GRI (called GRI. 3.0) [50] and various experimental data from the literature. With such a simple chemical scheme, only the laminar flame speed in lean conditions can be correctly predicted. To recover the right flame speed in rich regimes, the pre-exponential constant (A) of the Arrhenius rate is changed into a function of the local equivalence ratio ϕ [51,52]: $A(\phi) = A \cdot$

$[1/2\,(1 + tanh\,((\phi_c - \phi)/\Delta_\phi))]^2$, with $\phi_c = 1.25$ and $\Delta_\phi = 0.2$. Adiabatic temperature and laminar flame speed are presented on Fig. 1 and compared to the detailed mechanism and experimental data. For lean conditions, the temperature of the burned gases is well predicted by MP1 (Fig. 1a) but for rich mixtures the error between MP1 and GRI 3.0 is around 10%. Laminar flame velocities are correctly predicted for all equivalence ratios (Fig. 1b).

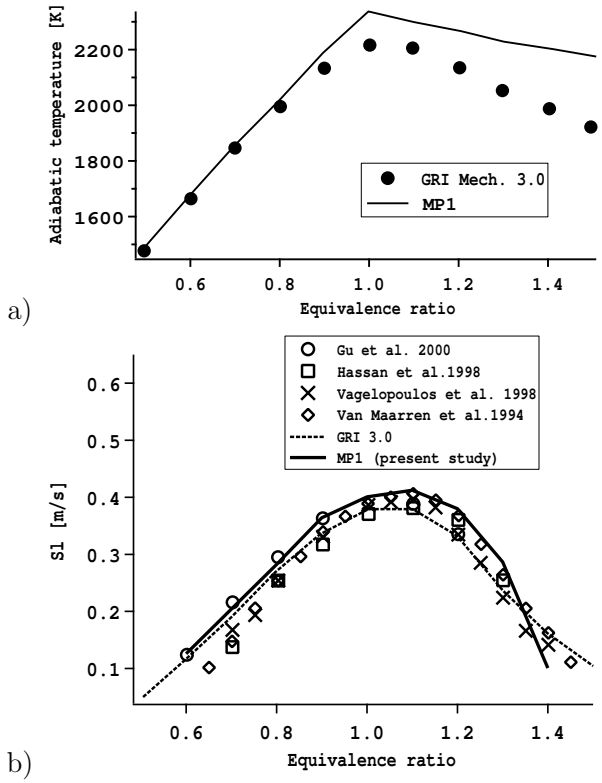


Fig. 1. Premixed laminar flame: comparison between MP1 and GRI 3.0: (a) Adiabatic temperature and (b) Laminar flame velocity (S_l), experimental measurements of Van Maaren et al. [85], Vagelopoulos et al. [86], Hassan et al. [87] and Gu et al. [88] are also given here.

The interaction between chemical kinetics and turbulence is modeled by the Dynamically Thickened Flame (TFLES) model [53]. On the basis of the theory of laminar premixed flames [54], the flame speed S_L^0 and the flame thickness δ_L^0 may be expressed as:

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}\,A} \qquad \text{and} \qquad \delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \tag{8}$$

where D_{th} is the thermal diffusivity and A the pre-exponential constant of the one-step chemical scheme.

Increasing the thermal diffusivity by a factor F, the flame speed is kept unchanged if the preexponential factor is decreased by the same factor [55]. This operation leads to a flame thickness which is multiplied by F and easily resolved on a LES mesh. Subgrid scale effects are introduced through an efficiency function E to reproduce the subgrid wrinkling [53,56,57]. To extend the model to partially premixed and non-premixed combustion, a sensor S (constructed as a reaction rate) is used to trigger the TFLES model only in reactive areas without affecting inert mixing away from the flame front [40,57,58]. Finally, in non-reactive regions ($S = 0,\ F = 1,\ E = 1$), standard LES equations (without chemical source terms) apply and in the flame front ($S = 1$), thickened equations apply, with: $\dot{\omega}_k^{flame} = E\,\dot{\omega}_k/F$, $D_{th}^{flame} = E\,F\,D_{th}$ and $D_k^{flame} = E\,F\,D_k$. In the flame region, the thickening factor depends on the local characteristic grid size Δ_x: $F = N_c\,\Delta_x/\delta_L^0$ where N_c is the number of points used to resolve the flame front ($N_c = 5$ to 10).

Although this approach is still being developed and requires further validations, its simplicity and its success in prior applications [40,58,59] suggest its suitability for the problem addressed in this work where the propagation and stabilization processes of the turbulent lifted flame involve premixed and diffusion combustion regimes [26].

3 A model for laser and electrical spark ignition

To capture the right flame response due to velocity and mixture fraction fluctuations at the electrode's tips, the energy deposition (ED) ignition model describes the spark as a source term added to the energy equation letting the LES solver explicitly compute the formation of the initial kernel. Even though this method requires significant simplifications of the physics taking place during the kernel formation, it is able to represent the ignition dependence on mixing, predicting for example failed ignition events if the composition at the spark location is beyond flammability limits or becomes nonflammable during the ignition event. This approach has been used in several Direct Numerical Simulations (DNS) to study the early times of flame generation [18,60,61].

The source term is described by three parameters: the energy transmitted to the gas ε_i, the duration Δ_t and the characteristic size Δ_s of the spark.

Standard CFD codes can not simulate plasma thermodynamics. Instead, the ED model seeks to deliver the energy profile that would exist following a real spark once the temperature has subsided below the ionization temperature, thus ignoring the plasma phase [2,5,7,9,62] (Fig. 2).

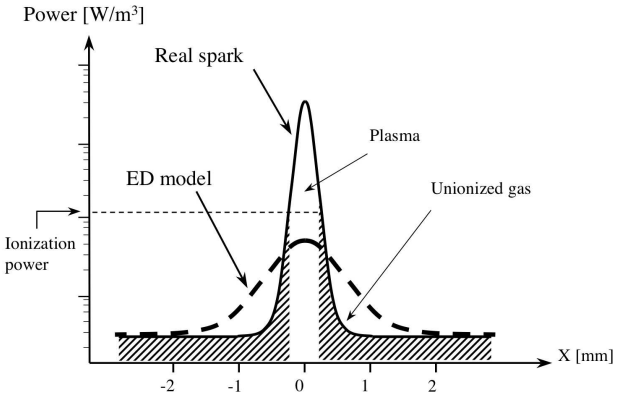


Fig. 2. Sketch of power distributions for a real spark and for the ED model.

The volumetric source term $\dot{Q}$ modeling the spark is directly added to the energy equation and is defined as a Gaussian distribution in time and space:

$$\dot{Q}(x,y,z,t) = \frac{\varepsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2} \tag{9}$$

where the transmitted energy ε_i corresponds to about 10% of the total energy of a laser [9] and to 10 to 30% of the overall energy of an electrical spark [2,3]. For laser-ignition, most of the initial energy ($\approx 90\%$) is lost in the generated shock wave and by radiative effects [9] whereas for an electrical spark, losses are mainly due to thermal conduction to the electrodes, radiation and shock wave expansion [2,3]. In Eq. 9, r is the distance to the center of the spark, t_0 is the moment when the power density reaches its maximum value and σ_s and σ_t are parameters that control the size and the duration of the source term defined by:

$$\sigma_s = \frac{\Delta_s}{a} \quad , \quad \sigma_t = \frac{\Delta_t}{a} \tag{10}$$

where the characteristic size Δ_s and the duration Δ_t of the deposition are divided by a factor $a = 4\sqrt{ln(10)}$ set to obtain 98% of the deposited energy in the domain $\Delta_s^3 \times \Delta_t$, or written mathematically: $\int_{\Delta_s^3}\int_{\Delta_t} \dot{Q}\ dt\ dV = 0.98 \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{Q}\ dt\ dV$.

In the ED model, the size of the deposition Δ_s is not the distance between electrodes or the plasma volume induced by a laser. Δ_s is chosen so that the maximum temperature at the kernel centre ($r = 0$) in the absence of any heat losses does not exceed a fixed temperature T_{k_max} which is evaluated by:

$$T_{k_max} \approx \frac{1}{\rho C_p} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{Q}(r=0)dt + T_0 = \frac{1}{\rho C_p} \frac{\varepsilon_i}{(2\pi)^{3/2}\sigma_s^3} + T_0 \tag{11}$$

where ρ, C_p and T_0 are respectively the density, the heat capacity at constant pressure and the temperature in the unburned gas. An estimate of Δ_s is then:

$$\Delta_s \approx \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon_i}{\rho C_p (T_{k_max} - T_0)}\right)^{1/3} \tag{12}$$

For $T_{k_max} = 3000K$, Δ_s is usually of the order of two to three times the electrode distance. This procedure allows deposition of the correct total energy without reaching excessive temperatures at the spark center.

Since the ED and the TFLES models work directly on the energy equation, their coupling is straightforward: the ED model deposits energy and when the temperature is high enough (and if the mixture is flammable), the finite rate chemistry begins and a flame kernel is initiated. The only complication is the thickening which is handled as follows: thickening is not applied during the first instants of the ignition and is only triggered when a real flame starts developing. The triggering criterion is based on the mass fraction of a burnt species: thickening starts when the maximum value of the mass fraction of a product species (water in the present study) Y_{max} reaches a crossover value (Y_c) corresponding to 90% of the product mass fraction at chemical equilibrium. Figure 3 presents the temporal evolution of the maximum temperature in the domain and the value of the thickening factor in the reaction zone.

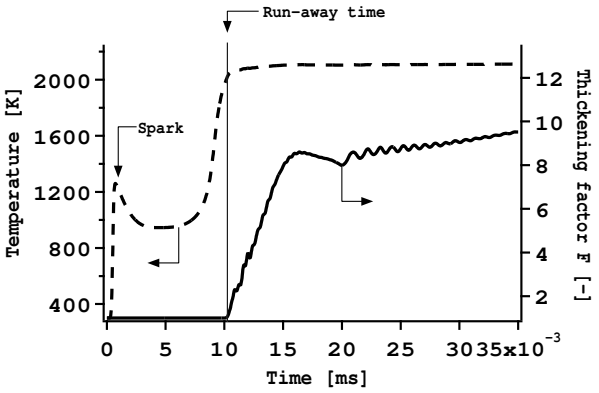


Fig. 3. Temporal evolution of the maximum temperature and maximum value of the thickening factor on a "LES" mesh with the ED-TFLES coupling. Ignition in a one-dimensional domain of a $H_2 - O_2$ mixture at an equivalence ratio of 4.

Tests on the cut-off value Y_c have shown that when Y_c changes from 70 to 95% of the equilibrium product mass fraction, the change to the ignition delay is less than 5%.

The ED-TFLES has been tested in multiple cases: ignition in 1D flows, ignition in a 3D laminar configuration (Fig.4) representing the experiment of Erard et

al. [63] (a perfectly premixed spherical flame ignited by an electrical spark) or in a rocket like experiment of DLR [39] (ignition by a laser in a non premixed H_2/O_2 flow simulating a delayed ignition in a rocket engine). It is tested here in simulation of the well controlled turbulent experiment of Ahmed and Mastorakos [25].

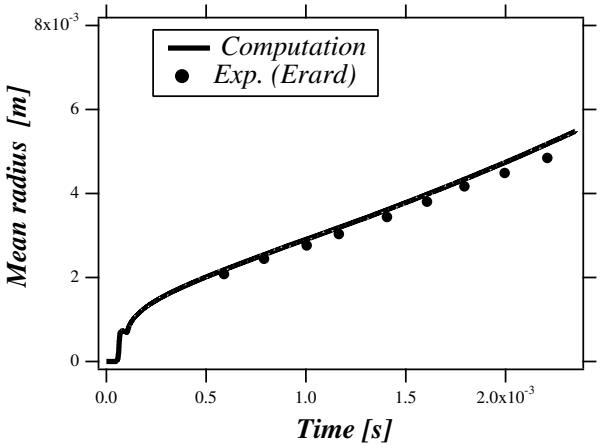


Fig. 4. Kernel radius as a function of time. Points: experimental results of Erard [63], line: calculation.

4 Configuration: a turbulent non-premixed jet

The jet configuration of Ahmed and Mastorakos [25] provides measurements in a well characterized flow: the authors report the ignition probability for a variety of spark characteristics and positions, where the ignition probability is the likelihood that a particular spark event results in the establishment of a viable flame kernel and subsequent propagation leading to a stabilized lifted flame. Fast camera and $OH\ P-LIF$ (Planar Laser-induced Fluorescence of the OH radical) records of the propagation phase are of particular interest for comparison with numerical simulation.

The jet configuration is shown in Fig. 5. A $5mm$ diameter (d_j) jet of fuel (70% of CH_4 and 30% of air in volume) with a bulk velocity of $25.5ms^{-1}$ issues into a 200 mm diameter co-flow of air moving at $0.1ms^{-1}$. The Reynolds number of the jet is $Re_j = 5800$. The jet pipe extends to $130d_j$ upstream of the nozzle so that the internal flow is expected to exhibit a fully developed turbulent velocity profile. The authors measured the mean and fluctuating velocity components for a pure air jet. Hot-wire measurements were not carried out with the methane jet because density variations and conductivity fluctuations would have induced errors. The experimental records show that the apparatus produces a jet closely matching the empirical equations describing the behavior of non-reacting jets [64].

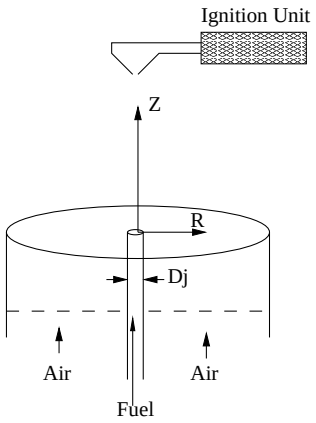


Fig. 5. Schematic diagram of the turbulent jet burner with the spark electrodes [25].

Six simulations are presented here for the Ahmed and Mastorakos experiment (Table 2). Case A: the flow dynamics are validated in an air jet configuration, numerical results are compared to hot-wire measurements carried out by Ahmed and Mastorakos. Case B: a non-reactive calculation of the methane jet has been done to validate mixing. Cases C0, C1, C2 and C3 are four ignition computations where the ED model is triggered at three different locations as in [25]. The non-reactive Cases A and B are presented in section 5 and the ignition sequence (Cases C0, C1, C2 and C3) is then studied in section 6.

Case	Validation goal	Jet injection conditions	Spark location	Experimental Data [25]
A	Flow dynamics	mixture: air $U_{mean} = 21\ m/s$ $Re = 6800$	no spark	yes
B	Mixing	mixture: $70\%\ CH_4 + 30\ \%air$ $U_{mean} = 25.5\ m/s$ $Re = 5800$	no spark	no
C0	Ignition	mixture: $70\%\ CH_4 + 30\ \%air$ $U_{mean} = 25.5\ m/s$ $Re = 5800$	$z = 50d_j\ ;\ r = 0d_j$	no
C1			$z = 40d_j;\ r = 0d_j$	yes
C2			$z = 30d_j;\ r = 0d_j$	yes
C3			$z = 4d_j;\ r = 1d_j$	yes

Table 2
Details of the jet simulations.

A pair of electrodes was positioned at various locations throughout the flow [25]. A spark with an overall duration of $400\mu s$ and a nominal electrical energy of $100mJ$ with an electrode spacing of $1mm$ and tip diameters of $0.1mm$ was used.

In the calculations, the domain is extended to a diameter of 1000 mm to avoid interaction between the jet and boundaries (Fig. 6). The injection tube is 10 mm long with a diameter of 5 mm as in the experiment. The rim of the tube is tapered at a half cone angle of 5.2 °. Figure 7 presents the tetrahedral mesh (Table 3) on a cutting plane through the domain and a close up of the jet region.

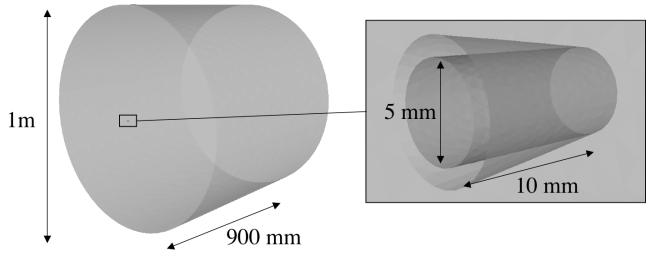


Fig. 6. Computational domain and an enlargement of the injection tube.

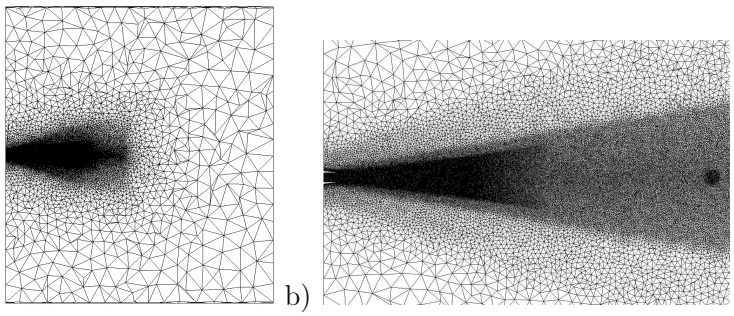


Fig. 7. a) The whole grid, b) the refined jet area.

Number of nodes	Number of cells	cell size in the tube
2,080,000	12,180,000	0.002 mm ($\approx 1/20\ d_j$)

Table 3
Characteristics of the computational mesh.

Boundary conditions are summarized in Table 4 and Fig. 8. The parameters of the boundary conditions for the three cases A, B and C are shown in Table 2.

According to section 3, the total amount of energy deposited by the ED model ($10\ mJ$) should be about 10% of the spark energy of the experiment due to large conductive and radiative losses [2,3]. The diameter of the deposition $\Delta_s \approx 3\ mm$ is estimated using Eq. 12, with a maximum temperature T_{k_max} of

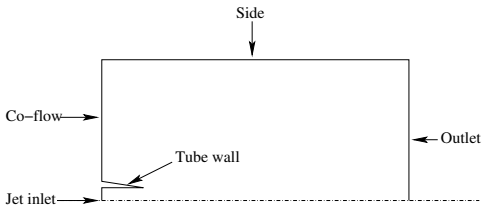


Fig. 8. Sketch of the boundary conditions of the domain.

Boundary Patch	Description
Jet Inlet	Characteristic inlet condition without turbulence injection. $1/7^{th}$ Power law mean velocity profile
Co-flow	Characteristic inlet condition
Sides	Adiabatic slip wall
Outlet	Characteristic outlet condition relaxed to the atmospheric pressure: 1.013 bar
Tube wall (inside)	Adiabatic no slip wall
Tube wall (exterior)	Law of the wall condition

Table 4
The boundary conditions of the calculation domain.

3500 K. The duration of the deposition is 400 μs as in the experiment. To have a sufficient grid resolution at the spark location (1D resolution tests showed that a minimum of five grid points in the deposition diameter is required), a mesh with a refined area ($D_x = 0.2\ mm$) at the deposition point is used to compute the ignition and early kernel propagation (Fig.7-b). A comparison between the experimental spark and the LES spark is summarized in Table 5.

	Energy amount	duration	spark width
	mJ	μs	mm
experimental spark parameters	100	400	1
simulation energy deposition parameters	10	400	3

Table 5
Parameters of the experimental and model sparks.

All computations have been performed on a *SGI ALTIX ICE 8200* cluster at the CINES computing center (France). This high-bandwidth low-latency network is equipped with 12,000 *Quad-Core E5472* processors. The LES calculations were computed over 1,000 processors on which an entire ignition sequence (900 ms of physical time) took 298,000 CPU hours.

5 Cold flow validation: Velocity and mixture fraction fields

To assess the quality of the LES, the flow field is evaluated for an air jet configuration (Case A in Table 2). Ahmed and Mastorakos [25] also carried out this first validation step. No measurement of the axial velocity on the axis of the jet is reported in Ref. [25] however, and simulation results are compared to the empirical relationship established by Tieszen et al. [64] for turbulent air jets:

$$\frac{U_m(z)}{U_j} = 11.8 \left(\frac{r_j}{z}\right) \exp\left[-93.7 \left(\frac{r}{z}\right)^2\right] \tag{13}$$

where U_m is the mean flow axial velocity on the jet axis, U_j the mean axial velocity at jet exit, r_j is the radius of the injection tube ($r_j = 2.5\ mm$) and z and r are the longitudinal and the radial coordinates ($z = 0$ at the jet exit).

Figure 9 shows that the agreement between the mean axial velocity and the correlation of Tieszen et al. is satisfactory, with shear generated turbulence penetrating to the center line at 4.5 diameters.

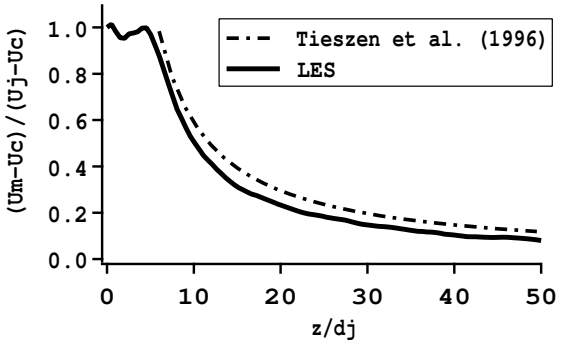


Fig. 9. Evolution along the jet axis of the mean axial velocity U_m (dashed line: Correlation of Tieszen et al. [64], solid line: LES). Air jet velocity: $U_j = 21\ m/s$ and co-flow velocity: $U_c = 0.1\ m/s$.

Figure 10 presents a comparison between different experimental hot-wire measurements and the computation of the longitudinal turbulence intensity on the axis of the jet. At the location where transition to turbulence occurs ($4.5 < z/d_j < 8$), the values of the longitudinal turbulence intensity measured in the LES are nearly two times greater than those measured in the experiments used for the comparison [65,66]. The explanation of this observation is still an open question. However, in the self-similar region ($z/d_j > 20$) where the flame develops, the results from the simulation are in the range of experimental hot-wire measurements, with an asymptotic value of the longitudinal turbulence intensity of the order of 25%.

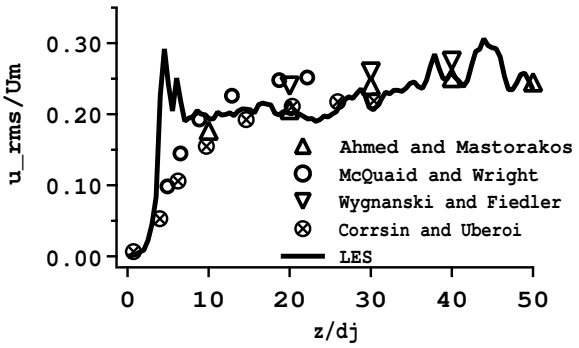


Fig. 10. Evolution along the jet axis of the axial rms-fluctuation u_rms (scaled by the mean axial velocity along the jet axis U_m), symbols: hot-wire measurements in round air jets flowing in air ($\triangle$: Ahmed and Mastorakos [25], $\circ$: McQuaid and Wright [65], $\triangledown$: Wygnansky and Fiedler [89] and $\otimes$: Corrsin and Uberoi [66]) and solid line: LES.

Figure 11 shows that the spreading angle of the jet is well captured by LES as well as the self-similar behavior of the mean axial velocity profiles in the self-preservation region ($z/d_j > 20$).

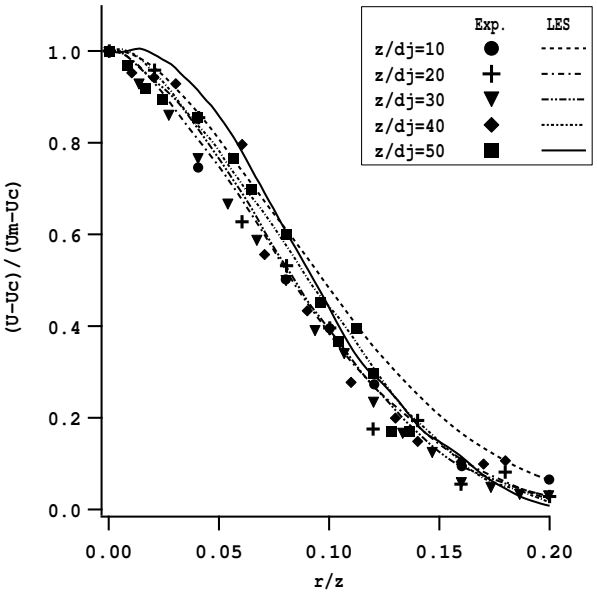


Fig. 11. Radial distribution of the mean axial velocity (U) scaled by the mean axial velocity on the axis (U_m), comparison of the experimental data of Ahmed et al. [25] (symbols) and LES results (lines). Air jet, injection velocity: $U_j = 21\ m/s$ and co-flow velocity: $U_c = 0.1\ m/s$.

Figure 12 presents the radial distribution of the streamwise fluctuations of the velocity at five downstream positions. Numerical results are in the range of

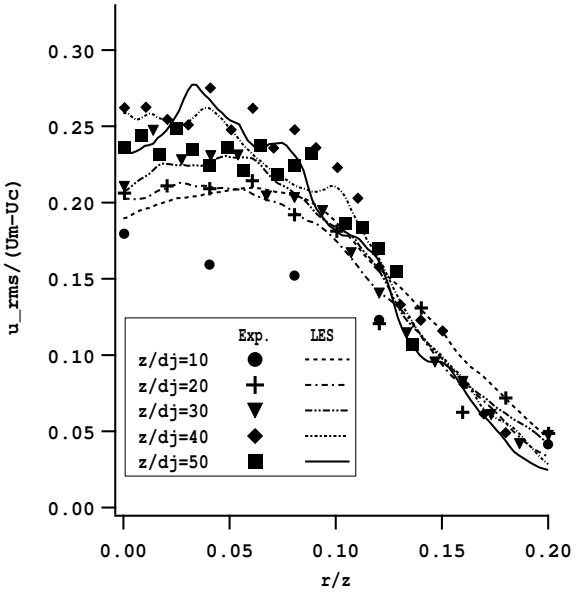


Fig. 12. Radial distribution of the axial velocity fluctuation (u_rms) scaled by the axial velocity on the axis (U_m), comparison of the experimental data of Ahmed et al. [25] (symbols) and LES results (lines). Air jet, injection velocity: $U_j = 21\ m/s$ and co-flow velocity: $U_c = 0.1\ m/s$.

experimental measurements. In the simulation, no turbulence is injected at the inlet and the velocity profile follows a $1/7^{th}$ power law. The differences observed for measurements carried out at $z/d_j = 10$ still have to be explained. Note that the direct comparison of filtered LES fields with experimental data is relevant since the subgrid scale kinetic energy k_{sgs} represents less than 7% of the total turbulent kinetic energy: $k_{tot} = k_{res} + k_{sgs}$ (where k_{res} is the resolved kinetic energy) at the five downstream positions of Fig. 12.

An additional analysis to assess the quality of the LES consists in comparing the LES grid size Dx with the different turbulent scales: the integral length scale L_t containing the maximum of the turbulent energy and the Kolmogorov length scale η_k characterizing the smallest eddies. In a round jet $L_t \approx d_j(1 + B \cdot z)$ where $B \approx 0.09$ is the expansion rate of the jet [48] and z the axial coordinate. The local Kolmogorov scale can be estimated as $\eta_k = L_t Re_t^{-3/4}$ where $Re_t = u' L_t/\nu$ is the local turbulent Reynolds number [48] obtained using the LES RMS field of velocity u' and the kinematic viscosity of the flow ν. The comparison of these characteristic sizes is shown on Fig. 13 where it is observed that in the zone of interest (i.e. for $z < 50 d_j$), the grid size represents less than 6% of the integral length scale and is only about 25 times greater

than the Kolmogorov length scale.

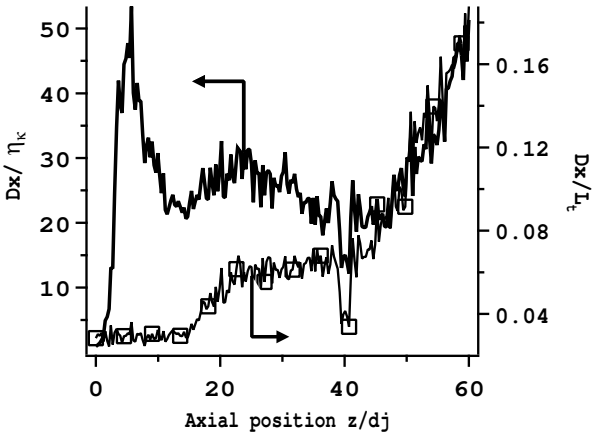


Fig. 13. Characteristic size of the LES mesh (Dx) compared to the integral scale (L_t) and the Kolmogorov scale (η_k) on the jet axis.

Case B corresponds to cold conditions before ignition (see Table 2) and is used to investigate the mixture fraction field before energy deposition. Ahmed and Mastorakos [25] did not measure the mixing of this jet and an empirical fit of Richards and Pitts, established for variable density jets [67], is again compared to LES results. Figure 14 presents the positions of three equivalence ratio iso-lines from the LES compared to the empirical law of Richards and Pitts [67]:

$$\frac{Y(r,z)}{Y_j} = 9.52 \left(\frac{\rho_j}{\rho_c}\right)^{1/2} \left(\frac{r_j}{z - 7.2 r_j}\right) \exp\left(-59 \left(\frac{r}{z - 7.2 r_j}\right)^2\right) \tag{14}$$

where $Y(r,z)$ and Y_j are respectively the mass fractions of methane in the domain and in the injection tube.

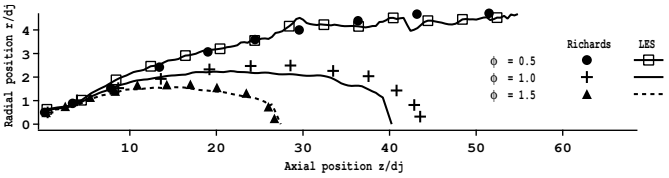


Fig. 14. Iso-lines of the equivalence ratio: comparison of LES results with the empirical law of Richards et al. [67]. Methane jet, injection velocity: $U_j = 25.5\ m/s$ and co-flow velocity: $U_c = 0.1\ m/s$

On Fig. 14, the three iso-lines are the lean and rich flammability limits of methane (respectively $\phi = 0.5$ and $\phi = 1.5$) and the stoichiometric line ($\phi = 1$). Mean LES results have been obtained from an average over 200 ms. A

satisfactory agreement is observed between numerical data and the empirical prediction.

Figure 15 plots the time evolutions of the equivalence ratio and axial velocity versus time at the spark location, here for case C1: $z = 40d_j$ and $r = 0d_j$, before ignition. The spark duration is also added to the figure as a reference. This plot shows that at the spark location both axial velocity and equivalence ratio fluctuate with time scales which are of the order of the spark duration. Hence for the present case, the use of the ED model is appropriate. Another aspect is that the value of the equivalence ratio is some times out of the flammable zone. This may lead to a reduced ignition probability. This point is discussed in the following section.

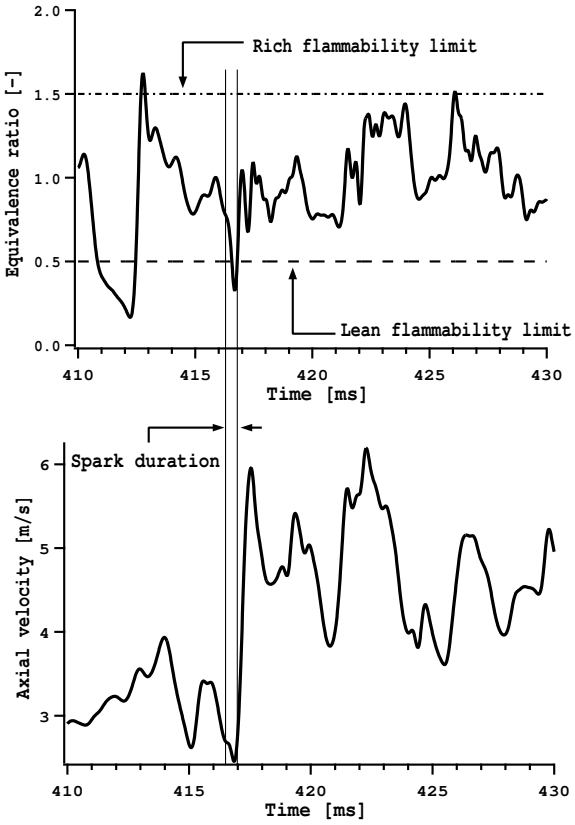


Fig. 15. Resolved equivalence ratio and axial velocity variation at the ignition location ($z = 40dj$ and $r = 0dj$) in the LES.

6 Ignition simulations: Case C

In this section the LES results of Cases C0, C1, C2 and C3 (Table 2) are first compared to experimental data of Ahmed and Mastorakos [25] and then used to analyze the progress of ignition events. The experimental ignition probabilities are discussed with reference to the velocity and mixing fields.

6.1 LES and experiment comparison

In the experiment [25] the axial position of the most upstream flame point has been determined with high speed photography and OH-PLIF images. Both diagnostics gave similar results. Ten sets of images were used to plot the average position of the upstream flame point and a maximum variation of 9% of its location at a given time was obtained. Figure 16 compares the average positions obtained experimentally with single LES realizations for cases C1, C2 and C3. In the LES, the flame location corresponds to the axial coordinate of the most upstream point of the 1500 K iso-surface. The LES flame locations agree well with those recorded in the experiment and the lift-off height is also captured. LES results fluctuate around experimental measurements, as expected, due to the fact that for each case only one LES realization is used for comparison. Note that for case C3, each upstream position of the flame in the experiment has been extracted from three pictures of Ref. [25] and is not averaged over 10 realizations. In addition, during case C0, a kernel is initiated leading to a flame that fails to propagate upstream and is then blown-off.

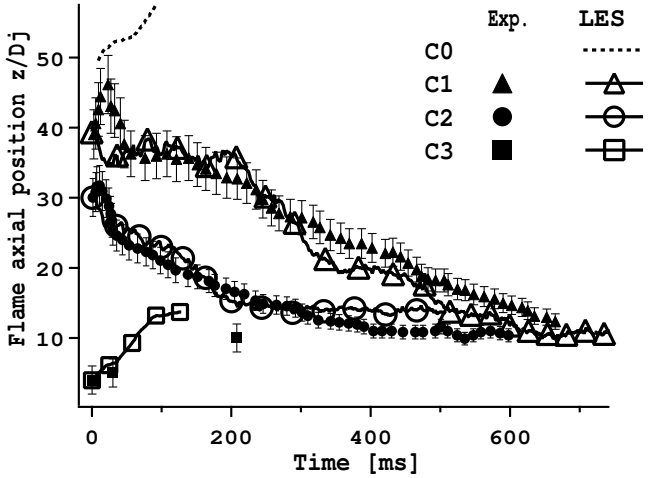


Fig. 16. Axial position of the upstream flame point. Point: experimental measurements of Ahmed and Mastorakos [25] and line: LES. Error bars represent 9% of the mean flame position, which is the maximum error measured in Ref. [25].

The fact that flame position and lift-off height are correctly captured in the LES may be explained by the following observations: (1) cold flow conditions are well reproduced in terms of velocity and mixture fraction distribution; (2) spark ignition and kernel initiation are well represented by the ED model (see next section) and (3) the combustion model performs well in the situation where the combustion mode transitions from a stratified premixed flame to a propagating triple flame (see section 6.3). This third point requires further investigation however, especially to test the influence of greater thickening factors on the stabilization height.

In addition to flame tracking, fast-camera images are compared to LES fields of temperature on Fig. 17 for case C1. The flame topologies are very similar and four phases can be identified in the ignition sequence and in other studies [68,69]. After ignition, a spherical kernel flame appears and is convected downstream (1) (Fig. 17a). Subsequently the kernel expands, (from 0.1 to 15 ms in the LES) keeping an approximately spherical shape (2) (Fig. 17b and c). Finally, the flame propagates upstream against the flow (3) (Fig. 17d, e and f) and stabilizes as an edge flame (4) (Fig. 17g).

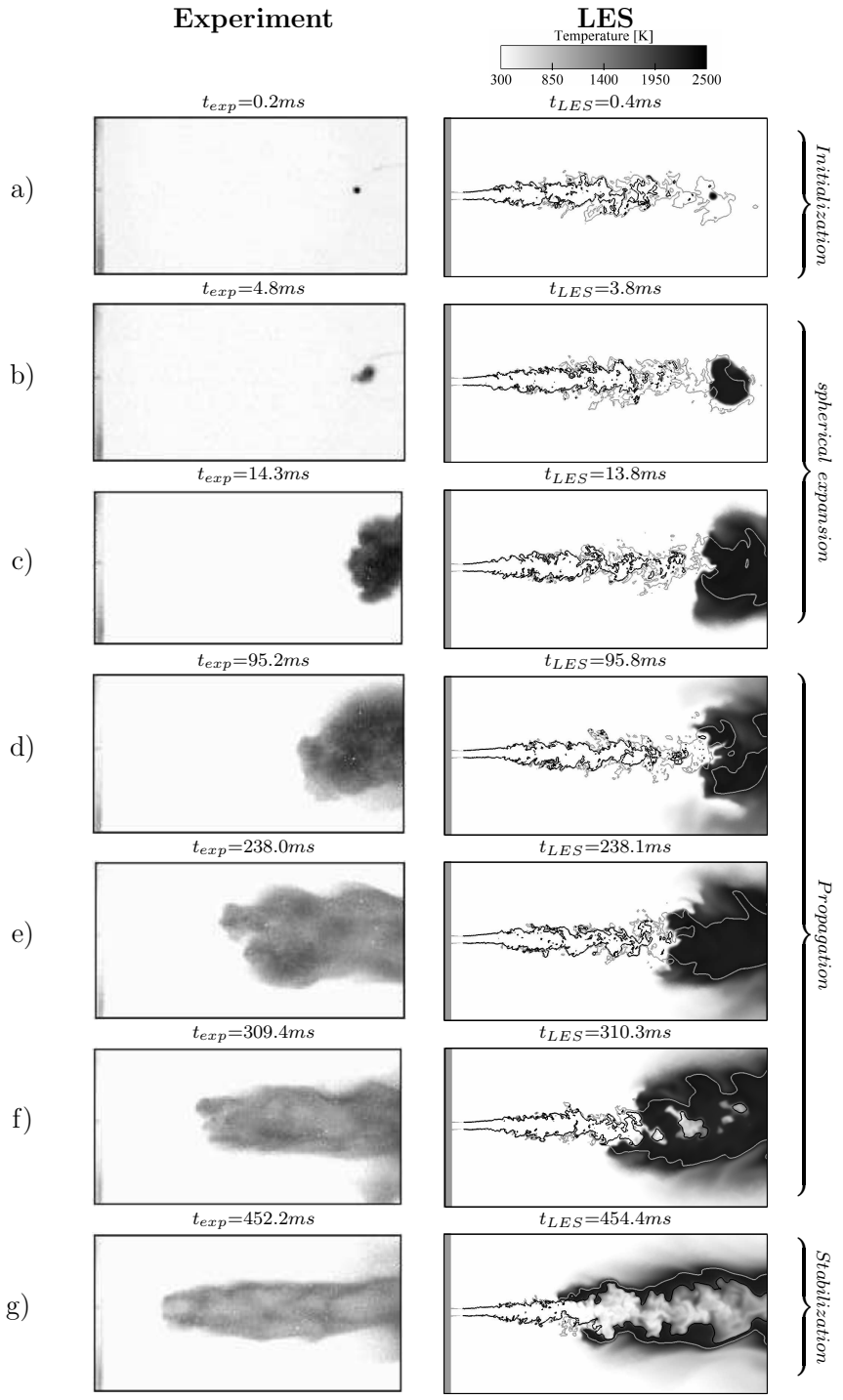


Fig. 17. Comparison of experimental fast-camera images [25] with the instantaneous LES temperature field for the C1 case (times are indicated at the top of each picture). LES results: black line: $\phi = 1.5$ and gray line: $\phi = 1.0$.

Similar experimental and numerical results for the case C3 are compared in Fig. 18. Again for this case, the shape and size of the flame obtained in the LES are in good agreement with experimental pictures.

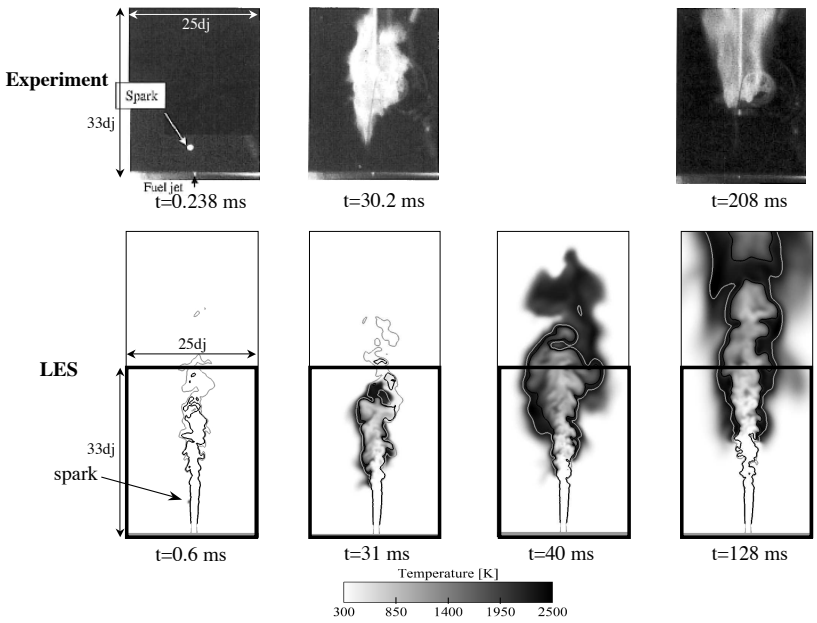


Fig. 18. Ignition at $z/d_j = 4$; $r/d_j = 1$: direct experimental visualizations of the flame [25] compared to computed temperature fields at different times after ignition. For LES results: gray line = stoichiometry and black line = rich flammability limit.

Ahmed and Mastorakos have used OH-PLIF images to characterize the reaction zone [25]. Figure 19 compares the OH-PLIF images with fields of reaction rate obtained with LES for case C1. The flame topologies are comparable in both cases. Ahmed [25] reports that initially the flame has a sphere-like shape (5 ms) and then expands radially (10 ms) before starting to move upstream (30 ms). The same behavior is observed in the LES for the first 30 ms. In the LES the flame wrinkling increases as the flame expands and propagates upstream and this is also observed in experimental results. Ahmed and Mastorakos assumed that the central zone of the flame extinguishes at t=60 ms and at t=100 ms because rich mixture pockets (above the flammability limit) cross the flame front [25]. This event appears in LES results for example at t=143.6 ms.

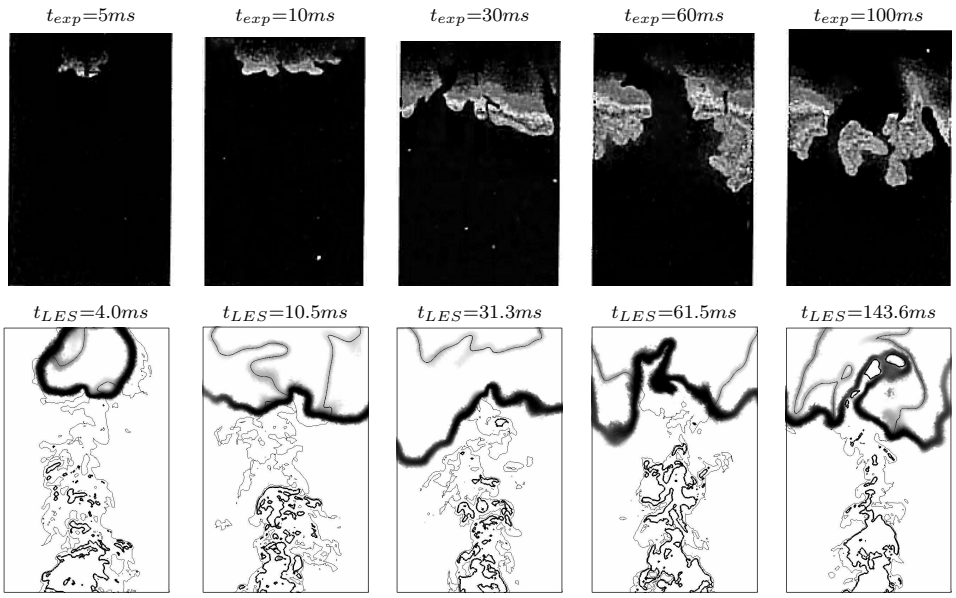


Fig. 19. Comparison between experimental OH-PLIF images [25] (top) and fields of the reaction rate from the LES (bottom) (thick line: rich flammability limit, thin line: stoichiometry). Experimental and numerical results for case C1. The jet flows from bottom to top. For both cases, the imaged region corresponds to 21 d_j and 13 d_j in the axial and radial directions respectively, and the lower side of the images is at z=24 d_j.

6.2 Ignition processes

(1) Flame kernel formation (from 0 to 2 ms)
The flame kernel begins first as a smooth laminar spherical flame. Ahmed and Mastorakos have recorded the temporal evolution of the flame kernel diameter using an average of 10 sets of high speed images in case C2 [25].

From LES results the kernel diameter d_k can be deduced from the volume of burned gases (V_b) assuming that the flame is spherical: $d_k = (6/\pi V_b)^{1/3}$. Figure 20 shows the diameter of the flame kernel in the early instants after ignition in the LES and in the experiment. During this period, the diameter of the flame is larger in the LES than in the experiment but its growth rate is globally well captured.

Early in the ignition process, the flame shape is close to a sphere in both LES and experiment (Fig. 21) . The kernel center stays at the same position in the experiment due to the presence of the electrodes modifying the flow whereas it is convected downstream in the LES when the energy deposition ends.

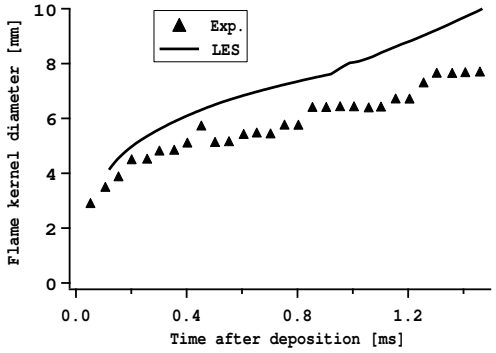


Fig. 20. Kernel growth, comparison between experimental [25] and LES results. Spark location: $z = 30\ d_j$.

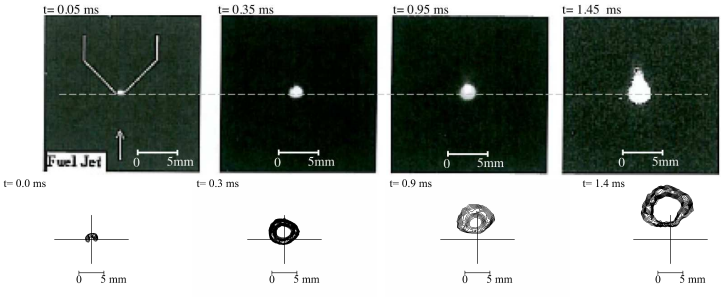


Fig. 21. Growth of the flame kernel. Top: experiment [25], bottom: LES (iso-lines based on heat release).

Note: for the three ignition simulations, the non-reacting initial solutions are chosen in order to have a mixture in the flammable range at the spark location. This point is mainly important for the C2 case where the activation of the ED model in rich mixture pockets leads to weak flame kernels which are rapidly dissipated by turbulent mixing and diffusion effects. No kernel quenching due to turbulence was observed however for these cases.

(2) Quasi-spherical expansion (from 2 to 15 ms)
Just after the kernel formation, the flame expands in all directions in a partially premixed mixture (the mean equivalence ratio at $z \approx 40 d_j$ is about 1.1). As the flame is convected by the mean flow, its expansion is quicker in the downstream direction than towards the injection tube. To evidence the processes involved in this phase, two speeds are defined [1] :

- the absolute flame speed S_f, corresponding to the front speed relative to a

[1] Another speed, the displacement speed S_d, can be defined for perfectly spherical flames: $S_d = \rho_b/\rho_u.dr/dt$ [70,45] (ρ_b and ρ_u are respectively the density of the burned and unburned gases). This expression is not applicable to partially premixed flames and is not used for the present study.

reference frame centered on the kernel. S_f is estimated from an equivalent spherical flame with a volume equal to the burned gas volume:

$$S_f = \frac{dr}{dt} \tag{15}$$

where r is the radius of the equivalent spherical flame, $r = \left(\frac{3}{4\pi} V_b\right)^{1/3}$

- the consumption speed S_c characterizing the speed at which the reactants are consumed. It is calculated from the consumption rate of oxygen:

$$S_c = -\frac{\int \dot{\omega}_{O_2} dv}{\rho_u Y_{O2} \Sigma_{sphere}} \tag{16}$$

where $\dot{\omega}_{O_2}$ is the consumption rate of O_2, ρ_u the density of the unburned gas, Y_{O_2} the mass fraction of O_2 assumed constant in the unburned mixture ($Y_{O_2} \approx 0.215$) and Σ_{sphere} the surface of the equivalent sphere of burned gases.

Figure 22 compares the two speeds and shows that the propagation of the flame from 2 to 15 ms is mainly driven by thermal expansion: the absolute flame speed (S_f) is about five times greater than the consumption speed (S_c) and this factor is close to the density ratio between cold and burned gases: $\rho_b/\rho_u \approx 7.5$.

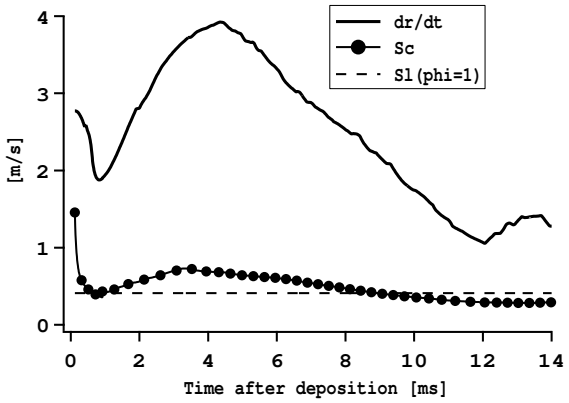


Fig. 22. Consumption speed (S_c) and absolute flame speed ($S_f = \frac{dr}{dt}$) obtained from the LES results. The laminar flame speed at stoichiometry has been added as a reference ($S_l = 0.41\ m/s$).

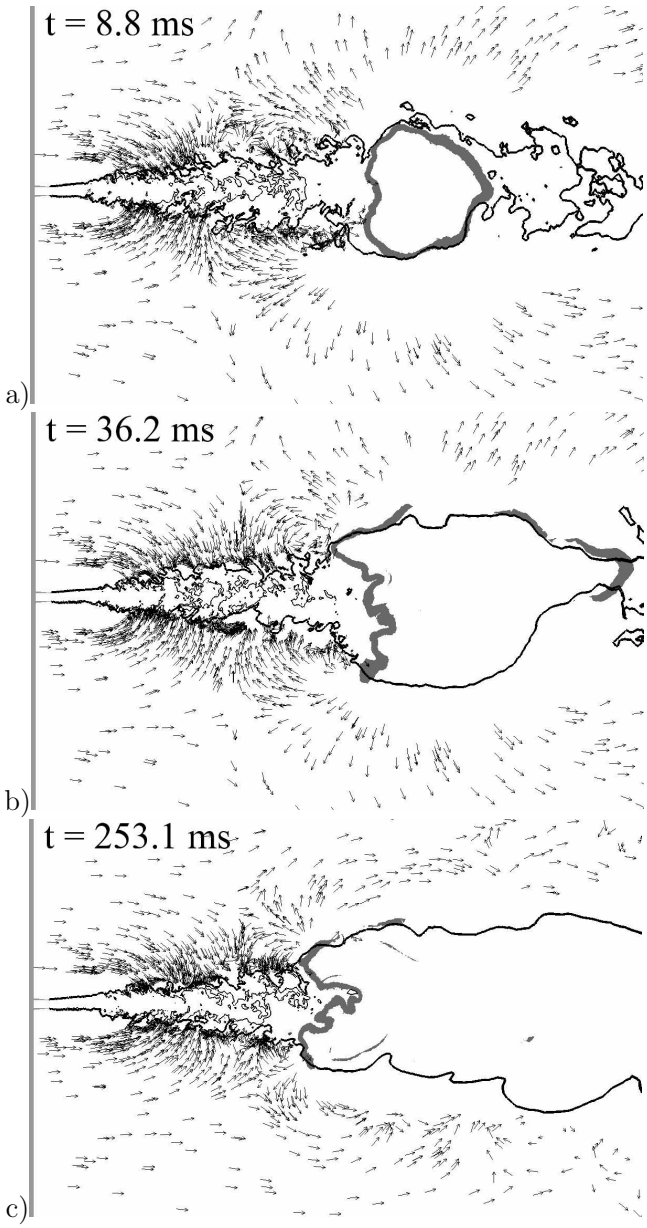


Fig. 23. Propagation phase in the LES. Arrows: velocity ; reactive zone: gray area ; thick line: lean flammability limit and thin line: rich flammability limit.

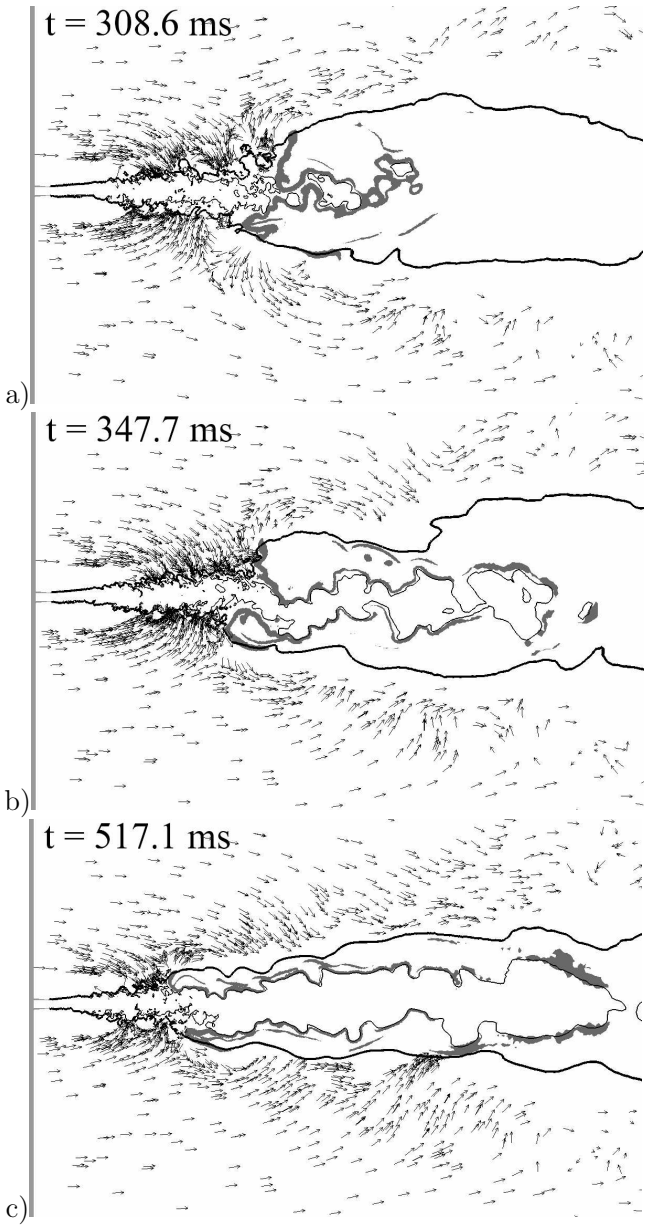


Fig. 24. Propagation phase in the LES. Arrows: velocity ; reactive zone: gray area ; thick line: lean flammability limit and thin line: rich flammability limit.

Figure 23 presents the impact of flame growth and propagation on the jet dynamics. Figure 23a for example confirms that the turbulent spherical flame induces an expansion of the flow.

(3) Upstream propagation of the flame (from 15 to 500 ms)
The spherical propagation of the flame and the rapid expansion of hot gases strongly modify the flow. Figure 23b shows that at $t = 36.2\ ms$ the reactive zone is no longer closed, due to lean extinction in the side regions of the jet. The upstream reactive region is strongly wrinkled in its center by the jet dynamics. The flame propagates upstream by the progression of the flame in the edge region of the jet (Fig. 23c, at $t = 253.1\ ms$), where the flow velocity in the streamwise direction is low and the mixture is close to stoichiometric conditions. In this region, the flow dilatation induced by the flame further reduces the speed of the oncoming flow ahead of the flame. Figure 24a shows that, at $t = 308.6\ ms$, the flame extinguishes in the jet axis region as it encounters rich mixtures. The shape of the flame becomes tubular as its center quenches (Fig. 24b). As the flame becomes cylindrical, the obstruction posed by the flame (Fig. 24a) reduces and the average radius of the flame tube decreases as observed experimentally (Fig. 17f, g and h). As the flame gets closer to the injection tube, less fuel-air premixing occurs, leading to greater penetration of the jet's rich core into the flame (Fig. 24 a, b and c). At $t = 517.1\ ms$ (Fig. 24c), the flame is stabilized by a ring shaped turbulent edge-flame.

To determine the flame regime (premixed or/and diffusion), the Takeno index [71]: $\Upsilon = \nabla Y_{O2}.\nabla Y_{CH4}$ and the indexed reaction rate (based on the one step scheme): $\dot{\omega}^* = \dot{\omega}\frac{\Upsilon}{|\nabla Y_{O2}.\nabla Y_{CH4}|}$ are used. When $\dot{\omega}^* = +\dot{\omega}$ the gradients of the reactants have the same sign and the flame is premixed; otherwise ($\dot{\omega}^* = -\dot{\omega}$) the flame is a diffusion flame. Figure 25 presents computed snapshots of $\dot{\omega}^*$ at three different times of the upstream propagation phase plotted alongside their respective scatter-plots of reaction rate versus the equivalence ratio.

During the quasi-spherical propagation phase (Fig. 25a), the flame evolves predominantly as a premixed flame but with some diffusion flame close to stoichiometry. 8.8 ms after ignition most of the reaction occurs in lean flame fronts as the flame expands radially towards the lean flammability limit. At t=253.1 ms (Fig. 25b), the flame has started its upstream propagation and three reaction modes can be identified: lean and rich premixed branches and a diffusion zone on the stoichiometric line. This flame is a triple flame [72]. When the flame has reached its stabilization location (Fig. 25c), the lean and rich premixed branches and diffusion flames are very close. At this stage, the flame can be called an edge flame and its stabilization is discussed in the following section. The most intense reaction occurs in the rich branch of the flame.

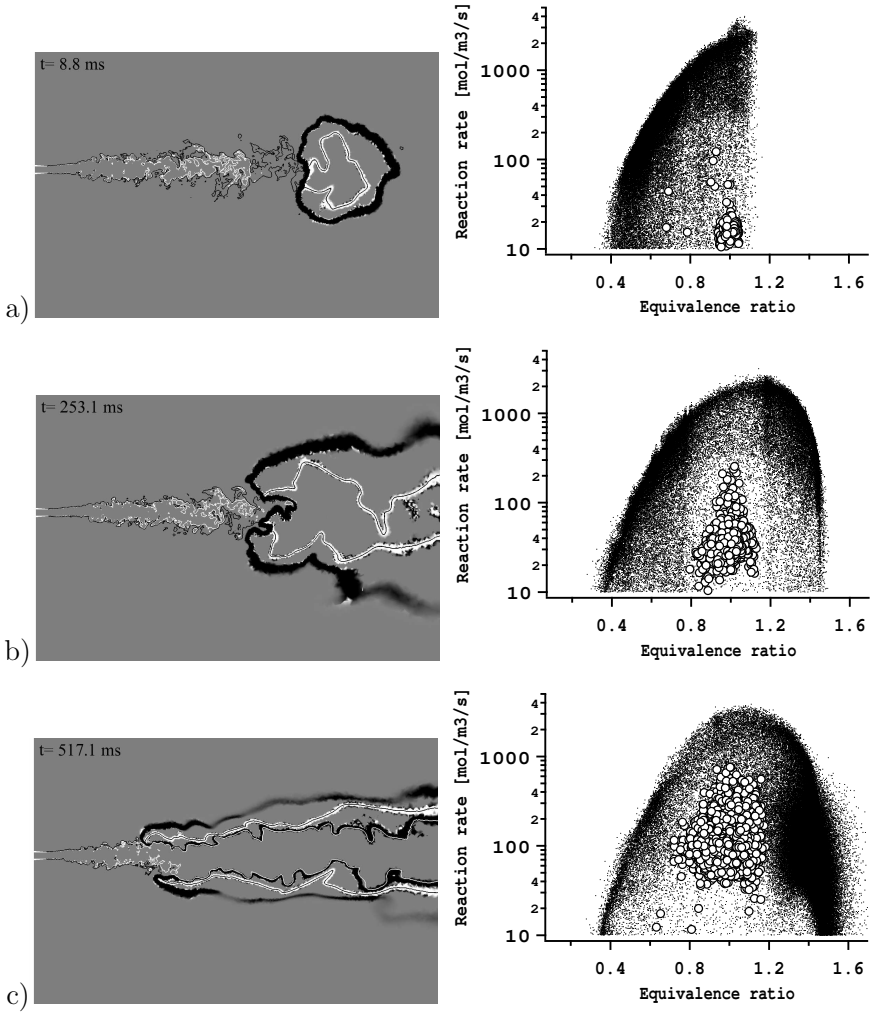


Fig. 25. Combustion regime indicated by the Takeno index [71] (left): black = premixed flame ; white = diffusion flame (black line: stoichiometry, white line: rich flammability limit) and corresponding scatter-plot (right) of the reaction rate of the one-step chemistry versus equivalence ratio (•: premixed regime, ○: diffusion regime).

(4) Stabilization of the edge flame (after 500 ms)
Figure 16 shows that the computed flame for the case C1 stabilizes at approximately 11 d_j downstream of the injector as in the experiment.

Figure 26 displays the velocity field and the Takeno index in the stabilization zone. Figure 26b shows that the flow streamlines diverge approaching the flame. This classical feature of triple flames has been observed in many experimental works [73,74] and is explained by the creation of hot gases which leads to a local dilatation of the flow which assists flame stabilization [73–77].

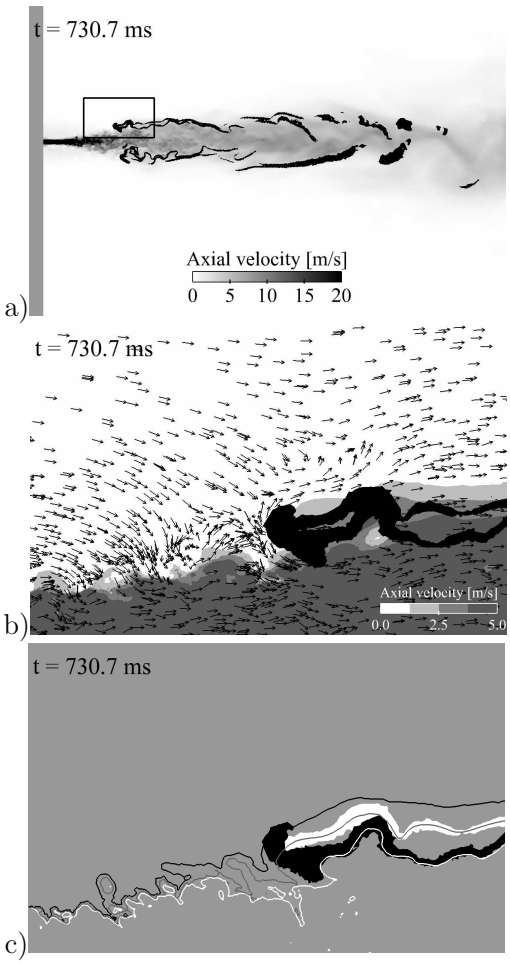


Fig. 26. Stabilization of the lifted flame (the flow is from left to right): (a) region of interest ; (b) flow dynamics around the triple point: black area=reaction zone and arrows: flow direction. (c) Combustion regimes (Takeno index) and flame position relative to the flammability limits (white zone: diffusion flame, black zone: premixed flame ; white line: lean limit, black line: rich limit and gray line: stoichiometric line).

Another aspect of edge flame stabilization is presented in Fig. 26c, where it is shown that the leading edge of the triple flame settles on the stoichiometric line at the intersection of the diffusion and premixed flames; the so-called triple point. The lean premixed branch is rather short compared to the rich premixed one and both premixed fronts stay within the flammability limits as observed experimentally by Schefer et al. [78] and Mansour [79].

The relative axial velocity (V_{rel}) of the fluid flowing across the triple point has been measured from the LES results (Fig. 27). This velocity is defined as: $V_{rel} = V_{flow} - V_{flame}$ where V_{flow} is the axial velocity of the flow recorded along a line parallel to jet axis and passing through the peak reaction rate

in the triple flame; V_{flame} is the axial speed of the flame in the laboratory frame of reference, calculated from the time derivative of the axial position of the flame's leading edge. This method has been employed experimentally by Hasselbrink and Mungal [80] to perform the same analysis using Particle Image Velocimetry (PIV).

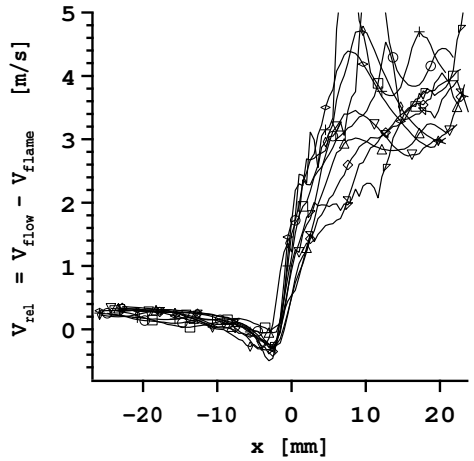


Fig. 27. Relative flow velocity ($V_{rel} = V_{flow} - V_{flame}$) plotted against distance x from the most reactive point for different times.

Figure 27 shows that the flow decelerates ahead of the flame base due to the dilatation and then accelerates in the reaction zone which is consistent with the experimental results of Hasselbrink and Mungal [80] and Schefer and Goix [73]. In the calculation, the relative velocity of the flow at the base of the flame is close to zero and the flame is stabilized in a flow moving at about 0.5 m/s. This result agrees with experimental measurements obtained at comparable Reynolds numbers such as those of Hasselbrink and Mungal [80] and Muñiz and Mungal [74]. These studies concluded that the axial velocity must be low, near the laminar flame speed at stoichiometric conditions ($S^0_{L(\phi=1)} = 0.41\ m/s$) to provide a region for stabilization.

6.3 Impact of the Thickened Flame Model on the triple flame stabilization

To better understand why the flame propagation and the stabilization height are well captured by LES, an analysis of the combustion model parameters is required. Figure 28 presents the field of the thickening factor F (cf. section 2) in the flame stabilization zone. The first point to note is that the flame is resolved while employing a thickening factor less than three. Since the magnitude of the flame thickening is small, and the thickened flame is still much thinner than

the large scale turbulent structures which are important to the upstream flame propagation [26,81], it is anticipated that the flame thickening has limited impact on the flame response.

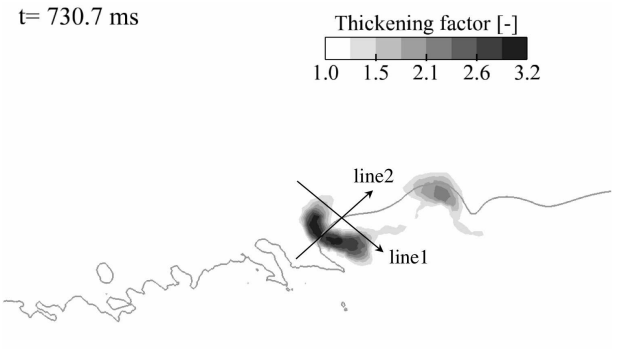


Fig. 28. Field of thickening factor F in the flame stabilization zone (gray line: stoichiometric line).

Second, the combustion model TFLES is activated ($F > 1$) only in the close vicinity of the triple point, on the two premixed branches (cf. Fig. 26c). The TFLES model is not triggered in the diffusion front because reaction rate values in the diffusion branch are about 5 times lower than in premixed regions (as shown in Fig. 29) so that the flame sensor S (constructed as a reaction rate) is not activated in this zone.

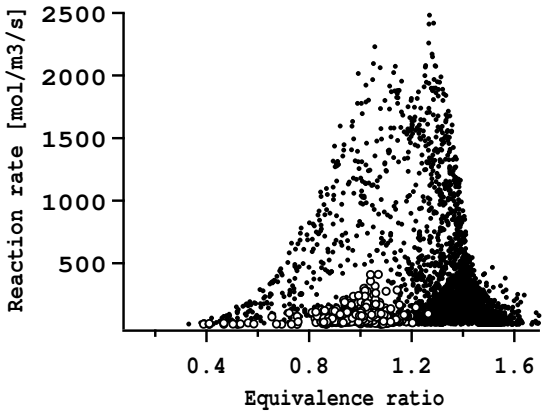


Fig. 29. Scatter plot of the reaction rate in the triple point region (•: premixed regime, ∘ diffusion regime).

This shows that mixing is not affected by the combustion model upstream of the flame front, a necessary condition to capture the stabilization processes [82,83].

Figure 30 presents the values of the thickening factor F and of the efficiency function E (cf. section 2) along two lines across the base of the flame (Fig. 28). Figure 30 shows that the efficiency function E is only activated in the premixed branches (since it depends on thickening) and that its maximum value reaches $E_{max} \approx 1.3$. This result indicates that due to SGS turbulence, the local consumption rate of the flame is only 1.3 times higher than the laminar flame rate. Hence, small scale turbulence has a small impact on the flame speed which agrees with experimental measurements of Watson et al. [83] and Upatnieks et al. [84] causing the flame base to propagate in the flow at a velocity close to the laminar flame speed.

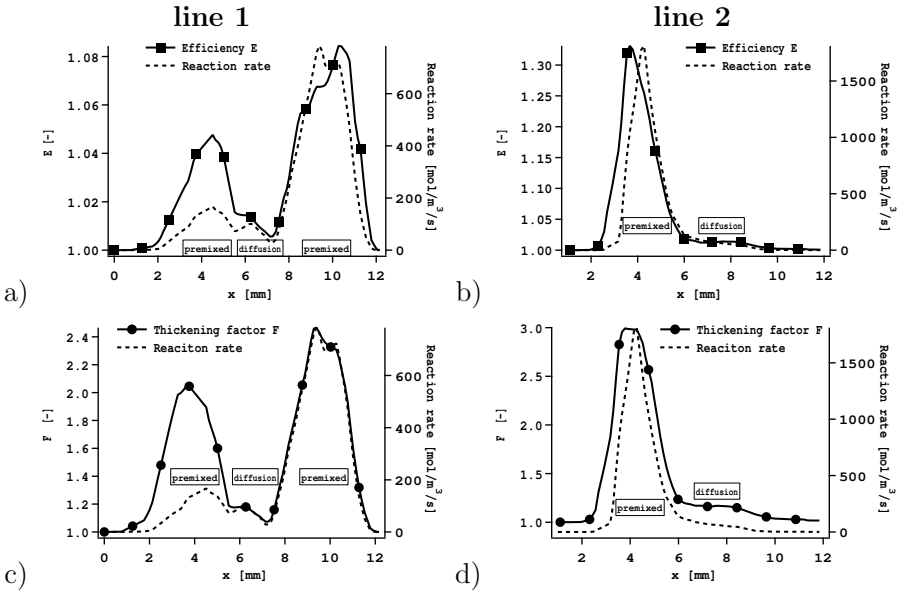


Fig. 30. Parameters of the combustion model (TFLES) along the two lines shown in Fig. 28. Efficiency function E along line 1: subfigure (a) and line 2: subfigure (b). Thickening factor F along line 1: subfigure (c) and 2: subfigure (d).

6.4 Field of ignition probability

Ahmed and Mastorakos established an ignition probability map of the jet [25] using the experimental protocol previously followed by Birch et al. [22] and Smith at al. [23]. For each location, a single spark is triggered 30 times at a rate of 6 sparks per minute to ensure that each test is independent. Three main events can occur after the spark is triggered: (1) no kernel is formed, (2) a kernel is formed but blown-off and (3) a kernel is formed leading to an upstream propagation of the flame and a stabilization as a lifted flame. Only event (3) is considered as a successful ignition in [25] and the ignition probability is then $P_{ig} = J/30$ where J is the number of successful ignitions.

Performing the same ignition probability analysis with LES is prohibited currently by the simulation time requirement. However some statistics based on time analysis of the mixture fraction in the cold flow permit construction of two probabilities from LES data: $P_f(r,\theta,z)$ is the probability of having a flammable mixture at location (r,θ,z) (in a cylindrical coordinate system) and $P_{f|U_c}(r,\theta,z)$ is the probability of having a flammable mixture with an axial speed U_x below a critical value U_c at (r,θ,z). In the experiment [25], the impact of the flow velocity on ignition was studied and it was concluded that for values of U_x above 5.5 m/s at the spark location, ignition fails because of kernel stretching and the increased heat loss due to turbulence [25]. From this result, the value of U_c was set to 5 m/s. Note that $P_{f|U_c}$ is an estimate of the probability of obtaining a kernel from a spark (event (2)) and not the probability of successful ignition (event (3)) denoted P_{ig}.

In the LES, the local equivalence ratio and the velocity of the flow have been recorded at 600 locations in the jet during a total time $\Delta_{t_{tot}}$ of 65 ms. Then the two probabilities can be calculated from:

$$P_f(r,\theta,z) = \frac{1}{\Delta_{t_{tot}}} \int_{\Delta_{t_{tot}}} G(\phi_{(r,\theta,z,t)})dt \tag{17}$$

$$P_{f|U_c}(r,\theta,z) = \frac{1}{\Delta_{t_{tot}}} \int_{\Delta_{t_{tot}}} G(\phi_{(r,\theta,z,t)}) \cdot H(Ux_{(r,\theta,z,t)} - U_c)dt \tag{18}$$

$$\text{with: } G(\phi_{(r,\theta,z,t)}) = H(\phi_{(r,\theta,z,t)} - \phi_{lean}) \cdot [1 - H(\phi_{(r,\theta,z,t)} - \phi_{rich})] \tag{19}$$

where H is the Heaviside function and the limits ϕ_{lean} and ϕ_{rich} are the lean and rich flammability limits respectively.

In Eq. 17 and 18, $\int_{\Delta_{t_{tot}}} G(\phi_{(r,\theta,z,t)})dt$ is the time during which the mixture is flammable and $\int_{\Delta_{t_{tot}}} G(\phi_{(r,\theta,z,t)}) \cdot H(Ux_{(r,\theta,z,t)} - U_c)dt$ is the time during which the mixture is flammable and the axial velocity is below U_c.

Figure 31 presents a comparison (on the jet axis) between P_{ig} the ignition probability measured in the experiment and the two probabilities P_f and $P_{f|Uc}$ obtained from LES results. A first observation is that the regions where $P_f > 0$ and $P_{f|U_c} > 0$, are wider than the region where the average equivalence ratio is flammable as indicated in Fig. 31 by the dashed lines. This can be explained by mixture fluctuations as proposed in Ref. [25,22].

A second result is that the region where $P_{ig} > 0$ is encompassed by the regions where $P_f > 0$ and $P_{f|U_c} > 0$ which is in agreement with the assumption that the formation of a kernel does not necessarily lead to a stable flame.

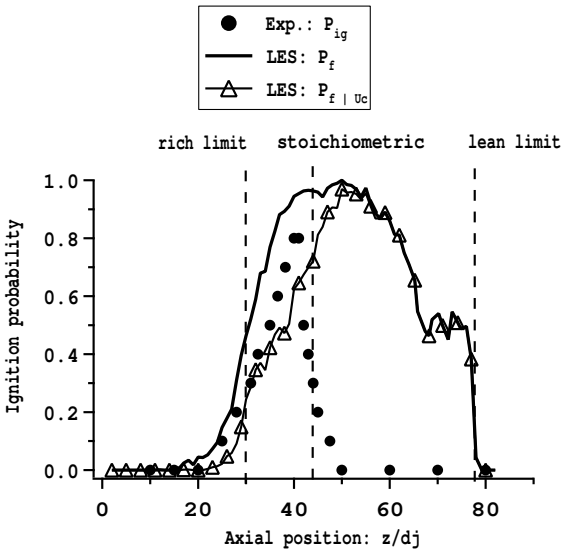


Fig. 31. Ignition probabilities on the jet axis for case C. The experimental value of P_{ig} (points) is plotted with the predicted values of P_f (line) and $P_{f|U_c}$ (line with symbols) from the LES.

In the experiment, $P_{ig} > 0$ in the region between the rich flammability limit and the stoichiometric line and drops to zero when $z > 50d_j$ [25]. Ahmed and Mastorakos [25] observed that P_{ig} falls to zero at $z \approx 50d_j$ (on the jet axis) suggesting that the kernels which form downstream of the location get blown-off. This result has been observed previously by Smith et al. [23]. It was explained in Ref. [25] that since the flame propagates downstream of the spark location following ignition, it encounters lean mixtures resulting in low flame speeds that do not allow the flame to propagate upstream. In the simulation, the ignition triggered at $z = 50\,d_j$ (case C0), generates a kernel but the subsequent flame fails to propagate upstream (Fig.32a). As the spark is located in a lean mixture region, the temperature of the resulting kernel is about 300K lower than in case C1 (Fig.32b) inducing a weaker dilatation of burned gases. This effect coupled with lower consumption speeds make the flame unable to reach the stoichiometric line and yield blow-off.

Figure 33 shows a comparison of the probability (P_{ig}) map measured experimentally [25] and the $P_{f|U_c}$ map reconstructed from cold LES results. In the experiment, the contours have been generated from a matrix of 42×12 points across and along the jet respectively. In the LES the matrix is made of 7 points in the axial direction and 74 points in the transverse direction.

The trends established from Fig. 31 are also observed on Fig. 33: $P_{f|U_c}$ and P_{ig} are relatively close in the $z < 40d_j$ region but $P_{f|U_c}$ remains above zero for $z > 50d_j$ contrary to P_{ig}. As discussed above, this is not surprising since in the present analysis, the LES is post-processed only to predict whether a

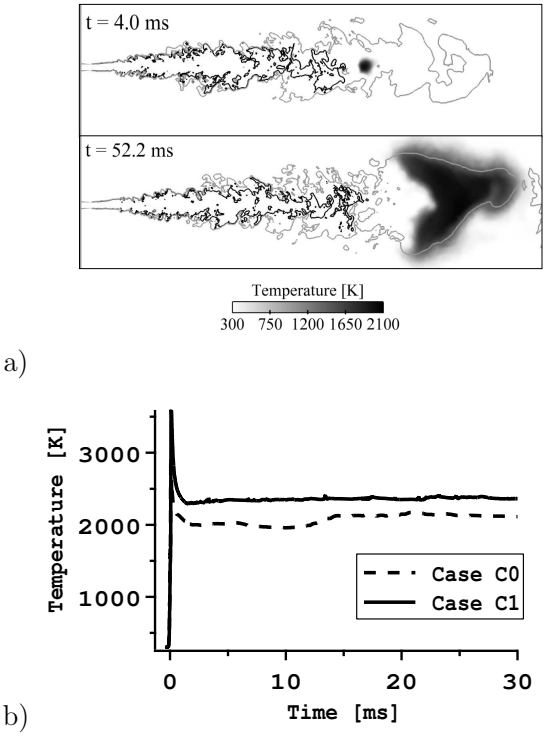


Fig. 32. Ignition case C0: a) flame topology (black line: stoichiometry, gray line: lean flammability limit); b) temporal evolution of the maximum flame temperature for cases C0 and C1.

flame kernel may be formed and not whether a spark might lead to successful ignition.

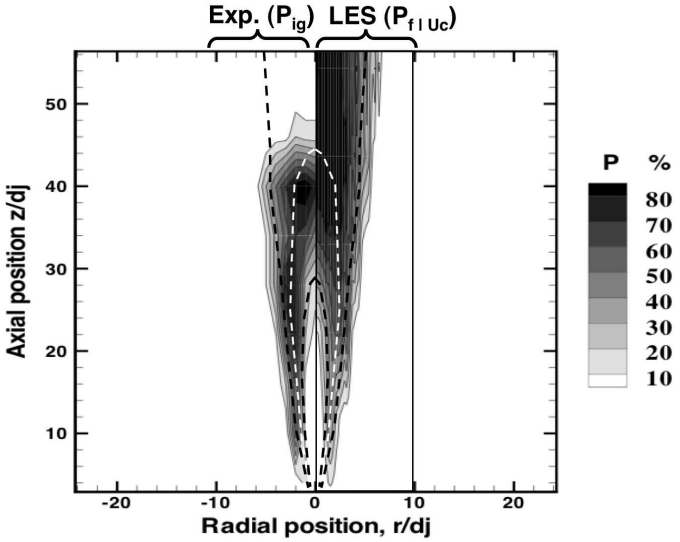


Fig. 33. Ignition probability map: Contours of the experimental ignition probability P_{ig} [25] (left) and $P_{f|U_c}$ predicted from the LES of case B (right). White dashed line: stoichiometric line and black dashed lines: flammability limits (from Eq. 14).

7 Conclusions

In this paper, full ignition sequences of a turbulent non-premixed jet, simulated with a LES approach have been presented. The kernel initiation is explicitly computed by the LES solver owing to a spark ignition model based on energy deposition, making this initial step dependent on the magnitude, duration and location of the energy deposition as well as on mixture and velocity variations at the ignition location. Turbulent combustion has been modeled using a single step chemical scheme coupled to the dynamically Thickened Flame model.

LES results are compared to experimental data reported for the same configuration [25]. Very good agreement is obtained between LES and experimental observations in terms of upstream flame propagation and stabilization as well as flame behavior and topology. Four main phases have been identified in both LES and experiment: (1) kernel initiation, (2) quasi-spherical expansion, (3) rapid upstream propagation and (4) stabilization. During the kernel initiation phase, the energy deposition results in the formation of a flame kernel which is first convected downstream by the jet. During the first phase, the kernel size and growth rate obtained by LES is in good agreement with experiment. Then the flame expands radially as a premixed flame (phase 2). At this time, the growth of the flame is mainly due to thermal expansion, which significantly disrupts the jet dynamics. When the flame reaches the boundaries of the jet, it quenches due to lean conditions and starts to propagate upstream (phase 3). As it gets closer to the jet exit, the flame front encounters mixture beyond

the rich the flammability limit and extinguishes locally. As the flame becomes tubular, a characteristic triple flame shape appears: a diffusion reaction zone on the stoichimetric surface is attached to lean and rich premixed branches. As this triple flame evolves upstream it becomes thinner and stabilizes as an edge flame at 11 diameters of the jet rim (phase 4) as in the experiment.

The probability of obtaining a flame kernel following the spark has also been estimated from LES results using statistics of mixture fraction and velocity in the cold flow. This probability has been compared to the probability of successful ignition, measured experimentally by Ahmed and Mastorakos [25]. The estimate give good accuracy down to the axial extent of the mean stoichiometric iso-surface, where kernel formation has a high probability of leading to a stable flame. Downstream of the mean stoichiometric iso-surface however, kernels which may be viable get blown-off because in the lean mixture, the burned gas expansion is weak and the turbulent flame speed is insufficient to allow upstream propagation.

To complete the comparison with the experiment, additional tests on the impact of the deposited energy amount, of the spark duration and size on ignition processes are necessary. The ignition model must also be validated in configurations with higher strain rates such as counter flow burners, to explore its ability to capture quenching.

8 Acknowledgments

This work was sponsored by the French Space Agency CNES and Snecma (Safran group). This research project has also been supported by a Marie Curie Early Stage Research Training Fellowship of the European Community's Sixth Framework Programme under contract number MEST-CT-2005-020426. The authors also gratefully acknowledge the computing center CINES where most of the calculations were performed, as well as Dr. Mastorakos and the research team of the Engineering Department of Cambridge University for fruitful discussions.

References

[1] E. Mastorakos, *Progress in Energy and Combustion Science* 35 (2009) 57–97.

[2] R. Maly, M. Vogel, in: *17th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1978, pp. 821–831.

[3] R. Teets, J. Sell, *SAE transactions* 97 (1988) 371–383.

[4] P. Ronney, *Opt. Eng.* 33 (1994) 510–521.

[5] T. Phuoc, F. White, *Combustion and Flame* 119 (1999) 203–216.

[6] J.-L. Beduneau, B. Kim, L. Zimmer, Y. Ikeda, *Combustion and Flame* 132 (4) (2003) 653–665.

[7] D. Bradley, C. G. W. Sheppard, I. M. Suardjaja, R. Woolley, *Combustion and Flame* 138 (2004) 55–77.

[8] C. V. Bindhu, S. S. Harilal, M. S. Tillack, F. Najmabadi, A. C. Caeris, *Applied Spectroscopy* 58 (6) (2004) 719–726.

[9] T. Phuoc, F. White, in: *29th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2002, pp. 1621 – 1628.

[10] D. R. Ballal, A. H. Lefebvre, in: *15th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1974, pp. 1473–1481.

[11] C. C. Swett, in: *6th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1956, pp. 523–532.

[12] D. R. Ballal, A. H. Lefebvre, in: *18th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981, pp. 1737–1747.

[13] P. L. Pitt, R. M. Clements, D. R. Topham, *Combustion Science and Technology* 78 (1986) 289–314.

[14] K. Rao, A. Lefebvre, *Combustion and Flame* 27 (1976) 1–20.

[15] M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, K. Kinoshita, *Combustion and Flame* 65 (3) (1986) 319–337.

[16] M. Champion, B. Deshaies, G. G. Joulin, *Combustion and Flame* 74 (1988) 161–170.

[17] D. Ballal, A. Lefebvre, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* 357 (1977) 163–181.

[18] D. Bradley, F. Lung, *Combustion and Flame* 69 (1) (1987) 71–93.

[19] C. Huang, S. Shy, C. Liu, Y. Yan, in: *31st Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2007, pp. 1401–1409.

[20] S. Rashkovsky, in: *First Mediterranean Combustion Symposium, Antalya, Turkey*, 1999.

[21] E. Richardson, E. Mastorakos, *Combustion Science and Technology* 179 (1-3) (2007) 21–37.

[22] A. D. Birch, D. R. Brown, M. G. Dodson, in: *18th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981, pp. 1775–1780.

[23] M. Smith, A. Birch, D. Brown, M. Fairweather, in: *21th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986, pp. 1403–1408.

[24] S. F. Ahmed, R. Balachandran, T. Marchione, E. Mastorakos, *Combustion and Flame* 151 (2007) 366–385.

[25] S. Ahmed, E. Mastorakos, *Combustion and Flame* 146 (2006) 215–231.

[26] K. Lyons, *Progress in Energy and Combustion Science* 33 (2) (2007) 211–231.

[27] C. M. Müller, H. Breitbach, N. Peters, in: *25th Symp. (Int.) On Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994, pp. 1099 – 1106.

[28] M. Chen, M. Herrmann, N. Peters, in: *28th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000, pp. 167–174.

[29] D. Veynante, F. Lacas, S. Candel, *AIAA Journal* 29 (1991) 848–851.

[30] O. Colin, A. Benkenida, C. Angelberger, *Oil and Gas Science Tech.* 58 (1) (2003) 47–62.

[31] E. Richardson, *Ignition modelling for turbulent non-premixed flows.*, Ph.D. thesis, University of Cambridge (2007).

[32] E. Richardson, E. Mastorakos, in: *Third European Combustion Meeting (ECM)*, 2007.

[33] P. E. DesJardin, S. H. Frankel, *Physics of Fluids* 10 (9) (1998) 2298 – 2314.

[34] A. R. Kerstein, *Combustion Science and Technology* 60 (1988) 391.

[35] P. A. McMurthy, S. Menon, A. R. Kerstein, in: *24th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992, pp. 271 – 278.

[36] S. B. Pope, *Progress in Energy and Combustion Science* 19 (11) (1985) 119–192.

[37] P. Domingo, L. Vervisch, K. Bray, *Combustion Theory and Modelling* 6 (2002) 529–551.

[38] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, C. Bérat, *Combustion and Flame* 154 (1-2) (2008) 2–22.

[39] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinsot, M. Oschwald, *Combustion and Flame* 156 (6) (2009) 1166–1180.

[40] P. Schmitt, T. J. Poinsot, B. Schuermans, K. Geigle, *Journal of Fluid Mechanics* 570 (2007) 17–46.

[41] A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, T. Poinsot, in: *31st Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2007, pp. 1729–1736.

[42] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinsot, D. Bissières, C. Bérat, *Combustion and Flame* 155 (1-2) (2008) 196–214.

[43] N. Lamarque, T. Poinsot, *AIAA Journal* 46 (9) (2008) 2282–2292.

[44] A. A. Aldama, *Lecture Notes in Engineering*, Vol. 49, Springer-Verlag, New York, 1990.

[45] T. Poinsot, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

[46] F. Nicoud, F. Ducros, *Flow, Turbulence and Combustion* 62 (3) (1999) 183–200.

[47] J. Smagorinsky, *Monthly Weather Review* 91 (1963) 99–164.

[48] P. Chassaing, *Turbulence en mécanique des fluides*, Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000.

[49] S. B. Pope, *Turbulent flows*, Cambridge University Press, 2000.

[50] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, J. W. C. Gardiner, V. V. Lissianski, Z. Qin, *GRI Topical Report No. GRI-95/0058*.

[51] E. Fernandez, V. Kurdyumov, A. Liñan, in: *28th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000, pp. 2125–2131.

[52] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinsot, D. Bissières, C. Bérat, in: *31st Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2007, pp. 3075–3082.

[53] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinsot, *Physics of Fluids* 12 (7) (2000) 1843–1863.

[54] F. A. Williams, *Combustion Theory*, Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

[55] T. D. Butler, P. J. O'Rourke, in: *16th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, 1977, pp. 1503 – 1515.

[56] C. Angelberger, F. Egolfopoulos, D. Veynante, *Flow, Turbulence and Combustion* 65 (2) (2000) 205–22.

[57] J.-P. Légier, T. Poinsot, D. Veynante, in: *Proceedings of the Summer Program*, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000, pp. 157–168.

[58] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud, T. Poinsot, *AIAA Journal* 44 (4) (2006) 741–750.

[59] A. Sengissen, J. F. V. Kampen, R. Huls, G. Stoffels, J. B. W. Kok, T. Poinsot, *Combustion and Flame* 150 (2007) 40–53.

[60] C. Vázquez-Espí, A. Liñán, *Combustion Theory and Modelling* 6 (2) (2002) 297–315.

[61] N. Chakraborty, R. S. Mastorakos, E. Cant, *Combustion Science and Technology* 179 (1-3) (2007) 293–317.

[62] T. A. Spiglanin, A. Mcilroy, E. W. Fournier, R. B. Cohen, J. A. Syage, *Combustion and Flame* 102 (3) (1995) 310–328.

[63] V. Erard, A. Boukhalfa, D. Puechberty, M. Coria-Ura, *Combustion Science and Technology* 113 (1) (1996) 313–327.

[64] S. Tieszen, D. Stamps, T. O'Hern, *Combustion and Flame* 106 (1996) 442–466.

[65] J. McQuaid, W. Wright, *International journal of heat and mass transfer* 17 (1974) 341–349.

[66] S. Corrsin, M. Uberoi, *Further experiments on the flow and heat transfer in a heated turbulent air jet*, National Advisory Committee for Aeronautics, 1949.

[67] C. Richards, W. Pitts, *Journal of Fluid Mechanics* 254 (1993) 417–435.

[68] O. Gurliat, V. Schmidt, O. Haidn, M. Oschwald, *Aerospace Science and Technology* 7 (7) (2003) 517–531.

[69] R. W. Bilger, S. B. Pope, K. N. C. Bray, J. F. Driscoll, in: *30th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2005, pp. 21–42.

[70] D. R. Dowdy, D. B. Smith, S. C. Taylor, in: *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp. 325–332.

[71] H. Yamashita, M. Shimada, T. Takeno, in: *26th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, pp. 27 – 34.

[72] H. Phillips, in: *10th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1965, pp. 1277–1283.

[73] R. W. Schefer, P. Goix, *Combustion and Flame* 112 (1998) 559–570.

[74] L. Muñiz, M. G. Mungal, *Combustion and Flame* 111 (1-2) (1997) 16–31.

[75] G. R. Ruetsch, L. Vervisch, A. Liñan, *Physics of Fluids* 7 (6) (1995) 1447–1454.

[76] J. Buckmaster, in: *27th Symp. (int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, pp. 1143–1149.

[77] J. Buckmaster, *Progress in Energy and Combustion Science* 28 (5) (2002) 435–475.

[78] R. W. Schefer, M. Namazian, J. Kelly, *Combustion and Flame* 99 (1994) 75–86.

[79] M. Mansour, *Combustion and Flame* 133 (3) (2003) 263–274.

[80] E. F. Hasselbrink, M. G. Mungal, in: *27th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998, pp. 867–874.

[81] J. E. Broadwell, W. J. Dahm, M. G. Mungal, in: *20th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1984, pp. 303 – 310.

[82] H. Eickhoff, B. Lenze, W. Leuckel, in: *20th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1984, pp. 311–318.

[83] K. Watson, K. Lyons, J. Donbar, C. Carter, *Combustion and Flame* 123 (2000) 252–265.

[84] A. Upatnieks, J. F. Driscoll, C. Rasmussen, S. Ceccio, *Combustion and Flame* 138 (2004) 259–272.

[85] A. Van Maaren, D. S. Thung, L. R. H. De Goey, *Combustion Science and Technology* 96 (4) (1994) 327–344.

[86] C. M. Vagelopoulos, F. Egolfopoulos, in: *27th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998, pp. 513–519.

[87] M. I. Hassan, K. T. Aung, G. M. Faeth, *Combustion and Flame* 115 (4) (1998) 539–550.

[88] X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, R. Woolley, *Combustion and Flame* 121 (2000) 41–58.

[89] I. Wygnanski, H. Fiedler, *Journal of Fluid Mechanics* 38 (03) (1969) 577–612.

Compléments

Evaluation des modèles LES

Avant d'effectuer les simulations d'allumage, une part importante du travail a consisté à tester les différents schémas et modèles turbulents disponibles dans AVBP. Ces tests ont été réalisés sur la configuration du jet d'air turbulent étudié par Ahmed et Mastorakos [3].

Le schéma numérique qui donne les meilleurs résultats est TTGC (cf. 5.2) et c'est ce schéma qui a été choisi pour les simulations. Les schémas de Lax-Wendroff et TTG4A (cf. 5.2) sont trop dissipatifs pour cette application : la transition turbulente du jet n'apparaît que pour des valeurs de turbulence injectées très importantes ($> \ 10\%$ de la vitesse moyenne).

Les trois modèles LES disponibles dans AVBP (cf. 4.2) ont aussi été comparés sur ce cas non-réactif : le modèle de Smagorinsky classique [197], le modèle de Smagorinsky dynamique [133] et le modèle de Wale [142].

La Fig. 8.16 présente les vitesses moyennes (U_m) et fluctuantes (RMS pour *root mean square* en anglais) sur l'axe du jet données par les trois modèles. Le modèle de Smagorinsky classique prédit une transition vers la turbulence à $z \approx 7d_j$ alors qu'avec les modèles de Smagorinsky dynamique et de Wale, la transition a lieu respectivement à $z = 3.5d_j$ et $z = 4.5d_j$. Cette première observation peut être expliquée par le fait que le modèle de Smagorinsky classique produit de la viscosité turbulente dans la zone de cisaillement laminaire en sortie de buse (Fig. 8.17a). Cette viscosité tend à détruire les instabilités du jet et à retarder l'apparition de la transition turbulente. Les modèles de Smagorinsky dynamique et de Wale génèrent de la viscosité turbulente principalement dans la zone d'éclatement du jet où de rotationnel de la vitesse est important (Fig. 8.17b and c).
Une autre observation est qu'après la transition, la vitesse moyenne longitudinale sur l'axe, a des valeurs plus faibles avec le modèle de Smagorinski dynamique qu'avec le modèle Wale (Fig. 8.16a). Les champs instantanés de viscosité turbulente présentés sur la Fig. 8.17, révèlent que l'intensité de la viscosité est plus importante avec le modèle de Smagorinski dynamique qu'avec le modèle de Wale. Cette différence de niveaux peut être à l'origine de la diminution plus rapide de la vitesse axiale moyenne.

la Fig. 8.16c) présente l'évolution le long de l'axe du jet, du rapport de la fluctuation axiale de la vitesse sur la vitesse moyenne axiale. Les valeurs de ce rapport obtenu avec le modèle Wale sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de Ahmed et Mastorakos [3] dans la région d'affinité

($z/d_j > 20$). Dans cette région, on obtient $u_rms/U_m \approx cte \approx 0,25$, valeur observée dans d'autres expériences [36].Les résultats obtenus avec les modèles de Smagorinsky (classique et dynamique) semblent présenter une décroissance rapide après l'éclatement du jet. Il faut cependant être prudent avec ces résultats du fait de la convergence incomplète des calculs.

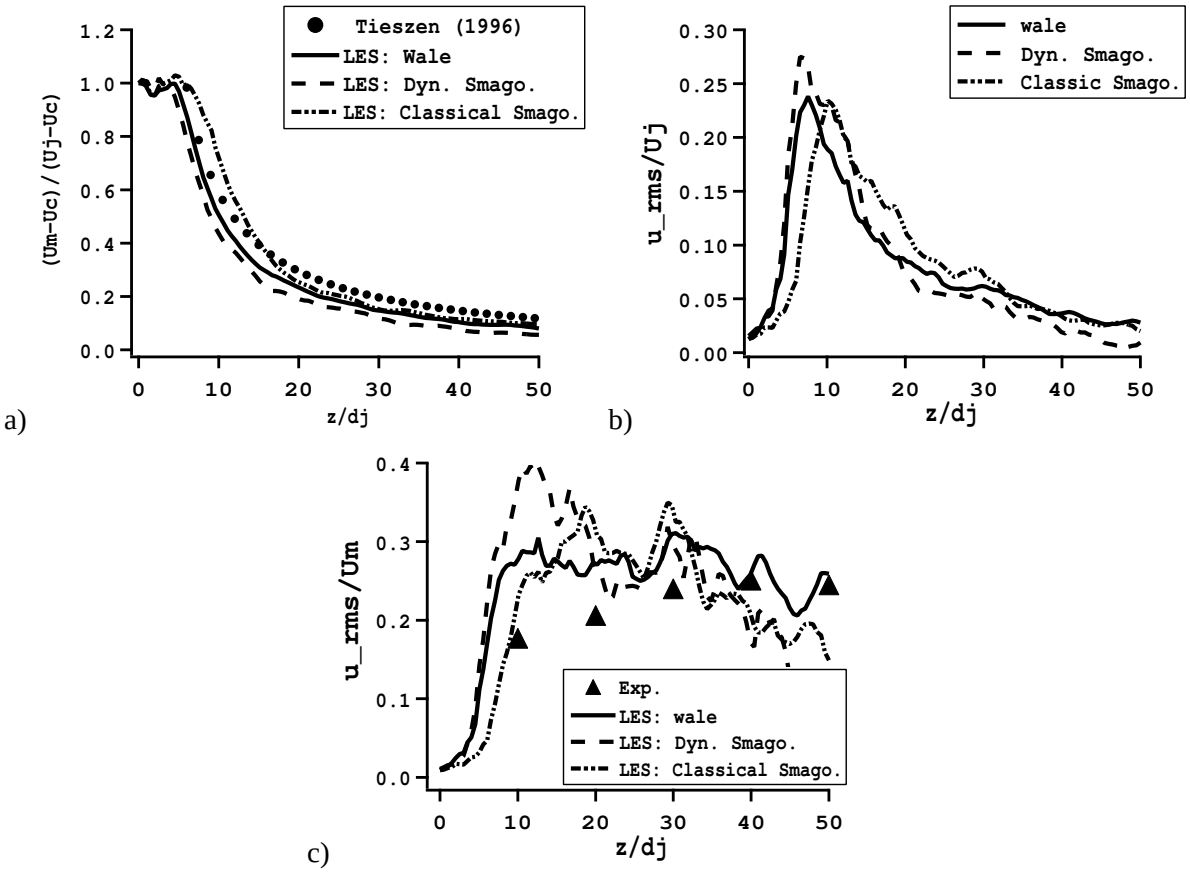


FIG. 8.16 - *(a) Evolution sur l'axe du jet, de la vitesse axial moyenne (U_m) comparée à la relation empirique de Tieszen et al. [218] ; (b) Evolution sur l'axe du jet, de la fluctuation axiale de la vitesse (u_rms) normalisée par la vitesse moyenne dans le tube (U_j) ; (c) Evolution sur l'axe du jet, de la fluctuation axiale de la vitesse, normalisée par la vitesse axiale moyenne à la même position, comparée aux mesures d'Ahmed et Mastorakos [3]. vitesse moyenne dans le tube : $U_j = 21\ m/s$ vitesse du co-courant : $U_c = 0.1\ m/s$.*

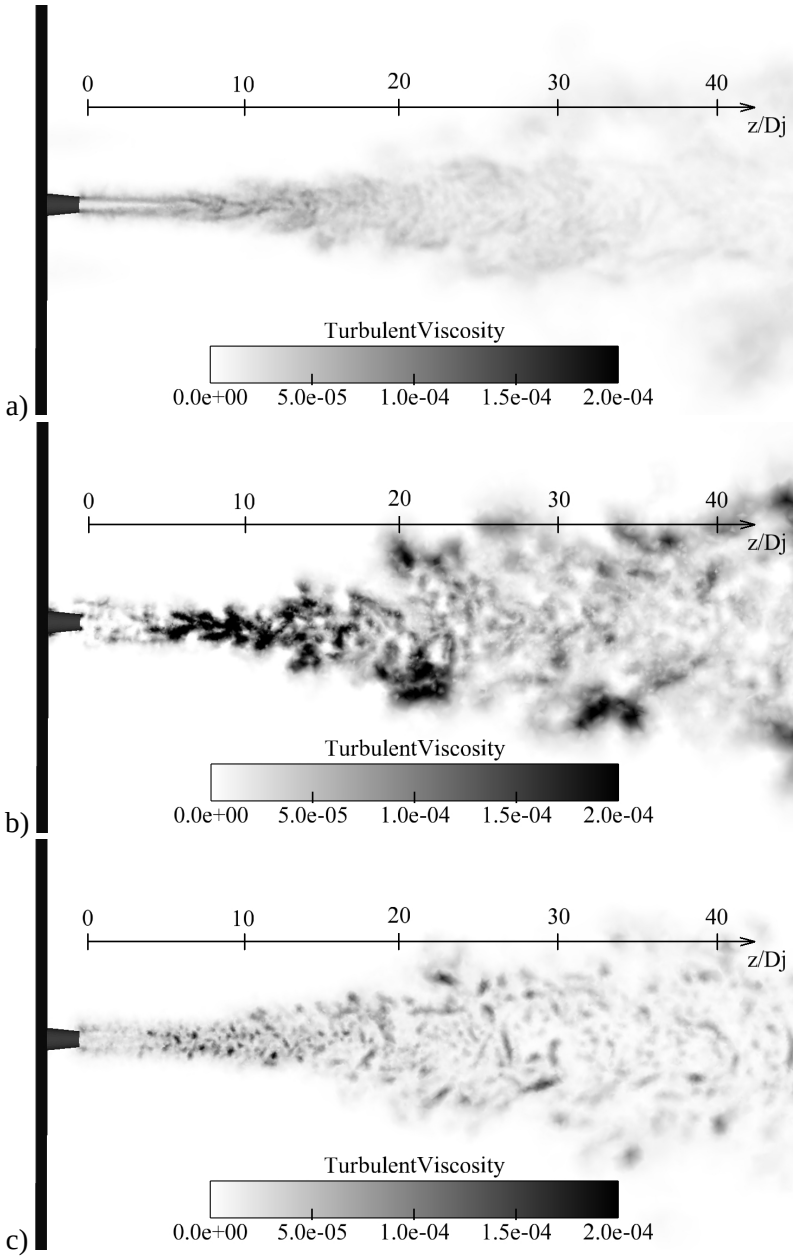


FIG. 8.17 - *Champs instantanés de viscosité turbulente $[m^2/s]$ dans le jet, pour les modèles LES : a) Smagorinsky classique, b) Smagorinsky dynamique et c) Wale.*

La Fig. 8.18 présente les profils radiaux de la vitesse axiale normalisée sur 5 plans en aval du tube, mesurés dans l'expérience de Ahmed et Mastorakos [3] et obtenu avec AVBP. Globalement, les trois modèles donnent des résultats proches des expériences. On notera tout de même que le modèle de Smagorinsky classique ne capture pas le bon profil de vitesse sur le premier plan ($z/d_j = 10$) du fait que la transition du jet n'est pas correctement prédite.

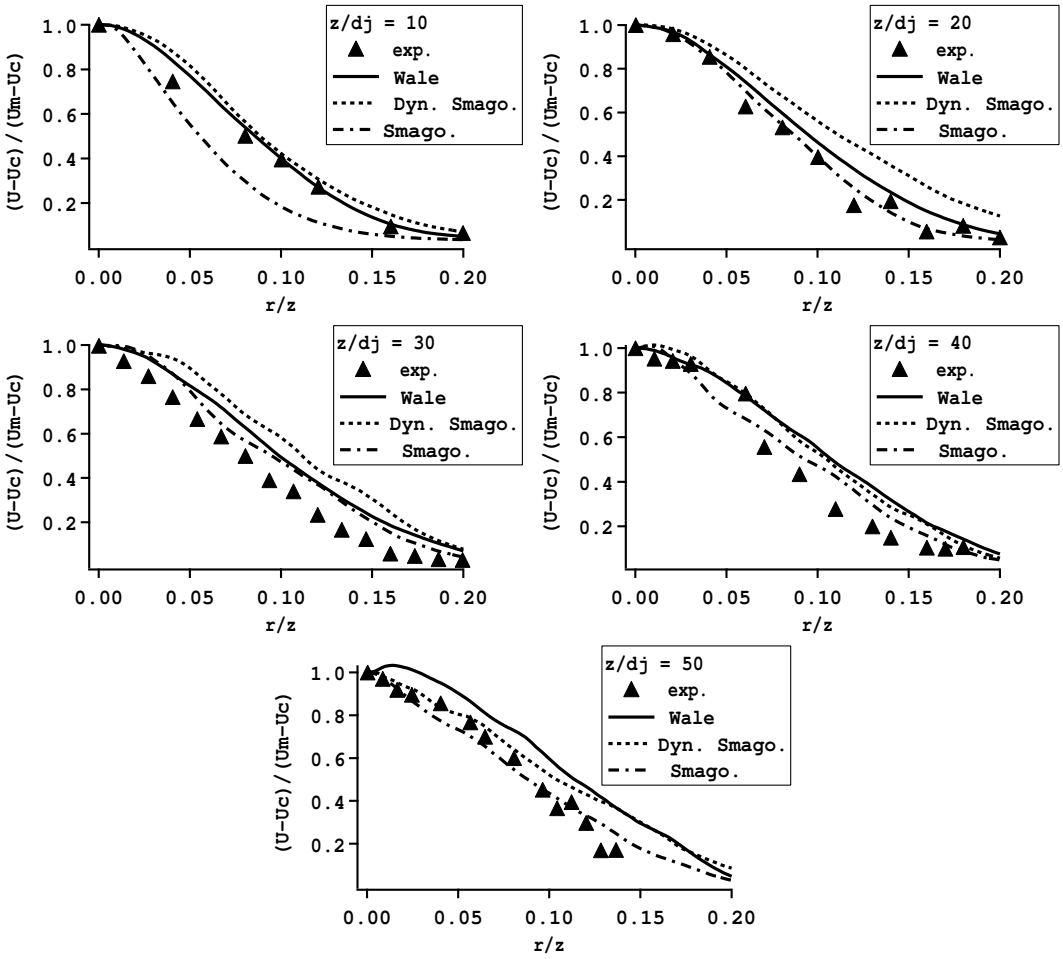


FIG. 8.18 - *Profils radiaux, sur différents plans perpendiculaires au jet, de la vitesse axiale moyenne (U) normalisée par la vitesse sur l'axe (U_m). Comparaison des résultats numériques et expérimentaux de Ahmed et Mastorakos [3]. Jet d'air, vitesse moyenne d'injection : $U_j = 21\ m/s$ et vitesse du co-courant : $U_c = 0.1\ m/s$.*

La Fig. 8.19 présente les profils radiaux de la fluctuation de vitesse axiale normalisée par la vitesse axial moyenne sur cinq plans en aval du tube d'injection. Il est observé que le modèle Wale présente une tendance proche des mesures expérimentales mais avec des niveaux d'intensité turbulente axiale supérieurs. Les résultats donnés par le modèle de Smagorinsky classique sont relativement éloignés des mesures expérimentales sur l'axe du jet, mais présentent un bon accord pour $r/z > 0,1$. Le modèle de Smagorinsky dynamique donne globalement des valeurs trop importantes pour $z/d_j < 30$ et trop faible pour $z/d_j = 50$.

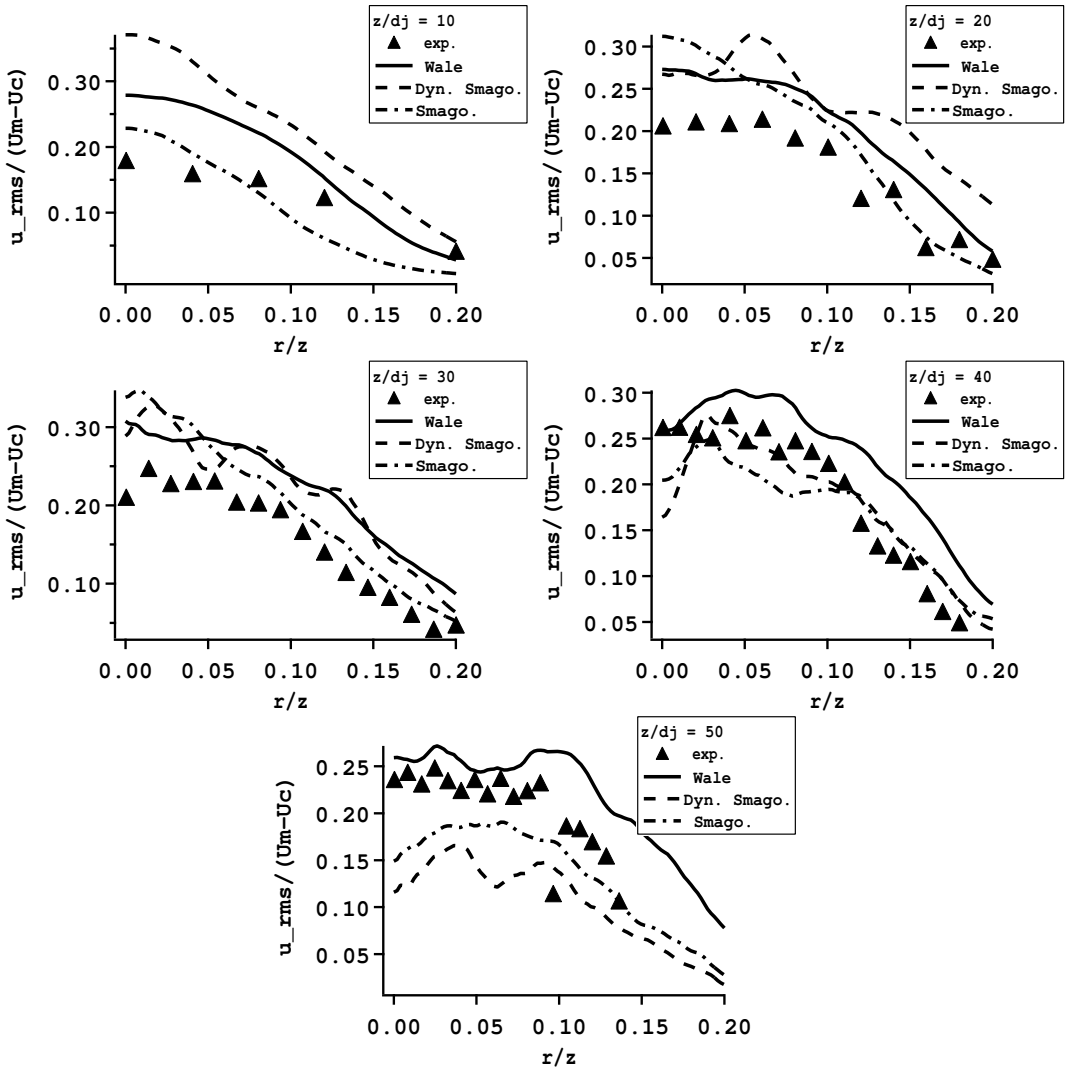


FIG. 8.19 - *Profils radiaux, sur différents plans perpendiculaires au jet, de la fluctuation de vitesse axiale (u_rms) normalisée par la vitesse sur l'axe (U_m). Comparaison des résultats numériques et expérimentaux de Ahmed et Mastorakos [3]. Jet d'air, vitesse moyenne d'injection : $U_j = 21\ m/s$ et vitesse du co-courant : $U_c = 0.1\ m/s$.*

Au regard de ces résultats, le modèle turbulent Wale a été choisi pour réaliser le calcul.

Modèle TFLES et flamme triple

Dans cette section, le comportement du modèle dynamique de flamme épaissie est étudié dans la zone de stabilisation de la flamme. Cette analyse permet d'apporter certains éléments de réponse pour expliquer pourquoi la vitesse de propagation ainsi que la hauteur de stabilisation de la flamme sont correctement capturées dans la simulation LES.

Pour cette étude, la zone d'intérêt est présentée sur la Fig. 8.20 (encadré noir). L'étude du régime de combustion à partir de l'indice de Takeno [232] (voir l'article sur l'allumage du jet pour la définition de l'indice) montre clairement que le point le plus amont de la flamme est composé de deux fronts prémélangés (riche et pauvre) et d'un front de diffusion, liés entre eux au niveau du point triple (Fig. 8.21a).

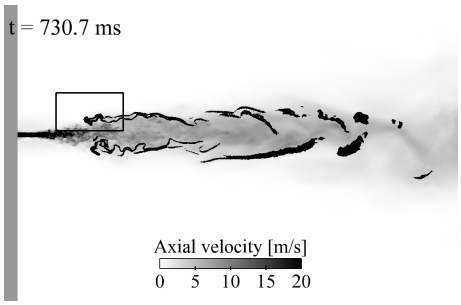


FIG. 8.20 - *Zone d'intérêt de l'étude de l'épaississement de la flamme triple (zone noire= flamme).*

La figure 8.21b montre la localisation de l'épaississement dans la zone du point triple. Il est observé que l'épaississement se déclenche près du point triple, au niveau des deux branches prémélangées. Cette localisation est due au fait que le taux de réaction de la zone de prémélange est environ 5 fois plus important que celui de la branche de diffusion comme on peut le voir sur la Fig 8.22. Ainsi, le senseur S utilisé pour détecter le front de flamme, basé sur une relation similaire à un taux de réaction (cf. Section 4.5), ne s'active quasiment pas dans la zone de réaction en diffusion comme le montre la Fig. 8.21c. Il est aussi à noter que l'épaississement est très localisé et n'affecte pas le mélange en amont de la zone de stabilisation.

Un autre point important est que la valeur maximale du facteur d'épaississement est environ 3. Cette valeur est relativement faible par comparaison avec celles communément rencontrées dans les simulations LES de brûleurs industriels [18, 21], où le facteur d'épaississement varie de 20 à 50. Cette faible valeur est due au fait que le maillage de la région de stabilisation a une taille caractéristique de l'ordre de l'épaisseur de flamme ($\Delta_x \approx 0,2 - 0,4\,mm$ et $\delta_L^0 \approx 0,15\,mm$). Le modèle de combustion a donc un impact modéré sur la flamme stabilisée.

La Figure 8.23 présente le facteur d'épaississement F et la valeur de la fonction d'efficacité E le long des lignes 1 et 2 de la Fig. 8.21b. Ces résultats plus quantitatifs montrent que la correction due à la fonction d'efficacité (pour retrouver le plissement réel de la flamme) est très faible ($E < 1.35$) car la flamme est quasiment résolue sur le maillage LES et que l'efficacité, comme l'épaississement se déclenche principalement dans la région de flamme de prémélange.

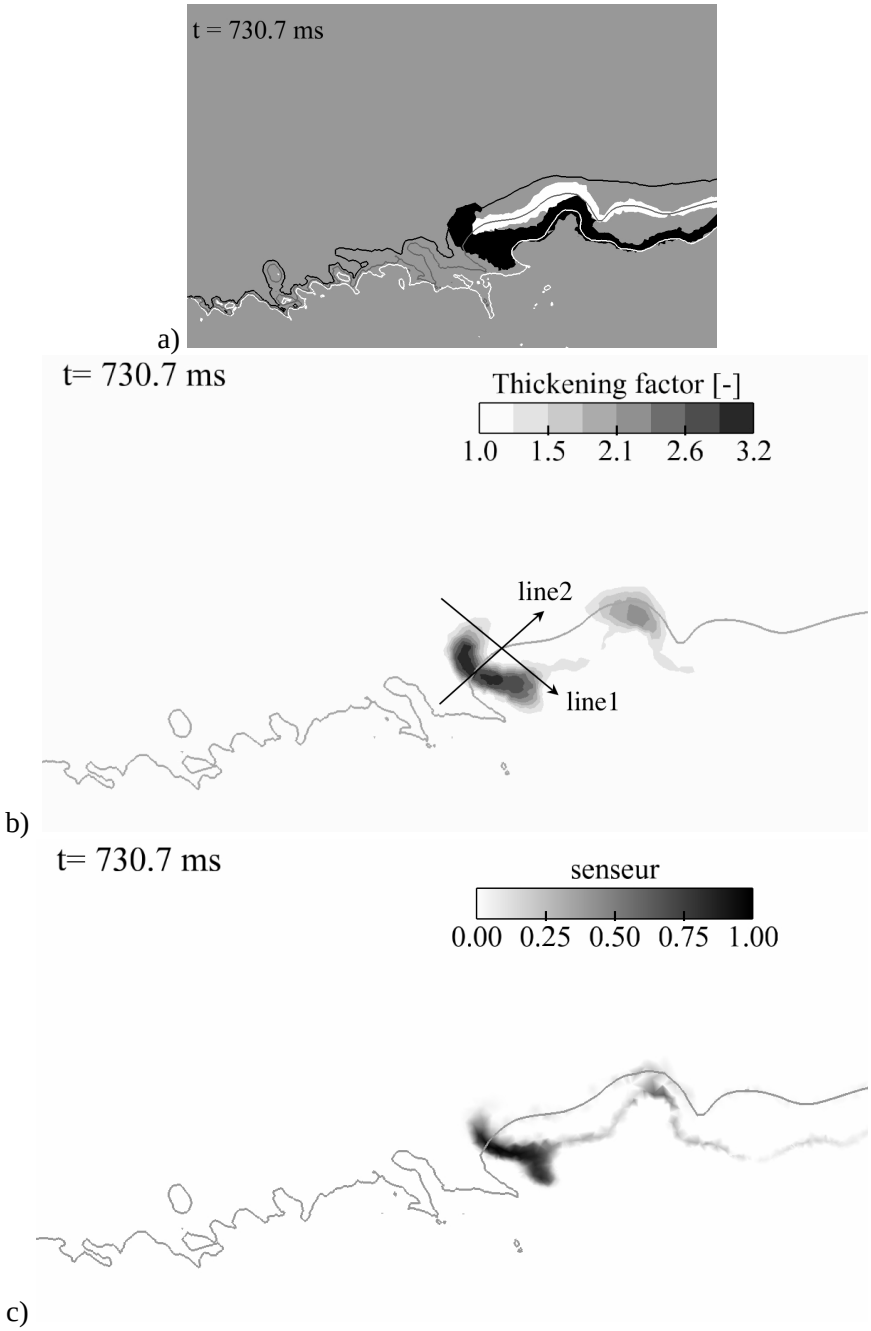


FIG. 8.21 - *Zone d'étude : a) régimes de combustion mis en évidence par l'indice de Takeno : zone noire=combustion en prémélange et zone blanche=combustion en diffusion (ligne noire : limite de flammabilité pauvre, ligne grise : ligne stoechiométrique et ligne blanche : limite de flammabilité riche), b) champs de l'épaississement de la flamme et position des deux lignes de coupe et c) senseur de détection de la zone réactive utilisé dans le modèle de combustion.*

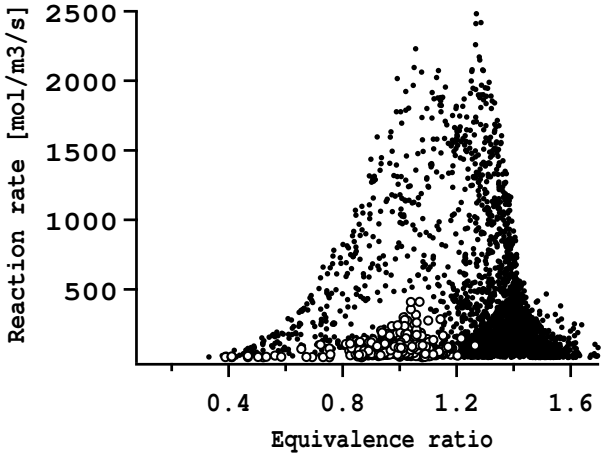


FIG. 8.22 - *Nuage de points du taux de réaction de la zone étudiée (indexé par l'indice de Takeno), en fonction de la richesse (● : prémélange, ○ : diffusion).*

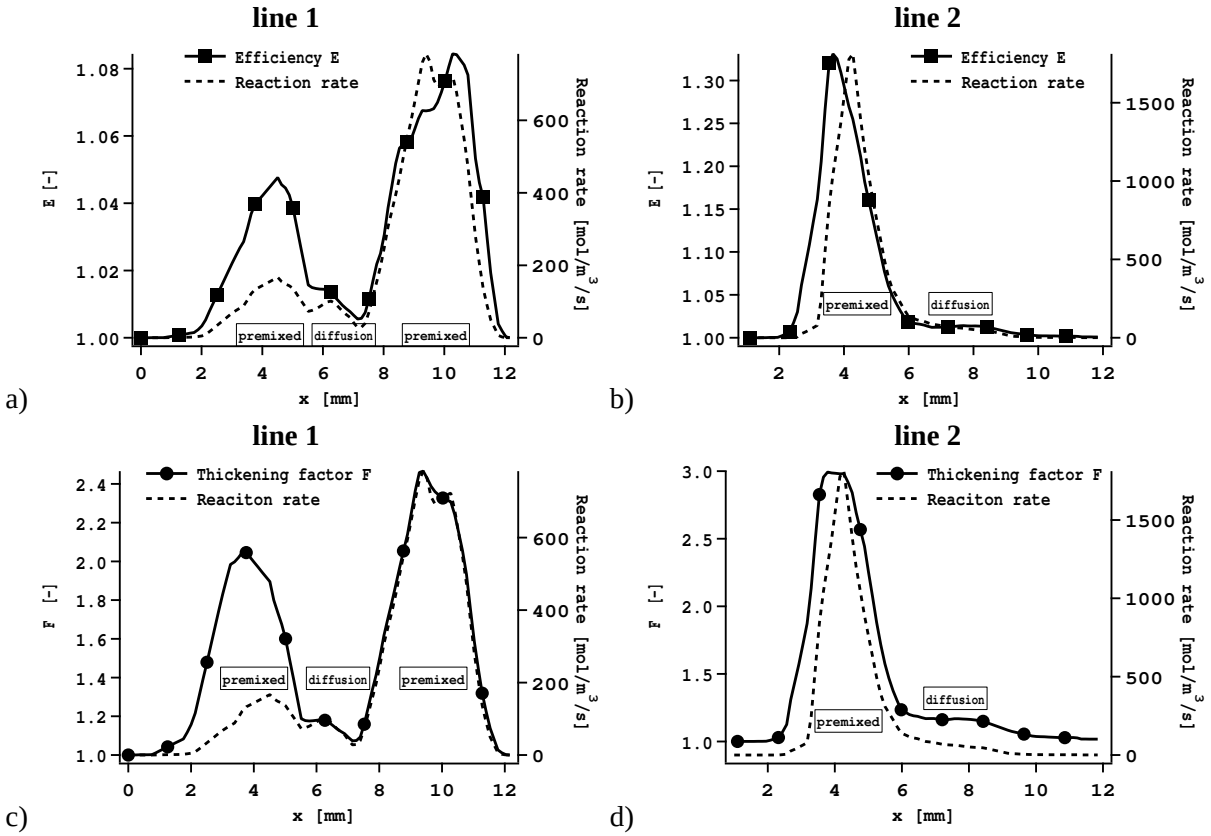


FIG. 8.23 - *Paramètres du modèle de combustion : facteur d'épaississement F et fonction d'efficacité E, le long des lignes 1 et 2 repérées sur la Fig. 8.21b.*

La conclusion de cette étude portant sur l'impact du modèle de flamme épaissie dynamique sur la flamme triple montre trois aspects :

1. l'épaississement est bien localisé à la zone de réaction et ne perturbe pas le mélange en amont de la zone de stabilisation
2. le modèle de combustion agit uniquement sur la zone de réaction en prémélange (qui est 5 fois plus réactive que la zone en diffusion), pour laquelle il est bien adapté
3. les valeurs d'épaississement et d'efficacité sont faibles, ce qui implique que la taille caractéristique et la dynamique de la flamme sont peu modifiées par le modèle de combustion

Il semble donc que pour le cas d'une flamme détachée, le modèle de combustion TFLES est relativement bien adapté. Une étude paramétrique avec des maillages plus grossiers est à envisager pour évaluer les performances du modèle pour des épaississements plus importants.

Conclusions

Dans cette partie, des simulations d'allumage d'un jet turbulent non prémélangé de Ahmed et Mastorakos [3] ont été présentées. Ces calculs s'appuient sur l'utilisation du modèle d'allumage ED permettant de reproduire d'une façon réaliste l'effet d'une bougie électrique. Les résultats LES obtenus sont en très bon accord avec les observations et mesures expérimentales : les évolutions temporelles des positions des flammes sont bien capturées par la LES pour les différents cas tests. Pour chaque phase de l'allumage, la topologie de la flamme calculée est très semblable à celle des visualisations obtenues par Ahmed et Mastorakos, ce qui montre que les mécanismes d'allumage, de propagation et de stabilisation sont relativement bien représentés par le code. L'étude portant sur la probabilité d'allumage montre que les statistiques établies à partir des champs froids LES permettent de savoir si l'allumage produira ou non un noyau de flamme mais ne permet pas de dire si cette flamme parviendra à se stabiliser. Une tendance observée expérimentalement [3, 2] et en partie verifiée par la LES, est que la probabilité d'avoir un allumage réussi est importante dans les zones où les vitesses sont faibles et le mélange près des conditions stoéchiométriques.

Dans le contexte de la thèse, ces travaux constituent la première étape de validation. L'étape suivante consiste à appliquer le code AVBP à un cas d'allumage de jet mais dans une configuration plus proche des moteurs fusées. Pour ce second test, le modèle ED est employé pour simuler un allumage par laser.

Quatrième partie

Séquence d’allumage d’un moteur fusée expérimental

Introduction

Le contenu de ce chapitre se présente sous forme d'un article accepté pour publication dans le journal *Combustion and Flame*. Ce travail est d'abord introduit en français et des compléments portant sur certains choix techniques sont présentés en fin de chapitre.

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre du 3eme colloque international : *Rocket Combustion Modeling* (RCM) en 2006. Cet événement a été organisé par le groupe de recherche franco-allemand constitué du CNES, du DLR, d'EADS-ST, de l'ONERA et de la SNECMA. Le but de ce comité est de développer et d'évaluer les méthodes de simulations numériques dans le domaine des écoulements réactifs dans les moteurs fusées.

La maîtrise de la phase d'allumage est un point clé de la fiabilité d'un lanceur spatial. Un retard de quelques millisecondes de l'allumage peut par exemple conduire à une accumulation de combustible dans la chambre et entraîner un pic brutal de pression au moment de l'allumage pouvant à son tour déclencher des instabilités acoustiques ou endommager la chambre.

Pour le moteur VINCI, cette phase est d'autant plus critique que le moteur doit pouvoir se rallumer en cours de vol, afin de mettre à poste plusieurs satellites. Dans le cadre de son développement, d'importants moyens expérimentaux ont été mis en place pour accroître la connaissance sur les phénomènes physiques de l'allumage des moteurs fusées cryotechniques. Un banc expérimental dédié à l'analyse optique du transitoire d'allumage a été mis au point sur le site du DLR de Lampoldshausen en Allemagne. Ce banc appelé "M3", permet de réaliser des allumages sous condition atmosphérique ou vide partiel, avec différents combustibles (hydrogène ou méthane) réagissant avec de l'oxygène injecté sous forme gazeuse ou liquide.
Ce dispositif est composé d'une chambre de combustion de faible dimension, alimentée par un injecteur coaxial et deux vitres en quartz permettent de réaliser les diagnostics optiques sur la totalité du volume de la chambre. Dans cette configuration, l'allumage est déclenché par un point laser focalisé dans la couche de mélange des jets d'injection.

Ce chapitre présente la simulation LES et l'analyse d'un transitoire d'allumage du banc M3, réalisé expérimentalement par le DLR. Dans un premier temps, le banc expérimental et les différents systèmes de mesures sont présentés. Puis la méthodologie LES et les données caractéristiques de la simulation sont décrites. Les deux dernières sections sont consacrées à la présentation des résultats et à la discussion.

Note : La réalisation de cette simulation a fait l'objet de deux présentations dans des colloques inter-

nationaux, à l’ICDERS (23-30 juillet 2007 à Poitiers) et au Symposium (International) on Combustion à Montreal (03-08 août 2008).

Accepted in Combustion and Flame

Large Eddy Simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration

G. Lacaze [a], B. Cuenot [a], T. Poinsot [b] and M. Oschwald [c]

[a] *CERFACS, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse cedex, France*

[b] *Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, CNRS, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

[c] *DLR Lampoldshausen, 74239 Hardthausen, Germany*

Abstract

The control of ignition in a rocket engine is a critical problem for combustion chamber design. Delayed ignition may lead to high amplitude pressure fluctuations that can damage the burner (strong ignition) whereas early ignition may fail. This paper describes a numerical study of a strong ignition sequence observed in a laboratory-scale single-injector rocket chamber ignited by a laser and fueled with gaseous oxygen and hydrogen. OH-emission images, Schlieren pictures and pressure measurements allow to follow the flame propagation experimentally. The present Large Eddy Simulation (LES) approach includes shock treatment, a 6 species - 7 reaction chemical scheme for $H_2 - O_2$ and a model for the energy deposition by a laser. Flame/turbulence interaction is modeled with the thickened flame concept. LES is used to compute both the filling phase (during which the gaseous hydrogen and oxygen mix) and the ignition phase. The flame location and structure as well as the temporal evolution of the chamber pressure obtained numerically are in good agreement with the experiment. The use of complex chemistry in the computation also allows the comparison of LES data with experimental OH-images and shows that the sensitivity of the CCD camera used to record the spontaneous emission of the $OH*$ radical is not high enough to properly locate the flame front in rich regions. The combined experimental and numerical results lead to a more detailed analysis of the ignition processes and its coupling with flow rates oscillations in the H_2 and O_2 feeding lines.

Key words: IGNITION, NUMERICAL COMBUSTION, ROCKET ENGINES

1 Introduction

Understanding ignition processes is extremely important to design reliable combustion devices. The technical needs for internal-combustion (IC) engines and aircraft combustors have motivated a large range of theoretical, experimental and numerical studies on ignition phenomena. Under uniform mixture condition with no flow, the minimum energy to trigger a chemical run-away as well as the critical radius and the duration of the spark have been extensively studied, analytically and experimentally [1–4]. In turbulent premixed flows, stretch and convective effects can lead to the failure of ignition [2,5–7]. In turbulent non-premixed configurations such as jet and bluff-body flows, ignition failure is mainly due to incomplete mixing at the spark location [8,9]. Other studies of Ballal and Lefevre [10] and of Danis [11] show the influence of two-phase flow effects on spark ignition.
In rocket engines ignition is a critical phase for safety and payload-cost constraints. The development program of future launchers often focusses on multiple-payload capability based on re-ignitable upper stage engines. In this context, ignition control is critical as it must be repeatable without failure.
The combustion initiation in rocket engines is usually based on pyrotechnic devices. Burned gases are injected into the chamber while the valves of propellants are simultaneously opened. Ignition in such configurations is mainly driven by turbulent mixing, convective effects, thermodynamic conditions, interaction between the under-expanded pyrotechnic jet and propellants jets, chemistry and two phase flow effects [1]. Most of these processes have been studied separately but due to measurement difficulties, experimental data on rocket ignition transient is limited [12–17]. McManus et al. [12] have investigate ignition processes recording the laser-induced fluorescence of the OH radical in a combustion chamber composed of three injectors fed with gaseous hydrogen and air. Ignition was triggered by a spark plug and the experiment showed that after the initiation of the kernel, the flame propagated in a partially premixed mode before stabilizing in a diffusion mode. Mayer et al. [13] studied the atomization of a liquid oxygen jet by a surrounding gaseous hydrogen jet and the effect of ignition on atomization processes. Gurliat et al. [16] and Schmidt et al. [15] have experimentally studied laser ignition sequences of a gaseous hydrogen and liquid oxygen ($GH_2 - Lox$) spray in a small scale combustion chamber with a single shear coaxial injector. Smooth and strong ignition processes were analyzed via high speed OH-imaging and Schlieren images. De Rosa et al. [17] reproduced the analysis of [16] under vacuum conditions.
Numerical simulations of rocket ignition are mainly based on the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) approach : for example, Schmidt et al. [14] and Karl et al. [18] carried out simulations of the ignition sequence of the laboratory-scale rocket engine operated at the Lampoldshausen DLR center [19]. The numerical study presented in [14] did include out the entire

ignition sequence. In [18] the DLR-Tau code was used and results showed how the flame propagated in the whole chamber volume but overpredicted the maximum value of the pressure by 45% compared to experiment. The authors explained this result by the fact that the calculation was performed in two dimensions without nitrogen dilution (the filling phase was not simulated) and without turbulence effects.
Large Eddy Simulation (LES) is a powerful tool to study unsteady complex flows. The concept of explicitely solving for the large geometry-dependent turbulent scales while modelling the dissipative behavior of the smaller scales, combined with high order numerical schemes and optimized unstructured meshes, has already shown its accuracy for turbulent non-reacting [20–22] and reacting flows [23–25] and recent results obtained on burners of gas turbine configurations have revolutionized the field of CFD combustion [26–30]. The application of LES to unsteady combustion in rocket engines is more recent [31–33] and more complex due to the particular thermodynamics and flow-dynamics conditions.
The first objective of this paper is to present a LES methodology applied to the problem of ignition in rocket engines. The compressible nature of the flow (with sonic inlets and shocks), the fast $H_2 - O_2$ chemistry and high pressure effects require specific developments that are presented here. The second aim of this study is to validate numerical results against the experiment of DLR [19], to establish an ignition scenario and to identify the important physical phenomena on the basis of a complementary analysis of numerical and experimental data.
The paper is organised as follows : section 2 describes the phenomenology and physics of ignition in rocket engines and section 3 presents the ignition experiment. Section 4 develops the LES methodology and the numerical approach required to apply LES to compressible reacting flows. The computational configuration is described in section 5 and results are analysed in section 6.

2 Ignition of liquid rocket engines

Ignition of liquid rocket engines is characterized by high-speed injection jets and very fast chemistry, making the ignition time a key-parameter for the success or failure of ignition : if it is too short, reactants are not sufficiently mixed to react strongly enough compared to the short convective time and to sustain combustion. If it is too long, the mixed reactants ignite too strongly and generate high and dangerous pressure levels [34–36].
Figure 1 shows a simplified sketch of an injection plate of a cryogenic rocket engine supporting hundreds of coaxial injectors feeding a chamber connected to the exit nozzle. The ignition of such an engine follows a specific sequence controlled by the timing of the valves opening. A usual ignition sequence may

be described in four phases : first the system is purged with an inert gas (Helium) to reach a nominal state and to cool down injection lines. Then the fuel injection (usually hydrogen) starts and after a few milliseconds the igniter is triggered. In real engines, the igniter is either a pyrotechnic system or a spark torch usually located at the center of the injection plate (producing a strongly under-expanded jet in the chamber) that blows a stream of hot gases. Finally the oxidizer (oxygen) valve is open, and the oxygen injected into a hot flow containing fuel allows combustion to start [34–36]. In the present experiment, the ignition sequence is slightly different as described in the next section to allow a better control and a more precise analysis of the ignition events.

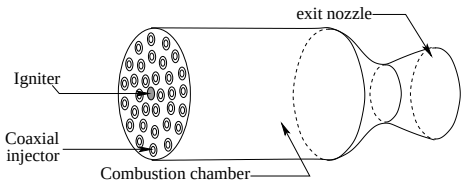


Fig. 1. Sketch of a real combustion chamber.

3 The M3 burner experiment

The M3 burner experiment operated at DLR [19] has been designed to investigate primary ignition processes and combustion in a rocket-like configuration using optical diagnostics [15–17]. Propellants may be either cooled by liquid nitrogen for cryogenic tests or injected under ambient conditions. A parameter study was performed to evaluate the impact of injection conditions on ignition at ambient pressure and temperature. In the experiment, ignition is triggered with a Nd:YAG ($\lambda = 532\ nm$) laser. All injection regimes presented in [19] correspond to delayed ignition, with a long intake phase that fills the chamber with a $H_2 - O_2$ gaseous mixture before laser ignition. In real rocket engines, an accidental delay in ignition may lead to a similar situation. Indeed, an ignition delay leads to the evaporation of an important amount of liquid oxygen and thus to the creation of a significant volume of gaseous flammable mixture into the chamber as in the present experiment. After ignition the flame spreads over the whole chamber leading to a sharp pressure peak. Once the mixture is burned, a diffusion flame anchors at the injector lips [19].

The test rig is fueled with gaseous hydrogen and oxygen by a coaxial injector and connected to the atmosphere by an exhaust nozzle (Fig. 2). The chamber is a 14 cm long box with a square section (6x6 cm^2) designed to sustain pressures up to 20 bars. Complete optical access to the chamber volume is

obtained via two opposed quartz windows. Smaller windows are placed on the two other sides to introduce the igniting laser beam. Burned gases exhaust through a 4 mm diameter nozzle which chokes during the ignition sequence. The coaxial injector is a 1.22 mm diameter O_2 injection tube surrounded by a H_2 injection annulus with an inner diameter of 2 mm and an outer diameter of 4 mm (Fig. 2).

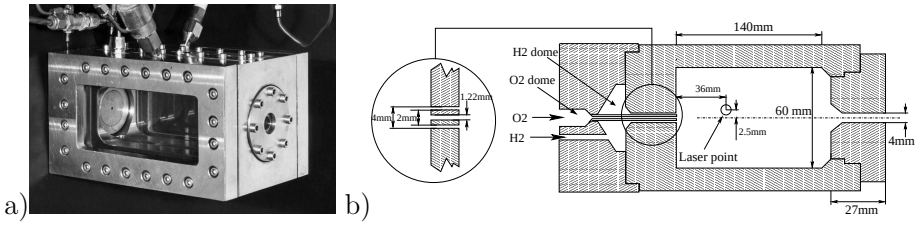


Fig. 2. The Micro-Combustor M3. a) Photograph. b) Geometry [19].

To study of the ignition phase (that only lasts about 5 ms), experimental diagnostics have to be accurately synchronized with the ignition time. With a standard pyrotechnic igniter, the position and the chemical run-away time vary drastically from one test to another. Previous tests, using a pilot flame to initiate combustion in the M3 burner, have shown that this method was not suitable for the present study [13]. Laser was chosen to initiate combustion and was found to give repeatable ignition times [14,16,19]. A second advantage of laser ignition is to allow an accurate location of the energy deposition without disturbing the flow contrary to electrical spark systems. In the experiment the laser ignites the mixture by an energy deposition of 195 mJ over 10 ns per pulse [19]. The beam is focused in the mixing layer between the reactant jets, at 36 mm downstream of the injection plate and at 2.5 mm above the injector axis (Fig. 2b). Schlieren images show that a hot plasma develops within an ellipsoid of 3.5 mm diameter and 2 mm length in the axial direction. No change of the global flame behavior was reported for energy depositions varying between 80 and 195 mJ [19].

The spontaneous OH-emission of the flame is captured by an intensified CCD-camera (Photron Fastcam Ultima I^2) with an interference filter that only transmits radiations emitted by OH radical (300-310 nm). The 256x64 pixel pictures are recorded at a rate of 18kHz. The flow topology and the flame development are visualized via Schlieren photographs, recorded with a Hasselblad film camera at a frame rate of 4kHz and an aperture time of 13 μs [19]. Schlieren images show density gradient fields (detecting the variation of refractive index into the gas) i. e. location of species segregation and transition from fresh to hot-burned gases. In addition to the optical set-up, pressure and temperature sensors are placed in the hydrogen and oxygen injection domes

(Fig. 2b) while static pressure is also measured in the chamber. The chamber pressure sensor is located 44 mm downstream of the injection plate in the middle of the top wall. Temperatures and pressures are recorded at a rate of 4.35 kHz [19].

The experiment is operated at room temperature ($\approx 300\ K$) and pressure ($\approx 1.013\ bar$). Mass fluxes of hydrogen and oxygen are estimated thanks to choked nozzles located upstream of the domes in the injection lines (Table 1).

cold flow	O_2	1.135
mass flux [g/s]	H_2	0.592
Dome total	O_2	300
temperature [K]	H_2	302
Dome total	O_2	11.7
Pressure [bar]	H_2	2.1
Pressure of the chamber [bar]		1.87

Table 1
Injection conditions for the M3 test case (at ignition time).

In order to define a reference condition, the chamber and the injection lines are purged with N2 before each test (Table 2). Once nitrogen injection is stopped the injection of propellants starts. Hydrogen and oxygen are injected at a mixture ratio of $\dot{m}_{O_2}/\dot{m}_{H_2} = 2$ corresponding to an equivalence ratio of 4. During this injection phase, H_2 is first injected alone for 7 ms, before the O_2 valve is opened. The injection phase then lasts 370 ms before the laser is triggered.

N2 valve closure : t_{N2}	-1000ms
H_2 valve opening : t_{H2}	0 ms
O_2 valve opening : t_{O2}	7 ms
laser ignition : $t_{ignition}$	370 ms

Table 2
Time sequence for the M3 test case.

4 LES methodology

The computation of the laser ignition sequence of the M3 burner requires particular numerical developments to correctly reproduce the different phases of the transient process : a compressible LES solver (section 4.1), a method to handle shocks (section 4.2), a model for laser ignition (section 4.3) and a $H_2 - O_2$ chemical scheme (section 4.4).

4.1 Explicit compressible LES solver

A fully unstructured solver is used to advance the compressible Navier Stokes equations for a multi-species gas using perfect gas laws [37]. For these ignition conditions, pressure is low and there is no need to include real gas effects [31]. Realistic thermochemistry is used, allowing multi-step kinetics for the oxidation of hydrogen [38]. The Lax-Wendroff scheme [39] (centered differencing) with a second-order accuracy in space and time and explicit time-advancement are used to control numerical dissipation and capture acoustics. The time step is controlled by the CFL number based on the sum of the convective and sound speeds. Sub-grid scale turbulent viscosity ν_t is calculated with the Smagorinsky model [40]. Turbulent diffusivities for energy and species are obtained from ν_t using respectively $D^t_{th} = \nu_t/Pr_t$ and $D^t_k = \nu_t/Sc_t$, where Pr_t is the turbulent Prandtl number (equal to 0.6) and Sc_t is the turbulent Schmidt number (equal to 0.6 for all species). Characteristic boundary conditions are set with the NSCBC method [41,37].

A summary of the LES equations solved by the code is given below [24] :

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}} \; = \; \overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}} \tag{1}$$

where $\overline{\mathbf{w}}$ is the vector of transported variables, $\overline{\mathbf{F}}$ is the flux tensor composed of viscous, inviscid and subgrid scale components and $\overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}}$ is the chemical source term. $\overline{\mathbf{w}}$ and $\overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}}$ are given respectively by :

$$\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T \;\; \text{and} \;\; \overline{\mathbf{S}}_{\mathbf{c}} = (0, 0, 0, \dot{\omega_T} + \dot{Q}, \dot{\omega_k})^T \tag{2}$$

where ρ is the density, $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$ the velocity vector, the total energy per unit mass is defined by $E = \frac{1}{2}\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + E_i$ where E_i is the internal energy and $\rho_k = \rho Y_k$ where Y_k is the mass fraction of species k. The models for the reaction rates $\dot{\omega_k}$ and the heat release $\dot{\omega_T}$ (Eq. 2) are described in section 4.4. The $\dot{Q}$ term is the power deposited by the laser (section 4.3).

To handle flame/turbulence interaction, the dynamically thickened flame model (TFLES) is used [29,30,42,43]. This model thickens the flame front so that it is resolved on the LES grid (usually on 5 to 8 points). The turbulent sub-grid scale wrinkling of the flame is modeled through the so-called efficiency function (based on the local sub-grid scale turbulence velocity and length scale), E [44] which allows to recover the turbulent flame speed. The TFLES model has been applied successfully to several configurations (premixed and partially premixed) and more details can be found in [27,29,42,44,45].

4.2 Shock treatment

The conditions of injection in rocket engines lead to supersonic under-expanded jets with shocks in a succession of expansion/recompression cells [46]. In the M3 burner, just before ignition, the oxygen dome is at 12 bar whereas the chamber is at about 2 bar. This pressure difference results in a supersonic jet with a tiger-tail-like shape. Because the LES code uses centered differencing the positivity of the solution in near shock region is not maintained due to strong gradients. To capture shocks, the methodology of Cook and Cabot [47] is used. It thickens the shock front by introducing a hyper-viscosity β (which can be seen as a bulk viscosity) in the viscous stress tensor $\underline{\tau}$:

$$\underline{\tau}_{modified} = (\beta - \frac{2}{3}\mu)\ \nabla.\mathbf{u}\ \underline{\delta} + 2\mu\underline{S} \tag{3}$$

where μ is the dynamic viscosity and $\underline{S}$ is the symmetric strain rate tensor. The bulk β viscosity is modeled as :

$$\beta = C(\Delta x)^4 |\nabla^2 \underline{S}| \tag{4}$$

where C is fixed to 5 according to [47]. This hyper-viscosity acts on the very sharp velocity gradients characterizing shocks but goes to zero where the velocity evolves smoothly. Tests have shown that it has a minor effect on the LES quality away from shocks and flames. This hyper-viscosity term is equivalent to an additional pressure term (P_{Cook}) :

$$P_{Cook} = -\beta \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \tag{5}$$

This approach was validated on simple one-dimensional shock-tube cases and on other more complex configurations. Figure 3 presents velocity profiles for a shock tube problem, given by the theory [48] and by numerical simulation with and without bulk viscosity. The approach of Cook suppresses spurious

values of the velocity in the shock region. This approach was also successfully tested by Fiorina and Lele [49] on various 2D configurations such as oblique shock waves, a supersonic blunt body flow and a Mach reflection problem.

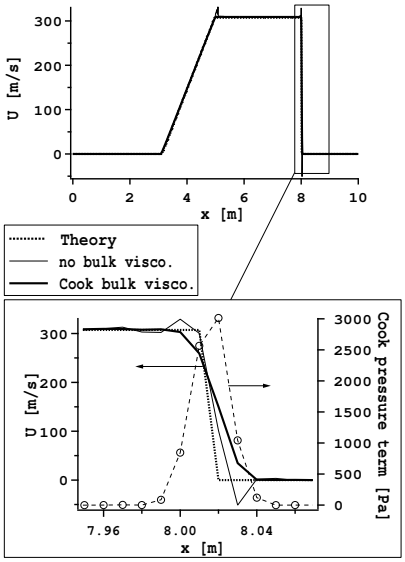


Fig. 3. Velocity profiles in a shock tube problem 5 ms after diaphragm breakdown: comparison between theory and results obtained with and without the approach of Cook [47].

4.3 Laser model for ignition in LES

Multiple models have been proposed to describe ignition in premixed conditions [50–53]. For the present case, ignition takes place in a non-premixed flow and a model (called ED for Energy Deposition in the rest of the text) was used to describe the ignition phase. The main idea of the ED model is to represent ignition by a source term directly added to the energy equation. This method was already used in several numerical works (Direct Numerical Simulations) to study the early times of flame generation in quiescent homogeneous mixtures [54,55] and in turbulent inhomogeneous flows [56]. It is applied here in the LES context.

In the present computation, the model represents the effect of the spark after the time when the kernel temperature has decreased below the ionization temperature (Fig. 4) and gas ionization is not taken into account. In the ED model, the energy injected in the calculation is the energy transferred from the plasma to the gaseous mixture. For laser ignition this energy accounts for about 10% of the laser energy [57,58] (most of the initial energy is lost in the

induced shock wave).

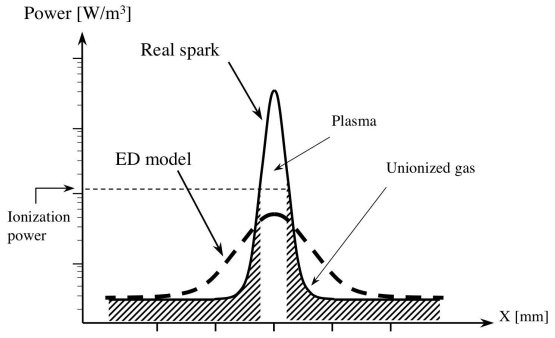


Fig. 4. Sketch of power distribution inside a spark kernel and part of the flow modeled with the ED model. The ED model reproduces the effect of the spark from the time when the temperature of the kernel has decreased below the ionization temperature.

The laser energy is represented by a power $\dot{Q}$ added to the energy equation (Eq. 2). The $\dot{Q}$ term is a gaussian distribution in time and space deposited at the beam focus location :

$$\dot{Q}(x,y,z,t) = \frac{\varepsilon_i}{4\pi^2\sigma_r^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_r})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_o}{\sigma_t})^2} \tag{6}$$

where r is the distance to the laser focus center, t_o is the time when $\dot{Q}$ is maximum, ε_i is the total amount of deposited energy and σ_r and σ_t are the spatial and temporal widths of the deposition.

The ED model has been validated in a laminar premixed case (Erard et al. [59]), where a propane-air mixture at ϕ=1 and 1 bar is ignited with an electrical spark. Results from the three-dimensional simulation agree with experimental measurements as presented on Fig. 5, showing that the assumptions of the ED model are reasonable.

For the present study, the energy deposition is focused at the same location as in the experiment. Additional numerical resolution near the laser point is required to compute the initial kernel formation. In the LES the grid size at laser focus point is 0.1 mm which is approximately the thickness of the flame in the conditions (mixture and thermodynamics) of this region. The total amount of energy transferred to the mixture is set to 40 mJ (i.e. 20% of the laser energy) in a 3mm-radius sphere during 0.5 μs.

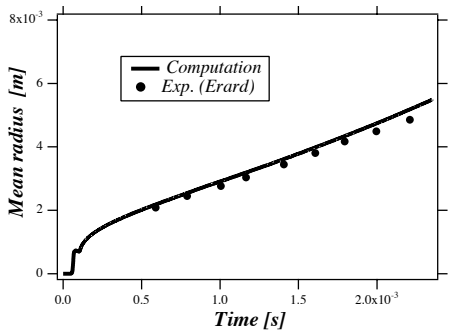


Fig. 5. Temporal evolution of the radius of a laminar spherical flame ignited by an electrical spark in a propane-air mixture at ϕ=1 and 1 bar. Line : computation, symbols : experimental results from Erard et al. [59].

4.4 Chemical kinetics

A seven-step chemical scheme (called H2O2-GL7-1 in the rest of the paper) using six species (H_2, O_2, H_2O, OH, O, H) extracted from the work of Baurle et al. [38] is used (Tab. 3). It has been modified to accurately reproduce the laminar flame speed and adiabatic temperature over a large range of equivalence ratio and to take into account pressure effects. Indeed, the chamber pressure initially equal to 1.85 bar reaches 11 bar during the ignition sequence and the effect on chemistry is significant.

Reaction	**A**	β	**Ea**
	[cm^3/mole.sec]		**[cal/mole]**
$H + O_2 = O + OH$	3.62E+17	-0.91	1.653E+4
$O + H_2 = H + OH$	1.53E+5	2.67	6.296E+3
$O_2 + H_2 = OH + OH$	5.13E+13	0.00	4.805E+4
$OH + H_2 = H_2O + H$	6.64E+13	0.00	5.155E+3
$OH + OH = H_2O + O$	1.90E+13	0.00	1.091E+3
$H + OH + M = H_2O + M$	6.67E+22	-2.00	0.000
$H + H + M = H_2 + M$	2.20E+18	-1.00	0.000
third body efficiencies :			
2.5 for H_2, 16 for H_2O and 1.0 for all other M			
Schmidt numbers :			
H_2 : 0.28 ; O_2 : 0.99 ; H_2O : 0.77 ; H : 0.17 ; O : 0.64 ; OH : 0.65			

Table 3
The seven-step H_2-O_2 kinetic scheme.

Figure 6 shows the comparison between detailed chemistry [60] and the seven-step scheme for the prediction of the flame speed at different equivalence ratios and at 1 bar. The laminar flame velocity is predicted with a maximum error of about 10% around an equivalence ratio of 1.5 and is correct for both lean and rich conditions. Pressure effects are more difficult to assess quantitatively as

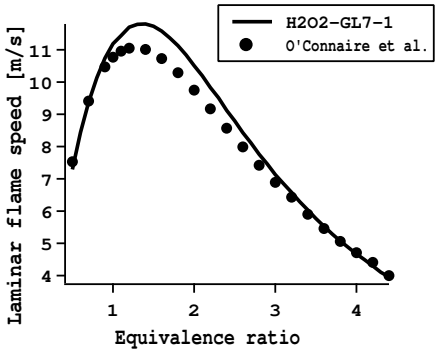


Fig. 6. Chemical comparison of the laminar flame speed given by the seven-step scheme (H2O2-GL7-1) used for the computation and a detailed chemistry from O'Conaire et al. [60] ($T_{cold\ gas} = 300K$ P=2.0 bar).

there are no measurements and detailed chemistry calculations do not agree, as shown in fig. 7 where three detailed chemical schemes from O'Conaire et al. [60], Kee et al. [61] and Smooke et al. [62] are compared with the reduced H2O2-GL7-1 scheme. The velocity obtained with the reduced scheme is in the range of the three complex schemes. For the present simulation, ignition

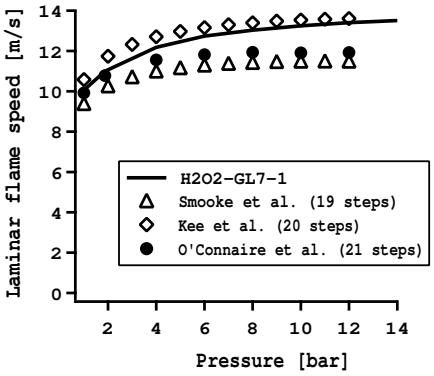


Fig. 7. Laminar flame speed against pressure, comparison between the seven-step scheme (H2O2-GL7-1) and three detailed chemistries from O'Conaire et al. [60], Smooke et al. [62] and Kee et al. [61] ($T_{cold\ gas} = 300K$, $\phi = 1.0$).

delay is also a key parameter : the laser beam induces a local temperature rise that triggers the chemical run-away by auto-ignition. An example of the performance of the 7-step scheme is given on Fig. 8 where it is compared to the detailed scheme of O'Conaire et al. [60]. Results for both schemes are of

the order of the micro-second at temperatures around 2000 K. The differences observed on Fig. 8 have thus no significant impact on the kernel flame creation which characteristic time is in the order of 100 μs [19].

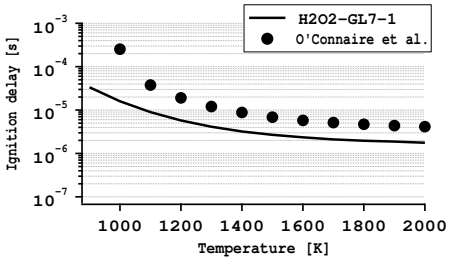


Fig. 8. Ignition delay, comparison between the seven-step scheme (H2O2-GL7-1) and the detailed chemistry from O'Conaire et al. [60] (homogeneous ignition at constant volume for an equivalence ratio of 1.0 and an initial pressure of 1 bar).

When energy is deposited in a H_2/O_2 mixture with the ED model, the temperature rises locally up to several thousands of Kelvins and few time after the initiation reaction ($H_2 + O_2 \leftrightarrow OH + OH$) starts almost immediately as shown on Fig. 9 on a one-dimensional case. This reaction creates the first OH radicals that will trigger the chain-branching reactions. Figure 9 presents an induction time after the reaction peak of the initiation reaction. During this time, all reactions start and their respective reaction rates increase exponentially until around $t = 8\ \mu s$ which is the run-away time. At this time the flame kernel is created and starts to propagate as a spherical flame.

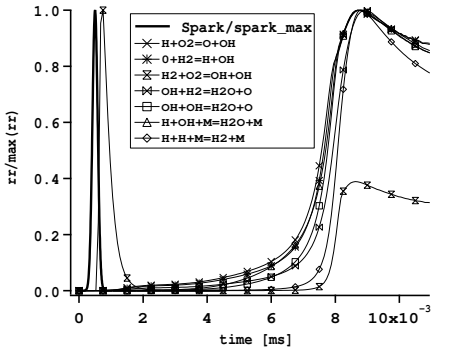


Fig. 9. Chemical path initiated after energy deposition in a 1D configuration ($H_2 - O_2$ mixture at $\phi = 4$, P=2 bar and T=300 K and duration of the deposition: 500 ns). Test realized with the H2O2-GL7-1 scheme, each reaction rate rr is scaled by its maximum value.

4.5 Boundary conditions

Boundary conditions are treated with an approach based on the method of characteristics [37,41]. The hydrogen inlet remains subsonic during the whole experiment : its mass flow rate and static temperature (Tab. 1) are imposed at the H_2 dome inlet (Fig. 10b). The exit boundary (which is located outside the chamber, Fig. 10b) is relaxed to the ambiant pressure. The walls in the injection lines and in the exhaust nozzle are adiabatic slip walls, while the chamber walls integrate heat losses (for brevity this aspect has not been developed in this paper, more details are available in [63]).

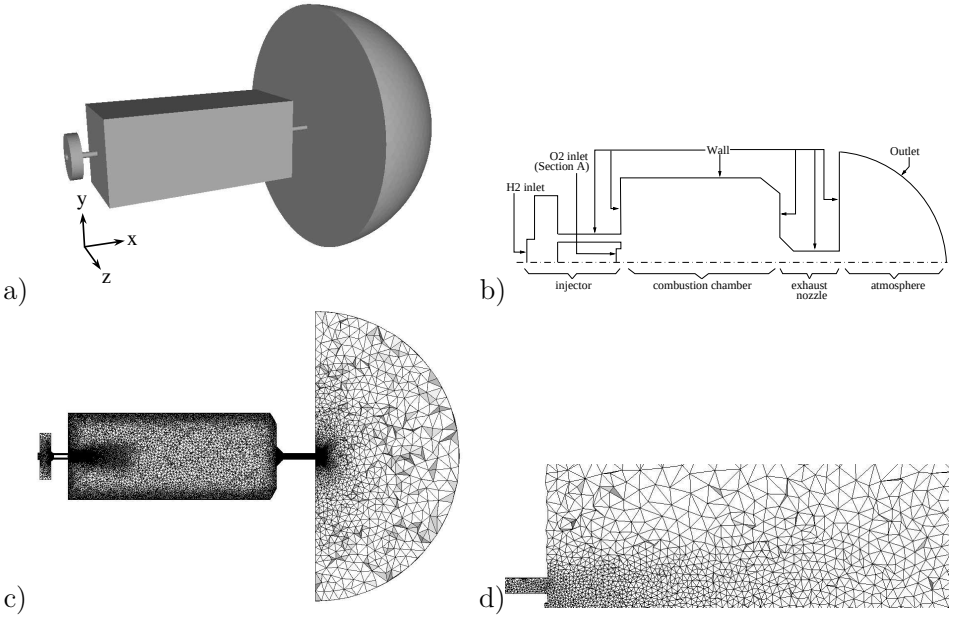


Fig. 10. Computing domain for the M3 Micro-combustor. a) Geometry, b) Sketch of boundary conditions, c) mesh, d) zoom around the inlet region.

In this configuration the oxygen inlet velocity is first sonic and then subsonic when the chamber pressure increases. The moment when the flow becomes subsonic is obtained by the calculation of the Mach number M at the injection section. M is calculated with isentropic nozzle relations applied between the injection dome (total pressure : P_i) and the chamber (total pressure : P_c).

In sonic conditions, the momentum is defined by [64] :

$$\rho u_{inj} = \frac{P_i}{(r.T_i)^{1/2}} \gamma^{1/2} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \tag{7}$$

where T_i is the total temperature in the dome, $\gamma = C_p/C_v$ is the ratio of the heat capacities and $r = R/W_{mel}$ where R is the universal gas constant and W_{mel} the molar mass of the injected mixture. The static temperature and pressure at injection are deduced from isentropic relations :

$$T_{inj} = \frac{2}{\gamma+1} T_i \quad \text{and} \quad P_{inj} = \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} P_i \tag{8}$$

In subsonic conditions, only the mass flux and temperature are imposed. They are calculated from the isentropic relations now involving the chamber pressure P_c :

$$\rho u_{inj} = \frac{P_i}{(rT_i)^{1/2}} \left(\frac{P_c}{P_i}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \left(\frac{2\gamma}{\gamma-1}\left(1 - \left(\frac{P_c}{P_i}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right)\right)^{1/2} \tag{9}$$

$$T_{inj} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1} T_i \tag{10}$$

If $M = u_{inj}/(\gamma r T_{inj})^{1/2} \geq 1$, where u_{inj} is the predicted (calculated) inlet velocity, Eqs 7 and 8 are used, otherwise, Eqs 9 and 10 are used to determine inlet conditions. The mass flux is $\dot{m} = AC_d\rho u_{inj}$, where A is the throat section of the injector (Fig. 10b) and the discharge coefficient C_d is kept constant for the whole calculation and is estimated to 0.346.

Figure 11 presents the temporal evolution of the oxygen injection mass flux during the calculation and compared to the experiment showing that the injection history is well represented by the present approach. Variations of the injection flux observed in the subsonic regime are due to the presence of a longitudinal pressure fluctuation.

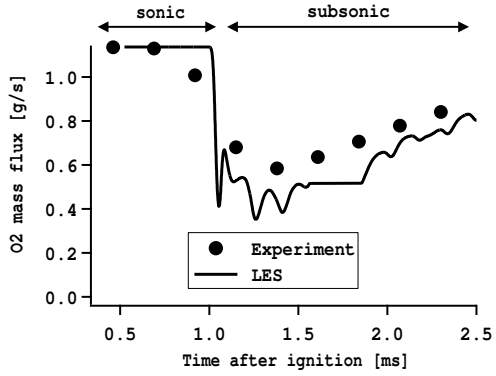


Fig. 11. Temporal evolution of the oxygen injection mass flux compared to the experiment.

5 Numerical configuration

The numerical configuration reproduces the 3D combustion chamber with the H_2 dome, the O_2 inlet tube, the exit throat and the atmosphere (Fig. 10). The H_2 dome is included in the computational domain to capture the back-flow into the hydrogen injection line observed in the experiment [19]. This back-flow is due to the fact that the chamber pressure becomes higher than the H_2-dome pressure during a portion of the ignition sequence. To minimize the impact of the exit boundary condition, the atmosphere around the chamber outlet is also calculated. The mesh is refined around the jets at inlet and downwards where they mix, develop and are ignited by the laser beam. It is fully unstructured and uses tetrahedral cells (Fig. 10c). It contains 645,000 nodes and 3,500,000 cells, with the smallest and biggest cell characteristic size being of the order of 0.2 mm and 2 mm respectively.

5.1 Initial conditions

The computation of the ignition sequence is performed in two steps. In the filling phase the chamber initially full of nitrogen at 300 K and at a pressure of 1.013 bar, is purged with gaseous O_2 and H_2. Then in the second phase the ignition and the propagation of the flame are computed. Most of the filling phase (from 0 to 368 ms) is computed on a coarse mesh (390,000 nodes) and only the last instants (from 368 to 370 ms) are computed on the fine mesh (Fig. 10c), to increase the jet topology accuracy before the energy deposition.

6 Results and discussions

6.1 Cold flow and mixing

The flow field is first studied after 370 ms of the filling phase, i. e. just before laser ignition. At this instant, the chamber pressure and temperature are respectively equal to 1.75 bar (1.87 bar in the experiment) and 350 K. The instantaneous axial velocity field obtained by LES shows the turbulent jet and the large recirculation zones (visualized with the 0-velocity isoline on Fig. 12).

The oxygen jet is underexpanded and is injected at 350 m/s and reaches a maximum velocity of 650 m/s (Mach 1.9) while the maximum velocity in the hydrogen jet is 470 m/s. Figure 13a) shows a field of the Z-component of

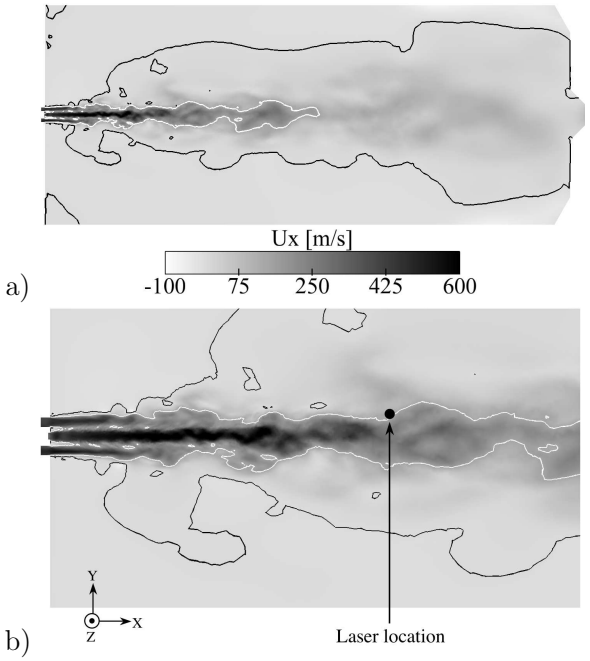


Fig. 12. Axial velocity field at ignition time : (a) whole chamber, (b) near-injector region (black line : 0 m/s, white line : 150 m/s) .

the vorticity in the jet region and the instantaneous velocities along the axis of the O_2 and H_2 jets are presented on Fig. 13b). The hydrogen jet decays rapidly after about 5 mm and its production of vorticity stops after 15 mm, however, as the oxygen jet expands, it keeps a coherent structure until 25 mm downstream of the injection plate. After 25 mm both jets interact, enhancing mixing and turbulence production : at the laser focus point, axial velocity fluctuations represent about 20% of the mean axial velocity.

The sonic O_2 jet leads to the formation of expansion/compression cells that are progressively damped by the flow. Figure 14 is a comparison at ignition time of a Schlieren image and the numerical pressure field showing a good qualitative agreement in the jet pattern. In particular the size of the cells is reproduced.

The time evolution of the mass fraction of nitrogen during the filling phase is presented on Fig. 15 showing that some nitrogen remains in the chamber at the ignition time with a maximum value of 0.17 and a mean value of 0.14. Most of the nitrogen is trapped in the recirculation zones in the corners of the chamber. This amount of residual nitrogen will have an impact on the pressure peak value after ignition. Indeed two 0D equilibrium calculations at constant volume have been carried out with a $H_2 - O_2$ mixture (at the overall equivalence ratio of the 3D simulation which is 4) and with and without the N_2 dilution of

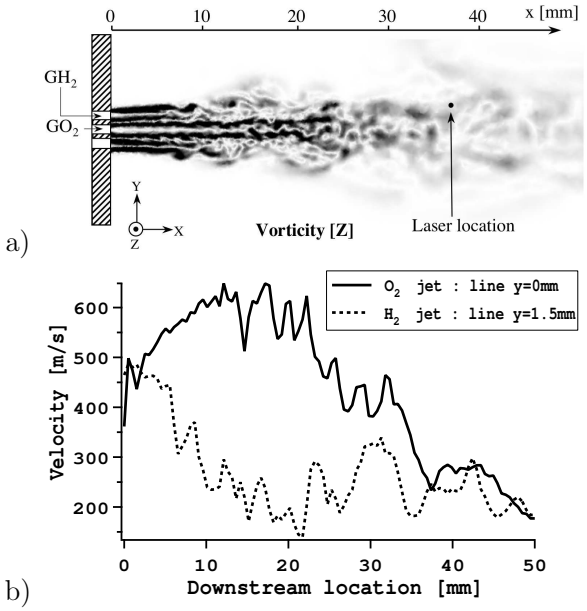


Fig. 13. Jets interaction : (a) Vorticity field, (b) velocity along the O_2 and the H_2 jet axis.

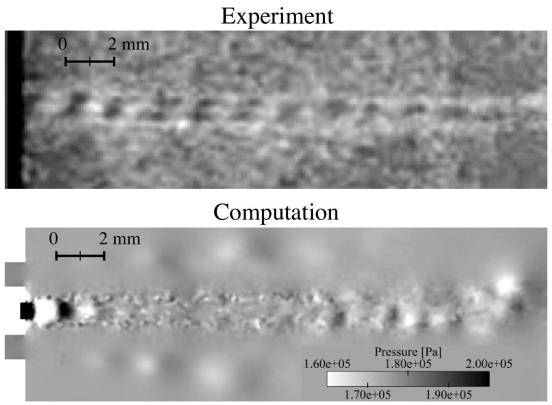


Fig. 14. Comparison of the jet topology at the injector exit between the experiment (Schlieren picture) and the LES (instantaneous pressure field).

14% in mass. The calculation without nitrogen gives final temperature and pressure of respectively 2735 K and 15.0 bar while with N_2 dilution, 2486 K and 13.8 bar were obtained, which represents a 10% difference on the final temperature and 9% on the pressure.

The reactants are well mixed in most of the chamber as shown on Fig. 16 where the field of the equivalence ratio is displayed as well as the line ϕ =3. Mixture gradients are only present in the jet region whereas in the recirculation zone, the equivalence ratio is close to ϕ =4 which is the overall injection equivalence ratio.

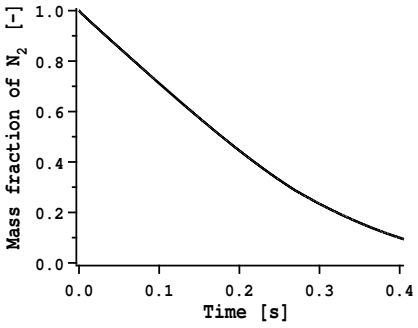


Fig. 15. Temporal evolution of the computed mean mass fraction of nitrogen in the chamber during the injection phase. At ignition time (t=370 ms) $Y_{N_2} = 0.14$.

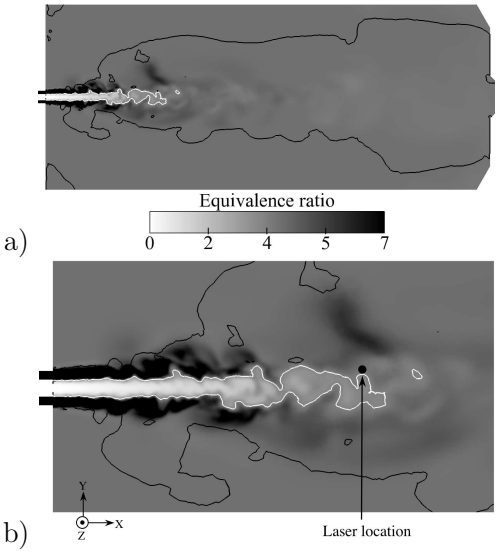


Fig. 16. Field of equivalence ratio (ϕ) at ignition time : (a) cut of the whole chamber, (b) detail of the jet region (black line : 0 m/s , white line : $\phi = 3$).

6.2 Ignition and combustion

The main experimental result is the pressure time evolution after ignition shown on Fig. 17. LES (also plotted on Fig 17), shows a good agreement with measurements. The value of the pressure peak in the LES (11.2 bar) is close to the experiment record (11.1 bar), but appears slightly earlier (about 0.25 ms) resulting in a shift between the two curves in the decreasing phase. This shows that the mixture obtained in the chamber after the intake phase is close to the experimental conditions and that the consumption rate is correctly predicted.

Flame propagation can be estimated experimentally from Schlieren photographs. LES results can also be used to reconstruct pseudo-Schlieren pictures from the

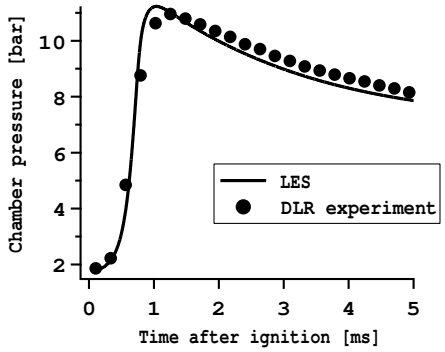


Fig. 17. Time evolution of the chamber pressure : LES vs Experiment.

calculation of density gradients integrated across the chamber. Experimental and numerical Schlieren images at three different times after ignition (Fig. 18) show the positions of the flame front (in the present case, as the chamber is initially full of partially mixed reactants, the Schlieren pictures that locate the limit between hot and cold gases also indicate the position of the flame surface). The topology of the flame at the three times (35 μs, 250 μs and 680 μs) is well captured by LES.

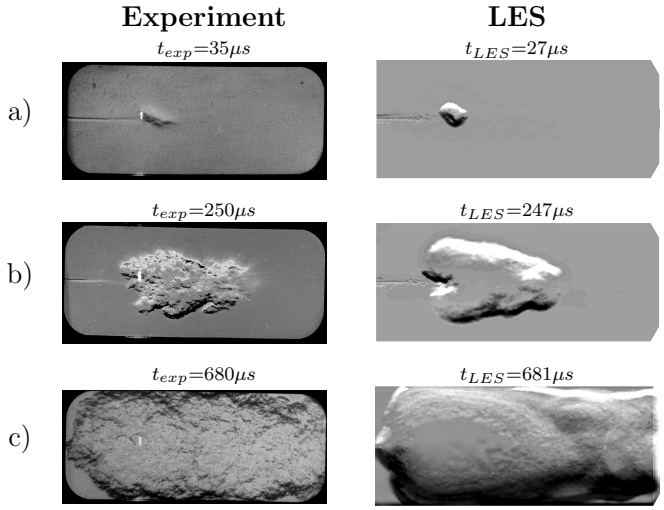


Fig. 18. Comparison of Schlieren pictures [19] and LES fields of the density gradient (integrated in the width of the chamber) at three different times after ignition.

The spontaneous emission of the OH radical visualized experimentally can be compared to the reaction rate calculated in the LES [7]. For this comparison, the reaction rate of the reaction: $H_2O + O \leftrightarrow 2OH$ was integrated along lines perpendicular to the quartz walls of the chamber and projected on a plane (Fig. 19). Some OH-emission is experimentally observed only in the central part of the combustion chamber whereas in the computation, the flame spreads over the whole domain. Two zones can be evidenced in the simulation : the

first one is characterized by a low chemical activity in the recirculation zone and the other by high levels of reaction rate in the axial region of the chamber. This later zone fits well with the experimental images (Fig. 19).

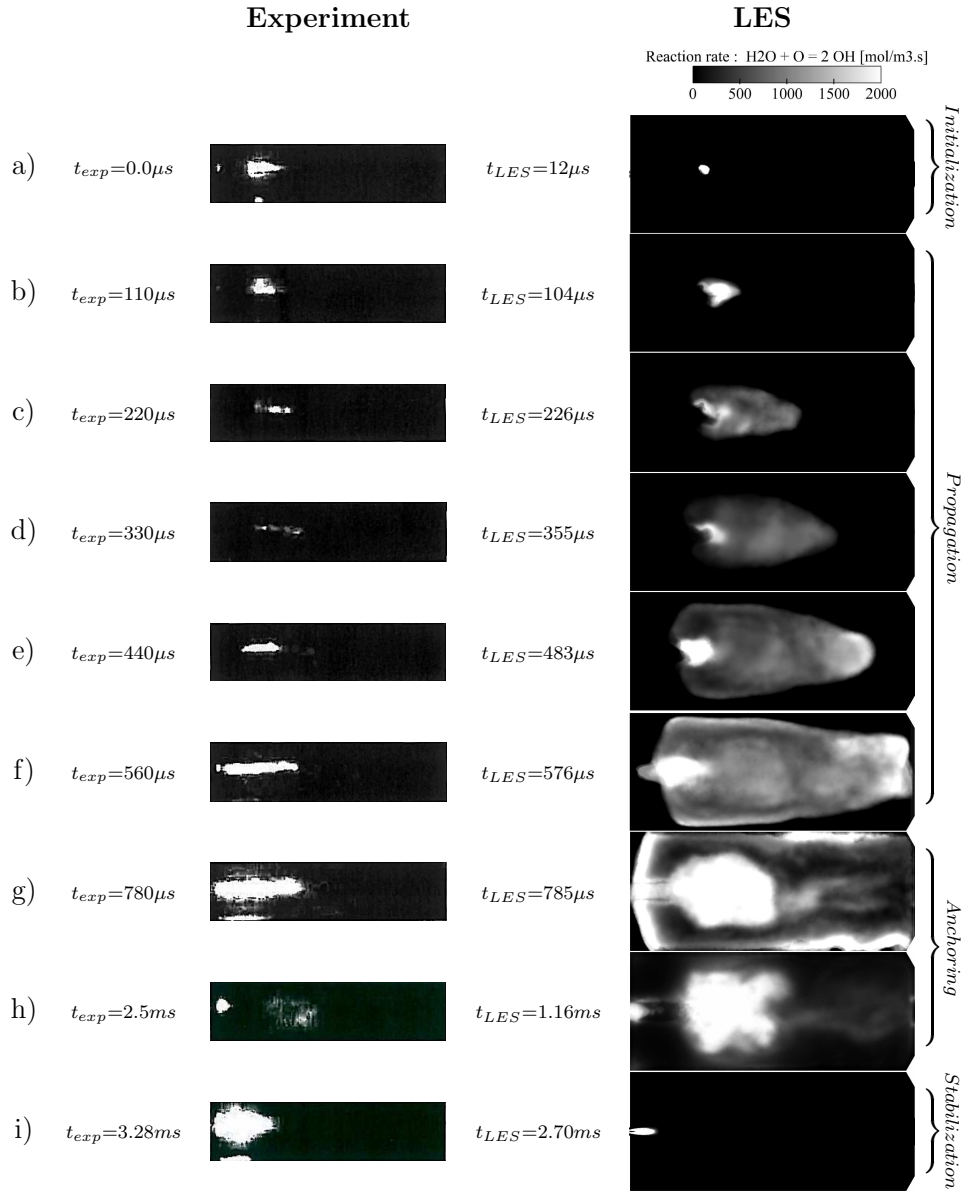


Fig. 19. Experimental OH-emission images compared to integrations across the chamber of the reaction rate of $H_2O + O \leftrightarrow OH + OH$.

The fact that no OH-emission is recorded by the CCD camera in the recirculation zone during the first 800 μs may be explained by the presence of a

very rich mixture in this region (the overall equivalence ratio is about four). Figure 20 presents the maximum values of the reaction rate of the reaction $H_2O + O \leftrightarrow 2OH$ in a laminar flame against the equivalence ratio : at $\phi = 4$, the maximum value of the reaction rate is three orders of magnitude lower than around stoichiometry. This could explain why a OH^*-signal is detected around the axis of the jet where the equivalence ratio is close to one whereas in the rich-recirculation zone the spontaneous OH-chemiluminescence of the flame is not intense enough to be detected by the CCD-camera.

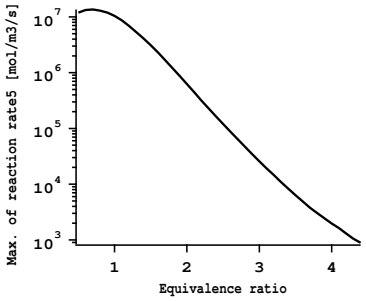


Fig. 20. Maximum of the reaction rate of the reaction $H_2O + O \leftrightarrow 2OH$ (reaction 5 in the H2O2-GL7-1 scheme) in laminar flames at different equivalence ratio given by the chemical scheme used in the present LES (To = 300 K and P = 1 bar).

This assumption was already made by Schmidt et al [19], from the comparison between Schlieren and OH-emission pictures. As seen on Fig. 21, OH-visualizations and Schlieren photographs do not agree on the flame position and topology. According to OH images the flame kernel keeps a constant diameter during the first 200 μs which is in contradiction with the observation of the Schlieren pictures on Fig. 21a and b. And at 680 μs, the Schlieren image shows a flame front at chamber walls whereas the OH-signal record shows an intense reactive zone on the axis of the jet.

From OH-imaging, Schmidt et al. have tracked the most upstream and downstream flame points (respectively x_u and x_d) during the ignition sequence [19]. These positions have been reported and compared to LES results on Fig. 22, together with the positions extracted from the three Schlieren images. The movement of the downstream point given by the computation is close to the tracking from Schlieren images but does not match the one based on OH-emission pictures. The poor sensitivity of the CCD camera to the low intensity emission of the flame in rich condition (in the dowstream area of the chamber) may be the explanation. For the location of the upstream position a general good agreement is observed. Some differences are observed from 0.2 to 0.4 ms (Fig. 22b), where flame positions extracted from LES and Schlieren pictures are close but do not match OH-imaging tracking. The explanation is that the most upstream flame point propagates at 7 mm off-centre from the jet axis

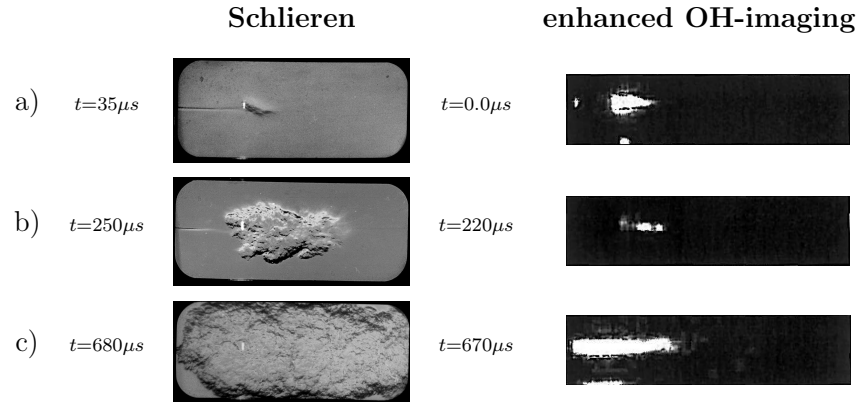


Fig. 21. Comparison of Schlieren pictures and enhanced OH-emission images at three different times after ignition [19].

(Fig. 22c) where the mixture is rich and thus is not captured by the CCD camera. On Fig. 22b, the temporal evolution of the upstream position of the flame on the jet axis (x_{axis}) obtained from the LES is close to the position x_u recorded from the OH-images.

6.3 A scenario for ignition

The previous results suggest that ignition is controlled by several phenomena. High levels of turbulence generated in the central jet shear layer enhance mixing wrinkling of the flame front. However, the high-speed jets issuing from the coaxial injector tend to blow out the flame. These phenomena are competing during the different phases of the ignition transient. From OH-imaging, Schmidt et al [19] proposed a flame propagation scenario following four steps : (i) the primary ignition phase, (ii) the upstream propagation of the flame, (iii) the anchoring and the (iv) stabilization phases. This ignition scenario has also been observed by Ahmed and Mastoralos [8,65] in the case of the ignition of a turbulent methane jet by a spark plug and a similar process can be identified in more complex configurations such as gas turbines [66]. In the present case, this scenario may be refined with the LES results.

(i) The primary ignition phase (from $t = 0$ to $t = 100$ μs)
This phase is characterized by the formation of the flame kernel after the laser shot and ends when the kernel reaches recirculation zones. In the computation this step lasts about 100 μs (Fig. 23 a and b). After the energy deposition, the hot gas kernel is first slowly convected downstream by the jet without stretching. Then at $t \approx 20$ μs chemical reactions start and as the kernel grows its surface is increasingly wrinkled. The flame zone near the jet axis is

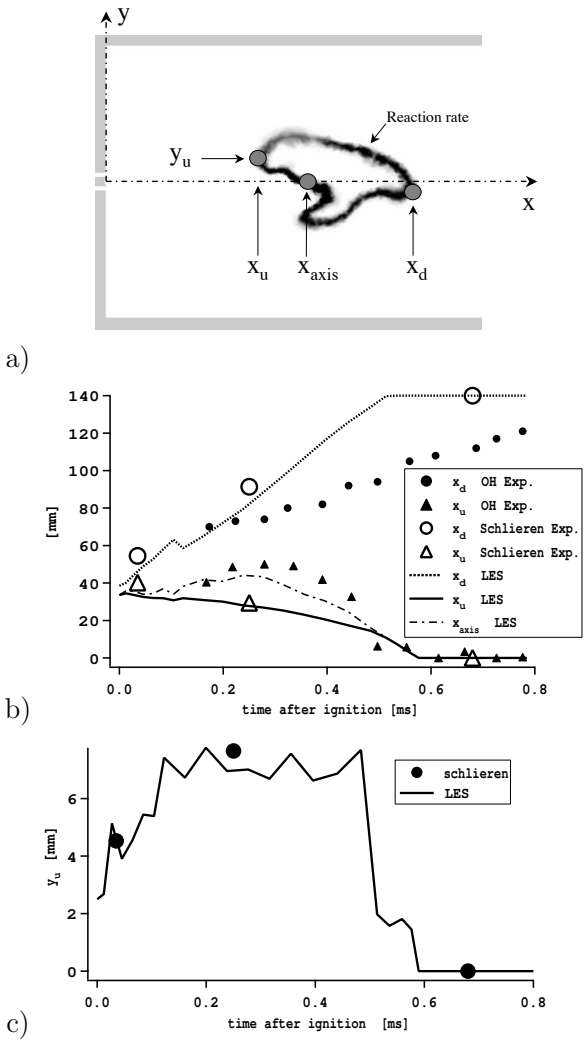


Fig. 22. Position of the most upstream and most downstream flame points during the ignition transient. a) Sketch of the different flame position measurements. b) comparison of the most upstream and downstream flame positions (respectively x_u and x_d) and the flame position on the axis of the jet (x_{axis}) between experiment [19] and LES. c) transversal position (y_u) of the most upstream flame point.

transported downstream by the flow whereas the flame zone in the surrounding mixing layer remains quite motionless. During this phase, the success of ignition depends on the competition between heat release, heat transfer, convective and stretching effects [66,16]. At the end of this phase (Fig. 23 b), the flame kernel is no longer a sphere, its upstream central part is wrinkled by the jet turbulence and both side fronts reach the recirculation zone.

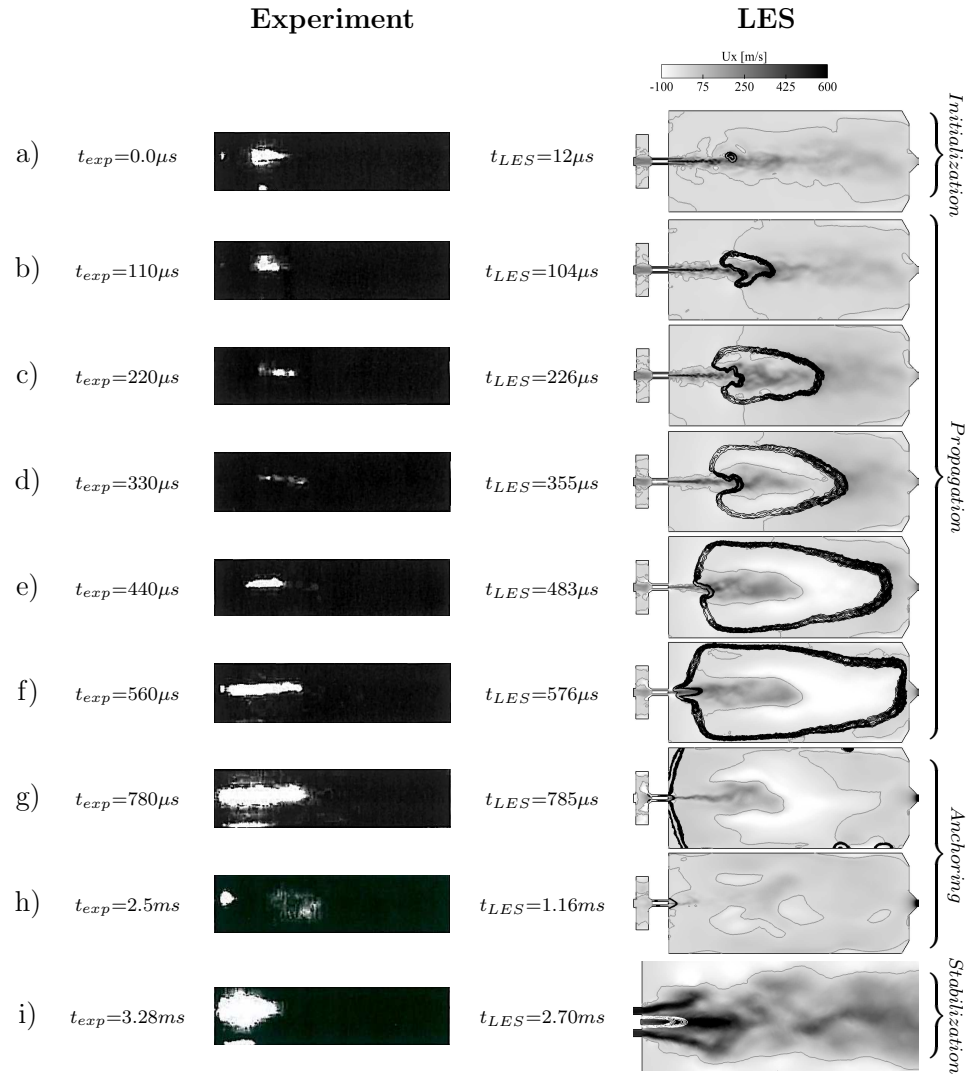


Fig. 23. Experimental OH-emission images and LES axial-velocity field (Ux) in the centerplane (black iso-line : reaction rate of $H_2O + O \leftrightarrow OH + OH$, grey iso-line : $Ux = 0\ m/s$). Note : for the last LES results ($t_{LES} = 2.7ms$) the reaction rate is located by white iso-lines.

(ii) Flame propagation phase (from $t = 100\ \mu s$ to $t = 600\mu s$)
The kernel phase is followed by a rapid expansion of the flame in the recirculation zone, consuming the partially premixed mixture that fills the chamber (Fig. 23 b to f). The flame development mainly depends on the flow condition : around the jet, hydrogen and oxygen are well mixed and the low velocities leads to the fast flame propagation whereas, the flame zone on the jet axis is convected downstream.
Because the flame propagating in the recirculation zone is not detected with

the OH-emission diagnostics, Schmidt et al. concluded that until 400 μs the flame keeps a constant size and is convected downstream [19]. This is true near the axis but as shown in the previous section, the actual upstream point moves upstream in the recirculation zone (Fig. 22).
At t≈300 μs after ignition, the pressure chamber becomes higher than the H_2-injection dome pressure resulting in an inversion of the flow in the H_2-injection tube. Figure 24 displays the time evolutions of the dome and chamber pressures and the velocity in the H_2-injection pipe. Initially the hydrogen flows in the chamber at 400 m/s but after ignition the velocity drops and becomes negative at 470 μs after the laser shot. It becomes positive again at 1.14 ms just after the chamber pressure peak has been reached.

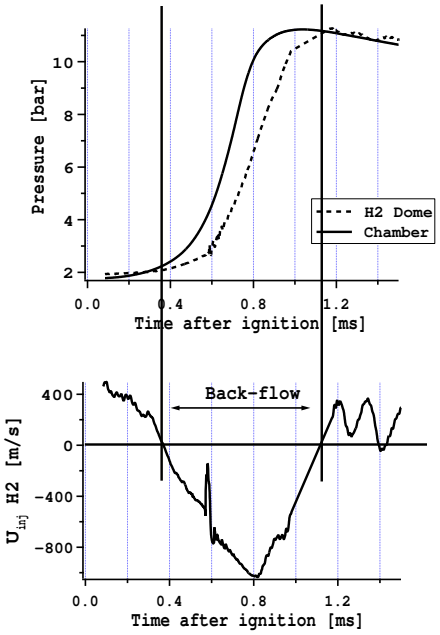


Fig. 24. The back-flow in hydrogen injection line : pressure traces in the chamber and in the H_2 injection dome and axial velocity in the H_2 injection tube.

The inversion of the H_2-injection velocity has a direct effect on flame propagation, as shown on Fig. 23 e and f. On the jet axis, the flame front shape and structure are modified : its curvature initially due to high velocity convection (Fig. 23 e) changes as the flow in the H_2 tube inverses (Fig. 23 f) and the most upstream flame zone accelerates towards the injection plate. At $t \approx 580\mu s$, this region of the flame encounters stoichiometric condition in the vicinity of the injection exit and the flame initially burning the mixture in partially premixed regime becomes a triple flame (this aspect will be clearly evidenced in the last section). During this phase, a change in the flame propagation direction is also observed in the experiment and an increase of the intensity of the OH-emission [19] reveals that the flame reaches the stoichiometric (Fig. 23d,

e and f).

Figure 22 shows that the upstream and downstream flame points in both LES and experiment (Schlieren) reach the injection plate and the exit nozzle at approximatively the same time (t≈ 0.6 ms).

(iii) Anchoring phase (from $t = 0.6\ ms$ to $t = 1.14\ ms$)
At t ≈0.6 ms, a small diffusion flame settles at the oxygen injection tube and the premixed flame propagating in the recirculation zone consumes the last pockets of unburned mixture trapped at walls (Fig. 23g and h). Until $t = 1.14\ ms$, H_2 injection is stopped and the flame is stabilized between the oxygen flowing from the injector and the hydrogen remaining in the rich burned gases. Note that the injection of oxygen never stops (Fig. 11 as the oxygen dome pressure keeps a constant value of 12 bar, which is above the chamber peak pressure of 11.2 bar). At t=1.1 ms after ignition, all the flammable mixture has burned and the chamber pressure reaches a maximum of 11.2 bar (Fig. 17). The end of this phase is characterized by the fact that hydrogen starts to flow again into the chamber ($t = 1.14\ ms$) and that a "normal" diffusion flame can now stabilize in the last phase.

(iv) Stabilization phase (after $t = 1.14\ ms$)
During the fourth and final phase, in both LES and experiment, the flame stabilizes in a pencil-like shape in the shear layer between the hydrogen and oxygen jets (Fig. 23i). Its influence on the mean chamber pressure is insignificant and it lengthens as the pressure in the vessel decreases.

6.4 Further analysis

Combustion regimes
To determine the flame regime (premixed or/and diffusion) the Takeno index [67] : $\Upsilon = \nabla Y_{O2}.\nabla Y_{H2}$ and the indexed reaction rate : $\dot{\omega}^*_{H2} = \dot{\omega}_{H2}\frac{\Upsilon}{|\nabla Y_{O2}.\nabla Y_{H2}|}$ are used ($\dot{\omega}_{H2}$ is the consumption rate of H_2). When $\dot{\omega}^*_{H2} = +\dot{\omega}_{H2}$ the gradients of the reactants have the same sign and the flame is premixed ; otherwise ($\dot{\omega}^*_{H2} = -\dot{\omega}_{H2}$) the flame is a diffusion flame. Figure 25 presents four computed snapshots of $\dot{\omega}^*_{H2}$ at four different times of the "kernel-propagation", "anchoring" and "stabilization" phases. The propagation of the flame in the recirculation zone is purely premixed (Fig. 25a), but near the jet axis, when approaching the injection tube, a triple flame appears with two lean and rich branches and a diffusion flame in between along the stoichiometric line (Fig. 25b). The anchoring phase (Fig. 25c) is characterized by a diffusion flame at the injector

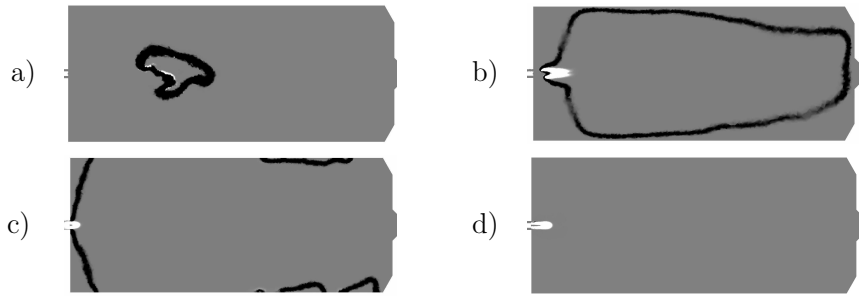


Fig. 25. Flame regimes : snapshots of the indexed reaction rate $\dot{\omega}^*_{H2}$ (black = premixed flame, white = diffusion flame). a) $t = 124\mu s$, b) $t = 577\mu s$, c) $t = 737\mu s$ and d) $t = 2.7ms$.

while pockets of flammable mixture trapped at walls are consumed in premixed mode. At the end of the computation, the flame stabilizes in a pure diffusion regime at the injector lips, between the hydrogen and oxygen jets (Fig. 25d). This ignition process is substantially different from a classical turbulent jet ignition observed for example in the experiment of Ahmed and Mastorakos [8,65] where the flame only propagates in the jet mixing layer, first as a partially premixed flame and then as a triple flame.

Propagation processes

To identify the processes controlling the flame expansion during the "kernel" and "propagation" phases, two speeds can be defined [1] :

- the absolute flame speed V_f, corresponding to the front speed relative to a fixed reference frame. V_f is estimated from an equivalent spherical flame with a volume equal to the burned gas volume :

$$V_f = \frac{dr}{dt} \tag{11}$$

  where r is the radius of the equivalent spherical flame, $r = \left(\frac{3}{4\pi} V_{bg}\right)^{1/3}$ and V_{bg} is the volume of the burned gas directly measured during the computation.

- the consumption speed $< S_c >$ that characterizes the speed at which the reactants are consumed. $< S_c >$ is calculated from the consumption rate of the oxygen :

$$< S_c >= -\frac{\int \dot{\omega}_{O_2} dv}{\rho_{ug} Y_{O_2} \Sigma_{sphere}} \tag{12}$$

[1] Another speed, the displacement speed S_d, is sometimes used for perfectly spherical flames : $S_d = \rho_b g / \rho_u g . dr/dt$ [68,24] ($\rho_b g$ and $\rho_u g$ are respectively the density of the burned and unburned gases). This expression is not adapted to diffusion flames and is not used for the present study.

where $\dot{\omega}_{O_2}$ is the consumption rate of O_2, ρ_{ug} the density of the unburned gas, Y_{O_2} the mass fraction of O_2 assumed constant in the cold mixture ($Y_{O_2} \approx 0.666$) and Σ_{sphere} the surface of the equivalent sphere of burned gases.

Figure 26 compares the two quantities V_f and $< S_c >$.

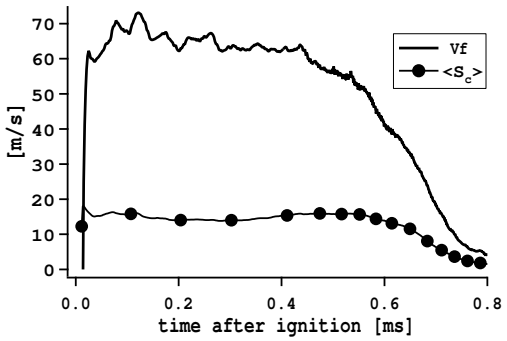


Fig. 26. Comparison between the absolute front speed V_f and the mean consumption speed $< S_c >$ during the "propagation phase".

The resolved flame area shown on Fig. 27 decreases after 0.5 ms, corresponding to the time when the flame interacts with the walls and is no longer a closed surface. Therefore, the flame speed curves of Fig. 26 are relevant only for $t < 0.5ms$. The consumption speed $< S_c >$ is rather constant and close to 14 m/s which is about 3 times the laminar flame speed S_l^0 (at $\phi = 4$ and $P = 2bar$, $S_l^0 = 4.71m/s$), corresponding to the ratio between the real wrinkled flame surface (Σ_{real}) and the area of the equivalent spherical flame (Σ_{sphere}) :

$$\frac{< S_c >}{S_l^0} = \frac{\Sigma_{real}}{\Sigma_{sphere}} = \frac{\Sigma_{real}}{\Sigma_{res}} \frac{\Sigma_{res}}{\Sigma_{sphere}} \tag{13}$$

In Eq. 13 the first term $\frac{\Sigma_{real}}{\Sigma_{res}}$ represents the sub-grid scale wrinkling of the flame, modeled by the combustion model (TFLES) by the efficiency function [44] and the second term $\frac{\Sigma_{res}}{\Sigma_{sphere}}$ is the resolved wrinkling of the flame. The temporal evolution of these two quantities are presented on Fig. 27c where the global wrinkling $\frac{\Sigma_{real}}{\Sigma_{sphere}}$ is mainly due to the sub-grid scale wrinkling : the resolved flame is moderately corrugated with a resolved wrinkling of the order of 1.35. The product of the resolved and the sub-grid scale wrinkling is about 3, which corresponds well to the ratio $< S_c > /S_l^0$.

V_f is nearly one order of magnitude higher than $< S_c >$ with an average value of 65 m/s. The slight decrease of V_f may be caused by confinement effects. The ratio of the absolute flame speed V_f to the consumption speed $< S_c >$ is

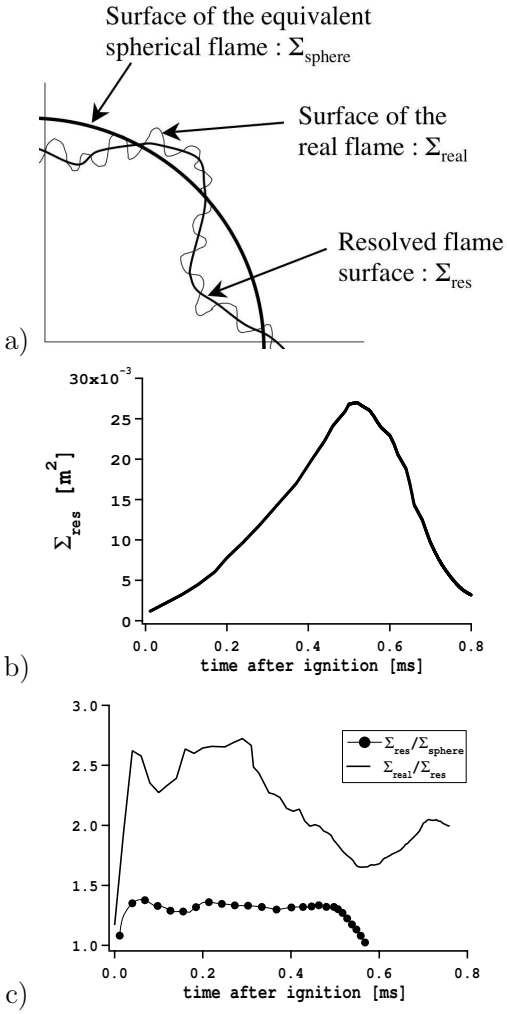


Fig. 27. Flame surface and wrinkling. a) Sketch of the different flame surfaces. b) Resolved flame surface Σ_{res} (based on the 1000K iso-surface). c) Comparison of the resolved wrinkling ($\frac{\Sigma_{res}}{\Sigma_{sphere}}$) and the sub-grid-scale wrinkling ($\frac{\Sigma_{real}}{\Sigma_{res}}$) averaged on the flame surface.

approximatively equal to 5. The theory on premixed spherical flame propagation [24] gives $V_f/ < S_c >= \rho_{ug}/\rho_{bg}$ (with ρ_{bg} and ρ_{ug} the density of burned and unburned gases). In the present case, $\rho_{ug}/\rho_{bg} \approx 5.3$ which indicates that the flame propagation mechanism during the "kernel" and the "propagation" phases correspond to a turbulent spherical flame process with a significant effect of hot gas expansion.

7 Conclusions

A compressible LES methodology to compute flame ignition and propagation in a rocket engine fueled by gaseous oxygen and hydrogen has been established and tested in the M3 configuration of DLR [19]. Results from LES are in good agreement with experimental observations, showing that the simulation captures the right mechanisms for flame ignition, propagation and stabilisation.
A six-species, seven-step chemical scheme is used for H_2/O_2 combustion and LES results show that the CCD camera employed to record the spontaneous OH-emission locates properly the flame in the jet region where the equivalence ratio is close to one but has some difficulties to detect the reactive front in the very rich mixture of the recirculation zone. This results in a different interpretation of experimental observations.
The analysis of numerical results and the comparison with experimental data have allowed to establish an ignition scenario and to identify the most important physical phenomena of the process. LES results show that in the early times, the flame expands as a premixed turbulent spherical flame. Then due to an increase of the chamber pressure, the flow direction changes in the hydrogen line making the upstream flame front accelerate towards the injector. At this time, this front enters the shear layer and a diffusion flame attaches at the injector lips, while the premixed flames consume the flammable mixture trapped at walls. At the injector, oxygen does not burn with the injected hydrogen (due to back-flow) but with the hydrogen remaining in the burned gases resulting from the combustion of the initial rich mixture. Once all the fresh mixture has burned, the chamber pressure reaches a maximum of 11.2 bar, close to the experimental measurement (11.1 bar). Finally, hydrogen flows again in the chamber and a standard diffusion flame can stabilize at the injector in a pencil-like shape.
The present delayed ignition results in a chamber full of flammable mixture at ignition time. In the first time after ignition, it has been shown that the flame propagates as a turbulent spherical flame. This well known process studied in premixed ignition [1–3] and in IC engines [69] is more hazardous for ignition in rocket engines because it leads to fast flame propagation and to a strong pressure peak in the chamber. The present approach is now extended to two-phase flow (Euler-Euler) simulations to take into account effects of the liquid phase on the ignition.

8 Acknowledgments

This work was sponsored by the French Space Agency CNES and the prime contractor for the European launcher Ariane 5 cryogenic propulsion systems : Snecma (Safran group). The authors also gratefully acknowledge the comput-

ing center CINES where most of the calculations were performed, as well as DLR for fruitful discussions.

References

[1] F. Williams, *Combustion theory*, Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

[2] I. Glassman, *Combustion*, Academic Press, New York, 1987.

[3] M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, K. Kinoshita, *Combust. Flame* 65 (1986) 319–337.

[4] V. Kurdyumov, J. Blasco, A. Sanchez, A. Linan, *Combust. Flame* 136 (2004) 394–397.

[5] M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, *Combust. Flame* 74 (1988) 161–170.

[6] D. Ballal, A. Lefebvre, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* 357 (1977) 163–181.

[7] M. Baum, *Etude de l'allumage et de la structure des flammes turbulentes*, Ph.d, Ecole Centrale Paris (1994).

[8] S. Ahmed, E. Mastorakos, *Combust. Flame* 146 (1-2) (2006) 215–231.

[9] S. Ahmed, R. Balachandran, T. Marchione, E. Mastorakos, *Combust. Flame* 151 (2007) 366–385.

[10] D. Ballal, A. Lefebvre, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* 364 (1978) 277–294.

[11] A. Danis, *Spark Ignition of Monodisperse Fuel Sprays*, Ph.D. thesis, Drexel University, Philadelphia, PA (1987).

[12] K. McManus, F. Aguerre, B. Yip, S. Candel, *Analysis of the ignition sequence of a nonpremixed combustor using PLIF imaging*, Begell House, New York, 1993, pp. 714–725.

[13] W. Mayer, B. Ivancic, A. Schik, U. Hornung, *Journal of Propulsion and Power* 17 (4) (2001) 794–799.

[14] V. Schmidt, D. Klimenko, O. Haidn, M. Oschwald, A. Nicole, G. Ordonneau, M. Habiballah, *ONERA, TP no. 2004-49* 2004 (49).

[15] V. Schmidt, U. Wepler, O. Haidn, M. Oschwald, *42 nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (AIAA-2004-1167).

[16] O. Gurliat, V. Schmidt, O. Haidn, M. Oschwald, *Aerospace Science and Technology* 7 (7) (2003) 517–531.

[17] M. De Rosa, J. Sender, H. Zimmermann, M. Oschwald, *42 nd AIAA Joint Propulsion Conference & Exhibit* (AIAA-2006-4539).

[18] S. Karl, K. Hannemann, in: *3rd International Workshop on Rocket Combustion Modeling (Paris)*, 2006.
URL `http://elib.dlr.de/43913`

[19] V. Schmidt, D. Klimenko, M. Oschwald, *Preliminary results of test case "A" laser ignition tests for coaxial GH2/GO2-Injection*, Tech. Rep. DLR-RA-TE-LI-RP-004, DLR, Lampoldshausen (2003).

[20] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, S. Lee, *Phys. Fluids* A 3 (11) (1991) 2746–2757.

[21] M. Lesieur, O. Metais, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 28 (1996) 45 – 82.

[22] M. Lesieur, in: O. Métais, J. Ferziger (Eds.), New tools in turbulence modelling, Les Editions de Physique - Springer Verlag, 1997, pp. 1 – 28.

[23] H. Pitsch, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 38 (2006) 453–482.

[24] T. Poinsot, D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*, R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

[25] J. Janicka, A. Sadiki, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2004) 537–547.

[26] M. Freitag, J. Janicka, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2007) 1477–1485.

[27] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, D. Veynante, *Combust. Flame* 137 (4) (2004) 489–505.

[28] F. Di Mare, W. P. Jones, K. Menzies, *Combust. Flame* 137 (2001) 278–295.

[29] P. Schmitt, T. Poinsot, B. Schuermans, K. Geigle, *J. Fluid Mech.* 570 (2007) 17–46.

[30] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, C. Bérat, *Combust. Flame* 154 (1) (2008) 2–22.

[31] J. C. Oefelein, *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (AIAA-2003-0479).

[32] J. C. Oefelein, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2) (2005) 2929–2937.

[33] M. Masquelet, *Simulations of a Sub-scale Liquid Rocket Engine: Transient Heat Transfer in a Real Gas Environment*, Ph.D. thesis, School of Aerospace Engineering Georgia Institute of Technology (December 2006).

[34] M. Barrère, A. Jaumotte, B. F. de Veubeke, J. Vandenkerckhove, *Rocket Propulsion*, Elsevier, 1960.

[35] D. Huzel, D. Huang, *Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, Washington, DC* 147 (1992) 20.

[36] V. Yang, M. Habiballah, J. Hulka, M. Popp, *Liquid Rocket Thrust Chambers: Aspects of Modeling, Analysis, and Design*, Vol. 200, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2004.

[37] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, T. Poinsot, *J. Comput. Phys.* 202 (2) (2005) 710–736.

[38] R. A. Baurle, S. Girimaji, *Combust. Flame* 134 (2003) 131–148.

[39] P. D. Lax, B. Wendroff, *Communications on pure and applied mathematics* 17 (1964) 381–398.

[40] J. Smagorinsky, *Month. Weath. Rev.* 91 (1963) 99–164.

[41] T. Poinsot, S. Lele, *J. Comput. Phys.* 101 (1) (1992) 104–129.

[42] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud, T. Poinsot, *AIAA Journal* 44 (4) (2006) 741–750.

[43] A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, T. Poinsot, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2007) 1729–1736.

[44] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinsot, *Phys. Fluids* 12 (7) (2000) 1843–1863.

[45] C. Angelberger, F. Egolfopoulos, D. Veynante, *Flow Turb. and Combustion* 65 (2) (2000) 205–22.

[46] P. Thompson, *Compressible-fluid dynamics*, McGraw-Hill, 1972.

[47] A. W. Cook, W. H. Cabot, *J. Comput. Phys.* 203 (2005) 379–385.

[48] C. Hirsch, *Numerical Computation of internal and external flows*, John Wiley, New York, 1988.

[49] B. Fiorina, S. Lele, *J. Comput. Phys.* 222 (1) (2007) 246–264.

[50] R. Maly, *Proc. Combust. Inst.* 18 (1981) 1747–1754.

[51] S. Pischinger, J. Heywood, *Proc. Combust. Inst.* 23 (1990) 1033–1040.

[52] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinsot, B. T., *Proc. Combust. Inst.* 24 (1992) 503–510.

[53] T. Kravchik, E. Sher, *Combust. Flame* 99 (1994) 635–643.

[54] D. Bradley, F. Lung, *Combust. Flame* 69 (1) (1987) 71–93.

[55] C. Vázquez-Espí, A. Liñán, *Combust. Theory and Modelling* 6 (2) (2002) 297–315.

[56] N. Chakraborty, R. S. Mastorakos, E. Cant, *Combust. Sci. Tech.* 179 (1-3) (2007) 293–317.

[57] D. Bradley, C. Sheppard, I. Suardjaja, R. Woolley, *Combust. Flame* 138 (2004) 55–77.

[58] T. Phuoc, F. White, *Proc. Combust. Inst.* 29 (2002) 1621 – 1628.

[59] V. Erard, A. Boukhalfa, D. Puechberty, M. Coria-Ura, *Combust. Sci. Tech.* 113 (1) (1996) 313–327.

[60] M. O'Conaire, H. Curran, J. Simmie, W. Pitz, C. Westbrook, *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (11) (2004) 603–622.

[61] R. Kee, J. Warnatz, J. Miller, *A fortran computer code package for the evaluation of gas phase viscosities, conductivities, and diffusion coefficients*, Tech. Rep. SAND83-8209, Sandia National Laboratories (1983).

[62] M. Smooke, M. Koszykowski, *Fully adaptive solutions of one-dimensional mixed initial-boundary value problem with applications to unstable problems in combustion*, Tech. Rep. SAND 83-8219, Sandia National Laboratories (1983).

[63] D. Panara, M. Porta, R. Dannecker, B. Noll, in: *Proceedings of the 5th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer.*, 2006.

[64] A. H. Shapiro, *The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow*, Wiley, 1953.

[65] E. Mastorakos, *Prog. Energy Comb. Sci.* 35 (2009) 57–97.

[66] A. Lefebvre, *Gas Turbines Combustion*, Taylor & Francis, 1999.

[67] H. Yamashita, M. Shimada, T. Takeno, *Proc. Combust. Inst.* 26 (1996) 27 – 34.

[68] D. Dowdy, D. Smith, S. Taylor, *Proc. Combust. Inst.* 23 (1990) 325–332.

[69] J. Heywood, *Internal combustion engine fundamentals*, McGraw and Hill Series in Mechanical Engineering, McGraw-Hill, New-York, 1988.

Compléments

Déroulement de l'étude

Le calcul du transitoire d'allumage de la chambre M3 a été effectué en quatre phases permettant un avancement rigoureux des travaux ainsi que la résolution des différents problèmes qui se sont posés pendant la mise en place du calcul.

Phase1 : calculs 0D
Le but de cette première étape est de comparer l'évolution de la pression de la chambre M3 avec celle calculée par une méthode 0D. Dans cette méthode, la combustion du mélange de la chambre est simulée par une réaction infiniment rapide (mise à l'équilibre chimique) d'un mélange d'oxygène et d'hydrogène à une richesse $\phi = 4$ (dans un réacteur homogène à volume constant), couplée à un modèle de fuite pour représenter l'expulsion des gaz brûlés par la tuyère de sortie. L'annexe B décrit plus précisément la procédure de calcul et les équations employées.

Un exemple de résultat est donné Fig. 8.24. On observe sur cette figure que l'évolution temporelle de la pression est relativement bien reproduite. La dilution due à la présence initiale de di-azote dans la chambre produit une diminution de la pression maximale atteinte pendant la séquence d'allumage. Ce résultat montre que dans l'expérience, la combustion après allumage est être très rapide, en mode prémélangé, et quasiment à volume constant.

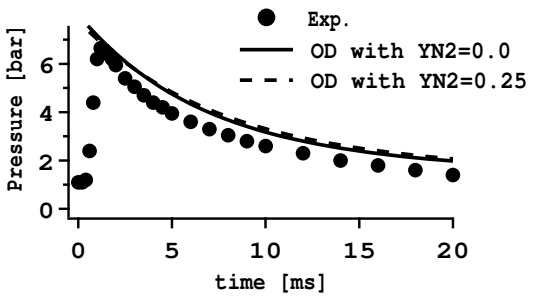


FIG. 8.24 - *Calcul 0D de l'allumage de la chambre M3 comparé aux résultats expérimentaux [180] (tuyère de 6mm de diamètre).*

Phase2 : calcul 3D de la phase de remplissage
D'après les résultats de la phase1, le mélange est relativement homogène dans la chambre à l'instant de l'allumage. La phase de remplissage a donc été calculée sur un maillage grossier pendant les premières 368 ms, de manière à capturer les grandes structures du mélange. Les 2 ms restantes de la phase de remplissage ($t_{ig} = 370\,ms$) ont été calculées sur un maillage plus fin pour capturer plus précisément la dynamiques des jets et les conditions locales dans la zone de dépôt d'énergie.

Phase3 : 1$^{\mathbf{er}}$ calcul d'allumage
Ce premier calcul a été réalisé avec la chimie une étape "Marinov-1" (présentée section 6) avec une géométrie ne comportant pas le dôme d'injection d'hydrogène. Les résultats obtenus montrent que (1) la propagation de la flamme est trop rapide, (2) la pression maximale est de l'ordre de 13 bar, (3) la pression continue d'augmenter une fois que tout le mélange de la chambre a brûlé, (4) la flamme n'a pas la bonne topologie par rapport aux visualisations expérimentales.

Les points (1) et (2) sont clairement dus à des problèmes de cinétique et de thermodynamique chimique. Le schéma Marinov-1 surestime en effet la vitesse de flamme laminaire et la température de fin de combustion dans une large gamme de richesses. La solution a donc été de trouver un schéma plus complet et plus précis. Cette étude a nécessité de nombreux tests et a débouché sur la mise en place du schéma H2O2-GL7-1 à sept étapes et six espèces (section 6).

Le problème (3) est lié aux conditions limites employées pour les murs de la chambre, de type "mur glissant isotherme" qui ont tendance à injecter de la masse dans le domaine en présence d'une source de chaleur très importante comme une flamme. Dans l'allumage M3, la flamme se propage jusqu'aux murs avant d'être coincée par les pertes thermiques. Dans cette situation, d'importantes quantités de masse sont injectées dans la chambre, conduisant à une augmentation de la pression même lorsque tout le mélange a été consommé. La solution à ce problème a été de changer la condition limite de mur, et d'utiliser des murs avec correction de flux (assurant un flux de masse nul à travers la paroi).

Le quatrième problème dépend des conditions d'injection. L'inversion de l'écoulement dans le tube d'injection de l'hydrogène n'est pas capturé si le dôme d'alimentation ne figure pas dans la géométrie. De plus, pour ce premier calcul réactif, l'injection d'oxygène est supposée sonique pendant toute la séquence d'allumage. Ces deux simplifications ne permettent donc pas d'obtenir le bon processus de remontée de la flamme, induisant des différences de topologie par rapport aux observations expérimentales. Les solutions sont d'inclure le dôme d'hydrogène et d'implanter une condition limite pour l'oxygène, dont le régime d'injection (sonique ou subsonique) dépend des pressions amont et avale (cf. section suivante).

Phase4 : calcul final de l'allumage
Les résultats de cette dernière phase ont permis d'écrire l'article présenté dans la section précédente.

Condition d'injection de l'oxygène

Dans cette section, l'implantation de la condition limite développée pour l'oxygène est décrite plus en détail. Pour cette condition d'injection, le régime de l'écoulement (sonique/subsonique) est déterminé par le différentiel de pression entre le dôme et la chambre de combustion. Dans l'expérience, la pression dôme reste constante à une valeur de 12 bar mais au cours du transitoire d'allumage, la pression chambre varie de 2 à 11 bar conduisant à une transition de l'écoulement d'un régime sonique à subsonique. Pour déterminer l'instant où le régime change, une condition aux limites basée sur des relations de tuyère isentropique a été mise en place. Le but de cette condition limite est de modéliser l'écoulement au col d'une tuyère située entre un réservoir dont la pression et la température génératrices sont connues et une chambre dont la pression est variable (Fig. 8.25).

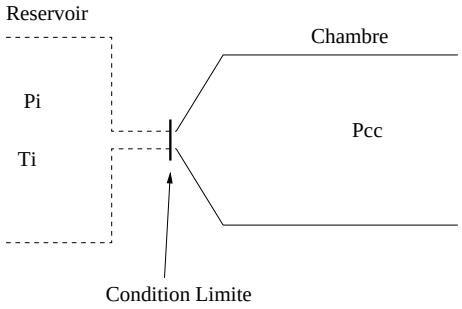


FIG. 8.25 - *Condition limite de col entre un réservoir à pression constante et une chambre à pression variable.*

Calcul des paramètres d'injection

Les paramètres d'entrée de cette condition limite sont la pression et la température génératrices du réservoir amont (respectivement P_i et T_i), la nature du gaz s'écoulant à travers la tuyère et le coefficient de décharge Cd de la ligne d'injection (ce coefficient Cd correspond au rapport du débit réel sur le débit isentropique). En sortie de réservoir (entrée de la chambre), le débit massique est imposé : $\dot{m} = A.Cd.\rho u|_{inj}$ (A étant la section minimum de la tuyère) ainsi que la température T_{inj} et la pression P_{inj} dans le cas où l'écoulement est sonique. Concrètement le coefficient de décharge est vu comme un facteur de réduction de la surface de passage A. Dans le code, les conditions d'injection sont appliquées sur une surface $A.Cd$ plus petite que la surface géométrique réelle A.

Pour une injection supersonique 5+N grandeurs doivent être imposées (en 3D), N étant les fractions massiques des espèces du mélange. On définira donc les quantités de mouvement $\rho u|_{inj}$, $\rho v|_{inj}$, $\rho w|_{inj}$ ainsi que la température et pression statiques T_{inj} et P_{inj} et les fractions massiques des espèces $Y_{k,inj}$. Dans le cas où l'entrée est subsonique, l'utilisation des conditions limites NSCBC requière 4+N grandeurs. Ici seront imposées : les quantités de mouvement $\rho u|_{inj}$, $\rho v|_{inj}$, $\rho w|_{inj}$, la température statique T_{inj} et les fractions massiques des espèces $Y_{k,inj}$.

La nature de l'écoulement est déterminée par le calcul du nombre de Mach au niveau de la section d'injection après avoir déterminé la pression avale de chambre P_{cc}. La procédure est la suivante :

1. on suppose l'écoulement subsonique ($P_{inj} = P_{cc}$) et on calcule la valeur du flux de sortie avec la

relation isentropique suivante [190] :

$$\rho u|_{inj} = \frac{P_i}{(rT_i)^{1/2}} \left(\frac{P_{cc}}{P_i}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \left(\frac{2\gamma}{\gamma-1}\left(1-\left(\frac{P_{cc}}{P_i}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right)\right)^{1/2} \tag{8.10}$$

où $r = \frac{R}{\sum W_k}$ avec R la constante des gaz parfaits et les $W_{k,inj}$ les masses molaires des espèces injectées. γ est le rapport des chaleurs massiques, calculé sur la section d'injection par : $\gamma = \frac{\sum Y_k.Cp_k}{\sum Y_k.Cv_k}$, avec Cp_k et Cv_k respectivement la chaleur massique à pression constante et à volume constant de l'espèce k.

2. Détermination du nombre de Mach d'injection M_{inj} en utilisant la relation Eq. 8.10 et la relation : $\rho u|_{inj} = \frac{P_{cc}}{rT_{inj}}.M_{inj}.(\gamma r T_{inj})^{1/2}$ où T_{inj} est évalué via une relation isentropique valable en régime subsonique [190] : $T_{inj} = \left(1+\frac{\gamma-1}{2}M_{inj}^2\right)^{-1} Ti$
3. si $M_{inj} > 1$ alors l'hypothèse de départ est fausse et l'écoulement est sonique, sinon il est subsonique.

Une fois que le régime de l'écoulement est connu, il reste à calculer les grandeurs injectées. Les valeurs de quantités de mouvement, de température et de pression sont déterminées via des relations isentropiques de tuyère [190].

Dans le cas d'un régime sonique, la quantité de mouvement traversant la tuyère est calculée avec la relation :

$$\rho u|_{inj} = \frac{Pi}{(rTi)^{1/2}}(\gamma)^{1/2}\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{(\gamma+1)/2(\gamma-1)} \tag{8.11}$$

La température statique locale T_{inj} est aussi déduite d'une relation isentropique (8.12).

$$T_{inj} = \frac{2}{\gamma+1}Ti \tag{8.12}$$

Tout comme la pression statique locale P_{inj} qui est calculée via la relation (8.13).

$$P_{inj} = \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} Pi \tag{8.13}$$

Pour le régime subsonique :

$$\rho u|_{inj} = \frac{Pi}{(rTi)^{1/2}} \left(\frac{Pcc}{Pi}\right)^{1/\gamma} \left(\frac{2\gamma}{\gamma-1}\left(1-\left(\frac{Pcc}{Pi}\right)^{(\gamma-1)/\gamma}\right)\right)^{1/2} \tag{8.14}$$

La température statique locale T_{inj} se déduit de :

$$T_{inj} = \left(1+\frac{\gamma-1}{2}M_{inj}^2\right)^{-1} Ti \tag{8.15}$$

Validation de la condition limite

Cette condition limite a été testée sur des configurations 0D et 2D avant d'être utilisée sur le calcul du transitoire du M3. Les conditions des cas test 0D et 2D sont les suivantes :

écoulement mono-espèce	$Y_{O2} = 1$
pression génératrice du dôme Pi	$12\ bar$
température génératrice du dôme Ti	$300\ K$
section de passage A_{inj}	$5,0.10^{-3}\ m^2$
Coefficient de décharge Cd	0.3
la pression chambre Pcc suit une évolution temporelle linéaire, augmentant de 2.0 bar par ms	

TAB. 8.9 - *Conditions du cas test 0D.*

La configuration 2D choisie pour ces tests est une chambre possédant deux entrées : la première est la condition que l'on souhaite tester et la seconde permet de faire monter la pression chambre (Fig. 8.26). Le débit de cette seconde entrée est fixé de manière à ce que la pression chambre Pcc suive une évolution temporelle linéaire, augmentant de 2.0 bar par ms.

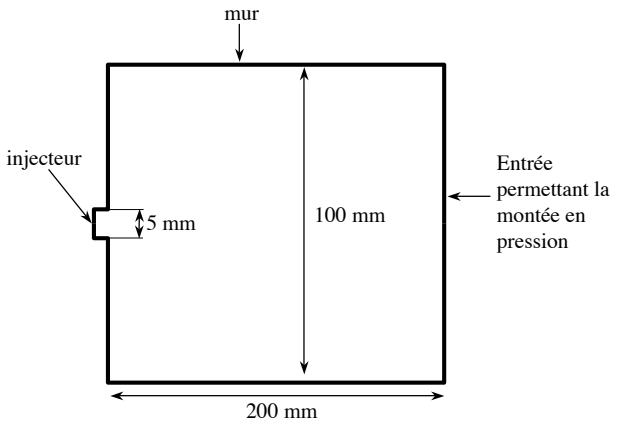
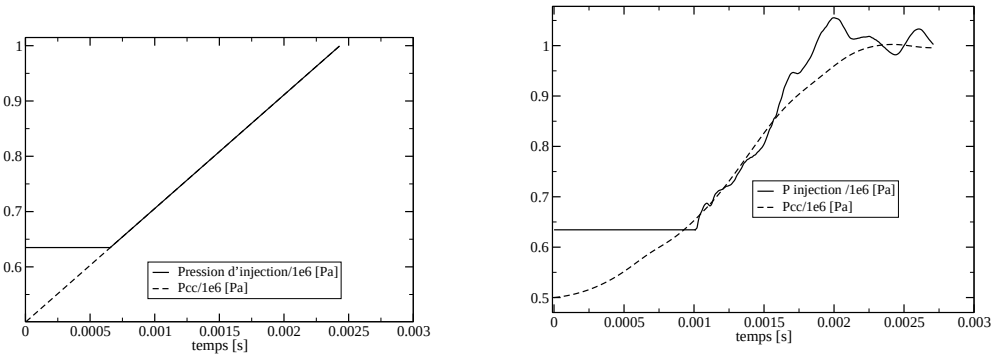


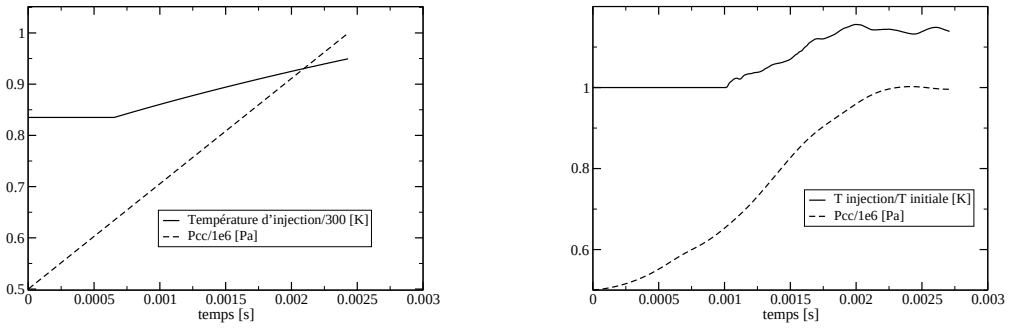
FIG. 8.26 - *Configuration du test 2D.*

Les résultats en terme de pression, température, nombre de Mach et débit pour les calculs 0D et 2D sont présentés Fig. 8.27, 8.28, 8.29 et 8.30. Le comportement du code AVBP est très proche de celui des calculs 0D de référence : dès que la pression chambre atteint la pression statique d'injection, la condition limite change de régime. Le nombre de Mach d'injection se met à décroître ainsi que le débit imposé. La pression d'injection devient égale à la pression locale de la chambre qui peut être légèrement différente de P_{cc} qui est une pression moyenne.



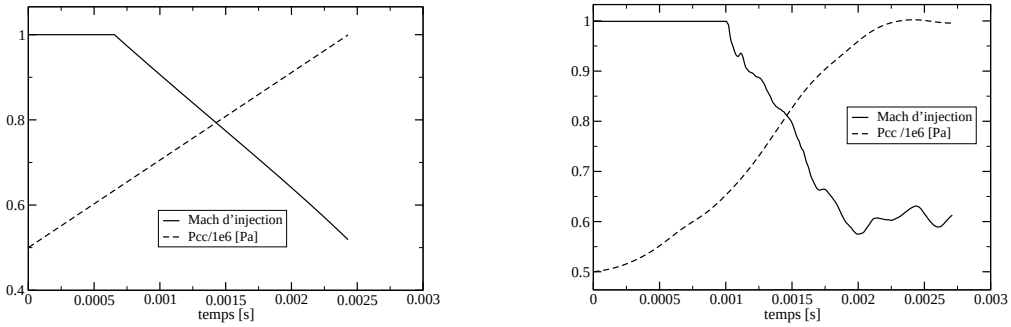
a. b.

FIG. 8.27 - *Evolutions temporelles de la pression statique d'injection et de la pression chambre. a. Calcul 0D de référence, b. calcul 2D.*



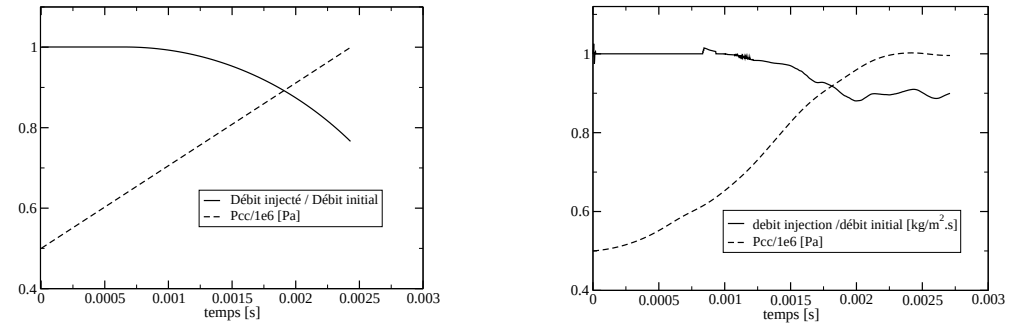
a. b.

FIG. 8.28 - *Evolutions temporelles de la température d'injection et de la pression chambre. a. Calcul 0D de référence, b. calcul 2D.*



a. b.

FIG. 8.29 - *Evolutions temporelles du nombre de Mach d'injection et de la pression chambre. a. Calcul 0D de référence, b. calcul 2D.*



a. b.

FIG. 8.30 - *Evolutions temporelles du débit d'injection et de la pression chambre. a. Calcul 0D de référence, b. calcul 2D.*

La topologie du jet est présentée Fig. 8.31. Initialement, la pression statique d'injection étant supérieure à la pression chambre, le jet est sous détendu et un réseau de compressions-détentes est visible sur la Fig. 8.31a. Il est aussi observé que l'application du coefficient de décharge Cd induit une réduction de la surface d'injection. Techniquement, la zone d'injection effective est un cercle de surface $A' = Cd\,A$ concentrique au plan d'injection de surface A. Les points en dehors de la surface A' ont une vitesse imposée à 0 m/s.

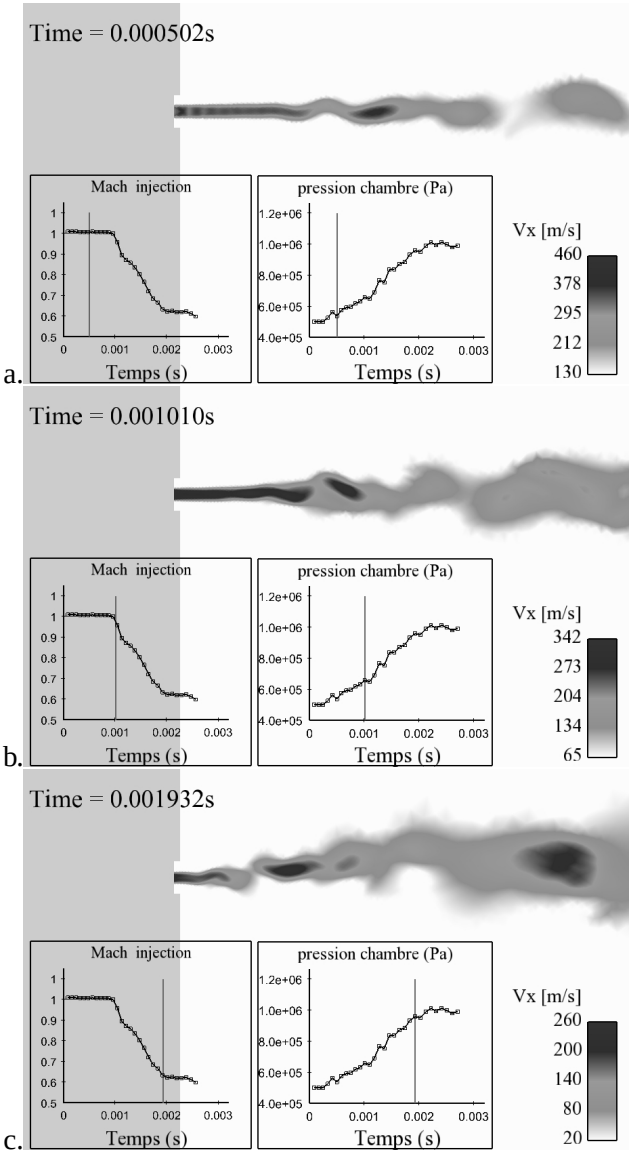


FIG. 8.31 - *Vitesse axiale à trois instants différents au cours de la transition.*

Influence de la résolution du maillage aux murs

Cette section présente brièvement l'impact du raffinement du maillage sur l'allumage. Deux raffinements au niveau de la paroi de la chambre ont été testés (Fig. 8.33a) : le Maillage1 avec une taille caractéristique au mur de $\Delta_{x|paroi} = 2\,mm$ et le Maillage2 identique au Maillage1 mais avec un raffinement plus fin au mur ($\Delta_{x|paroi} = 0,5\,mm$). Le type de mur utilisé pour les tests est une loi de paroi avec flux de chaleur. Le flux de chaleur q_{mur} est calculé à partir d'une température référence du mur T_{ref} spécifiée et de la température T_2 des points du domaine les plus proches :

$$q_{mur} = \frac{\rho_{ref} C_{p,ref} u_\tau (T_{ref} - T_2)}{T^+} \tag{8.16}$$

où ρ_{ref} et $C_{p,ref}$ sont les propriétés thermodynamiques du fluide déterminées à partir de T_{ref}, u_τ est une vitesse de friction et T^+ est déterminée par une loi de paroi. Pour calculer T^+, une distance au mur y^+ est définie :

$$y^+ = \Delta_{x|paroi} u_\tau / \nu_{ref} \tag{8.17}$$

où ν_{ref} est la viscosité laminaire calculée à partir de T_{ref}. T^+ est ensuite évaluée :

$$\text{si } y^+ < 11,445 \quad \text{alors} \quad T^+ = Pr\, y^+ \tag{8.18}$$

$$\text{si } y^+ > 11,445 T^+ = Pr\, ln(F y^+)/\kappa \tag{8.19}$$

où Pr et Pr_t sont les nombres de Prandtl laminaire et turbulent respectivement et $\kappa = 0,41$ et $F = 2,96$ sont des coefficients du modèle.

Avec cette condition limite faible sur température, une flamme qui s'approche du mur est coincée si le flux de chaleur évacué par le mur est supérieur ou égal au taux volumique de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ du front. Une relation simple entre la taille des mailles à la paroi et le rapport de ces termes source et puits est donnée par :

$$y^+ < 11,445 \quad \Rightarrow \quad \frac{\iint q_{mur} dS}{\iiint \dot{\omega}_T dV} \propto \frac{1}{(\Delta_x)^2} \tag{8.20}$$

$$y^+ > 11,445 \quad \Rightarrow \quad \frac{\iint q_{mur} dS}{\iiint \dot{\omega}_T dV} \propto \frac{1}{\Delta_x ln(\Delta_x)} \tag{8.21}$$

Par suite, moins la zone proche paroi est raffinée, moins elle a la capacité de coincer la flamme. Ce résultat est observé dans le cas de la chambre M3. Avec le Maillage1, la flamme n'est pratiquement pas affectée par les effets thermiques et vient se coller au mur sans que la combustion soit ralentie. Dans le cas du Maillage2, les effets de coincement sont plus importants et la combustion est globalement atténuée lorsque la flamme se rapproche de la paroi (voir Fig. 8.32).

L'effet de ces deux comportements sur la courbe de pression de la chambre est montré Fig. 8.33b, où il est observé que dans le cas du Maillage1 la montée en pression est plus rapide que dans le cas du Maillage2 et que la pression maximale atteinte est plus élevée.

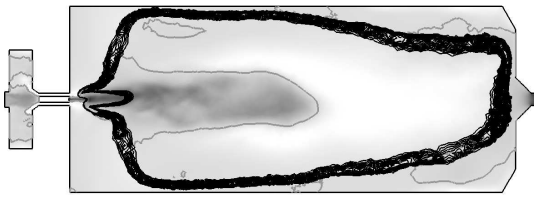


FIG. 8.32 - *Coincement de la flamme à la paroi (Maillage2).*

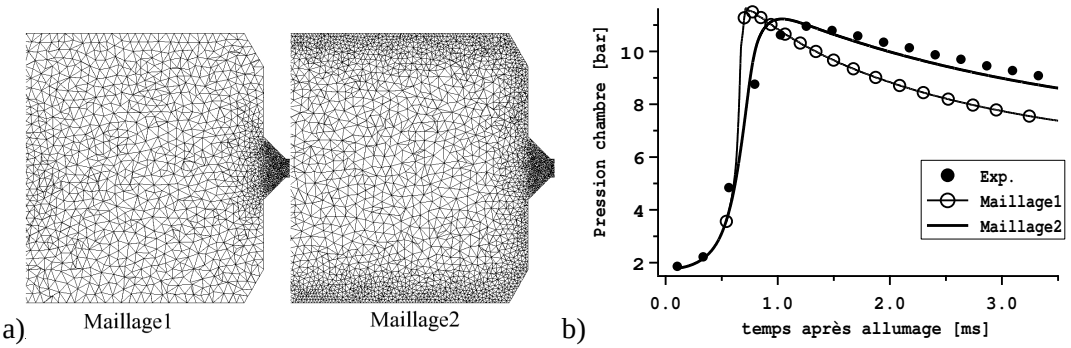


FIG. 8.33 - *a) les deux maillages utilisés : Maillage1 :* $\Delta_{x|paroi} = 2\,mm$ *et Maillage2 :* $\Delta_{x|paroi} = 0,5\,mm$*. b) Impact du raffinement à la paroi sur la pression chambre (lignes : simulations, symboles : expérience du DLR [180]).*

Conclusions

Les résultats de calcul de l'allumage de la chambre M3 montrent que le code AVBP est capable de simuler l'allumage d'un moteur fusée expérimental simplifié. L'utilisation du schéma cinétique H2O2-GL7-1 a permis de constater que la caméra rapide enregistrant les émissions du radical OH n'était pas assez sensible pour détecter la flamme dans la zone de recirculation où la richesse est de l'ordre de $\phi = 4$. Le scénario d'allumage établi à partir des résultats numériques est donc légèrement différent de celui des expérimentateurs. La séquence d'allumage se découpe en quatre phases comme présentées sur la Fig. 8.34.

A l'instant du dépôt d'énergie, la pression dans le dôme d'alimentation en hydrogène est légèrement supérieure à la pression chambre. La phase d'initiation débute, puis lorsque le noyau de flamme est assez gros le front de flamme se propage dans la zone de recirculation. Cette première phase est pilotée par des processus similaires à ceux d'une flamme sphérique turbulente (Fig. 8.34a). A $t = t_1 \approx 400\ \mu s$, la pression chambre devient supérieure à la pression du dôme d'hydrogène et l'écoulement s'inverse dans la ligne d'injection (Fig. 8.34b). Ce changement de direction de l'écoulement entraîne une aspiration du mélange inflammable et de la flamme vers l'intérieur du dôme. La zone de flamme proche de l'injecteur pénètre dans une région où l'inhomogénéité du mélange est importante, conduisant à l'apparition d'une flamme triple. A $t \approx 600\ \mu s$ la flamme atteint l'injecteur, et se transforme en flamme de diffusion

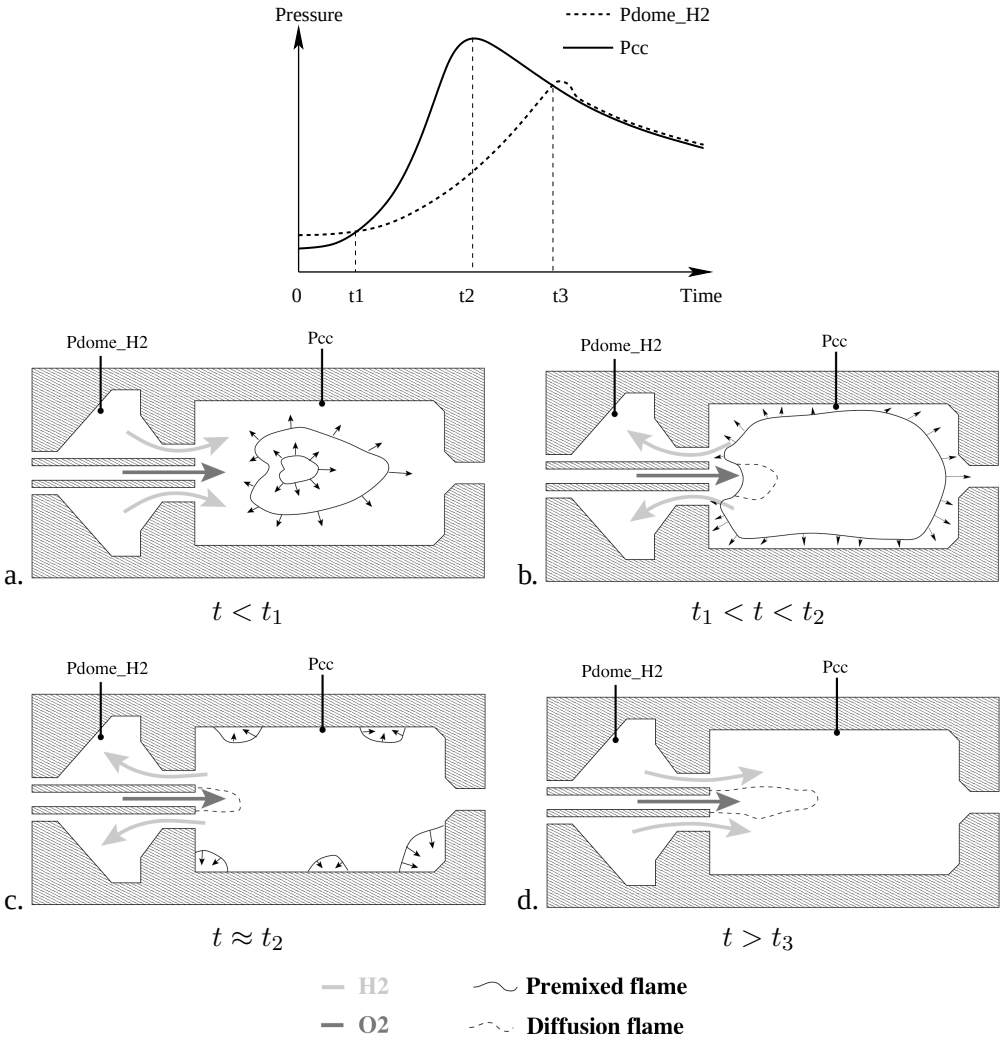


FIG. 8.34 - *Résumé du processus d'allumage du banc M3.*

stabilisée entre le jet d'oxygène et l'hydrogène contenu dans les gaz brûlés de la chambre. Les zones de flamme de prémélange disparaissent peu à peu en consumant les dernières poches de gaz non brûlé, piégées près des murs. A $t = t_2 \approx 1,1\ ms$ tout le mélange frais a été consommé et la pression chambre atteint sa valeur maximum de 11,2 bar (Fig. 8.34c). La diminution de la pression chambre s'amorce, alors que la pression dans le dôme continue d'augmenter. Vers $t = t_3 \approx 1,3\ ms$, l'hydrogène afflue à nouveau dans la chambre. La flamme de diffusion accrochée à l'injecteur se stabilise entre les jets d'oxygène et d'hydrogène et s'allonge à mesure que les débits d'oxygène et d'hydrogène réaugmentent.

Dans le cadre de la thèse, la simulation d'allumage du banc M3 a d'abord montré que le schéma cinétique chimique H2O2-GL7-1 est bien adapté aux problématiques d'allumage moteur fusée, dans lesquelles la pression varie, la répartition du mélange est non-homogène et les régimes de combustion

changent. Un autre point important est que la méthode de Cook et Cabot [44] a été utilisée avec succès pour résoudre l'écoulement supersonique généré par la détente du jet d'oxygène. Ces deux éléments de modélisation vont être employé dans la section suivante, pour simuler l'allumage du moteur VINCI qui introduit une nouvelle difficulté : le traitement des phénomènes diphasiques.

Cinquième partie

Allumage moteur VINCI

Chapitre 9

Introduction

Le programme VINCI, lancé en 1999 par la SNECMA représente la nouvelle génération de moteur cryotechnique pour l'étage supérieur d'Ariane 5. Ce moteur comporte une plaque d'injection composée de 122 injecteurs coaxiaux, alimentés en oxygène liquide (au centre) et en hydrogène gazeux (anneau périphérique). Il comporte plusieurs améliorations par rapport au moteur HM7 actuellement utilisé (développé à la fin des années 70) : sa poussée nominale est presque 3 fois supérieure (environ 18 tonnes) ; ses turbo-pompes (permettant l'injection des débits très élevés d'oxygène et d'hydrogène liquides) ne sont pas entraînées par un générateur de gaz chauds comme sur le HM7 mais par la détente de l'hydrogène, changeant de phase dans le circuit de refroidissement de la chambre ; enfin le moteur a la capacité d'être rallumé jusqu'à 4 fois au cours d'un vol ce qui lui permet de positionner plusieurs satellites sur des orbites différentes.
C'est pourquoi la maîtrise des phases d'allumage est cruciale. On a vu dans le chapitre précédent qu'un retard à l'allumage entraîne une élévation brutale de la pression, pouvant déclencher des instabilités de combustion voire même endommager le moteur. Dans le moteur VINCI, la plaque d'injection comporte six rangées d'injecteurs qui sont allumés par une torche de gaz brûlés ($\approx 2500\ K$) située au milieu de la plaque. Lors de l'allumage, la zone de combustion se propage de l'allumeur aux premières couronnes d'injecteurs puis d'une rangée à l'autre jusqu'à ce que tous les injecteurs soient allumés. Il faut donc que la séquence d'allumage débute par une phase de débits faibles pour éviter l'accumulation de combustible pouvant conduire à un allumage violent.

La réussite d'un allumage "doux" dépend essentiellement du mélange turbulent entre les réactifs d'une part et entre les réactifs et les gaz chauds d'autre part, ainsi que de la séquence d'allumage. L'impossibilité d'observer expérimentalement ce mélange dans une chambre d'un moteur fusée fait que l'analyse des résultats numériques présente un réel intérêt scientifique et technique.

Le chapitre précédent a permis de voir que le code AVBP est capable de simuler une séquence d'allumage dans la configuration simplifiée de moteur fusée du banc M3. Dans ce cas cependant, l'oxygène et l'hydrogène sont injectés sous forme gazeuse, alors que dans les moteurs fusées cryotechniques, le combustible et le comburant sont liquides du moins pendant la séquence d'allumage lorsque la pression est en dessous des pressions critiques des carburants. L'aspect diphasique joue un rôle crucial sur l'allumage

et va être étudié dans ce chapitre. Un autre aspect marquant une différence avec les travaux précédents est que l'allumage est initié par une torche de gaz chauds dans VINCI alors que les allumages précédents sont déclenchés par des dépôts locaux d'énergie (bougie/laser). Avec une torche, la probabilité d'allumage est beaucoup plus importante, du fait que la surface de contact entre les réactifs et la source chaude est bien plus grande que dans le cas d'un laser ou d'une bougie. La turbulence est favorable à l'allumage puisqu'elle augmente le mélange entre réactifs et gaz chauds alors qu'elle peut entraîner l'extinction du noyau initiale dans le cas d'un dépôt d'énergie. Le lien entre les deux méthodes d'allumage est qu'une fois que le noyau de flamme est créé, les processus de propagation de la flamme sont similaires.
De plus, les calculs effectués précédemment, ont permis de développer un schéma cinétique $H_2 - O_2$ robuste et adapté à l'allumage et ont montré que le modèle de flamme épaissie était relativement bien approprié dans la mesure où la combustion se fait essentiellement en mode partiellement prémélangé. Enfin, le traitement des chocs par l'ajout d'une hyperviscosité (méthode de Cook et Cabot [44]) a également été validée dans la simulation du banc M3.
La même méthodologie a donc été utilisée dans ce chapitre consacré à la simulation de l'allumage du moteur VINCI. La dernière difficulté est la prise en compte des effets diphasiques. Dans le code AVBP la phase liquide est calculée par une méthode eulérienne. L'absence de modèle d'atomisation fait qu'un effort particulier sera dédié à l'élaboration d'un modèle l'injection pour représenter la physique des injecteurs coaxiaux Lox/GH2.
Le chapitre se découpe de la façon suivante : le chapitre 11 décrit la procédure réelle d'allumage du moteur VINCI. L'étude de le chapitre 10, des temps caractéristiques des phénomènes impliqués dans la combustion dans les moteurs fusées permet d'identifier les processus les plus importants. Le chapitre 12 est une revue de la littérature sur l'injection coaxiale et dans le chapitre 13, les résultats de l'étude bibliographique sont utilisés pour définir le modèle d'injection. Ce modèle est ensuite testé dans une configuration bi-dimensionnelle dans le chapitre 14 puis utilisé dans le chapitre 15 pour la simulation du transitoire d'allumage du moteur VINCI, dans une configuration tri-dimensionnelle simplifiée.

Chapitre 10

Procédure d'allumage du moteur VINCI

Comme il l'a été mentionné dans l'introduction, une des particularités du moteur VINCI est de ne pas posséder de générateur de gaz chauds pour entraîner les turbo-pompes. Leur entraînement est généré par la détente de l'hydrogène qui, en circulant dans le circuit de refroidissement de la chambre, passe de l'état liquide à gazeux (Fig.10.1). L'hydrogène gazeux transite ensuite dans les étages de détente des turbo-pompes, puis il est directement injecté dans la chambre. Un tel cycle (appelé en anglais *expander cycle*) requiert une maîtrise parfaite des échanges thermiques entre la chambre et le circuit d'hydrogène [45].

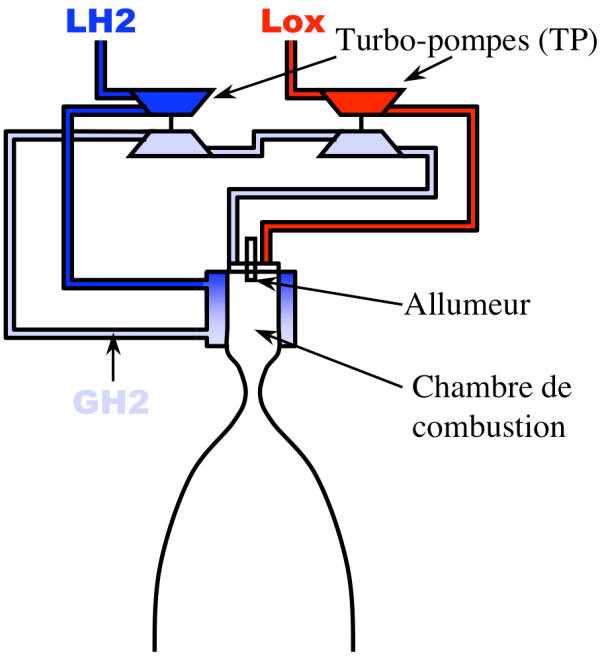


FIG. 10.1 - *Schéma de principe du moteur VINCI. LH2 : hydrogène liquide, GH2 : hydrogène gazeux et Lox : oxygène gazeux.*

L'allumage et la montée en régime du moteur suivent une séquence précise découpée en 4 phases distinctes (Fig.10.2). La première est la phase de "mise en froid" pendant laquelle les lignes d'injection sont purgées pour expulser les éventuelles poches de gaz emprisonnées dans les canalisations et faire descendre leur température. La seconde phase est la phase d'activation de l'allumeur suivie du début de l'injection de l'hydrogène. L'allumeur est une petite chambre de combustion amont alimentée en hydrogène et oxygène, allumée par une bougie électrique et débouchant au milieu de la plaque d'injection. Pendant cette seconde phase, les turbo-pompes commencent à tourner, entraînées par la détente de l'hydrogène gazeux. La troisième phase est caractérisée par l'allumage de la chambre suite à l'injection de l'oxygène liquide. Enfin, les débits sont progressivement augmentés jusqu'à atteindre le régime nominal à la fin de la quatrième phase. La description temporelle de la séquence a été retirée du manuscrit pour cause de confidentialité.

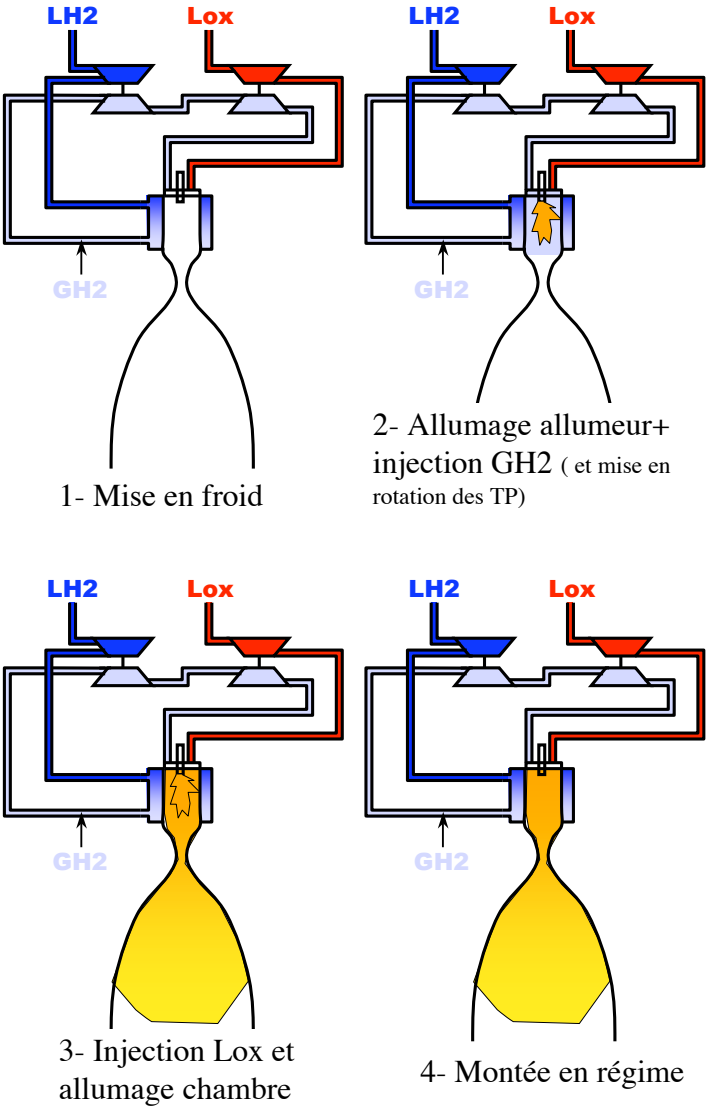


FIG. 10.2 - *Procédure d'allumage de la chambre VINCI.*

Chapitre 11

Temps caractéristiques de la combustion dans les moteurs fusées

Ce chapitre propose une étudie des temps caractéristiques des phénomènes impliqués dans la combustion dans les moteurs fusées. Le débit de gaz brûlés produit (que l'on cherche à maximiser) dépend de la rapidité de la combustion ainsi que de la vitesse d'approvisionnement de la flamme en réactifs gazeux. L'approvisionnement dépend lui-même des phénomènes de mélange, de vaporisation et donc de l'atomisation du jet liquide. Les temps caractéristiques de trois phénomènes, que sont l'évaporation, le mélange et la cinétique chimique, sont facilement quantifiables.

Dans l'hypothèse de goutte isolée, le temps d'évaporation se définit par :

$$\tau_{ev} = \frac{\rho_l \pi / 6 d_l^3}{\Gamma} \approx \frac{\rho_l d_l^2}{6 Sh D_{O_2} \rho_g ln(1+B)} \text{ avec } B = \frac{Cp(T_g - T_l)}{L_v} \tag{11.1}$$

où Γ est le taux d'évaporation eulérien défini dans le chapitre 3.

Pour une goutte isolée d'oxygène d'un diamètre d_l de $20\,\mu m$, dans un environnement gazeux à 500K et à une pression de 1bar, le temps caractéristique d'évaporation est $\tau_{ev} \approx 100\,\mu s$.

Le temps caractéristique de mélange peut être estimé grâce aux caractéristiques dimensionnelles et de vitesses des injecteurs [199] :

$$\tau_{mel} \approx \frac{D_l}{\Delta_U} \tag{11.2}$$

où D_l est le diamètre du tube d'injection de l'oxygène liquide, Δ_U est la différence des vitesses d'injection entre les écoulements d'oxygène liquide et d'hydrogène gazeux. Dans la zone proche injecteur le temps caractéristique de mélange est de l'ordre de $\tau_{mel} \approx 25\,\mu s$ et de l'ordre de $\tau_{mel} \approx 1\,ms$ à dix diamètres en aval.

Enfin le temps caractéristique chimique peut se définir par :

$$\tau_{chem} \approx \delta_l^0 / S_l^0 \tag{11.3}$$

où δ_l^0 et S_l^0 sont respectivement l'épaisseur et la vitesse de la flamme. Dans les conditions stoéchiométriques on obtient $\tau_{chem} \approx 10\,\mu s$.

Le nombre de Damköhler chimique $Da_{chem} = \tau_{mel}/\tau_{chem}$ est donc bien plus grand que 1 ce qui permet d'affirmer que les flammes turbulentes rencontrées dans les moteurs fusées sont des surfaces plissées fines [157], pour lesquelles le modèle de combustion TFLES est adapté. Cette comparaison montre aussi que le phénomène limitant est l'évaporation, qui est elle même très dépendante des processus d'atomisation. Il est donc primordial de prendre en compte les effets diphasiques dans la simulation d'un moteur fusée cryotechnique.

Chapitre 12

Atomisation d'un jet liquide par un jet gazeux coaxial

Ce résumé bibliographique se base sur les résultats du groupement de recherche (GdR) intitulé "Combustion dans les moteurs fusée" réunissant CNES, CNRS, ONERA et SNECMA dont la synthèse a été publiée en 2001 [39]. Une part conséquente de ces recherches a porté sur l'injection dans les moteurs fusées cryotechniques. Il est rappelé que ce comité de recherche a été mis en place en 1993, pour répondre à un manque de connaissance dans les domaines de l'allumage et plus généralement de la combustion dans les moteurs fusées (cf. section 1). Les injecteurs coaxiaux sont couramment utilisés dans ce type d'application, où l'oxygène est injecté au centre et épluché par le jet périphérique d'hydrogène gazeux. Pendant l'allumage, la pression chambre est inférieure à la pression critique de l'oxygène (50,4 bar) et l'injection est pilotée par des processus d'atomisation liquide "classiques" par opposition aux phénomènes supercritiques rencontrés à plus hautes pressions (qui n'entrent pas dans le cadre de cette étude). Une première partie décrit brièvement les mécanismes d'atomisation et les différents régimes observés. Une seconde section décrit plus précisément l'atomisation primaire pendant laquelle le jet est dissocié en filaments et en grosses gouttes. Ces grosses structures sont ensuite divisées lors de l'atomisation secondaire et la description des processus en jeu fait l'objet de la troisième et dernière partie.

12.1 Mécanismes d'atomisation

L'atomisation d'un jet liquide par un jet coaxial de gaz peut être grossièrement divisée en deux phases :

- **atomisation primaire**, au cours de laquelle le jet est déstabilisé en ligaments et grosses gouttes,
- **atomisation secondaire**, où les structures issues du premier processus sont désintégrées en gouttes plus fines.

La surface liquide est augmentée de façon significative pendant l'atomisation secondaire. Cependant, dans le cadre des injecteurs coaxiaux cryotechniques, la qualité de l'atomisation dépend principalement de la première phase. Une étude réalisée par Farago et Chigier [59] sur l'atomisation d'un jet d'eau

liquide par un jet coaxial d'air à permis d'établir une classification des différents modes de brisures du jet (Fig. 12.1).

Trois paramètres sans dimension permettent de définir ces différents régimes : le nombre de Weber (qui met en rapport les forces aérodynamiques déstabilisatrices et les forces stabilisatrices de tension de surface), le nombre de Reynolds liquide et le rapport des flux de quantité de mouvement entre les deux jets :

$$We = \frac{\rho_g.\Delta_U^2.D_l}{\sigma} \tag{12.1}$$

$$Re_l = \frac{U_l.D_l}{\nu_l} \tag{12.2}$$

$$J = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \tag{12.3}$$

où ρ_g et ρ_l sont respectivement les masses volumiques du jet gazeux et du jet liquide, $\Delta_U = U_g - U_l$ est la différence de vitesse entre les jets de gaz et de liquide, D_l le diamètre de jet liquide, σ la tension de surface du liquide et ν_l la viscosité du liquide.

Trois régimes d'atomisation ont été identifiés selon la valeur du nombre de Weber :
- régime de Rayleigh ($We < 30$) : les effets de tension de surface dominent le processus de brisure. Les effets aérodynamiques sont faibles et la taille des gouttes est de l'ordre du diamètre du jet,
- régime de membrane ($30 < We < 100$) : une membrane de liquide est gonflée par le flux de gaz et se désintègre en très petites gouttes,
- régime de fibre ou ligamentaire ($100 < We$) : l'épluchage du liquide génère des ligaments à sa surface, ces fibres sont ensuite brisées en gouttes.

Dans le cas des injecteurs spatiaux, le régime d'atomisation rencontré est du troisième type. Le GdR "Combustion dans les moteurs fusée" a permis de faire un état des connaissances concernant le régime ligamentaire et la caractérisation de plusieurs aspects tels que la longueur du cône potentiel, l'angle du spray, la taille des gouttes générées et leurs vitesses. Ces informations seront utilisées par la suite pour définir le modèle d'injection pour la simulation de l'allumage du moteur VINCI.

12.2 Atomisation primaire

L'atomisation du jet débute par la naissance d'une instabilité de la surface du liquide, dite de Kelvin-Helmholtz [99] (Fig. 12.2). Cette instabilité est due au gradient de vitesse entre les deux jets, qui conduit à la formation de "vagues" bidimensionnelles. La longueur d'onde λ_1 la plus amplifiée est donnée par la relation [124] :

$$\lambda_1 = B\delta_g\sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \tag{12.4}$$

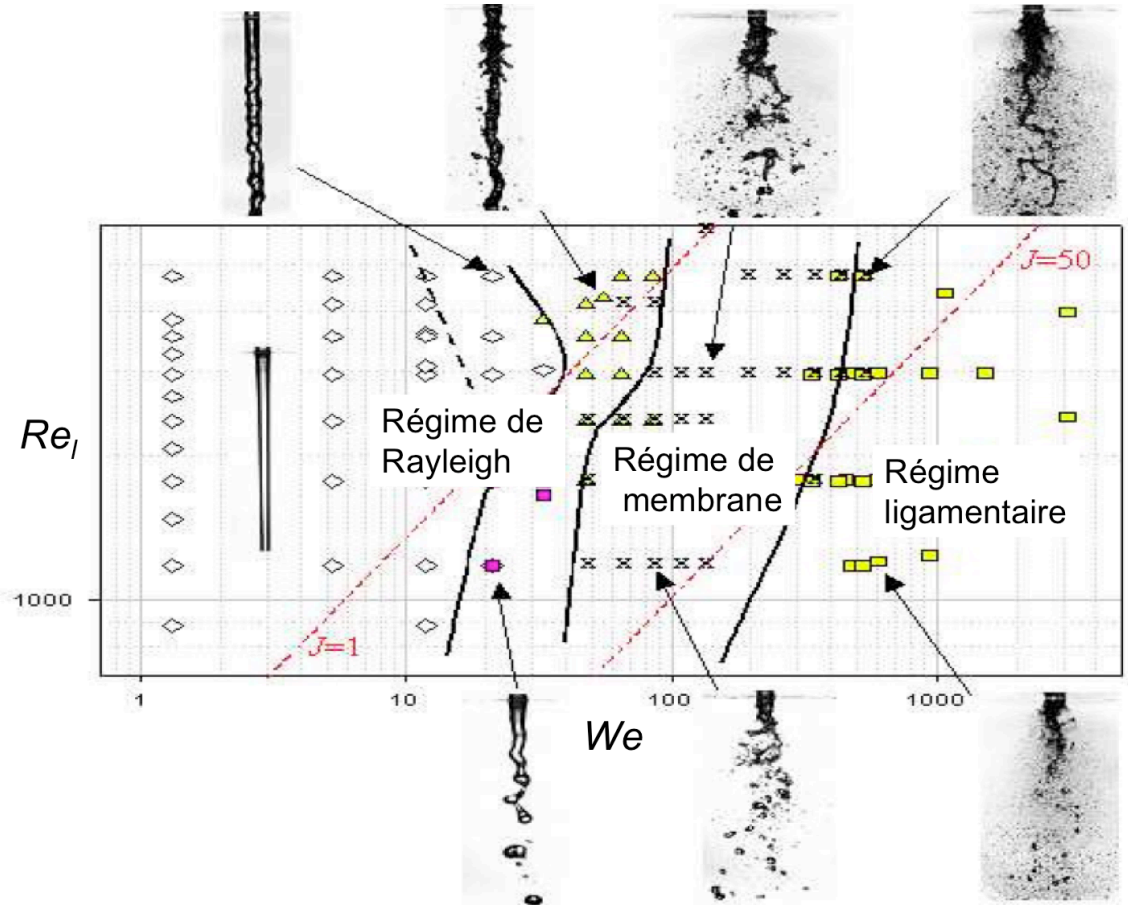


FIG. 12.1 - *Diagramme We-Re pour un injecteur coaxial [55].*

où δ_g est l'épaisseur de couche limite du gaz et B est une constante qui dépend du type d'injecteur ($B = 2$ pour les injecteurs axisymétriques) [124].

Ces ondulations, perpendiculaires à l'axe du jet, subissent ensuite d'autres types d'instabilités qui entraînent la formation de structures plus fines, qui sont encore mal comprises et dépendent fortement du régime d'injection.

Deux théories sont présentées ci-après : la première de Marmottant et Villermaux [124] ne dépend que de la tension de surface, l'autre de Lasheras et Hopfinger [106] s'appuie sur la tension de surface pour des $We \sim 100$ et sur la viscosité pour des We plus élevés.

Marmottant et Villermaux [124] stipulent que la formation des ligaments est due à une instabilité de type Rayleigh-Taylor dont la longueur d'onde est de la forme :

$$\lambda_{rt} = 3.45\delta_g \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{1/3} We_{\delta_g}^{-1/3} \tag{12.5}$$

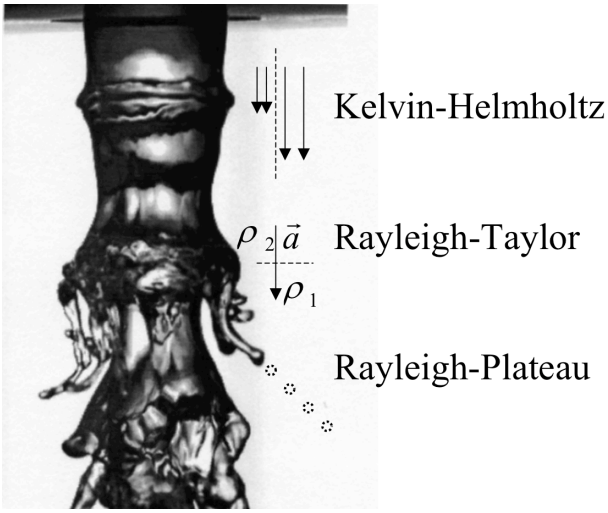


FIG. 12.2 - *Les différents processus d'instabilités impliqués dans l'atomisation primaire d'un jet liquide par un co-courant gazeux (image réalisée par Marmottant [123]).*

D'après ces mêmes travaux [124], la taille des gouttes issues des brisures ligamentaires peut être approchée par :

$$(d_{10})_{rt} \approx \frac{\lambda_{rt}}{10} \tag{12.6}$$

Ces résultats n'ont été validés que pour les écoulements gazeux à faible vitesse ($We < 500$).

Lasheras et Hopfinger [106] suggèrent deux scénarios. Pour des nombres de Weber de l'ordre de 100, le régime d'atomisation peut encore être considéré comme une atomisation de membrane. Dans ce cas précis, les ondulations (de l'instabilité de Kelvin-Helmhotlz) à la surface du liquide sont amplifiées jusqu'à générer des nappes. A l'extrémité de ces nappes se forme un bourrelet de rayon ξ qui se détache et se scinde en gouttes dont le diamètre est proportionnel à la valeur de ξ [106] :

$$(d_{10})_{\sigma} \sim \xi = \frac{\sigma}{\rho_g U_g^2} \tag{12.7}$$

Pour les nombres de Weber plus importants ($We \geq 10^3$), Lasheras et Hopfinger ont supposé que l'étirement des ondulations de la surface du liquide est limité par la diffusion visqueuse du gaz [81]. Dans ces conditions, la couche de mélange du gaz se déstabilise dans la direction transverse à l'écoulement, imposant au liquide des taux d'étirement variables entraînant la formation de ligaments. La taille des gouttes dans ce cas est d'après Hopfinger et al. [81] :

$$(d_{10})_2 = 3.0\sqrt{\frac{\nu_g}{2U_g} D_l \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}} \tag{12.8}$$

avec ν_g la viscosité du gaz. Il faut noter que pour $\delta_g \propto 1/\sqrt{Re_g} \propto U_g^{-1/2}$ on obtient alors : $(d_{10})_\nu \propto U_g^{-3/4}$. Cette tendance est proche des observations de Marmottant et Villermaux [123] réalisées avec des jets eau/air axisymétriques.

12.3 Atomisation secondaire

Une fois que les gouttes et fragments liquides issus de l'atomisation primaire ont été arrachés au cône potentiel, ils sont soumis à l'accélération et à la turbulence du jet gazeux. Une seconde atomisation a alors lieu, produisant des gouttes de plus petite taille. Trois processus principaux entrent en jeu : la brisure par cisaillement, la brisure par la turbulence du gaz et la brisure par collision entre gouttes.

– Brisure par cisaillement :
Lorsqu'une goutte est éjectée du dard liquide (le dard liquide est la région du jet dont la fraction volumique de liquide est statistiquement toujours égale à 1), elle entre dans une région où la vitesse du gaz est bien supérieure à la sienne. La goutte se brise par cisaillement si le nombre de Weber : $We_d = \rho_g(U_g - U_{goutte})^2 d/\sigma$ est supérieur à 20 environ [81] (d est le diamètre de la goutte issue de l'atomisation primaire). Ce mécanisme conduit à la formation de gouttes de taille [81] :

$$d_s \approx 20\frac{\sigma}{\rho_g \Delta_U^2} \tag{12.9}$$

Pour les conditions rencontrées dans les moteurs fusées, les zones où Δ_U est proche de la vitesse d'injection du gaz U_g sont localisées [81] dans la région du cône potentiel du jet de gaz dont la longueur est de l'ordre de celle du dard liquide. A une distance avale de $x/D_l \approx 3$, la vitesse relative Δ_U est environ dix fois plus faible que la vitesse d'injection du gaz, l'atomisation par cisaillement n'est alors plus efficace [81].

– Brisure par turbulence :
Ce type d'atomisation dit de Kolmogorov, est identifié pour la première fois par Lasheras et al. [107]. Lors de ce processus, les gouttes sont scindées par les fortes fluctuations de la vitesse dans la phase gazeuse. Cependant, pour un injecteur type moteur fusée, l'intensité turbulente n'est pas assez importante pour entraîner une brisure des gouttes [81].

– Brisure par collision :
Pour les injecteurs moteur fusée, il semble que le processus de brisure par collision soit de moindre importance face à l'atomisation primaire et à la brisure par cisaillement [81].

12.4 Autres paramètres importants pour la modélisation

12.5 Dard liquide

La longueur du dard liquide L est la longueur sur laquelle la fraction de présence du liquide garde sa valeur maximale en moyenne au cours du temps. En première approximation, le dard liquide peut être approché par un cône.

La longueur L dépend du diamètre du tube mais aussi du rapport des flux de quantités de mouvement $J = (\rho_g U_g^2)/(\rho_l U_l^2)$. Pour des faibles valeurs de J ($J \ll 1$), la déstabilisation est principalement due à la turbulence du jet liquide. Pour des valeurs plus élevées de J ($J > 1$), le jet liquide est épluché par le jet gazeux et la longueur de dard dépend de la turbulence de la couche de mélange entre le gaz et le liquide.

Przekwas et al. [162] proposent une relation pour des valeurs de J modérées :

$$\frac{L}{D_l} = \frac{1}{2C_l J^{2/3}} \left(\frac{\sigma}{\mu_l U_l} \right)^{1/3} \tag{12.10}$$

où C_l est une constante.

D'autres relations empiriques faisant intervenir la tension de surface et la viscosité liquide ont été proposées par Arai et al. [6, 58, 118], Eroglu et al. [58] et Lin et al. [118]. Ces expressions sont de la forme $L/D_l = C_2.We^{-a}.Re_l^b$ avec $0.3 < a < 0.7$ et $0.3 < b < 0.6$.

Les approches de Rehab et al [164] et de Lasheras et al [107] se basent sur l'hypothèse qu'à haut Reynolds et à faible J ($J \leq 30$), l'épluchage du jet liquide ne dépend plus de la tension de surface ni de la viscosité. La relation entre le diamètre du jet liquide et la longueur de dard est alors :

$$\frac{L}{D_l} \approx \frac{6}{\sqrt{J}} \left| 1 - \frac{U_l}{U_g} \right|^{-1} \tag{12.11}$$

Dans le cas du moteur VINCI, $U_g \gg U_l$, la relation (12.11) devient :

$$\frac{L}{D_l} \approx \frac{6}{\sqrt{J}} \tag{12.12}$$

12.6 Angle du spray

Généralement l'angle du spray est plus important que l'angle caractéristique de la couche de mélange qui entoure le dard liquide du fait de l'inertie des gouttes. Cependant les mesures expérimentales de Carreau et al. [30] et de Stepowski et al. [207] ont révélé que la fraction de présence du liquide est très faible à l'extérieur du jet annulaire du gaz. Le demi angle du spray peut être approché par la relation [81] :

$$\theta \approx 45^\circ - tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{J}}{12}\right) \tag{12.13}$$

Il faut noter que cette expression n'est valable que pour des rapports de flux de quantité de mouvement (J) inférieurs à 12^2 (pour des valeurs supérieurs de J, θ est négatif).

12.7 Conclusion

Cette section a résumé brièvement les phénomènes physiques régissant l'atomisation d'un jet liquide par un jet gazeux coaxial. Les résultats dégagés vont être directement utilisés pour définir l'injecteur coaxial dans les simulations LES présentées dans la suite du manuscrit. Plus précisément, trois paramètres sont d'importance majeure : la longueur de cône potentiel, la taille des gouttes et l'angle d'éjection des particules.

Chapitre 13

Modèle de l'injection coaxiale

Il est proposé dans ce chapitre de définir un modèle simplifié d'un injecteur coaxial LOX-GH2 du moteur VINCI en se basant sur les observations et résultats présentés dans la section 12. La formulation Eulerienne de la phase liquide du code AVBP ne dispose pas de modèle pour les atomisations primaire et secondaire. Une première simplification est donc de considérer que les gouttes ont déjà subi les deux types d'atomisation avant d'être injectées dans la chambre (voir Fig. 13.1). Afin de respecter l'interaction gouttes/gaz, les gouttes sont injectées là où elles sont formées, c'est à dire en périphérie du cône liquide qui est lui même matérialisé par une condition limite de mur imperméable (pour le gaz) dans la simulation (Fig. 13.1). Enfin les gouttes injectées sont supposées avoir toutes la même taille.

Ces simplifications ne tiennent pas compte de la présence d'une flamme ou non. Lorsqu'une flamme est accrochée à la lèvre de l'injecteur, prés du jet liquide, la granulométrie des gouttes issues du dard liquide est modifiée puisque les petites gouttes sont rapidement évaporées [129]. Les processus d'atomisation sont aussi impactés : la présence de vapeur d'eau à une température supérieure à 3000 K tend à modifier la tension de surface et la densité du gaz, et Mayer et al. [129] ont observé des différence de taille de ligaments avec ou sans flamme dans un cas Lox/GH_2. Dans l'étude de l'allumage du moteur VINCI, initialement la flamme n'est pas attachée aux injecteurs et les phénomènes cités précédemment ont été négligés.

Dans un premier temps, il faut calculer les paramètres d'injection : longueur de dard, angle d'injection, taille des gouttes et leur vitesse, dans le cas de la séquence d'allumage du moteur VINCI.

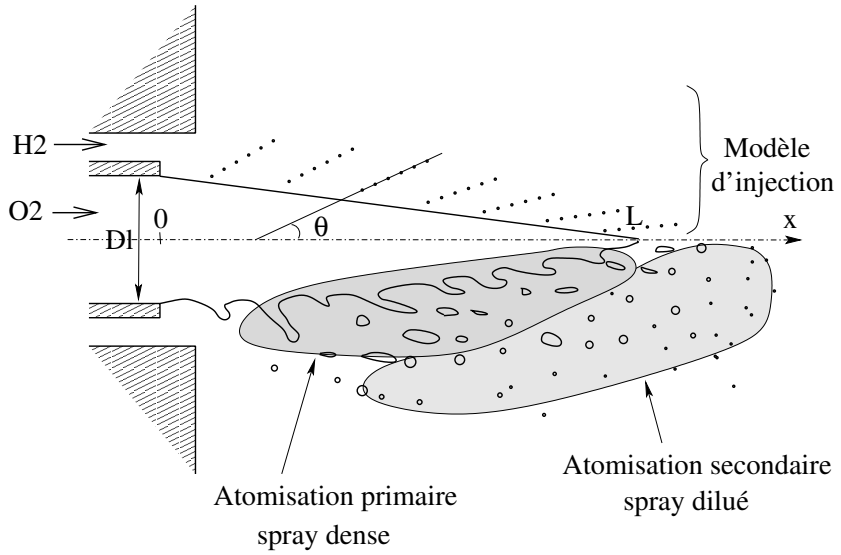


FIG. 13.1 - *Schéma représentant le modèle d'injection et les deux processus d'atomisations dans le cas d'un jet réel (L est la longueur de cône potentiel et θ l'angle entre l'axe du cône et la direction d'éjection des gouttes).*

13.1 Détermination des caractéristiques d'écoulement dans un injecteur VINCI

Pour des raisons de confidentialité, le contenu de cette section a été retiré du manuscrit.

13.2 Injection d'hydrogène

Pour des raisons de confidentialité, le contenu de cette section a été retiré du manuscrit.

13.3 Injection de l'oxygène liquide

Pour des raisons de confidentialité, le contenu de cette section a été retiré du manuscrit.

13.4 Paramètres du modèle d'injection d'oxygène liquide

Pour des raisons de confidentialité, le contenu de cette section a été retiré du manuscrit.

Chapitre 14

Cas tests 2D

Avant de réaliser une simulation en trois dimensions, des cas tests bi-dimensionnels ont été effectués pour évaluer le comportement du modèle d'injection. La géométrie de l'injecteur respecte la géométrie réelle (le biseau de la lèvre a néanmoins été retiré pour ne pas avoir de cellules de maillage trop petites), le dard liquide est une surface imperméable pour le gaz (Fig. 14.1).

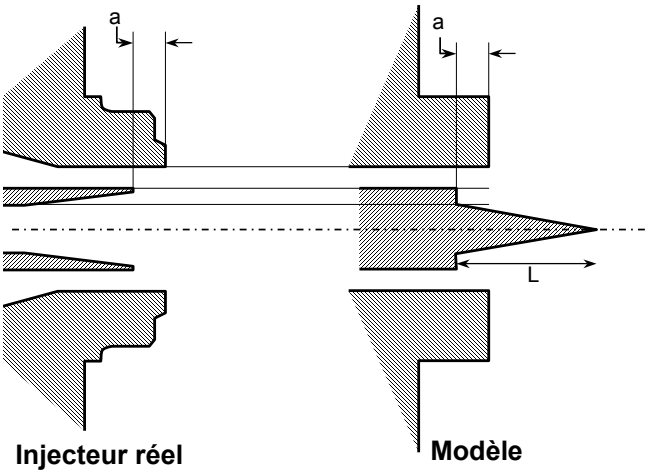


FIG. 14.1 - *Géométrie et dimensions de l'injecteur 2D (pour cause de confidentialité, les dimensions ont été retirées).*

Le cas test choisi pour la validation numérique du modèle est le point de fonctionnement à 0,7 s après le début de l'injection. Cet instant a été choisi pour sa position moyenne dans le transitoire d'allumage.

A partir de l'étude précédente de la section 12, les caractéristiques de l'injection liquide ont été déterminées (table 14.1).

instant	t = 0,7 s
injection H2	
T (K)	180
P (bar)	2,0
U (m/s)	1000
ρ (kg/m3)	0,4
ν (m2/s) NIST	$2,07 \cdot 10^{-6}$
injection O2, $D_l = 3,4mm$	
T (K)	91
U_l(m/s)	1,8
ρ(kg/m3)	1131
ν (m2/s) NIST	$1,63 \cdot 10^{-7}$
σ (N/m) NIST	$13 \cdot 10^{-3}$
Nombres caractéristiques de l'écoulement	
We	$1,05 \cdot 10^{5}$
Re_l	$3,8 \cdot 10^{4}$
J	110
Paramètres d'injection liquide	
L (mm) (relation 12.12)	4
θ (rad)	0,26
Ux_{inj} (m/s)	1,8
Uy_{inj} (m/s)	0,3
d_{10} (μm)	20
Fraction volumique liquide	0,628
Nbre de gouttes par m^3	$2 \cdot 10^{14}$

TAB. 14.1 - *paramètres d'injection du cas test 2D*

Les paramètres diphasiques de l'oxygène liquides ont été évalués sur un cas d'évaporation 0D avant d'être utilisés dans le code AVBP (cf. Annexe C).

14.1 Domaine et maillage

Le maillage est présenté Fig. 14.2. La même topologie de maillage sera utilisée lors de la simulation 3D du moteur VINCI. La taille caractéristique des plus petites mailles est de l'ordre de 0,2 mm ce qui correspond à 1/5 de l'épaisseur de la lèvre de l'injecteur.

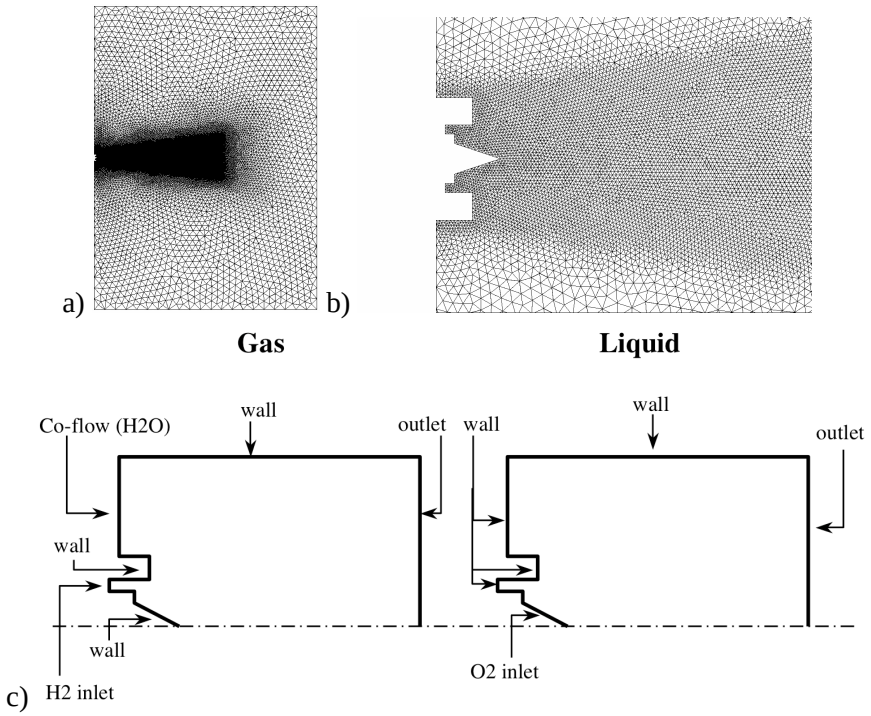


FIG. 14.2 - *a) Maillage du domaine de calcul, b) maillage de la zone proche injecteur et c) Conditions aux limites.*

Un co-courant de vapeur d'eau a été ajouté autour de l'injecteur (Fig. 14.2c) pour représenter la torche. Pour les tests d'évaporation non réactifs la vapeur d'eau est injectée à 400 K et pour les tests réactifs, la vapeur est introduite à une température de 1500 K pour déclencher l'allumage.

14.2 Paramètres numériques

Les tests non-réactifs et réactifs bi-dimensionnels ont été réalisés avec un schéma Taylor Galerkin à deux étapes TTG4A [100] (cf. section 5.2). Le modèle de sous-maille pour la turbulence est le modèle de Smagorinsky [197]. La phase liquide est suivie par une méthode Eulérienne (le mouvement décoléré n'est pas pris en compte) et la cinétique chimique est modélisée par le schéma H2O2-GL7-1 (cf. Chapitre 6).

14.3 Résultats non réactifs

Pour le cas froid, le co-courant de vapeur d'eau s'écoule à 20 m/s à une température de 500K. Les champs de fraction volumique de liquide et de fraction massique d'oxygène sont présentés dans les Fig. 14.3 et 14.4.

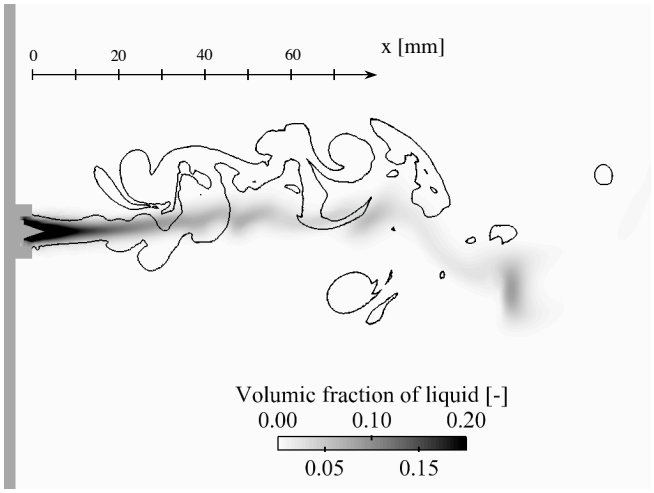
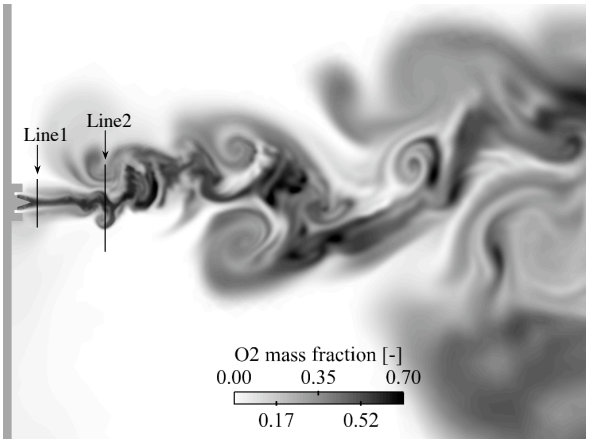


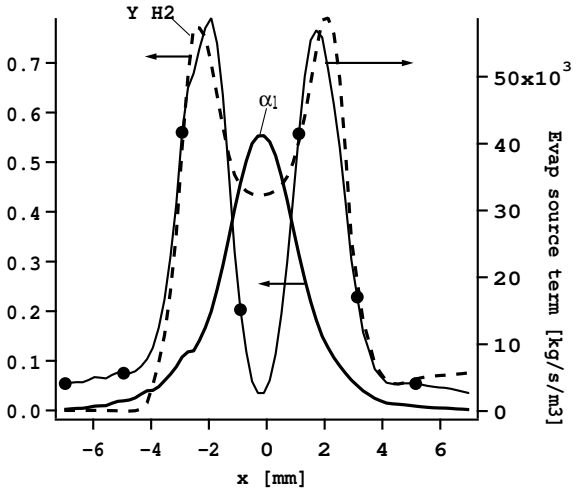
FIG. 14.3 - *Champ instantané de la fraction volumique de liquide et iso-ligne basée sur la fraction massique d'hydrogène :* $Y_{H_2} = 0,2$.

L'isoligne de fraction massique d'hydrogène repérée sur la Fig. 14.3 montre que le jet d'hydrogène se déstabilise à 20 mm environ en aval de l'injecteur alors que le jet liquide d'oxygène n'est perturbé qu'à partir de 40 mm à cause de l'inertie importante des gouttes. Un nombre de Stokes des gouttes injectées St peut être évalué : $St = \tau_l/\tau_{inj}$ avec $\tau_l = \rho_l d_l^2/(18\mu_{H_2})$ le temps de relaxation des gouttes et $\tau_{inj} = R_{lox}/U_l$ le temps caractéristique d'injection liquide ($R_{lox} = 1,2\,mm$ est le rayon du tube d'injection). Le temps de relaxation des gouttes est environ de $\tau_l \approx 30\,ms$ alors que le temps caractéristique d'injection $\tau_{inj} \approx 0,7\,ms$ ce qui donne un nombre de Stokes de $St \approx 43$.

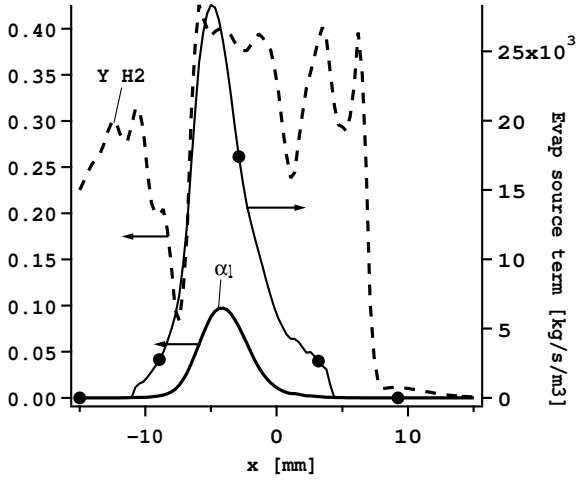
La figure 14.4a présente de champ de fraction massique d'oxygène gazeux issu de l'évaporation. Deux coupes ont été réalisées à travers les jets de l'injecteur (line1 et line2). Les profils spatiaux de la fraction massique d'hydrogène, la fraction volumique de liquide et le taux de transfert de masse dû à l'évaporation sont présentés sur les figures 14.4b et c. Au niveau de la première coupe (line1), il est mis en évidence que l'évaporation a lieu en périphérie du jet liquide, dans le jet d'hydrogène où la pression partielle d'oxygène est faible. Sur l'axe de l'injecteur, la densité volumique de liquide étant très importante, l'évaporation arrive rapidement à la saturation. Sur la seconde ligne (line2), le jet gazeux s'est déstabilisé, ce qui augmente le mélange et diminue la concentration de vapeur d'oxygène à proximité du jet liquide. Sous ces conditions, l'évaporation a lieu dans la zone de forte fraction volumique de liquide.



a)



b)



c)

FIG. 14.4 - *(a) Champ instantané de la fraction massique d'oxygène. Profils de fraction massique d'hydrogène ($Y\ H_2$), de fraction volumique de liquide (α_l) et de taux de transfert de masse dû à l'évaporation à travers les jets de l'injecteur : (b) line1 et (c) line2.*

14.4 Résultats réactifs

Après avoir allumé le jet, la flamme se stabilise dans la couche de mélange entre l'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux (Fig. 14.5). Il est cependant constaté que la flamme n'est pas en contact direct

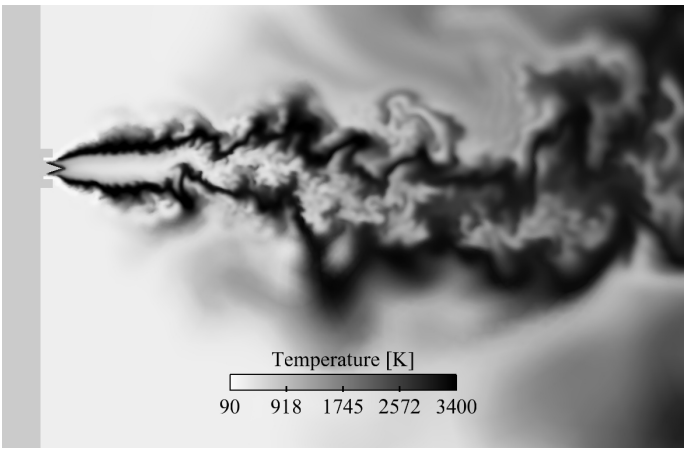


FIG. 14.5 - *Champ instantané de température du cas test 2D allumé.*

avec le jet liquide (Fig. 14.6a) contrairement aux observations expérimentales de Mayer et Tamura [130] et Mayer et al. [129]. L'explication est que le jet de Lox est représenté par un spray de gouttes dont l'évaporation est plus rapide qu'un jet réel, qui est constitué de ligaments de tailles significatives même à plusieurs dizaines de diamètres en aval de l'injecteur. Mayer [131] et Mayer et al. [130, 129] ont observé par ombroscopie qu'un jet d'oxygène liquide atomisé par un jet annulaire d'hydrogène ($U_l = 14\,m/s$, $U_{GH_2} = 340\,m/s$ et $P = 1,8\,bar$) est composé de grosses structures liquides pour des positions avales de l'ordre de 60 diamètres. D'autre part, ces visualisations expérimentales montrent qu'aucune goutte n'est présente en périphérie du jet liquide, dans la région où la flamme se stabilise. Ces structures fines sont très rapidement évaporées et le jet liquide est relativement lisse [130, 131, 129]. La représentation du jet en fine gouttes surestime donc l'évaporation, ce qui induit une dilatation volumique importante et un éloignement de la zone de combustion par rapport à l'axe du jet liquide. Les hypothèses du modèles d'injection ne sont plus valables lorsque la flamme est stabilisée et une autre méthode serait à développer pour simuler ce régime.

Sur la ligne de coupe "line1", une structure de flamme de diffusion est mise en évidence avec d'un côté l'oxygène gazeux issu de l'évaporation du spray et l'hydrogène du jet d'injection. La Figure 14.7 montre la zone de stabilisation de la flamme juste derrière la lèvre de l'injecteur. Il est observé que la flamme se stabilise dans une zone de recirculation, ce qui est en bon accord avec de nombreux résultats expérimentaux [28, 89, 129].

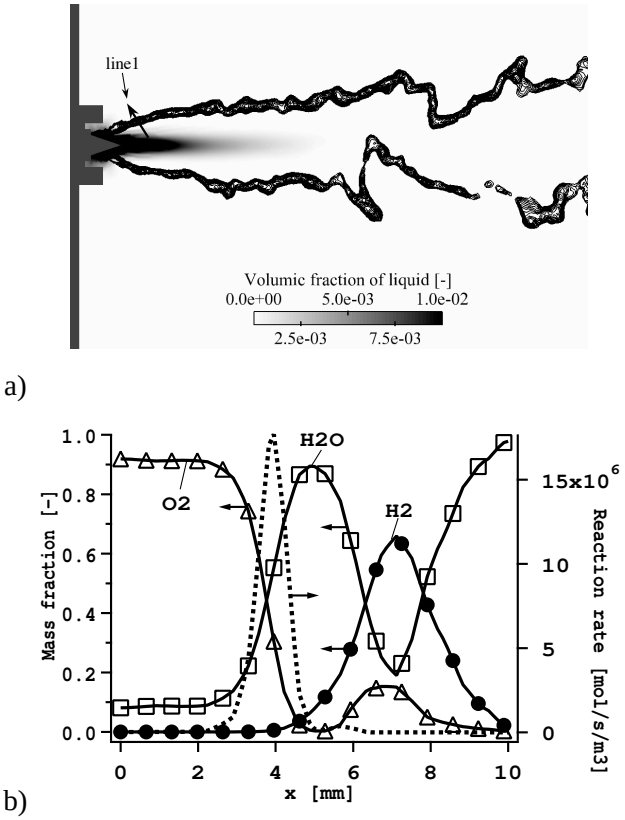


FIG. 14.6 - *(a) Position de la flamme par rapport au jet liquide, (b) profils des espèces et du taux de réaction sur la ligne "line1".*

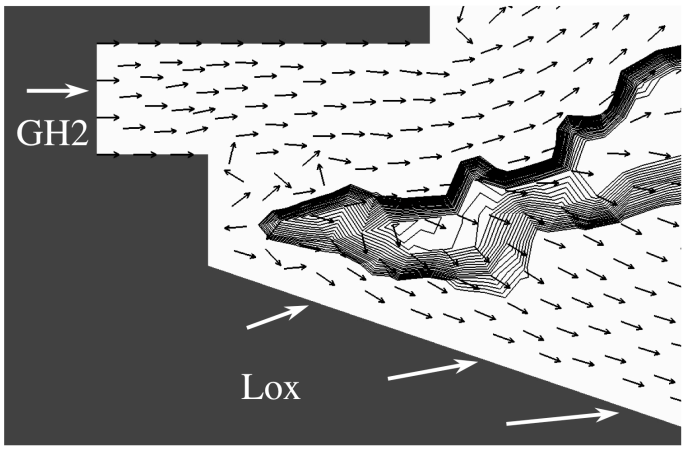


FIG. 14.7 - *Point de stabilisation de la flamme : flèches=direction de l'écoulement du gaz, iso-lignes=taux de réaction.*

14.5 Conclusion

Ce cas simple de validation en deux dimensions a montré que le modèle d'injecteur coaxial permet de reproduire des comportements physiques proches de ceux observés dans des expériences moteur fusée [28, 89, 129, 130] en terme de topologie de flamme et de stabilisation. Ce modèle d'injection est utilisé dans la section suivante dans la simulation de l'allumage du moteur VINCI.

Chapitre 15

Allumage 3D en configuration simplifiée

La géométrie de la configuration simplifiée se compose de la torche d'allumage et de deux injecteurs de la première couronne (Fig. 15.1). Cette simplification permet de réaliser un calcul représentatif du point de vue physique de la toute première phase de l'allumage du moteur pendant laquelle la première couronne d'injecteurs est allumée par la torche, tout en garantissant un temps de restitution acceptable. Cette configuration permet en effet de répondre à tous les problèmes majeurs intervenant dans un allumage d'un moteur fusée cryotechnique : injection liquide, jet sous-détendu, chimie H_2/O_2 et allumage d'un jet coaxial par un jet de gaz chaud. Les sections précédentes ont montré que le code AVBP est capable de reproduire des allumages de jets non prémélangés (Chapitre III et Chapitre IV), le Chapitre IV a aussi montré que la chimie H2O2-GL7-1 est bien adaptée à la problématique moteur fusée et que les chocs peuvent être traités par l'approche de Cook et Cabot [44]. La section précédente (section 14) a montré que l'approche Eulérienne de transport de la phase liquide couplée à un modèle simple d'injection coaxial permet de reproduire le comportement d'une flamme stabilisée aux lèvres d'un injecteur $Lox - GH_2$ d'un moteur fusée. L'intérêt de la dernière étape de simulation sur la configuration 3D simplifiée du moteur VINCI est de rassembler dans un même calcul toutes les problématiques précédentes. Le calcul d'une configuration plus complexe (plus d'injecteurs coaxiaux par exemple) n'est limité que par le coût de calcul.

15.1 Géométrie et maillage

Les simplifications géométriques sont les suivantes : les diamètres de la chambre et du col de sortie ont été divisés par un facteur 2 et seuls 2 des XXX injecteurs de la configuration réelle sont opérationnels.

Les caractéristiques géométriques et les dimensions de la configurations 3D simplifiée ont été retirées du manuscrit pour cause de confidentialité.

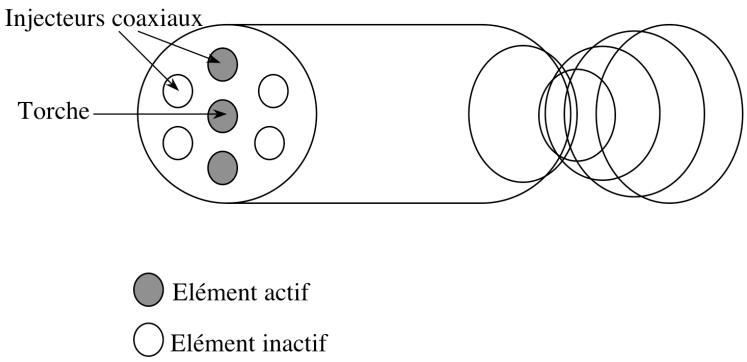


FIG. 15.1 - *Schéma de la géométrie simplifiée. Note : la géométrie comporte les six injecteurs de la première couronne, cependant seuls les deux situés sur l'axe y sont alimentés et ont une résolution de maillage suffisante pour réaliser le calcul.*

15.2 Paramètres numériques

La séquence d'allumage a été réalisée avec le schéma Taylor Galerkin à deux étapes TTG4A [100] permettant une précision d'ordre trois en temps et en espace. Ce schéma possède l'intérêt de limiter les erreurs dispersion au niveau des fronts comme les chocs et les accumulations liquides présents dans le calcul VINCI. Le modèle de sous-maille pour la turbulence est le modèle de Smagorinsky [197]. La phase liquide est suivie comme le gaz par une méthode Eulérienne (cf. Partie I). Le terme source chimique suit la loi d'Arrhénius basée sur le schéma cinétique à sept étapes et six espèces H2O2-GL7-1 (présenté Chapitre 6). Les chocs sont traités avec la méthode de Cook et Cabot [44].

15.3 Conditions initiales, séquence d'injection et conditions aux limites

Le calcul d'allumage reproduit un essai au sol. La chambre est initialement remplie de diazote à une pression de 1 atm et une température de 300 K. La séquence de calcul suit une procédure proche d'un allumage réel (le schéma illustrant la procédure d'allumage a été retiré du manuscrit pour cause de confidentialité). La séquence de calcul ne durant que 10 ms, les débits injectés ont été supposés constants. Chaque phase d'injection débute par une augmentation linéaire de débit d'une durée de 0.1 ms. Dans le calcul, le temps zéro coïncide avec le début de l'injection de l'oxygène liquide.

Le choix du point de fonctionnement a été retiré du manuscrit pour cause de confidentialité.

Les conditions aux limites de la simulation sont présentées schématiquement sur la Fig. 15.2. Pour les deux phases (liquide et gazeuse) les murs sont des murs glissants adiabatiques. Pour le gaz, la sortie est relaxée vers une pression de 1 atm.

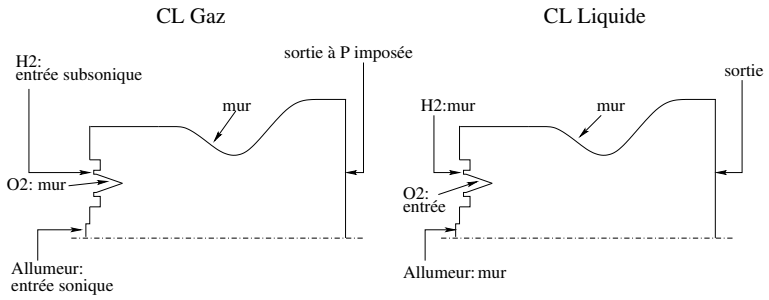


FIG. 15.2 - *Schéma des conditions aux limites du calcul d'allumage VINCI des points de vue du gaz et du liquide.*

Conditions d'injection de l'allumeur :
Pour des raisons de confidentialité, la description précise des conditions limites de l'allumeur a été retirée du manuscrit.

P_s^a [bar]	T_s^a [K]	V [m/s]
≈ 10	≈ 3000	≈ 1000

TAB. 15.1 - *Conditions de pression, de température et de vitesse sur la frontière de l'allumeur.*

Conditions d'injection de l'hydrogène pour un injecteur :
Pour des raisons de confidentialité, la description précise des conditions limites d'hydrogène a été retirée du manuscrit.

$P_s^{H_2}$ [bar]	$T_s^{H_2}$ [K]	$\dot{m}^{H_2}$ [g/s]
≈ 2	≈ 200	confidentiel

TAB. 15.2 - *Conditions de pression, de température et de débit massique d'injection de l'hydrogène.*

Conditions d'injection de l'oxygène liquide pour injecteur :
Pour des raisons de confidentialité, la description précise des conditions limites d'oxygène liquide a été retirée du manuscrit.

$\dot{m}^{Lox}$ [g/s]	U_l [m/s]	d_l [μm]	n_l [-]	T_l [K]
confidentiel	≈ 1	≈ 20	$\approx 1.10^{14}$	≈ 90

TAB. 15.3 - *Conditions d'injection de l'oxygène liquide.*

15.4 Analyse de la séquence d'allumage

15.5 Analyse globale

Cette première section d'analyse est consacrée à l'évolution temporelle de grandeurs intégrales caractéristiques de la combustion diphasique (Tab. 15.4). Ces grandeurs globales sont obtenues par intégration sur le volume total du domaine de calcul de la masse d'oxygène gazeux et liquide, le taux de consommation d'oxygène par la flamme et le taux d'évaporation.

Masse totale d'oxygène gazeux [kg] :	m_{Gox}	=	$\iiint_V \rho Y_{O_2} dV$
Masse totale d'oxygène liquide [kg] :	m_{Lox}	=	$\iiint_V \rho_l \alpha_l dV$
Taux global de consommation d'oxygène [kg/s] :	Ω_{chem}	=	$\iiint_V \dot{\omega}_{O_2} dV$
Taux global d'évaporation [kg/s] :	Ω_{ev}	=	$\iiint_V \Gamma dV$

TAB. 15.4 - *Définitions des grandeurs intégrales dans le volume V du domaine de calcul.*

La Figure 15.3 présente les évolutions temporelles de ces grandeurs. Cette figure permet d'observer que l'emballement de la cinétique a lieu environ $0,6\,ms$ après le début de l'injection de l'oxygène, concordant avec l'allumage des jets (à $t \approx 0\,ms$ le taux de consommation du O_2 n'est pas nul du fait d'une réaction entre l'oxygène en excès de la torche et l'hydrogène du film de refroidissement). L'augmentation du taux global de consommation de l'oxygène est couplé à un pic du taux d'évaporation et à une diminution de la masse de liquide présente dans la chambre qui n'avait cessé d'augmenter jusqu'alors. Pour $0,6\,ms < t < 2,6\,ms$, la masse d'oxygène gazeux continue d'augmenter alors que le taux de consommation est plus important que le taux d'évaporation. Cet effet est dû à la présence de la torche qui injecte de l'oxygène gazeux dans ses gaz brûlés. Dans le même temps la masse totale de liquide diminue pour atteindre une valeur d'équilibre vers $t \approx 2\,ms$ après le début de l'injection de l'oxygène. A $t = 2,6\,ms$, la torche est désactivée. Le taux de consommation d'oxygène devient alors égal au taux d'évaporation (car l'évaporation est le facteur limitant) conduisant à une stabilisation de la masse globale d'oxygène gazeux. A $t = 3,5\,ms$, le régime stationnaire est atteint.

Cette première étude portant sur des grandeurs intégrales permet de distinguer quatre phases majeures de la séquence d'allumage :

1. ($0\,ms < t < 0,6\,ms$) : début d'injection de l'oxygène liquide, réaction faible confinée à la torche, augmentation de la masse totale de liquide ;
2. ($t \approx 0,6\,ms$) : emballement cinétique dû à l'allumage des jets, pic d'évaporation ;
3. ($0,6\,ms < t < 2,6\,ms$) : transitoire vers un régime stabilisé, diminution de la masse totale d'oxygène liquide ;
4. ($2,6\,ms < t$) : régime stabilisé, la quantité d'oxygène évaporée est consommée par réaction et le taux d'évaporation est égal au débit liquide injecté.

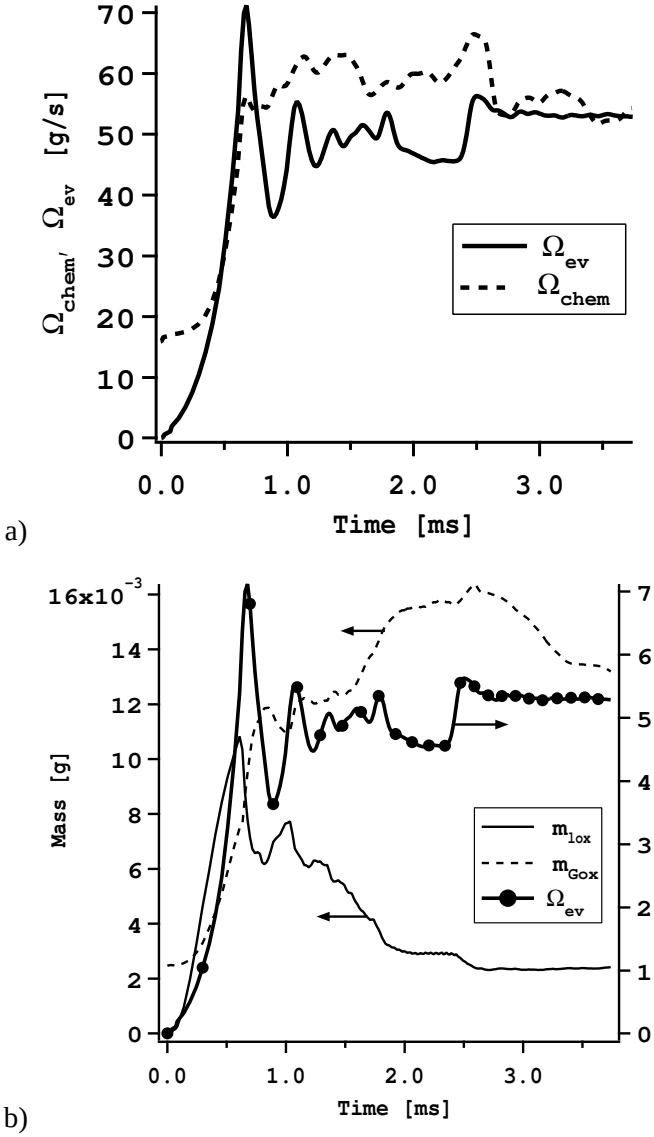


FIG. 15.3 - *Evolutions temporelles de grandeurs globales : a) taux d'évaporation et de consommation de l'oxygène ; b) masses totales d'oxygène liquide et gazeux et taux d'évaporation.*

15.6 Description générale de la séquence d'allumage

La Figure 15.4 illustre les différentes étapes de la séquence d'allumage. Sur cette figure, composée de solutions instantanées, trois iso-surfaces sont montrées, basées sur : la fraction massique d'hydrogène gazeux égale à 0.5 (vert), la fraction volumique de liquide égale à 0,001 (bleu) et le taux de réaction de la réaction 1 du schéma cinétique H2O2-GL7-1 (égal à $10^6\ mol/s/m^3$) colorée par la température. Sur

la Fig. 15.4a, seul l'allumeur est actif ainsi que la couronne de refroidissement injectant de l'hydrogène gazeux dans la chambre. Une zone de réaction est présente entre le film de refroidissement et la torche débitant des gaz brûlés chauds contenant de l'oxygène gazeux. La seconde phase de l'allumage est caractérisée par le début de l'injection de l'hydrogène gazeux (Fig. 15.4b). A $t = 0.0\ ms$, l'injection de l'oxygène liquide commence (Fig. 15.4c) et à $t \approx 0.5\ ms$, les premières zones de réaction apparaissent dans les régions avales des jets (Fig. 15.4d). Ces zones réactives, d'abord confinées aux régions comprises entre la torche et les injecteurs, se propagent dans la couche de mélange des jets amorçant ensuite leurs remontées vers la plaque d'injection (Fig. 15.4e). A $t = 1.5\ ms$ la première des deux flammes atteint l'injecteur (injecteur du haut) (Fig. 15.4f) et ce n'est qu'à $t = 1.8\ ms$ que les deux flammes sont accrochées aux lèvres d'injection. Enfin, à $t = 2,6\ ms$ l'allumeur est désactivé (Fig. 15.4g) et les deux flammes stables restent accrochées aux lèvres des injecteurs entre l'hydrogène gazeux et l'oxygène liquide (Fig. 15.4h).

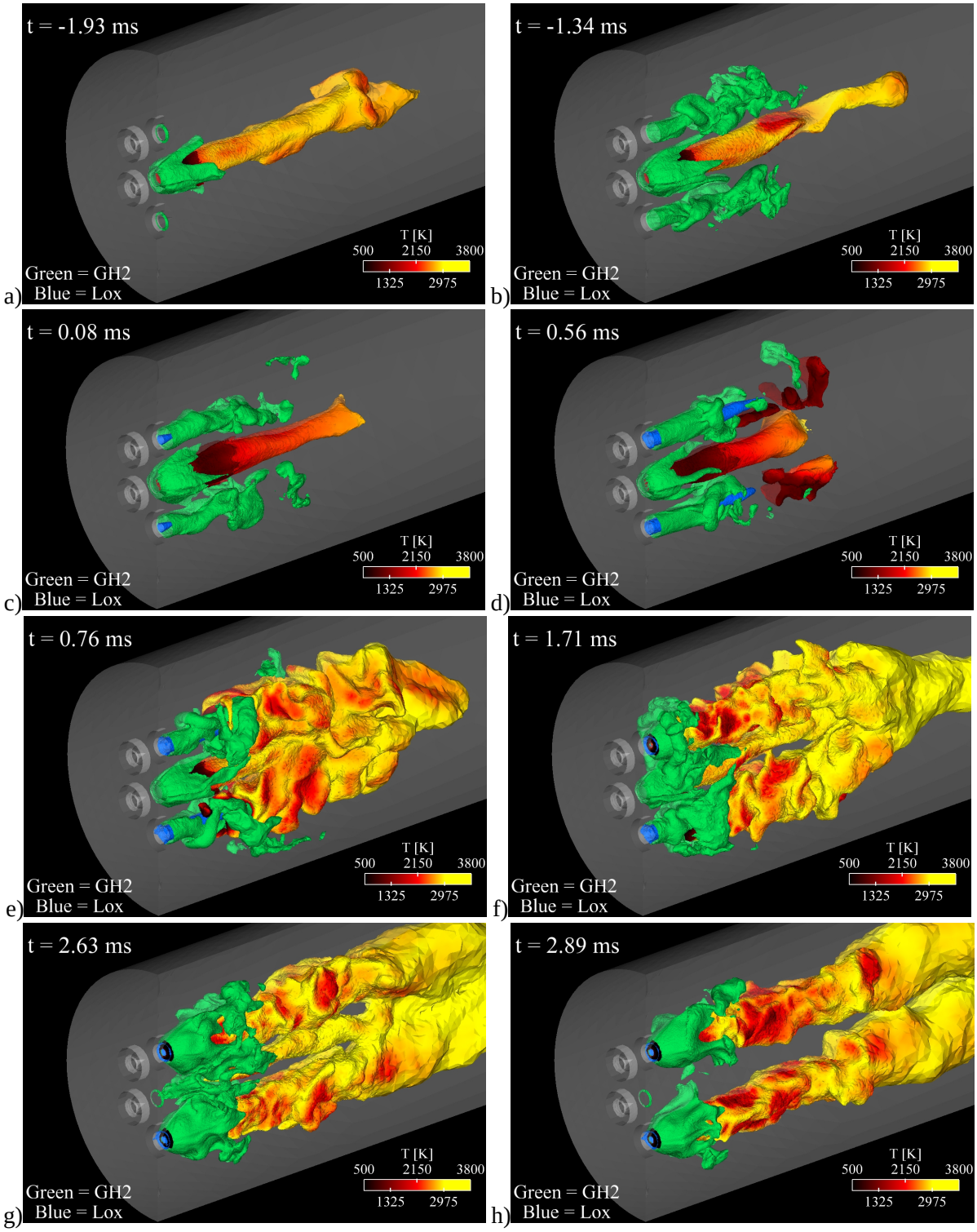


FIG. 15.4 - *Description de la séquence d'allumage simulée : iso-surfaces de fraction massique d'hydrogène gazeux égale à 0,5 (vert), de la fraction volumique de liquide égale à 0,001 (bleu) et de taux de réaction (égal à* $10^6\ mol/s/m^3$*) colorée par la température.*

15.7 Position de la zone de réaction

Dans cette section, la localisation précise des différentes zones de réaction est étudiée sur trois coupes planes de la chambre de combustion comme indiqué sur la Fig. 15.5 . La surface A est une coupe longitudinale de la chambre passant par le centre des deux injecteurs actifs et de la torche (plan z=0cm), les surfaces B et C sont des coupes transverses situées respectivement à 2cm et à 4cm de la plaque d'injection (plans x=2cm et x=4cm).

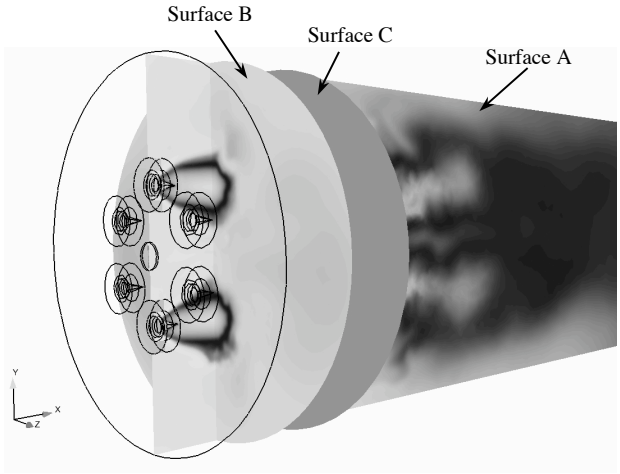


FIG. 15.5 - *Positions des différentes coupes : Surface A : z=0 ; Surface B : x=2cm et Surface C : x=4cm (l'origine x=0 est située sur la plaque d'injection).*

La figure 15.6 présente des champs instantanés de température et des iso-lignes du taux de consommation de la réaction $H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2OH$ sur les trois plans de coupe décrits Fig. 15.5. Le temps indiqué sur chaque figure a pour origine le début de l'injection de l'oxygène liquide. A l'instant $t = 0,01\ ms$ (Fig. 15.6a), la seule source de chaleur provient de la torche. Le caractère sous-détendu du jet de l'allumeur générant une bouteille de Mach est clairement visible Fig. 15.6a et b (voir Section 5.4 et Annexe D pour la méthode de traitement des chocs). A $t = 0,01\ ms$, des zones réactives de faible intensité sont présentes dans le jet de la torche où l'hydrogène du film de refroidissement et des injecteurs réagit avec l'oxygène résiduel issu de l'allumeur. A $t = 0,56\ ms$ et $t = 0,63\ ms$ (Fig. 15.6b et c), l'allumage des jets se déclenche. Les zones de réaction confinées initialement à la région axiale de la chambre s'étendent aux jets suite à l'évaporation de l'oxygène injecté. Ces zones de réaction se referment pour former deux flammes tubulaires comprises dans les couches de mélange entre l'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux (Fig. 15.6d et e). Ces flammes se propagent ensuite vers la plaque d'injection (Fig. 15.6e et f) et à $t = 1,5\ ms$ la première des deux flammes atteint l'injecteur (Fig. 15.6g) suivie par la seconde 0,3 ms plus tard (Fig. 15.6h) . Enfin, après avoir supprimé l'allumeur ($t = 2,6\ ms$) les deux flammes restent accrochées de façon stable aux lèvres des injecteurs (Fig. 15.6i).

La Figure 15.7 présente les positions des points les plus amont des flammes des deux injecteurs (notés "inj1" pour l'injecteur situé à y=17,7 mm et "inj2" pour l'autre). Cette figure montre clairement la dissymétrie de la propagation de flamme observée sur la Fig. 15.6 avec un retard de 0,3 ms de la seconde flamme sur la première. La durée de la phase de propagation ($\approx 1,5\ ms$) est comparable à celles observées par Schmidt et al. [181] et Gurliat et al. [76] dans des configurations d'allumage de jet GH2/Lox dans des conditions similaires (pression chambre de l'ordre de 1bar et flamme initiée par laser à 40mm de la plaque d'injection). Ces deux expériences réalisées sur le banc M3, présentées dans le Chapitre IV, montrent que le temps de remontée de la flamme dans la couche de mélange de l'injecteur coaxial est compris entre 1 et 2 ms.

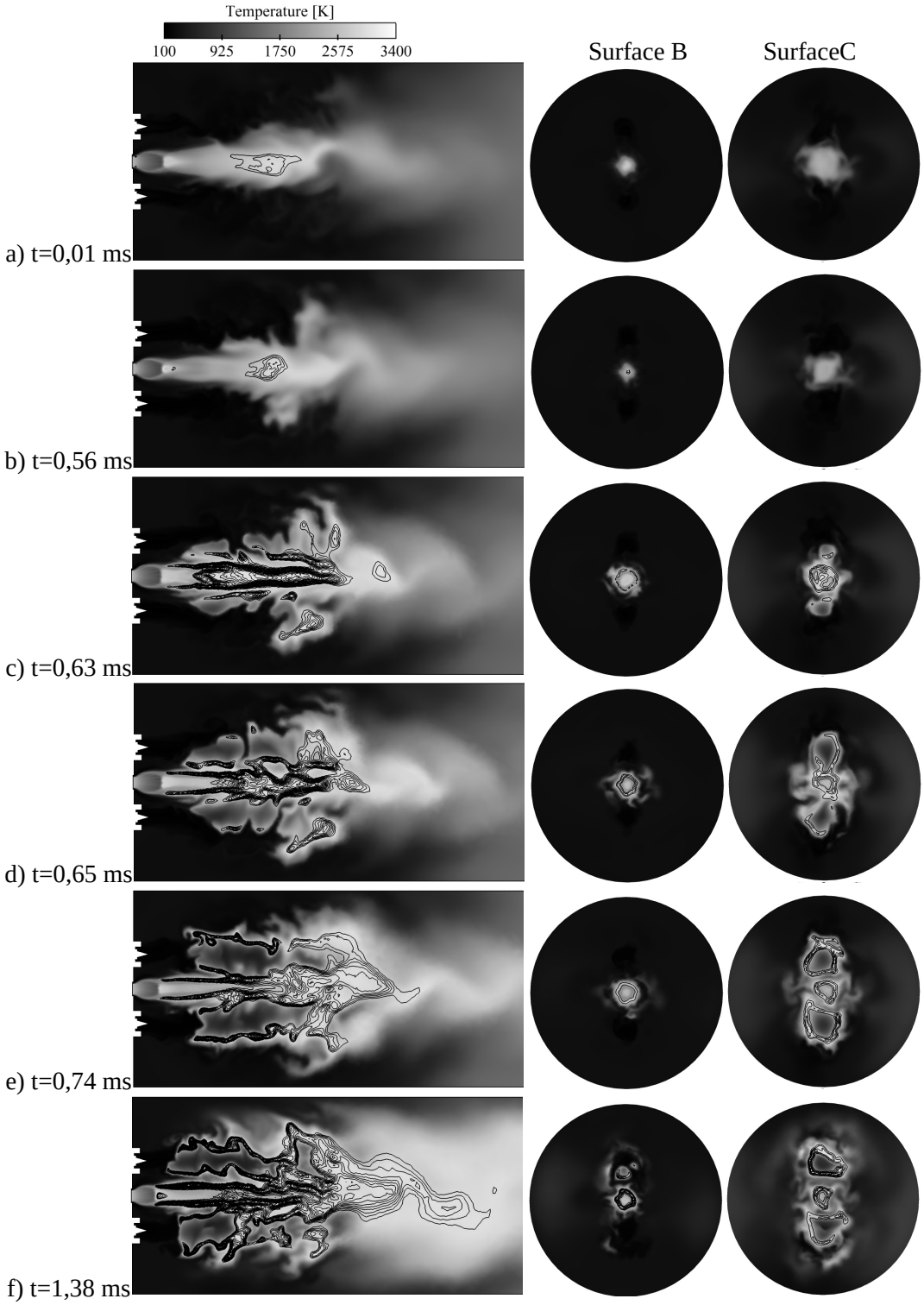


FIG. 15.6 - *Position de la zone de flamme au cours de l'allumage : champs de température et iso-lignes basées sur le taux de consommation de la réaction $H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2OH$. Le temps indiqué a pour origine l'instant d'ouverture des valves O2.*

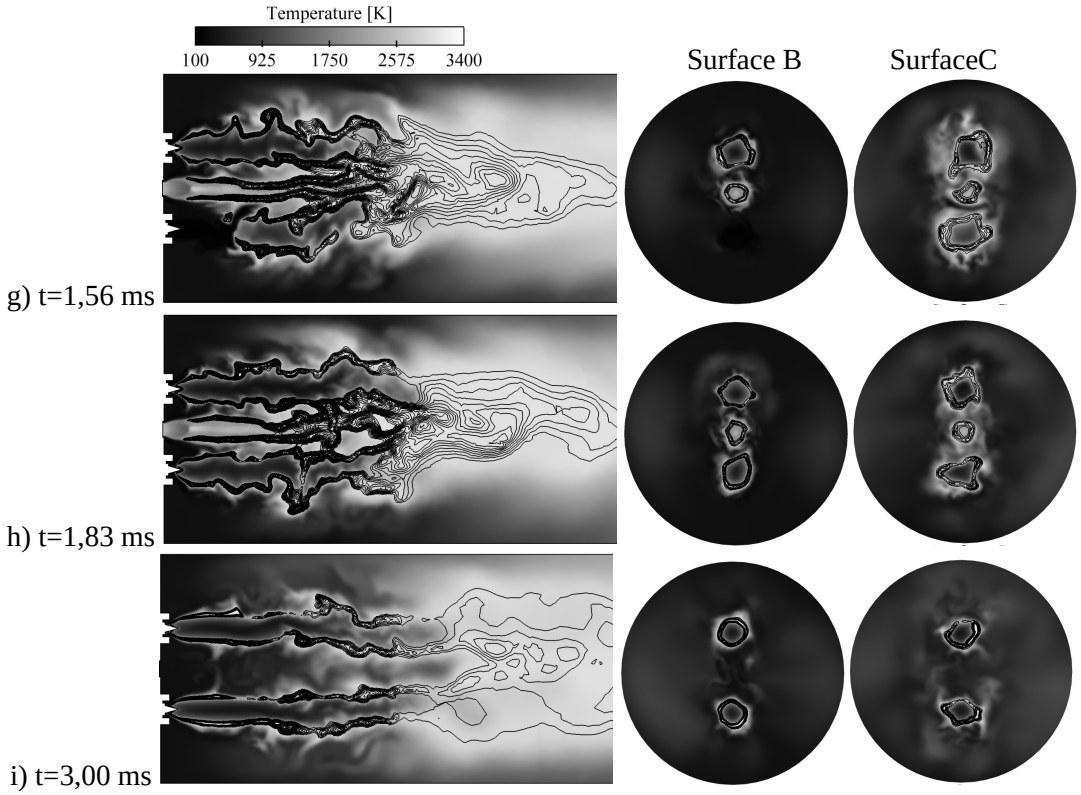


FIG. 15.6 - *(suite) Position de la zone de flamme au cours de l'allumage : champs de température et iso-lignes basées sur le taux de consommation de la réaction $H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2OH$. Le temps indiqué a pour origine l'instant d'ouverture des valves O2.*

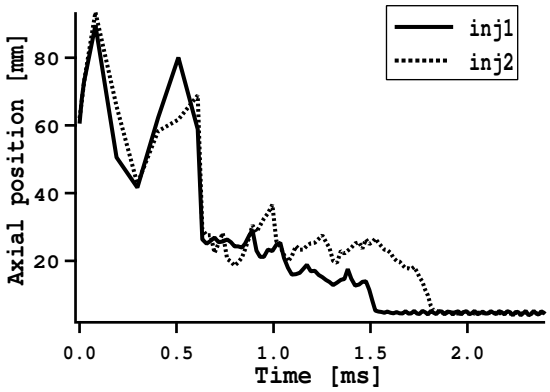


FIG. 15.7 - *Position axiale du point amont de la flamme au cours du temps pour les deux injecteurs actifs.*

15.8 Régimes de combustion et interaction flamme/jet liquide

De même que pour l'allumage de jet de méthane de la partie II et l'allumage de la chambre M3 de la partie IV, le régime de combustion (prémélangé et/ou diffusion) est une information importante permettant d'analyser les processus de propagation de la flamme. Classiquement, le régime de combustion est mis en évidence par l'indice de Takeno [232] : $\dot{\omega}^*_{O_2} = \dot{\omega}_{O_2} \cdot (\nabla Y_{H_2} \nabla Y_{O_2})/(|\nabla Y_{H_2} \nabla Y_{O_2}|)$ qui indexe le taux de consommation d'oxygène par le produit normalisé des gradients d'O_2 et de H_2. Dans le cas où les gradients ont le même signe ($\dot{\omega}^*_{O_2} = +\dot{\omega}_{O_2}$), l'oxydant et le réducteur arrivent du même coté du front de flamme et la combustion est prémélangée ; dans le cas contraire ($\dot{\omega}^*_{O_2} = -\dot{\omega}_{O_2}$) la combustion s'effectue en régime de diffusion.

La Figure 15.8 présente des champs instantanés de richesse auxquels ont été superposés l'indice de Takeno et le taux d'évaporation. Ces différentes grandeurs permettent d'identifier les régimes de combustion présents et d'expliquer leurs apparitions. A 0,4 ms après le début de l'injection d'oxygène liquide (Fig. 15.8a), une zone réactive consomme en mode de prémélange (zone noire) un mélange partiel d'hydrogène et d'oxygène gazeux résultant de l'évaporation du jet liquide dans le jet d'hydrogène (Phase de prémélange). Une zone de réaction de diffusion est visible dans le jet de l'allumeur, à l'aval de la bouteille de Mach. Cette zone consomme l'hydrogène résiduel de la flamme de prémélange et l'oxygène gazeux contenu dans les gaz brûlés de la torche. A $t = 0,56\,ms$ (Fig. 15.8b), la zone de réaction de prémélange se propage dans les régions en aval des jets. A $t = 0,63\,ms$ (Fig. 15.8c), la flamme de prémélange atteint les régions denses en oxygène liquide déclenchant une augmentation significative du taux d'évaporation observée précédemment sur la Fig. 15.3, lors de l'analyse temporelle (le maximum du taux d'évaporation global est atteint à $t = 0,6\,ms$). La création importante d'oxygène gazeux par évaporation fait apparaître des zones réactives en mode de diffusion entre 2 et 6cm en aval des jets (Fig. 15.8c). Cette phase est appelée "Phase de transition" pendant laquelle des régions de mélange très riche (dues à l'évaporation très importante de l'oxygène) sont consommées par diffusion alors que d'autres brûlent en prémélange. La combustion en diffusion des poches riches ne doit pas être confondue avec la "combustion de groupe" de la classification de Borghi [20] et de Réveillon et Vervisch [166] qui n'a de signification que dans une approche Lagrangienne. Dans une approche Euler-Euler, la combustion ne "voit" pas les gouttes (la combustion est purement gazeuse, aucune interaction flamme/goutte) et la notion de distance inter-gouttes utilisée dans les classifications de la combustion diphasique [20, 166], n'a pas de sens. Une autre question se pose lorsque des gouttes traversent le front de flamme, ou lorsque la flamme traverse le jet comme c'est le cas dans la phase de transition. Dans ce cas, les temps caractéristiques de vaporisation sont beaucoup plus importants que le temps caractéristique de flamme et le mode de combustion peut s'apparenter à un régime de flamme épaisse [20, 166]. Mais encore une fois, l'interprétation de l'interaction entre le modèle de combustion et la phase Eulérienne liquide est délicate et reste à être validée. De $t = 0,7\,ms$ à $t = 1,23\,ms$ (Fig. 15.8c et d), le volume de flamme en mode de prémélange diminue alors que celui du mode de diffusion augmente. Cette modification du régime de combustion est due à la fin de la combustion du mélange partiel ($t = 0,6\,ms$) et le début d'une combustion "classique" de jet dans laquelle la flamme se stabilise dans la couche de mélange en mode de diffusion. A $t = 1,23\,ms$ la zone de flamme a une structure tubulaire comprise entre les jets d'hydrogène et l'oxygène résultant de l'évaporation du jet liquide. La région la plus amont de chacune des deux flammes se caractérise par la convergence d'une zone de combustion en prémélange et d'une zone de diffusion (Fig. 15.8d et 15.8a) rappelant la structure d'une

flamme triple [119]. Comme pour l'allumage du jet turbulent de méthane de la partie II, cette structure particulière semble responsable de la propagation de la flamme vers la plaque d'injection. Une étude détaillée de sa structure est proposée dans la section suivante. Enfin les deux flammes finissent par atteindre leurs injecteurs respectifs (Fig. 15.8a et b) et sont stabilisées en mode de diffusion pur (Phase de diffusion),à $t = 3,0\,ms$ (Fig. 15.8c). Ce type de séquence d'allumage, débutant par une phase où le régime de combustion est principalement prémélangé avant que la flamme ne s'attache aux injecteurs en mode de diffusion, a été observé expérimentalement : McManus et al. [132] et Schmidt et al. [179] dans des configurations Gox/Air et Gox/GH2 respectivement et De Rosa et al. [49] ainsi que Gurliat et al. [76] dans des configurations Lox/GH2.

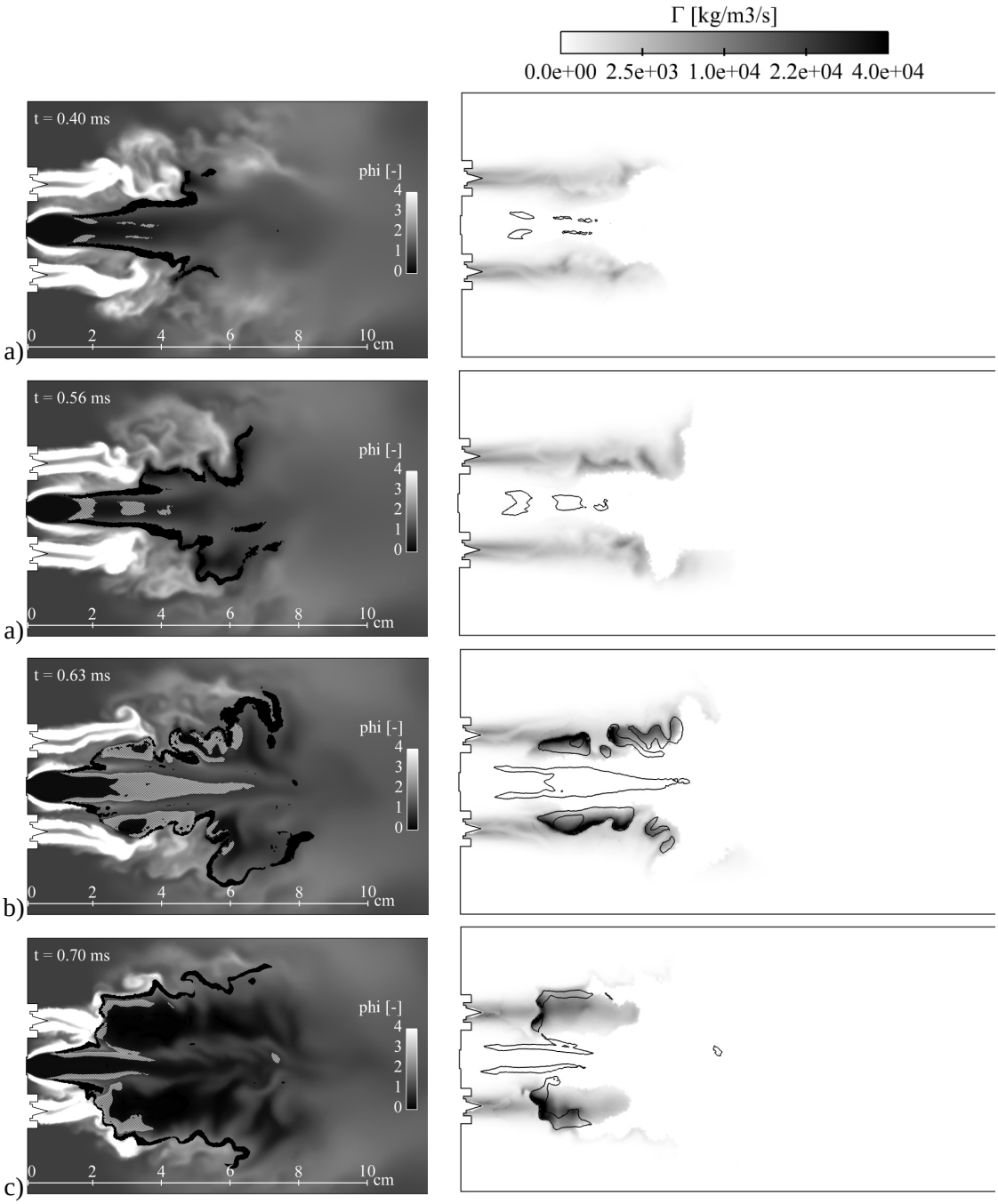


FIG. 15.8 - *Indice de Takeno (gauche) superposé au champs de richesse (zone noire=prémélange et zone grisée=diffusion) et taux d'évaporation* Γ *(droite) et iso-ligne du taux de réaction :* $H_2 + O_2 = 2OH$

L'analyse précédente peut être résumée par le schéma de la Fig. 15.9 sur laquelle les différentes phases de la séquence d'allumage sont schématisées.

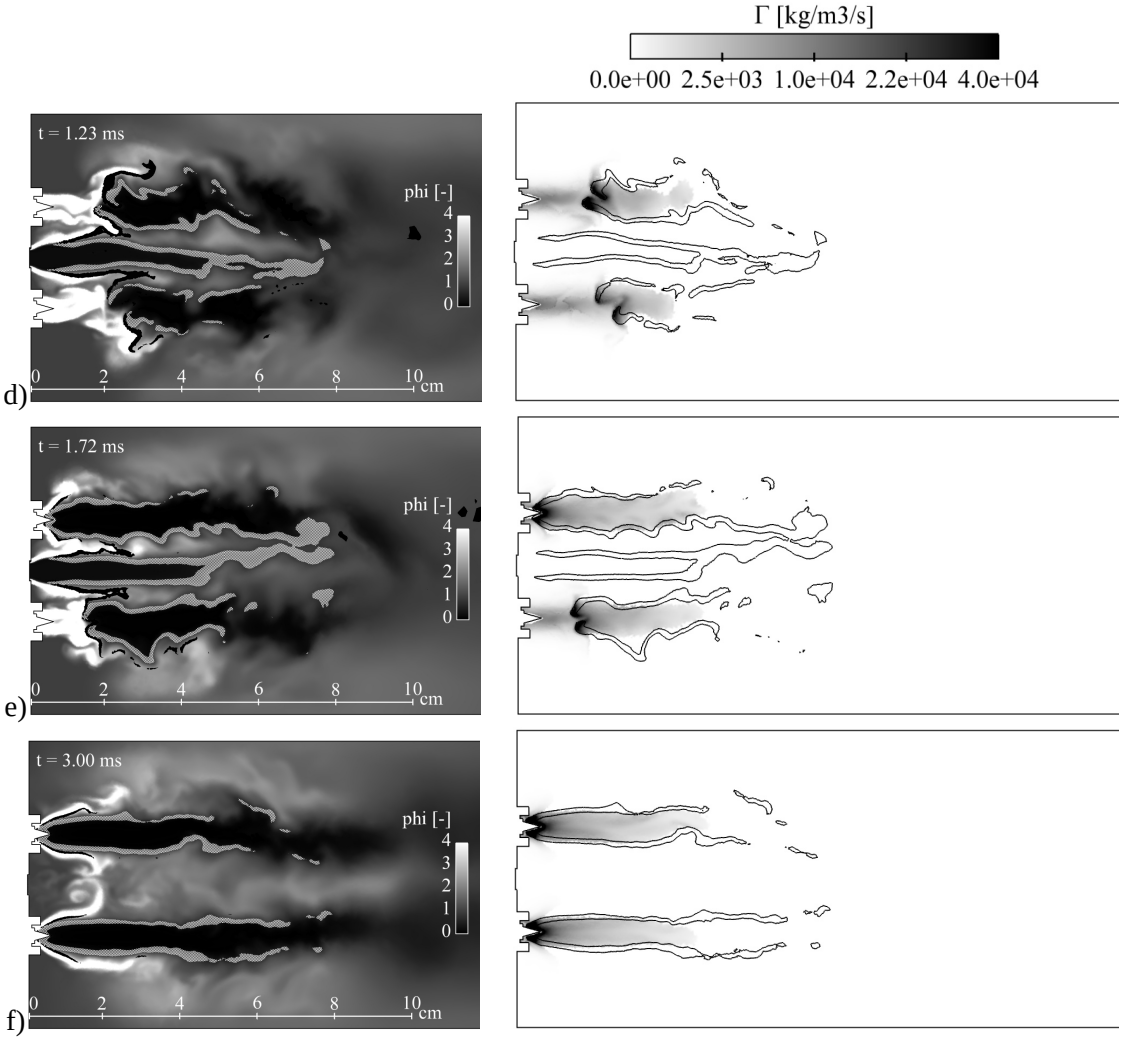


FIG. 15.8 - *(suite) Indice de Takeno (gauche) superposé au champs de richesse (zone noire=prémélange et zone grisée=diffusion) et taux d'évaporation* Γ *(droite) et iso-ligne du taux de réaction :* $H_2 + O_2 = 2OH$.

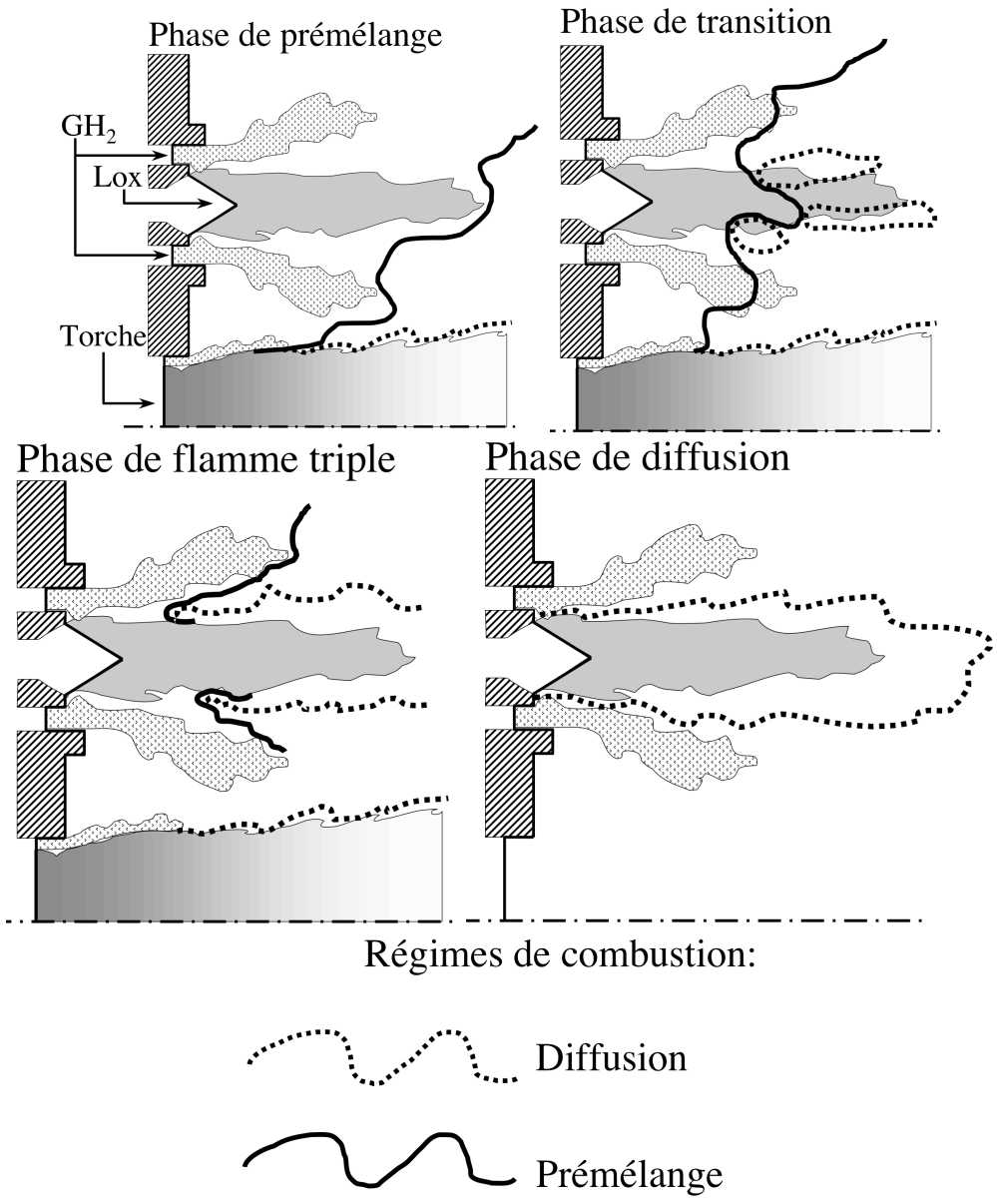


FIG. 15.9 - *Les différentes phases de la séquence d'allumage du moteur VINCI.*

15.9 Mécanismes de propagation

Dans cette section, l'évolution du point amont de la flamme est étudiée. A travers cette analyse, des hypothèses vont pouvoir être formulées pour expliquer les différents mécanismes intervenant dans la propagation de la flamme vers l'amont.
La Fig. 15.10 montre une flamme dans la "phase de flamme triple" de la Fig. 15.9. Sur le champs de vitesse de la Fig. 15.10a, il est observé que la vitesse en amont du front réactif diminue de façon importante avant de pénétrer la flamme permettant ainsi sa propagation dans l'écoulement très rapide de l'injecteur. Cette diminution locale de la vitesse est due à la très forte dilatation de l'écoulement causée par la présence de la flamme, comme on peut le voir sur la Fig. 15.10b, résultat classique de flamme triple [119].

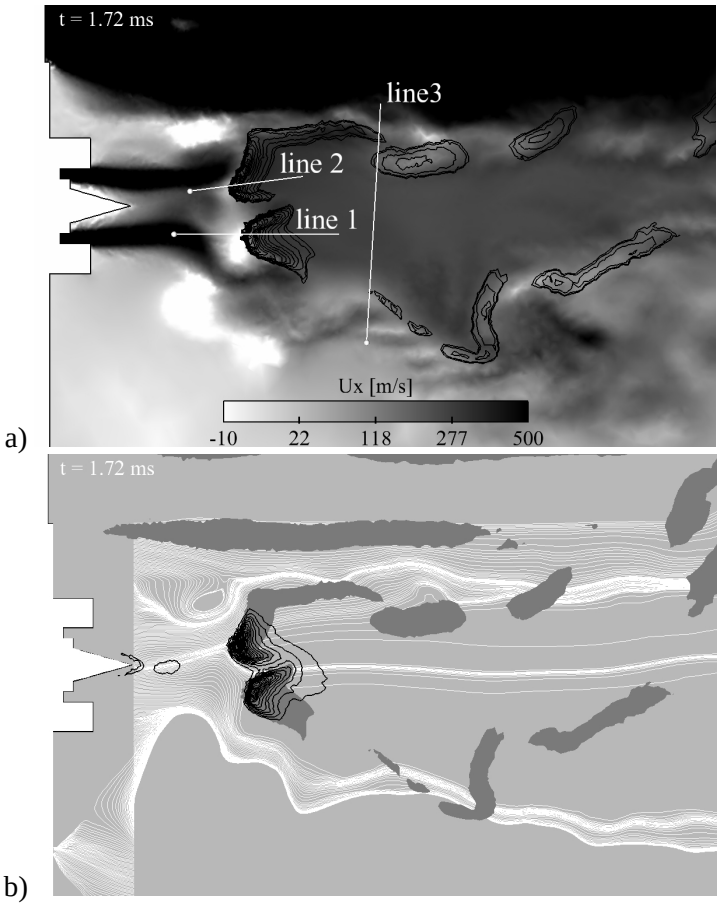


FIG. 15.10 - *Détails d'une flamme dans la phase de propagation. a) champs de vitesse axiale et isolignes de dégagement de chaleur ; b) dilatation des lignes de courants due à la présence de la flamme : zone grise=dégagement de chaleur ($\dot{\omega}_T = 2,0.10^{10}\ W/m^3$), isolignes noires= zone d'évaporation importante et lignes blanches=lignes de courant.*

La structure 1D de la flamme est étudiée le long de la ligne 1 indiquée sur la Fig. 15.10a. La Figure 15.11a montre que la zone de réaction chimique coïncide avec le maximum du taux d'évaporation et il est constaté sur la Fig. 15.10b que les pertes de chaleur dues à l'évaporation représentent près de 5% de la chaleur créée par réaction. La présence du liquide proche de la flamme est donc en partie responsable de la température relativement basse du front ($\approx 1900\,K$) et de la diminution de cette température en aval (pour $x > 17\,mm$ sur la Fig 15.11b, le terme puits Π devient supérieur au terme source $\dot{\omega}_T$ en valeur absolue). Les autres processus responsables des faibles températures sont : 1) la forme convexe de la zone de réaction qui induit des pertes thermiques plus importantes ; 2) l'activation du modèle de flamme épaissie ainsi que des senseurs de viscosité artificielle dus à la présence de fort gradients. Il est aussi observé que l'évaporation n'est pas nulle en amont de la flamme induisant des fractions massiques d'oxygène gazeux non nulles dans cette région. La phase liquide n'atteint pas non plus de condition de saturation à l'aval du front de flamme (à $x = 25\,mm$, $\Gamma = 2583\,kg/m^3/s$).

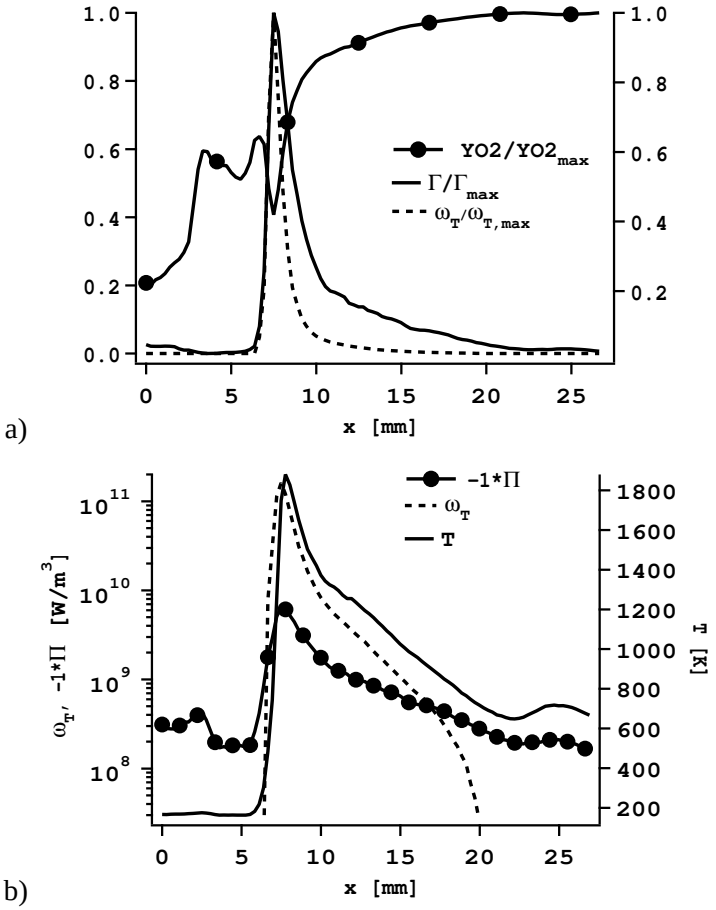


FIG. 15.11 - *Position des zones de réaction et d'évaporation (le long de la ligne 1 de la Fig. 15.10) : a) Profils normalisés de la fraction massique d'oxygène gazeux $YO2$, du taux d'évaporation Γ et du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ ($YO2_{max} = 0,9$; $\Gamma_{max} = 7,5 \cdot 10^4\,kg/m^3/s$; $\dot{\omega}_{T_{max}} = 160\,GW/m^3$). b) Profils du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$, de la température T et du taux de transfert de chaleur par évaporation Π.*

La Fig. 15.12 présente les évolutions de la fraction volumique de liquide α_l et du diamètre des gouttes d_l le long de la ligne 1 de la Fig. 15.10a. La fraction volumique de liquide en amont du front de flamme est faible ($\alpha_l \approx 1,2.10^{-3}$) du fait que le flamme se situe sur le bord du jet liquide. En aval de la flamme la fraction volumique de liquide a diminué de façon significative ($\alpha_l \approx 1.10^{-4}$) par effet d'évaporation. La Fig. 15.12b montre que le diamètre des gouttes a été divisé par 2 après le passage de la flamme, ce qui correspond à une diminution de la masse liquide de 88% environ. Les gouttes traversent le front de flamme sans être totalement évaporées car le débit massique de liquide alimentant le front d'évaporation : $\alpha_l \rho_l V_{rel} \approx 110\, kg/m^2/s$ ($V_{rel} \approx 75\, m/s$ étant la vitesse relative de l'écoulement par rapport au front, voir plus loin pour cette estimation) est légèrement supérieur au terme puits d'évaporation : $\Gamma \delta_{ev} \approx 100\, kg/m^2/s$ ($\delta_{ev} \approx 5\, mm$ étant l'épaisseur du front d'évaporation).

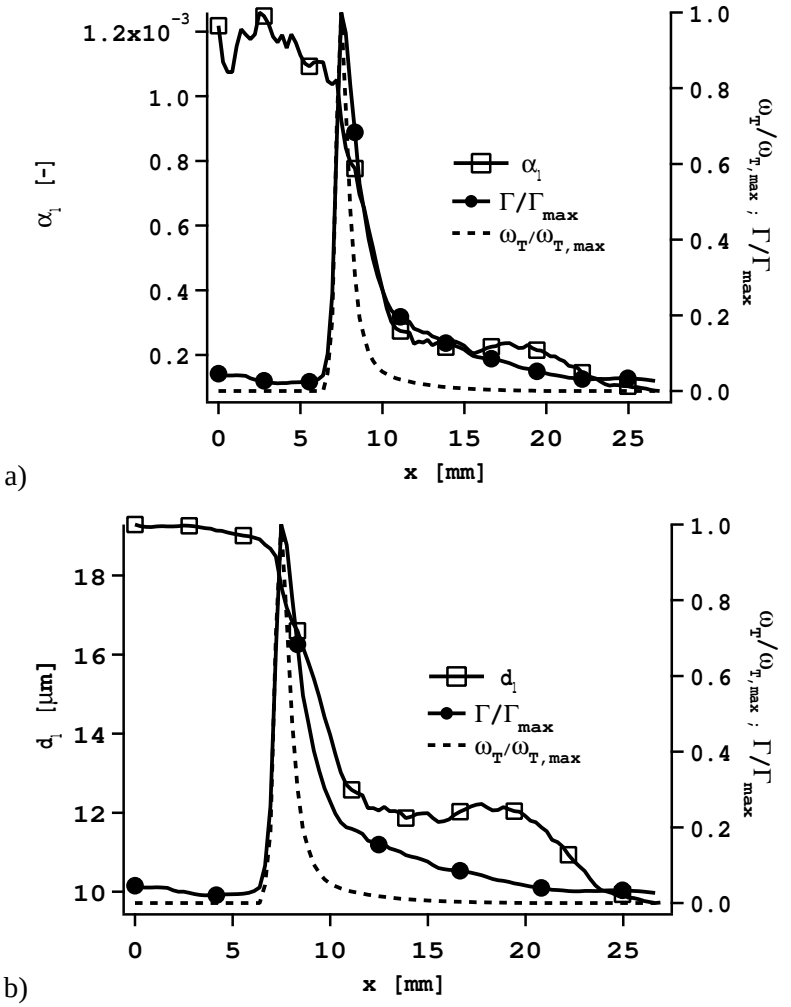
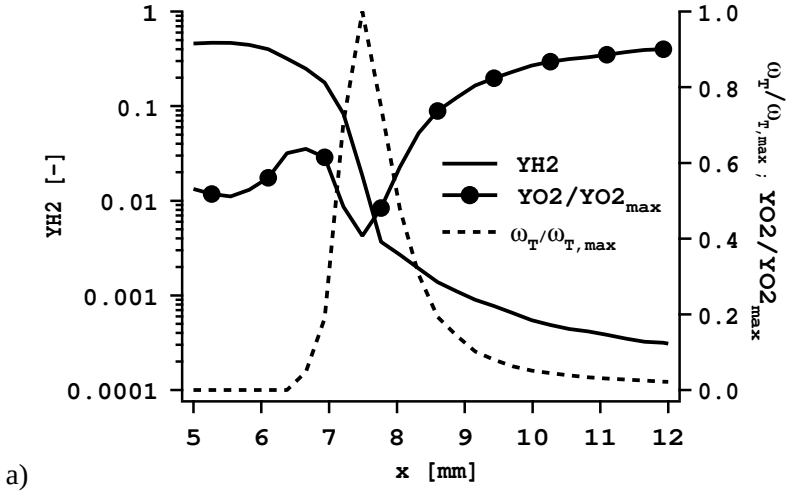
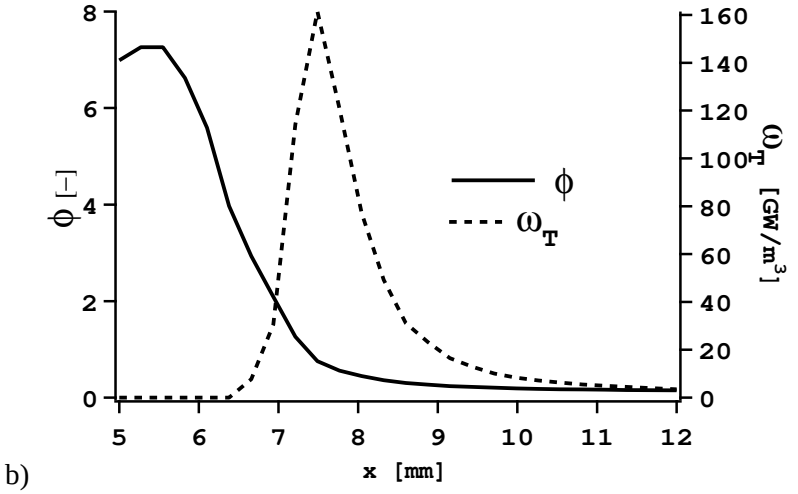


FIG. 15.12 - *Paramètres de la phase liquide (le long de la ligne 1 de la Fig. 15.10) : a) Evolution de la fraction volumique de liquide α_l . b) Evolution du diamètre des gouttes d_l.*
($\Gamma_{max} = 7,5 \cdot 10^4\, kg/m^3/s$; $\dot{\omega}_{T_{max}} = 160\, GW/m^3$)

La Fig. 15.13 présente la structure de la flamme le long de la ligne 1 de la Fig. 15.10. Comme il l'a été vu précédemment, la fraction massique d'oxygène n'est pas nulle en amont de la flamme à cause de l'évaporation du spray de Lox dans le jet annulaire d'hydrogène. Cela explique que le front de flamme est composé d'une zone de combustion en mode de prémélange en amont d'une zone de diffusion (Fig. 15.10b). La flamme de prémélange consomme d'abord un mélange riche ($\phi \approx 2$) produisant une diminution de la fraction massique d'oxygène ($\phi = z/(1-z)(1-z_{st})/z_{st}$ est la richesse du gaz). Au milieu du front de flamme, le taux de consommation d'oxygène devient inférieur au terme source d'évaporation. La fraction massique d'oxygène se met alors à augmenter. Dans la région avale du front de flamme, les gradients de fraction massique d'oxygène et d'hydrogène sont de signes différents, mettant en évidence une flamme de diffusion.



a)



b)

FIG. 15.13 - *Structure de flamme (le long de la ligne 1 de la Fig. 15.10) : a) Profils des fractions massiques d'hydrogène $YH2$, d'oxygène $YO2$ gazeux et du taux de dégagement de chaleur de la réaction. b) Richesse (ϕ) du mélange gazeux à travers le front de flamme. ($YO2_{max} = 0,9$; $\dot{\omega}_{T_{max}} = 160\,GW/m^3$).*

La Fig. 15.14 présente les profils des différentes grandeurs le long de la ligne 3. La Fig. 15.14a) montre que la température dans le front ($T_{max} = 3032\,K$) de flamme est égale à celle observée dans la flamme laminaire à contre courant ($T_{DNS,max} = 3060\,K$) présentée section 6.7. Il est aussi observé que la zone d'évaporation importante ne coïncide pas avec la zone de flamme comme c'était le cas sur la ligne 1 (Fig. 15.11). L'évaporation a lieu dans la zone de spray (Fig. 15.14b). Dans le calcul, le terme source d'évaporation est artificiellement mis à zéro lorsque le diamètre des gouttes atteint la valeur de $d_l = 2\,\mu m$, correspondant à $1/1000^{eme}$ de la masse initiale. Cette mesure de précaution est prise de manière à ne pas avoir de terme source trop élevé en fin d'évaporation.

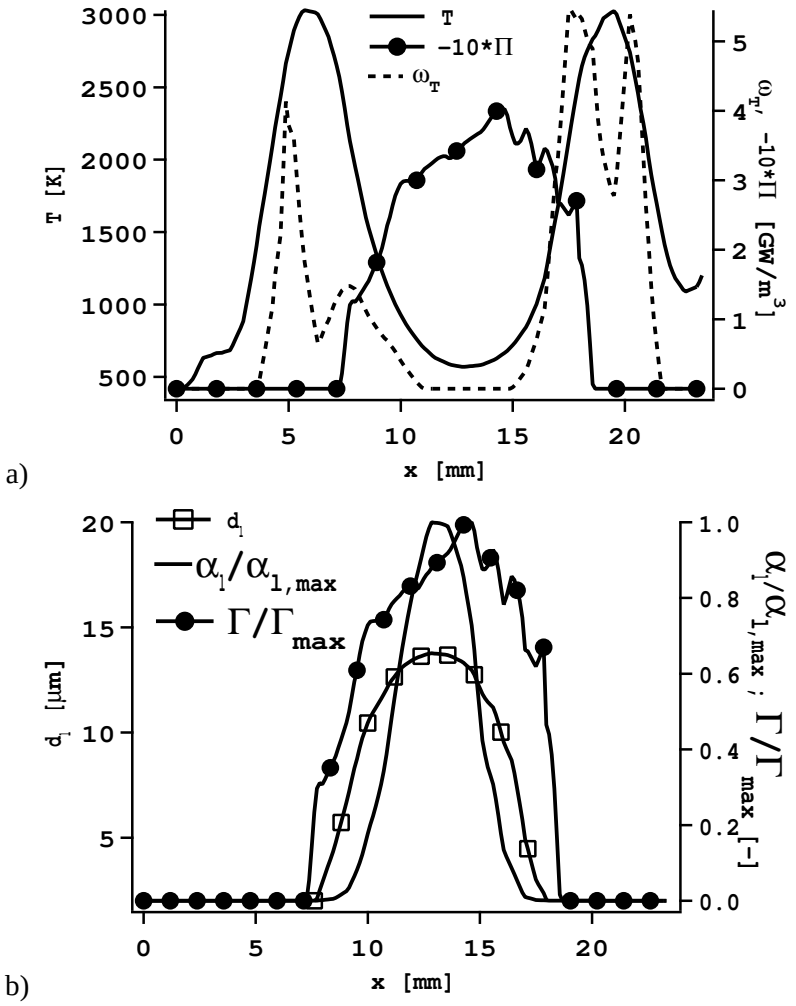


FIG. 15.14 - *Structure de flamme (le long de la ligne 3 de la Fig. 15.10) : a) Profils du taux de dégagement de chaleur de la réaction $\dot{\omega}_T$, du taux de transfert de chaleur par évaporation Π et de la température du gaz T. b) Paramètres de la phase liquide : diamètre des gouttes d_l, fraction volumique de liquide α_l et taux d'évaporation Γ. ($\alpha_{l,max} = 5,6.10^{-4}$; $\Gamma_{max} = 5152 kg/m^3/s$).*

La Fig. 15.15 présente le profil de la vitesse axiale à travers le front de flamme, le long des lignes 1 et 2 de la Fig. 15.10a. Sur ces deux tracés, on observe une diminution significative de la vitesse axiale en amont du front de flamme allant jusqu'à inverser la direction de l'écoulement pour le cas de la ligne 1. Juste en aval du front de flamme la vitesse axiale de l'écoulement est proche de 300 m/s dans les deux cas. La diminution de la vitesse amont et la forte accélération de l'écoulement au passage du front de flamme sont dus, d'après ce qui a été vu précédemment à :

1. la dilatation des gaz due à l'apport de chaleur par la flamme ($\dot{\omega}_{T_{max}} = 160\,GW/m^3$) ;
2. l'évaporation produisant localement un volume important d'oxygène gazeux ($\Gamma_{max} = 75 \cdot 10^3\,kg/m^3/s$).

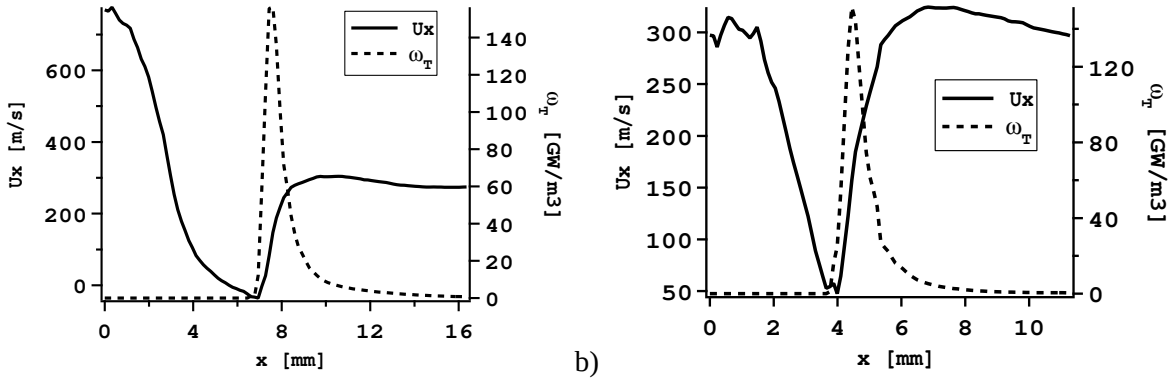


FIG. 15.15 - *Profil de vitesse axiale (U_x) à travers le front de flamme : a) le long de la ligne 1 et b) le long de la ligne 2 de la Fig. 15.10a.*

En se basant sur les résultats des figures 15.7 et 15.15, une estimation très grossière de la vitesse de l'écoulement V_{rel} relativement au front de flamme peut être réalisée. L'évolution temporelle de la position du front de flamme amont (Fig. 15.7) permet d'évaluer la vitesse de la flamme (V_{flame}) dans un référentiel global : $V_{flame} \approx 25\,m/s$ et la vitesse de l'écoulement à la base de la flamme V_{flow} est de l'ordre de 50m/s (les résultats de la ligne 1 ne sont pas utilisés car elle n'est pas alignée avec les lignes de courant contrairement à la ligne 2). La vitesse de l'écoulement dans lequel se propage la flamme est donc de l'ordre de 75 m/s. Cette estimation est en accord avec les mesures de Gurliat et al. [76], Schmidt et al. [179] et Mayer et al. [130, 129] pour le cas d'un allumage d'un unique injecteur coaxial Lox/GH2. Les limitations du modèle d'injection sont principalement liées au fait qu'un jet de liquide ne peut pas être représenté par un spray de gouttes de diamètre uniforme. Les atomisations primaire et secondaire font apparaître une grande diversité de tailles et de formes de particules qui ont des temps d'évaporation distincts [59, 124, 106, 123]. De plus, la fraction volumique de liquide est égale à 1 dans la zone proche injecteur qui est en contradiction avec une des hypothèses (pas de collision) de l'approche Euler-Euler utilisée dans cette étude.

Dans le cas présent, où la seule classe de gouttes prise en compte est celle issue de l'atomisation secondaire, le rapport surface/volume est donc largement surestimé par rapport à un jet réel. Les visualisations expérimentales réalisées par Mayers et al. [130, 129] montrent que le jet d'oxygène liquide subit de l'atomisation secondaire plusieurs dizaines de diamètres en aval de l'injection, même dans un cas

réactif. La simplification utilisée dans la présente étude conduit donc à une surprédiction du taux local d'évaporation, ce qui devrait avoir un impact sur 1) le mécanisme et la vitesse de propagation amont de la flamme, 2) la structure de la flamme et 3) la longueur de flamme.
Note : le troisième aspect ne peut pas être quantifié dans cette étude du fait que le raffinement du maillage est rapidement dégradé dans la région en aval de la flamme.

15.10 Stabilisation

Cette section est dédiée à l'étude de la structure de la flamme stabilisée. La Figure 15.16, présente une comparaison entre des topologies de flammes observées expérimentalement grâce au banc Mascotte de l'ONERA et la flamme obtenue en LES. Les visualisations de flammes effectuées dans des régimes sub et supercritiques ont fait l'objet de nombreuses publications [89, 199, 28, 29, 194].
La structure de la flamme obtenue numériquement diffère de celles obtenues par visualisation des émissions du radical OH*. Dans les expériences, il est observé que la flamme se stabilise dans la région de vitesse faible en aval de la lèvre d'injection [89] et se développe parallèlement au tubes d'injection. Dans le calcul LES, la flamme est bien stabilisée derrière la lèvre mais le diamètre de la structure tubulaire de la flamme augmente très rapidement lorsqu'on se déplace vers l'aval. Cette expansion rapide est une conséquence du modèle d'injection employé. La Figure 15.16c montre en effet que le taux d'évaporation Γ est très important au coeur du spray liquide induisant une dilatation non physique des gaz dans cette région. Ce phénomène est dû au fait que les gaz brûlés ($\approx 3000\,K$) issus du front de flamme pénètrent dans le jet de Lox modélisé par un spray dense de goutte ($\alpha_l \approx 0,5$).

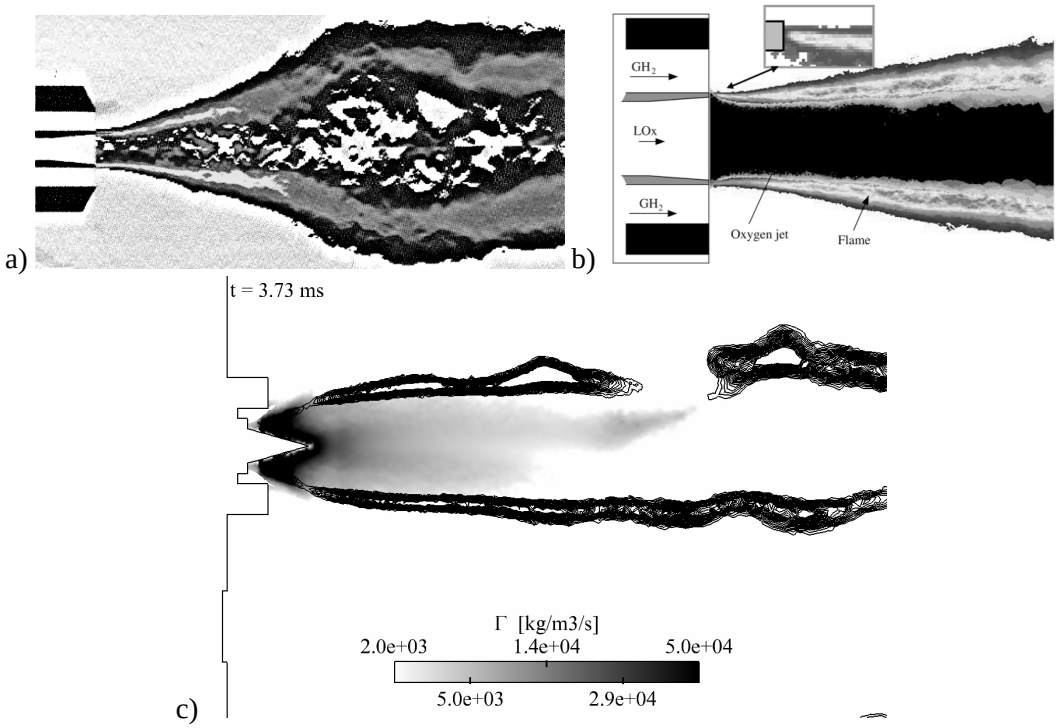


FIG. 15.16 - *Structure de la flamme stabilisée comparée à des visualisations experimentales. a) Transformation inverse d'Abel des émission OH* de la flamme Lox/GH2 dans la configuration Mascotte à 10 bar [199]. b) Détail de la région de stabilisation dans la configuration Mascotte [89]. c) Champs de taux d'évaporation Γ et isolignes basées sur le taux de réaction.*

15.11 Coût d'un calcul plus complexe

Afin de se rapprocher des conditions réelles d'allumage VINCI, il faudrait calculer au moins les 3 premières couronnes d'injecteurs de la plaque d'injection.

Le tableau 15.5 résume le nombre de noeuds nécessaire pour résoudre l'écoulement en aval des différents éléments de géométrie (injecteurs et torche), dans le cas de la précédente étude (configuration simplifiée) et dans le cas d'une configuration à 36 injecteurs en supposant la même résolution.

	configuration simplifiée (Conf1)		configuration complexe (Conf2)	
	nombre d'éléments	nombre de noeuds	nombre d'éléments	nombre de noeuds
torche+chambre	1	$5,4 \cdot 10^5$	1	$5,4 \cdot 10^5$
injecteurs	2	$2 \times 4,5 \cdot 10^5$	36	$36 \times 4,5 \cdot 10^5$
nombre total de cellules		$\approx 8,4 \cdot 10^6$		$\approx 97,0 \cdot 10^6$
nombre total de noeuds		$\approx \mathbf{1,4 \cdot 10^6}$		$\approx \mathbf{16,7 \cdot 10^6}$

TAB. 15.5 - *Volume de noeuds de maillage dans le cas de la configuration simplifiée et dans le cas d'une configuration à 36 injecteurs.*

Le temps de restitution d'un tel calcul dépend d'abord de l'efficacité du code de calcul et de sa parrallélisation ainsi que de l'efficacité des processeurs employés et du réseau inter-processeurs. L'efficacité de la parallélisation d'AVBP est proche de 1, comme l'a montré Staffelbach et al. sur l'IBM BlueGene L du centre de Rochester [205, 206] jusqu'à 5000 processeurs. Concernant la performance du calculateur, le tableau 15.6 donne le temps de calcul nécessaire pour réaliser la séquence d'allumage dans la configuration simplifiée (Conf1) et en déduit une estimation du temps de restitution pour un calcul de la configuration Conf2. Dans cette comparaison deux calculateurs sont utilisés : l'IBM Blue Gene/L du Cerfacs et le SGI ALTIX ICE 8200 EX du CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur). Pour le calcul de la configuration plus complexe, un temps physique de 100 ms est nécessaire pour que toute la plaque d'injection soit allumée (d'après les données Snecma).
Les paramètres "Machine" donnés pour la configuration Conf1 sont les paramètres utilisés lors du calcul d'allumage présenté dans ce manuscrit. Pour la configuration Conf2, les paramètres relatifs aux calculateurs sont représentatifs des ressources disponibles.

Les statistiques présentées dans Tab. 15.6 montrent que la simulation d'un allumage dans une configuration plus complexe est réalisable sur les calculateurs aujourd'hui disponible en France, avec un temps de restitution acceptable.

	Conf1	**Conf2**	
	Calculateur CERFACS	Calculateur CERFACS	Calculateur CINES
temps physique du calcul [s]	$10 \cdot 10^{-3}$	$0,1$	$0,1$
pas de temps [s]	$3 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-8}$
nombre de noeuds (Tab. 15.5)	$1,4 \cdot 10^{6}$	$16,7 \cdot 10^{6}$	$16,7 \cdot 10^{6}$
efficacité Code/Machine [s/proc./ité./noeud]	$4 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$
nombre processeurs	128	512	2000
temps de restitution [heures]	**174**	**12300 (17 mois)**	**787 (1 mois)**

TAB. 15.6 - *Temps de calcul en fonction de la configuration et du calculateur utilisé.*

Chapitre 16

Conclusions et perspectives

Une séquence d'allumage du moteur VINCI dans une configuration simplifiée mais représentative a été calculée en LES avec le code AVBP. Durant ce calcul, les effets diphasiques ont été pris en compte par une approche eulérienne. Un modèle d'injecteur coaxial a été défini dans lequel les gouttes liquides sont injectées par un cône imperméable au gaz, représentant le dard potentiel du jet liquide. Les gouttes injectées ont toutes le même diamètre, déterminé à partir de lois caractérisant l'atomisation secondaire.

De façon générale, les résultats obtenus sembles cohérents avec les observations expérimentales réalisées notamment au DLR [130, 49, 76, 179, 132] : le temps d'allumage des deux jets simulés est de l'ordre de 1,5 à 2 ms et le processus global d'allumage débute par une phase où la combustion s'effectue en mode de prémélange avant que la flamme ne se stabilise en mode de diffusion pur.

L'analyse temporelle de grandeurs intégrales caractéristiques de l'écoulement ainsi que l'étude des champs instantanés ont permis d'identifier les phases majeures de la séquence d'allumage :

1. Dans les premiers instants de l'injection de l'oxygène liquide, l'oxygène s'évapore dans le jet d'hydrogène gazeux. Le prémélange partiel est convecté en aval de la plaque d'injection ;
2. Lorsque le mélange atteint les gaz brûlés de la torche de l'allumeur ($t \approx 0.4\,ms$), l'allumage de la première couronne débute et une flamme de prémélange est initiée à environ 60 d_{lox} en aval des injecteurs ;
3. A $t = 0,6\,ms$, cette flamme turbulente, se propageant dans la région aval des jets, rencontre le spray d'oxygène liquide. La présence de la flamme déclenche alors un pic d'évaporation, faisant localement chuter la richesse jusqu'à atteindre des conditions stoéchiométriques. Les premières zones de réaction en mode de diffusion apparaissent ;
4. A $t \approx 1\,ms$ après le début de l'injection Lox, les flammes de prémélange ont quasiment disparu laissant place à deux flammes tubulaires de diffusion, se propageant dans la couche de mélange entre l'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux. L'analyse de la structure 1D de ces flammes montre une juxtaposition d'une flamme amont de prémélange suivie d'une flamme de diffusion. La propagation de la flamme semble permise par deux phénomènes : le premier est la dilatation des gaz

par le dégagement de chaleur de la flamme et le second est l'expansion de l'écoulement causée par l'évaporation très importante de l'oxygène.

5. La première flamme atteint l'injecteur à $t \approx 1,5\,ms$ suivie par la seconde à $t \approx 1,8\,ms$.
6. Les deux flammes restent stables après l'extinction de l'allumeur dans un mode de combustion purement diffusif et à $t \approx 4\,ms$ le régime stationnaire est atteint.

Le succès d'un tel allumage est fortement lié aux effets diphasiques. Le délai d'allumage dépend notamment de la qualité de l'atomisation du jet d'oxygène liquide. Si la taille des gouttes est trop importante, le temps d'apparition d'un mélange inflammable à proximité du jet de l'allumeur sera retardé entraînant un retard à l'allumage et un remplissage plus important de la chambre en combustible. Ce retard risque par conséquent de mener à un allumage violent conduisant à une surpression de la chambre.

Dans l'étude présentée dans ce manuscrit, les effets d'atomisation ne sont pas pris en compte et les gouttes sont injectées à diamètre constant. La taille de ces gouttes est égale à celles issues de l'atomisation secondaire dans la région proche injecteur. Cette simplification conduit à une surestimation du rapport Surface/Volume de la phase liquide, induisant des phénomènes non physiques : la propagation de la flamme est très fortement influencée par l'expansion des gaz due à l'évaporation et le diamètre de la flamme tubulaire stabilisée n'est pas correct. Une autre faiblesse du calcul est l'interaction entre la combustion et la phase liquide suivie par une approche Eulérienne. Les régimes de combustion observés pendant l'allumage présentent certaines similitudes avec les régimes de combustion diphasique identifiés expérimentalement [20, 166], mais des validations supplémentaires sont requises.

Les travaux futurs consacrés à l'allumage de moteurs fusées cryotechniques devront donc se concentrer sur la représentation plus physique du jet liquide. Une amélioration simple des résultats peut être obtenue en utilisant une approche Lagrangienne (disponible dans AVBP) qui permettrait de caractériser le jet avec plusieurs classes de gouttes. L'aspect polydisperse peut aussi être introduite dans l'approche Eulérienne [128, 109, 138] mais cette méthode présente plus de difficultés que la première.
Une amélioration supplémentaire serait d'inclure un modèle d'atomisation dans le code. De nombreux modèles ont été développés dans un contexte Lagrangien, où le jet dense est initialement représenté par un train de gouttes dont le diamètre est égal au diamètre d'injection. On citera par exemple les modèles de O'Rourke et Amsden [145], de Reitz [165], de Tanner [211] et d'Apte et al. [5]. Ces modèles ont été validés pour des conditions variées d'injection. Le modèle stochastique d'Apte et al. [5] semble bien adapté à la problématique d'injection dans les moteurs fusées où de nombreux processus (turbulence, collisions, etc) conduisent à la formation de gouttes de diamètres très différents [37].
La dernière amélioration, qui est aussi la plus complexe, serait de représenter les phénomènes d'atomisation primaire par une approche Eulérienne de suivi d'interface couplée à une approche lagrangienne pour l'atomisation secondaire et la combustion. Différentes méthodes de suivi d'interfaces ont été développées pendant les quinze dernières années. Des méthodes de type *Level-set* [189] et *Ghost Fluid* [60] permettent de suivre précisément l'interface fluide et de décrire son interaction avec le gaz. Ces méthodes peuvent être couplées à une méthode de type *Volume of Fluid* [75] pour assurer la conservation de la masse liquide. Ce type d'approche pour le suivi d'une interface liquide a été implanté en LES, par exemple par De Villier et al. [50] et Herrmann [77]. Un couplage entre une méthode de suivi d'interface

pour simuler l'atomisation primaire et une méthode lagrangienne pour l'atomisation secondaire a récemment été testé par Kim et al. [93]. Dans cette étude [93], les fragments liquides issus de l'atomisation primaire sont identifiés, puis deux critères de volume et de forme leurs sont appliqués. Si les particules ont un volume inférieur à un volume critique et si elles sont suffisamment sphériques, alors elles sont retirées de la méthode de suivi d'interface et sont ré-injectées dans le domaine sous forme de gouttes pour l'approche lagrangienne [93].
Des tests préliminaires pour l'implantation d'une approche *Volume of Fluid* dans le code AVBP ont été réalisés par A. Roux et N. Lamarque [174] en utilisant un schéma FCT (schéma décentré dans les zones de forts gradients et schéma centré ailleurs).

Conclusion générale

L'objectif final de ces travaux de recherche est de réaliser la simulation LES d'un allumage du moteur fusée cryotechnique VINCI. Pour remplir cet objectif la stratégie suivie pendant cette thèse a consisté à isoler les différentes difficultés physiques impliquées dans un tel allumage. Certains de ces aspects ont déjà fait l'objet d'études (avec le code AVBP) au CERFACS : de nombreux travaux ont porté sur la combustion turbulente dans des régimes prémélangés et partiellement prémélangés [69, 175, 186, 187, 188, 183, 125, 114] ; l'impact de la présence d'un carburant liquide dans un écoulement réactif a aussi été étudié [147, 17, 18]. En 2006 les travaux de A. Dauptain [48] ont permis d'aborder la résolution des écoulements supersoniques.

Dans la droite ligne de ces travaux, quatre points de modélisation sont étudiés : (1) cinétique chimique réduite H_2/O_2 adaptée à l'allumage ; (2) modèle d'allumage par dépôt d'énergie ; (3) simulation d'un allumage de jet turbulent ; (4) prise en compte de l'oxygène liquide et des effets diphasiques sur l'établissement d'une flamme stable.

La méthodologie employée pour répondre à ces questions a été de simuler des cas expérimentaux simples mais représentatifs, permettant d'isoler chaque problème. Ces expériences présentent une complexité croissante de manière à faire converger graduellement la méthodologie, pour finalement aboutir à la simulation du moteur VINCI. Cette approche a permis d'atteindre l'objectif fixé : la simulation LES d'un allumage du moteur VINCI dans une configuration simplifiée. Les résultats numériques établis au cours de cette démarche (sur les configurations de validation et sur le moteur VINCI), ont montré que la simulation numérique aux grandes échelles est capable de capturer les différents processus impliqués dans l'allumage d'un moteur fusée. Les phénoménologies d'allumage établies à partir de l'analyse des données de calcul sont très proches de celles identifiées expérimentalement ; et la confrontation des résultats numériques et expérimentaux permet de mieux comprendre les divers mécanismes du transitoire d'allumage.

Les différentes étapes de simulation ont aussi permis d'améliorer le code AVBP ainsi que d'implanter de nouveaux modèles. Une part significative des travaux a été consacrée à la mise en place d'un modèle d'allumage par dépôt d'énergie, représentant une bougie électrique ou un laser. La simulation du banc expérimental M3 (banc dédié à l'étude des processus d'allumage dans le moteur fusée) a nécessité la création d'une nouvelle condition limite. Cette condition permet de simuler l'injection créée par un réservoir haute pression dans une chambre dont la pression varie. Cette condition limite permet de capturer le désamorçage de l'injection. Enfin, un modèle d'injection diphasique a été mis en place pour reproduire un injecteur coaxial de moteur fusée. Dans ce type d'injecteur, un jet d'oxygène liquide est atomisé par un jet périphérique annulaire d'hydrogène gazeux.

La poursuite de l'analyse numérique du transitoire d'allumage VINCI requiert néanmoins certains approfondissements. Pour des allumages en condition de vide partiel (rallumage haute altitude), la détente du jet sous-détendu de l'allumeur conduit à la formation d'un choc plus fort que celui rencontré dans les travaux de cette thèse. La méthode de traitement des chocs par l'ajout d'une viscosité de volume risque d'être insuffisante et une nouvelle approche devra certainement être mise en place.
La représentation du jet liquide d'oxygène doit aussi être améliorée. La dernière partie de ce manuscrit a montré qu'un spray de gouttes de même taille ne reproduit pas correctement les effets diphasiques d'un jet liquide réel. Une première étape d'amélioration sera de prendre en compte la description polydisperse du jet soit par l'utilisation de l'approche Lagrangienne du code AVBP soit en implantant un formalisme multi-fluide dans l'approche Euler-Euler [128]. Un perfectionnement supplémentaire serait d'implanter un modèle d'atomisation secondaire comme celui de Apte et al. [5] dans l'approche Lagrangienne. Dans une perspective à plus long terme, une méthode de suivi de l'interface liquide pourrait être considérée pour capturer l'atomisation primaire, et couplée à une approche Lagrangienne pour l'atomisation secondaire, comme dans les travaux de Kim et al. [93].

Le succès de l'implantation de la thermodynamique haute pression par T. Schmitt [184] dans le code AVBP, ainsi que l'amélioration constante des moyens de calcul laissent espérer que dans un futur proche, le code AVBP sera capable de simuler tous les régimes de fonctionnement du moteur VINCI. Un calcul de la montée en régime, débutant par la phase d'allumage, permettrait d'étudier l'impact de l'allumage sur la phase de stabilisation à haute pression, d'étudier les risques d'initiation d'instabilités et d'optimiser la séquence d'injection.

Bibliographie

[1] AGNEW, J., AND GRAIFF, L. The pressure dependence of laminar burning velocity by the spherical bomb method. *Combustion and Flame 5*, 3 (1961), 209–219. 96

[2] AHMED, S., BALACHANDRAN, R., MARCHIONE, T., AND MASTORAKOS, E. Spark ignition of turbulent nonpremixed bluff-body flames. *Combustion and Flame151* (2007), 366–385. 205

[3] AHMED, S., AND MASTORAKOS, E. Spark ignition of lifted turbulent jet flames. *Combustion and Flame146* (2006), 215–231. 25, 26, 27, 153, 197, 198, 200, 201, 205

[4] ANGELBERGER, D., VEYNANTE, D., EGOLFOPOULOS, F., AND POINSOT, T. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Summer Program* (1998), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 61–82. 71

[5] APTE, S., GOROKHOVSKI, M., AND MOIN, P. Large-eddy simulation of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow29* (2003), 1503–1522. 314, 318

[6] ARAI, M., SHIMIZU, M., AND HIROYASU, H. Breakup length and spray angle of high speed jet. *In Proceedings of the Third International Conference on Liquid atomization and spray systems(ICLASS), London,* (1985). 274

[7] BALLAL, D., AND LEFEBVRE, A. Ignition and flame quenching in flowing gaseous mixtures. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A357* (1977), 163–181. 124

[8] BARBEAU, B., JAY, S., LACAS, F., AND CANDEL, S. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Simulation numérique de la combustion dans des injecteurs coaxiaux. 23

[9] BAUM, M., AND POINSOT, T. Effects of mean flow on premixed flame ignition. *Combustion Science and Technology106*, 1-3 (1995), 19. 126, 127

[10] BAURLE, R. A., AND GIRIMAJI, S. Assumed pdf turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations. *Combustion and Flame134* (2003), 131–148. 92, 95

[11] BEDUNEAU, J.-L., KIM, B., ZIMMER, L., AND IKEDA, Y. Measurements of minimum ignition energy in premixed laminar methane/air flow by using laser induced spark. *Combustion and Flame*, 132 (2003), 653–665. 119, 122, 126

[12] BILGER, R., POPE, S., BRAY, K., AND DRISCOLL, J. Paradigms in turbulent combustion research. *Proceedings of the Combustion Institute30*, 1 (2005), 21–42. 69

[13] BINDHU, C. V., HARILAL, S. S., TILLACK, M. S., NAJMABADI, F., AND CAERIS, A. C. Energy absorption and propagation in laser-created sparks. *Applied Spectroscopy 58*, 6 (2004), 719–726. 119

[14] BIRD, R., STEWART, W., AND LIGHFOOT, E. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. 40

[15] BODÈLE, E., AND GÖKALP, I. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Modélisation de l'atomisation secondaire des gouttes LOX avec le code THESEE. 23

[16] BOILEAU, M. *Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques*. PhD thesis, CERFACS, 2008. 44, 48, 53

[17] BOILEAU, M., PASCAUD, S., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Submitted to Flow, Turbulence and Combustion* (2007). 24, 317

[18] BOILEAU, M., STAFFELBACH, G., CUENOT, B., POINSOT, T., AND BÉRAT, C. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combustion and Flame 154* (2008), 291–321. 24, 69, 202, 317

[19] BOIVIN, M., SQUIRES, K., AND SIMONIN, O. On the prediction of gas-solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. *Physics of Fluids12*, 8 (2000), 2080–2090. 43

[20] BORGHI, R. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02* (1996), Von Karman Institute for Fluid Dynamics. 298, 314

[21] BOUDIER, G., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame155* (2008), 196–214. 202

[22] BOUDIER, P., HENRIOT, S., POINSOT, T., AND T., B. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion* (1992), T. C. Institute, Ed., pp. 503–510. 131

[23] BRADLEY, D., AND LUNG, F. Spark ignition and the early stages of turbulent flame propagation. *Combustion and Flame69*, 1 (1987), 71–93. 126, 131

[24] BRADLEY, D., SHEPPARD, C., SUARDJAJA, I., AND WOOLLEY, R. Fundamentals of high-energy spark ignition with lasers. *Combustion and Flame138* (2004), 55–77. 119, 120, 121, 124

[25] BRAY, K., AND CANT, R. Some applications of kolmogorov's turbulence research in the field of combustion. *Proc. Roy. Soc. A London. A.N. Kolmogorov Special Issue 434*, 1890 (1991), 217–240. 70

[26] BUTLER, T., AND O'ROURKE, P. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion* (1977), The Combustion Institute, pp. 1503 – 1515. 69

[27] CACERES, M. Back-to-back growth years for space launches. *Aerospace America* (Mars 2008). 20

[28] CANDEL, S., HERDING, G., SNYDER, R., SCOUFLAIRE, P., ROLON, C., VINGERT, L., HABIBALLAH, M., GRISCH, F., PEALAT, M., BOUCHARDY, P., STEPOWSKI, D., CESSOU, A., AND

COLIN, P. Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames. *Journal of Propulsion and Power 14*, 5 (1998), 826–834. 22, 284, 286, 310

[29] CANDEL, S., JUNIPER, M., SINGLA, G., SCOUFLAIRE, P., AND ROLON, C. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology 178*, 1 (2006), 161–192. 22, 310

[30] CARREAU, J., PORCHERON, E., LE VISAGE, D., PREVOST, L., AND ROGER, F. Liquid core characterization of coaxial liquid oxygen/inert gas jets. *Fluid Mechanics Research 24*, 4 (1997), 498–507. 274

[31] CHAKRABORTY, N., AND MASTORAKOS, E. CANT, R. S. Effects of turbulence on spark ignition in inhomogeneous mixtures : A direct numerical simulation(DNS) study. *Combustion Science and Technology179*, 1-3 (2007), 293–317. 131

[32] CHAMPION, M., DESHAIES, B., AND JOULIN, G. Relative influences of convective and diffusive transports during spherical flame initiation. *Combustion and Flame74* (1988), 161–170. 122

[33] CHAMPION, M., DESHAIES, B., JOULIN, G., AND KINOSHITA, K. Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. *Combustion and Flame65* (1986), 319–337. 122, 123, 125

[34] CHAPMAN, S., AND COWLING, T. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, cambridge mathematical library ed. Cambridge University Press, 1939 (digital reprint 1999). 45

[35] CHARLETTE, F., VEYNANTE, D., AND MENEVEAU, C. A power-law wrinkling model for les of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame131* (2002), 159–180. 71, 72

[36] CHASSAING, P. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000. 22, 198

[37] CHIGIER, N., AND REITZ, R. Regimes of jet breakup and breakup mechanisms (physical aspects). *Recent Advances in Spray Combustion 1* (1996), 109–136. 314

[38] CLEMENTS, R., SMY, P., AND DALE, J. An experimental study of the ejection mechanism for typical plasma jet igniters. *Combustion and Flame 42* (1981), 287–295. 115

[39] CNRS/ONERA/SNEGMA. Combustion dans les moteurs fusees, actes du collogue de synthese du groupe de recherche. Tech. rep., CNRS, 2001. 21, 269

[40] COLIN, O., DUCROS, F., VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids12*, 7 (2000), 1843–1863. 71, 72

[41] COLIN, O., AND RUDGYARD, M. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics162*, 2 (2000), 338–371. 80

[42] CONAIRE, M., CURRAN, H., SIMMIE, J., PITZ, W., AND WESTBROOK, C. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics 36*, 11 (2004), 603–622. 25, 92, 93, 94, 97, 99, 100, 101, 102, 103

[43] CONAIRE, M., CURRAN, H., SIMMIE, J., PITZ, W., AND WESTBROOK, C. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics 36*, 11 (2004), 603–622. 26

[44] COOK, A., AND CABOT, W. Hyperviscosity for shock-turbulence interactions. *Journal of Computational Physics 203*, 2 (2005), 379–385. 85, 258, 262, 287, 288

[45] DABIREAU, F. *Étude des transferts de chaleur aux parois dans les moteurs-fusées*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2002. 263

[46] DAGUSE, T., CROONENBROEK, T., DARABIHA, N., ROLON, J., AND SOUFIANI, A. Study of radiative effects on laminar counterflow h2 o2 n2 diffusion flames. *Combustion and Flame106* (1996), 271–287. 104, 105

[47] DAHMS, R., FANSLER, T., DRAKE, M., KUO, T., LIPPERT, A. M., AND PETERS, N. Modeling ignition phenomena in spray-guided spark-ignited engines. *Proceedings of the Combustion Institute* (2008). 131

[48] DAUPTAIN, A. *Allumage des moteurs fusée cryotechniques*. PhD thesis, INPT - CERFACS, 2006. 17, 25, 83, 317

[49] DE ROSA, M., SENDER, J., ZIMMERMANN, H., AND OSCHWALD, M. Cryogenic spray ignition at high altitude conditions. *42 nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2006). 22, 26, 299, 313

[50] DE VILLIERS, E., GOSMAN, A., AND WELLER, H. Large eddy simulation of primary diesel spray atomization. *SAE transactions 113*, 3 (2004), 193–206. 314

[51] DEMOULIN, F. X., MURA, A., AND ZURBACH, S. Single flow modelling of high-pressure turbulent cryogenic injection and combustion. In *Proceedings of the 3rd International Workshop : Rocket Combustion Modeling* (Paris, 2006), S. Zurbach, Ed. 23

[52] DESHAIES, B., AND JOULIN, G. On the initiation of a spherical flame kernel. *Combustion Science and Technology37* (1984), 99. 122

[53] DIXON-LEWIS, G. Chemical mechanism and properties of freely propagating hydrogen-oxygen supported flames. *Archivum Combustionis 4* (1984), 279–296. 93, 94

[54] DUCROS, F., COMTE, P., AND LESIEUR, M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *Journal of Fluid Mechanics326* (1996), 1–36. 64

[55] DUMOUCHEL, C. Atomisation et sprays. 10 eme Ecole de Combustion, 2006. 271

[56] ENAUX, B. *Simulation LES des variations cycle à cycle dans un moteur à pistons*. PhD thesis, CERFACS, 2009. 142, 143

[57] ERARD, V., BOUKHALFA, A., PUECHBERTY, D., AND CORIA-URA, M. A statistical study on surface properties of freely-propagating premixed turbulent flames. *Combustion Science and Technology113*, 1 (1996), 313–327. 25, 26, 27, 132, 142, 143, 144, 150

[58] EROGLU, H., CHIGIER, N., AND FARAGO, Z. Coaxial atomizer liquid intact lengths. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics 3* (1991), 303. 274

[59] FARAGO, Z., AND CHIGIER, N. Morphological classification of disintegration of round liquid jets in a coaxial air stream. *Atomization and Sprays 2*, 2 (1992), 137–153. 269, 308

[60] FEDKIW, R., ASLAM, T., MERRIMAN, B., AND OSHER, S. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics152*, 2 (1999), 457–492. 314

[61] FÉVRIER, P. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000. 53

[62] FÉVRIER, P., AND SIMONIN, O. Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flows. part 2 : Application of a two-phase second-moment transport model for prediction of turbulent gas-particle flows. In *Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flows, Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode Saint Genese (Belgium)* (2000). 52, 53

[63] FÉVRIER, P., SIMONIN, O., AND SQUIRES, K. D. Partitioning of particle velocities in gas–solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics533* (2005), 1–46. 44, 45

[64] FUJIMOTO, S., AND SUZUKI, M. The induction period of hydrogen–oxygen and methane–oxygen mixtures in a shock tube. *Memoirs Defense Academy, Japan 7*, 3 (1967), 1037–1046. 99

[65] GARCIA, M. *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. PhD thesis, CERFACS, 42, avenue Gaspard Coriolis, 3057 Toulouse, France, 2009. 44

[66] GARCÍA, M., SOMMERER, Y., SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Evaluation of Euler/Euler and Euler/Lagrange strategies for large eddy simulations of turbulent reacting flows. In *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion* (2005). 44

[67] GASTAL, J. Ariane 3rd stage ignition improvement. In *24th AIAA/SAE/ASME/ASEE Joint Propulsion Conference* (Boston, MA, July 11-13 1988), AIAA 88–2932. 21

[68] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P., AND CABOT, W. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids3*, 7 (1991), 1760–1765. 64

[69] GIAUQUE, A., SELLE, L., POINSOT, T., BUECHNER, H., KAUFMANN, P., AND KREBS, W. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using les and measurements. *Journal of Turbulence6*, 21 (2005), 1–20. 24, 317

[70] GLASSMAN, I. *Combustion*. Academic Press, New York, 1987. 123

[71] GODUNOV, S. A finite difference method for the numerical computation of discontinuous solution of the equations of gas dynamics. *Mat. Sb.* (1959). 84

[72] GÖKALP, I., CHAUVEAU, C., MORIN, B., AND VIEILLE, B. Cassure et vaporisation des gouttes : effets de la pression. *GDR : combustion dans les moteurs fusée* (2001), 67–85. 343, 344

[73] GOROKHOVSKI, M., AND SAVELIEV, V. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Approche stochastique pour la modélisation de la pulverisation air-assistée. 23

[74] GU, X., HAQ, M., LAWES, M., AND WOOLLEY, R. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combustion and Flame121* (2000), 41–58. 96

[75] GUEYFFIER, D., LI, J., NADIM, A., SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics152*, 2 (1999), 423–456. 314

[76] GURLIAT, O., SCHMIDT, V., HAIDN, O., AND OSCHWALD, M. Ignition of cryogenic h 2/lox sprays. *Aerospace Science and Technology 7*, 7 (2003), 517–531. 22, 26, 295, 299, 308, 313

[77] HERRMANN, M. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics227*, 4 (2008), 2674–2706. 314

[78] HIDAKA, Y., SATO, K., HENMI, Y., TANAKA, H., AND INAMI, K. Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation. *Combustion and Flame118*, 3 (1999), 340–358. 99

[79] HIRSCH, C. *Numerical Computation of internal and external flows*. John Wiley, New York, 1988. 86

[80] HIRSCHFELDER, J., CURTISS, C., AND BIRD, R. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969. 40

[81] HOPFINGER, E. Atomisation d'un jet liquide par un jet de gaz coaxial : un bilan des connaissance acquises. Tech. rep., GdR "Combustion dans les moteurs fusée", 2002. 272, 273, 274

[82] HUANG, C., SHY, S., LIU, C., AND YAN, Y. A transition on minimum ignition energy for lean turbulent methane combustion in flamelet and distributed regimes. *Proceedings of the Combustion Institute 31*, 1 (2007), 1401–1409. 126, 127, 128

[83] HUBBARD, G., DENNY, V., AND MILLS, A. Droplet evaporation : effects of transient and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer 18* (1975), 1003–1008. 53, 57

[84] JAHN, G. Der zundvorgang in gasgemischen, 1934. 93, 94

[85] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical solution of the euler equations 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. 80

[86] JAY, S., LACAS, F., AND CANDEL, S. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame144*, 3 (2006), 558–577. 23

[87] JIANG, G. S., AND SHU, C. W. Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of Computational Physics126* (1996), 202–228. 84

[88] JUNIPER, M., DARABIHA, N., AND CANDEL, S. The extinction limits of a hydrogen counterflow diffusion flame above liquid oxygen. *Combustion and Flame135*, 1-2 (2003), 87–96. 104

[89] JUNIPER, M., TRIPATHI, A., SCOUFLAIRE, P., ROLON, C., AND CANDEL, S. *The structure of cryogenic flames at subcritical and supercritical pressures*. Centre National D'Etude Spatial, 2001. 22, 284, 286, 310

[90] KAUFMANN, A. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 24, 44, 52

[91] KEE, R., WARNATZ, J., AND MILLER, J. A fortran computer code package for the evaluation of gas phase viscosities, conductivities, and diffusion coefficients. Tech. Rep. SAND83-8209, Sandia National Laboratories, 1983. 97

[92] KEE, R. J., RUPLEY, F. M., AND MILLER, J. A. Chemkin-ii : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Tech. rep., Sandia National Laboratories, 1991. 40, 100

[93] KIM, D., DESJARDINS, O., HERRMANN, M., AND MOIN, P. Toward two-phase simulation of the primary breakup of a round liquid jet by a coaxial flow of gas. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2006). 315, 318

[94] KOLMOGOROV, A. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR 30* (1941), 301. 63

[95] KONO, M., NIU, K., TSUKAMOTO, T., AND UJIIE, Y. Mechanism of flame kernel formation produced by short duration sparks. *Proc. 22nd Symp.(Intl) on Comb* (1988), 1643–1649. 131

[96] KRAVCHIK, T., AND SHER, E. Numerical modeling of spark ignition and flame initiation in a quiescent methane-air mixture. *Combustion and Flame99* (1994), 635–643. 131

[97] KUO, K. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986. 41, 54

[98] KURDYUMOV, V., BLASCO, J., SANCHEZ, A., AND LINAN, A. On the calculation of the minimum ignition energy. *Combustion and Flame*, 136 (2004), 394–397. 122

[99] L., R. *Instabilité et Entrainement à l'interface d'une couche de m/'elange liquide-gaz*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 1997. 270

[100] LAMARQUE, N. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2008. 77, 79, 281, 288

[101] LARDIER, C. Asie-europe : l'écart se creuse. *Air et Cosmos 2107* (jan. 2008). 20

[102] LARDIER, C. Suprématie russe et montée en puissance de l'asie. *Air et Cosmos 2145* (janv. 2009). 19

[103] LARDIER, C. Un nouvel étage supérieur pour ariane-v. *Air et Cosmos 2132* (Juil. 2008). 20, 21

[104] LARDIER, C. Nouvel échec de proton le 15 mars. *Air et Cosmos 2117* (Mars 2008). 21

[105] LARDIER, C. Succès pour le troisième vol habité chinois. *Air et Cosmos 2141* (Oct. 2008). 19

[106] LASHERAS, J., AND HOPFINGER, E. Liquid jet instability and atomisation in a coaxial gas stream. *Ann. Rev. Fluid. Mech. 32* (2000), 275–308. 271, 272, 308

[107] LASHERAS, J., VILLERMAUX, E., AND HOPFINGER, E. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics 357* (1998), 351–379. 273, 274

[108] LAURENT, F., AND MASSOT, M. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse sprayflames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling5* (2001), 537–572. 45

[109] LAURENT, F., MASSOT, M., AND VILLEDIEU, P. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics* (2004). 45, 314

[110] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math. 13* (1960), 217–237. 79

[111] LEE, J. H., AND KNYSTAUTAS, R. Laser spark ignition of chemically reactive gases. *AIAA Journal 7*, 2 (1969), 312–317. 119, 120, 121

[112] LEE, M. J., HALL, M., EZEKOYE, O. A., AND MATTHEWS, R. Voltage and energy deposition characteristics of spark ignition systems. Tech. Rep. 2005-01-0231, SAE, 2005. 117

[113] LEFEBVRE, A. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999. 114, 115, 124, 146

[114] LÉGIER, J.-P., POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000* (Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000), pp. 157–168. 24, 69, 73, 317

[115] LESIEUR, M. Recent approaches in large-eddy simulations of turbulence. In *New tools in turbulence modelling*, O. Métais and J. Ferziger, Eds. Les Editions de Physique - Springer Verlag, 1997, pp. 1 – 28. 64

[116] LESIEUR, M., AND METAIS, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics28* (1996), 45 – 82. 64

[117] LEWIS, B., AND VON ELBE, G. *Combustion, Flames and Explosions of Gases*, third ed. Academic Press, New York, 1987. 122, 123, 126

[118] LIN, S., AND REITZ, R. Drop and spray formation from a liquid jet. *Annual Review of Fluid Mechanics 30*, 1 (1998), 85–105. 274

[119] LYONS, K. Toward an understanding of the stabilization mechanisms of lifted turbulent jet flames : Experiments. *Progress in Energy and Combustion Science33*, 2 (2007), 211–231. 299, 303

[120] MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., APTE, S., IACCARINO, G., HAM, F., AND MOIN, P. Progress towards large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting flows in complex geometries. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002, pp. 115–142. 44

[121] MALY, R., AND VOGEL, M. Initiation and propagation of flame fronts in lean ch4-air mixtures by the threemodes of the ignition spark. In *17th Symp. (Int.) on Combustion* (1978), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 821–831. 116, 117, 118

[122] MARINOV, N., WESTBROOK, C., AND PITZ, W. Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen. *Transport Phenomena in Combustion 1* (1996). 92

[123] MARMOTTANT, P. *Atomisation d'un liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2001. 272, 273, 308

[124] MARMOTTANT, P., AND VILLERMAUX, E. Atomisation primaire dans les jets coaxiaux. *Combustion (Revue des Sciences et Techniques de Combustion) 2* (2002), 89–126. 270, 271, 272, 308

[125] MARTIN, C., BENOIT, L., SOMMERER, Y., NICOUD, F., AND POINSOT, T. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal44*, 4 (2006), 741–750. 24, 317

[126] MASHAYEK, F., AND PANDYA, R. Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science29* (2003), 329–378. 44

[127] MASQUELET, M. *Simulations of a Sub-scale Liquid Rocket Engine : Transient Heat Transfer in a Real Gas Environment*. PhD thesis, School of Aerospace Engineering Georgia Institute of Technology, December 2006. 23

[128] MASSOT, M., AND VILLEDIEU, P. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *Probleèmes mathématiques de la mécanique C.R.Acad.Sci.Paris Serie 1* (2001), 332ff. 314, 318

[129] MAYER, W., IVANCIC, B., SCHIK, A., AND HORNUNG, U. Propellant atomization and ignition phenomena in liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. *Journal of Propulsion and Power 17*, 4 (2001), 794–799. 22, 277, 284, 286, 308

[130] MAYER, W., AND TAMURA, H. Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *Journal of Propulsion and Power12*, 6 (1996), 1137–1147. 22, 284, 286, 308, 313

[131] MAYER, W., AND TAMURA, H. Injection and mixing processes in high-pressure liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. *Journal of Propulsion and Power16*, 5 (2000), 823–828. 284

[132] MCMANUS, K., AGUERRE, F., YIP, B., , AND CANDEL, S. Analysis of the ignition sequence of a nonpremixed combustor using plif imaging. *Non-intrusive combustion diagnostics* (1993), 714–725. 299, 313

[133] MENEVEAU, C., AND LUND, T. The dynamic smagorinsky model and scale-dependent coefficients in the viscous range of turbulence. *Physics of Fluids9*, 12 (1997), 3932–3934. 197

[134] METGHALCHI, M., AND KECK, J. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and Flame38* (1980), 143–154. 96, 143

[135] MITTINTI, D. N. R., AND DABORA, E. K. Plasma jet ignition studies. *Proceedings of the Combustion Institute Twentieth Symposium (Internationnal) on Combustion* (1984), 169–177. 115

[136] MOREAU, M. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 68

[137] MOREAU, M., BEDAT, B., AND SIMONIN, O. A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems* (2005), ILASS Americas. 68

[138] MOSSA, J.-B. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs - TH/CFD/05/74*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 45, 50, 314

[139] MOUREAU, V., LARTIGUE, G., SOMMERER, Y., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND POINSOT, T. High-order methods for dns and les of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics202*, 2 (2005), 710–736. 88

[140] NICOLI, C., DENET, B., AND HALDENWANG, P. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Combustion de jets supercritiques. 23

[141] NICOUD, F., BAGGETT, J., MOIN, P., AND CABOT, W. New approximate boundary conditions for les. part 1 : Finding the answer via an optimal control strategy. In *APS/DFD meeting* (New York, 1999), vol. 44 of *Bull. Amer. Phys. Soc.* 64

[142] NICOUD, F., AND DUCROS, F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turbulence and Combustion62*, 3 (1999), 183–200. 197

[143] OEFELEIN, J. C. Les of supercritical lox-h2 injection and combustion in a shear coaxial unielement rocket. *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, AIAA-2003-0479 (Jan. 2003). 23

[144] OEFELEIN, J. C. Thermophysical characteristics of shear-coaxial lox–h2 flames at supercritical pressure. *Proceedings of the Combustion Institute30*, 2 (2005), 2929–2937. 23

[145] O'ROURKE, P., AND AMSDEN, A. The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup. *SAE Technical Paper 87-2089* (1987). 314

[146] PANDYA, R., AND MASHAYEK, F. Two-fluid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent flows. *International journal of heat and mass transfer45* (2002), 4753–4759. 44

[147] PASCAUD, S. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 317

[148] PASCHEN, F. Ueber die zum funkenübergang in luft, wasserstoff und kohlensäure bei verschiedenen drucken erforderliche potentialdifferenz. *Annalen der Physik 273*, 5 (1889), 69–96. 124

[149] PETERS, N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *21st Symp. (Int.) on Combustion* (1986), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1231–1250. 70

[150] PETERSEN, E., KALITAN, D., AND RICKARD, M. Chemical Kinetics of OH* Chemiluminescence in High Temperature Reacting Flows. In *Proc. of the Third Joint Meeting of the US Sections of the Combustion Institute* (Illinois, USA, 2003). 99

[151] PHUOC, T., AND WHITE, F. Laser induced spark ignition of ch4/air mixtures. *Combustion and Flame119* (1999), 203–216. 118, 119, 120, 122, 123, 124, 125, 126

[152] PHUOC, T., AND WHITE, F. An optical and spectroscopic study of laser-induced sparks to determine available ignition energy. In *29th Symp. (Int.) on Combustion* (2002), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1621 – 1628. 119, 120, 121

[153] PISCHINGER, S., AND HEYWOOD, J. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion* (1990), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1033–1040. 131

[154] PITSCH, H. Large-Eddy Simulation of turbulent combustion. *Annual Review of Fluid Mechanics38* (2006), 453–482. 69

[155] POINSOT, T., ANGELBERGER, C., EGOLFOPOULOS, 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. 88

[156] POINSOT, T., AND LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics101*, 1 (1992), 104–129. 88

[157] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005. 39, 61, 71, 72, 95, 96, 105, 106, 268

[158] POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. 22

[159] POUROUCHOTTAMANE, M., DUPOIRIEUX, F., HABIBALLAH, M., AND BORGHI, R. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Modélisation des brouillards denses pour la combustion cryotechnique. 23

[160] PRECLIK, D., KNAB, O., ESTUBLIER, D., AND WENNERBERG, D. *Liquid rocket thrust chamber : aspects of modeling, analysis and design*, vol. 200. AIAA, 2004, ch. Simulation and analysis of thrust chamber flowfields : Storable propellant rockets. 23

[161] PRECLIK, D., KNAB, O., GÖRGEN, J., AND HAGEMANN, G. *Liquid rocket thrust chamber : aspects of modeling, analysis and design*, vol. 200. AIAA, 2004, ch. Simulation and analysis of thrust chamber flowfields : cryogenic propellant rockets. 23

[162] PRZEKWAS, A. Theoretical modeling of liquid jet and sheet breakup processes. *Recent advances in spray combustion : Spray atomization and drop burning phenomena 1* (1996), 211–239. 274

[163] RASHKOVSKY, S. Spark ignition of ill-mixed gases. In *First Mediterranean Combustion Symposium, Antalya, Turkey* (1999). 126

[164] REHAB, H., VILLERMAUX, E., AND HOPFINGER, E. Flow regimes of large-velocity-ratio coaxial jets. *Journal of Fluid Mechanics 345* (1997), 357–381. 274

[165] REITZ, R. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomisation and Spray Technology 3*, 4 (1987), 309–337. 314

[166] RÉVEILLON, J., AND VERVISCH, L. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics537* (2005), 317–347. 298, 314

[167] RIBER, E. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 48

[168] RIBER, E., MOREAU, M., SIMONIN, O., AND CUENOT, B. Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions* (Merseburg, Germany, 2005). 50, 68

[169] RIBER, E., MOUREAU, V., GARCÍA., M., POINSOT, T., AND SIMONIN, O. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. *Journal of Computational Physics228* (2009), 539–564. 44

[170] RIBERT, G., ZONG, N., YANG, V., PONS, L., DARABIHA, N., AND CANDEL, S. Counterflow diffusion flames of general fluids : Oxygen/hydrogen mixtures. *Combustion and Flame* (2008). 104, 105, 106

[171] RICHARD, S., COLIN, O., VERMOREL, O., BENKENIDA, A., ANGELBERGER, C., AND VEYNANTE, D. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. of the Combustion Institute 31*, 3059-3066 (2007). 131

[172] RICHARDSON, E., AND MASTORAKOS, E. Numerical investigation of forced ignition in laminar counterflow non-premixed methane-air flames. *Combustion Science and Technology179*, 1-3 (2007), 21–37. 126

[173] RONNEY, P. Laser versus conventional ignition of flames. *Opt. Eng. 33* (1994), 510–521. 118

[174] ROUX, A. *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans un stato-reacteur*. PhD thesis, CERFACS, 42, avenue Gaspard Coriolis, 3057 Toulouse, France, 2009. 315

[175] ROUX, S., LARTIGUE, G., POINSOT, T., MEIER, U., AND BÉRAT, C. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combustion and Flame141* (2005), 40–54. 24, 317

[176] SAGAUT, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles*, mathématiques & applications ed. Springer, 1998. 22, 64

[177] SAGAUT, P. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998. 59

[178] SCHILLER, L., AND NAUMAN, A. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung 77* (1935), 318–320. 53

[179] SCHMIDT, V., KLIMENKO, D., HAIDN, O., OSCHWALD, M., NICOLE, A., ORDONNEAU, G., AND HABIBALLAH, M. Experimental investigation and modeling of the ignition transient of a coaxial h 2/o 2-injector. *ONERA, TP no. 2004-49 2004*, 49 (2004). 22, 299, 308, 313

[180] SCHMIDT, V., KLIMENKO, D., AND OSCHWALD, M. Preliminary results of test case "a" laser ignition tests for coaxial gh2/go2-injection. Tech. rep., DLR, Lampoldshausen, 2003. 26, 247, 256

[181] SCHMIDT, V., WEPLER, U., HAIDN, O., AND OSCHWALD, M. Characterization of the primary ignition process of a coaxial gh 2/lox spray. *42 nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2004). 22, 26, 295

[182] SCHMITT, P. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 88

[183] SCHMITT, P., POINSOT, T., SCHUERMANS, B., AND GEIGLE, K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *Journal of Fluid Mechanics570* (2007), 17–46. 24, 88, 317

[184] SCHMITT, T. *Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente à pression supercritique*. PhD thesis, CERFACS, 42, avenue Gaspard Coriolis, 3057 Toulouse, France, 2009. 25, 318

[185] SCHONFELD, 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. 88

[186] SELLE, L., LARTIGUE, G., POINSOT, T., KOCH, R., SCHILDMACHER, K.-U., KREBS, W., PRADE, B., KAUFMANN, P., AND VEYNANTE, D. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combustion and Flame137*, 4 (2004), 489–505. 24, 317

[187] SENGISSEN, A., GIAUQUE, A., STAFFELBACH, G., PORTA, M., KREBS, W., KAUFMANN, P., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. of the Combustion Institute 31* (2007), 1729–1736. 24, 317

[188] SENGISSEN, A., KAMPEN, J. V., HULS, R., STOFFELS, G., KOK, J., AND POINSOT, T. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combustion and Flame150* (2007), 40–53. 24, 69, 317

[189] SETHIAN, J. *Level Set Methods and Fast Marching Methods*. Cmbridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge University Press, 1999. 314

[190] SHAPIRO, A. H. *The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow*. Wiley, 1953. 250, 341

[191] SHER, E., BEN-YA'ISH, J., AND KRAVCHIK, T. On the birth of spark channels. *Combustion and Flame89* (1992), 186–194. 131

[192] SIMONIN, O. Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute fo Fluid Dynamics, 1996. 44

[193] SIMONIN, O., FEVRIER, P., AND LAVIEVILLE, J. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *Journal of Turbulence3* (2002). 45

[194] SINGLA, G., SCOUFLAIRE, P., ROLON, C., AND CANDEL, S. Planar laser-induced fluorescence of OH in high-pressure cryogenic LOx/GH2 jet flames. *Combustion and Flame 144*, 1-2 (2006), 151–169. 22, 310

[195] SIRIGNANO, W. A. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. 23, 50

[196] SLACK, M. W. Rate coefficient for H+ O 2+ M= HO 2+ M evaluated from shock tube measurements of induction times. *Combustion and Flame28*, 3 (1977), 241–249. 99

[197] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review91* (1963), 99–164. 64, 68, 197, 281, 288

[198] SMOOKE, M., AND KOSZYKOWSKI, M. Fully adaptive solutions of one-dimensional mixed initial-boundary value problem with applications to unstable problems in combustion. Tech. Rep. SAND 83-8219, Sandia National Laboratories, 1983. 97

[199] SNYDER, R., HERDING, G., ROLON, J., AND CANDEL, S. Analysis of Flame Patterns in Cryogenic Propellant Combustion. *Combustion Science and Technology124*, 1 (1997), 331–370. 22, 26, 267, 310

[200] SPALDING, D. B. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion* (1953), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 847–864. 53

[201] SPALDING, D. B. Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. *Fuel 32* (1953), 169–185. 53

[202] SPALDING, D. B. Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. In *16th Symp. (Int.) on Combustion* (1976), The Combustion Institute, pp. 1657–1663. 68

[203] SPIGLANIN, T. A., MCILROY, A., FOURNIER, E. W., COHEN, R. B., AND SYAGE, J. A. Time-resolved imaging of flame kernels : Laser spark ignition of h2/o2/ar mixtures. *Combustion and Flame102*, 3 (1995), 310–328. 119

[204] SQUIRES, K., FORSYTHE, J., AND SPALART, P. DETACHED-EDDY SIMULATION OF THE SEPARATED FLOW AROUND A FOREBODY CROSS-SECTION. *Direct and Large-Eddy Simulation IV* (2002), 481. 23

[205] STAFFELBACH, G., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation* (2005). 311

[206] STAFFELBACH, G., AND POINSOT, T. High performance computing for combustion applications. In *Super Computing 2006* (Tampa, Florida, USA, 2006). 311

[207] STEPOWSKI, D., CESSOU, A., AND GOIX, P. Flame stabilization and oh fluorescence mapping of the combustion structures in the near field of a spray jet. *Combustion and Flame99*, 3/4 (1994), 516–522. 274

[208] STRUIJS, R. *A multi-dimensional upwind discretization method fot the Euler equations on unstructured grids*. PhD thesis, Technical University of Delft, 1994. 88

[209] STULL, D., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Tech. Rep. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971. 37

[210] TAJMAR, M. *Advanced space propulsion systems*. Springer, 2003. 17, 18

[211] TANNER, F. Liquid jet atomization and droplet breakup modeling of non-evaporating diesel fuel sprays. *SAE transactions 106*, 3 (1997), 127–140. 314

[212] TANOFF, M., SMOOKE, M., TEETS, R., AND SELL, J. Computational and experimental studies of laser-induced thermal ignition in premixed ethylene-oxidizer mixtures. *Combustion and Flame103* (1995), 253–280. 118

[213] TEETS, R., AND SELL, J. Calorimetry of ignition sparks. *SAE transactions 97* (1989), 371–383. 118

[214] TERNEL, C. *Contribution au développement de l'allumage par laser pour les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Faculté des sciences de l'Université de Rouen, 2006. 117, 121, 122, 124, 125, 126

[215] THIELE, M., SELLE, S., RIEDEL, U., WARNATZ, J., AND MAAS, U. Numerical simulation of spark ignition including ionization. In *Twenty-Eighth Symposium (International) on Combustion* (2000), T. C. Institute, Ed., pp. 1177–1185. 131

[216] THIELE, M., WARNATZ, J., DREIZLER, A., LINDENMAIER, S., SCHIESSL, R., MAAS, U., GRANT, A., AND EWART, P. Spark ignited hydrogen/air mixtures : two dimensional detailed modeling and laser based diagnostics. *Combustion and Flame 128*, 1-2 (2002), 74–87. 131

[217] THOBOIS, L. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 64

[218] TIESZEN, S., STAMPS, D., AND O'HERN, T. A heuristic model of turbulent mixing applied to blowout of turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame106* (1996), 442–466. 198

[219] TRUFFIN, K. *Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 69

[220] TSE, S., ZHU, D., AND LAW, C. Morphology and burning rates of expanding spherical flames in h 2= o 2= inert mixtures up to 60 atmospheres. *Proceedings of the Combustion Institute 28* (2000), 1793–1800. 96

[221] VALLET, A., BURLUKA, A. A., AND BORGHI, R. Development of a Eulerian Model for the" Atomization" of a Liquid Jet. *Astronomy and Astrophysics11*, 6 (2001), 619–642. 45

[222] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics23* (1977), 276–299. 84

[223] VÁZQUEZ-ESPÍ, C., AND LIÑÁN, A. Thermal-diffusive ignition and flame initiation by a local energy source. *Combustion Theory and Modelling6*, 2 (2002), 297–315. 131

[224] VERSAEVEL, P. *Combustion laminaire diphasique : Etude théorique et expérimentale*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996. 57

[225] VEYNANTE, D., AND VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science28* (2002), 193 – 266. 69

[226] VILLERMOZ, P., DURAND, P., BOURÉ, G., LEQUETTE, L., SCHERRER, D., VUILLOT, F., AND HABIBALLAH, M. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Collogue de Synthese du Groupe de Recherche*. Cépaduès-Éditions, 2001, ch. Evaluation des potentialités et limitations de la modélisation numérique appliquée à la combustion liquide fusée. 23

[227] VON NEUMANN, J., AND RICHTMEYER, R. D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys. 21* (1950), 231. 85

[228] WANG, L.-P., AND MAXEY, M. R. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics256* (1993), 27–68. 53

[229] WARNATZ, J. Structure of freely propagating and burner-stabilized flames in the h 2-co-o 2 system. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem 83* (1979), 950. 93, 94

[230] WILKES, J., DANEHY, P., AND NOWAK, R. Fluorescence Imaging Study of Transition in Underexpanded Free Jets. In *Proceedings of the 21 stInternational Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities* (2005), pp. 1–8. 83

[231] WILLIAMS, F. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. 69, 96, 97, 99

[232] YAMASHITA, H., SHIMADA, M., AND TAKENO, T. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. In *26th Symp. (Int.) on Combustion* (1996), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 27 – 34. 202, 298

[233] YOSHIZAWA, A. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Physics of Fluids29*, 7 (1986), 2152–2164. 68

[234] ZHANG, Y., AND SHU, C. High-Order WENO Schemes for Hamilton-Jacobi Equations on Triangular Meshes. *SIAM Journal on Scientific Computing 24*, 3 (2002), 1005–1030. 84

[235] ZITOUN, R., AND DESHAIES, B. Burning velocities of rich h2-o2 flames under cryogenic conditions. *Combustion and Flame 109*, 3 (1997), 427–435. 93, 94

[236] ZURBACH, S., AND CARIES, L. Supercritical combustion modeling of the rcm-2 test case : Mascotte 60 bar. In *Proceedings of the 3rd International Workshop : Rocket Combustion Modeling* (Paris, 2006), S. Zurbach, Ed. 23

Annexes

Annexe A

Termes du modèles de dépôt d'énergie

A.1 Intégrale du dépôt de densité de puissance dans un cas 3D

Dans cette partie il sera vérifié que l'intégrale de $\dot{Q}(x,y,z,t)$ dans tout l'espace et sur une durée infinie, est bien égale à ε_i.

$$\iiiint_{]-\infty;+\infty[^4} \dot{Q}(x,y,z,t)dxdydzdt = \frac{\varepsilon_i}{Vi} \iiiint_{]-\infty;+\infty[^4} e^{-\frac{1}{2}.[(\frac{x-x_0}{\sigma_s})^2+(\frac{y-y_0}{\sigma_s})^2+(\frac{z-z_0}{\sigma_s})^2+(\frac{t-t_0}{\sigma_t})^2]} dxdydzdt \tag{A.1}$$

Sachant que $Vi = 2\pi\sigma_s^3\sigma_t$, on obtient :

$$\boxed{\iiint_{]-\infty;+\infty[^4} \dot{Q}(x,y,z,t)dxdydydt = \frac{\varepsilon_i}{Vi}\left(\sqrt{2\pi}\right)^3 \sigma_s.\sqrt{2\pi}\sigma_t = \varepsilon_i} \tag{A.2}$$

A.2 Définition de σ_s et σ_t

σ_s et σ_t ont été définis de manière à ce que 98% de l'énergie totale déposée soit contenue dans le "volume" $\Delta x.\Delta y.\Delta z.\Delta t$. Cette partie est consacrée au calcul de l'intégrale :

$$E = \iiiint_{[-\frac{\Delta_s}{2};+\frac{\Delta_s}{2}]^3\times[-\frac{\Delta_t}{2};+\frac{\Delta_t}{2}]} \dot{Q}(x,y,z,t)\, dxdydzdt \tag{A.3}$$

Posons :

$$J_i = \int_{-\frac{\Delta_i}{2}}^{+\frac{\Delta_i}{2}} exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{i}{\sigma_i}\right)^2\right) di \tag{A.4}$$

En reproduisant le développement de la section **??**, il est possible de déterminer J_i :

$$\left(\frac{J}{2}\right)^2 = \sigma_i^2\frac{\pi}{2}\left(1 - exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_i/2}{\sigma_i}\right)^2\right]\right) \tag{A.5}$$

D'après les relations Eq. A.3, A.4 et A.5, E peut s'écrire :

$$E = \frac{\varepsilon_i}{2\pi\sigma_s^3\sigma_t} J_x\, J_y\, J_z\, J_t = \varepsilon_i \left(1 - exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_s/2}{\sigma_s}\right)^2\right]\right)^{3/2} \left(1 - exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_t/2}{\sigma_t}\right)^2\right]\right)^{1/2} \tag{A.6}$$

En posant $\sigma_s = \frac{\Delta_s/2}{\sqrt{ln(10^b)}}$ et $\sigma_t = \frac{\Delta_t/2}{\sqrt{ln(10^b)}}$, l'expression A.6 devient :

$$E = \varepsilon_i \left(1 - exp\left[-\frac{1}{2} ln(10^b)\right]\right)^2 = \varepsilon_i \left(1 - 10^{-b/2}\right)^2 \tag{A.7}$$

et pour $b = 4$, on obtient :

$$E \approx\ 0,98\, \varepsilon_i \tag{A.8}$$

Annexe B

Procédure 0D pour le calcul de l'allumage du banc M3

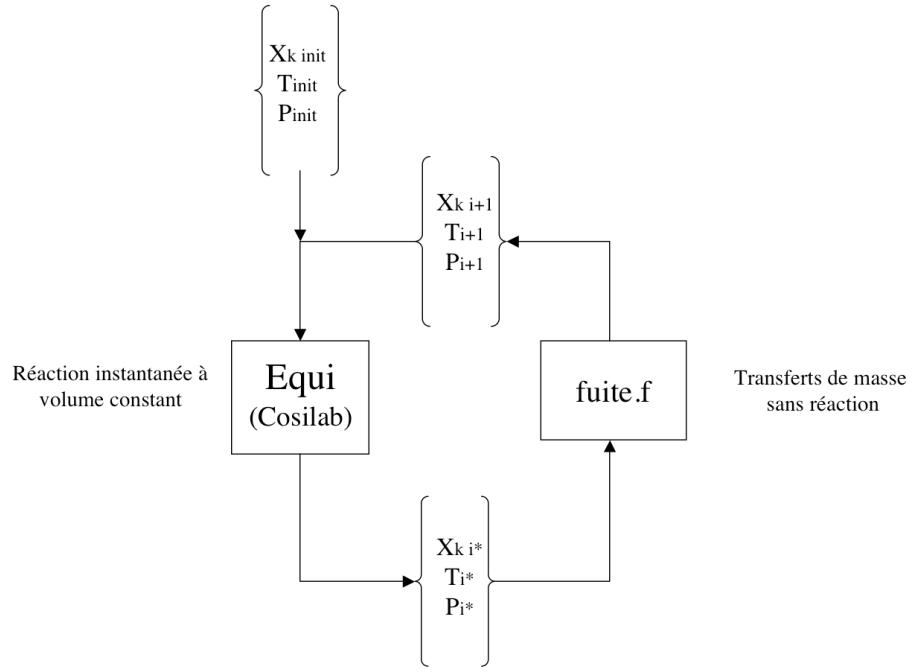


FIG. B.1 - *Diagramme du calcul.*

L'évolution temporelle de la pression chambre est calculée en deux étapes distinctes (Fig. B.1). Pour chaque itération, la combustion est représentée par une mise à l'équilibre chimique à volume constant. L'état d'équilibre est déterminé via le Solver EQUI de Cosilab (Fig. B.1), à partir d'une thermodynamique à 8 espèces (H_2,O_2, H, O, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2). Ensuite une étape non réactive (module

"fuite.f" de la Fig. B.1) évalue la variation de masse et d'énergie de la chambre en prenant en compte les débits d'injection et en calculant la masse expulsée par la tuyère (section B.1). La procédure de calcul est présentée sur la Fig. B.2, sur deux pas de temps (Δ_t) consécutifs.

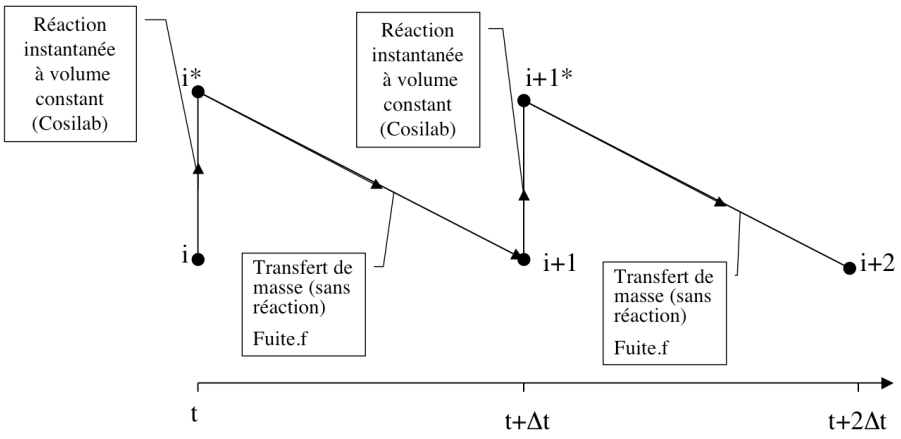


FIG. B.2 - *Séquence de calcul sur deux itérations.*

B.1 Calcul de la variation de la masse et de l'énergie

Le calcul des variations de masse et d'énergie est réalisé dans l'étape **non-reactive**, les équations suivantes ne font donc pas intervenir de terme source dû aux réactions chimiques. Les équations présentées ci-dessous sont les équations théoriques du problème. Les méthodes réelles de calcul sont détaillées dans la section suivante.

Pendant l'étape non-réactive, la variation de la masse m de la chambre s'écrit :

$$\frac{d}{dt}(m) = \dot{m}_{tuy} + \dot{m}_{H2} + \dot{m}_{O2} \tag{B.1}$$

Où $\dot{m}_{tuy}$ est le débit masse expulsé à travers la tuyère (compté négativement), $\dot{m}_{O2}$ et $\dot{m}_{H2}$ les débits d'injection d'oxygène et d'hydrogène respectivement.

La conservation de l'enthalpie se traduit par :

$$\frac{d}{dt}(mCpT) = \dot{m}_{tuy}CpT + \dot{m}_{H2}Cp_{H_2}T_{H_2} + \dot{m}_{O2}Cp_{O_2}T_{O_2} \tag{B.2}$$

où Cp est la capacité calorifique du mélange à pression constante et T la température dans la chambre. Cp_{H_2} et Cp_{O_2} sont les Cp d'injection et T_{H_2} et T_{O_2} les températures d'injection d'hydrogène et d'oxygène.

La pression découle de la loi des gaz parfaits :

$$P = \rho.r.T \tag{B.3}$$

B.1.1 Méthode de calcul

Les résultats (x_k, P et T) de l'étape d'équilibre thermodynamique, sont tout d'abord utilisés pour calculer la densité ρ et la capacité calorifique du mélange à pression constante Cp. La capacité calorifique est calculée en supposant qu'entre 1000K et 2300K les Cp de chaque espèce varient linéairement avec la température. Les équations de ces droites ont été déterminées à partir des tables thermodynamiques issues de http ://cea.grc.nasa.gov.

$$Cp = \frac{1}{W_{mel}}.\sum(x_k.Cp_k) \tag{B.4}$$

où les Cp_k sont les capacités calorifiques de chaque espèce, W_{mel} la masse molaire du mélange et x_k sont les fractions molaires des espèces du mélange. Le γ du mélange est déduit de :

$$\gamma = \frac{Cp}{Cp - r} \tag{B.5}$$

Ce qui permet de calculer la vitesse du son c :

$$c = \sqrt{\gamma.r.T} \tag{B.6}$$

La variation de la masse contenue dans la chambre est calculée grâce à l'Eq. B.1 en supposant que les débits d'injection d'hydrogène et d'oxygène sont constants et égaux à ceux de l'expérience.

Le calcule du flux de masse sortant par la tuyère $\dot{m}_{tuy}$ est calculé de la façon suivante :

Tout d'abord le régime (sonique ou sub-sonique) de l'écoulement est déterminé à partir de la pression chambre P et la pression exterieure $P_{ext} = 1\,bar$: si P est superieure à la pression critique Pc, l'écoulement est sonique. Pc est définie par [190] :

$$\frac{Pc}{P_{ext}} = \left(\frac{2}{\gamma + 1}\right)^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \tag{B.7}$$

Si le col n'est pas sonique $\dot{m}_{tuy}$ est calculé suivant l'expression :

$$\dot{m}_{tuy} = -\rho A_{col} v_{col} \tag{B.8}$$

avec A_{col} la surface du col de la tuyère et v_{col} la vitesse moyenne de l'écoulement à travers le col. Cette dernière est calculée à partir de l'équation de concervation de la quantité de mouvement :

$$P = P_{ext} + \rho.\frac{v_{col}^2}{2} \tag{B.9}$$

Si le col est sonique, le débit masse à travers le col est bloqué et se détermine grâce à l'expression du débit au col d'une tuyère choquée issue de la théorie de Prandtl-Meyer [190] :

$$\dot{m}_{tuy} = -\frac{P\,A_{col}}{\sqrt{T}}.\sqrt{\frac{\gamma}{R}(\frac{2}{\gamma+1})^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}} \tag{B.10}$$

La variation de la température due aux transferts de masse est calculée en supposant la chambre adiabatique, le bilan de flux utilisé est le suivant :

$$m\,Cp\,\frac{dT}{\Delta t} = \dot{m}_{tuy}\,Cp\,T + \dot{m}_{H2}\,Cp_{H_2}\,T_{H_2} + \dot{m}_{O2}\,Cp_{O_2}\,T_{O_2} \tag{B.11}$$

La nouvelle température T_{new} est donnée par :

$$T_{new} = T + dT \tag{B.12}$$

La pression P_{new} de la chambre à la fin de l'itération est calculée en supposant que le mélange est un gaz parfait :

$$P_{new} = \rho_{new}.R.T_{new} \tag{B.13}$$

Les données thermodynamiques et chimiques résultant de la routine sont ensuite réinjectées dans un fichier d'entrée de Cosilab qui peut ensuite calculer le nouvel état d'équilibre.

Annexe C

Validation des paramètres diphasiques du Lox

Avant de réaliser les calculs LES, les paramètres diphasiques du Lox ont été testés dans un cas d'évaporation 0D. Ce Cas test permet de reproduire l'évolution temporelle du volume d'une goutte isolée dans une atmosphère gazeuse. Les équations régissant l'évaporation sont celles d'AVBP (cf. chapitre 3) en supposant que la température de la goutte est homogène (sa conductivité thermique est infinie). Aucun écoulement autour de la goutte n'est considéré, l'évaporation est donc pilotée par les effets purement diffusifs de la phase gazeuse.

Les paramètres liquides utilisés pour le Lox sont présentés Tab. C.1.

$\rho_l\ [kg.m^{-3}]$	1,1908(NIST)
$T_{ref}\ [K]$	80
$C_{p,l}\ [J.kg^{-1}.K^{-1}]$	1681 (NIST)
$L_v\ [J.kg^{-1}]$	1,82 10^5(NIST)
$T_{cc}\ [K]$	97,24 (NIST)
$P_{cc}\ [Pa]$	2.0 10^5(NIST)

TAB. C.1 - *Paramètres diphasiques de l'oxygène liquide.*

On rappelle que ρ_l, $C_{p,l}$ et L_v sont définis à T_{ref} et que T_{cc} et P_{cc} permettent de localiser un point de référence sur la courbe de saturation de l'oxygène.

Les résultats de la simulation 0D ont été comparés à ceux de l'expérience de Gökalp et al. [72] dans laquelle des tests d'évaporation de goutte isolée d'oxygène liquide ont été réalisés. Dans l'expérience, la goutte est suspendue à une fibre de quartz de 0,2 mm de diamètre, dans une atmosphère au repos d'une enceinte fermée et pressurisée. A l'intérieur de l'enceinte, pression, température et mélange gazeux sont contrôlés. L'évolution du diamètre de la goutte est enregistrée par une caméra rapide.

Le cas test utilisé pour la validation est celui d'une goutte d'oxygène de 1.5 mm de diamètre plongée

dans une atmosphère gazeuse de di-azote à une pression de 1 bar et une température de 297K.

Une comparaison entre les résultats de simulation et de l'expérience de Gökalp et al. [72] est présentée Fig. C.1, où l'évolution temporelle du carré du diamètre de la goutte adimensionné par le diamètre initial est tracée.

Les taux d'évaporation dans l'expérience et dans la simulation sont suffisamment proches pour affirmer que les paramètres diphasiques du Lox sont corrects.

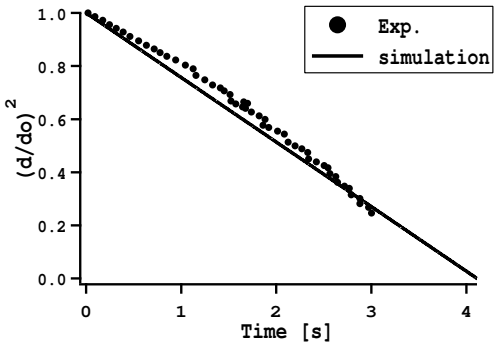


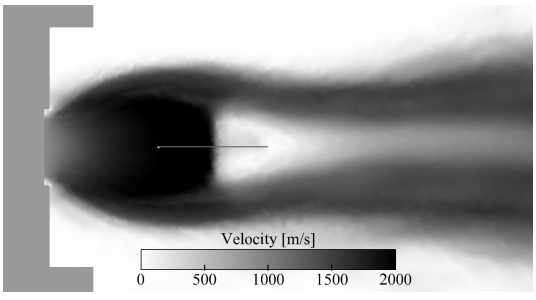
FIG. C.1 - *Evolution temporelle du carré du diamètre de la goutte adimensionné par son diamètre initial. Goutte d'oxygène dans une atmosphère de di-azote à 297K et à 1 bar. Symboles : expérience de Gökalp et al. [72] et ligne : simulation OD.*

Annexe D

Traitement du jet sous-détendu de l’allumeur de VINCI

Le jet sous-détendu de l’allumeur est issu d’une chambre amont dont la pression totale est de l’ordre de 16 bar et débouche dans la chambre de combustion à une pression initialement de 1 bar générant un jet sous-détendu (Fig. D.1). Sans l’utilisation de la méthode de Cook et Cabot le schéma numérique (ici TTG4A) ne parvient pas à résoudre correctement le choc hydrodynamique et des valeurs non-physiques de pression et de température apparaissent.

La Fig. D.2 montre l’évolution à travers le choc (sur la ligne grise de la Fig. D.1) de la pression, la vitesse et du terme de pression (en bar) induit par la viscosité de volume. Sur cette figure, la vitesse et la pression évoluent de façon continue sans générer d’oscillation haute fréquence. De plus le terme correctif de viscosité de volume intervient de manière très localisée au niveau du choc, assurant une conservation de la précision globale du calcul.

a) 

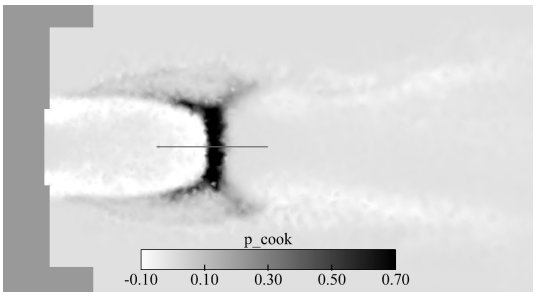
b) 

FIG. D.1 - *Détail du domaine en sortie d’allumeur : a) vitesse, b) senseur d’activation de l’hyper-viscosité (les mesures sont effectuées le long de la ligne grise).*

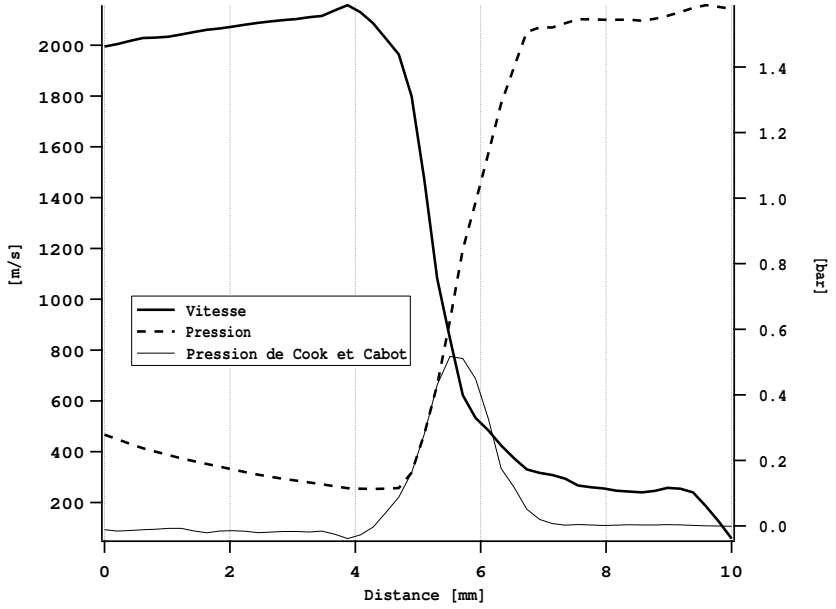


FIG. D.2 - *Vitesse, pression et senseur à travers le choc.*

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Doctorat d'Université, spécialité *Dynamique des Fluides*

20 mai 2009

Guilhem LACAZE

Simulation aux grandes échelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques

L'allumage d'un moteur fusée cryotechnique (carburants liquides) est une phase critique. La moindre anomalie dans la procédure d'allumage peut conduire à la destruction du lanceur. L'objectif de cette thèse est de développer une méthodologie s'appuyant sur la simulation aux grandes échelles (LES) pour étudier les phénomènes physiques impliqués dans un tel allumage. L'intérêt de la méthode LES est de pouvoir capturer les couplages instationnaires entre la turbulence, les processus diphasiques et la cinétique chimique. L'outil numérique est tout d'abord validé sur des cas académiques et expérimentaux, puis appliqué à un moteur fusée réel. Une approche graduelle est employée : les différents cas de validation présentent une complexité croissante, permettant d'isoler les processus physiques principaux. Ce travail de recherche montre que l'approche de la simulation aux grandes échelles, dans un contexte de calcul massivement parallèle, peut être utilisée pour étudier la séquence complète d'allumage dans un moteur fusée réel.

Mots clefs : combustion, turbulence, écoulements diphasiques, allumage, simulation aux grandes échelles

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS)
42 avenue Gaspard Coriolis
31057 Toulouse Cedex 1

Large eddy simulation of the ignition of cryogenic rocket engine

The ignition of a cryogenic rocket engine (liquid propellants) is a critical phase. The slightest anomaly in the ignition sequence can lead to the destruction of the entire launcher. The objective of this research work is to set a methodology based on the Large Eddy Simulation (LES) approach, to study the different physical phenomena involved in such ignition transient. The LES method can capture the unsteady processes such as turbulence, two-phase flow physics and chemical kinetics. The numerical tool is first validated in academic and experimental cases, and then applied to a real rocket engine. A gradual approach is employed : the complexity is increased between each validation case, so as to identify the main physical processes. This research work shows that the LES approach, in the context of massively parallel computing, can be used to study the whole ignition sequence of a real cryogenic rocket engine.

Keywords : combustion, turbulence, two-phase flows, ignition, large eddy simulation

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS)
42 avenue Gaspard Coriolis
31057 Toulouse Cedex 1
France