

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 *Thomas SCHMITT*
Le *19 juin 2009*

Titre : *Simulation des Grandes Echelles de la combustion turbulente à pression supercritique*

JURY

V. GIOVANGIGLI	*École Polytechnique, Palaiseau*	*Rapporteur*
P. SAGAUT	*Université Pierre et Marie Curie, Paris*	*Rapporteur*
S. CANDEL	*École Centrale Paris*	*Examinateur*
G. ORDONNEAU	*ONERA, Châtillon*	*Examinateur*
D. SAUCEREAU	*SNECMA, Vernon*	*Examinateur*
M. THERON	*CNES, Evry*	*Membre invité*
B. CUENOT	*CERFACS, Toulouse*	*Directeur de thèse*
L. SELLE	*IMFT, Toulouse*	*Membre invité*

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

Table des matières

1 Introduction **1**

1.1 Contexte 2

1.2 Résumé de l'état de l'art sur les jets non-réactifs à haute pression 4

1.2.1 Résultats expérimentaux 4

1.2.2 Résultats numériques 7

1.3 Résumé de l'état de l'art sur les jets cryotechniques réactifs 8

1.3.1 Résultats expérimentaux 8

1.3.2 Résultats numériques 13

1.4 Objectifs 14

1.5 Plan du document de thèse 14

I Simulation aux Grandes Echelles en gaz réel **17**

2 Thermodynamique gaz réel **19**

2.1 Interactions moléculaires 19

2.2 Le point critique 21

2.3 Comportement des fluides à pression supercritique 25

2.4 Modélisation 28

2.4.1 Principe des états correspondants 28

2.4.2 Équation d'état des gaz parfaits 29

2.4.3 Équation d'état de Peng-Robinson 30
2.4.4 Équation d'état de Peng-Robinson modifiée 31
2.4.5 Équation d'état de Soave-Redlich-Kwong 32
2.4.6 Détermination de la densité pour une température et une pression 33
2.5 Comparaison des équations d'état pour le calcul de la densité 34
2.6 Variables thermodynamiques 36
2.6.1 Etat de référence basse pression (gaz parfait) 36
2.6.2 Thermodynamique haute pression (gaz réel) 37
2.6.3 Application à Peng-Robinson 38
2.6.4 Application à Peng-Robinson modifiée 40
2.6.5 Application à SRK 41
2.7 Comparaison et exemples de résultats thermodynamiques 41
2.8 Relations thermodynamiques importantes en équation d'état de Peng-Robinson . 43
2.8.1 Propriétés partielles massiques 43
2.8.2 Relations thermodynamiques entre T, P, ρY_k et ρe_s 45
2.9 Phénomènes diffusifs 48
2.9.1 Diffusion moléculaire multi-espèces 49
2.9.2 Diffusion de la chaleur 50
2.9.3 Coefficients de viscosité et de conductivité thermique 50
2.9.4 Coefficient de diffusion d'espèces 52

3 Dynamique des fluides en gaz réel **55**
3.1 Équations et variables conservatives 55
3.2 Terme source chimique 57
3.3 Décomposition en variables caractéristiques 59
3.3.1 Passage entre variables primitives et variables caractéristiques 60
3.3.2 Passage entre variables conservatives et variables primitives 61
3.3.3 Passage entre variables caractéristiques et variables conservatives 62

4 Simulation aux grandes échelles en gaz réel 65

4.1 Simulation aux grandes échelles (SGE) . . . 65

4.2 Équations SGE . . . 66

4.2.1 Filtrage SGE des équations de Navier-Stokes . . . 66

4.3 Modèles de sous-maille . . . 69

4.3.1 Modèle de Smagorinsky . . . 69

4.3.2 Modèle WALE . . . 69

4.4 Modèle de combustion turbulente . . . 70

4.4.1 Flamme laminaire épaissie (TF) . . . 70

4.4.2 Modèle de flamme épaissie turbulente (TFLES) . . . 71

4.4.3 Modèle de flamme épaissie dynamique . . . 73

5 Le code AVBP pour la SGE en gaz réel 77

5.1 Schémas numériques pour la convection . . . 78

5.1.1 Approche des résidus pondérés . . . 78

5.1.2 Matrices Jacobiennes des flux convectifs . . . 81

5.2 Tests de validation : convection en domaine périodique . . . 84

5.2.1 Convection à $T >> T_C$ . . . 85

5.2.2 Convection à $T < T_C$ . . . 85

5.3 Calcul de la température et de la pression . . . 87

5.3.1 Mise à jour de la température . . . 87

5.3.2 Contrôle de l'erreur . . . 88

5.3.3 Impact sur la pression . . . 88

5.4 Procédure de stabilisation . . . 91

5.4.1 Senseurs de viscosité artificielle . . . 92

5.4.2 Opérateurs de viscosité artificielle . . . 94

5.5 Conditions aux limites . . . 101

5.5.1 Passage vers la base locale de la limite . . . 101

5.5.2 Conditions limites d'entrée/sortie et conditions sur les parois 103
5.6 Tests de validation 1D 105
5.6.1 Solutions initiales 106
5.6.2 Résultats 107
5.7 Tests de validation 2D 108
5.7.1 Gradient de vitesse 108
5.7.2 Gradient de température 111

II Simulations **115**

6 SGE de jets ronds à pression supercritique **117**
6.1 Introduction 117
6.2 Bibliographie et méthodologie utilisée pour cette étude 120
6.3 Article en préparation pour l'AIAA journal 122
6.4 Compléments sur la zone similaire 147
6.4.1 Profils dans la zone similaire 147
6.4.2 Comparaison avec les simulations de Zong 147
6.5 Etude de la dynamique du jet 150
6.5.1 Comportement général 151
6.5.2 Dynamique le long du coeur potentiel 155
6.5.3 Région de transition 160
6.6 Modélisation de sous-maille 163
6.7 Conclusion 164

7 SGE de jets coaxiaux réactifs cryotechniques **167**
7.1 Introduction 167
7.2 Description des cas simulés 167
7.2.1 Domaine de simulation 167

7.2.2 Conditions d'injection 168
7.3 Cinétique chimique 170
7.4 Paramètres numériques 176
7.5 Résultats 177
7.6 Structure de flamme 181
7.6.1 Température de sortie 181
7.6.2 Structure en scalaire passif 181
7.6.3 Epaississement de la flamme 183
7.7 Comparaison avec les résultats expérimentaux 183
7.7.1 Zone proche injecteur 183
7.7.2 Zone avale 186
7.7.3 Conclusion des validations 190
7.8 Comparaison entre les cas A60 et C60 190
7.8.1 Zone proche injecteur (x<70 mm) 192
7.8.2 Zone d'expansion (x>70 mm) 195
7.8.3 Longueurs caractéristiques 198
7.9 Conclusion 202

8 Conclusions et perspectives **205**

Annexe : Article Soumis à *Comptes Rendus - Mécanique* **223**

Chapitre 1

Introduction

L'accroissement régulier de la masse des satellites nécessite la mise en place de lanceurs spatiaux avec un potentiel de mise en orbite accru. Une solution pour pouvoir augmenter la charge utile maximale d'un lanceur est d'augmenter la poussée de moteur de la fusée.

Un moteur de fusée est composé d'une chambre combustion, où les réactifs sont consommés et produisent de l'énergie, et d'une tuyère, équipée d'un convergent et d'un divergent, qui permet de transformer l'énergie thermique de la combustion en énergie cinétique afin de transmettre de la quantité de mouvement au lanceur. De manière générale, la poussée d'un tel moteur s'écrit :

$$F = u_e q + A_s(P_s - P_a) \tag{1.1}$$

où u_e est la vitesse d'éjection en sortie de tuyère, q est le débit de masse éjecté, A_s est l'aire de la sortie de tuyère, P_s est la pression des gaz en sortie de tuyère et P_a est la pression ambiante. Pour cette analyse qualitative, nous allons négliger le deuxième terme du membre de droite de l'Eq. 1.1 car il est généralement bien plus faible que le premier terme. En dehors des phases d'allumage, la tuyère est amorcée (*i.e.* le col est sonique), le produit entre débit de masse éjecté q et la vitesse d'éjection sont alors principalement déterminés par la section du col et la pression de la chambre de combustion, si bien qu'on obtient l'approximation suivante :

$$F \approx P_{chambre} A_{col} \tag{1.2}$$

où $P_{chambre}$ est la pression dans la chambre de combustion et A_{col} est la section du col de la tuyère. Ainsi, le besoin de poussée toujours croissant conduit à un accroissement de la pression dans la chambre de combustion. Ce phénomène est bien illustré par la Fig. 1.1, tirée de Yang et al. [163], où la poussée est en effet intimement liée à la pression chambre, qui pour les moteurs les plus puissants est de l'ordre de 100 bar.

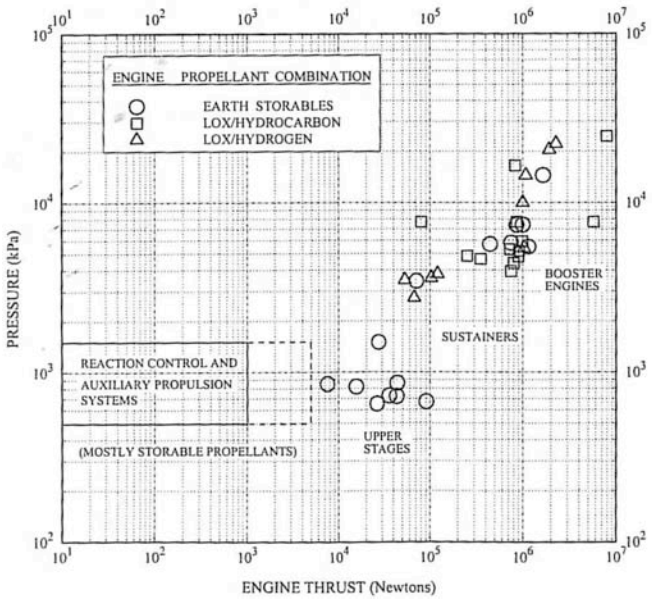


FIGURE 1.1 – Pression de la chambre de combustion en fonction de la poussée de différents types de moteurs fusée (tiré de Yang *et al.* [163]).

1.1 Contexte

Une photo du lanceur européen Ariane V est donnée en Fig. 1.2 (a). Ce lanceur est composé de trois étages de propulsion : un étage à propergol solide (booster), un étage principal cryotechnique équipé du moteur Vulcain et d'un dernier étage avec un moteur utilisant des ergols stockables ou bien cryotechniques.

Dans le moteur Vulcain, de l'oxygène est injecté sous forme liquide à 80 K et de l'hydrogène est injecté en gaz. La chambre de combustion est équipée de plus de 500 injecteurs coaxiaux (Fig. 1.2 (b)), à partir desquels l'oxygène est injecté à faible vitesse (10 m/s) mais à haute densité, entouré d'hydrogène gazeux à très forte vitesse (plus de 200 m/s).
Nous avons vu précédemment que la poussée d'un moteur est intimement liée à sa pression de fonctionnement (Fig. 1.1). Une pression plus élevée permet d'obtenir une poussée plus importante. De fait, les pressions classiquement atteintes dans les moteurs cryotechniques sont très élevées : 110 bar pour Vulcain ou 60 bar pour Vinci par exemple. Sous de telles conditions thermodynamiques, la validité des modèles de simulation numérique classiquement utilisés à basse pression ne sont plus totalement valides. Ainsi, par exemple, la thermodynamique et l'équation d'état ne suivent plus un comportement de type gaz parfait dans toute la chambre de combustion. Plus précisément, les pressions de fonctionnement citées précédemment sont situées au-delà de la pression critique des réactifs et des effets dits de "gaz réel" sont attendus.
Bien que les lanceurs spatiaux opèrent de manière relativement fiable depuis plusieurs décennies, certains phénomènes physiques cruciaux ne sont pas encore parfaitement maîtrisés. Ainsi, lors

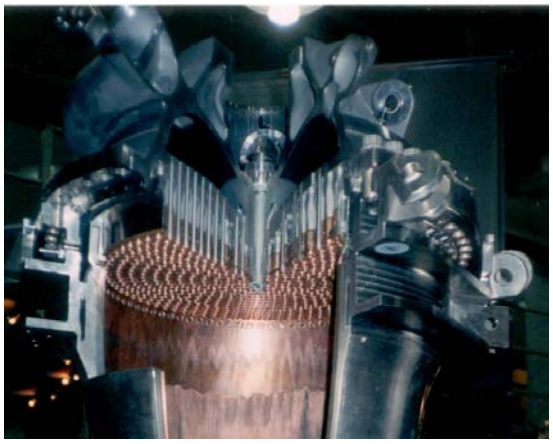
a)  b) 

FIGURE 1.2 – (a) Ariane V au décollage. (b) Vue de l'intérieur de la chambre de combustion du moteur Vulcain.

du développement de nouveaux moteurs fusées, les problématiques suivantes se posent (la liste ci-dessous n'est bien sûr pas exhaustive) :

1. Les instabilités de combustion.
   Les instabilités hautes fréquences sont attribuées à un couplage entre la combustion et un mode acoustique transverse de la chambre. Cette instabilité peut mener à un échec complet du lancement en brûlant la paroi de la chambre de combustion ou bien de l'injecteur. Des instabilités basses fréquences peuvent également apparaître entre la combustion et la ligne d'alimentation des injecteurs. Ce type d'instabilité n'est pas destructif, mais peut endommager la charge utile.

2. L'allumage.
   Ce transitoire est très important. Prévoir correctement l'allumage est primordial pour la réussite d'un lancement. L'allumage doit être fiable (par exemple si l'étage supérieur ne s'allume pas après la séparation des étages, la mission est un échec) et pas trop "brutal".

Une meilleure compréhension de ces phénomènes permet d'accroître la fiabilité et la performance des moteurs. Les situations citées précédemment sont par nature instationnaires. Les comprendre est encore un défi. Un important travail de recherche a été mené au sein du Groupement De Recherche (GDR) "Combustion dans les moteurs fusées" qui regroupe le CNES, la SNECMA, le CNRS et l'ONERA. Ce travail de recherche est axé sur l'ensemble des compétences propres à la conception et à la compréhension des moteurs fusées, traitant notamment des thèmes suivants : mélange et atomisation, modélisation, combustion, phénomènes haute pression. Une synthèse des principaux résultats obtenus est disponible dans [27].

1.2 Résumé de l'état de l'art sur les jets non-réactifs à haute pression

L'étude de moteurs cryotechniques est délicate. En effet, il est impossible d'analyser la dynamique et la combustion dans une chambre de combustion complète du fait des conditions extrêmes qui y règnent (haute pression et haute température (plus de 3000 K)).
De ce fait, des expériences ont été menées dans des configurations simplifiées. Dans un premier temps, des recherches ont été effectuées sur des cas non-réactifs, afin d'améliorer la compréhension de la dynamique des jets à haute pression.

1.2.1 Résultats expérimentaux

Le banc expérimental non-réactif du DLR

Le centre de recherche aérospatial allemand, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), a développé un banc expérimental afin d'y étudier le comportement d'injection axisymétrique et coaxiale de fluides (azote, hélium et hydrogène) à haute pression (60 bar), sans réaction chimique [105, 88]. Le banc est équipé de fenêtres permettant la visualisation par ombroscopie (proportionnelle au gradient de densité) ainsi que la prise de mesure quantitative par spectroscopie Raman (proportionnelle à la densité) de l'écoulement.

Le banc expérimental non-réactif de l'AFRL

L'Air Force Research Laboratory (AFRL), possède un banc expérimental similaire à celui du DLR pour l'étude de jets cryotechnique non-réactifs [108, 22]. La pression peut cependant être portée jusqu'à 200 bar. Des diagnostics par ombroscopie et par spectroscopie Raman sont également disponibles. Ce banc est équipé d'un dispositif permettant de générer des sources acoustiques, ce qui permet de tester leur influence dans des cas à haute pression.

Comportement de jets ronds non-réactifs

Chehroudi et al. [22] ont étudié l'effet de la pression P par rapport à la pression critique P_C sur un jet d'azote liquide dans une chambre remplie d'azote gazeux (Fig. 6.4). A pression sous-critique ($P/P_C < 1$), le jet présente une apparence de spray. De fins ligaments émergent du jet et des gouttes sont éjectées. On retrouve un comportement d'atomisation de jet. Lorsque la pression devient supercritique ($P/P_C > 1$), les gouttes ne sont plus observées, mais des structures en forme de "doigt" sont présentes à l'interface. Ces structures ligamenteuses ne donnent plus naissance à des gouttes, mais sont dissoutes dans le gaz environnant. A pression supercritique, l'atomisation d'un jet liquide n'est plus visible, ce qui semble indiquer que la coexistence ente

phase liquide et gazeuse disparaît. Lorsque $P/P_C >> 1$, le jet liquide a une topologie très semblable à celle d'une jet gazeux à densité variable.

a) $P/P_C = 0.91$ b) $P/P_C = 1.22$ c) $P/P_C = 2.71$

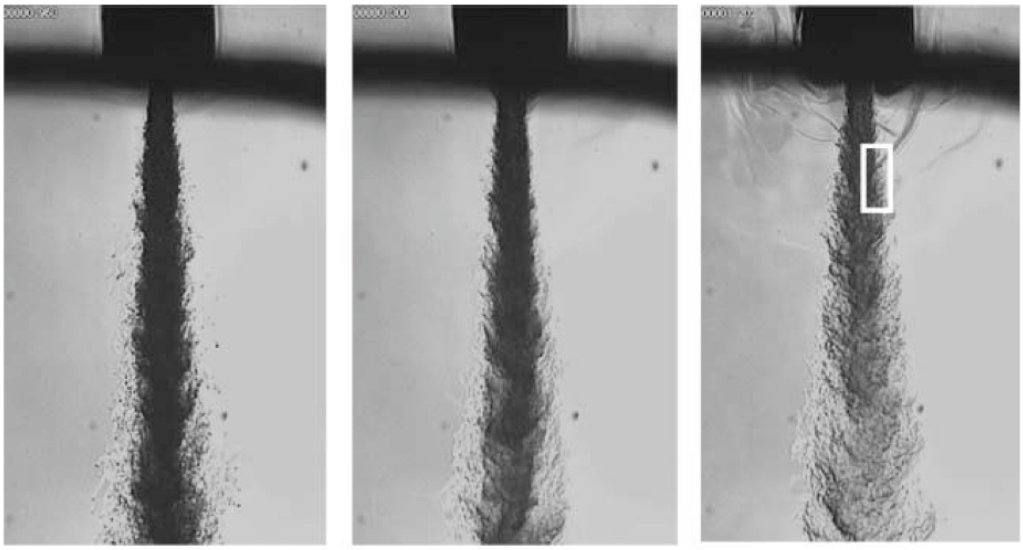


FIGURE 1.3 – Images expérimentales de l'impact de la pression P par rapport à la pression critique P_C sur l'aspect de jets ronds cryotechniques d'azote, obtenues par rétro-éclairage par Chehroudi et al. [22]. (a) $P/P_C = 0.91$ (b) $P/P_C = 1.22$ (c) $P/P_C = 2.71$.

Dans une expérience similaire réalisée au DLR, l'absence de gouttes est également observée. Un exemple de résultat obtenu au DLR par Mayer et al. [88] est présenté Fig. 1.4, où l'on constate la présence de forts gradients de densité autour du jet (zones sombres).

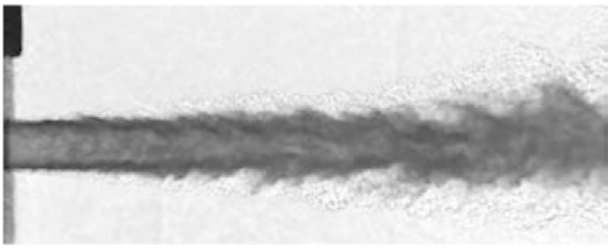


FIGURE 1.4 – Visualisation expérimentale d'un jet rond d'azote cryotechnique à pression supercritique. Tiré de Mayer et al. [88].

Les résultats obtenus par l'AFRL et le DLR indiquent que les jets mono-espèce à pression supercritique ne sont pas des jets diphasiques, mais présentent de fortes similitudes avec des jets à densité fortement variable. Ces expériences sur les jets ronds ont également permis la mesure d'angle d'ouverture des jets et de coupes de densité [108, 20, 88, 8, 105, 106].

Le cas multi-espèces est étudié au DLR par Mayer *et al.* [83] à partir d'un jet coaxial non-réactif d'azote liquide et d'hélium gazeux injecté dans un réservoir à haute pression. Une image expérimentale est donnée en Fig. 1.5. Dans la Fig. 1.5 (A), le jet liquide est injecté dans un réservoir ayant une pression inférieure à la pression critique de l'azote : comme le jet rond mono-espèce, un comportement de spray est retrouvé. Lorsque la pression est supérieure à la pression critique de chacune des espèces, la formation de gouttes n'est plus observable et le fluide dense est rapidement dissout dans le gaz. Il semble alors que, à pression supercritique, les tensions de surface, fortement atténuées par rapport au cas souscritique, sont faibles par rapport au cisaillement. D'après ce résultat, nous pouvons donc considérer les jets à pression supercritique comme des jets à densité variable et les tensions de surface peuvent être négligées. Des mesures de densité sont disponibles dans Oschwald et al. [107, 108].

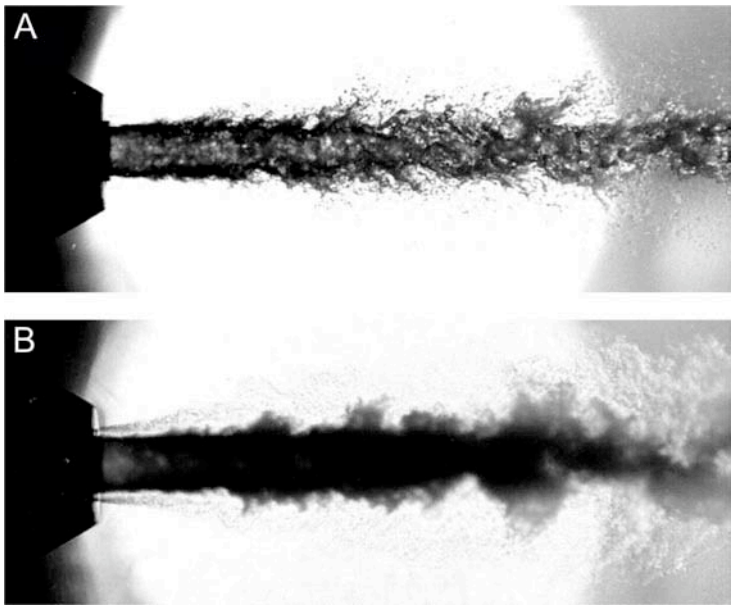


FIGURE 1.5 – Visualisation expérimentale d'un jet coaxial binaire non-réactif de LN_2/GHe à 10 bar (A) et 60 bar (b). La vitesse d'injection de l'azote est 5 m/s, celle de l'hélium est 100 m/s. La température d'injection de l'azote est 97 K, celle de l'hélium 280 K. Tiré de Mayer et Smith [83].

Enfin, Chehroudi et al. [21] ont étudié l'effet de la pression sur la réponse de jets ronds d'azote liquide à une perturbation acoustique. La réponse du jet est fort à pression souscritique ($P < P_C$), devient maximale proche de la pression critique, puis est quasi inexistante à pression supercritique ($P > P_C$). Ce résultats suggère que le mécanisme qui gouverne le couplage entre les ondes acoustiques et le jet à pression supercritique diffère de celui à pression souscritique.

1.2.2 Résultats numériques

L'étude de couches de mélanges en simulation numérique directe (DNS) (*i.e.* où toutes les échelles de la turbulence sont résolues) ont fait l'objet de nombreux articles et une revue est effectuée par Bellan [4].
Les simulations numériques directes ont permis de montrer que le fort gradient stabilise la couche de mélange et modifie les caractéristiques de la turbulence [91, 93, 104]. De plus, la thermodynamique et les coefficients de diffusion à haute pression présentent un comportement sensiblement différent par rapport à ceux à basse pression [4], ce qui modifie les propriétés de mélange [67, 49, 102, 103, 101]. Ces DNS mettent en évidence la nécessité d'utiliser des modèles de sous-maille appropriés à pression supercritique [4, 135].
Un effort important a également été réalisé sur la modélisation de la thermodynamique gaz réel, notamment sur la formulation d'une équation d'état cubique améliorée (*i.e.* plus précise) [51] ainsi que le calcul des coefficients de diffusion d'espèce [50].

L'effet de la pression sur des jets ronds non-réactifs à pression supercritique a été étudié par Zong *et al.* [166, 165, 168] en Simulation des Grandes Echelles (SGE) (Fig. 1.6). Ces calculs ont permis de mettre en évidence l'effet stabilisant du gradient de densité, ainsi que son impact sur la redistribution de l'énergie cinétique turbulente dans la couche de mélange initiale du jet. Zong indique que l'angle d'ouverture à partir de la densité obtenu par SGE correspond avec une erreur de 5% à celui donné par Chehroudi et al. [20].
Zong et Yang [167] ont également étudié le cas d'une injection coaxiale non-réactive d'oxygène et de méthane. Du fait de la très forte densité de l'oxygène, la dynamique du méthane en sortie d'injecteur est similaire à celle rencontrée derrière une marche descendante.

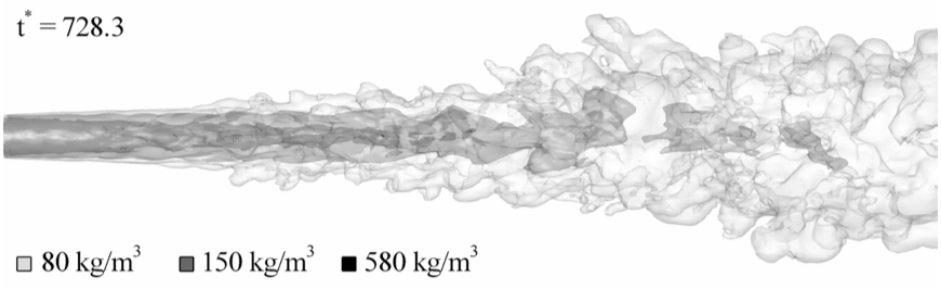


FIGURE 1.6 – Iso-contours de densité instantanés obtenus par Simulation aux Grandes Echelles d'un jet rond à pression supercritique calculé par Zong [165].

Citons également les travaux de Cheng et al. [24] et Mayer et al. [88] qui ont simulé des jets rond à pression supercritique en utilisant une approche RANS (qui n'est pas une méthode instationnaire comme la SGE, mais permet d'obtenir le champ moyen). Leurs résultats indiquent un bon accord avec les mesures expérimentales disponibles.

1.3 Résumé de l'état de l'art sur les jets cryotechniques réactifs

L'analyse de la dynamique de jets coaxiaux réactifs est le cas d'étude représentatif des injecteurs de moteurs de fusée.

1.3.1 Résultats expérimentaux

Le banc Mascotte de l'Onera

L'Onera a développé, à partir de 1991, le banc d'essai Mascotte. Ce banc initialement muni d'un seul injecteur coaxial de type moteur fusée (Fig. 1.7), a permis dans les premières versions, V01 et V02, d'effectuer des expériences à pression sous-critique (*i.e.* dans un cas diphasique). La version V02, qui permet d'atteindre une pression chambre de 10 bar, était achevée en 1995. Des informations sur le banc peuvent être trouvées dans les articles de Habiballah *et al* [47] et de Vingert *et al* [157].

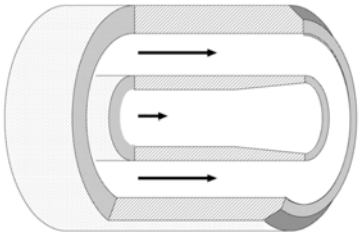


FIGURE 1.7 – Représentation de l'injecteur coaxial du banc Mascotte. Tiré de Candel et al. [14].

L'objectif final étant de se placer dans des conditions représentatives de celles rencontrées dans les moteurs fusées, une version (V03) pouvant supporter une pression chambre de 75 bar, supérieure à la pression critique de l'oxygène (50.4 bar), a été mise en service en 1998 [156, 158] pour étudier la combustion LOx/H2 [150, 63]. En 2002, le banc a été étendu à l'étude LOx/CH4 et LOx/LCH4 [137].
Des études multi-injecteurs ont été menées par Richecoeur [125]. Un article de revue des résultats pour les jets cryotechniques LOx/H2 et LOx/CH4 à haute pression obtenus par imagerie est disponible dans [14]. Des mesures de température sur un cas LOx/H2 à haute pression sont présentées dans [46].

Le banc P8 du DLR

Un système expérimental similaire au banc Mascotte est également disponible en Allemagne, au DLR. Des informations sont disponibles dans Mayer *et al.* [87, 86] [85], Smith *et al.* [142] et Oschwald *et al.* [108].

Résultats à pression souscritique

De la même manière que pour les jets cryotechniques non-réactifs à pression souscritique, la présence de gouttes est observée dans les cas réactifs. Mayer et Tamura [87] ont obtenu des images instantanées de jet cryotechnique à pression souscritique par ombroscopie où la présence de gouttes est clairement identifiable (Fig. 1.8).

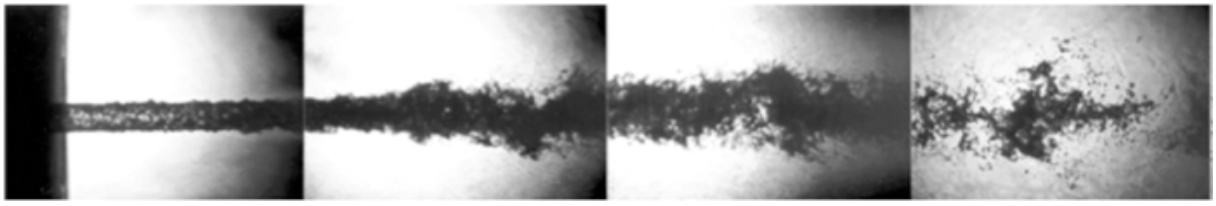


FIGURE 1.8 – Combustion d'un jet d'oxygène liquide à pression souscritique [87].

Snyder et al. [143] et Juniper et al. [63] ont étudié la topologie de la flamme issue d'oxygène cryotechnique et d'hydrogène gazeux à partir du banc Mascotte à des pressions inférieures à la pression critique de l'oxygène. Une visualisation d'émission OH* (Fig. 1.9) permet de constater que la flamme se stabilise au niveau de la lèvre de l'injecteur et consomme l'oxygène directement à la surface du liquide sur une distance de plusieurs diamètres d'injecteur. La flamme s'ouvre ensuite, principalement du fait de l'atomisation du jet d'oxygène liquide, et occupe tout l'espace de la chambre. La structure de flamme est alors notablement complexifiée, du fait de la présence d'un mélange de gouttes et de gaz. La fluorescence induite par laser à permis de confirmer la présence de la flamme au niveau de la lèvre de l'injecteur et un important plissement de la zone réactive, qui est une indication de son caractère turbulent, est observé. Le flux de quantité de

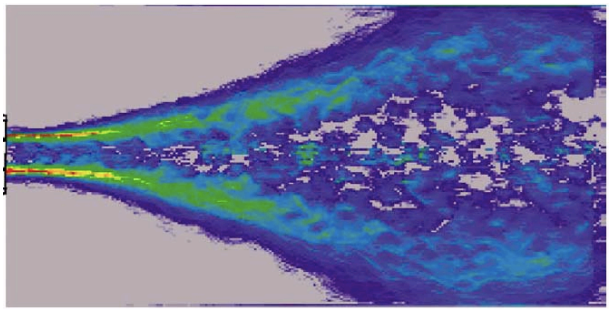


FIGURE 1.9 – Emission de OH* pour le cas A10 à 10 bar [66, 63].

mouvement $J = (\rho_{H_2} u_{H_2}^2)/(\rho_{O_2} u_{O_2}^2)$ joue ici un rôle très important : le taux d'expansion de la flamme augmente avec J, principalement du fait d'une meilleure atomisation du jet liquide. De même, lorsque la pression augmente, le taux d'expansion initial de la flamme est plus grand.
Une synthèse des résultats obtenus à pression souscritique est également disponible dans l'article de revue de Candel *et al* [13].

Résultats à pression supercritique

Lorsque la pression devient supérieure à la pression critique de l'oxygène, la disparition de gouttes et la présence de poches où la densité est élevée sont notés par des expériences du DLR (oxygène/hydrogène) [83] (Fig. 1.10). Ce comportement est également observé dans des cas réactifs à pression supercritique [66].

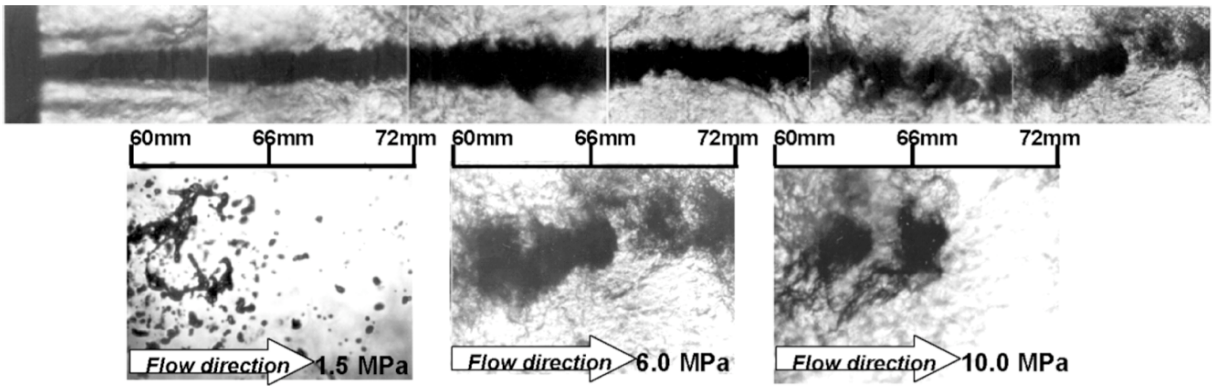


FIGURE 1.10 – Effet de la pression sur la désintégration du jet d'oxygène liquide [87, 83]. La pression critique de l'oxygène est 5.04 MPa.

Des images obtenues par émission du radical OH* (qui localise la zone réactive) et par ombroscopie permettent d'avoir une information sur la structure générale de la flamme en combustion hydrogène/oxygène et du jet d'oxygène [150, 63]. Un exemple de résultat est donné en Fig. 1.11. L'ouverture de la flamme est initialement faible sur une distance de plusieurs diamètres d'injecteur (proche de 4°), puis le taux d'expansion augmente rapidement. La flamme se referme ensuite lentement.

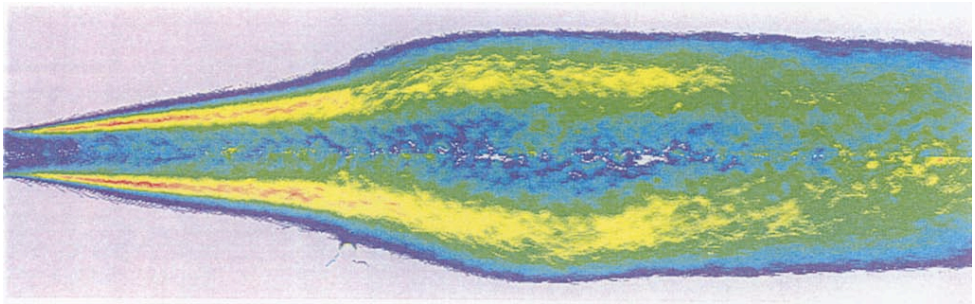


FIGURE 1.11 – Image moyenne de l'émission du radical OH* du cas Mascotte A60 obtenue par transformée d'Abel [63].

Par rapport au cas souscritique, l'expansion initiale de la flamme d'hydrogène/oxygène est

bien plus faible [63, 14, 150] et est liée aux modifications thermodynamiques propres au régime supercritique. En effet, le processus limitant l'ouverture de la flamme n'est plus l'atomisation du jet liquide d'oxygène comme dans le cas souscritique, mais le transfert de masse du jet dense vers le gaz léger et l'étirement local du fait de l'absence de tension de surface. Une conséquence majeure de ce comportement est que l'influence du flux de quantité de mouvement J sur le développement de la flamme est inversé : lorsque J est augmenté, l'ouverture initiale de la flamme diminue. Cependant, l'impact de J semble moins important à pression supercritique [14, 63].
De la même manière que dans les cas à pression souscritique, la flamme est située au niveau des lèvres de l'injecteur d'oxygène, à une très faible distance de la paroi (Fig. 1.12). Singla *et al* [139, 137], à partir de fluorescence induite par laser ont confirmé que la flamme est initialement positionnée au niveau de la lèvre de séparation hydrogène/oxygène. La même observation est faite par Juniper [63, 66]. Juniper *et al.* [65] ont montré que la stabilisation de la flamme est liée au rapport entre l'épaisseur de la lèvre et l'épaisseur de la flamme. Lorsque la flamme est plus fine que la lèvre, la flamme se positionne de manière stable derrière la paroi. Les résultats expérimentaux de Mayer *et al.* [87, 84, 59] obtenus au DLR indiquent également que la flamme est attachée à la lèvre de l'injecteur d'oxygène. Leurs résultats suggèrent que la flamme est attachée par une forte zone de recirculation derrière la lèvre.

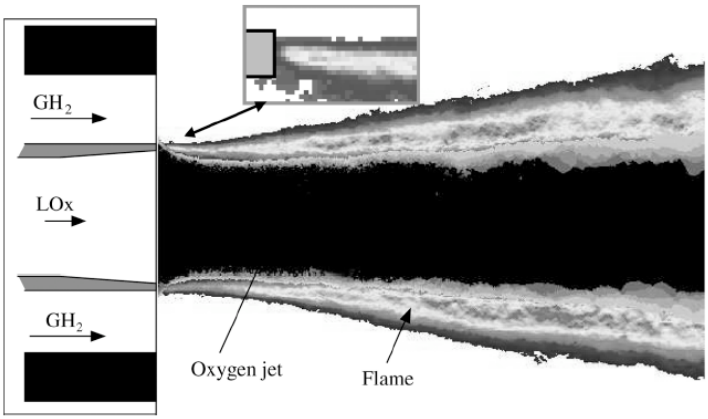


FIGURE 1.12 – Emission de OH* et rétroéclairage en zone proche injecteur [66] (Tiré de [14]).

Singla [137] et Singla *et al.* [139], grâce à l'utilisation de fluorescence induite par laser du radical OH, ont constaté que la flamme est initialement très fine proche de l'injecteur puis est plissée par interaction avec la turbulence un peu plus en aval de l'injecteur.

La différence entre la topologie de la flamme à pression souscritique et à pression supercritique est résumé Fig. 1.13.

L'effet du retrait de l'injecteur d'oxygène (Fig. 1.14) est de provoquer un net accroissement de l'ouverture de la flamme [63, 150]. Le jet dense initialement peu fluctuant en sortie d'injecteur présente alors de larges fluctuations sinusoïdales. A partir d'une étude théorique d'instabilité,

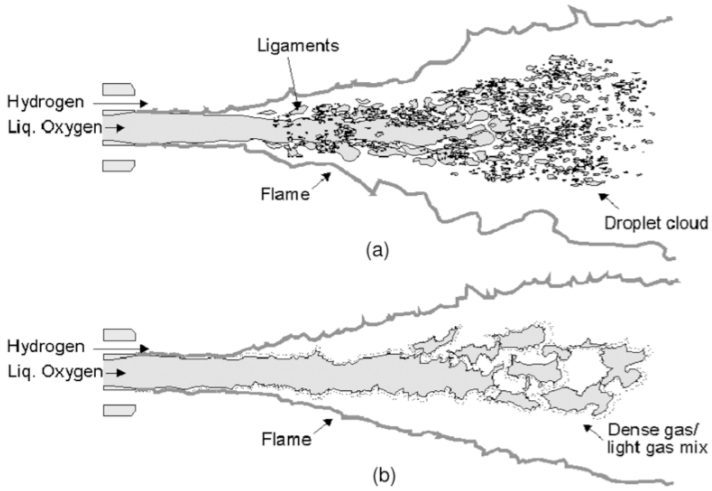


FIGURE 1.13 – Représentation de la structure de flamme à pression souscritique (a) et à pression supercritique (b) (Tiré de [14, 63]).

Juniper et Candel [64] ont montré que le retrait de l'injecteur modifie la nature de l'instabilité dans la couche de mélange en sortie d'injecteur d'oxygène, qui passe alors d'une instabilité convective (classique des jet axisymétriques à densité élevée) à une instabilité globale, rendant la déstabilisation bien plus efficace.

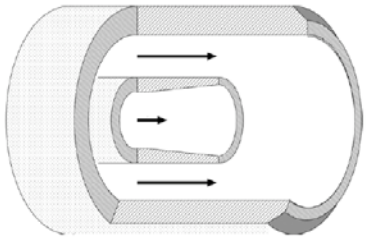


FIGURE 1.14 – Représentation de l'injecteur coaxial du banc Mascotte avec retrait. Tiré de Candel et al. [14].

Singla [137] a analysé la structure de flamme LO_2/CH_4 et LO_2/LCH_4 à partir du banc Mascotte. Ces analyses sont réalisées à partir d'émission de CH* et de fluorescence induite par laser du radical OH*. Une transformée d'Abel d'émission de OH* pour le cas LO_2/CH_4 est montrée Fig. 1.15 (a). La flamme est toujours attachée aux lèvres de l'injecteur et la structure est semblable à celle de la flamme LOx/H_2, mais la flamme est bien plus courte et semble se terminer avant la fin de la région de visualisation. La flamme doublement transcritique LO_2/LCH_4 à une structure fortement différente. La flamme n'est plus attachée aux lèvres de l'injecteur et deux zones de réactions coniques sont notables (Fig. 1.15 (b)).

a) b)

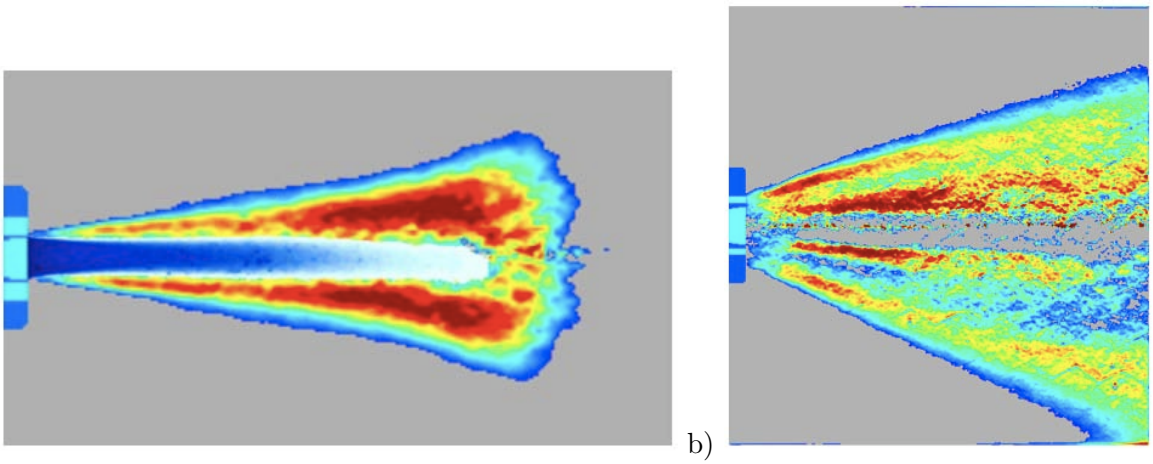


FIGURE 1.15 – (a) Emission de OH* d'un flamme LOx/CH_4 (b) Emission de CH* d'une flamme LOx/LCH_4 (Tiré de Singla et al. [138, 137]).

1.3.2 Résultats numériques

Les pionniers de la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) à pression supercritique sont Oefelein [98] et Yang [100, 162].

La région proche injecteur est étudiée par Oefelein [99, 97] et Matsuyama [81] dans le cas d'une simulation numérique directe réactive LOx/H2. Une forte recirculation des gaz brûlés derrière la lèvre de séparation entre l'hydrogène et l'oxygène est observée (Fig. 1.16).

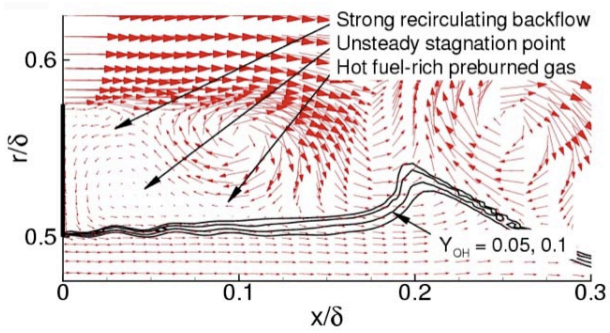


FIGURE 1.16 – Mécanisme de stabilisation de la flamme obtenue par simulation numérique [97].

Des SGE réactives LOx/H2 à pression supercritique sont réalisées par Oefelein [97], Yang and Menon [149, 79, 152]. Toutes ces simulations sont basées sur un traitement unifié de l'équation d'état, de la thermodynamique (à partir de thermodynamique fondamentale) et du transport [90, 161, 99]. A la connaissance de l'auteur, tous ces codes sont construits sur des maillages structurés.

Des calculs RANS réactifs à pression supercritique ont été réalisés par Cheng et al. [24], Zurbach et al. [169] et Demoulin et al. [35].

Pons [117] et Ribert et al. [123] ont étudié des flammes à contre-courant méthane/oxygène et hydrogène/oxygène à haute pression. Dans le cas où l'un des réactifs est dense, Pons [116] indique que la flamme se développe dans la zone de faible densité. La structure de flamme reste cependant très semblable à celle rencontrée en l'absence de gradient de densité.

1.4 Objectifs

Les études numériques citées en Sec. 1.3.2 sont principalement axées sur le calcul en simulation directe ou bien sur la SGE proche injecteur. L'objectif de cette thèse est d'utiliser une approche numérique, complémentaire à l'expérience, pour étudier la combustion au sein des moteurs cryotechniques. L'outil de Simulation des Grandes Echelles (SGE) semble approprié. En effet, il est instationnaire par construction et sa sensibilité à la modélisation *a priori* bien plus faible qu'une méthode RANS en fait un outil d'avantage prédictif. Le code de calcul AVBP, développé au CERFACS, est utilisé pour l'étude. Il résout les équations de conservation instationnaires et compressibles, et, de ce fait, l'ensemble des phénomènes d'interaction et de propagation d'ondes acoustiques. De plus, le code est conçu pour traiter des maillages non-structurés et est massivement parallèle. Il est donc adapté à la simulation des géométries complexes ainsi qu'à l'étude de la dynamique et des instabilités de combustion dans les moteurs fusées.

Cette thèse constitue la première étude de SGE à haute pression réalisée au Cerfacs. Ce travail se place donc dans un contexte d'étude amont et de mise en place de premiers éléments nécessaires à de telles simulations. L'objectif est donc, au terme de la thèse, d'avoir un outil capable de simuler la dynamique et la combustion d'un seul injecteur complet afin de montrer la faisabilité de ce type de calcul et poser les bases des calculs complexes futurs.

1.5 Plan du document de thèse

Le code de SGE AVBP a initialement été développé pour les systèmes à basse pression, à partir d'une équation d'état et d'une thermodynamique gaz parfait. Ce code s'est montré particulièrement prédictif dans ces conditions. Citons notamment le succès rencontré lors d'études d'instabilités de combustion dans les turbines à gaz [136, 133] ou dans les statoréacteurs [128]. AVBP a également été appliqué à la simulation de moteurs à pistons [154] et de séquences d'allumage [7]. De plus, les performances d'AVBP sur calculateur massivement parallèle (plusieurs milliers de processeurs) sont largement démontrées [145].

Il s'agit donc, dans un premier temps, de mettre en place une thermodynamique adaptée aux calculs en gaz réel. Le comportement particulier de la thermodynamique et des coefficients de transport est développé au Chap. 2. La thermodynamique utilisée pour ce travail y est explicitée. Les équations de la dynamique des fluide en gaz réel sont données au Chap. 3 et leur formulation

pour la SGE est détaillée au Chap. 4. Le passage d'une thermodynamique basse pression vers une thermodynamique pour les calculs à haute pression impacte directement d'autres parties du calcul. Pour garantir la consistance générale du code, il est nécessaire de mettre à jour les conditions aux limites et les schémas numériques. La formulation d'AVBP adapté au calcul en gaz réel est détaillée au Chap. 5. Toutes ces modifications sont associées au coeur même du code de calcul et ont donc fait l'objet de validations systématiques.
Le code est ensuite validé sur des jets ronds à pression supercritique (Chap. 6). Ces simulations ont l'avantage de ne pas faire intervenir la problématique multi-espèces, ni les réactions chimiques. Ce cas est donc visé comme première étape de validation du nouveau code. Enfin, dans le dernier chapitre, on aborde la simulation de jets coaxiaux réactifs, représentatifs d'un injecteur de moteur fusée (Chap. 7), qui constitue l'objectif final de ce travail.

Première partie

Simulation aux Grandes Echelles en gaz réel

Chapitre 2

Thermodynamique gaz réel

2.1 Interactions moléculaires

D'un point de vue gaz parfait, chaque molécule d'un gaz se comporte comme si elle se trouvait seule dans le système. Cette approche est acceptable si la densité est suffisamment faible pour que l'on puisse considérer chaque molécule comme étant isolée. Lorsque la densité augmente, la probabilité d'interaction entre les molécules n'est plus négligeable : du fait des forces d'interaction, appelées force de Van Der Waals, les molécules s'attirent lorsque qu'elles sont loin l'une de l'autre et se repoussent lorsqu'elles s'approchent.
Considérons le cas simplifié de forces d'interaction entre paires de molécules sphériques. Elles peuvent être modélisées via le potentiel d'interaction de Lennard-Jones V(r) donné en Eq. 2.1 et tracé en Fig. 2.1. Si le gradient est positif ou négatif, la force est respectivement attractive ou répulsive.

$$V(r) \quad = \quad 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right] \tag{2.1}$$

où r est la distance intermoléculaire, σ est le diamètre de collision et ϵ est le potentiel minimum. Les paramètres σ et ϵ sont propres au composé considéré.

Lorsque 2 molécules s'approchent et que leur énergie d'agitation moléculaire thermique $k_B T$, où k_B est la constante de Boltzmann et T la température, est plus faible que l'énergie d'attraction maximale ϵ, leur force d'attraction les rassemble autour de la distance d'équilibre r_0. Si la densité est suffisante, la condensation vers l'état liquide aura lieu. Au contraire, si la température, et donc l'énergie d'agitation moléculaire, est élevée, la force d'attraction est trop faible pour avoir un impact sur la vitesse moléculaire et la condensation ne peut plus avoir lieu. Il existe une température à partir de laquelle la condensation vers un liquide ne peut plus avoir lieu : c'est la **température critique**, T_C. Au point critique, la distance entre les molécules $(V_C/N_A)^{1/3}$, où V_C est le volume critique et N_A est le nombre d'Avogadro, est plus grande que la distance d'équilibre r_0, et la condensation ne peut plus se produire.

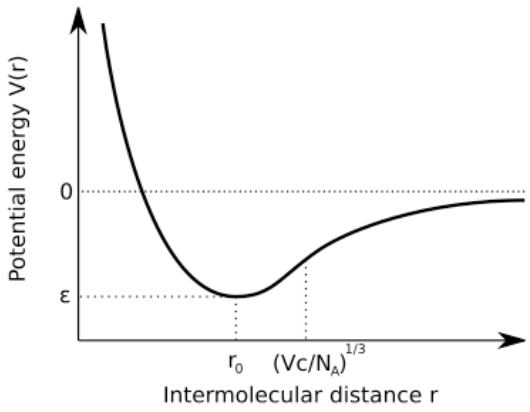


FIGURE 2.1 – Potentiel de Lennard-Jones.

Ce comportement est reproduit par l'équation d'état, qui peut s'écrire comme une somme infinie de puissances négatives du volume [53, 75] :

$$\frac{P}{RT} = \frac{1}{v} + \frac{B(T)}{v^2} + \frac{C(T)}{v^3} + ... \tag{2.2}$$

où $B(T)$, $C(T)$, ... sont les deuxième, troisième, ... coefficients du viriel, v le volume molaire et R la constante des gaz. Le premier terme de droite correspond au comportement idéal du gaz. A partir de la théorie cinétique des gaz, il est possible de montrer que $B(T)/v^2$ représente la déviation du comportement idéal liée aux interactions entre 2 molécules, $C(T)/v^3$ représente la déviation du comportement idéal liée aux interactions entre 3 molécules, etc ... Dans un cas où la densité est suffisamment faible pour ne considérer que les interactions entre deux molécules, on obtient l'approximation suivante :

$$\frac{P}{RT} \approx \frac{1}{v} + \frac{B(T)}{v^2} \tag{2.3}$$

où B(T) est donné par la relation suivante [75] :

$$B(T) = \frac{1}{2}\int (1 - \exp(-V_{12}/T))dv \tag{2.4}$$

où V_{12} est l'énergie d'interaction mutuelle de deux molécules. On constate que ce coefficient ne dépend que de la température et de l'énergie d'interaction entre paire de molécules, qui peut, par exemple, être modélisée à partir du potentiel de Lennard-Jones (Eq. 2.1). De la même manière, le troisième coefficient du viriel peut se calculer à partir de l'énergie d'interaction entre 3 molécules. L'Eq. 2.2 montre bien que lorsque le volume est grand et que les interactions sont négligeables, on retrouve l'équation d'état des gaz parfaits. Lorsque la densité augmente, le nombre de molécules impliquées dans les interactions augmente. On comprend alors que dans un cas dense, les termes associées aux interactions ($B(T)$, $C(T)$, ...) ne sont plus négligeables. Il convient alors d'utiliser

une équation d'état qui modélise ces interactions moléculaires.
Une autre conséquence des interactions moléculaires est qu'il n'est plus possible de traiter chaque espèce chimique indépendemment l'une de l'autre, comme cela est fait en gaz parfait. En effet, le mélange est affecté par les interactions entre molécules des différentes espèces et est alors régi par une loi de mélange particulière. Par exemple, le potentiel de Lennard-Jones pour deux espèces différentes V_{ij} est donné par :

$$V_{ij}(r) = 4\epsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^{6}\right] \tag{2.5}$$

où le diamètre de collision σ_{ij} et l'énergie minimale ϵ_{ij} sont associés à des paires d'espèces et sont souvent exprimés par la relation :

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \tag{2.6}$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j) \tag{2.7}$$

où σ_k est le diamètre de collision de l'espèce k et ϵ_k l'énergie minimale de l'espèce k. Les paramètres moléculaires de chaque espèce ne peuvent alors pas être considérés séparément et fort intuitivement les caractéristiques de chaque espèce interviennent lors des interactions moléculaires. Dans l'équation d'état pour un mélange, le deuxième coefficient du viriel $B(T)$ devient par exemple [53, 115] :

$$B(T) = \sum_{i,j} B_{ij}(T) X_i X_j \tag{2.8}$$

où X_i et X_j sont les fractions molaires des espèces i et j et $B_{ij}(T)$ est le coefficient du viriel croisé. De la même manière que dans le cas d'une espèce pure, le coefficient $B_{ij}(T)$ peut être exprimé à partir de l'Eq. 2.5.
L'influence des interactions moléculaires sur toutes les variables thermodynamiques, comme l'énergie interne e_s ou les capacités calorifiques C_p et C_v, est déterminée grâce à l'équation d'état. De ce fait, la non-idéalité du gaz qui apparaît dans l'équation d'état se répercute sur l'ensemble des grandeurs thermodynamiques, y compris les grandeurs partielles. Pour ces dernières, une conséquence importante est qu'elles ne dépendent plus uniquement de l'espèce considérée comme en gaz parfait, mais de toutes les espèces, par l'introduction des coefficients croisés.

2.2 Le point critique

La figure 2.2 (a) donne une représentation d'un diagramme des phases d'une substance pure. Notons que la phase solide à haute température intervient généralement à une pression très élevée qui sort du cadre de cette étude. Nous constatons l'existence de zones à phase unique (*i.e.* gaz pur, liquide ou solide), tandis que les lignes représentent la coexistence de deux phases.
Dans le liquide, la densité est très élevée et les interactions entre molécules sont fortes. Les molécules sont attirées par les forces de Van Der Waals et se stabilisent autour d'une position

d'équilibre (*cf* Sec. 2.1). Dans le gaz, la distance intermoléculaire et l'agitation thermique sont suffisamment élevées pour que les forces d'attraction soient faibles. Considérons un volume de fluide où les deux phases (gaz-liquide) coexistent. Au sein du liquide, chaque molécule est attirée dans toutes les directions par les molécules voisines de liquide : la résultante des forces est nulle. A l'interface, puisque les forces dans le gaz sont très faibles, les forces d'interaction ne sont globalement plus équilibrées et les molécules sont attirées du côté liquide. Ce déséquilibre est à l'origine des tensions de surface entre liquide et gaz et de l'existence d'une surface de séparation. D'un point de vue macroscopique, la région de séparation entre liquide et gaz est considérée comme une discontinuité, bien que au niveau microscopique, la variation de densité entre liquide et gaz est continue. La Fig. 2.3 donne un exemple d'évolution de la densité en fonction de la position au travers d'une surface, pour différentes températures.

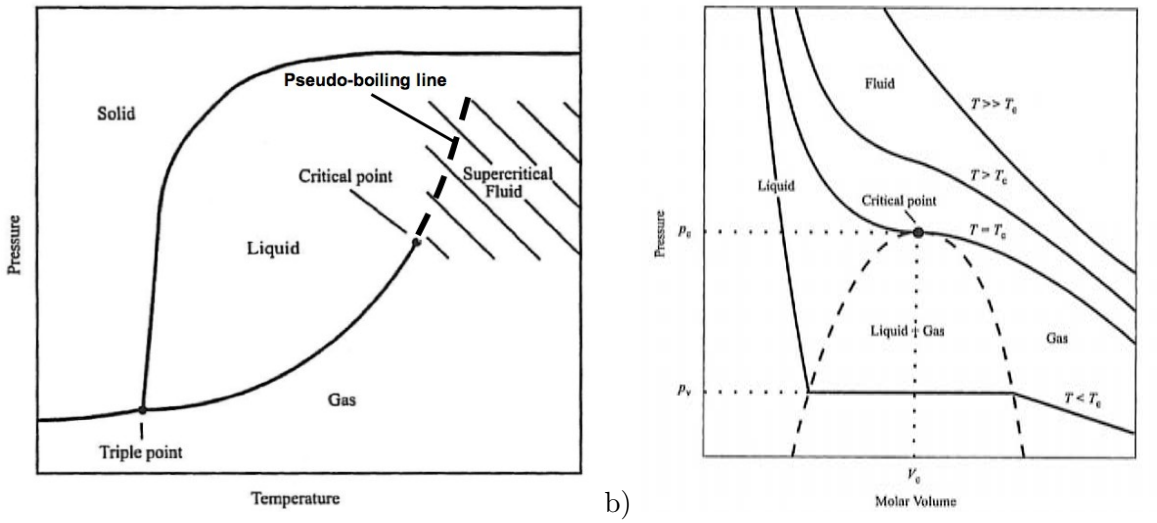


FIGURE 2.2 – a) Diagramme de phase d'un corps pur. b) Isothermes dans le diagramme pression - volume d'un corps pur. Ces deux diagrammes proviennent de Clifford [26]

Le long de la courbe de coexistence gaz-liquide, la pression et la température augmentent ensemble. Le liquide devient moins dense à cause de l'expansion thermique (les forces d'interaction ne changent guère, mais l'agitation thermique est accrue) et le gaz devient plus dense du fait de l'augmentation de pression (les forces d'attraction augmentent). En conséquence, le déséquilibre entre l'énergie dans le liquide et l'énergie dans le gaz se réduit et la tension de surface est moindre. Il arrive un point où les densités des deux phases deviennent identiques : le différentiel d'énergie n'existe plus et la distinction entre liquide et gaz disparaît. Ce comportement est observable en Fig. 2.3, où l'épaisseur de la surface grandit au fur et à mesure que la différence de densité diminue entre liquide et gaz.
La courbe de coexistence de phase se termine en un point appelé le **point critique**, défini par sa **température critique** T_C, sa **pression critique** P_C et son **volume critique** v_C. Ce phé-

nomène est illustré en Fig. 2.4, où l'on observe la disparition et l'épaississement progressif de l'interface entre un liquide et un gaz lorsque que les conditions thermodynamiques approchent du point critique. Le coefficient de tension superficielle s s'exprime de manière générale sous la forme [115, 75] : $s \equiv (1 - T/T_C)^a$, où a est un coefficient proche de 1. Ainsi, au point critique, où la température est égale à la température critique, la tension de surface est nulle.
On dit que le régime est **supercritique** si la température et la pression sont tous deux au-delà de leurs valeurs critiques. Si seule l'une des deux valeurs est supérieure à la valeur critique, le régime est dit **transcritique**.

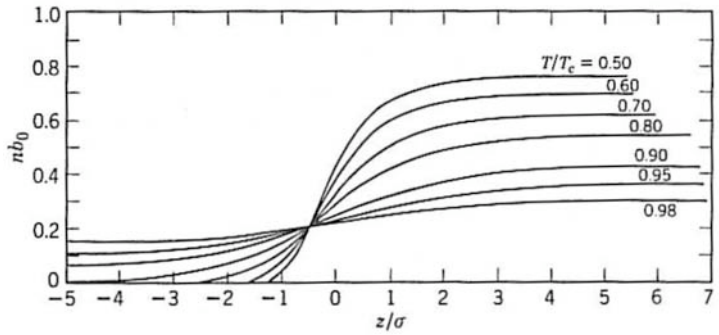


FIGURE 2.3 – Evolution de la densité au travers de la surface de séparation liquide/gaz (située à $z \approx 0$). Tiré de Hirschfelder *et al* [53]. La grandeur nb_0 est proportionnelle au nombre de densité (nombre de particules par unité de volume) et z est la distance au travers de la région de l'interface.

La Fig. 2.2 (b) donne une représentation des isothermes d'Andrews, qui représentent le volume molaire v en fonction de la pression P pour une série d'isothermes. Lorsque $T >> T_C$, pour une température donnée, la pression évolue comme l'inverse du volume. Ce comportement est très semblable à celui d'un gaz parfait. Lorsque la température diminue, un point d'inflexion apparaît sur l'isotherme. Au point critique, on a les relations suivantes :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_T = 0 \tag{2.9}$$

Ainsi, au point critique, la variation du volume par rapport à la pression à température fixée est infinie. Dans la zone critique (proche du point critique), le fluide est donc fortement compressible. De même, proche de la pression critique, le volume du fluide est fortement sensible à la température. Un faible changement de température génère une très forte variation de densité. Lorsque la température est inférieure à la température critique, l'isotherme présente deux segments. La partie intermédiaire à pression et température constante, correspond à la région de coexistence de phases. Le volume le plus grand est le volume de la phase gazeuse et l'autre correspond à la phase liquide. La Fig. 2.2 (b) indique également que pour une pression suffisamment élevée, le changement de phase n'est plus observable.

Dans le cas d'un mélange de fluides, la solubilité d'un gaz dans le liquide est fortement liée à la

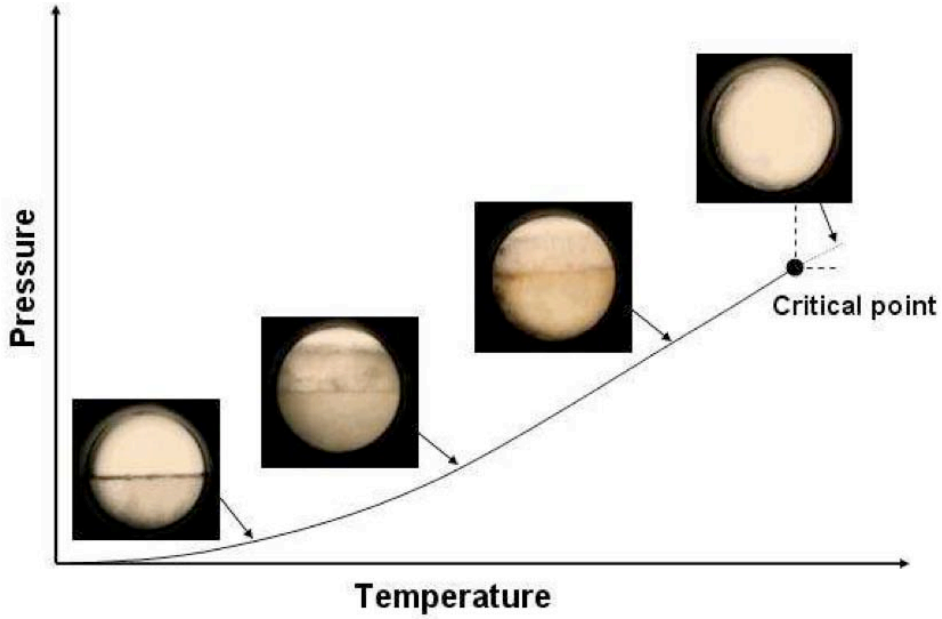


FIGURE 2.4 – Disparition de l'interface liquide/gaz. Tiré de Tramecourt *et al* [149].

densité. En-dessous de la pression critique, la solubilité croît avec la pression. Ce comportement est associé à l'augmentation des forces d'interaction entre les molécules du liquide et celles du gaz, dont la densité augmente. Lorsque la densité du fluide est très élevée, les forces de répulsion entre le liquide et le gaz deviennent importantes et la solubilité diminue. Cependant, proche du point critique, la densité du fluide est très dépendante de la pression et de la température. Dans ces conditions, les forces d'interaction sont grandement modifiées et la solubilité devient aussi très dépendante de la température et de la densité. Cette forte dépendance de la solubilité est d'ailleurs utilisée dans les processus d'extraction pétrolière, ou pour purifier un composé (c'est de cette manière que l'on obtient le café décaféiné, par exemple).

Il convient alors de ne plus regarder les propriétés critiques de chaque espèce séparément, mais il est nécessaire de considérer les propriétés critiques du mélange. Dans ce cas, le comportement thermodynamique n'est plus défini par un point critique, mais une ligne critique qui dépend du mélange. Oschwald *et al.* discutent de ce phénomène dans [108]. La Fig. 2.5, tirée de [108], présente les lignes d'équilibre liquide/vapeur en fonction de la température et du mélange H_2/O_2. On constate que même si la pression est supérieure à la pression critique des deux espèces, il est possible de rencontrer, du fait du mélange, une coexistence de phases pour des températures inférieures à la température critique du fluide dense (l'oxygène sur la Fig. 2.5, pour lequel la température critique vaut 155 K). On observe par ailleurs que la quantité de gaz dissoute dans le liquide est fortement dépendante de la température et de la pression.

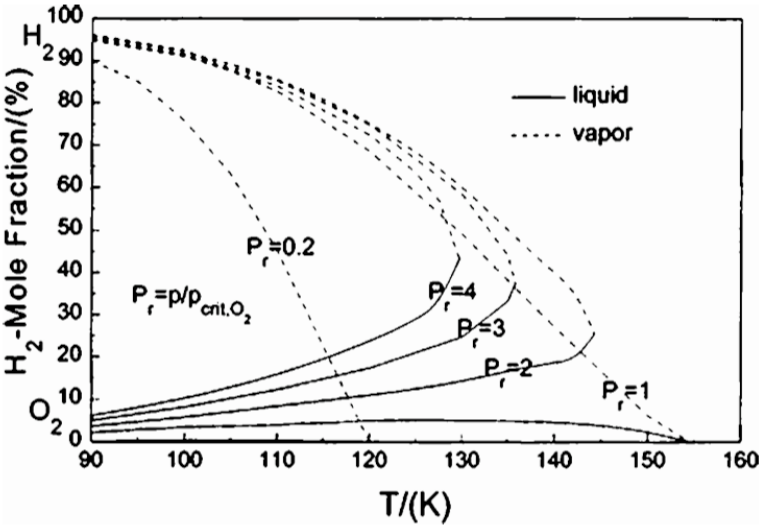


FIGURE 2.5 – Equilibre de phase du système H_2/O_2 et concentration molaire de l'oxygène et de l'hydrogène. Tiré de Oschwald *et al.* [108].

2.3 Comportement des fluides à pression supercritique

A l'approche du point critique, les propriétés thermodynamiques d'une substance pure subissent des modifications importantes par rapport à leur comportement gaz parfait. La figure 2.6 trace la variation du facteur de compressibilité $Z = p/(\rho \overline{r} T)$ en fonction de la pression réduite pour différentes isothermes. Une grandeur réduite est donnée par le rapport entre cette variable et sa valeur critique : pression réduite $P_R = P/P_C$, température réduite $T_R = T/T_C$ et volume réduit $v_R = v/v_C$. Le facteur de compressibilité permet de quantifier l'écart de l'équation d'état par rapport à un comportement gaz parfait, $Z = 1$ correspondant à l'équation d'état des gaz parfaits. Autour de la pression critique ($P_R \approx 1$), une très forte déviation par rapport au gaz parfait est notable lorsque la température est proche de sa valeur critique : l'équation d'état des gaz parfaits n'est plus valable. Cependant, pour des températures suffisamment élevées par rapport à la température critique, un comportement proche de celui d'un gaz parfait est retrouvé.

La figure 2.7 montre les variations de la densité et de la capacité calorifique à pression constante de l'oxygène à 60 bar et 110 bar tirées de la base de données NIST et comparées aux valeurs obtenues à partir d'une équation d'état de gaz parfait. Ces grandeurs sont choisies pour cet exemple car elles permettent de mettre en évidence l'écart par rapport au gaz parfait de l'équation d'état et de la thermodynamique. Rappelons que la pression critique P_C vaut 50.4 bars et que la température critique T_c vaut 155 °K pour l'oxygène. On retrouve le fort écart entre le comportement **gaz réel** et le gaz parfait pour la densité (Fig. 2.7 (a)). De la même manière, la capacité calorifique est affectée par la non-idéalité proche de la température critique

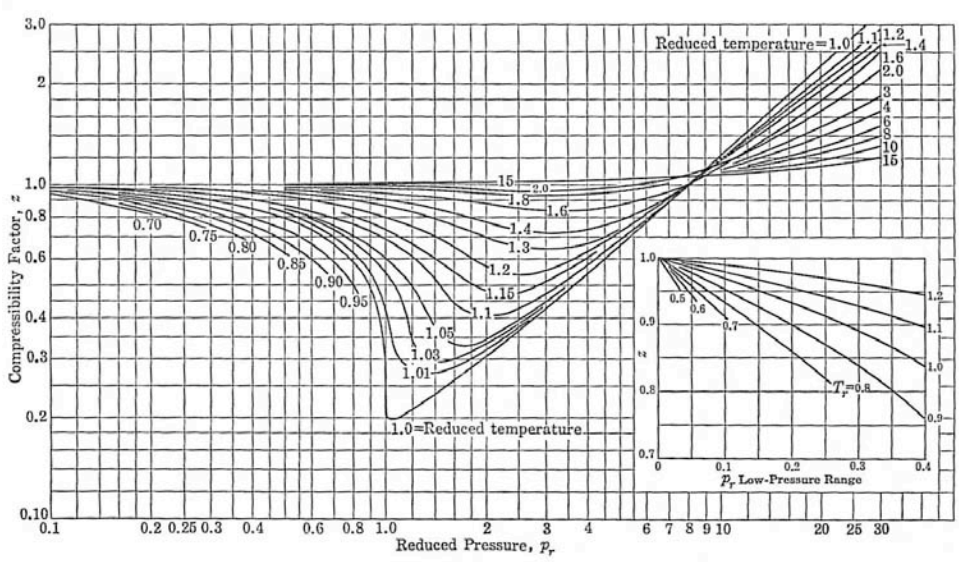


FIGURE 2.6 – Facteur de compressibilité $Z = P/(\rho \overline{r} T)$ en fonction de la pression réduite pour différentes isothermes. Tiré de Hirschfelder *et al* [53].

(Fig. 2.7 (b)). Toutes les autres grandeurs thermodynamiques (Par ex. : l'enthalpie, l'énergie interne ou la vitesse du son) présentent également une déviation du comportement gaz parfait. Remarquons que la variation en densité est d'autant plus forte que la pression est proche du point critique. La température pour laquelle la capacité calorifique à pression constante est maximale est appelée température de pseudo-ébullition T^*. Elle correspond au prolongement de la ligne de coexistence de phases (ligne de pseudo-ébullition Fig. 2.2). De manière générale, à pression constante, le fluide passe d'un état dense proche d'un liquide, lorsque la température est inférieure à T^*, à un état léger proche d'un gaz, lorsque la température est supérieure à T^*. Contrairement au cas à pression souscritique, ce changement d'état s'opère de manière continue, sans discontinuité associée à un changement de phase. Ainsi, dans le cas d'un système réactif où de l'oxygène liquide est injecté à pression supercritique (injection transcritique), de forts gradients de densité sont présents autour du jet d'oxygène dense.

De la même manière, les coefficients de transport subissent de fortes modifications près du point critique. Pour un cas mono-espèce, la viscosité dynamique μ et la conductivité thermique λ sont des grandeurs représentatives de l'effet de la densité sur le transport. A l'approche du point critique, un changement de variation de la courbe de viscosité de la figure 2.7 (c) est observé. La viscosité d'un gaz augmente avec la température, tandis que celle d'un liquide diminue avec la température. Une fois les pression et température critiques dépassées, la viscosité du fluide suit à nouveau un comportement proche d'un gaz, mais au niveau de la région critique le changement est brutal. Soulignons le fait que lorsque le fluide est en phase liquide (donc pour des températures basses), la viscosité est bien plus importante (1 ordre de grandeur de plus que dans la zone supercritique où les températures sont de l'ordre de 10^3). Enfin, le comportement de la conductivité thermique λ est très semblable à celui de la viscosité (Fig. 2.7 (d)).

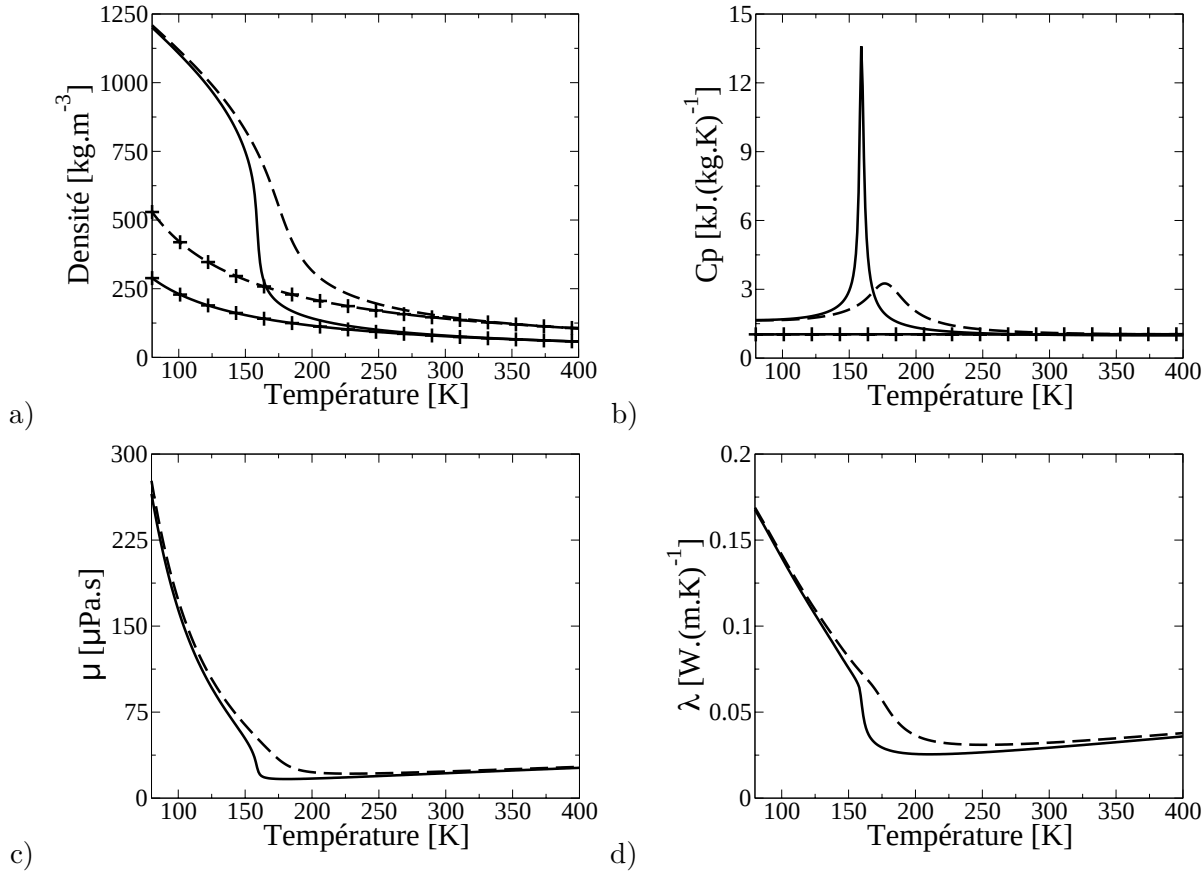


FIGURE 2.7 – Densité (a), capacité calorifique à pression constante C_P (b), viscosité dynamique μ (c) et conductivité thermique λ (d) de l'oxygène. — 60 bar (NIST) ; − − 110 bar (NIST). + Gaz parfait. $T_{C,O_2} = 155$ K ; $P_{C,O_2} = 50.4$ bar.

2.4 Modélisation

L'Eq. 2.2 est l'équation d'état du viriel. Cette équation d'état est intéressante d'un point de vue théorique et permet notamment de mettre en avant l'influence des interactions moléculaires sur le comportement du fluide. Cependant, dans les cas usuels, l'équation est tronquée au deuxième coefficient, ce qui limite donc son utilisation à des densités peu élevées. Cette équation d'état n'a pas été testée, car d'après Poling et al. [115], la précision de cette équation est généralement plus faible que les équations d'état généralement utilisées (telles les cubiques, dont certaines seront développées).
De manière générale, on classe les équations d'état en deux catégories : les équations analytiques et les équations non-analytiques. Une équation est dite analytique lorsque, pour une température et une pression données, la densité peut être calculée de manière analytique et ne nécessite pas une résolution numérique. Cela implique que l'équation d'état ne peut avoir une puissance sur la densité supérieure à 4. De plus, afin de pouvoir reproduire un comportement semblable à celui présenté en Fig. 2.2, la fonction utilisée doit contenir un point d'inflexion. Ainsi, l'équation d'état analytique la plus simple capable de décrire un comportement liquide et gazeux est de forme cubique sur la densité. Les équations d'état non-analytiques sont généralement plus précises que les équation cubiques ou quadriques. L'équation d'état non-analytique la plus connue est l'équation de Benedict, Webb et Rubin (BWR) [115]. La forme de cette équation est cependant très complexe et est trop coûteuse pour être intégrée au sein d'un code de Simulation aux Grandes Echelles. Elle n'a donc pas été utilisée dans ce travail.

Finalement, seules des équations cubiques sont considérées ici. Le principe des états correspondant est d'abord brièvement rappelé en Sec. 2.4.1. Ce principe est la base de la construction d'équations d'état. Quatre équations d'état sont ensuite présentées : gaz parfait (Sec. 2.4.2), Peng-Robinson (Sec. 2.4.3), Peng-Robinson avec une correction de volume (Sec. 2.4.4) et Soave-Redlich-Kwong (Sec. 2.4.5). Les 3 dernières équations d'état sont les plus utilisées pour la simulation à pression supercritique [99, 168].

2.4.1 Principe des états correspondants

D'après Hirschfelder et al. [53], le principe des états correspondants s'énonce ainsi : "Toutes les substances obéissent à la même équation d'état en termes de variables réduites". De manière générale, pour un cas mono-espèce, l'état d'un système peut être décrit par 2 des 3 variables suivantes : pression, volume et température. Ainsi, d'après le principe des états correspondants, toute grandeur sans dimension est une fonction universelle de 2 des 3 variables réduites. Le facteur de compressibilité $Z = P/(\rho \overline{r} T)$ peut par exemple être écrit en fonction de la température réduite et de la pression réduite : $Z = Z(P_R, T_R)$ ce qui donne le résultat de la Fig. 2.6. Le facteur de compressibilité critique $Z_C = (P_C v_C)/(RT_C)$ est obtenu lorsque $P_R = T_R = 1$ et est donc, d'après le principe des états correspondants, une constante universelle, proche de 0.292.
Le facteur de compressibilité peut également être exprimé en fonction du volume réduit et de la

température réduite :

$$\frac{Pv}{RT} = F(T_R, v_R) \tag{2.10}$$

où F est une fonction universelle. L'Eq. 2.10 s'écrit également :

$$P_R = \left(\frac{RT_C}{P_C v_C}\right)\left(\frac{T_R}{v_R}\right) F(T_R, v_R) \tag{2.11}$$

$$= Z_C \left(\frac{T_R}{v_R}\right) F(T_R, v_R) \tag{2.12}$$

Puisque le facteur de compressibilité critique est, d'après le principe des états correspondants, une constante universelle, l'Eq. 2.12 est alors également une fonction universelle de T_R et v_R :

$$P_R = G(T_R, v_R) \tag{2.13}$$

Une représentation de l'Eq. 2.13 est donnée en Fig. 2.2 (b).
Le principe des états correspondants est ainsi à l'origine de nombreuses équations d'état. Dans le cas de molécules non polaires et quasi-sphériques, Z_C est effectivement proche de 0.292. Cependant, il constitue une approximation du comportement réel et des erreurs importantes sont observables lorsque les molécules considérées ne sont pas sphériques ou sont polaires (par ex. : pour de l'oxygène : $Z_C = 0.292$ et pour l'eau : $Z_C = 0.224$), justifiant l'introduction du facteur acentrique ω. Le facteur acentrique ω (Pitzer [112]) est défini à partir de la relation 2.14 où la pression $P_R^{T_R=0,7}$ désigne la valeur où il y a coexistence de phases pour une température réduite de 0.7 :

$$\omega = -ln(P_R^{T_R=0,7}) - 1 \tag{2.14}$$

Le principe des états correspondants étendu s'écrit alors :

$$P_R = P_R(T_R, v_R, \omega) \tag{2.15}$$

Les équations d'état présentées dans les sections suivantes sont construites en utilisant ce principe des états correspondants étendu.

2.4.2 Équation d'état des gaz parfaits

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

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

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

où $\overline{W}$ est la masse molaire du mélange et Y_k la fraction massique de l'espèce k. La constante du mélange $\overline{r}$ dépend des fractions massiques :

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

$$\tag{2.19}$$

où $\mathcal{R} = 8.3143\ J.mol^{-1}.K^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. Dans cette formulation, chaque molécule de fluide est considérée comme étant seule dans le volume et les interactions moléculaires sont négligées.

2.4.3 Équation d'état de Peng-Robinson

Pour un mélange de fluides de volume molaire $v^m = \overline{W}/\rho$, l'équation d'état de Peng-Robinson (PR) [126] est donnée par :

$$P = \frac{\mathcal{R}T}{v^m - b_m^m} - \frac{a_m^m(T)}{(v^m)^2 + 2v^m b_m^m - (b_m^m)^2} \tag{2.20}$$

où $a_m^m(T)$ et b_m^m sont les coefficients molaires de Peng-Robinson associés au mélange. $a_m^m(T)$ modélise l'attraction mutuelle des molécules tandis que b_m^m modélise la force de répulsion, associée au volume occupé par les molécules. Ecrite sous forme massique, l'équation 2.20 devient :

$$\boxed{P = \frac{\rho\overline{r}T}{1 - \rho b_m} - \frac{\rho^2 a_m}{1 + 2\rho b_m - \rho^2 b_m^2}} \tag{2.21}$$

où $a_m(T) = a_m^m(T)/\overline{W}^2$ et $b_m = b_m^m/\overline{W}$ sont les coefficients massiques de Peng-Robinson associés au mélange. Ces coefficients sont calculés à partir de la loi de mélange de Van Der Walls [115] :

$$a_m(T) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} a_{ij}(T) Y_i Y_j \tag{2.22}$$

$$b_m = \sum_{i=1}^{N} b_i Y_i \tag{2.23}$$

$$\text{avec} \qquad a_{ij}(T) = \sqrt{a_i(T)a_j(T)}(1 - k_{ij}) \tag{2.24}$$

où k_{ij} est le coefficient d'interaction binaire. Ce coefficient permet d'améliorer la précision de l'équation d'état dans les mélanges et est obtenu par ajustement avec des données expérimentales. Les coefficients a_{ii} et b_i sont les coefficients de Peng-Robinson pour une espèce pure i et sont donnés par :

$$a_{ii} = \Phi_{C_i}\Psi(T)^2 \tag{2.25}$$

$$b_i = 0.077796\frac{r_i T_{C_i}}{P_{C_i}} \tag{2.26}$$

avec

$$r_i = \frac{R}{W_i} \tag{2.27}$$

$$\Phi_{C_i} = 0.457236\frac{(r_i T_{C_i})^2}{P_{C_i}} \tag{2.28}$$

$$\Psi(T) = 1 + c_i(1 - \sqrt{T_{R_i}}) \tag{2.29}$$

$$c_i = 0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2 \tag{2.30}$$

où T_{C_i} est la température critique de l'espèce i, P_{C_i} sa pression critique, et ω_i son facteur acentrique. Enfin, $T_{R_i} = T/T_{C_i}$ est la température réduite de l'espèce i. Lorsque $\rho \to 0$, on remarque que l'on retrouve l'équation d'état des gaz parfaits, ce qui est consistent avec le fait qu'à faible densité les interactions moléculaires sont négligeables.

2.4.4 Équation d'état de Peng-Robinson modifiée

Afin d'améliorer la précision lors du calcul de la densité, mais également des grandeurs thermodynamiques, Harstad *et al.* [51] ont développé une équation d'état à partir de l'équation de Peng-Robinson.
Nous verrons en Sec. 2.6 que, de manière générale, le calcul des grandeurs thermodynamiques est réalisé à partir d'un état de référence pris en régime gaz parfait et d'une fonction résiduelle qui reproduit la déviation à cet état de référence. Pour une grandeur générale F, on écrit donc $F = F^0 + \Delta F$ où F^0 est l'état de référence pris à $P^0 = 1$ bar et ΔF la fonction résiduelle, calculée à partir de l'équation d'état (*cf* Sec. 2.6).
Dans la méthode proposée par Harstad *et al.* [51], la fonction résiduelle est calculée avec l'équation de PR, tandis qu'un ajustement est réalisé sur l'état de référence F^0 afin d'améliorer la précision générale de l'équation d'état de PR. Cet ajustement est réalisé sur l'enthalpie et l'entropie obtenues à partir d'une équation d'état connue comme étant très précise (Lee-Kesler), et n'est valable que sur une plage de température et de pression données. Par exemple, pour l'oxygène, l'ajustement est réalisé pour une température comprise entre 100 K et 400K.
Pour une substance pure k, Harstad *et al.* [51] proposent la forme suivante pour l'énergie de Gibbs de référence :

$$G_k^0(T,P) = r_k T_{C_k}\left(a_k(P) + \frac{b_k(P)}{2T_{R_k}} + e_k(P)T_{R_k} - c_k(P)T_{R_k}ln(T_{R_k}) + 2d_k(P)\sqrt{T_{R_k}}\right) \tag{2.31}$$

où $a_k(P)$, $b_k(P)$, $c_k(P)$, $d_k(P)$ et $e_k(P)$ sont des polynômes d'ordre 3 en pression pour lesquels les coefficients sont propres à l'espèce considérée. Ceux pour l'oxygène sont donnés dans le Tab. 2.1.

L'état de référence ayant un comportement de gaz parfait, la loi de mélange du gaz parfait peut être utilisée : $G^0 = \sum_k X_k(G_k^0 + RT\ln(X_k))$. Le volume molaire est donné par la dérivée

n	a_n	b_n	c_n	d_n	e_n
0	-2.6627.10^{-3}	-2.6855.10^{-2}	3.5256	0	-1.8844.10^{1}
1	-5.5055.10^{-2}	3.8370.10^{-2}	2.3725.10^{-2}	0	4.8007.10^{-2}
2	1.0802.10^{-2}	-5.8455.10^{-3}	-4.0817.10^{-3}	0	-7.9077.10^{-3}
3	-3.3882.10^{-4}	1.7140.10^{-4}	1.3537.10^{-4}	0	2.5601.10^{-4}

TABLE 2.1 – Coefficients pour les polynômes en pression (par ex. : $a_k(P) = \sum_{n=0}^{3} a_n P^n$) de la fonction de Gibbs de référence (Eq. 2.31) pour l'oxygène.

partielle de l'énergie de Gibbs du mélange par rapport à la pression :

$$v = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,X_k} \tag{2.32}$$

$$= \left(\frac{\partial \Delta G_{PR} + G^0}{\partial P}\right)_{T,X_k} \tag{2.33}$$

ou également :

$$\boxed{v = v_{PR} + \left(\frac{\partial G^0}{\partial P}\right)_{T,X_k}} \tag{2.34}$$

où v est le volume et v_{PR} est le volume résiduel obtenu avec l'équation de PR. Le deuxième terme du membre de droite de l'Eq. 2.34 est la correction de volume induite par la fonction de référence ajustée. L'effet de l'ajustement sur les grandeurs thermodynamiques telle que l'enthalpie est détaillé en Sec. 2.6. L'équation d'état résultante sera dénommée PRm pour PR modifiée.

2.4.5 Équation d'état de Soave-Redlich-Kwong

Pour un mélange de fluides, l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) [144] est donnée par :

$$\boxed{P = \frac{\rho \bar{r} T}{1 - \rho b_m} - \frac{\rho^2 a_m(T)}{1 + \rho b_m}} \tag{2.35}$$

où $a_m(T)$ et b_m sont les coefficients massique de SRK associés au mélange. Pour une substance pure i, les coefficients de SRK $a_{ii}(T)$ et b_i sont donnés par :

$$a_{ii}(T) = \Phi_{C_i} \Psi(T)^2 \tag{2.36}$$

$$b_i = 0.08664 \frac{r_i T_{C_i}}{P_{C_i}} \tag{2.37}$$

avec

$$r_i = \frac{\mathcal{R}}{W_i} \tag{2.38}$$

$$\Phi_{C_i} = 0.42747\frac{(r_i T_{C_i})^2}{P_{C_i}} \tag{2.39}$$

$$\Psi(T) = 1 + c_i(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{C_i}}}) \tag{2.40}$$

$$c_i = 0.48508 + 1.5517\omega_i - 0.15613\omega_i^2 \tag{2.41}$$

Les coefficients a_m et b_m sont obtenus à partir des même lois de mélange que pour PR (Eqs. 2.22 à 2.24).

2.4.6 Détermination de la densité pour une température et une pression

L'obtention de la densité nécessite la résolution d'une équation cubique :

$$\rho^3 + (a_2)\,\rho^2 + (a_1)\,\rho + (a_0) = 0 \tag{2.42}$$

où, pour l'équation de PR,

$$a_0 = \frac{P}{Pb_m^3 + b_m^2\overline{r}T - b_m a_m} \tag{2.43}$$

$$a_1 = \frac{Pb_m - \overline{r}T}{Pb_m^3 + b_m^2\overline{r}T - b_m a_m} \tag{2.44}$$

$$a_2 = \frac{-Pb_m^2 - 2\overline{r}Tb_m + a_m}{Pb_m^3 + b_m^2\overline{r}T - b_m a_m} \tag{2.45}$$

et pour l'équation de SRK :

$$a_0 = \frac{P}{b_m a_m} \tag{2.46}$$

$$a_1 = -\frac{\overline{r}T}{b_m a_m} \tag{2.47}$$

$$a_2 = \frac{-Pb_m^2 - \overline{r}Tb_m + a_m}{a_m b_m} \tag{2.48}$$

Pour résoudre l'Eq. 2.42, une méthode de Cardan est utilisée. Dans certains cas, il peut s'avérer que l'on obtienne plusieurs solutions réelles. Toute solution réelle négative est écartée car non physique. Si deux solutions réelles positives existent, la solution réelle ayant la fugacité f la plus faible est choisie. En effet, selon le deuxième principe de la thermodynamique, cette solution est la plus stable. Enfin, si deux solutions ont même fugacité, il y a coexistence de phases : la densité la plus faible correspond au gaz et la densité la plus grande au liquide. Ce cas particulier

n'a pas été considéré dans le calcul, car très improbable. La fugacité f du mélange est donnée par [115] :

$$\text{PR} : \quad ln\left(\frac{f}{P}\right) = \frac{a_m}{2\sqrt{2}b_m\overline{r}T} ln\left(\frac{1+(1-\sqrt{2})\rho b_m}{1+(1+\sqrt{2})\rho b_m}\right) - ln\left(\frac{P(1-\rho b_m)}{\rho\overline{r}T}\right) + \frac{P}{\rho\overline{r}T} - 1 \quad (2.49)$$

$$\text{SRK} : \quad ln\left(\frac{f}{P}\right) = \frac{a_m}{b_m\overline{r}T} ln\left(\frac{1}{1+\rho b_m}\right) - ln\left(\frac{P(1-\rho b_m)}{\rho\overline{r}T}\right) + \frac{P}{\rho\overline{r}T} - 1 \quad (2.50)$$

Un exemple de résultat avec changement de phase est donné Fig. 2.8, où la densité de l'oxygène est tracée en fonction de la température à 10 bar, 50 bar et 100 bar en utilisant l'équation de Peng-Robinson. Le résultat est comparé à la base de données NIST. Le changement de phase est correctement reproduit. Les densités sont en bonne concordance, sauf lorsque que la température est inférieure à la température critique (155 ˚K), où on observe une erreur de 12%, provenant d'une erreur sur la densité de l'équation de Peng-Robinson lorsque la température est inférieure à la température critique.

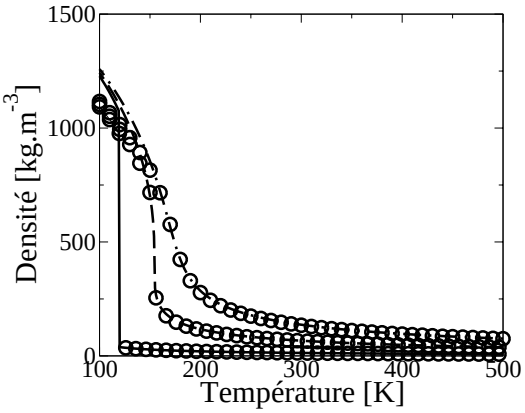


FIGURE 2.8 – Densité de l'oxygène à 10, 50 et 100 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars. — Peng-Robinson 10 bar ; − − Peng-Robinson 50 bar ; − · − Peng-Robinson 100 bar ; ∘ Référence NIST .

2.5 Comparaison des équations d'état pour le calcul de la densité

Une comparaison entre les équations d'état cubiques présentées en sec. 2.4 est effectuée afin de déterminer l'équation la plus précise pour le calcul de la densité. La densité est une variable cruciale car varie fortement en condition transcritique et que son évaluation correcte est nécessaire pour respecter les rapports entre débit et vitesse à l'injection. Un exemple de résultat pour l'oxygène à 100 bar et à 60 bar est montré Fig. 2.9. La température varie entre 100 K et 400 K.

La température critique de l'oxygène est 155 K et sa pression critique est 50 bar, de sorte que le test est transcritique. Le comportement de la densité est bien reproduit par les 3 équations d'état avec, dans tous les cas, la forte variation de densité capturée au bon moment et l'évolution globale retrouvée. Ces équations ont également un très bon comportement à faible pression et pour des températures plus élevées [116]. Elles sont donc toutes à même de prédire correctement la densité dans une large gamme de température et de pression.
L'équation de PR est la plus précise dans la zone critique (zone où la densité est très sensible à la température). Dans cette région, SRK génère environ 10% d'erreur et PRm 6% (Fig. 2.9 (a)). Lorsque la pression diminue et se rapproche de la valeur critique, les erreurs dans la zone critique augmente pour SRK, tandis que PR reste très performante (Fig. 2.9 (b)). A l'inverse, lorsque la densité augmente ($T < T_C$), PR sur-estime la densité d'environ 12%, ce qui n'est pas le cas de SRK et PRm. De manière générale, PRm est l'équation la plus précise pour la densité, même si PR est la plus précise dans la zone critique, où les variations de densité sont importantes.
Dans la suite de cette étude, l'équation utilisée est PR car elle est la plus précise dans la zone de fort gradient, ce qui est considéré comme le plus crucial. Il est toujours possible, si nécessaire, de corriger l'erreur dans la zone dense en utilisant PRm. Cependant, PRm, bien qu'étant l'équation la plus précise en terme de densité, est également la plus coûteuse ce qui a conduit dans un premier temps à ne pas l'utiliser.
La densité pour l'oxygène (a) et l'hydrogène (b) en fonction de la température à 60 bar calcu-

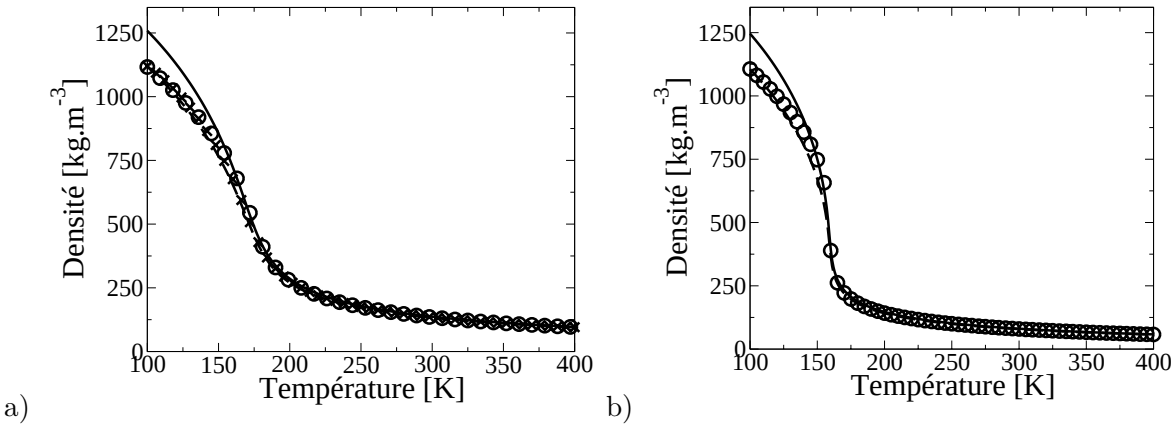


FIGURE 2.9 – Densité de l'oxygène 100 bar (a) et 60 bar (b) pour différentes équations d'état. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et sa température critique 155 K. — PR ; × PRm ; – – SRK ; ∘ Référence NIST .

lée avec PR et en gaz parfait pour l'oxygène sont tracées Fig. 2.10, et comparées à la base de données NIST (*h*ttp ://webbook.nist.gov). L'équation de PR donne de bons résultats dans les deux cas, mais un fort écart est observable avec l'équation d'état des gaz parfaits pour l'oxygène lorsque $T < T_{C,O_2}$. Ceci justifie à nouveau la nécessité d'utiliser une loi d'état adaptée pour les simulations à haute pression.

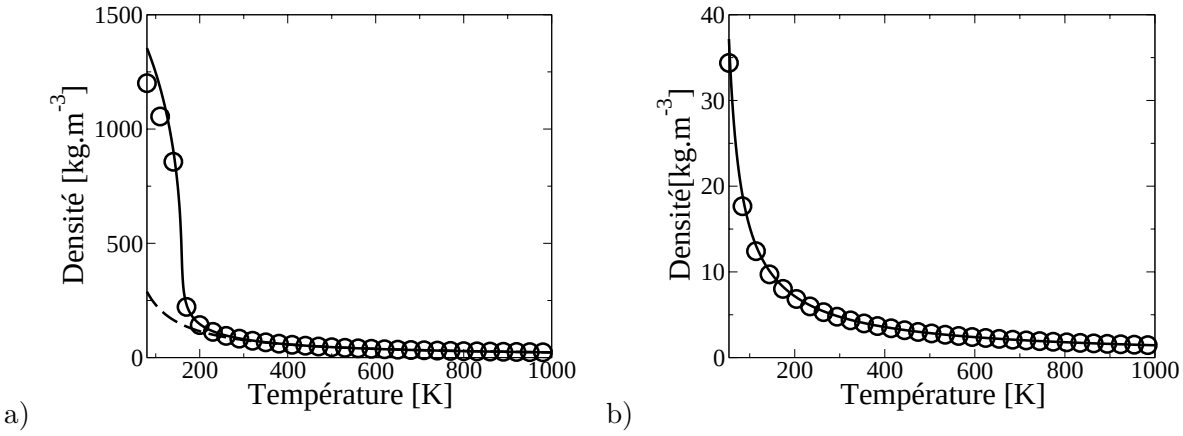


FIGURE 2.10 – Densité de l'oxygène (a) et de l'hydrogène (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar. — Peng-Robinson ; – – Gaz parfait ; ○ Référence NIST .

2.6 Variables thermodynamiques

Le calcul des variables thermodynamiques se fait à partir de la thermodynamique basse pression qui sert d'état de référence, à laquelle la contribution haute densité est ajoutée via l'utilisation de relations thermodynamiques fondamentales permettant de définir les fonctions résiduelles (section 2.6.2). Pour une variable d'état F, la formulation peut s'écrire :

$$F(T,\rho,Y_k) = F^0(T,Y_k) + \Delta F(T,\rho,Y_k) \tag{2.51}$$

où $F^0(T,Y_k)$ est l'état de référence basse pression qui ne dépend que de la température et du mélange et $\Delta F(T,\rho,Y_k)$ est la fonction résiduelle qui dépend de la température, du mélange mais également de la densité.
L'état de référence est décrit en Sec. 2.6.1 et les fonctions résiduelles sont calculées en Sec. 2.6.2. Dans le cas de l'équation d'état PRm, on rappelle que l'état de référence est donné par l'Eq. 2.34 qui contient une correction de la thermodynamique gaz parfait.

2.6.1 Etat de référence basse pression (gaz parfait)

L'état de référence est pris à la pression $P_0 = 1\ bar$. Dans ces conditions, la thermodynamique est celle d'un gaz parfait, pour laquelle l'énergie sensible massique de chaque espèce $e^0_{s,k}(T)$ ne dépend que de la température. L'énergie sensible de référence du mélange est la somme pondérée par la fraction massique de chaque espèce :

$$e^0_s = \sum_{k=1}^{N} Y_k e^0_{s,k} \tag{2.52}$$

La capacité calorifique à volume constant de référence du mélange C_v^0 est définie par l'Eq. 2.53 :

$$C_v^0 = \left(\frac{\partial e_s^0}{\partial T}\right)_\rho = \sum_{k=1}^{N} Y_k \left(\frac{\partial e_{s,k}^0}{\partial T}\right)_\rho = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{v,k}^0 \tag{2.53}$$

où $C_{v,k}^0$ est la capacité calorifique à volume constant de référence de l'espèce k. Les capacités calorifiques $C_{v,k}^0$ ne dépendent que de la température. L'exposant polytropique de référence du mélange est donné par $\gamma^0 = C_p^0/C_v^0$, où C_p^0 est la capacité calorifique de référence du mélange ($C_p^0 = C_v^0 + \overline{r}$).

2.6.2 Thermodynamique haute pression (gaz réel)

Dans cette section, l'effet de la densité élevée sur l'énergie interne et la capacité calorifique est calculé. Ces variables étant des variables d'état, leurs valeurs ne dépendent que de l'état initial et final. Considérons le cas de l'énergie interne. Pour un cas mono-espèce, puisque les variables T et ρ sont indépendantes, on peut écrire :

$$de_s = \left(\frac{\partial e_s}{\partial T}\right)_\rho dT + \left(\frac{\partial e_s}{\partial \rho}\right)_T d\rho \tag{2.54}$$

Puisqu'une variable d'état est uniquement définie par son état initial et final, le "chemin" d'intégration n'a aucune importance et on peut intégrer entre ρ_1 et T_1, la densité et la température finale et ρ_0 et T_0, les valeurs de référence :

$$e_s(T_1,\rho_1) - e_s(T_0,\rho_0) = \int_{T_0}^{T_1} \left\{\left(\frac{\partial e_s}{\partial T}\right)_{\rho=\rho_0} dT\right\} + \int_{\rho_0}^{\rho_1} \left\{\left(\frac{\partial e_s}{\partial \rho}\right)_{T=T_1} d\rho\right\} \tag{2.55}$$

$$= e_s(T_1,\rho_0) - e_s(T_0,\rho_0) + e_s(T_1,\rho_1) - e_s(T_1,\rho_0) \tag{2.56}$$

soit :

$$e_s(T_1,\rho_1) - e_s(T_1,\rho_0) = \int_{\rho_0}^{\rho_1} \left\{\left(\frac{\partial e_s}{\partial \rho}\right)_{T=T_1} d\rho\right\} \tag{2.57}$$

$$\equiv e_s - e_s^0(T_1) \tag{2.58}$$

Une relation entre l'énergie sensible à une température et densité T_1 et ρ_1 et une énergie de référence à T_1 et ρ_0 est ainsi établie, où ρ_0 désigne une densité calculée à une pression de référence $P_0 = \rho_0 \overline{r} T = 1$ bar. Dans la relation 2.57 est appelée fonction résiduelle.
L'énergie résiduelle valable dans toutes les conditions thermodynamiques, s'écrit [53] :

$$e_s - e_s^0(T) = -\int_\rho^{\rho_0} \left\{\frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k} - \frac{P}{\rho^2}\right\}_{T,Y_k} d\rho \tag{2.59}$$

De même, on a pour C_v :

$$C_v - C_v^0(T) = T\int_{\rho}^{\rho_0}\left\{\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k}\right\}_{T,Y_k} d\rho \tag{2.60}$$

On pourra en déduire l'enthalpie et la capacité calorifique à pression constante à partir de :

$$h_s = e_s + \frac{P}{\rho} \tag{2.61}$$

$$C_p = C_v + \frac{T\alpha^2}{\rho\beta} \tag{2.62}$$

où les coefficients d'expansion thermique α et de compressibilité isotherme β sont définis par :

$$\alpha = -\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_{P,Y_i} = \frac{1}{\rho}\left(\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_{T,Y_i}\right)^{-1}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho,Y_i} \tag{2.63}$$

$$\beta = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_{T,Y_i} = \frac{1}{\rho}\left(\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_{T,Y_i}\right)^{-1} \tag{2.64}$$

où e_s est l'énergie sensible massique du mélange, h_s son enthalpie sensible massique et C_v et C_p les capacités calorifiques massiques à volume constant et pression constante. Les intégrations en densité s'effectuent à composition et température constantes. Remarquons qu'en utilisant l'équation d'état des gaz parfaits dans les Eqs. 2.59 - 2.64, on obtient :

$$e_s = e_s^0(T) \qquad C_v = C_v^0(T) \qquad \alpha = \frac{1}{T} \qquad \beta = \frac{1}{P} \tag{2.65}$$

On retrouve bien l'indépendance de l'énergie sensible à la densité en gaz parfait.

2.6.3 Application à Peng-Robinson

En appliquant les relations précédentes à l'équation de Peng-Robinson on trouve directement :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_{T,Y_k} = \frac{\overline{r}T}{(1-\rho b_m)^2} - a_m\frac{2+2\rho b_m}{(1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2)^2} \tag{2.66}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k} = \frac{\rho\overline{r}}{1-\rho b_m} - \frac{\rho^2\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2} \tag{2.67}$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k} = -\frac{\rho^2\left(\frac{\partial^2 a_m}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k}}{1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2} \tag{2.68}$$

On en déduit :

$$e_s - e_s^0(T) = \left(\frac{\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}T - a_m}{2\sqrt{2}b_m}\right)\left[ln\left(\frac{1+(1-\sqrt{2})\rho b_m}{1+(1+\sqrt{2})\rho b_m}\right)\right]_{\rho}^{\rho_0} \tag{2.69}$$

Comme la pression de référence est supposée faible, on a $\rho_0 b_m << 1$, d'où le résultat suivant :

$$\boxed{e_s - e_s^0(T) = \left(\frac{a_m - T\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{2\sqrt{2}b_m} \right) ln\left(\frac{1+(1-\sqrt{2})\rho b_m}{1+(1+\sqrt{2})\rho b_m} \right)} \tag{2.70}$$

Il s'en suit :

$$\boxed{h_s = \left(\frac{a_m - T\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{2\sqrt{2}b_m} \right) ln\left(\frac{1+(1-\sqrt{2})\rho b_m}{1+(1+\sqrt{2})\rho b_m} \right) + e_s^0(T) + \frac{P}{\rho}} \tag{2.71}$$

De la même manière, on calcule les capacités calorifiques :

$$\boxed{C_v - C_v^0(T) = \frac{-T\left(\frac{\partial^2 a_m}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k}}{2\sqrt{2}b_m} ln\left(\frac{1+(1-\sqrt{2})\rho b_m}{1+(1+\sqrt{2})\rho b_m} \right) \qquad \text{et} \qquad C_p = C_v + \frac{T\alpha^2}{\rho\beta}} \tag{2.72}$$

où α et β valent :

$$\alpha = \beta \left\{ \frac{\rho\overline{r}}{1-\rho b_m} - \frac{\rho^2 \frac{\partial a_m}{\partial T}}{1+2\rho b_m - \rho^2 b_m^2} \right\} \tag{2.73}$$

$$\beta = \left\{ \frac{\rho\overline{r}T}{(1-\rho b_m)^2} - a_m \frac{2\rho^2(1+\rho b_m)}{(1+2\rho b_m - \rho^2 b_m^2)^2} \right\}^{-1} \tag{2.74}$$

Les dérivées première et seconde de a_m par rapport à la température sont données par :

$$\frac{\partial a_m}{\partial T} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} Y_i Y_j \frac{\partial a_{ij}}{\partial T} \tag{2.75}$$

$$\frac{\partial^2 a_m}{\partial T^2} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} Y_i Y_j \frac{\partial^2 a_{ij}}{\partial T^2} \tag{2.76}$$

avec :

$$\frac{\partial a_{ii}}{\partial T} = \Phi_{C_i} 2\Psi(T)\frac{\partial \Psi(T)}{\partial T} \tag{2.77}$$

$$\frac{\partial^2 a_{ii}}{\partial T^2} = \Phi_{C_i} 2\left(\Psi(T)\frac{\partial^2 \Psi(T)}{\partial T^2} + \left(\frac{\partial \Psi(T)}{\partial T}\right)^2\right) \tag{2.78}$$

$$\frac{\partial \Psi(T)}{\partial T} = -\frac{1}{2}\frac{c_i}{\sqrt{TT_{C_i}}} \tag{2.79}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(T)}{\partial T^2} = -\frac{1}{2T}\frac{\partial \Psi(T)}{\partial T} \tag{2.80}$$

$$\frac{\partial a_{ij}}{\partial T} = \frac{1}{2a_{ij}}\left(a_{ii}\frac{\partial a_{jj}}{\partial T} + a_{jj}\frac{\partial a_{ii}}{\partial T}\right)(1-k_{ij})^2 \tag{2.81}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 a_{ij}}{\partial T^2} = {} & \frac{1}{2a_{ij}}\left(a_{ii}\frac{\partial^2 a_{jj}}{\partial T^2} + a_{jj}\frac{\partial^2 a_{ii}}{\partial T^2} + 2\frac{\partial a_{ii}}{\partial T}\frac{\partial a_{jj}}{\partial T}\right)(1-k_{ij})^2 \\ & -\frac{1}{a_{ij}}\left(\frac{\partial a_{ij}}{\partial T}\right)^2(1-k_{ij})^2\end{aligned} \tag{2.82}$$

2.6.4 Application à Peng-Robinson modifiée

Comme cela a été indiqué en Sec. 2.4.4, la correction développée pour l'équation de PR par Harstad *et al* [51] est obtenue par modification des état de référence. Les énergies et capacités calorifiques de référence pour chaque espèce ne sont plus données par les Eqs. 2.52 et 2.53, mais par les relations suivantes obtenues à partir de l'Eq. 2.31 :

$$e^0_{s,k} = r_k\left(\frac{b_k(P)}{2T_R^2} - e_k(P) + c_k(P)(1+ln(T_R)) - \frac{d_k(P)}{\sqrt{T_R}} - T\right) \tag{2.83}$$

$$C^0_{v,k} = r_k\left(-\frac{b_k(P)}{T_R^2} + c_k(P) + \frac{d_k(P)}{2\sqrt{T_R}} - 1\right) \tag{2.84}$$

Les fonctions résiduelles sont les mêmes que celles pour l'équation de PR données en Eqs. 2.59 et 2.60.

2.6.5 Application à SRK

Avec l'équation de Soave-Redlich-Kwong, on trouve directement :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T,Y_k} = \frac{\overline{r}T}{(1-\rho b_m)^2} - a_m \frac{\rho\,(2+\rho b_m)}{(1+\rho b_m)^2} \tag{2.85}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k} = \frac{\rho \overline{r}}{1-\rho b_m} - \frac{\rho^2 \left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{1+\rho b_m} \tag{2.86}$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k} = -\frac{\rho^2 \left(\frac{\partial^2 a_m}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k}}{1+\rho b_m} \tag{2.87}$$

On en déduit :

$$\boxed{e_s - e_s^0(T) = \left(\frac{a_m - T\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{b_m}\right) ln\,(1+\rho b_m)} \tag{2.88}$$

Il s'en suit :

$$\boxed{h_s = \left(\frac{a_m - T\left(\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)_{\rho,Y_k}}{b_m}\right) ln\,(1+\rho b_m) + e_s^0(T) + \frac{P}{\rho}} \tag{2.89}$$

De la même manière, on calcule les capacités calorifiques :

$$\boxed{C_v - C_v^0(T) = \frac{-T\left(\frac{\partial^2 a_m}{\partial T^2}\right)_{\rho,Y_k}}{b_m} ln\,(1+\rho b_m) \qquad \text{et} \qquad C_p = C_v + \frac{T\alpha^2}{\rho\beta}} \tag{2.90}$$

où α et β valent :

$$\alpha = \beta\left\{\frac{\rho\overline{r}}{1-\rho b_m} - \frac{\rho^2 \frac{\partial a_m}{\partial T}}{1+\rho b_m}\right\} \tag{2.91}$$

$$\beta = \left\{\frac{\rho\overline{r}T}{(1-\rho b_m)^2} - a_m \frac{\rho^2(2+\rho b_m)}{(1+\rho b_m)^2}\right\}^{-1} \tag{2.92}$$

Les dérivées première et seconde de a_m par rapport à la température sont données par les Eq. 2.75 - 2.82.

2.7 Comparaison et exemples de résultats thermodynamiques

La Fig. 2.11 (a) compare l'enthalpie sensible de l'oxygène à 100 bar entre 100 et 400K pour les 3 équations d'états cubiques testées. Dans cette gamme de température les résultats sont très bons pour les 3 équations d'état, indiquant une fois encore que les 3 équations ont un comportement bien représentatif de la physique gaz réel.

La région testée est étendue jusqu'à 4000 K sur la Fig. 2.11 (b) pour les équations PR et PRm. A de telles températures ($T_R >> 1$), les effets gaz réels sont négligeables et la comparaison n'implique finalement que les enthalpies de référence. Ces températures sont en-dehors du domaine de validité de la correction de Harstad *et al.*[51]. L'enthalpie de PRm suit une évolution linéaire (la capacité calorifique à pression constante est constante). Un écart de 20% est observable entre PR et PRm. Il faut cependant noter que dans le cadre des applications visées, l'hydrogène est en excès, si bien que l'oxygène est entièrement consommé. La présence d'oxygène à des températures supérieure à 1000 K est donc très peu probable et l'erreur n'aura dans ce cas que peu d'impact.

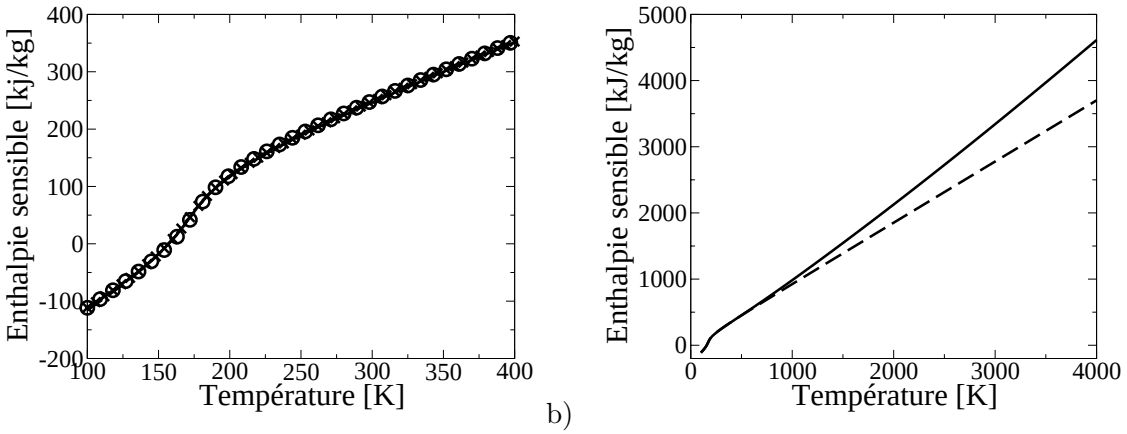


FIGURE 2.11 – Enthalpie sensible de l'oxygène entre 100 K et 400 K (a) et entre 100 K et 4000 K (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar.
(a) — PR ; × PRm ; − − SRK ; ∘ Référence NIST.
(b) — PR ; − − PRm.

L'enthalpie et la capacité calorifique à pression constante calculées à partir de l'équation de PR (choisie pour la suite de ce travail) de l'oxygène et de l'hydrogène en fonction de la température à 60 bar sont tracées Fig. 2.12 et 2.13. Dans les ceux cas, les comparaisons avec la base de donnée NIST (http ://webbook.nist.gov) sont bonnes. Les valeurs obtenues avec la thermodynamique gaz parfait sont tracées pour l'oxygène. Encore une fois, on note un fort écart entre le gaz parfait et le gaz réel lorsque la densité est grande (*i*.e. lorsque $T < T_{C,O_2} \approx 155K$).
Un exemple de comportement du coefficient de compressibilité isotherme α et du coefficient d'expansion thermique β est présenté sur la Fig. 2.14 pour l'oxygène à 60 bar. Le comportement en gaz parfait est également rappelé sur les graphiques pour comparaison. La très forte non-idéalité est clairement observable. La forte variation de α est liée à la forte dépendance de la densité à la température proche de la température critique. L'évolution du coefficient de compressibilité isotherme permet de constater l'extrême sensibilité de la thermodynamique et notamment la très forte raideur entre pression et densité dans le fluide dense (qui est très peu compressible, comme un liquide).

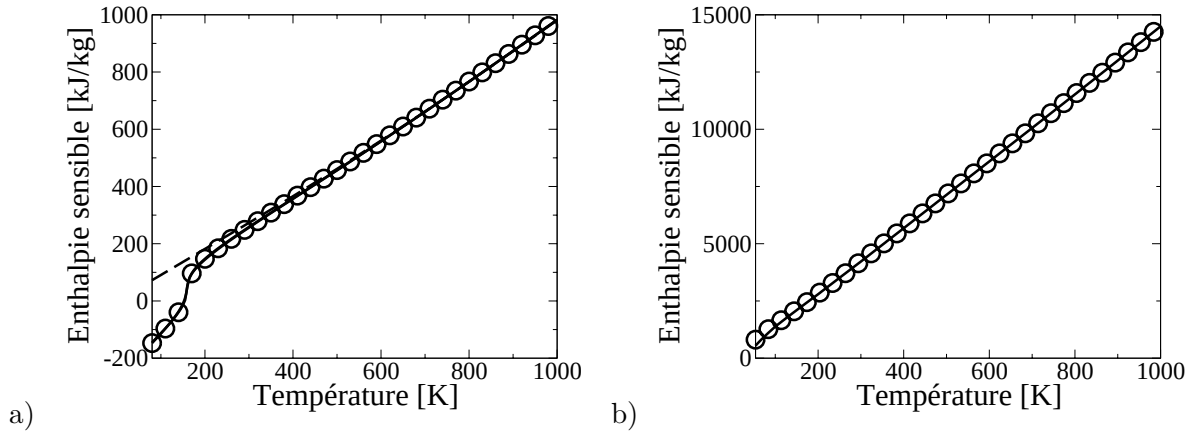


FIGURE 2.12 – Enthalpie de l'oxygène (a) et de l'hydrogène (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar. — Peng-Robinson ; − − Gaz parfait ; ∘ Référence NIST .

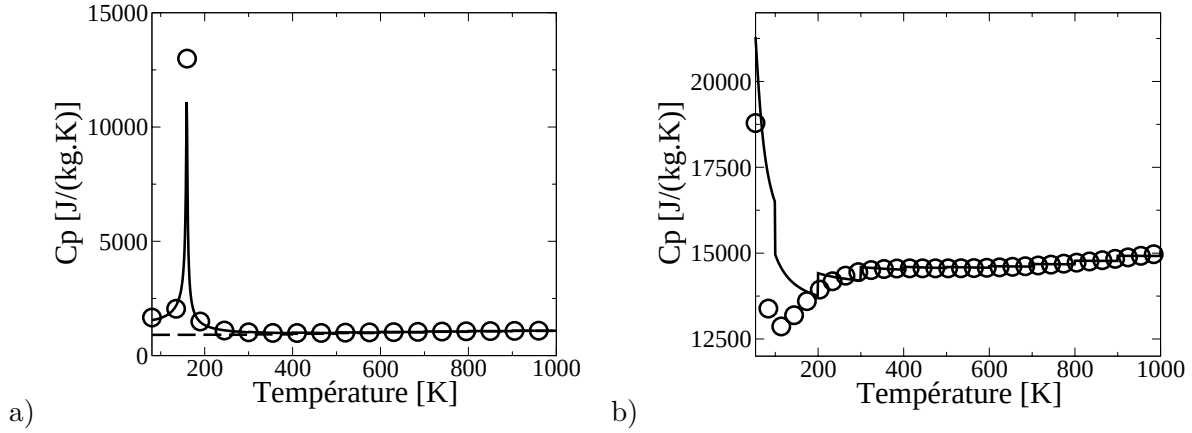


FIGURE 2.13 – Capacité calorifique à pression constante de l'oxygène (a) et de l'hydrogène (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar. — Peng-Robinson ; − − Gaz parfait ; ∘ Référence NIST .

2.8 Relations thermodynamiques importantes en équation d'état de Peng-Robinson

2.8.1 Propriétés partielles massiques

Dans le cas général des gaz réels, les propriétés du mélange ne sont plus simplement une moyenne pondérée par le nombre de moles des propriétés de chaque composant. Elles dépendent

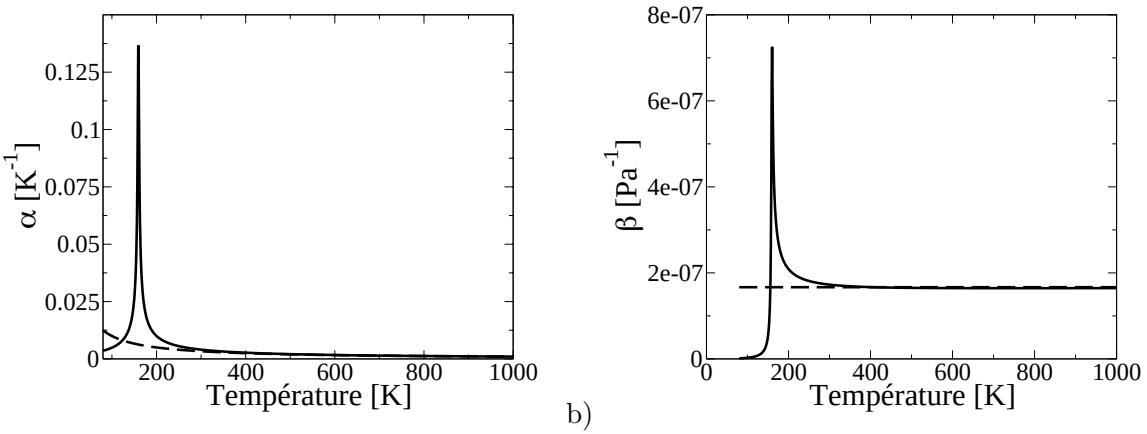


FIGURE 2.14 – Coefficient d'expansion thermique α (a) et coefficient de compressibilité isotherme β (b) de l'oxygène à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars. — Peng-Robinson ; – – Gaz parfait.

de manière non linéaire de la température, pression mais aussi des fractions molaires de chaque espèce.
La différentielle d'une fonction extensive $F = mf$, où f est la propriété massique et m la masse du système, en fonction de P, T et m_i s'écrit [34] :

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{P,m_i} dT + \left(\frac{\partial F}{\partial P}\right)_{T,m_i} dP + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial F}{\partial m_i}\right)_{P,T,m_{j\neq i}} dm_i \tag{2.93}$$

où m_i est la masse de l'espèce i dans le système. Les variables P, T et m_i sont indépendantes. La grandeur

$$f_i = \left(\frac{\partial F}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} \tag{2.94}$$

est appelée dérivée partielle massique [115] [34].
Ainsi, le volume partiel massique v_i vaut :

$$v_i = \left(\frac{\partial mv}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\ \neq i}} = \frac{m\left(\frac{\partial P}{\partial m_i}\right)_{T,mv,m_{j\ \neq i}}}{\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T,m_j}} = \frac{m\left(\frac{\partial P}{\partial m_i}\right)_{T,mv,m_{j\ \neq i}}}{\rho\beta^{-1}} \tag{2.95}$$

où $mv = V$ est le volume total et :

$$m\left(\frac{\partial P}{\partial m_i}\right)_{T,V,m_{j\neq i}} = \frac{\rho r_i T}{1-\rho b_m} + \frac{\rho^2 rT}{(1-\rho b_m)^2}\frac{\partial m b_m}{\partial m_i} - \frac{\rho^2}{1+2\rho b_m - \rho^2 b_m^2}\frac{\partial m^2 a_m}{m\partial m_i} + \frac{2\rho^3 a_m(1-\rho b_m)}{(1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2)^2}\frac{\partial m b_m}{\partial m_i} \tag{2.96}$$

Soit, finalement :

$$\boxed{v_i = \beta\left(\frac{r_i T}{1-\rho b_m} + \frac{\rho r T b_i}{(1-\rho b_m)^2} - \frac{2\rho\sum_k Y_k a_{ik}}{1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2} + \frac{2\rho^2 a_m(1-\rho b_m)b_i}{(1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2)^2}\right)} \tag{2.97}$$

Le volume partiel massique dépend donc du mélange contrairement au cas gaz parfait ($v_i = r_i T/P$).

De la même manière, l'enthalpie partielle massique $h_{s,i}$ s'écrit :

$$h_{s,i} = \left(\frac{\partial m h_s}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} \tag{2.98}$$

$$= \left(\frac{\partial m(h_s - h_s^0)}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} + \left(\frac{\partial m h_s^0}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} \tag{2.99}$$

Le deuxième terme de droite est lié à l'enthalpie de référence :

$$\left(\frac{\partial m h_s^0}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} = \left(\frac{\partial m\sum_j Y_j h_{s,j}^0}{\partial m_i}\right)_{T,P,m_{j\neq i}} \tag{2.100}$$

$$= h_{s,i}^0 \tag{2.101}$$

où $h_{s,i}^0$ est l'enthalpie sensible massique de référence de l'espèce i. Après quelques développements, on peut montrer que l'on obtient :

$$\boxed{\begin{aligned} h_{s,i} = &\left(\frac{2\sum_k Y_k a_{ik} - 2T\sum_k Y_k \frac{\partial a_{ik}}{\partial T}}{2\sqrt{2}b_m} - \frac{\left(a_m - T\frac{\partial a_m}{\partial T}\right)b_i}{2\sqrt{2}b_m}\right) ln\left(\frac{1+\rho(1-\sqrt{2})b_m}{1+\rho(1+\sqrt{2})b_m}\right) \\ &+ \frac{a_m - T\frac{\partial a_m}{\partial T}}{b_m}\frac{\rho^2 v_i b_m - \rho b_i}{1+2\rho b_m-\rho^2 b_m^2} + Pv_i - r_i T + h_{s,i}^0 \end{aligned}} \tag{2.102}$$

A titre illustratif, le volume partiel et l'enthalpie partielle de l'oxygène dans une mélange O_2/H_2 à 60 bar et 120 K sont tracés en fonction de la fraction massique de O_2 en Fig. 2.15. Les résultats en gaz parfait sont également tracés. La très forte dépendance au mélange est remarquable.

2.8.2 Relations thermodynamiques entre T, P, ρY_k et ρe_s

Les grandeurs partielles massiques f_i et les grandeur massiques f sont reliées par la relation [34] :

$$f(T,P,m_1,m_2,..,m_N) = \sum_{i=1}^{N} Y_i f_i(T,P,m_1,m_2,..,m_N) \tag{2.103}$$

$$df = \sum_{i=1}^{N} Y_i df_i + \sum_{i=1}^{N} f_i dY_i \tag{2.104}$$

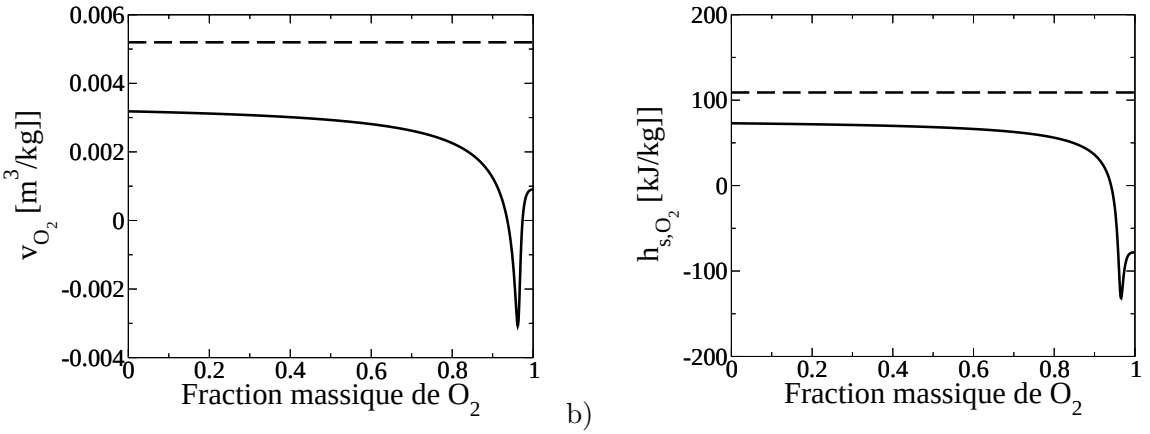


FIGURE 2.15 – Volume partiel massique de l'oxygène (a) et enthalpie partielle massique de l'oxygène (b) à 60 bar et à $T = 120$ K pour un mélange O_2/H_2, en fonction de la fraction massique de O_2. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et sa température critique vaut $T_{C,O_2} \approx 155$ K. — Peng-Robinson ; − − Gaz parfait.

L'équation de Gibbs-Duhem [115] donnée par :

$$-\sum_{i=1}^{N} Y_i df_i + \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_{P,m_i} dT + \left(\frac{\partial f}{\partial P}\right)_{T,m_i} dP = 0 \tag{2.105}$$

permet d'écrire :

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_{P,m_i} dT + \left(\frac{\partial f}{\partial P}\right)_{T,m_i} dP + \sum_{i=1}^{N} f_i dY_i \tag{2.106}$$

Expression de dv et de_s en fonction de dT, dP et dY_i

En appliquant directement la relation 2.106 au volume massique v et à l'énergie interne massique e, on peut écrire :

$$dv = \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_{P,m_i} dT + \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_{T,m_i} dP + \sum_{i=1}^{N} v_i d(Y_i) \tag{2.107}$$

$$de_s = \left(\frac{\partial e_s}{\partial T}\right)_{P,m_i} dT + \left(\frac{\partial e_s}{\partial P}\right)_{T,m_i} dP + \sum_{i=1}^{N} e_{s,i} d(Y_i) \tag{2.108}$$

ce qui s'écrit également :

$$dv = (v\alpha)\,dT + (-v\beta)\,dP + \sum_{i=1}^{N} v_i dY_i \tag{2.109}$$

$$de_s = (C_p - Pv\alpha)\,dT + v\,(P\beta - T\alpha)\,dP + \sum_{i=1}^{N} e_{s,i} dY_i \tag{2.110}$$

Expression de de_s en fonction de dT, dv et dY_i

Sortons dP de l'équation 2.109 :

$$dP = \frac{1}{-v\beta} dv + \frac{\alpha}{\beta} dT + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{v_i}{v\beta}\right) dY_i \tag{2.111}$$

en injectant dP dans l'équation 2.110 et après réécriture, on obtient :

$$de_s = C_v dT - \left(P + \frac{C_v - C_p}{\alpha v}\right) dv + \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left(\frac{C_v - C_p}{\alpha v}\right) v_i + h_{s,i} \right\} dY_i \tag{2.112}$$

Expression de de_s en fonction de dP, dv et dY_i

Sortons dT de l'équation 2.109 :

$$dT = \frac{1}{v\alpha} dv + \frac{\beta}{\alpha} dP - \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{v_i}{v\alpha}\right) dY_i \tag{2.113}$$

en injectant dT dans l'équation 2.110 et après réécriture, on obtient :

$$de_s = \left(\frac{C_p}{v\alpha} - P\right) dv + \left(\frac{\beta}{\alpha} C_v\right) dP + \sum_{i=1}^{N} \left\{ h_{s,i} + \left(\frac{C_p}{\alpha v}\right) v_i \right\} dY_i \tag{2.114}$$

Expressions de dT et dP en fonction de de_s, dv et dY_i

A partir des relations 2.112 et 2.114, on obtient rapidement :

$$dT = \frac{1}{C_v} de_s + \left(\frac{P}{C_v} + \frac{1}{\alpha v}\left(1 - \frac{C_p}{C_v}\right)\right) dv - \sum_{i=1}^{N} \frac{(C_v - C_p)v_i + \alpha v h_{s,i}}{\alpha v C_v} dY_i \tag{2.115}$$

$$dP = \frac{\alpha}{\beta C_v} de_s + \left(\frac{\alpha P}{\beta C_v} - \frac{C_p}{\beta v C_v}\right) dv - \sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{\alpha}{\beta C_v} h_{s,i} + \frac{C_p}{C_v \beta v} v_i \right\} dY_i \tag{2.116}$$

Changement de variables pour la simulation

Les variables utilisées en simulation sont les variables conservatives $(\rho Y_k, \rho E, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3)$, où ρ est la densité, Y_k sont les fractions massiques, $E = e_s + \sum u_i^2$, l'énergie totale par unité de masse, et u_i la vitesse dans la direction i. Les équations 2.115 et 2.116 sont à réécrire en fonction de $(\rho Y_k, \rho e_s, \rho)$. Les relations suivantes sont immédiates :

$$d(Y_i) = \frac{d(\rho Y_i) - Y_i d\rho}{\rho} \tag{2.117}$$

$$d(e_s) = \frac{d(\rho e_s) - e_s d\rho}{\rho} \tag{2.118}$$

$$d(v) = -\frac{1}{\rho^2} d(\rho) \tag{2.119}$$

et permettent d'obtenir les relations 2.120 et 2.121 :

$$\boxed{dT = \frac{1}{\rho C_v} d(\rho e_s) - \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_v - C_p}{\alpha C_v} v_k + \frac{h_{s,k}}{\rho C_v} \right\} d(\rho Y_k)} \tag{2.120}$$

$$\boxed{dP = \frac{\alpha}{\beta \rho C_v} d(\rho e_s) + \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_p}{C_v} \frac{v_k}{\beta} - \frac{\alpha h_{s,k}}{\rho \beta C_v} \right\} d(\rho Y_k)} \tag{2.121}$$

Ces relations sont très importantes pour l'intégration dans un code comme AVBP et sont notamment utilisées dans les conditions aux limites, ainsi que dans certaines parties associées aux schémas numériques. Les détails sont donnés en section 5, qui traite de l'intégration de la thermodynamique gaz réel au sein du code compressible et non-structuré AVBP.

2.9 Phénomènes diffusifs

La résolution des équations de Navier-Stokes nécessite le calcul des flux diffusifs, associés à la viscosité, au flux thermique et au flux d'espèces. De manière générale, le vecteur flux de chaleur $\overrightarrow{q}$ et le vecteur flux de l'espèce k $\overrightarrow{J}_k$ peuvent s'écrire sous la forme [6] [4] :

$$\overrightarrow{q} = \overrightarrow{q}_{\overrightarrow{\nabla} T} + \overbrace{\overrightarrow{q}_{\overrightarrow{\nabla} Y}}^{Interdiffusion} + \overbrace{\overrightarrow{q}_{\overrightarrow{\nabla} Y}^{D}}^{Dufour} \tag{2.122}$$

$$\overrightarrow{J}_k = \overrightarrow{J}_{k,\overrightarrow{\nabla} P} + \overrightarrow{J}_{k,\overrightarrow{\nabla} Y} + \overbrace{\overrightarrow{J}_{k,\overrightarrow{\nabla} T}}^{Soret} \tag{2.123}$$

En plus des contributions habituelles en gradient de température pour le flux de chaleur et en gradient d'espèce pour le flux d'espèce, une dépendance au gradient de pression est présente dans le flux d'espèce. De plus, un gradient de température peut générer un flux d'espèce (effet

Soret) et qu'un gradient d'espèce peut générer un flux de chaleur (effet Dufour). Dans ce travail, l'influence du gradient de pression sur le flux d'espèce est négligée. Cette simplification n'a pour l'instant pas été quantifiée. Cependant, d'après Bird *et al.* [6], cet effet n'est *a priori* important que dans des cas particuliers comme la centrifugation où les gradients de pression sont très grands. L'effet Soret (flux d'espèce provoqué par un gradient de température) n'est pas non plus pris en compte. Une simulation numérique directe d'une injection d'hydrogène-oxygène, en environnement réactif, réalisée par Oefelein [97] a mis en évidence l'impact très faible de ce terme comparativement aux contributions du gradient d'espèce et du gradient de pression. Finalement, les flux d'espèces considérés sont :

$$\overrightarrow{q} = \overrightarrow{q}_{\overrightarrow{\nabla} T} + \overbrace{\overrightarrow{q}_{\overrightarrow{\nabla} Y}}^{Interdiffusion} \tag{2.124}$$

$$\overrightarrow{J}_k = \overrightarrow{J}_{k,\overrightarrow{\nabla} Y} \tag{2.125}$$

Les coefficients de diffusion sont modifiés par la non-idéalité et de nouveaux modèles doivent être introduits pour les calculs en gaz réel. Le calcul du flux d'espèce est discuté en section 2.9.1 et celui du flux de chaleur en section 2.9.2.

2.9.1 Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale s'écrit avec l'Eq. 2.126. $\mathbf{V}^k$ représente la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k = 1, ..., N$) et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (Eq. 2.127). L'Eq. 2.127, qui fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k ou des fractions massiques dans l'Eq. 2.128.

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k V_i^k = 0 \tag{2.126}$$

$$X_k V_i^k = -D_k \alpha_{D,k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.127}$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \alpha_{D,k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.128}$$

où le coefficient $\alpha_{D,k}$ est le facteur de diffusion massique (mass diffusion factor) [115] [4] et est égal à 1 en gaz parfait, D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange. $\alpha_{D,k}$ est une correction destinée à prendre en considération la force effectivement responsable de la diffusion d'espèce, associée au gradient de potentiel chimique de l'espèce k, μ_k [115, 53, 6] :

$$\frac{\partial \mu_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \mu_k}{\partial X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} = \alpha_{D,k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.129}$$

si bien que le facteur de diffusion massique $\alpha_{D,k}$ est donné :

$$\alpha_{D,k} = \frac{\partial \mu_k}{\partial X_k} = 1 + X_k \frac{\partial \ln f_k}{\partial X_k} \tag{2.130}$$

où f_k est la fugacité de l'espèce k (homogène à une pression, elle peut être vue comme l'expression de la pression partielle au cas général) et est obtenue à partir de l'équation d'état. Le calcul de D_k est discuté en section 2.9.4.
L'expression des vitesses de diffusion 2.127 et 2.128, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.126 n'est pas nécessairement respectée. On ajoute alors une vitesse de diffusion corrective $\mathbf{V}^c$ dont l'expression Eq. 2.131 découle directement de l'Eq. 2.126 [114]. Le flux de diffusion des espèces $\overrightarrow{J}_k$ avec cette correction s'écrit finalement :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N} D_k \alpha_{D,k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.131}$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k \left(V_i^k + V_i^c \right) = -\rho \left(D_k \alpha_{D,k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \tag{2.132}$$

2.9.2 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total $\overrightarrow{q}$ 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 associé à la diffusion des espèces.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k} h_{s,k} \tag{2.133}$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{conduction} \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^{N} \left(D_k \alpha_{D,k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{interdiffusion} \tag{2.134}$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie en section 2.9.3.

2.9.3 Coefficients de viscosité et de conductivité thermique

Modèles utilisés en gaz parfait

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air [1]. La loi puissance (Eq. 2.135) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \tag{2.135}$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref}. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0 (air : $b = 0.76$).

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. 2.136 qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant et également indépendant du mélange. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. 2.137.

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \tag{2.136}$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \tag{2.137}$$

Modèles utilisés en gaz réel

Il y a plusieurs contraintes concernant la sélection du modèle pour le calcul des coefficients de viscosité dynamique et de conductivité thermique :

- La gamme de température et de pression doit recouvrir la zone 100 - 5000 K et 1-300 bar respectivement.
- Le modèle ne doit pas être trop coûteux en temps de calcul.

Dans ces conditions, deux approches dominent : la méthode de Ely & Hanley [38] [39] et la méthode de Chung et al. [25]. Ce sont par ailleurs les méthodes généralement utilisées pour la simulation numérique en gaz réel [97] [168]. Ces 2 méthodes font usage du principe des états correspondants [115] pour évaluer la viscosité et la conductivité thermique d'un fluide à partir d'un fluide de référence. Ely et al. utilisent comme fonction de référence une fonction empirique ajustée sur une espèce donnée, généralement le méthane, pour une grande gamme de pression et de température. La méthode de Chung et al. est basée sur l'équation de Chapman-Enskog au premier ordre [53, 115], issue de la théorie cinétique des gaz et valable à faible densité. Cette équation est exprimée en variables réduites et corrigée par une expression empirique pour les hautes densités. Les deux méthodes donnent des résultats satisfaisants dans la gamme de température et de pression d'intérêt, mais aucun n'est exempt de défaut comme en atteste l'article de revue de Congiunti *et al.* [31].

Le modèle de Chung et al. a été retenu dans le travail pour modéliser à la fois le coefficient de conductivité thermique et la viscosité dynamique du mélange. L'intérêt d'utiliser un seul modèle pour calculer les deux coefficients est un coût de calcul minimum car certaines variables sont communes, leur formulation étant très proche.

Remarque : La méthode de Chung et al. calcule les coefficients de transport à partir de la densité et de la température. A une pression et température donnée, les erreurs de l'équation d'état sur le calcul de la densité peuvent avoir des conséquences importantes sur le résultat, notamment lorsque la température est souscritique, puisque la formulation dans cette région est exponentielle. Lorsque l'équation d'état de PR est utilisée, la densité est alors corrigée pour le calcul des coefficients de transport (via une simple translation de volume [80]). Cette correction n'affecte que la région de haute densité.

De manière générale, la méthode de Chung et al. s'écrit :

$$\mu = \mu_0 F_1(T, \rho, T_C, \rho_C, \omega) \tag{2.138}$$
$$\lambda = \lambda_0 F_2(T, \rho, T_C, \rho_C, \omega) \tag{2.139}$$

où μ et λ représentent la viscosité dynamique et la conductivité thermique. Les variables indicées "0" représentent une valeur de référence basse pression (gaz parfait) obtenue à partir de l'équation de Chapman-Enskog. Les fonctions F_1 et F_2 sont des fonctions semi-empiriques qui corrigent les valeurs basse pression afin d'obtenir les valeurs à la pression souhaitée.
Pour utiliser la méthode de Chung et al. dans un mélange, l'idée est de considérer le mélange comme un fluide fictif dont les paramètres critiques $T_{C,m}$, $v_{C,m}$ et ω_m sont exprimés en fonction de la composition, pour obtenir des valeurs pseudo-critiques du mélange :

$$v_{C,m} = \sum_i \sum_j X_i X_j v_{C,ij} \tag{2.140}$$
$$T_{C,m} = \frac{\sum_i \sum_j X_i X_j T_{C,ij} v_{C,ij}}{v_{C,m}} \tag{2.141}$$
$$\omega_m = \frac{\sum_i \sum_j X_i X_j \omega_{ij} v_{C,ij}}{v_{C,m}} \tag{2.142}$$
$$v_{C,ij} = \sqrt{v_{C,i} v_{C_j}}(1 - k_{v,ij}) \tag{2.143}$$
$$T_{C,ij} = \sqrt{T_{C,i} T_{C_j}}(1 - k_{T,ij}) \tag{2.144}$$
$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i + \omega_j}{2} \tag{2.145}$$

où $k_{v,ij}$ et $k_{T,ij}$ sont les coefficients d'interaction binaire entre l'espèce i et l'espèce j pour le volume et la température qui permettent d'améliorer la prédiction dans le cas de mélanges. Pour la présente étude, ces coefficients sont néanmoins fixés à zéro. Le détail de cette méthode peut être trouvé dans Poling et al. [115]. Une comparaison entre la viscosité dynamique et la conductivité thermique obtenues avec le modèle de Chung et al. et la base de donnée NIST est proposée en Fig. 2.16 et 2.17. Les correspondances sont très bonnes sauf pour l'hydrogène où des erreurs apparaissent lorsque la température augmente. L'hydrogène est la seule espèce qui présente de telles erreurs. Ces erreurs étant localisées restent toutefois acceptables (15% pour la viscosité et 30% pour la conductivité thermique) puisque l'évolution avec la température respecte le comportement physique général.

2.9.4 Coefficient de diffusion d'espèces

Le calcul des coefficients de diffusion d'espèce D_k est bien plus compliqué que le calcul de la viscosité et la conductivité thermique, principalement du fait du nombre limité d'informations expérimentales disponibles.

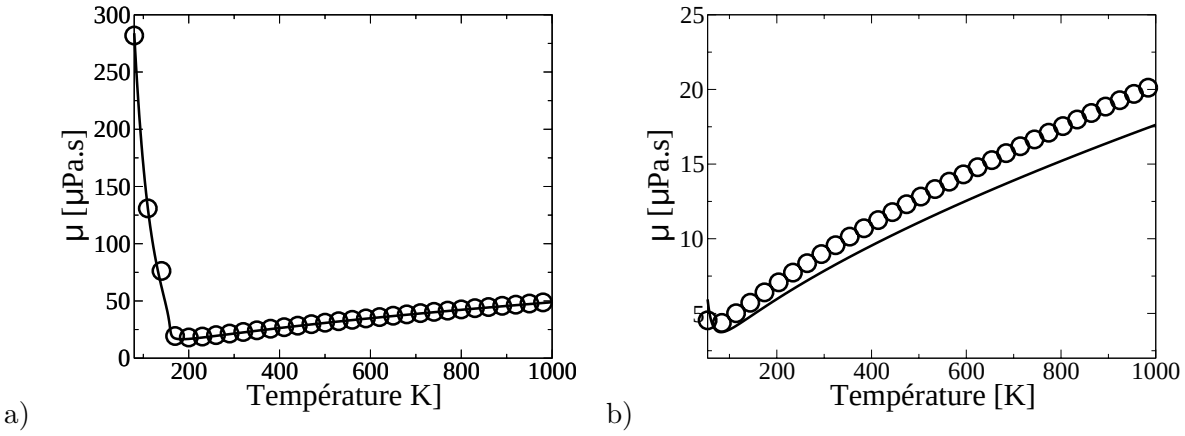


FIGURE 2.16 – Coefficient de viscosité dynamique de l'oxygène (a) et de l'hydrpogène (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar. — Peng-Robinson & Chung et al. ; ∘ Référence NIST.

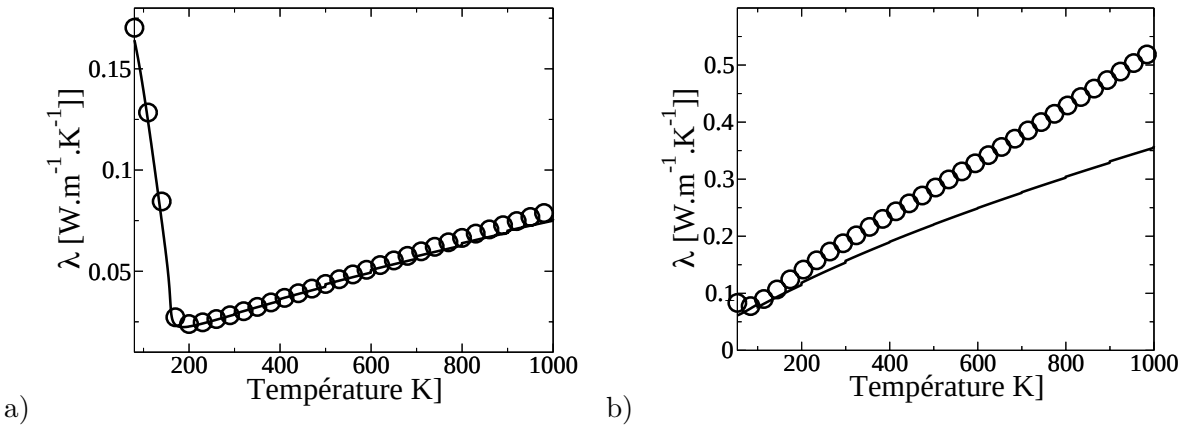


FIGURE 2.17 – Coefficient de conductivité thermique de l'oxygène (a) et de l'hydrpogène (b) à 60 bar. La pression critique de l'oxygène est 50.4 bars et celle de l'hydrogène est 12.8 bar. — Peng-Robinson & Chung et al. ; ∘ Référence NIST.

Le coefficient de diffusion D_k doit être corrigé pour les hautes pressions. Takahashi [147] et Riazi et Withson [122] proposent une correction de la diffusion basse pression basée sur le principe des états correspondants. Les deux modèles souffrent d'erreurs pouvant être importantes [115]. Soulignons par exemple, que la majorité des données expérimentales utilisées par Takahashi pour construire son modèle sont à une température plus élevée que la température critique, si bien que de fortes incertitudes pour des températures réduites inférieures à 1 subsistent. Le modèle de Riazi et al. [122] a une formulation plus simple que celui de Takahashi, mais est a priori moins précis [115]. A la connaissance de l'auteur, il n'y a pas de données expérimentales permettant

de valider efficacement le coefficient de diffusion (et donc les correction de Takahashi et Riazi et al.) à haute pression pour un mélange oxygène / hydrogène.

La diffusivité moléculaire basse pression de l'espèce k dans le mélange D_k^0 peut être exprimée à l'aide des coefficients de diffusion binaires D_{ij}^0. La méthode de Fuller et al. [40] peut par exemple être utilisée. La diffusion de l'espèce k dans le mélange D_k^0 est donnée par l'Eq. 2.146 [42].

$$D_k^0 = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^{N} X_j / D_{jk}^0} \tag{2.146}$$

Dans un calcul utilisant une chimie complexe, utiliser l'Eq. 2.146 a un sens. À l'inverse, un schéma cinétique simplifié ne nécessite pas une modélisation aussi précise. Dans ce travail une approche simplifiée utilisant les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k supposés constants a été initialement choisie comme en gaz parfait. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho \, Sc_k} \tag{2.147}$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k. Corriger pour la haute pression des coefficients de diffusion obtenus à partir de nombres de Schmidt constants, qui sont déjà une approximation, est discutable. De plus, face à l'impossibilité de validation pour le couple oxygène / hydrogène, il a été décidé dans cette thèse de ne pas modifier les coefficients de diffusion est de garder leur expression simplifiée "gaz parfait". Il est cependant important de savoir que la diffusion d'espèce est fortement affectée par les effets de non-idéalité du gaz réel (la diffusion d'une espèce dans un fluide dense, *i.e.* qui a des propriétés proche d'un liquide, est fortement réduite). La flamme à contre courant de Ribert et al. [123] donne un bon exemple de la variation du nombre Schmidt dans un environnement dense (la méthode de Takahashi est utilisée dans ce travail). Une discussion complète sur le sujet est donnée par Harstad et al. [50]. Ces derniers proposent une méthode pour le calcul des coefficients de diffusion valable à basse et haute pression. La méthode est basée sur le principe des états correspondants appliqué à une formulation issue de la théorie cinétique des gaz. Bien que l'absence de données expérimentales à haute pression en limite la précision, la formulation est construite à partir de bases théoriques, ce qui permet *a priori* d'assurer un comportement représentatif de la physique des coefficients calculés.

Chapitre 3

Dynamique des fluides en gaz réel

On considère les équations de Navier-Stokes compressibles, instationnaires et réactives, couplées à une thermodynamique gaz réel.

3.1 Équations et variables conservatives

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).

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

$$\frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overline{\overline{F}} \; = \; \overrightarrow{s}_c \tag{3.1}$$

où $\overrightarrow{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho Y_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives avec respectivement ρ, u, v, w, E, la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\overrightarrow{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$, l'énergie totale non chimique et Y_k la fraction massique de l'espèce k, k variant de 1 à N, N étant le nombre d'espèces. $\overrightarrow{s}_c$ est le terme source lié à la réaction chimique (cf. section 3.2). $\overline{\overline{F}}$ est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non diffusive et une partie diffusive :

$$\overline{\overline{F}} = \overline{\overline{F}}^I(\overrightarrow{w}) + \overline{\overline{F}}^V(\overrightarrow{w}, \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{w}) \tag{3.2}$$

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

$$\overrightarrow{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u_1^2 + P \\ \rho u_1 u_2 \\ \rho u_1 u_3 \\ (\rho E + P) u_1 \\ \rho Y_k u_1 \end{pmatrix}, \quad \overrightarrow{g}^I = \begin{pmatrix} \rho u_1 u_2 \\ \rho u_2^2 + P \\ \rho u_2 u_3 \\ (\rho E + P) u_2 \\ \rho Y_k u_2 \end{pmatrix}, \quad \overrightarrow{h}^I = \begin{pmatrix} \rho u_2 u_3 \\ \rho u_2 u_3 \\ \rho u_3^2 + P \\ (\rho E + P) u_3 \\ \rho Y_k u_3 \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

La pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état (Chap. 2). Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs $\overline{\overline{F}}^V(\overrightarrow{w}, \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{w})$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{f}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u_1\tau_{xx} + u_2\tau_{xy} + u_3\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix} \\
\overrightarrow{g}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u_1\tau_{xy} + u_2\tau_{yy} + u_3\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \\
\overrightarrow{h}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u_1\tau_{xz} + u_2\tau_{yz} + u_3\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

où $\overline{\overline{\tau}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses, μ est la viscosité dynamique (cf. section 2.9.3), $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i (cf. section 2.9.1) et q_i est le flux diffusif de chaleur (cf. section 2.9.2). $\overline{\overline{\tau}}$ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right) \tag{3.5}$$

$$\text{avec :} \quad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{3.6}$$

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

On a donc un système d'équations similaire au cas gaz parfait, à part l'équation d'état, les coefficients de transport et les relations thermodynamiques qui ont des formulations différentes.

3.2 Terme source chimique

Le terme source $\overrightarrow{s}_c$ de l'Eq. 3.1 est défini par : $\overrightarrow{s}_c = (0, 0, 0, \dot{\omega}_T, \dot{\omega}_k)^T$ 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. 3.7. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. 3.8 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. 3.9. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par les Eq. 3.10 et 3.11. $A_{f,j}$ 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.

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \qquad j = 1, M \tag{3.7}$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \tag{3.8}$$

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \tag{3.9}$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T} \right) \tag{3.10}$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq,j}} \tag{3.11}$$

$$K_{eq,j} = \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu_{kj}}_{eq,j} \tag{3.12}$$

Le calcul de la constante d'équilibre faisant intervenir la thermodynamique, il est sensible à l'effet gaz réel, comme on le montre ci-dessous. Lorsque le système est à l'équilibre, l'égalité suivante est vérifiée :

$$\mu_{produits,j} = \mu_{reactifs,j} \tag{3.13}$$

où $\mu_{produits,j}$ et $\mu_{reactifs,j}$ représentent respectivement le potentiel chimique des produits et des réactifs de la réaction j. Les potentiels chimiques $\mu_{produits,j}$ et $\mu_{reactifs,j}$ sont associés aux potentiels chimiques μ_k des espèces k par la relation :

$$\mu_{produits,j} - \mu_{reactifs,j} = \sum_{k=1}^{N} \nu_k \mu_k \tag{3.14}$$

La fugacité f_k de l'espèce k est définie par la relation [34, 71] :

$$\mu_k = \mu_k^0 + RT \ln\left(\frac{f_k}{P^0}\right) \tag{3.15}$$
$$= \mu_k^0 + RT \ln\left(\frac{\gamma_k P X_k}{P^0}\right) \tag{3.16}$$
$$= \mu_k^0 + RT \left(\ln\left(\frac{P X_k}{P^0}\right) + \ln\left(\gamma_k\right)\right) \tag{3.17}$$

où μ_k^0 est le potentiel chimique à $P = P^0$ de l'espèce k et $\gamma_k = f_k/(PX_k)$ est le coefficient de fugacité de l'espèce k. La fugacité de l'espèce k, f_k, a la dimension d'une pression et peut être interprétée comme la pression partielle généralisée, qui prend en compte les interactions moléculaires. De plus, le terme $\ln(\gamma_k)$ de l'Eq. 3.17 représente l'énergie libre de Gibbs en excès, c'est à dire la différence entre le potentiel chimique en gaz parfait et celui en gaz réel [115] :

$$\ln\left(\gamma_k\right) = \frac{\mu_k(T, P, \{X\}) - \mu_k^{GP}(T, P)}{RT} \tag{3.18}$$
$$= \int_V^\infty \left[\left(\frac{\partial nZ}{n_k}\right)_{T,V,n_{j\neq 0}} - 1\right] \frac{dV}{V} - \ln Z \tag{3.19}$$

où $\mu_k^{GP}(T, P)$ est le potentiel chimique à faible densité pour un gaz parfait. On constate que le potentiel chimique de l'espèce k en gaz réel dépend désormais des autres espèces du mélanges. Le coefficient de fugacité se calcule à partir de l'équation d'état. En gaz parfait, puisque $Z = 1$, le coefficient vaut 1. A l'équilibre (Eq. 3.14), avec l'Eq. 3.17, on obtient :

$$\sum_{k=1}^{N} \nu_k \mu_{kj}^0 = \Delta G_j^0 = -RT \left(\ln\left(\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{P X_k}{P^0}\right)^{\nu_{kj}}\right) + \ln\left(\prod_{k=1}^{N}\left(\gamma_k\right)^{\nu_{kj}}\right)\right) \tag{3.20}$$

où ΔG_j^0 représente le potentiel chimique de référence de chaque espèce k de la réaction j à l'équilibre. Si on reprend l'Eq. 3.12 :

$$K_{eq,j} = \prod_{k=1}^{N}\left(\frac{\rho Y_k}{W_k}\right)_{eq,j}^{\nu_{kj}} \tag{3.21}$$
$$= \prod_{k=1}^{N}\left(\frac{P X_k}{ZRT}\right)_{eq,j}^{\nu_{kj}} \tag{3.22}$$
$$= \prod_{k=1}^{N}\left(\frac{P^0}{ZRT}\right)^{\nu_{kj}} \prod_{k=1}^{N}\left(\frac{P X_k}{P^0}\right)^{\nu_{kj}} \tag{3.23}$$

où $Z = \rho \overline{r} T/P$ est le facteur de compressibilité. A partir de l'Eq. 3.20, on obtient :

$$K_{eq,j} = \left[\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{P^0}{ZRT}\right)^{\nu_{kj}} \prod_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{\gamma_k}\right)^{\nu_{kj}}\right] exp\left(-\frac{\Delta G_j^0}{RT}\right) \tag{3.24}$$

L'Eq. 3.24 s'écrit également :

$$K_{eq} = \left[\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{Z\gamma_k}\right)^{\nu_{kj}}\left(\frac{P^0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{k=1}^{N}\nu_{kj}}\right]\exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}}-\frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T}\right) \tag{3.25}$$

La pression de référence est égale à $P^0 = 1\ bar$. ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) associée à la réaction j et définie par l'Eq. 3.26 et ΔS_j^0 sa variation d'entropie définie par l'Eq. 3.27.

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^{N}\nu_{kj}\left(h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0\right) \tag{3.26}$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^{N}\nu_{kj}s_k(T) \tag{3.27}$$

$$\tag{3.28}$$

$\Delta h_{f,k}^0$ 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. 3.29.

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N}\dot{\omega}_k\Delta h_{f,k}^0 \tag{3.29}$$

Par rapport au gaz parfait, des coefficients supplémentaires, Z et γ_k interviennent dans la constante d'équilibre chimique. L'équilibre chimique peut donc être potentiellement affecté par les interactions moléculaires considérées dans le gaz réel. Cependant, Pons [116] a montré, via l'étude de flamme à contre courant à pression supercritique, que la flamme se développe dans la région où la densité est faible. On peut donc supposer que les interactions moléculaires auront finalement un très faible impact sur l'équilibre chimique. De plus, Matuszewski et al. [82] ont montré un impact faible (10%) de la non-idéalité jusqu'à 200 bar sur le calcul de délais d'auto-inflammation d'une chimie hydrogène/air. Nous avons donc choisi de négliger l'effet de la thermodynamique haute pression pour le calcul de l'équilibre chimique et l'équation effectivement utilisée est celle des gaz parfaits :

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{k=1}^{N}\nu_{kj}}\exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}}-\frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T}\right) \tag{3.30}$$

3.3 Décomposition en variables caractéristiques

L'utilisation de conditions aux limites caractéristiques, dont l'implantation dans AVBP est détaillée en Sec. 5.5, nécessite le passage des variables conservatives vers les variables caractéristiques à l'aide de matrices de passage. Cette décomposition en variables caractéristiques permet d'obtenir un système d'équations de propagation indépendantes qui correspondent aux ondes physique et permettent de séparer l'information acoustique de l'information entropique.

Notons que ces conditions limites ne concernent que la partie non-diffusive des équations de conservation (*i.e.* équations d'Euler) car seul un système d'équations hyperboliques peut être exprimé en variables caractéristiques.

Le passage des variables conservatives vers les variables caractéristiques est détaillé ici pour une thermodynamique gaz réel. Afin de mettre en avant les différences entre la thermodynamique gaz parfait et gaz réel, le passage est réalisé en deux étapes : variables primitives vers variables caractéristiques (Sec. 3.3.1), puis variables conservatives vers variables primitives (Sec. 3.3.2).

3.3.1 Passage entre variables primitives et variables caractéristiques

L'expression des variables caractéristiques en termes de variables primitives est développée en gaz réel. Le vecteur des variables primitives $\overrightarrow{v}$ est donné par $\overrightarrow{v} = (u_1, u_2, u_3, P, \{\rho Y_k\})$. Pour simplifier la lecture, le cas 1D est présenté. Les équations de transport mono-dimensionnelles s'écrivent en variables primitives :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_1 \frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0 \tag{3.31}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} = 0 \tag{3.32}$$

$$\rho \frac{\partial e_s}{\partial t} + \rho u_1 \frac{\partial e_s}{\partial x} + P \frac{\partial u_1}{\partial x} = 0 \tag{3.33}$$

Rappelons l'Eq. 2.121 :

$$dP = \frac{\alpha}{\beta \rho C_v} d(\rho e_s) + \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_p}{C_v}\frac{v_k}{\beta} - \frac{\alpha h_{s,k}}{\rho \beta C_v} \right\} d(\rho Y_k) \tag{3.34}$$

qui permet d'obtenir la relation suivante :

$$\frac{De_s}{Dt} = \left(\frac{P}{\rho^2} - \frac{C_p}{\rho \alpha} \right) \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\beta C_v}{\alpha}\frac{DP}{Dt} + \left(\frac{\rho C_p v_i}{\alpha} - h_i \right) \frac{DY_i}{Dt} \tag{3.35}$$

où $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_1 \frac{\partial}{\partial x}$. L'équation 3.35 permet d'écrire l'équation 3.33 sous la forme suivante, puisque $\frac{DY_i}{Dt} = 0$ (Eq. 3.31) :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u_1 \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{C_p}{C_v \beta}\frac{\partial u_1}{\partial x} = 0 \tag{3.36}$$

La vitesse du son c est définie par :

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \tag{3.37}$$

où s est l'entropie. A partir du premier et du deuxième principe de la thermodynamique, si on considère une thermodynamique réversible, on obtient la relation suivante :

$$ds = \frac{\beta C_v}{\alpha T} dP - \frac{C_p}{T \rho \alpha} d\rho \tag{3.38}$$

qui nous permet par identification d'obtenir l'égalité suivante [53] :

$$\frac{C_p}{C_v\beta} = \rho c^2 \tag{3.39}$$

où c est la vitesse du son.
Finalement, le système en variables primitives s'écrit :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_1\frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0 \tag{3.40}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} = 0 \tag{3.41}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u_1\frac{\partial P}{\partial x} + \rho c^2\frac{\partial u_1}{\partial x} = 0 \tag{3.42}$$

Ce système est identique au système obtenu en gaz parfait, seule la vitesse du son a une expression différente (Eq. 3.39). Ainsi, les grandeurs caractéristiques et les matrices de passage entre variables primitives et variables caractéristiques gardent la même forme qu'en gaz parfait. Dans le cas plus général à trois dimensions, elles sont données par [15] :

$$\overline{\overline{L}}_V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho c} & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho c} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{Y_l}{c^2} & \delta_{kl} \end{pmatrix} \qquad \overline{\overline{R}}_V = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{\rho c}{2} & \frac{\rho c}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho_l}{2c} & \frac{\rho_l}{2c} & 0 & 0 & \delta_{kl} \end{pmatrix} \tag{3.43}$$

où $\overline{\overline{L}}_V$ est la matrice permettant de passer des variables primitives vers les variables caractéristiques et $\overline{\overline{R}}_V$ celle permettant de passer des variables caractéristiques vers les variables primitives.

Le vecteur des variables caractéristiques $\overrightarrow{W}$ est donné par $\overrightarrow{W} = (W_+, W_-, W_{t_1}, W_{t_2}, W_k)$, où W_+ et W_- sont les deux ondes acoustiques (convectées à la vistesse $||\overrightarrow{u}|| + c$ et $||\overrightarrow{u}|| - c$), W_k, W_{t1} et W_{t2} les ondes entropiques (convectées à la vistesse $||\overrightarrow{u}||$) pour les espèces et vitesses tangentielles à la limite du domaine.

3.3.2 Passage entre variables conservatives et variables primitives

Les équations de conservation considérées étant exprimées en termes de variables conservatives, les variables caractéristiques doivent être exprimées à partir des variables conservatives. Puisque la relation entre variables primitives et variables caractéristiques est établie, il reste à exprimer la relation entre variables conservatives et variables primitives.

A partir de l'équation 2.121, on obtient rapidement les équations suivantes :

$$d(\rho E) = \frac{\beta\rho C_v}{\alpha} dP + \rho u_i d(u_i) - \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - h_k - e_c \right\} d(\rho Y_k) \tag{3.44}$$

$$dP = \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} d(\rho E) - \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} u_i d(\rho u_i) + \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_p v_k}{C_v \beta} - \frac{\alpha h_k}{\beta C_v} + \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} e_c \right\} d(\rho Y_k) \tag{3.45}$$

où E est l'énergie totale massique et e_c l'énergie cinétique par unité de masse. Les matrices de passage $\overline{\overline{M}}$ et $\overline{\overline{M}}^{-1}$ sont définies de la façon suivante :

$$\overline{\overline{M}} = \frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial \overrightarrow{v}} \tag{3.46}$$

Les Eqs. 3.44 et 3.45 donnent :

$$\overline{\overline{M}} = \begin{pmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 & u_1 \\ 0 & \rho & 0 & 0 & u_2 \\ 0 & 0 & \rho & 0 & u_3 \\ \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \frac{\beta\rho C_v}{\alpha} & e_c - \left(\frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - h_k \right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \delta_{lk} \end{pmatrix} \tag{3.47}$$

et

$$\overline{\overline{M}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & -\frac{u_1}{\rho} \\ 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & -\frac{u_2}{\rho} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & -\frac{u_3}{\rho} \\ -\frac{\alpha}{\beta\rho C_v} u_1 & -\frac{\alpha}{\beta\rho C_v} u_2 & -\frac{\alpha}{\beta\rho C_v} u_3 & \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} & \left\{ \frac{C_p v_k}{C_v \beta} - \frac{\alpha h_k}{\beta\rho C_v} + \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} e_c \right\} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \delta_{lk} \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

Cette matrice n'est pas identique au cas gaz parfait par la présence des coefficients d'expansion thermique.

3.3.3 Passage entre variables caractéristiques et variables conservatives

On en déduit les matrices de passage entre variables caractéristiques et variables conservatives via la relation :

$$\begin{aligned} \overline{\overline{L}}_U &= \overline{\overline{L}}_V \overline{\overline{M}}^{-1} \\ \overline{\overline{R}}_U &= \overline{\overline{M}} \overline{\overline{R}}_V \end{aligned}$$

Soit :

$$\overline{\overline{L}}_U = \begin{pmatrix} -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 - c}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3}{\rho c} & \frac{\alpha}{\beta\rho C_v}\frac{1}{\rho c} & -\frac{u_1}{\rho} + \frac{1}{\rho c}A \\ -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 + c}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3}{\rho c} & \frac{\alpha}{\beta\rho C_v}\frac{1}{\rho c} & \frac{u_1}{\rho} + \frac{1}{\rho c}A \\ 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & -\frac{u_2}{\rho} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & -\frac{u_3}{\rho} \\ \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v} & -\frac{Y_l}{c^2}A + \delta_{kl} \end{pmatrix} \tag{3.49}$$

$$\overline{\overline{R}}_U = \begin{pmatrix} \frac{\rho}{2c}(u_1 + c) & \frac{\rho}{2c}(u_1 - c) & 0 & 0 & u_1 \\ \frac{\rho}{2c}u_2 & \frac{\rho}{2c}u_2 & \rho & 0 & u_2 \\ \frac{\rho}{2c}u_3 & \frac{\rho}{2c}u_3 & 0 & \rho & u_3 \\ \frac{\rho}{2}u_1 + B & -\frac{\rho}{2}u_1 + B & \rho u_2 & \rho u_3 & e_c - \left(\frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - h_k\right) \\ \frac{\rho_l}{2c} & \frac{\rho_l}{2c} & 0 & 0 & \delta_{lk} \end{pmatrix} \tag{3.50}$$

avec

$$A = \left\{ \frac{C_p v_k}{C_v \beta} - \frac{\alpha h_k}{\beta\rho C_v} + \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} e_c \right\}$$
$$B = \left\{ \frac{\rho}{2c}H + \frac{\rho c}{2}\frac{\beta\rho C_v}{\alpha} - \frac{\rho C_p}{2c\alpha} \right\}$$

où $H = E + P/\rho$ représente l'enthalpie totale massique. Ces matrices ne sont pas identiques à celles du gaz parfait, et la décomposition du champ de variables conservatives en gaz réel nécessite donc l'utilisation de matrices appropriées.

Chapitre 4

Simulation aux grandes échelles en gaz réel

4.1 Simulation aux grandes échelles (SGE)

La simulation aux grandes échelles [119, 130] (*large eddy simulation* ou LES en anglais) est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche RANS (pour *Reynolds averaged Navier-Stokes* en anglais). Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont toutes deux pour principe d'appliquer certains opérateurs de filtrage ou de moyennage aux équations de conservation dans le but de produire un nouveau système d'équations pour décrire les écoulements turbulents. Ces opérateurs font apparaître des termes non résolus qui nécessitent des modèles de fermeture spécifiques. Les principales différences entre l'approche RANS et SGE proviennent du choix de l'opérateur employé :

Approche RANS : L'opérateur est une moyenne d'ensemble sur un grand nombre de réalisations du champ fluide [18, 119]. Les termes à modéliser doivent représenter le mouvement à toutes les échelles de la turbulence.

Approche SGE : L'opérateur est un filtre local, de taille fixée $\triangle$, indépendant du temps et appliqué à une réalisation unique du champ fluide. Ce *filtrage spatial* permet une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence. Les termes à modéliser sont représentatifs du mouvement associé aux échelles de la turbulence plus petites qu'une échelle de coupure. Cette échelle de coupure située entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées est liée à la taille du filtre.

La différence fondamentale entre ces deux approches réside dans la plage d'échelles non résolues, qui représente toutes les échelles dans le cas du RANS et seulement les petites échelles dans le cas de la SGE. Cette différence est illustrée Fig. 4.1 sur le spectre d'énergie d'un champ turbulent homogène isotrope (THI).

Grâce à la séparation d'échelles par le filtre, la SGE permet une représentation dynamique des tourbillons de plus grande taille dont les contributions sont critiques pour les écoulements

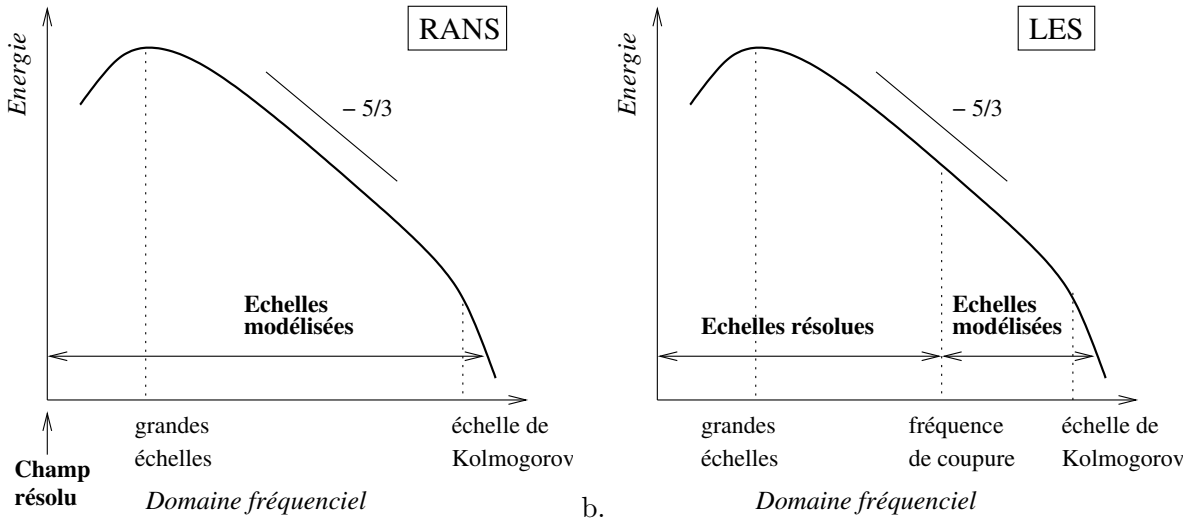


FIGURE 4.1 – Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et SGE (b.) appliquées à une turbulence homogène isotrope

au sein de géométries complexes. La physique des écoulements turbulents est mieux prédite avec la SGE puisque la turbulence de grande échelle, et les phénomènes instationnaires, sont intrinsèquement présents dans les équations de conservation [114].

Il reste cependant des approximations associées aux hypothèses introduites pour construire les modèles.

Dans ce chapitre, on présente tout d'abord les équations de conservation filtrées avec thermodynamique gaz réel (section 4.2) puis les modèles de sous-maille correspondants (section 4.3). La section 4.4 présente le modèle de combustion turbulente choisi dans cette étude : le modèle de flamme épaissie.

4.2 Équations SGE

4.2.1 Filtrage SGE des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage évoquée dans la section 4.1 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 $\triangle$:

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

Le filtre $G_\triangle$ est classiquement de type boîte ou gaussien [131]. La quantité filtrée $\overline{f}$ est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. 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 SGE en filtrant les équations de conservation (Eq. 3.1) :

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

où $\overline{\overrightarrow{s}}$ est le terme source filtré et $\overline{\left(\overline{\overline{F}}\right)}$ est le tenseur des flux filtrés. Explicitement, on obtient :

$$\frac{\partial \overline{\rho Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{J_{k,j}}}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_k} \qquad , k = 1, N \tag{4.4}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} \tag{4.5}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho E}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho(E+P)u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{q_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{u_i \tau_{ij}}}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_T} \tag{4.6}$$

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. En utilisant la moyenne de Favre, on obtient :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\tilde{Y}_k \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{J_{k,j}}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho Y_k u_j} - \overline{\rho}\tilde{Y}_k \tilde{u}_j\right) + \overline{\dot{\omega}_k} \qquad , k = 1, N \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho u_i u_j} - \overline{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\tilde{E} + \overline{P})\tilde{u}_j}{\partial x_j} = &-\frac{\partial \overline{q_j}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{\tau_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial(\overline{\rho h_s u_j} - \overline{\rho}\tilde{h_s}\tilde{u}_j)}{\partial x_j} \\ &+ \frac{\partial(\overline{u_i\tau_{ij}} - \tilde{u}_i\tilde{\tau_{ij}})}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i u_i} - \tilde{u}_i\tilde{u}_i\right)\tilde{u}_j}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_T}\end{aligned} \tag{4.9}$$

Les termes suivants nécessitent une fermeture :

$$\underbrace{\overline{u_j\tau_{ij}} - \tilde{u}_i\tilde{\tau_{ij}}}_{A} ; \underbrace{\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i u_i} - \tilde{u}_i\tilde{u}_i\right)\tilde{u}_j}_{B} ; \underbrace{\widetilde{\overline{\rho Y_k u_j}} - \overline{\rho}\tilde{Y}_k\tilde{u}_j}_{C} ; \underbrace{\overline{\rho}\widetilde{u_i u_j} - \overline{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}_{D} ; \underbrace{\overline{\rho}\widetilde{h_s u_j} - \overline{\rho}\tilde{h_s}\tilde{u}_j}_{E} \tag{4.10}$$

$$\underbrace{\overline{J_{k,j}}}_{F} = \overline{J_{k,j}(\phi)} ; \underbrace{\overline{P}}_{G} = \overline{P(\phi)} ; \underbrace{\overline{\tau_{ij}}}_{H} = \overline{\tau_{ij}(\phi)} ; \underbrace{\overline{q_j}}_{I} = \overline{q_j(\phi)} \quad \text{où} \quad \phi = (\rho, \rho u_i, \rho E) \tag{4.11}$$

La non-linéarité de l'équation d'état, de la thermodynamique et des coefficients de transport peuvent rendre les hypothèses de fermeture et de simplification généralement faites en gaz parfait non valides en gaz réel. Afin d'apporter une première réponse à cette problématique, Selle *et al.* [135] ont étudié *a priori* l'importance relative de chacun des termes de sous-maille, ainsi que le comportement des modèles de sous-maille, initialement utilisés en gaz parfait, dans un cas gaz réel. Leurs principales conclusions pour une couche de mélange H_2/O_2 sont que :

1. Le terme (A) peut être négligé. Son amplitude est très faible comparée aux autre termes de l'équation 4.9.
2. L'hypothèse considérant que les termes filtrés (F), (G), (H) et (I) peuvent être approchés par leur valeur obtenue à partir des variables conservatives filtrés (*i.e.* $\overline{P(\phi)} = P(\overline{\phi})$, par exemple) est généralement vraie, *sauf* dans l'Eq. 4.8 pour le terme (G) et dans l'Eq. 4.9 pour le terme (I), où les grandeurs $\overrightarrow{\nabla}(\overline{P(\phi)} - P(\overline{\phi}))$ et $\overrightarrow{\nabla} \cdot (\overline{\overrightarrow{q}(\phi)} - \overrightarrow{q}(\overline{\phi}))$ ne sont plus toujours négligeables.
3. Les modèles de sous-maille existants pour les termes (C), (D) et (E) offrent une précision de modélisation comparable en gaz parfait et en gaz réel.

En l'absence de modèles matures, les termes supplémentaires associés à la forte non-linéarité de l'équation d'état et du transport cités en 2. sont négligés dans cette étude. De plus, le terme (B) n'est pas modélisé.

Finalement, le système d'équations SGE utilisé dans ce travail est :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\tilde{Y_k}\tilde{u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{k,j}(\overline{\phi})}{\partial x_j} - \frac{\partial J^t_{j,k}(\overline{\phi})}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_k} \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u_i}\tilde{u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial P(\overline{\phi})}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}(\overline{\phi})}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau^t_{ij}(\overline{\phi})}{\partial x_j} \tag{4.13}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho}\tilde{E} + P(\overline{\phi}))\tilde{u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j(\overline{\phi})}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u_i}\tau_{ij}(\overline{\phi})}{\partial x_j} - \frac{\partial q^t_j(\overline{\phi})}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_T} \tag{4.14}$$

avec

$$q^t_j = \overline{\rho h_s u_j} - \overline{\rho}\tilde{h_s}\tilde{u_j}\,; \tau^t_{ij} = \overline{\rho u_i u_j} - \overline{\rho}\tilde{u_i}\tilde{u_j}\,; J^t_{j,k} = \overline{\rho h_s u_j} - \overline{\rho}\tilde{h_s}\tilde{u_j} \tag{4.15}$$

Le flux de chaleur et le flux d'espèces de sous-maille sont modélisés à partir de modèles de type gradient, introduisant la viscosité turbulente de sous-maille μ^t et les coefficients de diffusion d'espèce et de conductivité thermique turbulentes D^t_k et λ^t :

$$\tau^t_{ij} = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}\right) \quad \text{avec} \quad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}\right) - \frac{1}{3}\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij} \tag{4.16}$$

$$\overline{J_{i,k}}^t = -\overline{\rho}\left(D^t_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i}^{c,t}\right) \quad \text{avec} \quad \widetilde{V}^{c,t}_i = \sum_{k=1}^{N} D^t_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.17}$$

$$\overline{q_i}^t = -\lambda_t\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}}^t\,\widetilde{h}_{s,k} \tag{4.18}$$

Une telle approche suppose que les effets de sous-maille soient uniquement d'ordre dissipatif, hypothèse issue de la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov [68]. Les coefficients de conductivité thermique et de diffusion d'espèces turbulents sont liés à la viscosité turbulente

par :

$$D_k^t = \frac{\nu^t}{Sc_k^t} \tag{4.19}$$

$$\lambda^t = \frac{\rho\nu^t\overline{C_p}}{Pr^t} \tag{4.20}$$

où les nombres de Prandtl Pr^t et Schmidt Sc_k^t turbulents sont fixés à 0.6. La viscosité turbulente ν^t est calculé par le modèle de sous-maille détaillé en Sec. 4.3.
Les modèles pour $\overline{\dot{\omega}_k}$ et $\overline{\dot{\omega}_T}$ sont traités en Sec. 4.4.

4.3 Modèles de sous-maille

4.3.1 Modèle de Smagorinsky

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

$$\nu^t = (C_S\triangle)^2\sqrt{2\,\widetilde{S}_{ij}\,\widetilde{S}_{ij}} \tag{4.21}$$

$$\text{avec :} \quad C_S = (0.1 - 0.18) \quad \text{suivant la configuration} \tag{4.22}$$

Développé dans les années 1960, le modèle de Smagorinsky [140] a fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur 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 [130].

4.3.2 Modèle WALE

Le modèle WALE (pour *wall adapting linear eddy*) a été développé par Nicoud et Ducros [95] afin de pallier le défaut du modèle de Smagorinsky classique (cf. section 4.3.1) concernant les écoulements en proche paroi. Dans ce modèle, la viscosité turbulente est définie par :

$$\nu^t = (C_w\triangle)^2\frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2}+(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \tag{4.23}$$

où C_w est l'équivalent de la constante du modèle de Smagorinsky dont la valeur est fixée à : $C_w = 0.4929$. s_{ij}^d est la partie déviatrice du taux de déformations résolu :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}\,(\widetilde{g}_{ij}^2 + \widetilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3}\,\widetilde{g}_{kk}^2\,\delta_{ij} \tag{4.24}$$

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

$$\widetilde{g}_{ij} = \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \tag{4.25}$$

$$\widetilde{g}^2_{ij} = \widetilde{g}_{ik}\widetilde{g}_{kj} \tag{4.26}$$

C'est ce modèle qui est utilisé dans toute cette étude, car il est *a priori* plus indiqué pour le calcul de couche de mélange et de régions de transition [96].

4.4 Modèle de combustion turbulente

4.4.1 Flamme laminaire épaissie (TF)

Butler et O'Rourke [12] sont les premiers à avoir proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange pour la propager sur un maillage grossier. Cette méthode a été étendue par la suite au cas de la combustion turbulente [3, 2, 28, 78, 77, 133, 132, 114]. Une analyse dimensionnelle classique [159] 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 3.2).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \tag{4.27}$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \tag{4.28}$$

Dans le cas d'une flamme laminaire épaissie, les diffusivités thermique D_{th} et moléculaire D_k sont multipliées par F alors que le taux de dégagement de chaleur et le taux de réaction $\dot{\omega}_F$ sont divisés par F, F étant le facteur d'épaississement :

$$\overset{\text{épaississement}}{\longrightarrow}$$

$$D_{th} \longrightarrow F D_{th} \tag{4.29}$$

$$D_k \longrightarrow F D_k \tag{4.30}$$

$$\dot{\omega}_T \longrightarrow \dot{\omega}_T / F \tag{4.31}$$

$$\dot{\omega}_k \longrightarrow \dot{\omega}_k / F \tag{4.32}$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont directement calculés par une loi d'Arrhénius (cf. Eq. 3.9). Si l'on prend l'exemple de l'équation de conservation des espèces, on obtient après épaississement :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\rho(u_i + V_i^c)Y_k\Big) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho F D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}\right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \tag{4.33}$$

$$\text{avec} \quad V_i^c = \sum_{k=1}^{n} F D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{4.34}$$

La vitesse du front de flamme est inchangée (cf. Eq. 4.27) mais l'épaisseur du front de flamme est multipliée par F (cf. Eq. 4.28). F est choisi de manière à pouvoir propager le front de flamme sur le maillage considéré.

Les principaux avantages du modèle de flamme épaissie (TF) sont les suivants :
- en conservant une loi d'Arrhénius pour décrire les termes sources chimiques, on peut représenter facilement des phénomènes physiques tels que l'allumage, l'extinction, la stabilisation de flamme, les interactions flamme/paroi, etc. ;
- le modèle peut s'étendre à une chimie multi-étapes [151], voire plus complexe.

Toutefois, dans le cas d'écoulements turbulents, l'épaississement a pour effet de modifier le rapport entre échelles de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme, avec pour conséquence un plissement moindre. Le modèle doit donc être complété par une correction décrite dans la section 4.4.2.

4.4.2 Modèle de flamme épaissie turbulente (TFLES)

En épaississant la zone réactive, on rend la flamme moins sensible aux petites échelles turbulentes voire insensible aux échelles inférieures à $F\delta_L^0$. Cela se traduit par une diminution du plissement du front de flamme : la surface de flamme est réduite et le taux de consommation global des réactifs est sous-estimé. Pour corriger, cet effet, Colin *et al.* [28] proposent d'introduire une fonction d'efficacité E construite à partir de résultats de DNS (cf. Fig. 4.2) et représentant le rapport entre le plissement entre la flamme non-épaissie et la flamme épaissie :

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} \tag{4.35}$$

où δ_L^0 est l'épaisseur de la flamme non épaissie et $\delta_L^1 = F\delta_L^0$ est l'épaisseur de la flamme épaissie.

a. b.

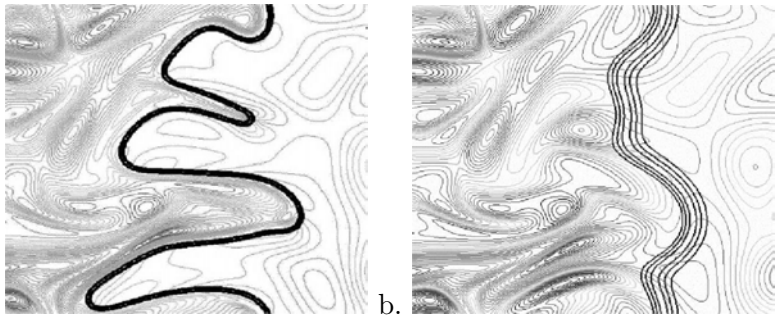


FIGURE 4.2 – DNS d'interaction flamme/turbulence [3, 114]. Flamme non épaissie (a.), flamme épaissie d'un facteur $F = 5$ (b.)

Le terme source $\overline{\dot{\omega}}_k = \frac{E\dot{\omega}_k}{F}$ permet de propager la flamme turbulente à la vitesse ES_L^0.

La méthodologie se décompose en trois étapes principales :

1. Le facteur de plissement de la surface de flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$, en supposant l'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{S_L^0} \langle a_T \rangle_s \tag{4.36}$$

où $\langle a_T \rangle_s$ est le taux d'étirement de sous-maille, Δ_e correspond à la plus grande échelle affectée par l'épaississement, *i.e.* δ_L^1, et α est une constante du modèle.

2. $\langle a_T \rangle_s$ est défini par l'Eq. 4.37 à partir de Δ_e et de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} définie Eq. 4.40. La fonction Γ_{Δ_e}, définie par l'Eq. 4.38, correspond à la prise en compte du taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, c'est-à-dire toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov et Δ_e [89].

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma_{\Delta_e} \; u'_{\Delta_e} / \Delta_e \tag{4.37}$$

$$\Gamma_{\Delta_e}\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) = 0.75 \exp\left[-\frac{1.2}{\left(u'_{\Delta_e}/S_L^0\right)^{0.3}}\right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{4.38}$$

On obtient finalement pour E :

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e}\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e}\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \tag{4.39}$$

On peut montrer que E varie entre 1 (faible niveau de turbulence) et $E_{max} \simeq F^{2/3}$ (plissement important à l'échelle de la sous-maille). Dans le cas de flammes turbulentes prémélangées, la fonction d'efficacité permet de retrouver la vitesse de propagation turbulente : $E \; S_L^0 = S_T$. Colin *et al.* [28] définissent une taille de coupure δ_L^c en-dessous de laquelle les tourbillons n'affectent plus le plissement de la flamme. La fonction d'efficacité est donc sollicitée uniquement si la taille caractéristique d'un tourbillon r est telle que :
– *dans le cas d'une flamme non épaissie :* $\delta_L^0 > r > \delta_L^c$;
– *dans le cas d'une flamme épaissie :* $\delta_L^1 = F\delta_L^0 > r > \delta_L^c$.

3. Les fluctuations de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} sont estimées en utilisant un opérateur basé sur le rotationnel du champ de vitesse. Le rôle de cet opérateur est d'évaluer la fluctuation de vitesse associée à la vorticité, en ignorant la contribution en dilatation qui n'est pas considérée comme de la *turbulence* :

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta_x^3 |\nabla^2(\nabla \times \overline{u})|, \qquad c_2 \approx 2 \tag{4.40}$$

où Δ_x est la taille de maille.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver le comportement asymptotique du facteur de plissement Ξ en fonction des fluctuations de vitesse u' pour les flammes minces lorsque Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t. Dans ce cas, le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 4.41 :

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u'/s_l^0 \tag{4.41}$$

On obtient alors pour α :

$$\alpha = \beta \frac{2\ln(2)}{3c_{ms}\left(Re_t^{1/2} - 1\right)} \tag{4.42}$$

$$\text{avec :} \quad Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad \text{et} \quad c_{ms} = 0.28 \tag{4.43}$$

Il existe plusieurs méthodes pour calculer les constantes α et β, notamment celles proposées par Colin *et al.* [28] ou Charlette *et al.* [16].

Implantation

En pratique, les équations de conservation des espèces et de l'énergie sont modifiées en écrivant les flux diffusifs (Eq. 4.44 à 4.46) et le terme source (Eq. 4.47) comme suit :

– tenseur de diffusion des espèces :

$$\overline{J_{i,k}} = -EF\frac{\overline{\mu}}{Sc_k}\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \overline{\rho}_k \widetilde{V}_i^c \tag{4.44}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{V}_i^c = EF\sum_{k=1}^{N}\frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho}Sc_k}\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.45}$$

– flux de chaleur :

$$\overline{q_i} = -EF\frac{\overline{\mu}\overline{C_p}}{P_r}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}}\,\widetilde{h}_{s,k} \tag{4.46}$$

– terme source chimique :

$$\overline{\mathbf{s}}_c = \left(0, 0, 0, \frac{E\overline{\dot{\omega}}_T}{F}, \frac{E\overline{\dot{\omega}}_k}{F}\right)^T \tag{4.47}$$

4.4.3 Modèle de flamme épaissie dynamique

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la section 4.4.2 est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées. Pour les flammes partiellement prémélangées et non-prémélangées, en revanche, ce modèle doit être modifié pour deux raisons principales :

1. Dans les zones non réactives où seul le mélange se produit, les diffusions thermiques et moléculaires ne doivent pas être modifiées. Dans ces régions, le facteur d'épaississement doit donc valoir $F = 1$.
2. Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre les termes diffusifs et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille doivent être annulés.

En d'autres termes, le modèle TFLES est adapté dans la zone de flamme mais doit être corrigé hors de cette région. Le modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES pour *dynamically thickened flame* en anglais) a été développé pour introduire ces corrections [78]. Dans ce modèle schématisé Fig. 4.3, l'épaississement F n'est plus une constante mais varie entre F_{max} dans la zone réactive et $F = 1$ ailleurs.

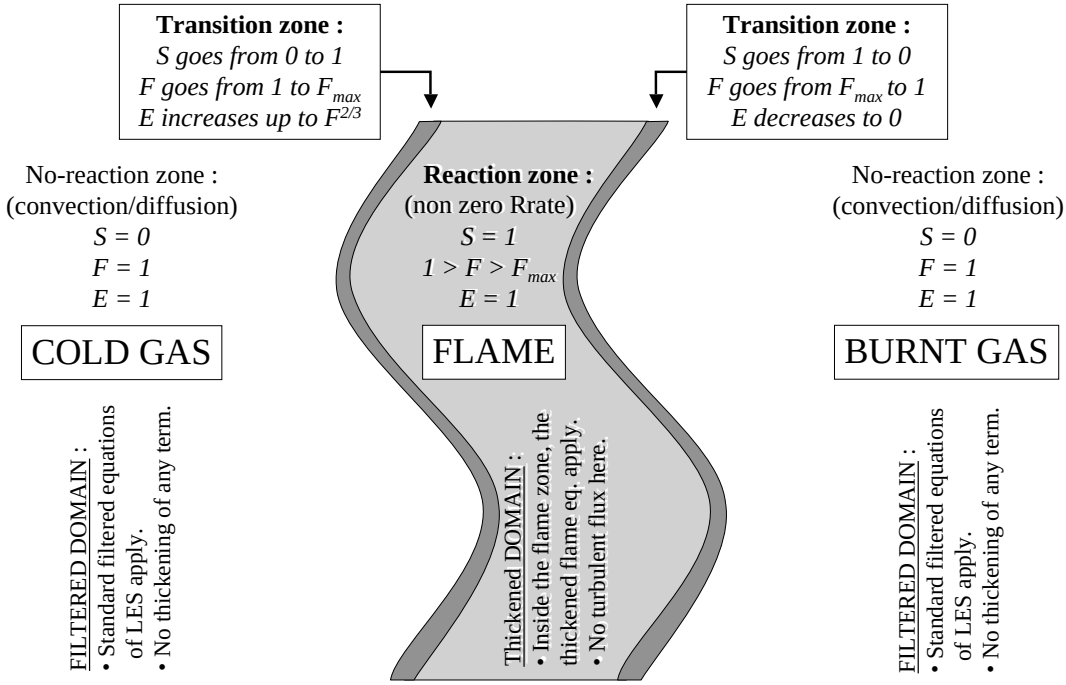


FIGURE 4.3 – Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTFLES

L'épaississement dynamique F est défini par l'Eq. 4.48. Le senseur S défini par l'Eq. 4.49 dépend localement des fractions massiques et de la température. S évalue si la zone est réactive ($S = 1$) ou non ($S = 0$) à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant les paramètres du schéma cinétique.

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\, S \tag{4.48}$$

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \qquad \text{avec :} \quad \beta' = 500 \tag{4.49}$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}\right) \tag{4.50}$$

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement autour de la zone de réaction et vaut typiquement : $\Gamma_T = 0.68$. Ω_0 est le maximum de Ω, préalablement calculé pour une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique 1D non épaissie.

Enfin, dans les calculs SGE 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 :

$$F_{max} = n\frac{\delta_L^0}{\Delta x} \tag{4.51}$$

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

Chapitre 5

Le code AVBP pour la SGE en gaz réel

AVBP résout les équation du Chap. 4, sur des maillages non structurés, structurés ou hybrides. On se concentre ici sur les aspect numériques associés au passage en gaz réel.

Les éléments numériques à considérer sont les suivants :

1. Le schéma numérique pour la résolution de la partie convective des équations de Navier-Stokes. Les caractéristiques des schémas généralement utilisés sont brièvement rappelées en section 5.1. L'ajout d'une nouvelle thermodynamique dans AVBP nécessite une adaptation des matrices jacobiennes des flux non visqueux.
2. Les conditions limites pour imposer les valeurs souhaitées sur les frontières du domaine de calcul. Les conditions limites généralement utilisées dans AVBP sont construites autour d'une méthode des caractéristiques [113]. Leur expression fait explicitement intervenir des relations entre variable primitives et variables conservatives, si bien qu'il est nécessaire, afin de garantir la consistance du code, de les mettre à jour avec la nouvelle loi d'état (voir Chap. 3).
3. La méthode de stabilisation numérique. La SGE requiert des méthode numériques très peu dissipatives. AVBP utilise des schémas centrés qui nécessitent l'ajout d'un terme de stabilisation numérique dans les zones à fort gradient, généralement sous la forme de viscosité artificielle. Ce point a fait l'objet d'une attention particulière et est explicité en section 5.4.

Les autres éléments numériques présents dans AVBP n'ont pas été modifiés :

1. Le schéma de diffusion pour le calcul des termes visqueux des équations de Navier Stokes. La gestion numérique des termes dissipatifs ne sera pas traitée dans ce document, car elle n'a pas nécessité de modification. Le lecteur interessé trouvera les détails des méthodes existantes dans AVBP dans la thèse de N. Lamarque [73].
2. Le calcul des termes sources (dans notre cas ces termes source sont uniquement chimiques). La gestion numérique des termes source est indépendante de la thermodynamique et donc

n'a pas été modifiée. Cet élément est également détaillé dans la thèse de N. Lamarque [73].

3. Le parallélisme efficace afin de pouvoir réaliser les simulations sur un nombre important de processeurs. Ce dernier point ne sera pas discuté dans cette thèse. Une description complète du parallélisme se trouve dans la thèse de M. Garcia [41].

5.1 Schémas numériques pour la convection

AVBP utilise un solveur aux volumes finis pour discrétiser les équations de conservation sur des maillages non structurés. Deux méthodes principales sont disponibles pour l'approche volumes finis :

1. la formulation Cell-Centered : les valeurs des solutions discrètes sont stockées aux centres des volumes de contrôle (les cellules du maillage) et les valeurs des éléments voisins sont moyennées au travers des limites de la cellule pour calculer les flux [61, 60, 52, 129].
2. la formulation Cell-Vertex : les valeurs des solutions discrètes sont stockées aux nœuds de la cellule considérée et les valeurs moyennes des flux sont obtenues en moyennant le long des arêtes limitant la cellule [94, 92]. L'approche Cell-Vertex est applicable à des types de cellules quelconques et apparaît donc très utile pour des maillages hybrides.

Dans AVBP, la discrétisation Cell-Vertex a été choisie car elle permet de diminuer la quantité d'information stockée pour les maillages tétraédriques (adaptés aux géométries complexes des chambres de combustion) et de limiter la communication entre partitions pour les calculs parallèles.

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 :

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

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

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

Les flux non visqueux sont intégrés sur chaque volume de contrôle Ω_j (Fig. 5.1) pour en déduire le résidu $\overrightarrow{\mathcal{R}}_{\Omega_j}$ défini par [129] :

$$\overrightarrow{\mathcal{R}}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \overline{\overline{F}}^I \cdot \overrightarrow{n}\, d\mathcal{S} \tag{5.3}$$

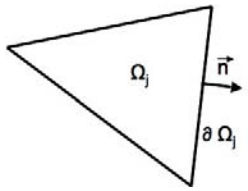


FIGURE 5.1 – Représentation du volume de contrôle Ω_j dans le cas d'un triangle.

où $\partial\Omega_j$ est l'élément de surface de normale $\overrightarrow{n}$. Le résidu $\overrightarrow{\mathcal{R}}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.3 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 sur lesquels l'intégrale est calculée. 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 $\overrightarrow{\mathcal{R}}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.3 au travers d'une cellule quelconque, l'Eq. 5.3 devient :

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

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

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

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

$$\frac{d\overrightarrow{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{(j|k) \in \Omega_j} \overline{\overline{\mathcal{D}}}^k_{\Omega_j} V_{\Omega_j} \overrightarrow{\mathcal{R}}_{\Omega_j}, \tag{5.6}$$

où $\overline{\overline{\mathcal{D}}}^k_{\Omega_j}$ est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre de 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 $\sum_{k \in \Omega_j} \overline{\overline{\mathcal{D}}}^k_{\Omega_j} = \overline{\overline{Id}}$ [146].

Schéma centré

La matrice de distribution est dans ce cas définie par :

$$\overline{\overline{\mathcal{D}}}^{k}_{\Omega_j} = \frac{1}{n_n}\overline{\overline{Id}} \tag{5.7}$$

où n_n est le nombre de nœuds de Ω_j. Les résidus sont alors distribués de manière équitable à chaque sommet de l'élément Ω_j. Cette distribution correspond au schéma classique de différences finies centrées de second ordre sur un maillage régulier mono-dimensionnel [155]. Ce schéma étant instable avec une méthode d'avancement temporel explicite d'Euler (ordre 1), il est utilisé avec une intégration temporelle de type Runge-Kutta 3.
Ce schéma n'est pas dissipatif, mais il est très dispersif. Il nécessite donc généralement l'ajout de viscosité artificielle pour assurer sa stabilité [61].

Schéma Lax Wendroff [76, 33]

Comparativement au schéma précédent, ce schéma est une discrétisation totale (temporelle et spatiale) des équations d'Euler. Ce schéma est basé sur un développement en série de Taylor en temps :

$$\frac{\overrightarrow{w}^{n+1} - \overrightarrow{w}^{n}}{\Delta t} = \frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial t}^{n} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \overrightarrow{w}}{\partial t^2}^{n}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \tag{5.8}$$

L'idée est d'utiliser les équations d'Euler pour remplacer la dérivée temporelle par une divergence des flux :

$$\frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial t}^{n} = -\left(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I}\right)^{n} \tag{5.9}$$

$$\frac{\partial^2 \overrightarrow{w}}{\partial t^2}^{n} = -\frac{\partial\left(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I}\right)^{n}}{\partial t} \tag{5.10}$$

$$= -\overrightarrow{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial\overline{\overline{F}}^{I}}{\partial t}\right)^{n} \tag{5.11}$$

$$= \overrightarrow{\nabla}\cdot\left(\overline{\overline{\mathcal{A}}}\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I}\right)^{n} \tag{5.12}$$

Dans l'Eq. 5.12, $\overline{\overline{\mathcal{A}}}$ est le vecteur des matrices jacobiennes des flux non-visqueux (il s'agit donc d'un tenseur d'ordre 3). Ce tenseur est détaillé en Sec. 5.1.2. A partir des Eqs. 5.9 et 5.12, l'Eq. 5.8 devient :

$$\frac{\overrightarrow{w}^{n+1} - \overrightarrow{w}^{n}}{\Delta t} = -\left(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I}\right)^{n} + \frac{1}{2}\overrightarrow{\nabla}\cdot\left(\overline{\overline{\mathcal{A}}}\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I}\right)^{n}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \tag{5.13}$$

Finalement, la matrice de distribution s'écrit :

$$\overline{\overline{D}}^{k}_{\Omega_j} = \frac{1}{n_n}\overline{\overline{Id}} - \frac{n_n^2}{2N_d}\frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}}\overline{\overline{\mathcal{A}}}_{\Omega_j}\cdot\overrightarrow{dS}_k \tag{5.14}$$

Ce schéma de deuxième ordre en espace et en temps offre l'avantage d'être peu coûteux et relativement précis. Il est en outre plus robuste que le schéma différences centrées, car plus dissipatif.

Schémas TTGC/TTG4A [29]

Les schémas Two-Step Taylor Galerkin (TTG) [29] ont une expression proche du schéma Lax Wendroff, si ce n'est que le développement de Taylor est cette fois réalisé en deux étapes. De la même manière que pour le schéma Lax Wendroff, les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales pour finalement obtenir l'expression suivante :

$$\overrightarrow{\tilde{w}}^n = \overrightarrow{w}^n - \alpha\Delta t\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^n + \beta\Delta t^2\overrightarrow{\nabla}\cdot\left(\overline{\overline{\mathcal{A}}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^n)\right) \tag{5.15}$$

$$\begin{aligned}\overrightarrow{w}^{n+1} = {} & \overrightarrow{w}^n - \Delta t\overrightarrow{\nabla}\cdot\left(\theta_1\overline{\overline{\tilde{F}}}^n + \theta_2\overline{\overline{F}}^n\right) + \\ & \gamma\Delta t^2\left(\epsilon_1\nabla\cdot\left(\overline{\overline{\mathcal{A}}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^n)\right) + \epsilon_2\nabla\cdot\left(\overline{\overline{\mathcal{A}}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{\tilde{F}}}^n)\right)\right)\end{aligned} \tag{5.16}$$

où $\tilde{}$ indique l'étape intermédiaire. Les coefficients α, β, θ_1, θ_2, ϵ_1 et ϵ_2 valent 1/3, 1/12, 1, 0, 0 et 1/2 pour TTG4A et $1/2-\gamma$, 1/6, 0, 1, γ et 0 pour TTGC. γ est généralement fixé à 0.01. Ce dernier terme permet d'ajouter un peu de dissipation à TTGC, sans quoi il est généralement instable (car totalement non-dissipatif).

Sur des éléments linéaires, la matrice de distribution est identique à celle de Lax Wendroff (Eq. 5.14). Ces schémas sont d'ordre 3 en espace et en temps. Ils sont très performants en terme de dispersion (bien plus faible que pour les schémas du second ordre), et assurent une dissipation numérique globalement très faible. Le schéma TTGA4 à comme particularité de dissiper les hautes fréquences, ce que ne fait pas TTGC. Cette dissipation des hautes fréquences limite l'apparition de "wiggles" (oscillations numériques hautes fréquences), ce qui le rend généralement plus stable dans des configurations complexes.

Le coût calcul de ces schéma est néanmoins 2 fois plus grand que pour celui de Lax Wendroff. Cependant ils sont nécessaires pour obtenir une simulation de qualité.

5.1.2 Matrices Jacobiennes des flux convectifs

Les schémas Lax Wendroff, TTGC et TTGA4 font intervenir des matrices Jacobiennes pour les flux convectifs. Le calcul de ces matrices fait intervenir la thermodynamique est doit être redéveloppée en gaz réel.

Le vecteur des matrices jacobiennes des flux non-visqueux noté : $\overline{\overline{\mathcal{A}}} = (\overline{A}, \overline{B}, \overline{C})$, où $\overline{A}$, $\overline{B}$ et $\overline{C}$ sont les matrices jacobiennes des flux non visqueux dans chaque direction et sont définies par

[15] :

$$\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{w}) = \frac{\partial \overrightarrow{f}}{\partial \overrightarrow{w}} \qquad \overline{\overline{B}}(\overrightarrow{w}) = \frac{\partial \overrightarrow{g}}{\partial \overrightarrow{w}} \qquad \overline{\overline{C}}(\overrightarrow{w}) = \frac{\partial \overrightarrow{h}}{\partial \overrightarrow{w}} \tag{5.17}$$

où $\overline{\overline{F}}^I = (\overrightarrow{f}, \overrightarrow{g}, \overrightarrow{h})$ est la matrice (5x3) des flux non visqueux :

$$\overrightarrow{f} = \begin{pmatrix} \rho u_1^2 + P \\ \rho u_1 u_2 \\ \rho u_1 u_3 \\ \rho u_1 \ H \\ \rho_k u_1 \end{pmatrix} \overrightarrow{g} = \begin{pmatrix} \rho u_1 u_2 \\ \rho u_2^2 + P \\ \rho u_2 u_3 \\ \rho u_2 \ H \\ \rho_k u_2 \end{pmatrix} \overrightarrow{h} = \begin{pmatrix} \rho u_1 u_3 \\ \rho u_2 u_3 \\ \rho u_3^2 + P \\ \rho u_3 \ H \\ \rho_k u_3 \end{pmatrix}$$

On a donc :

$$\overline{\overline{A}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho u_1^2 + P}{\partial \rho u_1} & \frac{\partial \rho u_1^2 + P}{\partial \rho u_2} & \frac{\partial \rho u_1^2 + P}{\partial \rho u_3} & \frac{\partial \rho u_1^2 + P}{\partial \rho E} & \frac{\partial \rho u_1^2 + P}{\partial \rho_k} \\ \frac{\partial \rho u_1 u_2}{\partial \rho u_1} & \frac{\partial \rho u_1 u_2}{\partial \rho u_2} & \frac{\partial \rho u_1 u_2}{\partial \rho u_3} & \frac{\partial \rho u_1 u_2}{\partial \rho E} & \frac{\partial \rho u_1 u_2}{\partial \rho_k} \\ \frac{\partial \rho u_1 u_3}{\partial \rho u_1} & \frac{\partial \rho u_1 u_3}{\partial \rho u_2} & \frac{\partial \rho u_1 u_3}{\partial \rho u_3} & \frac{\partial \rho u_1 u_3}{\partial \rho E} & \frac{\partial \rho u_1 u_3}{\partial \rho_k} \\ \frac{\partial \rho u_1 H}{\partial \rho u_1} & \frac{\partial \rho u_1 H}{\partial \rho u_2} & \frac{\partial \rho u_1 H}{\partial \rho u_3} & \frac{\partial \rho u_1 H}{\partial \rho E} & \frac{\partial \rho u_1 H}{\partial \rho_k} \\ \frac{\partial \rho_k u_1}{\partial \rho u_1} & \frac{\partial \rho_k u_1}{\partial \rho u_2} & \frac{\partial \rho_k u_1}{\partial \rho u_3} & \frac{\partial \rho_k u_1}{\partial \rho E} & \frac{\partial \rho_k u_1}{\partial \rho_k} \end{pmatrix}$$

Les Eqs. 5.13, 5.15 et 5.16 font intervenir par exemple le terme $\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{\nabla} \cdot \overline{\overline{F}}^I)$. En partant à nouveau des équations d'Euler (3D) écrites sous forme conservative :

$$\frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial t} = -(\nabla \cdot \overline{\overline{F}}^I)$$

Un développement en série de Taylor au premier ordre sur $\overrightarrow{w}(t)$ donne :

$$\begin{aligned} \Delta \overrightarrow{w} &= (\frac{\partial \overrightarrow{w}}{\partial t})\Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= -(\nabla \cdot \overline{\overline{F}}^I)\Delta t + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

où $\Delta \overrightarrow{w} = \overrightarrow{w}^{n+1} - \overrightarrow{w}^n$. Ainsi, on peut écrire :

$$\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{\nabla} \cdot \overline{\overline{F}}^I) \cdot \Delta t = -\overline{\overline{A}} \Delta \overrightarrow{w} + O(\overline{\overline{A}} \cdot \Delta t^2)$$

or $\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{w}) = \frac{\partial \overrightarrow{f}}{\partial \overrightarrow{w}}$ et donc :

$$\begin{aligned} \overline{\overline{A}} \Delta \overrightarrow{w} &= \frac{\partial \overrightarrow{f}}{\partial \overrightarrow{w}} \Delta \overrightarrow{w} \\ &= \Delta(\overrightarrow{f}) + O(\| \Delta \overrightarrow{w} \|^2) \end{aligned}$$

Finalement, on trouve :

$$\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}}^{I})\cdot\Delta t \;=\; -\begin{pmatrix}\Delta(\rho u_1^2+P)\\ \Delta(\rho u_1u_2)\\ \Delta(\rho u_1u_3)\\ \Delta(\rho u_1H)\\ \Delta(\rho_k u_1)\end{pmatrix}+O(\Delta t^2\cdot\parallel\Delta w\parallel^2) \tag{5.18}$$

qui peut être réécrit de la façon suivante :

$$\overline{\overline{A}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}})\cdot\Delta t \;\approx\; -\begin{pmatrix}u_1\Delta w_1+u_1(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)+\Delta P\\ u_1\Delta w_2+u_2(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)\\ u_1\Delta w_3+u_3(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)\\ u_1\Delta w_4+\rho E(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)+u_1\Delta P+P(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)\\ Y_k\,(\Delta w_1-u_1\Delta\rho)+u_1\Delta w_{4+k}\end{pmatrix}$$

avec $\Delta\rho=\sum_{k=1}^{N}\Delta w_{4+k}$. De la même manière pour $\overline{\overline{B}}$ et $\overline{\overline{C}}$, on a :

$$\overline{\overline{B}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}})\cdot\Delta t \;\approx\; -\begin{pmatrix}u_2\Delta w_1+u_1(\Delta w_2-u_2\Delta\rho)\\ u_2\Delta w_2+u_2(\Delta w_2-u_2\Delta\rho)+\Delta P\\ u_2\Delta w_3+u_3(\Delta w_2-u_2\Delta\rho)\\ u_2\Delta w_4+\rho E(\Delta w_3-u_2\Delta\rho)+u_2\Delta P+P(\Delta w_2-u_2\Delta\rho)\\ Y_k\,(\Delta w_2-u_2\Delta\rho)+u_2\Delta w_{4+k}\end{pmatrix}$$

$$\overline{\overline{C}}(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{F}})\cdot\Delta t \;\approx\; -\begin{pmatrix}u_3\Delta w_1+u_1(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)\\ u_3\Delta w_2+u_2(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)\\ u_3\Delta w_3+u_3(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)+\Delta P\\ u_3\Delta w_4+\rho E(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)+u_3\Delta P+P(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)\\ Y_k\,(\Delta w_3-u_3\Delta\rho)+u_3\Delta w_{4+k}\end{pmatrix}$$

Ces calculs font tous apparaître le terme ΔP, calculé à partir de l'équation d'état. En gaz parfait :

$$\Delta P=(\gamma-1)\,\Delta(\rho e_s)+\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{R}{W_k}T-(\gamma-1)\,e_{s,k}\right)\Delta(\rho Y_k) \tag{5.19}$$

Les modifications à apporter ne concernent finalement que ΔP qui s'écrit en gaz réel :

$$\Delta P=\frac{\alpha}{\beta\rho c_v}\Delta(\rho e_s)+\sum_{k=1}^{N}\left\{\frac{C_p}{C_v}\frac{v_k}{\beta}-\frac{\alpha h_k}{\beta\rho C_v}\right\}\Delta(\rho Y_k) \tag{5.20}$$

Soit en faisant intervenir $\overrightarrow{w}$:

$$\boxed{\Delta P=\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}(\Delta w_4-u_i\Delta w_i)+\sum_{k=1}^{N}\left\{\frac{C_pv_k}{C_v\beta}-\frac{\alpha h_k}{\beta C_v}+\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}e_c\right\}\Delta w_{4+k}} \tag{5.21}$$

Remarque : Les matrices jacobiennes des flux non-visqueux sont calculées à partir des valeurs à la cellule (*cf* Eq. 5.14). Les coefficients de l'Eq. 5.20, $C_1 = \frac{\alpha}{\beta\rho c_v}$ et $C_{2,k} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{C_p}{C_v}\frac{v_i}{\beta} - \frac{\alpha h_i}{\beta\rho C_v} \right\}$ doivent donc être aussi calculés au centre de l'élément. Jusqu'à présent (*i.e.* en gaz parfait), les coefficients étaient calculés directement à partir des variables aux centres. En gaz réel, les coefficients pouvant être fortement non-linéaires, il est primordial pour la précision du calcul de les calculer préalablement aux noeuds puis de les ramener aux centres des cellules (cela diminue l'apparition de wiggles sur la pression).

5.2 Tests de validation : convection en domaine périodique

Pour valider les modifications apportées aux matrices jacobiennes des flux convectifs, des tests de convection en domaine périodique ont été réalisés. Dans un premier temps, on se place dans un cas haute température (*i.e.* où les écarts par rapport au gaz parfait sont très faibles), pour vérifier que le comportement d'AVBP gaz réel se rapproche d'AVBP gaz parfait. Il convient notamment de s'assurer que le champ de pression obtenu après convection est proche de celui obtenu en gaz parfait. Ensuite des tests en régime transcritique sont réalisés.
Le nombre de tests à réaliser est important : il convient en effet de tester les différents schémas existants (Lax Wendroff, TTGC, TTG4A), en 2D et 3D, sur des maillages linéaires (triangles/tétrahèdres) et non-linéaires (carrés/hexahèdres), en mono-espèce et multi-espèces et en conditions gaz parfait et gaz réel. Deux exemples sont montrés ici, réalisés avec TTG4A et une seule espèce. Les caractéristiques générales des deux tests sont données dans le Tab. 5.1.

Equations résolues :	**Euler**
Nombre d'espèces :	**1 (N_2)**
Nombre de réactions :	**0**
Nombre de dimensions spatiales :	**2**
Type d'élements :	**quads**
Nombre de noeuds :	**101 x 2**
Nombre d'élements :	**100**
Longueur × largeur :	$1.0m \times 0.01m$
Shéma numérique :	TTG4A
Δt :	10^{-6} s (CFL≈0.15)
Viscosité artificielle :	non

TABLE 5.1 – Paramètres numériques

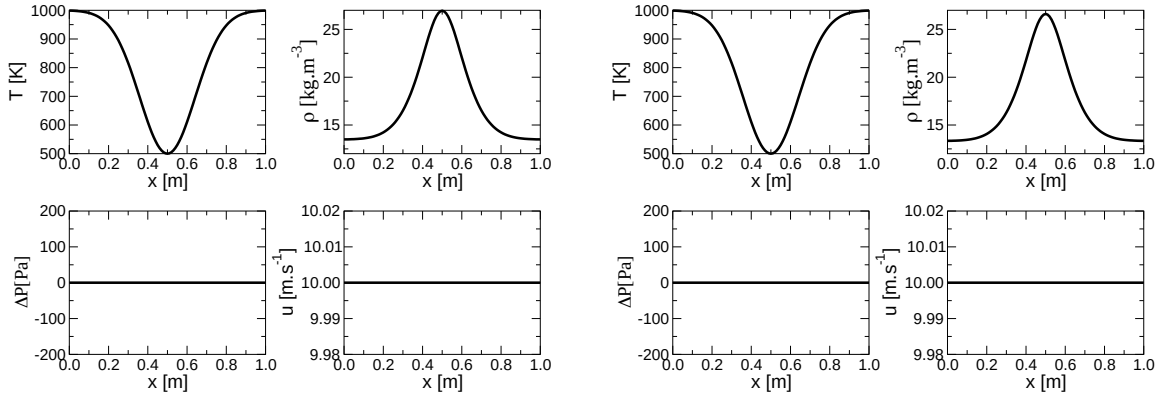
Dans les deux tests présentés, le champ est initialisé avec une gaussienne en température à pression constante (40 bar) et vitesse axiale constante (10 m/s). Un cas proche du gaz parfait ($T >> T_C$) et une cas transcritique ($T < T_C$) sont présentés.

5.2.1 Convection à $T >> T_C$

Ce test est effectué à température élevée par rapport à la température critique de l'azote ($T_R \approx 4$), si bien que les effets gaz réel sont négligeables. La gaussienne en température sur la solution initiale est donnée en Eq. 5.22 :

$$T = \exp(-(x-0.5)^2) \times (500-1000) + 1000 \tag{5.22}$$

Un calcul de référence est effectué avec AVBP gaz parfait puis un autre avec AVBP gaz réel est réalisé. Les solution initiales sont présentées en Fig. 5.2 (a) pour le gaz parfait et en Fig. 5.2 (b) pour le gaz réel.



a) b)

FIGURE 5.2 – Profils de température T, de densité ρ, de pression P et de vitesse u de la solution initiale en gaz parfait (a) et en gaz réel (b) pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K).

Les solutions obtenues après 1 temps convectif (1 tour de domaine, soit 100 000 itérations) sont données en Fig. 5.3. Le résultat en gaz réel est satisfaisant puisque l'erreur sur la pression et la vitesse sont du même niveau qu'en gaz parfait.

5.2.2 Convection à $T < T_C$

Ce test est effectué à une température inférieure à la température critique de l'azote, où les effets gaz réels sont importants. La gaussienne en température sur la solution initiale est donnée en Eq. 5.23 :

$$T = \exp(-(x-0.5)^2) \times (100-120) + 120 \tag{5.23}$$

Le calcul ne peut pas être réalisé en gaz parfait. La solution initiale est présentée en Fig. 5.4. Après 1 temps convectif, le comportement est bon et les erreurs restent très faibles (Fig. 5.5

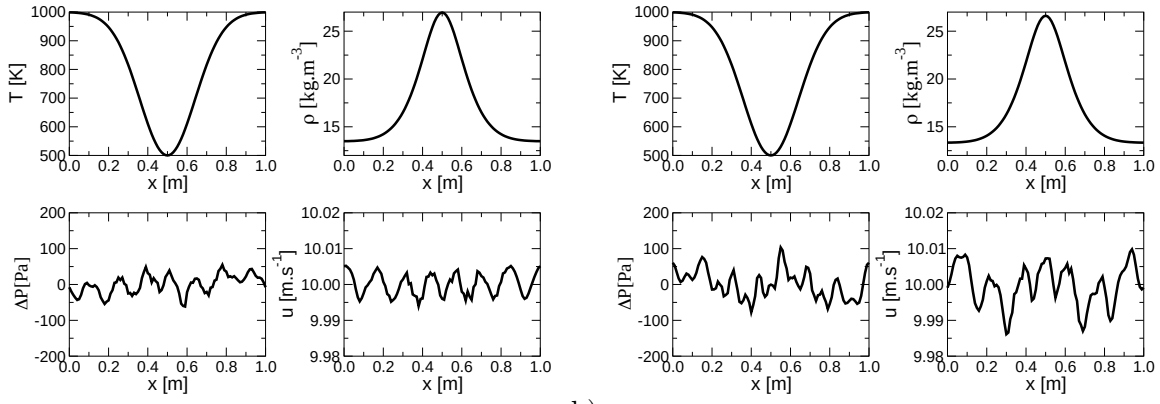


FIGURE 5.3 – Profils de température T, de densité ρ, de pression P et de vitesse u après 1 temps convectif en gaz parfait (a) et en gaz réel (b) pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K).

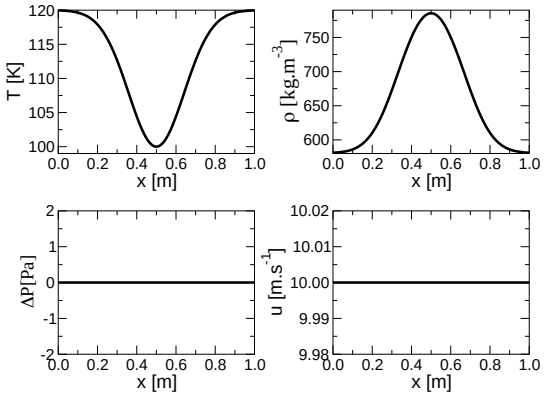


FIGURE 5.4 – Profils de température T, de densité ρ, de pression P et de vitesse u de la solution initiale en gaz réel pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K).

(a)). A titre illustratif, le même calcul est réalisé avec les matrices jacobiennes de gaz parfait. Le résultat en montrée en Fig. 5.5 (b). De fortes erreurs sont visibles sur la pression et la vitesse. Le calcul est instable et s'arrête après 7500 itérations.

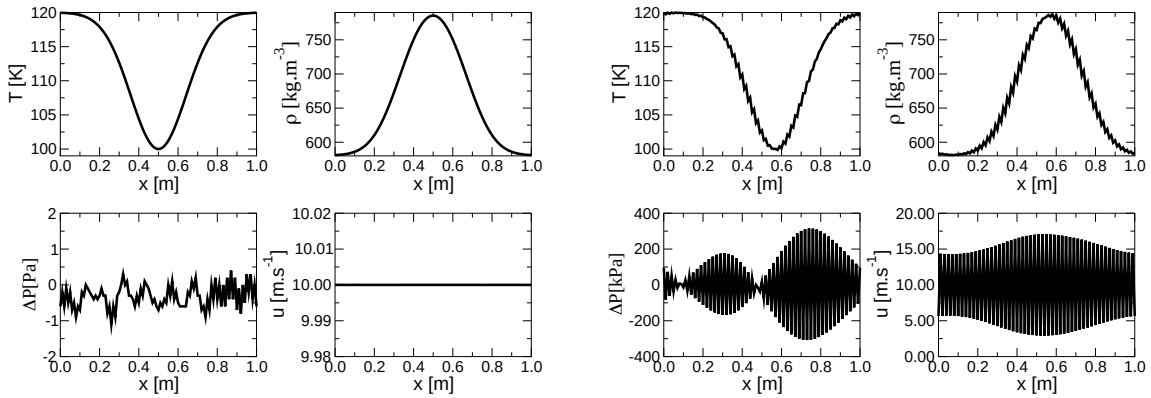


FIGURE 5.5 – Profils de température T, de densité ρ, de pression P et de vitesse u après 1 temps convectif en gaz réel (a), avec les Jacobiennes en gaz parfait (b), pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K). Le calcul en (b) s'arrête après 7500 itérations.

5.3 Calcul de la température et de la pression

Dans le cas gaz parfait, l'énergie ne dépendant que de la température et de la composition, la température peut être obtenue rapidement par une simple dichotomie sur les valeurs tabulées. On en déduit alors la pression via l'équation d'état. Dans le cas des gaz réels, l'énergie interne dépend à la fois de la température, de la composition et de la densité. Le calcul de la température devient délicat car la dépendance en composition et en densité est non-linéaire et il convient d'utiliser une méthode plus adaptée.
La méthode la plus simple est d'utiliser une procédure itérative. Cependant, si la valeur initiale de T n'est pas proche de la solution, cette procédure peut devenir rapidement très coûteuse en temps de calcul. Pour accélérer la procédure, il faut donc une première estimation de T la plus proche possible de la solution. On utilise pour cela une valeur approchée à partir d'un résidu reconstruit pour la température.

5.3.1 Mise à jour de la température

A chaque itération n la température est mise à jour à partir d'un résidu dT estimé à partir des résidus sur ρe_s et ρY_k

$$T^{n+1} = T^n + dT \tag{5.24}$$

où

$$dT = \frac{1}{\rho C_v} d(\rho e_s) - \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_v - C_p}{\alpha C_v} v_k + \frac{h_k}{\rho C_v} \right\} d(\rho Y_k) \tag{5.25}$$

avec $d(\rho e_s) = (\rho e_s)^{n+1} - (\rho e_s)^n$ et $d(\rho Y_k) = (\rho Y_k)^{n+1} - (\rho Y_k)^n$.

Ce calcul est effectué en fin d'itération (en même temps que la mise à jour des variables conservatives) et a un supplément en terme de coût calcul machine très faible, car il n'utilise que des grandeurs déjà calculées. La différentielle Eq. 5.25 est exacte lorsque l'équation $T(e_s, v, X_i)$ est linéaire, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on s'approche de la zone critique. Il faut donc systématiquement vérifier et corriger si nécessaire la température, en respectant une certaine tolérance sur l'erreur.

5.3.2 Contrôle de l'erreur

Le principe de la méthode est schématisé Fig. 5.6. On veut obtenir T tel que $e_s(\rho, T, Y_i) = e_{s,transporte}$ où l'indice $_{transporte}$ fait référence à la valeur directement prédite par AVBP. La composition et la densité sont des grandeurs transportées et sont donc connues à l'itération courante. L'inconnue est la température. A chaque itération, on contrôle la précision de T obtenu par 5.24 avec la relation :

$$\left| \frac{e_s(T, \rho, Y_i) - e_{s,transporte}}{e_{s,transporte}} \right| < \left(\frac{\epsilon_{e_s}}{e_s} \right)_{max} \tag{5.26}$$

$$\text{où} \qquad \left(\frac{\epsilon_{e_s}}{e_s} \right)_{max} = \frac{1}{\left| \frac{\alpha e_s}{P \beta C_v} \right| + 1} \left(\frac{\epsilon_P}{P} \right)_{max} \tag{5.27}$$

où $\epsilon_{e_s} = e_s(\rho, T, Y_i) - e_{s,transporte}$ et $(\epsilon_P/P)_{max}$ est un critère fixé par l'utilisateur (typiquement 10^{-6} ou 10^{-7}), qui permet de garantir une précision donnée sur la pression, comme expliqué en Sec. 5.3.3.

5.3.3 Impact sur la pression

La thermodynamique gaz réel a comme particularité une forte sensibilité de la pression à la précision sur les grandeurs conservatives. Pour simplifier, l'étude est faite ici pour un cas mono-espèce, négligeant les erreurs associées au transport des espèces.

Approximation au premier ordre de l'erreur sur la pression

Les grandeurs transportées dans le code sont l'énergie totale $\rho E = \rho e_s + \rho e_c$, où ρe_s est l'énergie sensible et ρe_c est l'énergie cinétique, et la densité ρ. La température est obtenue à

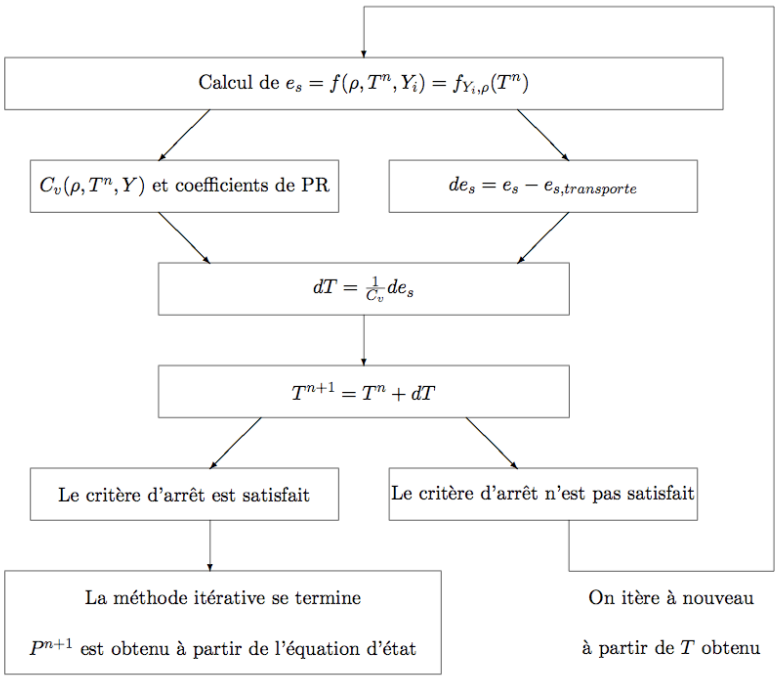


FIGURE 5.6 – Calcul de la température

partir de ρe_s et ρ, comme expliqué en Sec. 5.3.2. Notons $T^\star$ la température effectivement connue par le code. Cette température est une estimation de la température exacte, T_{exact}.

$$T^\star = T_{exact} + \epsilon_T \tag{5.28}$$

avec $T_{exact} = T(\rho e_{s,exact}, \rho_{exact})$, où $\rho e_{s,exact}$ et ρ_{exact} sont l'énergie interne et la densité exactes. $T^\star$ correspond à la température obtenue à partir d'une énergie et d'une densité différentes des valeurs exactes :

$$T^\star = T^\star(\rho e_{s,exact} + \epsilon_{\rho e_s}, \rho_{exact} + \epsilon_\rho) \tag{5.29}$$

où $\epsilon_{\rho e_s}$ et ϵ_ρ représentent l'erreur sur la densité et l'énergie interne. Ces erreurs correspondent à l'erreur numérique du schéma de transport ϵ^s et à l'erreur introduite par la tolérance sur l'estimation de T (Sec. 5.3.2), ϵ^c. L'erreur ϵ^c n'est présente que sur l'énergie, puisque l'estimation de T est réalisée de lanière à ce que $e_s(T, \rho) = e_{s,transporte} + \epsilon^c$ (Sec. 5.3.2). Soit :

$$T^\star = T(\rho e_{s,exact} + \epsilon^c_{\rho e_s} + \epsilon^s_{\rho e_s}, \rho_{exact} + \epsilon^s_\rho) \tag{5.30}$$

La pression est obtenue via l'équation d'état. Avec les variables exactes, on obtient :

$$P_{exact} = P(T_{exact}, \rho_{exact}) \tag{5.31}$$

La pression calculée est :

$$P^\star = P(T^\star, \rho_{exact} + \epsilon^s_\rho) \tag{5.32}$$
$$= P + \epsilon_P \tag{5.33}$$

L'erreur sur la température associée à l'erreur sur ρe_s et ρ se déduit directement de l'Eq. 2.120. Celle sur P provient des erreurs sur T et ρ, via l'équation d'état.

Ainsi, on peut écrire les relations suivantes :

$$\frac{\epsilon_T}{T} = \frac{e_s}{C_v T}\frac{\epsilon^c_{\rho e_s} + \epsilon^s_{\rho e_s}}{\rho e_s} - \left\{\frac{C_v - C_p}{C_v \alpha T} + \frac{h_s}{C_v T}\right\}\frac{\epsilon^s_\rho}{\rho} \tag{5.34}$$
$$\frac{\epsilon_P}{P} = \frac{\alpha}{\beta}\frac{T}{P}\frac{\epsilon_T}{T} + \frac{1}{\beta P}\frac{\epsilon^s_\rho}{\rho} \tag{5.35}$$

En combinant 5.34 et 5.35, on obtient :

$$\frac{\epsilon_P}{P} = \underbrace{\left(\frac{\alpha e_s}{P\beta C_v}\right)}_{coef_{\rho e_s}}\frac{\epsilon^s_{\rho e_s} + \epsilon^c_{\rho e_s}}{\rho e_s} + \underbrace{\left(\frac{C_p - \alpha h_s}{C_v P \beta}\right)}_{coef_\rho}\frac{\epsilon^s_\rho}{\rho} \tag{5.36}$$

La Fig. 5.7 présente l'impact des coefficients $coef_{\rho e_s}$ et $coef_\rho$ sur l'erreur relative de pression. Lorsque la densité augmente (*.i.e.* la non-idéalité augmente), une erreur relative de densité de 1 peut entraîner une erreur relative de pression jusqu'à 150 et une erreur relative de ρe_s de 1 peut entraîner une erreur relative de pression jusqu'à 40. Cette propriété est directement liée à la faible compressibilité du fluide lorsqu'il devient proche d'un liquide (*cf* Fig. 2.14). On comprend donc la forte raideur sur la pression, et l'extrême précaution avec laquelle il faudra traiter les éventuelles erreurs numériques durant le calcul. Ce constat est à la base des modifications sur la viscosité artificielle faites à la Sec. 5.4. Ce graphique montre aussi que le critère d'arrêt pour la méthode itérative doit être choisi avec soin. En effet, un critère basé sur l'énergie interne peut mener à des erreurs relatives élevées sur la pression. Il faut donc introduire l'erreur relative de pression dans le critère d'arrêt, comme cela est fait ci-dessous.

Expression du critère d'arrêt de la méthode itérative en fonction de P

A partir de l'équation 5.36, le critère de correction sur e_s peut être exprimé en fonction de $\left(\frac{\epsilon_P}{P}\right)_{max}$, l'erreur relative sur la pression maximale :

$$\left(\frac{\epsilon_{e_s}}{e_{s,transportee}}\right)_{max} = \frac{1}{\left|\frac{\alpha e_s}{P\beta C_v}\right| + 1}\left(\frac{\epsilon_P}{P}\right)_{max} \tag{5.37}$$

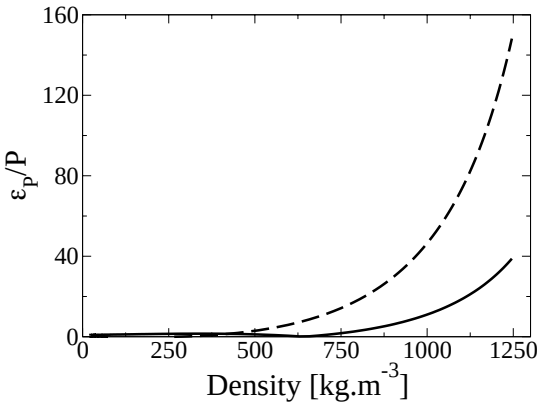


FIGURE 5.7 – Erreur relative sur la pression $\frac{\epsilon_P}{P}$ (veleur absolue) provenant des erreurs sur ρe_s et ρ. — $coef_{\rho e_s}$; – – $coef_\rho$, obtenus avec l'équation de Peng-Robinson appliquée à de l'oxygène à 60 bars.

Comme $coef_{\rho e_s}$ tend vers 0 lorsque la densité tend vers la densité critique du fluide (≈ 600 kg.m^{-3} Fig. 5.7), la valeur 1 est ajoutée à $coef_{\rho e_s}$ dans l'Eq. 5.37 pour éviter une indétermination. Dans ce cas, l'erreur sur la pression n'est plus fortement dépendante de l'erreur sur e_s et on applique à e_s la même tolérance que sur P (identique à un comportement gaz parfait).

5.4 Procédure de stabilisation

Une des caractéristiques des configurations cryotechniques est la présence d'un fort gradient de densité en sortie d'injecteur entre le jet transcritique ($\approx 1000 kg/m^3$) et la flamme ($\approx 1 kg/m^3$). Les schémas numériques d'AVBP ont été construits pour être faiblement dissipatifs, conformément aux besoins de la simulation aux grandes échelles [70] [44]. Cependant les schémas centrés d'AVBP sont naturellement sujets à des oscillations numériques hautes fréquences (wiggles) dans les zones de forts gradients. Ces oscillations sont généralement associés à la présence de gradients trop forts et mal résolus sur le maillage. on utilise la viscosité artificielle pour limiter le développement de ces oscillations.

En gaz réel, la pression est particulièrement sensible (comparativement au gaz parfait) aux erreurs numériques sur la densité et l'énergie interne. De plus, la variation de pression produite par une variation de l'énergie interne n'est pas identique à celle obtenue par une variation de densité. Ainsi, il convient d'être particulièrement vigilant lors de l'application de l'opérateur de viscosité artificielle à l'énergie interne et à la densité, sous peine de générer de très fortes fluctuations de pression.

La viscosité artificielle est appliquée au calcul en 2 étapes :

1. un (ou plusieurs) senseur(s) ciblent les zones où il est nécessaire d'appliquer la viscosité

artificielle. Dans AVBP, deux senseurs sont disponibles : le senseur de Jameson [61] et le senseur de Colin [28], qui est une amélioration du senseur de Jameson. Ce senseur, ainsi que sa version modifiée pour les calculs en gaz réel, sont détaillés en section 5.4.1.

2. des opérateurs sont appliqués sur les zones ciblées en ayant pour objectifs, soit de limiter les gradients, soit de supprimer les oscillations point à point (wiggles). La diffusion des gradients est obtenue via un opérateur de deuxième ordre (proche d'un Laplacien, et donc d'un opérateur de diffusion). Les fluctuations point à point sont limitées grâce à un opérateur de quatrième ordre (proche d'un bi-Laplacien). Seul l'opérateur de deuxième ordre est piloté par le senseur, l'opérateur de quatrième ordre étant actif partout (sauf quand l'opérateur de deuxième ordre est actif). Pour limiter les perturbations sur la pression en gaz réel, les opérateurs utilisés en gaz parfait ont été adaptés et sont présentés en section 5.4.2.

5.4.1 Senseurs de viscosité artificielle

Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson $\zeta^J_{\Omega_j}$ lié à la cellule Ω_j est défini par l'Eq. 5.38 est le maximum de tous les senseurs ζ^J_k liés aux sommets k (Eq. 5.39). S est la variable évaluée par le senseur et (Δ^k_1, Δ^k_2) sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 5.40. 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 linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique particulièrement adaptée aux cas quasi-stationnaires.

$$\zeta^J_{\Omega_j} = \max_{k\in\Omega_j} \zeta^J_k \tag{5.38}$$

$$\zeta^J_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + |S_k|} \tag{5.39}$$

$$\Delta^k_1 = S_{\Omega_j} - S_k \qquad \Delta^k_2 = (\vec{\nabla}S)_k.(\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \tag{5.40}$$

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 forte non-linéarité. Le senseur de Colin a été conçu dans ce but (cf. Eq. 5.41 à 5.45), avec les caractéristiques suivantes :

1. $\zeta^C_{\Omega_j}$ 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).

2. $\zeta^C_{\Omega_j}$ 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.
3. $\zeta^C_{\Omega_j}$ 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.
4. $\zeta^C_{\Omega_j}$ 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 les fractions massiques : la valeur de référence n'est plus S_k mais 1, valeur maximum possible.

$$\zeta^C_{\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{5.41}$$

$$\text{avec :} \quad \Psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k|+\epsilon_1 S_k}\zeta^J_k\right) \tag{5.42}$$

$$\Delta^k = |\Delta^k_1 - \Delta^k_2| - \epsilon^k \max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right) \tag{5.43}$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2\left(1-\epsilon_3\frac{\max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right)}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+S_k}\right) \tag{5.44}$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \qquad \delta = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_2 = 0.95 \qquad \epsilon_3 = 0.5 \tag{5.45}$$

Senseur pour la simulation en gaz réel

Le senseur de Jameson est trop peu précis sur les zones critiques et n'est donc pas utilisé en gaz réel. A la lecture des propriétés du senseur de Colin, on constate que certaines ne sont pas souhaitables pour la simulation en gaz réel. La propriété 1., qui indique que lorsque les gradients sont petits par rapport à la grandeur locale le senseur doit être faible, peut générer de très fortes erreurs dans les jets denses, où la pression est extrêmement sensible à la moindre erreur sur ρ. La propriété 4. stipule que le senseur doit être fort lorsque les gradients sont du même ordre de grandeur que la variable locale : cette situation est toujours rencontrée dans la couche de mélange entre un fluide dense et un gaz. Dans de telle conditions, le senseur de Colin s'active trop fortement dans le gradient de densité et mène à une diffusion trop importante de ce gradient.

Finalement, la forme retenue dans ce travail est basée sur le senseur de Jameson, cumulé avec la fonction tanh du senseur de Colin pour affiner la correction. Finalement, on obtient :

$$\epsilon^{(2)}_{\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(\tanh\left(\frac{\psi-\psi_0}{\delta}\right) - \tanh\left(\frac{-\psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{5.46}$$

$$\psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \zeta^{J,m}_k\right) \tag{5.47}$$

$$\zeta^{J,m}_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+|S^{gp}_k|} \tag{5.48}$$

Ce senseur est utilisé sur la densité ρ et les espèces ρ_k. S_k^{gp} indique que la valeur utilisée est celle correspondant au gaz parfait, afin que le senseur ne soit pas trop faible quand la densité est trop importante. Les constantes sont fixées à $\psi_0 = 0.2$ et $\delta = 0.05$. Ce senseur est en fait une version un peu simplifiée du senseur de Colin, avec les constantes ψ et δ sensiblement plus élevées. Cela provient du fait que ce senseur a été construit pour les schémas TTG (TTGA4 et TTGC) plus à même de transporter les forts gradients qu'un schéma de type Lax Wendroff. En conséquence, ce senseur n'est *a priori* pas adapté pour une utilisation avec les schémas d'ordre plus faible d'AVBP, pour lesquels il faudrait revoir les constantes.

5.4.2 Opérateurs de viscosité artificielle

Un terme additionnel est ajouté aux résidus des cellules $\mathcal{R}_{\Omega_j}$ sur l'ensemble des variables conservatives du vecteur $\overrightarrow{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)$. Ce terme imite une dérivée d'ordre deux et une dérivée d'ordre quatre :

$$\begin{aligned} S_{\Omega_j, w_k} &= \left(\kappa^{(2)}\epsilon^{(2)}_{\Omega_j} + \epsilon^{(4)}_{\Omega_j}\right)\left(\left\{\frac{1}{n_n}\sum_{i\in\Omega_j} w_{k,i}\right\} - w_{k,\Omega_j}\right) \\ &\quad -\epsilon^{(4)}_{\Omega_j}\left\{\frac{1}{n_n}\sum_{i\in\Omega_j} \overrightarrow{\nabla} w_{k,i}\right\}\cdot\left(\left\{\frac{1}{n_n}\sum_{i\in\Omega_j} x_i\right\} - x_{\Omega_j}\right) \end{aligned} \tag{5.49}$$

où $\epsilon^{(4)}_{\Omega_j} = max(0, \kappa^{(4)} - \kappa^{(2)}\epsilon^{(2)}_{\Omega_j})$, $\epsilon^{(2)}_{\Omega_j}$ est fournie par le senseur, et $\kappa^{(4)}$ et $\kappa^{(2)}$ sont des paramètres fixés par l'utilisateur, $w_{k,i}$ est la variable conservative w_k prise au noeud i et w_{k,Ω_j} est la variable w_k prise au centre de la cellule.

Problématique associée à la thermodynamique gaz réel

La formulation 5.49 implique que les variables conservatives sont toutes artificiellement diffusées de la même manière. Dans un cas gaz parfait, cette diffusion artificielle ne génère que peu de bruit sur la pression du fait de la quasi-équivalence entre ρe_s et P ($\rho e_s = \rho C_v T = P/(\gamma - 1)$). En effet, dans un calcul à pression constante et en gaz parfait, ρe_s est également constant et non diffusé et la diffusion d'un gradient de densité entraînera également la diffusion du gradient de température associé sans modifier la pression. Le comportement en gaz réel est tout à fait différent.

Une courbe représentant la densité ρ et l'énergie ρe_s pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K) en fonction de la température est tracée Fig. 5.8. La forte non-idéalité est très clairement visible lorsque $T < 200$ K. En particulier, dans la zone dense, la variable ρe_s varie très fortement même lorsque la pression est constante. L'utilisation de viscosité artificielle sur ρ aura donc de fortes conséquences pour P.

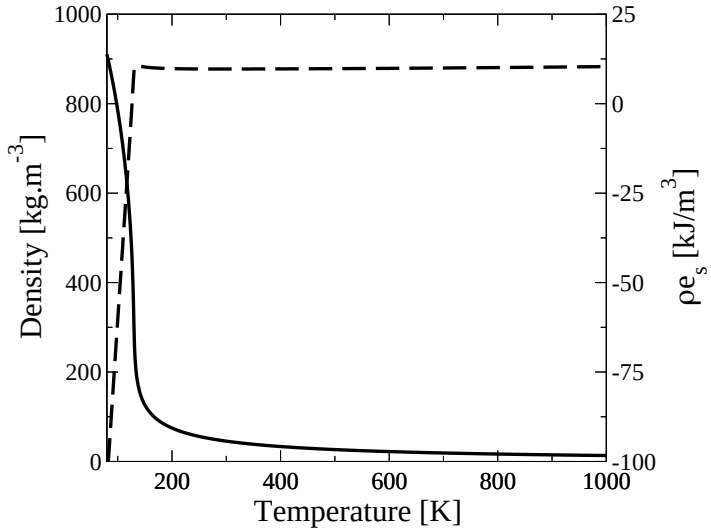


FIGURE 5.8 – Densité ρ (—) et énergie interne ρe_s (– –) en fonction de la température pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K).

Pour avoir une idée de l'impact sur le champ de pression de l'opérateur défini à l'Eq. 5.49, un cas test simple, sur un maillage 1D périodique, est réalisé. Une onde entropique de vitesse nulle est placée au centre du domaine. La pression est uniforme et fixée à 40 bar. L'espèce utilisée est de l'azote ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K). Les équations résolues sont les équation d'Euler, si bien que la seule diffusion provient de l'opérateur de diffusion artificielle, qui a été forcé (*i.e.* $\epsilon^{(2)} = 1$, $\epsilon^{(4)} = 0$) sur tout le domaine. Une seule itération de calcul, avec un pas de temps fixé à 10^{-7} s, est effectuée.

Le champ de densité initial (la densité n'a pas le temps d'être significativement diffusée en une itération et son profil après 1 itération est très proche de son profil initial) et la variation de pression par rapport à la pression initiale $\Delta P = P_{initiale} - P$ sont présentés pour un cas utilisant une thermodynamique gaz parfait sur la Fig. 5.9 et un cas gaz réel sur la Fig. 5.10. Le champ de densité dans le cas gaz parfait est choisi pour fournir des gradients de densité maximum proches du cas gaz réel. Le champ de pression du cas gaz parfait n'est pas affecté par la diffusion artificielle, tandis que des perturbations d'amplitude 1500 Pa sont visibles dans le cas en gaz réel.

Amélioration proposée

Pour limiter les perturbations de pression associées au processus de diffusion artificielle, son application à la variable ρE est modifiée pour générer une variation de densité garantissant une pression (quasi) constante. Rappelons l'Eq. 2.121 :

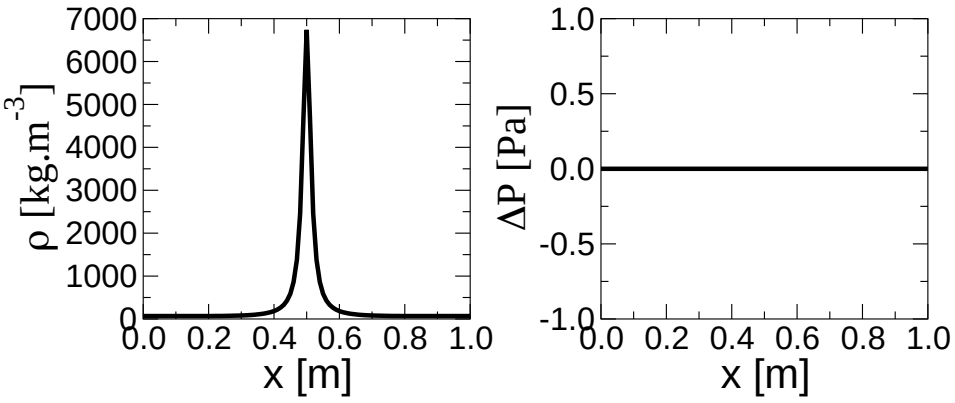


FIGURE 5.9 – Variation de pression ΔP obtenue après 1 itération (le pas de temps est fixé à 10^{-7}) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à 40 bar ($P_R = 1.17$) en thermodynamique gaz parfait, avec la diffusion artificielle forcée sur tout le domaine.

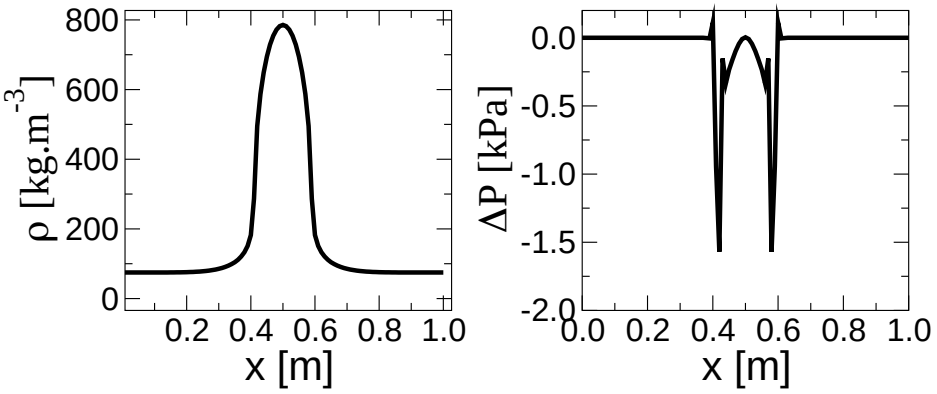


FIGURE 5.10 – Variation de pression ΔP obtenue après 1 itération (le pas de temps est fixé à 10^{-7} s) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à 40 bar en gaz réel où la diffusion artificielle forcée sur tout le domaine.

$$dP = \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} d(\rho E) + \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{C_p}{C_v}\frac{v_k}{\beta} - \frac{\alpha h_{s,k}}{\rho\beta C_v} + \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} e_c \right\} d(\rho Y_k) - \frac{\alpha}{\beta\rho C_v} u_i d(\rho u_i)$$

Imposer $dP = 0$, conduit à la relation relation entre $d(\rho Y_k)$, $d(\rho e_s)$ et $d(\rho u_i)$:

$$d(\rho e_s) = \sum_{k=1}^{N} \left\{ h_{s,k} - \frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - e_c \right\} d(\rho Y_k) + u_i d(\rho u_i) \tag{5.50}$$

On exprime alors la diffusion artificielle sur l'énergie à partir de la diffusion artificielle sur la densité en utilisant l'Eq. 5.50. L'Eq. 5.49 n'est donc plus appliquée à ρE, mais remplacée par :

$$S_{\Omega_j,\rho E} = \sum_{k=1}^{N} \left\{ h_{s,k} - \frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - e_c \right\} S_{\Omega_j,\rho Y_k} + u_i S_{\Omega_j,\rho u_i} \tag{5.51}$$

Cette formulation est une approximation linéaire et ne supprimera donc pas totalement les fluctuations de pression lors du processus de diffusion artificielle, mais permet de les limiter. Cette approximation est d'autant plus valable que l'on se situe loin du point critique, point où la raideur de la thermodynamique est maximale et donc les effets non-linéaires prépondérants.

Comme cette formulation n'agit pas sur la pression, il faut ajouter un traitement sur les fluctuations de pression, qui sont alors limitées par l'opérateur d'ordre quatre sur ρE. Les fluctuations de pression sont explicitement exprimées dans la formulation via l'équation 2.121 (une variation de ρE n'est plus fortement liée à une variation de pression comme cela est souvent le cas en gaz parfait), pour laquelle on fixe $d\rho Y_k = 0$ et $d\rho u_i = 0$, soit :

$$d(\rho E) = \frac{\beta \rho C_v}{\alpha} dP \tag{5.52}$$

Ce qui finalement mène à l'équation suivante pour $S_{\Omega_j,\rho E}$:

$$\begin{aligned} S_{\Omega_j,\rho E} = & \sum_{k=1}^{N} \left\{ h_{s,k} - \frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - e_c \right\} S_{\Omega_j,\rho Y_k} + u_i S_{\Omega_j,\rho u_i} + \frac{\rho \beta C_v}{\alpha} \epsilon^{(4)}_{\Omega_j} \left(\left\{ \frac{1}{n_n} \sum_{i \in \Omega_j} P_i \right\} - P_{\Omega_j} \right) \\ & + \frac{\rho \beta C_v}{\alpha} \epsilon^{(4)}_{\Omega_j} \left\{ \frac{1}{n_n} \sum_{i \in \Omega_j} \overrightarrow{\nabla} P_i \right\} \cdot \left(\left\{ \frac{1}{n_n} \sum_{i \in \Omega_j} x_i \right\} - x_{\Omega_j} \right) \end{aligned} \tag{5.53}$$

Influence du traitement spécifique de ρE

La figure 5.11 donne un exemple de résultat sur le cas test mono-dimensionnel précédent, toujours après 1 itération. On note une nette amélioration apportée par la modification de l'opérateur de diffusion artificielle pour l'énergie ρE. L'amplitude de la fluctuation est divisée par 5 environ. Le test prolongé jusqu'à 1000 itérations (Fig. 5.12) montre que la différence d'amplitude des oscillations entre le cas modifié et le traitement d'origine est de l'ordre de 8.

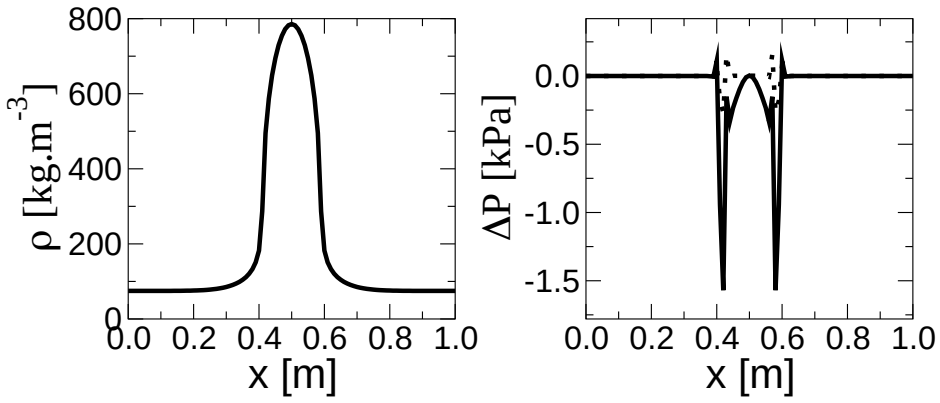


FIGURE 5.11 – Variation de pression ΔP obtenue après **1 itération** (le pas de temps est fixé à 10^{-7}) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à **40 bar** en gaz réel où la diffusion artificielle a été forcée sur tout le domaine ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K). — Opérateur d'origine d'AVBP ; · · · Opérateur modifié pour le gaz réel.

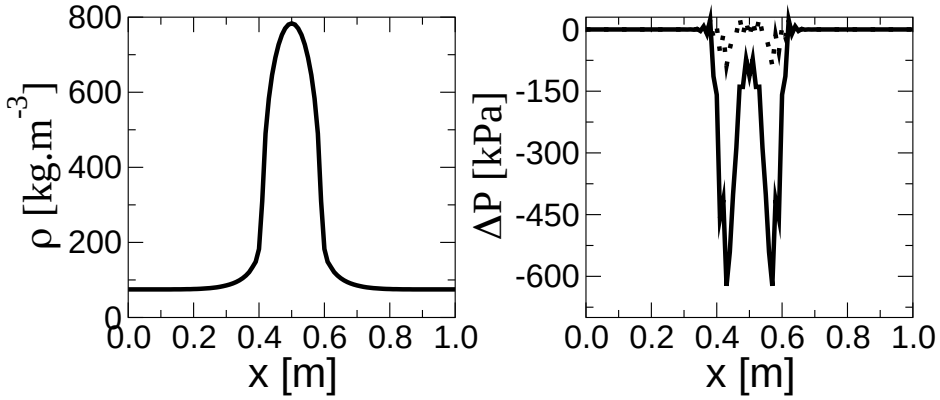


FIGURE 5.12 – Variation de pression ΔP obtenue après **1000 itérations** (le pas de temps est fixé à 10^{-7}) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à **40 bar** en gaz réel où la diffusion artificielle a été forcée sur tout le domaine ($P_{C,N_2} = 34$ bar, $T_{C,N_2} = 126.2$ K). — Opérateur d'origine d'AVBP ; · · · Opérateur modifié pour le gaz réel.

Le même cas test est reproduit avec une pression plus élevée ($P_R \approx 3$) pour tester le comportement de l'opérateur plus loin du point critique. Les résultats après 1 itération et 1000 itérations sont montrés Figs. 5.13 et 5.14. L'amélioration est cette fois bien plus marquée que dans le cas à 40 bar, car l'approximation linéaire (Eq. 5.50) est meilleure. L'amplitude des fluctuations est cette fois divisée d'un facteur 20 après 1 itération et d'un facteur 100 après 1000 itérations.

Le cas test présenté ici n'est pas totalement représentatif d'un cas réel 3D dans lequel plusieurs

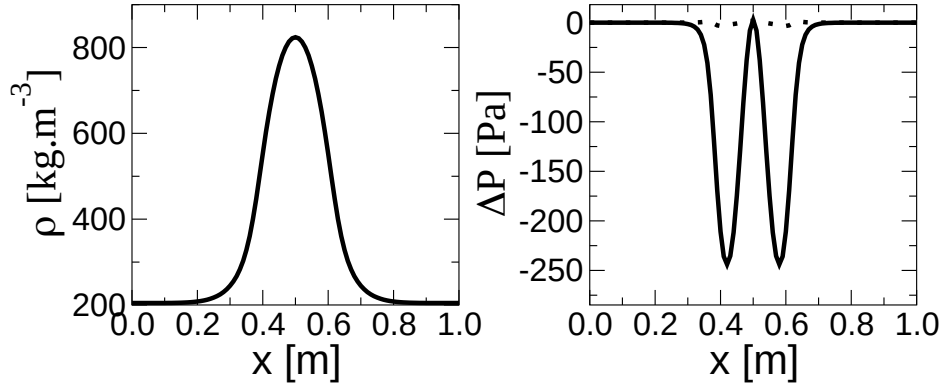


FIGURE 5.13 – Variation de pression ΔP obtenue après **1 itération** (le pas de temps est fixé à 10^{-7} s) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à **100 bar** en gaz réel où la diffusion artificielle a été forcée sur tout le domaine (P_{C,N_2} = 34 bar, T_{C,N_2} = 126.2 K). — Opérateur d'origine d'AVBP ; · · · Opérateur modifié pour le gaz réel.

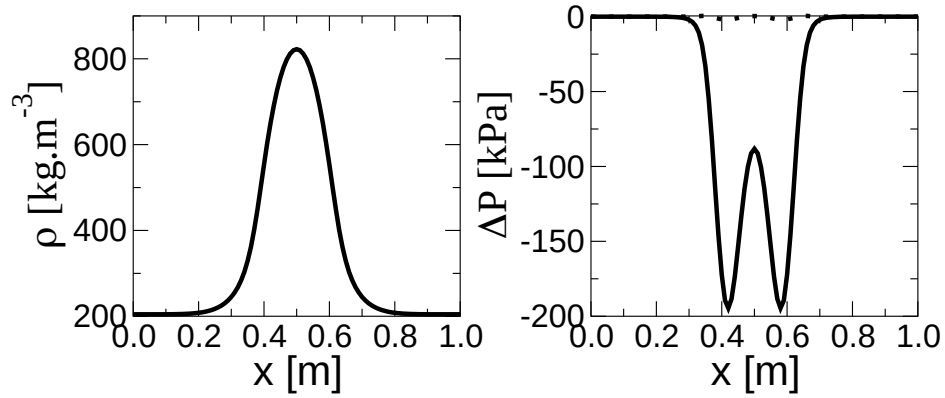
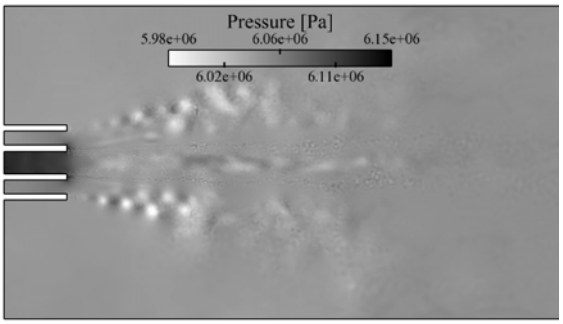


FIGURE 5.14 – Variation de pression ΔP obtenue après **1000 itérations** (le pas de temps est fixé à 10^{-7} s) sur une onde entropique à vitesse nulle pour de l'azote à **100 bar** en gaz réel où la diffusion artificielle a été forcée sur tout le domaine (P_{C,N_2} = 34 bar, T_{C,N_2} = 126.2 K). — Opérateur d'origine d'AVBP ; · · · Opérateur modifié pour le gaz réel.

espèces sont présentes et dans lequel la viscosité artificielle n'est appliquée que dans des zones bien ciblées grâce à l'utilisation de senseurs. Une illustration de l'amélioration obtenue par la modification de l'opérateur de viscosité artificielle dans le cas réactif coaxial Mascotte est présentée Fig. 5.15 par visualisation d'une coupe du champ de pression instantané proche de l'injecteur. La Fig. 5.15 a) montre le champ obtenu avec l'opérateur modifié pour les gaz réels et la Fig. 5.15 b) présente le champ obtenu avec l'opérateur original, après 100 itérations (le pas de temps vaut environ 2.8 10^{-8} s). Rappelons que de l'oxygène dense est injecté au centre

de l'injecteur et est entouré d'un jet gazeux d'hydrogène. On note très clairement dans le cas b) l'apparition de fortes variations de pression à l'intérieur et autour du jet dense d'oxygène, où les effets gaz réels sont très importants, tandis que dans le cas a), les seules fluctuations de pression visibles sont liées à l'écoulement (champ de pression généré par la déstabilisation du jet d'hydrogène et la présence de tourbillons, ainsi que la déstabilisation du jet dense central).

L'évolution temporelle des maximum et minimum de pression dans le domaine pour les deux cas est tracée Fig. 5.16. Lorsque l'opérateur original est utilisé des variations de pression de plus de 10 bar sont observables.

a) 

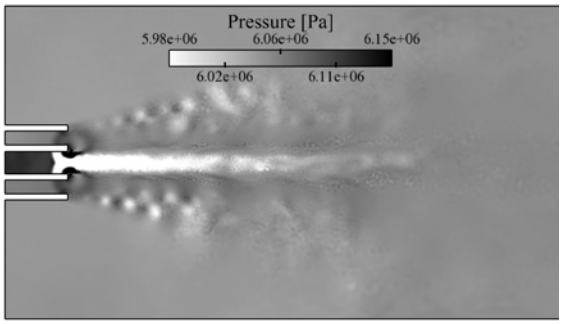
b) 

FIGURE 5.15 – Coupe du champ de pression instantané du cas test Mascotte obtenu après 100 itérations avec (a) et sans (b) la modification de viscosité artificielle. L'échelle est saturée dans le cas b) pour correspondre à celle du cas a).

Utilisation dans AVBP

L'opérateur donné en Eq. 5.51 ne conserve pas l'énergie totale. Cependant, son utilisation est nécessaire dans les zones de forte non-idéalité. Il est donc utilisé uniquement dans ces régions et dans les zones à comportement de type gaz parfait, l'opérateur standard d'AVBP est utilisé (Eq. 5.49). Le passage d'un opérateur à l'autre est réalisé à partir d'un test sur le facteur de compressibilité $Z = P/\rho\bar{r}T$, avec un seuil fixé à 0.9, correspondant à un écart significatif du comportement de l'énergie interne en gaz réel (Fig. 5.8) par rapport à un comportement en gaz parfait. Ce critère n'est pas optimisé et peut certainement être amélioré.

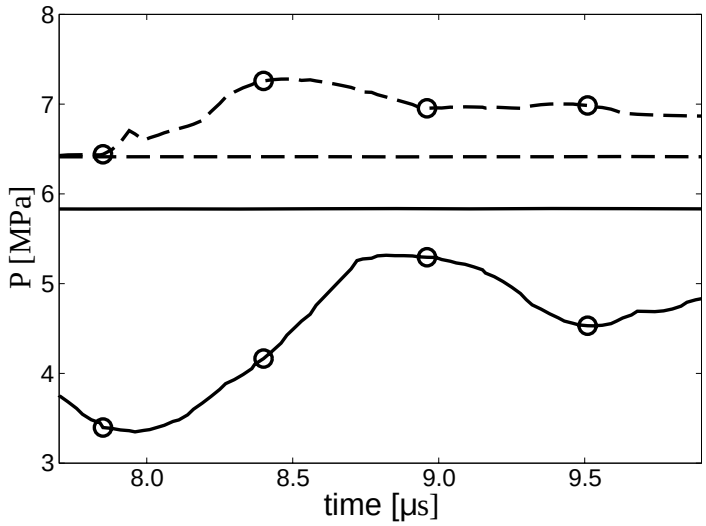


FIGURE 5.16 – Evolution de la pression maximale (—) et minimale (− −) sur 100 itérations de la simulation du cas test Mascotte (cas coaxial réactif H_2/O_2 à 60 bars). Lignes sans symboles : Opérateur modifié pour le gaz réel ; Lignes avec cercles : Opérateur d'origine d'AVBP.

5.5 Conditions aux limites

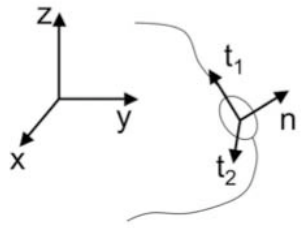
AVBP utilise des conditions limites caractéristiques développées par Poinsot et al. [113], séparant l'information acoustique de l'information entropique, qui permet une gestion efficace de l'acoustique sur les conditions limites.

Les matrices de passage des variables conservatives vers les variables caractéristiques ont été calculées en Sec. 3.3. Cependant, de manière générale, la base cartésienne locale des surfaces du domaine n'est pas la même que la base générale utilisée dans le calcul. L'expression des matrices de passage dans la base locale de la limite est donnée en Sec. 5.5.1.

L'utilisation de la méthode dans AVBP est présentée en Sec. 5.5.2.

5.5.1 Passage vers la base locale de la limite

La rotation se fait de la base locale vers la base normale à la surface $(\overrightarrow{n}, \overrightarrow{t_1}, \overrightarrow{t_2})$ (Fig. 5.17), pour laquelle (n_x, n_y, n_z) sont les composantes du vecteur $\overrightarrow{n}$ unitaire normal à la limite et (t_{1x}, t_{1y}, t_{1z}) et (t_{2x}, t_{2y}, t_{2z}) les coordonnées de deux vecteurs tangeants $\overrightarrow{t_1}$ et $\overrightarrow{t_2}$ qui forment une base orthonormale avec $\overrightarrow{n}$.



a)

FIGURE 5.17 – Rotation de la base cartésienne pour obtenir une base normale à la surface limite.

Avec ces définitions, les matrices de changement de base Ω_v et Ω_v^{-1} sont données par :

$$\overline{\overline{\Omega_v}} = \begin{pmatrix} n_x & t_{1x} & t_{2x} & 0 & 0 \\ n_y & t_{1y} & t_{2y} & 0 & 0 \\ n_z & t_{1z} & t_{2z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \overline{\overline{\Omega_v}}^{-1} = \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z & 0 & 0 \\ t_{1x} & t_{1y} & t_{1z} & 0 & 0 \\ t_{2x} & t_{2y} & t_{2z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.54}$$

Finalement, les matrices qui permettent de passer des variables conservatives exprimées dans la base globale vers les variables caractéristiques dans la base locale sont obtenues à partir des matrices de passage obtenues en Sec. 3.3 :

$$\boxed{\begin{aligned} \overline{\overline{L}}_{U_n} &= \overline{\overline{L}}_V \overline{\overline{\Omega}}_v^{-1} \overline{\overline{M}}^{-1} \\ \overline{\overline{R}}_{U_n} &= \overline{\overline{M\Omega}}_v \overline{\overline{R}}_V \end{aligned}} \tag{5.55}$$

Soit :

$$\overline{\overline{L}}_U = \begin{pmatrix} -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 - cn_x}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2 - cn_y}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3 - cn_z}{\rho c} & \frac{\alpha}{\beta\rho C_v}\frac{1}{\rho c} & -\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{\rho} + \frac{1}{\rho c}A \\ -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 + cn_x}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2 + cn_y}{\rho c} & -\frac{\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3 + cn_z}{\rho c} & \frac{\alpha}{\beta\rho C_v}\frac{1}{\rho c} & \frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{\rho} + \frac{1}{\rho c}A \\ \frac{t_{1x}}{\rho} & \frac{t_{1y}}{\rho} & \frac{t_{1z}}{\rho} & 0 & -\frac{\vec{u}\cdot\vec{t_1}}{\rho} \\ \frac{t_{2x}}{\rho} & \frac{t_{2y}}{\rho} & \frac{t_{2z}}{\rho} & 0 & -\frac{\vec{u}\cdot\vec{t_2}}{\rho} \\ \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_1 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_2 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v}u_3 & \frac{Y_l}{c^2}\frac{\alpha}{\beta\rho C_v} & -\frac{Y_l}{c^2}A + \delta_{kl} \end{pmatrix} \tag{5.56}$$

$$\overline{\overline{R}}_U = \begin{pmatrix} \frac{\rho}{2c}(u_1 + cn_x) & \frac{\rho}{2c}(u_1 - cn_x) & \rho t_{1x} & \rho t_{2x} & u_1 \\ \frac{\rho}{2c}(u_2 + cn_y) & \frac{\rho}{2c}(u_2 - cn_y) & \rho t_{1y} & \rho t_{2y} & u_2 \\ \frac{\rho}{2c}(u_3 + cn_z) & \frac{\rho}{2c}(u_3 - cn_z) & \rho t_{1z} & \rho t_{2z} & u_3 \\ \frac{\rho}{2}\vec{u}\cdot\vec{n} + B & -\frac{\rho}{2}\vec{u}\cdot\vec{n} + B & \rho\vec{u}\cdot\vec{t_1} & \rho\vec{u}\cdot\vec{t_2} & e_c - \left(\frac{\rho C_p v_k}{\alpha} - h_k\right) \\ \frac{\rho_l}{2c} & \frac{\rho_l}{2c} & 0 & 0 & \delta_{lk} \end{pmatrix} \tag{5.57}$$

avec

$$A = \left\{ \frac{C_p v_k}{C_v \beta} - \frac{\alpha h_k}{\beta \rho C_v} + \frac{\alpha}{\beta \rho C_v} e_c \right\}$$
$$B = \left\{ \frac{\rho}{2c} H + \frac{\rho c}{2} \frac{\beta \rho C_v}{\alpha} - \frac{\rho C_p}{2 c \alpha} \right\}$$

La variable $H = E + P/\rho$ représente l'enthalpie totale massique.

5.5.2 Conditions limites d'entrée/sortie et conditions sur les parois

Les variables caractéristiques permettent de sélectionner les ondes sortantes et entrantes dans le domaine de calcul. Dans une direction donnée, on obtient W_+ et W_- les deux ondes acoustiques (convectées à la vistesse $||\overrightarrow{u}|| + c$ et $||\overrightarrow{u}|| - c$), W_k, W_{t1} et W_{t2} les ondes entropiques (convectées à la vistesse $||\overrightarrow{u}||$) pour les espèces et tangentielles à la limite du domaine. Les ondes sortantes ne sont pas modifiées par la condition limite, tandis que les ondes entrantes sont corrigées afin d'imposer les valeurs désirées à la limite.

Pour cela, il est pratique d'exprimer les variations des variables caractéristiques en termes de variables primitives. Dans la base locale à la limite, notée $(\overrightarrow{n}, \overrightarrow{t1}, \overrightarrow{t2})$ où $\overrightarrow{n}$ est la normale à la surface et $\overrightarrow{t1}, \overrightarrow{2}$ les 2 tangentielles, on peut établir les relations suivantes entre variables primitives locales et variables caractéristiques :

$$\partial u_n - \frac{1}{2}(\partial W_+ - \partial W_-) = 0 \quad (5.58)$$
$$\partial u_{t1} - \partial W_{t1} = 0 \quad (5.59)$$
$$\partial u_{t2} - \partial W_{t2} = 0 \quad (5.60)$$
$$\partial P - \frac{\rho c}{2}(\partial W_+ + \partial W_-) = 0 \quad (5.61)$$
$$\partial \rho_k - \frac{\rho_k}{2c}(\partial W_+ + \partial W_-) - \partial W_k = 0 \quad (5.62)$$
$$\partial \rho - \frac{\rho}{2c}(\partial W_+ + \partial W_-) - \partial W_S = 0 \quad (5.63)$$
$$\partial T - \frac{\gamma - 1}{2\alpha c}(\partial W_+ + \partial W_-) + \sum_k \frac{v_k}{\alpha} \partial W_k = 0 \quad (5.64)$$
$$\partial Y_k - \frac{1}{\rho}(\partial W_k - Y_k \partial W_S) = 0 \quad (5.65)$$

où u_n, u_{t1} et u_{t2} sont les vitesses normales et tangentielles à la limite et $\partial W_S = \sum_k \partial W_k$. Ce sont des relations similaires au gaz parfait, avec une différence au niveau de l'énergie qui, calculée à partir de l'équation d'état, fait apparaître des paramètres propre au gaz réel.

Entrée (partiellement) non réfléchissante à vitesse, température et fractions massiques imposées

Pour une entrée est subsonique, une seule onde est sortante : l'onde acoustique W_- à vitesse $\overrightarrow{u} - c$. Les ondes restantes, qui entrent dans le domaine, sont exprimées à partir de l'onde sortante et des valeurs imposées sur u_n, u_{t1}, u_{t2}, T et Y_k.
Pour des valeurs imposée constantes et à partir des relations 5.58 - 5.65, l'expression des ondes entrantes est donnée par :

$$\partial W_+ = \partial W_- \tag{5.66}$$
$$\partial W_{t1} = 0 \tag{5.67}$$
$$\partial W_{t2} = 0 \tag{5.68}$$
$$\partial W_k = Y_k \partial W_S \tag{5.69}$$
$$\partial W_S = \rho \frac{\gamma - 1}{c} \partial W_- \tag{5.70}$$

Ce type de limite est totalement réfléchissante (car $\partial W_+ = \partial W_-$ puisque l'onde acoustique entrante est égale à l'onde acoustique sortante, et qu'aucune fluctuation n'est autorisée sur la limite). Cela peut poser des problèmes dans les calculs transitoires où on souhaite évacuer les perturbations acoustiques. On utilise alors une condition limite partiellement réfléchissante (absorbante) grâce à une relaxation K sur les valeurs cibles $\partial u_n = K_{u_n} \Delta t (u_n^t - u_n)$, $\partial u_{t1} = K_{u_{t1}} \Delta t (u_{t1}^t - u_{t1})$, ... ce qui donne :

$$\partial W_+ = +2K_{u_n} \Delta t (u_n^t - u_n) \tag{5.71}$$
$$\partial W_{t1} = +K_{u_{t1}} \Delta t (u_{t1}^t - u_{t1}) \tag{5.72}$$
$$\partial W_{t2} = +K_{u_{t2}} \Delta t (u_{t2}^t - u_{t2}) \tag{5.73}$$
$$\partial W_k = +Y_k \partial W_S + \rho K_Y \Delta t (Y_k^t - Y_k) \tag{5.74}$$
$$\partial W_S = -\rho \alpha K_T \Delta t (T^t - T) + \rho \frac{\gamma - 1}{c} \left(K_{u_n} \Delta t (u_n^t - u_n) \right) - \rho^2 \sum_k \frac{v_k}{W_k} K_Y \Delta t (Y_k^t - Y_k) \tag{5.75}$$

où les variables avec un exposant ^{t} sont les valeurs cibles (souhaitées) sur la limite. Les coefficients de relaxation K_{u_n}, $K_{u_{t1}}$, $K_{u_{t2}}$, K_Y et K_T (paramètres fixés par l'utilisateur) sont homogènes à une fréquence et permettent à la condition limite d'agir comme un filtre haute fréquence [134] : les hautes fréquences (associées aux fluctuations propres à un écoulement SGE instationnaire) ne sont pas réfléchies et sortent du domaine de calcul, tandis qu'un signal basse fréquence est créé (ou réfléchi) afin d'imposer la valeur moyenne à l'écoulement.

Si on compare les équations 5.71 à 5.75 à leur formulation en gaz parfait, la seule différence apparaît au niveau de l'Eq. 5.75.

Sortie (partiellement) non réfléchissante à pression imposée

La même méthodologie est employée pour traiter la sortie partiellement non-réfléchissante. Dans le cas d'un sortie subsonique, un seule onde entre dans le domaine, l'onde acoustique ∂W_+. On obtient alors :

$$\partial W_+ = K_P \Delta t \frac{2}{\rho c}(P^t - P)$$

où K_P est le coefficient de relaxation sur la pression. L'impact de la formulation gaz réel joue ici dans les calcul de c.

Paroi glissante isotherme

Une paroi est totalement réfléchissante. La vitesse normale à la paroi est nulle et la température est imposée.

$$\partial W_+ = \partial W_- \tag{5.76}$$
$$\partial W_k = Y_k \partial W_S \tag{5.77}$$
$$\partial W_S = \rho \frac{\gamma - 1}{c} \partial W_- \tag{5.78}$$

Paroi non glissante isotherme

Cette fois, les ondes tangentielles sont également imposées car les vitesses tangentielles sont nulles. La température est imposée.

$$\partial W_+ = \partial W_- \tag{5.79}$$
$$\partial W_{t1} = 0 \tag{5.80}$$
$$\partial W_{t2} = 0 \tag{5.81}$$
$$\partial W_k = Y_k \partial W_S \tag{5.82}$$
$$\partial W_S = \rho \frac{\gamma - 1}{c} \partial W_- \tag{5.83}$$

5.6 Tests de validation 1D

Une onde acoutique (u+c) est superposée à un champ initial à vitesse nulle, température constante et pression constante (40 bar). Deux cas sont traités :

– cas 1 : la température initiale vaut 500 K. Ce cas est proche d'un cas gaz parfait.

– cas 2 : la température initiale vaut 100 K. Ce cas est transcritique.

Les paramètres utilisés sont rappelés ci-dessous :

Equations résolues :	**Euler**
Nombre d'espèces :	**1** (N_2)
Nombre de réactions :	**0**

TABLE 5.2 – Caractéristiques générales de l'écoulement

Nombre de dimension spatiales :	**2**
Type d'élements :	**quads**
Nombre de noeuds :	**101 x 2**
Nombre d'élements :	**100**
Longueur : $L_x \times L_y$	$1.0m \times 0.01m$

TABLE 5.3 – Paramètres du maillage

Shéma numérique :	TTG4A
Δt	10^{-6} (CFL=0.15)
Viscosité artificielle :	non

TABLE 5.4 – Paramètres numériques

Entrée :	non réfléchissante
Relaxs en entrée :	0
Sortie :	non réfléchissante
Relax en sortie :	0

TABLE 5.5 – Conditions limites

Les coefficients de relaxation sont mis à 0 pour obtenir des conditions aux limites parfaitement non-réfléchissantes. Dans ces conditions, l'onde acoustique initialement présente dans le domaine doit sortir sans perturber le champ moyen. Cet exemple permet de vérifier que la décomposition en ondes est correcte et que la partie acoustique est correctement identifiée.

5.6.1 Solutions initiales

Les solutions initiales des cas 1 et 2 sont représentées Fig. 5.18. Une onde acoustique de vitesse c est superposée à une champ constant à température égale à 500 K (supercritique) et 100 K (transcritique).

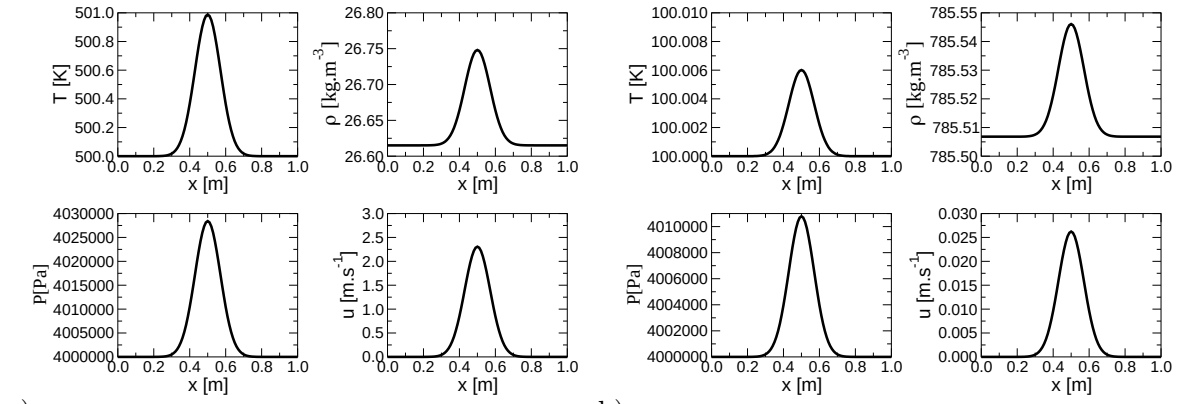


FIGURE 5.18 – Profils de température T, de densité ρ, de pression P et de vitesse u pour de l'azote à 40 bar ($P_{C,N_2} \approx 34$ bar, $T_{C,N_2} \approx 126$ K).(a) cas 1 ; (b) cas 2.

5.6.2 Résultats

Les évolutions temporelles de la pression maximale et minimale ainsi que de la densité maximale et minimale sont montrées Fig. 5.19 pour le cas 1 et Fig. 5.20 pour le cas 2. Dans les deux cas, on constate que l'onde acoustique quitte le domaine et aucune perturbation n'est notable. La pression minimale reste bien à 40 bar. La condition limite se comporte donc correctement aussi bien en condition gaz parfait que gaz réel. La partie acoustique de l'écoulement est correctement identifiée par la matrice de passage.

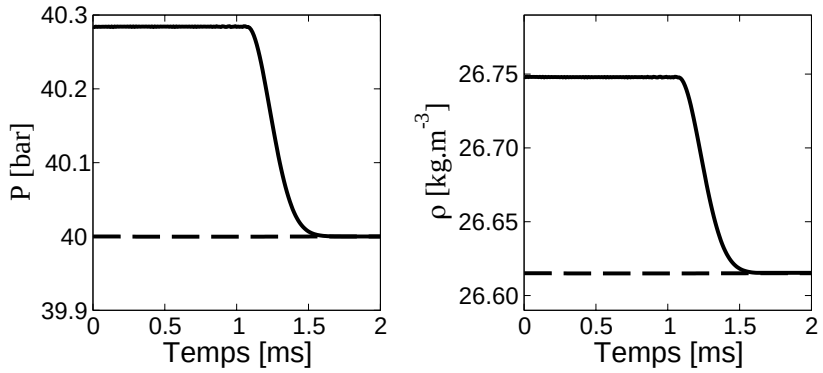


FIGURE 5.19 – Evolution temporelle de la pression P et de la densité ρ pour le cas 1 (T=500 K). — valeur maximale ; − − valeur minimale.

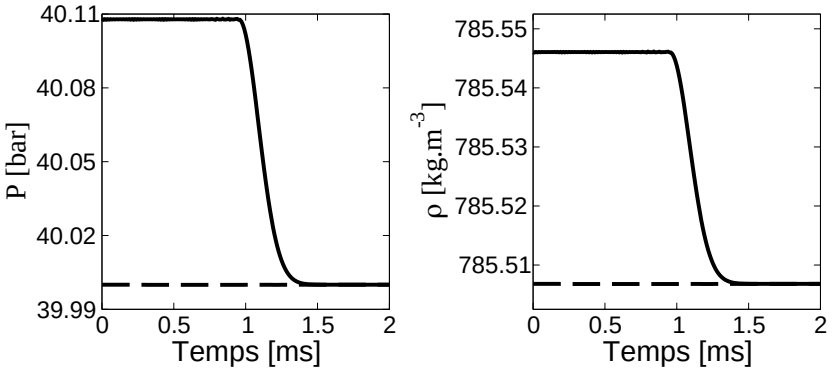


FIGURE 5.20 – Evolution temporelle de la pression P et de la densité ρ pour le cas 2 (T=100 K). — valeur maximale ; − − valeur minimale.

5.7 Tests de validation 2D

5.7.1 Gradient de vitesse

Afin de vérifier si les conditions limites d'entrée et de sortie imposent les valeurs voulues, un test classique d'AVBP est réalisé. A $t = 0$, un profil d'entrée avec gradient de vitesse est imposé à un champ initialement à vitesse nulle, $T = 200$ °K et $P = 100$ bar. Le profil d'entrée est donné par : $u(y) = 85 \times (1.5 + tanh(10(y - 0.5)))$. Ce cas est un cas gaz réel puisque le facteur de compressibilité à T=200K et P=100 bar vaut 0.67. Les paramètres utilisés sont rappelés ci-dessous :

Equations résolues :	**Euler**
Nombre d'espèces :	**1** (O_2)
Nombre de réactions :	**0**

TABLE 5.6 – Caractéristiques générales de l'écoulement

Nombre de dimension spatiales :	2
Type d'élements :	quads
Nombre de noeuds :	101 x 101
Nombre d'élements :	10 000
Longueur × largeur :	$1.0m \times 1.0m$

TABLE 5.7 – Paramètres du maillage

Shéma numérique :	Lax Wendroff
CFL :	0.5
Viscosité artificielle :	non

TABLE 5.8 – Paramètres numériques

Entrée :	partiellement non-réfléchissante sur U et T
Relax sur u :	100
Relax sur T :	100
Sortie :	partiellement non-réfléchissante sur P
Relax sur P :	10

TABLE 5.9 – Conditions limites

L'évolution temporelle de la pression, température, densité et de l'énergie cinétique est donnée Fig. 5.21. Le système, après une phase transitoire, converge bien vers une pression moyenne de 100 bars et vers une température de 200 °K. La forte augmentation de pression dans la phase transitoire est liée au gradient de pression associé à l'accélération du fluide. Cette très forte fluctuation de la pression est bien évacuée par les conditions limites et la pression finale est bien la valeur imposée par la sortie. Après la phase transitoire, il n'y a plus de perturbations notables dans l'écoulement.

La figure 5.22 montre des iso-contours de vitesse axiale. La vitesse axiale a bien convergé vers le profil souhaité dans tout le domaine. Les conditions aux limites ont donc imposé le profil recherché.

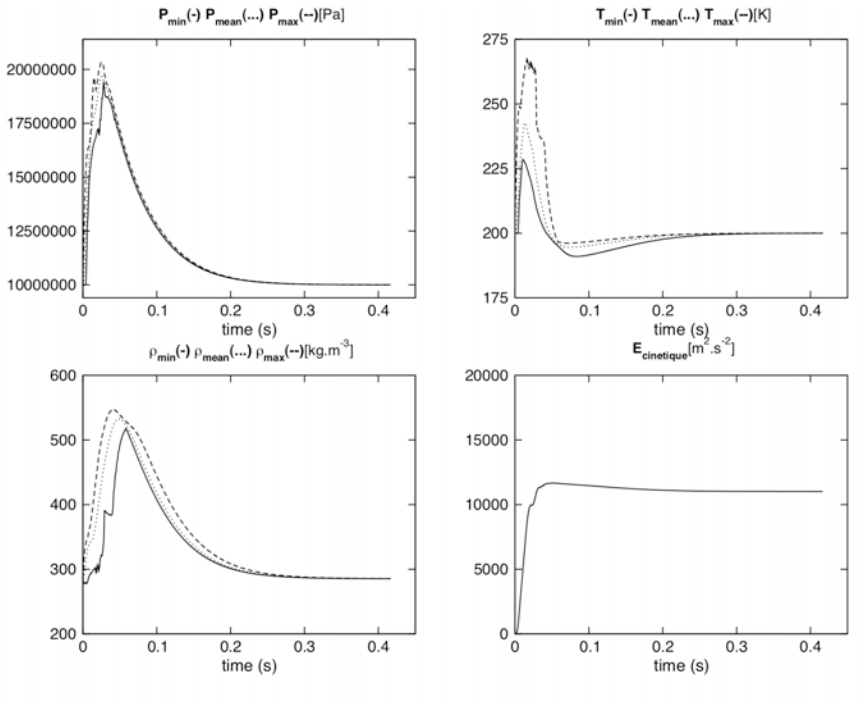


FIGURE 5.21 – Evolution temporelle de la pression P, de la température T, de la densité ρ et de l'énergie cinétique pour le cas test en gradient de vitesse.

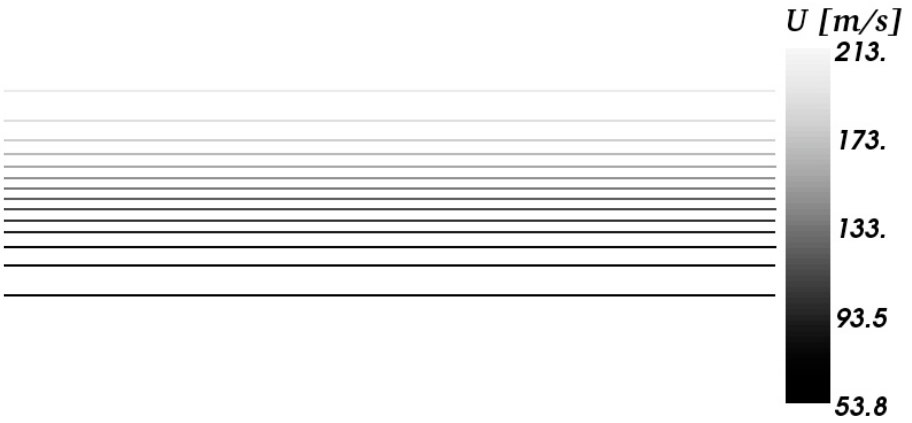


FIGURE 5.22 – Iso-lignes de vitesse axiale pour le cas test en gradient de vitesse.

5.7.2 Gradient de température

Un gradient sur la température est cette fois imposé à un champ initialement à $T = 200$ K, $P = 100$ bar et avec une vitesse axiale initiale de 100 $m.s^{-1}$. Le profil de température imposé en entrée est donné par : $T(y) = 120.0 + 40.0 \times (1.0 + tanh(10.0 \times (y - 0.5)))$. Les paramètres utilisés sont rappelés ci-dessous :

Equations résolues :	Euler
Nombre d'espèces :	1 (O_2)
Nombre de réactions :	0

TABLE 5.10 – Caractéristiques générales de l'écoulement

Nombre de dimension spatiales :	2
Type d'élements :	quads
Nombre de noeuds :	101 x 101
Nombre d'élements :	10 000
Longueur $\times$ largeur	$1.0m \times 1.0m$

TABLE 5.11 – Paramètres du maillage

Shéma numérique :	LW
CFL :	0.5
Viscosité artificielle :	non

TABLE 5.12 – Paramètres numériques

Entrée :	partiellement non-réfléchissante sur U et T
Relax sur u :	100
Relax sur T :	100
Sortie :	partiellement non-réfléchissante sur P
Relax sur P :	1000

TABLE 5.13 – Conditions limites

Résultats

L'évolution temporelle de la pression, de la température, de la densité et de l'énergie cinétique est présentée Fig. 5.23. La température converge bien vers le valeurs minimales et maximales souhaitées. La pression se stabilise à 100 bar. Le champ du facteur de compressibilité résultant $Z = P/(\rho \overline{r} T)$ est montré en Fig. 5.24, indiquant la forte non-idéalité du fluide dans ce cas.

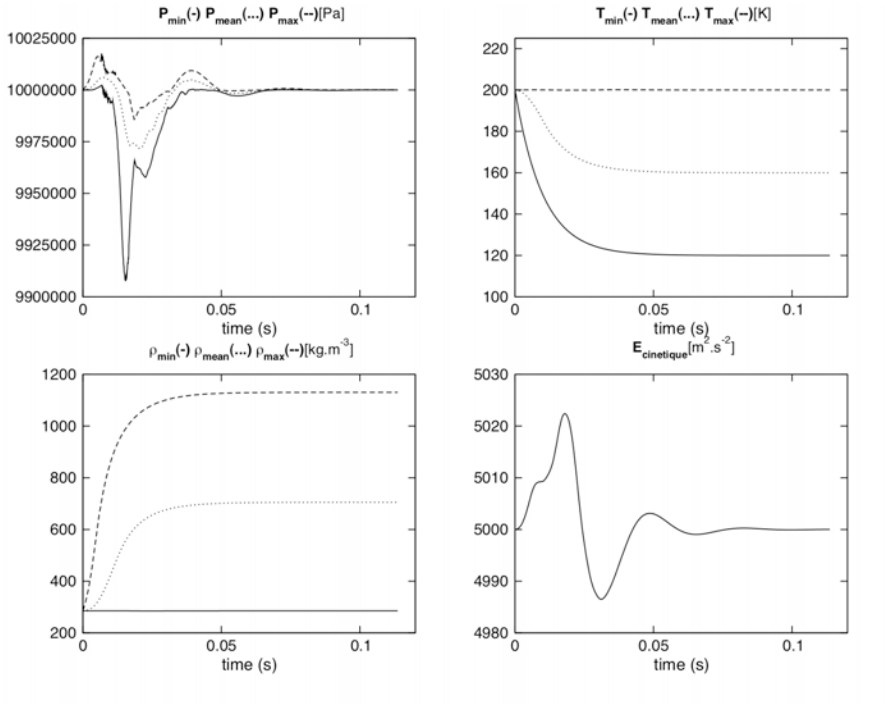


FIGURE 5.23 – Evolution temporelle de la pression P, de la température T, de la densité ρ et de l'énergie cinétique pour le cas test en gradient de température.



FIGURE 5.24 – Champ du facteur de compressibilité $Z = P/(\rho \overline{r} T)$ pour le cas test en gradient de température.

Deuxième partie

Simulations

Chapitre 6

SGE de jets ronds à pression supercritique

6.1 Introduction

Les jets rond axisymétriques à basse pression (*i. e.* en gaz parfait) ont fait l'objet de nombreuses expériences. Ils sont en effet un cas d'étude intéressant de transition vers la turbulence et sont représentatifs du mélange dans des systèmes industriels courants tels que les chambres de combustion. De manière générale, un jet rond peut être découpé en trois régions [131] (Fig. 6.1) :

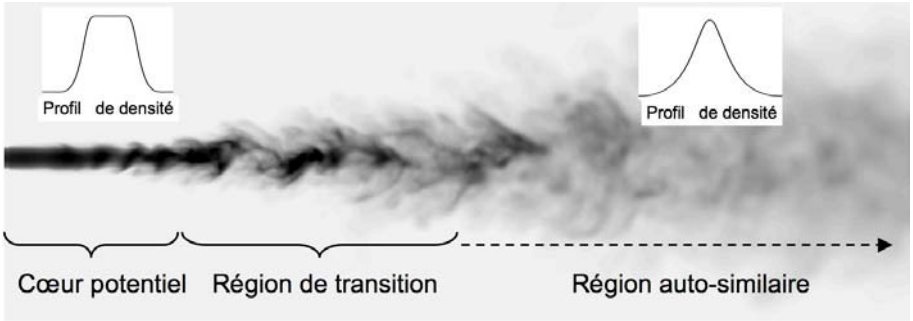


FIGURE 6.1 – Représentation qualitative des régions d'un jet rond (rétro-éclairage provenant d'un des calculs de cette section).

– En sortie d'injecteur, dans le coeur potentiel, qui est la région dans laquelle les grandeurs moyennes gardent leur valeur à l'injection, des plateaux sont notables sur les profils moyens de densité, vitesse, ... Dans la couche de mélange initiale du jet, la dynamique est dominée par la formation d'anneaux tourbillonnaires liée à l'instabilité de Kelvin-Helmoltz (Fig. 6.2). Les structures cohérentes persistent même à haut Reynolds Re_d [32]

($Re_d = (\rho_{inj} u_{inj} d)/\mu$ >1 000 000, où ρ_{inj} est la densité à l'injection, u_{inj} la vitesse à l'injection, d le diamètre de l'injecteur et μ la viscosité dynamique) et ont été également observées dans des jets à densité variable [11]. Notons que l'instabilité de Kelvin-Helmoltz peut être décrite de manière fiable par l'instabilité linéaire [55, 37, 164, 101]. Les anneaux tourbillonnaires issus de l'instabilité primaire croissent par accumulation de vorticité et peuvent s'apparier (instabilité axisymétrique secondaire). La longueur d'onde de l'instabilité initiale est alors doublée et la taille caractéristique des tourbillons augmente [55, 54]. Jusqu'à 3 appariements ont été observés expérimentalement [54].

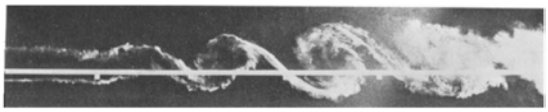


FIGURE 6.2 – Visualisation des structures de vorticité en couche de mélange issue des travaux de Wygnanski *et al.* [160].

– La région de transition se situe en fin de coeur potentiel et est associée à une tridimensionalisation (instabilité secondaire 3D) des structures tourbillonnaires, principalement liée à la présence de tourbillons longitudinaux contra-rotatifs dans la tresse des tourbillons axisymétriques (*i.e.* entre deux tourbillons) [9, 10, 5, 43] (Fig. 6.3). Ces structures longitudinales brisent la cohérence des structures issues des instabilités primaires et secondaires et donnent naissance à un écoulement fortement tri-dimensionnel où des structures tourbillonnaires de petite et grande taille coexistent dans un écoulement désorganisé. La vorticité n'est plus alors principalement azimutale, comme initialement en sortie d'injecteur et sur une grande partie du coeur potentiel, mais les structures tourbillonnaires s'enrichissent de composantes radiales et longitudinales.

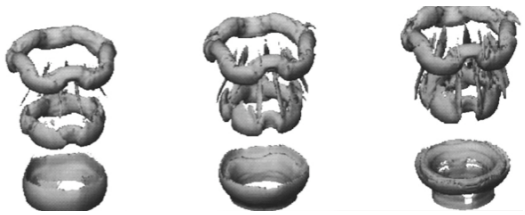


FIGURE 6.3 – Visualisation de filaments longitudinaux dans la tresse de deux tourbillons axisymétriques obtenus par simulation aux grandes échelles par Grinstein *et al.* [43].

– Après la transition, l'écoulement entre dans la région de similarité. Dans cette région, l'écoulement normalisé est simplement défini par deux échelles de longueur r et x. Par exemple, si F est une grandeur moyenne de l'écoulement, on a alors la relation : $F(x,r)/F_{ref}(x-x_0) = f(\eta)$ où $\eta = r/(x-x_0)$, x_0 est une origine fictive de l'écoulement et F_{ref} est une valeur de référence. Cela signifie que les profils moyens, mais aussi fluctuants, une fois normalisés, suivent une loi d'évolution similaire pour tous les jets ronds. Cette caractéristique est observée en situation iso-volume [58] et, lorsque l'écoulement est turbulent, semble être peu dépendante du Reynolds [111]. Dans le cas de jets à densité variable, une normalisation du

diamètre de l'injecteur par une fonction dépendante de la variation de densité entre le jet et le fluide environnant (diamètre effectif) [148, 23] permet de retrouver qualitativement un comportement de similarité (souvent appelé pseudo-similarité) [110, 109, 1].

Des simulations de jets ronds à basse pression ont montré le fort potentiel de la SGE dans ce type de configuration [43, 153, 131]. Ils ont permis de valider et d'améliorer les modèles de sous-maille pour la SGE, et sont maintenant des cas tests de validation incontournables. Il est donc naturel dans une première étape de tester AVBP gaz réel sur ces cas.

Des expériences sur des jets ronds diphasiques ont été menées par le Groupement De Recherche (GDR) [27], et ont permis une meilleur compréhension de leur dynamique.

L'étude de jets à haute pression est plus récente et a été entreprise par le DLR et l'AFRL qui ont conduit des recherches portant sur l'injection de jets ronds cryotechniques à pression supercritique et pression sous-critique [108]. Il est notamment montré qu'à pression supercritique, du fait de la disparition de tension de surface, la formation de gouttes associée au processus d'atomisation d'un jet liquide classiquement observée à pression sous-critique (Fig. 6.4 (a)) n'a plus lieu [22, 86] (Fig. 6.4 (b)). En efffet, une fois la pression critique dépassée, les ligaments qui se forment à la surface du jet ne se cassent plus en gouttes, mais sont dissout dans le gaz ambiant. Notons que lorsque la pression est bien plus élevée que la pression critique, la structure du jet redevient proche de celle d'un jet gazeux injecté dans un environnement gazeux [22] (Fig. 6.4 (c)). En plus de la topologie du jet, ces études ont permis une analyse quantitative des jets cryotechniques. En particulier, ces jets étant à densité fortement variable, l'effet du saut de densité entre l'injection et le gaz environnant sur la longueur du coeur dense (ou potentiel) et l'angle d'ouverture des jets ont été quantifiés.

Deux méthodes expérimentales ont été utilisées : la spectroscopie Raman [105, 106, 8, 88], proportionnelle à la densité, et l'ombroscopie [22, 88], proportionnelle au gradient de densité. Les résultats obtenus par ombroscopie ne sont malheureusement pas toujours en parfait accord avec les résultats obtenus par Raman [108, 88]. Néanmoins, il est qualitativement montré que la longueur du coeur potentiel est accrue lorsque le rapport de densité entre l'injection et le gaz environnant est augmenté [108, 22, 88]. L'ombroscopie a permis de montrer que l'expansion **initiale** du jet est liée au saut de densité : plus ce rapport augmente, plus l'angle d'ouverture initial est faible [22]. La technique Raman permet de mesurer le taux d'expansion des jets [105, 8, 88] à partir de la densité, mais les résultats sont très variables. Ces deux points sont discutés dans la Sec. 6.3.

Dans ce chapitre, l'outil de simulation aux grandes échelles AVBP gaz réel développé en partie 5 est utilisé pour simuler deux jets ronds d'azote à pression supercritique. Les cas simulés sont issus de cas d'expériences du DLR, menées par Mayer et al. [88]. Le premier jet (cas 3 dans Mayer et al. [88]) est injecté avec une température en-dessous de la température de pseudo-ébullition T^* (température pour laquelle la capacité calorifique à pression constante est maximale). Ce cas présente donc de forts effets de non-idéalité, autant pour la thermodynamique que pour le transport. Le saut de densité entre l'injection et le gaz est dans ce cas 9,6. L'autre jet simulé est injecté à une température supérieure à T^*, le saut de densité est alors plus faible (3,7).

a) $P/P_C = 0.91$ b) $P/P_C = 1.22$ c) $P/P_C = 2.71$

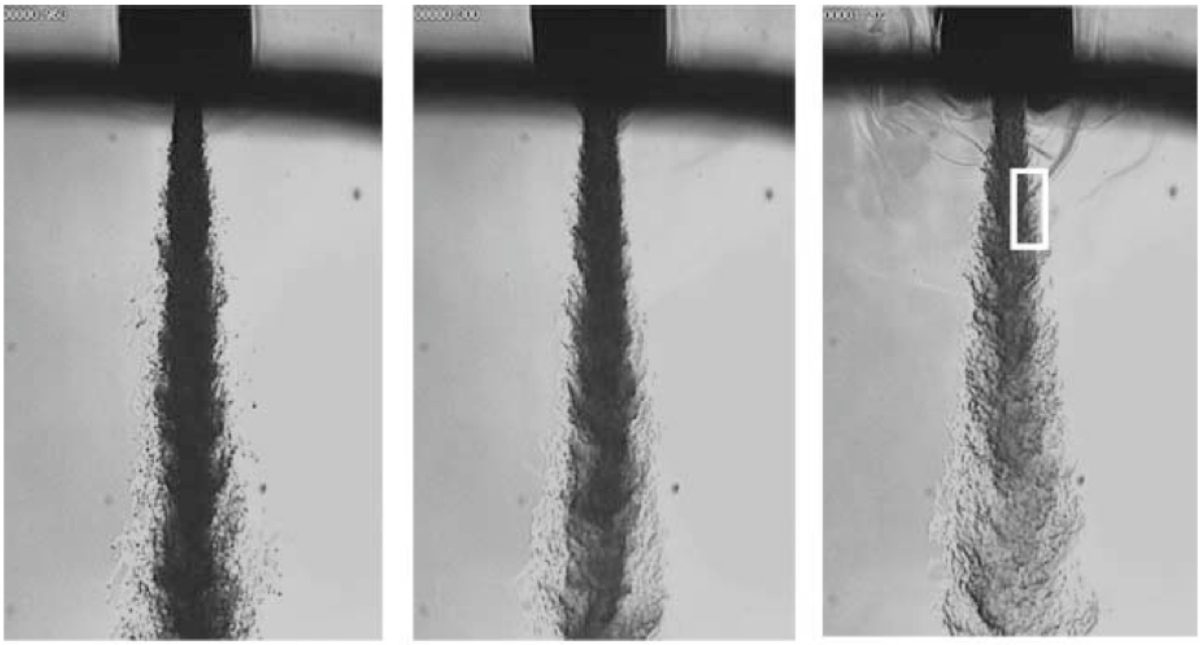


FIGURE 6.4 – Images expérimentales de l'impact de la pression P/P_C sur l'aspect de jets ronds cryotechniques d'azote, obtenues par rétro-éclairage par Chehroudi et al. [22]. (a) $P/P_C = 0.91$ (b) $P/P_C = 1.22$ (c) $P/P_C = 2.71$.

Les objectifs de ce chapitre sont :

1. La validation d'AVBP gaz réel décrite en Sec. 6.3.
2. L'étude de jets à haute pression :
   - la persistance ou non des propriétés de (pseudo-)similarités. Ce point est également étudié en Sec. 6.3. Des compléments sont donnés en Sec. 6.4
   - l'impact du fort gradient de densité initial sur la dynamique des jets. La dynamique le long du coeur potentiel, puis dans la région de transition est regardée en Sec. 6.5.

Les travaux ont donné lieu à une article préparation pour l'AIAA Journal, reproduit en Sec. 6.3 de manière intégrale. En premier lieu, une synthèse de la bibliographie utilisée pour cette étude est donnée en Sec. 6.2.

6.2 Bibliographie et méthodologie utilisée pour cette étude

L'objectif premier de ce travail est la validation d'AVBP gaz réel sur une configuration *a priori* plus simple qu'un cas réactif multi-espèces. Le choix s'est porté vers la simulation d'un jet axisymétrique à pression supercritique, configuration pour laquelle des expériences ont été

menées au DLR et à l'AFRL. La validation est réalisée dans un premier temps par comparaison avec les résultats expérimentaux à haute pression, puis en comparant le comportement des jets dans la zone auto-similaire (*i.e. en aval de l'injecteur*) avec des résultats expérimentaux à basse pression. Les résultats sont également comparés aux résultats numériques de Zong [165]. D'après l'auteur de cette thèse, ces calculs de jets ronds à pression supercritique, très semblables aux simulations de ce chapitre, sont les seuls disponibles dans la bibliographie.

Au DLR, Mayer *et al.* [88], Branam *et al.* [8] et Oschwald *et al.* [108, 105, 106] ont réalisé des mesures de profils de densité. A l'AFRL, Chehroudi *et al.* [22, 20] ont mesuré l'angle d'ouverture initial des jets. Dans les deux cas, le nombre de Reynolds ($Re_d = (\rho_{inj} u_{inj} d)/\mu$ >50 000) est suffisamment élevé pour que son influence sur les résultats soit faible et permette donc une comparaison entre les cas. Ce comportement est confirmé expérimentalement par Pitts [111] dans la région de similarité sur des jets à densité variable basse pression pour $Re > 4000$.
Les jets à haute pression (gaz réel) ont une forte variation de densité entre l'injection et le gaz ambiant $\rho_{inj}/\rho_\infty (> 1)$ (Tab. 6.1) et les expériences portent donc sur l'effet de ce paramètre sur les caractéristiques du jet. Les conditions de pression dans la chambre étant très élevées ($P \approx 40$ bar), les mesures actuelles sont limités au champ moyen de densité le long de l'axe central du jet et au taux d'expansion en densité. De plus, une forte variabilité entre les résultats rend plus délicate leur interprétation (Sec. 6.3). Ces données, associées à des analyses qualitatives de topologie de jet, permettent néanmoins d'offrir une validation partielle des jets simulés.

D'après Chen et Rodi [23], en aval de l'injecteur et après la région de transition, l'écoulement entre dans la zone similaire. Dans la simulation, il convient tout d'abord de s'assurer de l'existence d'une telle région, dans laquelle la décroissance de la vitesse et de la densité le long de l'axe central du jet deviennent linéaires (Sec. 6.3) et les profils normalisés de vitesse, de densité, de fluctuation de vitesse et de fluctuation de densité suivent alors un comportement similaire (Sec. 6.4). Dans la région auto-similaire, les taux d'expansion en densité et en vitesse sont quasi-indépendant de ρ_{inj}/ρ_∞ [23, 110, 62].

Ce comportement permet de comparer les simulations avec des jets axisymétriques turbulents à basse pression en région auto-similaire. Cette région se situe au moins à 20 diamètres d'injecteur en aval de l'injecteur et dans ces conditions la non-idéalité thermodynamique est réduite par le réchauffement du jet dense par le gaz ambiant. Utiliser des données obtenues à basse pression pour valider les calculs à haute pression dans cette région de l'écoulement est donc justifié.
Dans un premier temps, l'expansion en densité de jets ronds axisymétriques turbulents en fonction du rapport de densité est étudiée. Pour cela, les études de Pitts [110] et Richards *et al* [124] qui portent sur l'influence de la densité sur la région de similarité sont utilisés. Les rapports de densité sont complémentaires à ceux utilisés à haute pression (Tab. 6.1).
Il n'y a pas de mesures de vitesse dans Pitts [110] et Richards *et al* [124]. Les taux d'expansion en vitesse proviennent alors des mesures de jets à densité variable de Panchapakesan *et al* [109] (Tab. 6.1), Chassaing [17] et Amielh *et al.* [1]. Les résultats expérimentaux de Amielh *et al.* [1] correspondent aux cas de jets libres afin d'éviter toute influence du confinement.

Les comparaisons entre les données à haute pression, la topologie des jets simulés par rapport

aux images expérimentales à haute pression et les taux d'expansion par rapport à ceux de données à basse pression permettent de s'assurer de la qualité de la simulation.

Les résultats de jet isovolume de Hussein *et al.* [58] sont également utilisés pour les profils de vitesse et de fluctuation de vitesse dans la zone similaire (Sec. 6.4).

La décroissance de la vitesse et de la densité est ensuite normalisée par un diamètre effectif [23] pour étudier la validité de la pseudo-similarité lorsque les sauts de densité sont élevés, mais également pour pouvoir comparer les simulations avec les résultats numériques de Zong *et al.* [165] (Sec. 6.3).

L'étape suivante est l'analyse de la dynamique des jets (Sec. 6.5). L'objectif est de vérifier si le comportement général des simulations est en accord avec les nombreuses connaissances de la dynamique des jets axisymétriques de la littérature. Cela permet également d'avoir une vision globale de la dynamique de jets à densité variable.

Pour résumer, on se propose de valider le code pour un cas mono-espèce via :
- des comparaisons quantitatives avec les expériences à haute pression et le comportement dans la région auto-similaire.
- une analyse de la dynamique et des phénomènes physiques observés dans le calcul, qui comparés avec des informations de la bibliographie permettent une validation qualitative du comportement des jets.

Références expérimentales	S_ρ	$P>P_C$	ρ (ou Y)	u	ρ' (ou Y')	u'
Mayer *et al* [88] et Branam *et al* [8]	3 à 25	×	×			
Chehroudi *et al* [22, 20]	6 à 100	×				
Oschwald *et al* [106, 108, 105]	3 à 20	×	×			
Pitts *et al* [110] et Richards *et al* [124]	0,14 à 5		×		×	
Chassaing [17]	1,43 et 1		×	×		×
Hussein [58]	1			×		×
Panchapakesan [109]	0.14 et 1		×	×	×	×
Amielh *et al.* [1]	0.14, 1 et 1.4			×		×

TABLE 6.1 – Récapitulatif des expériences utilisées pour les validations et grandeurs mesurées dans chaque cas. $S_\rho = \rho_{inj}/\rho_\infty$ où ρ_{inj} est la densité à l'injection et ρ_∞ est la densité à l'infini. $P>P_C$ indique que l'expérience est réalisée à pression supercritique. Le symbole $'$ désigne la grandeur fluctuante.

6.3 Article en préparation pour l'AIAA journal

Large-Eddy Simulation of supercritical-pressure round jets.

T. Schmitt, L. Selle, A. Ruiz, B. Cuenot and T. Poinsot

May 21, 2009

Abstract

This paper presents the numerical computation of a turbulent jet of supercritical Nitrogen into ambiant Nitrogen. The solver uses the Large-Eddy Simulation (LES) technique for turbulence modeling and accounts for real-gas effects through a cubic equation of state and appropriate viscosity and conductivity coefficients. The purpose of this paper is to evaluate how low-pressure LES equations coupled with real-gas equation of state compare with experiments. Although this approach does not take into account all the complexity of diffusive transport at high pressure as well as the impact of high density gradients on turbulence subgrid models, the results show reasonable agreement with available experimental data and also reveal the importance of numerics for such computations.

1 Introduction

It has been known, since the famous cannon-barrel experiments of Baron Charles Cagniard de la Tour (1822) that above a certain temperature (T_c) and pressure (P_c), the discontinuity between gaseous and liquid phases disappears. The coordinates (P_c, T_c) define the **critical point**, that is the point above which the phase-change phenomenon no longer occurs. In such a thermodynamic state, talking about a gas or a liquid does not make sense any more. This state is therefore referred to as a *supercritical fluid* (SC fluid). The exact definition of a SC fluid is still a subject of controversy in the literature and this issue is not addressed here. However, from the standpoint of Computational Fluid Dynamics (CFD), as soon as departure from the perfect-gas (PG) law occurs, modifications must be made in numerical solvers.

Rocket engines were the first -and for a long time also virtually the only- thermal engines working under supercritical conditions. However, the need for higher efficiency and lower emission leads to increased pressure and temperature levels in other engines such as gas turbines, diesel piston engines and aeronautical turbines. Therefore, these industries are facing the scientific challenge of SC turbulent flows.

For a proper description of SC fluid dynamics, two major modifications must be made to the standard low-pressure Navier Stokes equations [1, 2, 3, 4]:

- An equation of state (EOS) that accounts for real-gas effects must be implemented,
- Transport models for mass and heat transfers must be modified.

Noteworthy, these models (EOS and transport) are to be made consistent through the appropriate thermodynamic relations.

The equation of state can be considered as the cornerstone of SC fluid modeling for it ensures the accuracy of the thermodynamics. Indeed, the density or the pressure dependence of the heat capacities are directly driven by the EOS. Another example is the computation of combustion instabilities, when the speed of sound results from the EOS and is a key parameter to the prediction of acoustic modes. From a practical point of view, the equation of state must compromise between accuracy and computational cost, and cubic equations of state are usually good candidates to this respect [5, 3].

Strong modifications of the transport properties also occur at supercritical pressure. Dynamic viscosity and thermal conductivity may be enhanced at supercritical pressure [5]. Soret and Dufour effects may become important and modeling mass diffusivity is much more arduous than for low pressure cases [6, 7].

The impact of thermodynamics in compressible (reactive) flows is so important that in principle all turbulence models should be revised. However, their adaptation to SC fluids is a virtually unexplored subject. Experimental observations of SC turbulent flows suggest a wealth of new flow structures compared to low-pressure gaseous-turbulence [8, 9]. For example, in SC jets comb-like structures develop on the edge of the jet that are unobserved at low pressure [10]. It has also been shown in numerical simulations that the high density gradient leads to a local reorganization of the turbulence [6, 11]. Consequently, from both phenomenological and theoretical perspectives, turbulence modeling should take into account the thermodynamic state of the fluid. However, only *a priori* studies are available at the moment [12] on this topic and current existing models used for perfect gas are still used.

Because of its uncontroversial success in quantitatively predicting flow features in both reacting and non reacting conditions, the Large-Eddy Simulation (LES) technique was chosen for this study.

The LES tool has already been used in the supercritical regime. Shear coaxial jet flames at supercritical pressure were investigated by Oefelein [13, 14], Matsuyama [15] and Tramecourt *et al.* [16].

In this paper, a three-dimensional LES of axisymetric jets at supercritical pressure is achieved. Similar calculations have been done by Zong [17] and Zong *et al* [18], who simulate two turbulent nitrogen jets initially at subcritical temperature injected into supercritical nitrogen with chamber pressures of 69 and 93 bar (for nitrogen, P_C =34 bar). Good agreements with Chehroudi *et al* correlation [10] (Eq. 20 in Sec. 7.3.1) were obtained considering the density spreading angle, whereas the centerline velocity decay is shown not to follow the pseudo-similarity laws of Chen and Rodi [19]. They also noticed that jets are surrounded by large density-gradient regions

stabilizing the jet evolution.

Here, two nitrogen jets, at a pressure of 40 bar, are considered. Contrary to Zong's simulation [17], the pressure is kept constant for both cases, but the injection temperature varies : one is close to the critical temperature, while the other is slightly higher. As a consequence, departure from the perfect gas thermodynamics behavior is limited in the latter case, while the first case is experiencing strong real gas effects. The main purpose of this paper is to evaluate how low-pressure LES equations coupled with real-gas equation of state compare with experiments. The behavior in the similarity region is also studied and compared to the pseudo-similarity law of Chen and Rodi [19].

This paper is organized as follows. In sections 2 and 3, the mathematical formulation for SC-LES is presented. First the equation of state is described, followed by the transport models and eventually the subgrid scale turbulence model. In section 4 some details about the numerics are offered. Then section 5 and 6 presents the configuration and the simulation and the comparison with experimental results is discussed in section 7.

2 Real-Gas Model

In this section, the equation of state (EOS) and the models for transport phenomena for super-critical flows are presented. When computing turbulent flows with the Large-Eddy Simulation (LES) methodology, a good compromise between accuracy and computational cost is seaken for. To this respect, cubic EOS are good candidates [5]. More precisely, the Peng-Robinson equation of state (PR EOS) was chosen for this work [20]:

$$P = \frac{\rho r T}{1-\rho b} - \frac{\rho^2 a(T)}{1+2\rho b-\rho^2 b^2} \tag{1}$$

where P is the pressure, T the temperature, ρ the density and $r = R/W$ with R being the perfect-gas constant and W the molar mass of the species considered. The coefficients $a(T)$ and b are defined as:

$$a(T) = 0.457236\frac{(rT_C)^2}{P_C}\left[1+c\left(1-\sqrt{\frac{T}{T_C}}\right)\right]^2 \tag{2}$$

$$b = 0.077796\frac{rT_C}{P_C} \tag{3}$$

where P_C is the critical pressure, T_C the critical temperature and the additional parameter c is defined as a function of the acentric factor ω by:

$$c = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \tag{4}$$

Equation 1 is then used for a consistent derivation of the pressure dependence of all thermodynamic coefficients and variables(heat capacities, compressibility, speed of sound, *etc.*), as

presented by Miller *et al.* [21]. The low-pressure reference state is taken from the JANAF Thermodynamical Tables [22].

The accuracy of this thermodynamic model is established on Fig. 1 by comparing the density ρ and the constant-pressure heat capacity C_p of nitrogen with data from the NIST database [23]. For this validation, the pressure is set to 40 bar and the temperature varies from 120 to 300 K (for nitrogen, $T_C = 126.2$ K and $P_C = 34.0$ bar), well covering the experimental conditions presented in Sec. 5. The relative error is less than 3% for the density and 10% for the heat capacity, except when crossing the pseudo-boiling temperature $T*$, the temperature at which the heat capacity at constant pressure is maximal (around 130 K), where the error locally increases to 5% for the density and 20% for the heat capacity.

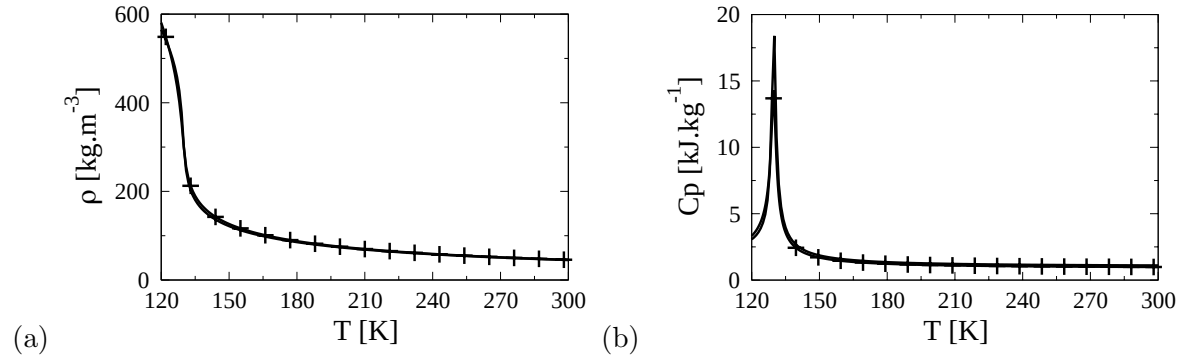


Figure 1: Validation of the EOS and thermodynamics: (a) density, (b) constant-pressure heat capacity. — NIST database [23]; −+− real-gas model, based on the PR EOS [20].

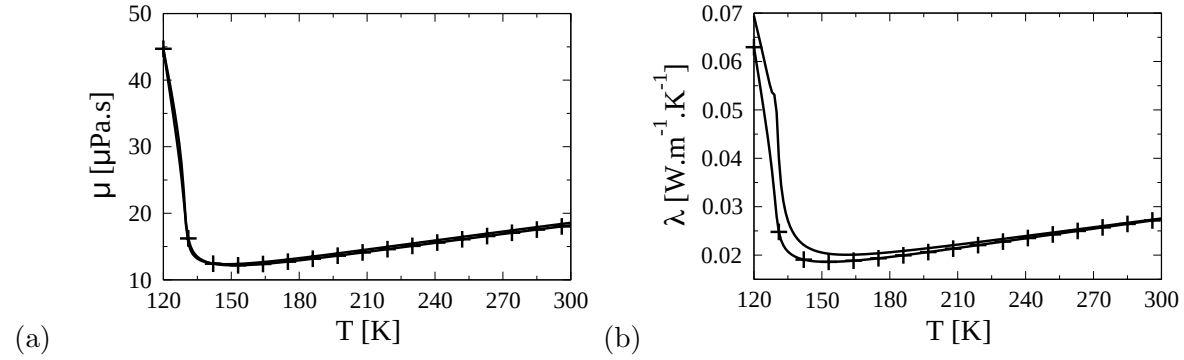
The fluctuation/dissipation theory [24] is the adequate framework for the description of transport phenomena under supercritical conditions. Miller, Harstad and Bellan [25, 26, 27] proposed a formulation consistent with kinetic theory at low-pressure, that serves as a baseline for this study. For the particular configuration considered in this work (Sec. 5), many simplifications can be made. Indeed, for single-species calculations, the only term that remains in the heat flux $\overrightarrow{q}$ is the classical Fickian contribution:

$$\overrightarrow{q} \quad = \lambda \overrightarrow{\nabla} T \tag{5}$$

where λ is the thermal conductivity.

The method proposed by Chung *et al.* [28] is used to compute the transport coefficients: the thermal conductivity λ and the dynamic viscosity μ. These coefficients compare favorably with the NIST database within the thermodynamic conditions of this study (Fig. 2).

Altogether, this model provides a correct quantitative evaluation of thermodynamic variables over a wide range of pressure (not shown here) and temperature. Noteworthy, it naturally degenerates towards perfect-gas values when pressure decreases.



(a) (b)

Figure 2: Transport coefficients: (a) viscosity, (b) thermal conductivity. — NIST database [23]; −+− Chung *et al.* [28].

3 Governing equations

3.1 Large-eddy simulation equations

The primitive variables for the description of a single-species continuum (gaseous, liquid or supercritical fluid) are: the density ρ, the velocity components u_i ($i \in [1,3]$), the pressure P and the temperature T. The total energy e_t is defined as $e_t = e + e_k$ where e is the internal energy and $e_k = u_i u_i/2$ is the kinetic energy. The vector of conservative variables is $\phi = (\rho, \rho u_i, \rho e_t)$. The methodology for deriving the LES equations is to apply a filtering operator, denoted $\bar{\bullet}$, onto the set of conservative equations. Then the filtered conservative variables vector is $\bar{\phi} = (\bar{\rho}, \overline{\rho u_i}, \overline{\rho e_t})$, which can also be written in terms of Favre-averaged variables: $\bar{\phi} = (\bar{\rho}, \bar{\rho}\tilde{u}_i, \bar{\rho}\tilde{e}_t)$. The appropriate set of equations for LES is then:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \tag{6}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho}\tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{7}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{e}_t\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P\tilde{u}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j(\bar{\phi})}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho}\zeta_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho}\tau_{ij}\tilde{u}_i}{\partial x_j} \tag{8}$$

where σ is the viscous-stress tensor:

$$\sigma_{ij} = 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}S_{kk}\delta_{ij}\right) \tag{9}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{10}$$

and the SGS contributions τ and ζ are defined as:

$$\tau_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j \tag{11}$$

$$\zeta_j = \widetilde{h u_j} - \tilde{h}\tilde{u}_j \tag{12}$$

3.2 Sub-grid scale models and assumptions

The closure of the Reynolds stress (Eq. 11) requires particular attention. Indeed, in order to compute LES of round jets, the sub-grid scale model should be able to limit dissipation in the pure shear zone, where the destabilization fluctuations are growing before leading to complete turbulence. For such configuration, the classical Smagorinsky model is known to be too dissipative. Thus, the WALE model [29] (Eq. 13), which has been designed to be less dissipative in pure shear zones by accounting for the rotational rate, is used in this study.

$$\nu^t = (C_w \triangle)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \qquad \text{with} \qquad s_{ij}^d = \frac{1}{2}\left(\widetilde{g}_{ij}^2 + \widetilde{g}_{ji}^2\right) - \frac{1}{3}\,\widetilde{g}_{kk}^2\,\delta_{ij} \tag{13}$$

where $C_w = 0.4929$ and $\widetilde{g}_{ij}$ is the irrotational part of the stress tensor :

$$\widetilde{g}_{ij} = \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \qquad \text{and} \qquad \widetilde{g}_{ij}^2 = \widetilde{g}_{ik}\widetilde{g}_{kj} \tag{14}$$

The SGS stress tensor is then:

$$\overline{\rho}\tau_{ij} \;=\; 2\overline{\rho}\nu^t\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}\right) \tag{15}$$

The SGS energy fluxes Eq. 12 are modeled using the gradient transport assumption :

$$\bar{\rho}\zeta_j \;=\; -\frac{\overline{\rho}\nu^t\overline{C_p}}{P_r^t}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \tag{16}$$

where P_r^t represents the turbulent Prandtl number, fixed here to 0.6.

4 Numerics

The unstructured explicit solver AVBP is used to compute the compressible Navier-Stokes equations for a multi-species gas [30]. A third-order (in time and space) low dissipative centered scheme [31] is used to obtain accurate turbulence intensities [32] [33]. Because of the high density gradients encountered in transcritical systems, artificial viscosity is used to avoid spurious oscillations [34]. Contrary to the original formulation of Jameson [34], the sensor is now density-based. Artificial dissipation procedure is adjusted to manage the real-gas non-linear relation between P, ρ and ρe_t in order to minimize the perturbation on pressure. On boundaries, characteristic wave decomposition is applied using the NSCBC method [35, 30], adapted to the real gas thermodynamics.

5 Flow configuration

The configuration is made of a single round jet injected into a cylindrical reservoir (Fig. 3) of diameter 122 mm, pressurized at 39.7 bar and with an initial temperature of 298 K. The diameter

of the injector is 2.2 mm. Experimental studies of this configuration have been performed by Mayer *et al.* [36]. Two cases are computed and presented in table 1.

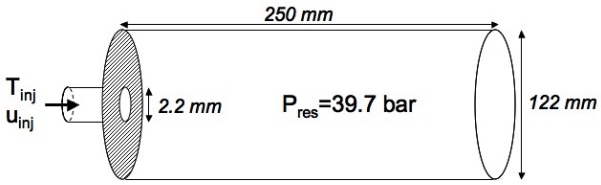


Figure 3: Sketch of the experiment.

Case	T_{inj} [K]	u_{inj} [m.s^{-1}]	T/T^*	$\frac{\rho_{inj}}{\rho_\infty}$	Re_{inj}
3	126.9	4.9	0.98	9.6	1.7 10^5
4	137	5.4	1.06	3.7	1.6 10^5

Table 1: Injection conditions.

In case 3, the injection temperature, $T_{inj,3} = 126.9$ K, is slightly below the pseudo-boiling temperature T^*. In this case, the reservoir pressure is 39.7 bar and the corresponding T^* is 129.5 K (Fig. 4). On the contrary, for case 4, the temperature $T_{inj,4} = 137$ K is slightly higher than T^*. Near the pseudo-boiling point, properties of the fluid are known to be strongly sensitive to the temperature [8] [37], so that, for case 3, the injection density $\rho_{inj,3} = 435$ kg.m^{-3}, is much higher than for case 4, $\rho_{inj,4} = 171$ kg.m^{-3}. The density in the reservoir is initially $\rho_\infty = 45.5$ kg.m^{-3}, leading to a strong density ratio between the jet and the ambient gas (ρ_{inj}/ρ_∞=9.6 for case 3 and ρ_{inj}/ρ_∞=3.7 for case 4).

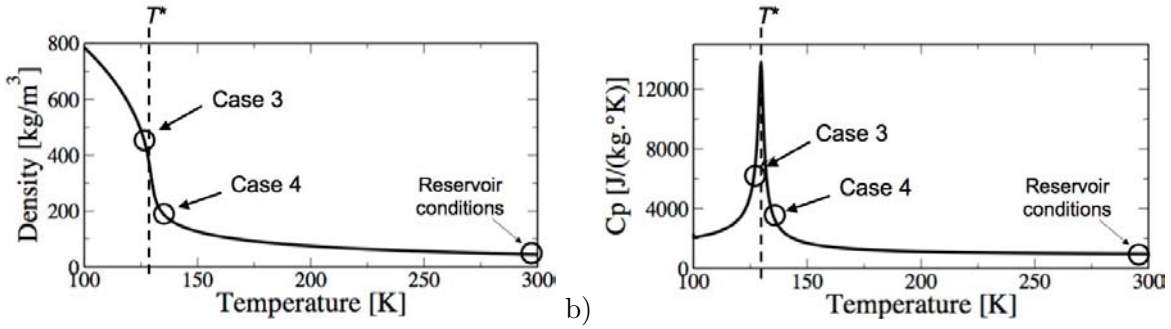
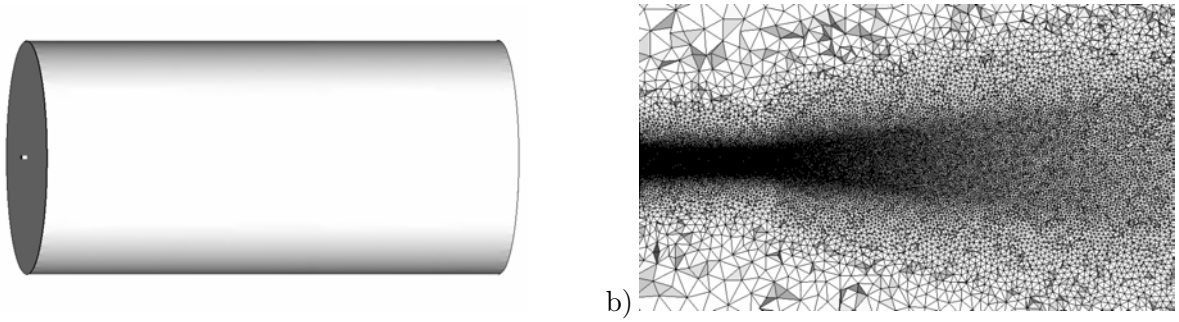


Figure 4: Density (a) and heat capacity (b) for both injection conditions.

Because of the strong variation of dynamic viscosity near the pseudo-boiling temperature (Fig. 2), the Reynolds numbers at injection Re_{inj} for cases 3 and 4 are very close.

6 Numerical setup : mesh and boundary conditions

The computational domain is shown Fig. 5 (a) and a cut of the mesh is displayed on Fig. 5 (b). The grid is refined near the injector, with a constant characteristic cell size of 0.1 mm over a length of almost 10 diameters. This zone is followed by a smooth coarsening region towards the exit. The mesh contains 950 000 points and 5 500 000 tetrahedra.



a) b)

Figure 5: View of the computational domain (a) and cut of the mesh on a length of 30 injector diameters (b)

Boundary conditions are sketched in Fig. 6. The pressure in the reservoir is maintained by a non-reflecting outlet with imposed pressure. The walls near the injector are considered adiabatic. Reservoir walls are isotherm, with an imposed temperature of 298 K. Velocity and temperature are imposed at the inlet. Turbulent perturbations are superposed to the mean flow at the inlet by using the procedure of Kraichnan/Celik [38] [39] with an intensity of 2.5 %.

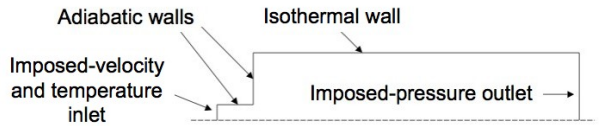


Figure 6: Sketch of the boundary conditions used in the present simulation.

7 Results and discussion

7.1 General features of the jets

Figure 7 shows two cuts in the median plane, for cases 3 and 4, of an instantaneous field of density. As presented in section 5, the injection density for case 3 is much higher than for case 4. In both cases, Kelvin-Helmoltz-like instability waves appear near the injector, perturbing the jet and leading to the first steps toward turbulence. After the end of the potential core (where density

keeps its initial value ; *i.e.* close to the injector), dense stretched pockets are ejected from the central core in case 3. This feature is not noticeable in case 4, where the high density pockets rapidly dissolve in the ambient gas. This seems to indicate a much more efficient mixing in the transition region for case 4 than for case 3.
Shadowgraphs are reconstructed on Fig. 8 by integrating normal density gradients along the line of sight. The same characteristics observed by Mayer *et al.* [36], are found. Both jets are initially surrounded by large density gradients, which are still present at the end of the visualization region for case 3, whereas they are quickly dissolved in ambient gas in case 4. The "intact core" lengths (*i.e.* the whiter region in the center of the jet, associated with high-density fluid), are in good qualitative agreement from experimental pictures.



Figure 7: Cuts in the median plane of density in the near injector zone (30 diameters). Black: injection density ; White: reservoir density.

The center-line density is compared with experimental results of Mayer *et al.* [36] obtained with 2D Raman imaging on Fig. 9. Results agree fairly well with experiments for case 3, where the differences in the potential core zone for case 3 is due to a systematic under-estimation of the density by the Raman imaging when density is very high (Mayer *et al.* [36]). Case 4 shows more important discrepancies with experimental results. One possible explanation comes from the strong uncertainty on the injection temperature [9]. Another explanation may be found in the increased errors linked to the lowered Raman signal for lower density ratio [40]. The latter point is discussed in sections 7.3.1 and 7.3.2.

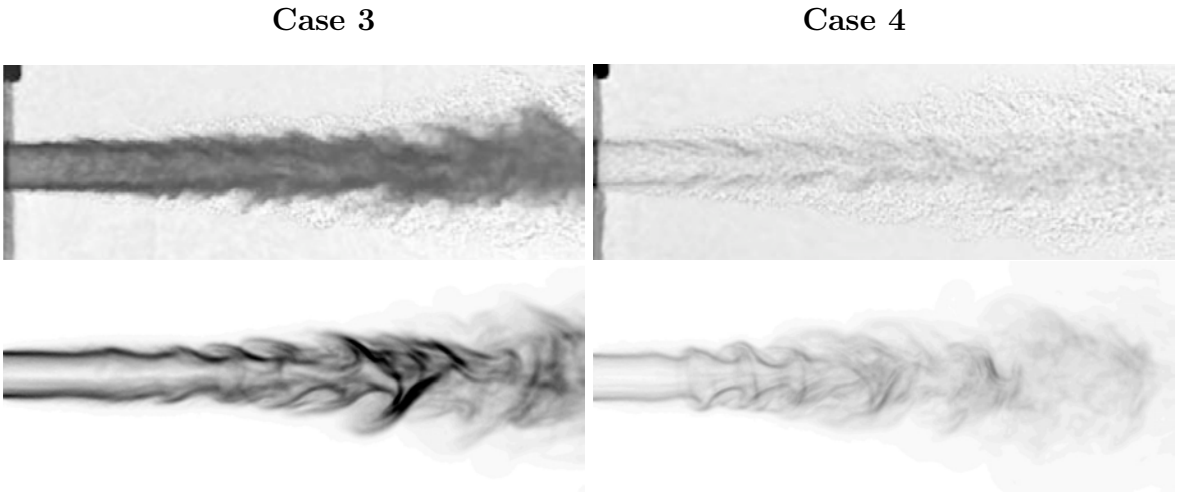


Figure 8: Top: Shadowgraphs from Mayer *et al.* [36] for cases 3 and 4. Bottom: Numerically reconstructed shadowgraphs of cases 3 and 4, over a distance of 12 injector diameters.

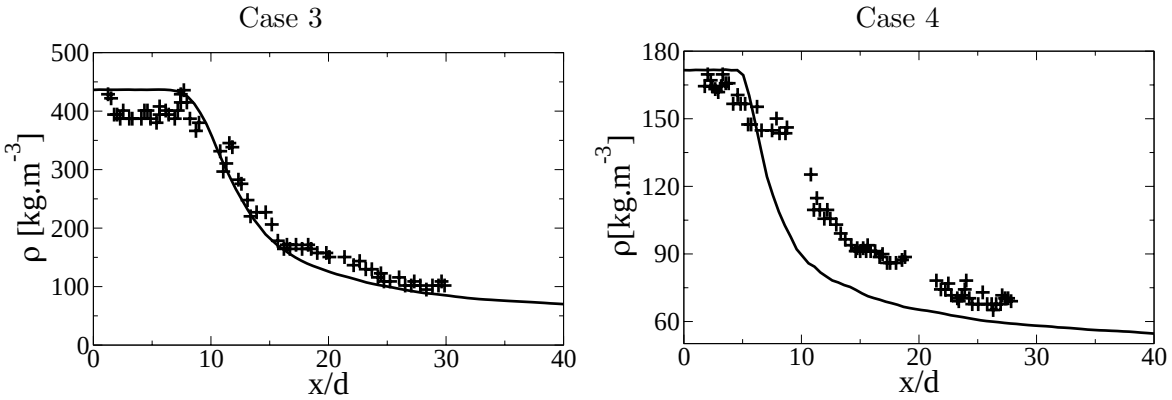


Figure 9: Comparison between experiments and LES of the center-line density vs normalized distance from the injector. — LES ; + Mayer *et al.* [36]

7.2 Normalized center-line profiles

Fig. 10 shows normalized density ρ^* and temperature T along the center-line of the jet:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_\infty}{\rho_{inj} - \rho_\infty} \tag{17}$$

with ρ_∞ being the reservoir initial density. Using Fig. 10 (left), the potential core length (taken

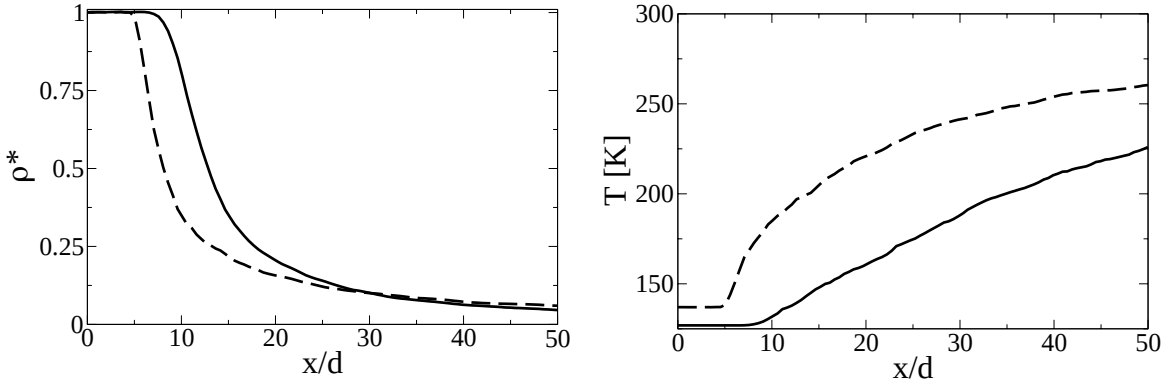


Figure 10: Normalized density ρ^* (Eq. 17) and temperature T^* along the center-line of the jet. — Case 3 (ρ_{inj}/ρ_∞=9.6) ; − − case 4 (ρ_{inj}/ρ_∞=3.7).

at 99 % of the injection density) is found to be 7.9 diameters for case 3 and falls to 5.1 diameters for case 4. Strong effects of real gas thermodynamics are noticeable in the temperature profile for case 3 (Fig. 10, right), that obviously does not follow the perfect-gas linear relation with density. Contrary to case 4, the injection temperature for case 3 is lower than T^* (Fig. 4). As already mentioned by Oschwald *et al.* [40], when the temperature is close to T^*, heat is mainly used for fluid expansion rather than temperature change, as C_p is maximum. This process is comparable to evaporation of a liquid at the boiling point. Thanks to mixing, the fluid in case 3 reaches the pseudo-boiling temperature (Fig. 11), and the heat needed for temperature change is high compared to case 4 or perfect-gas case. Although the difference between the injection temperature of case 3 and case 4 is only 10 K, strongly different behaviors are observed, both in terms of potential core length and temperature. This highlights the extreme sensitivity of the flow to the injection temperature in the vicinity of the pseudo-boiling point. As outlined by Branam and Mayer [9], this particular feature is an additional source of experimental error.

7.3 Spreading rates

7.3.1 Density spreading rates

The spreading angle is a key feature to characterize a jet. Two angles have to be distinguished: θ_{HWHM}, measured in the self-similar region (Fig. 12), and θ_{vis}, the visual initial spreading

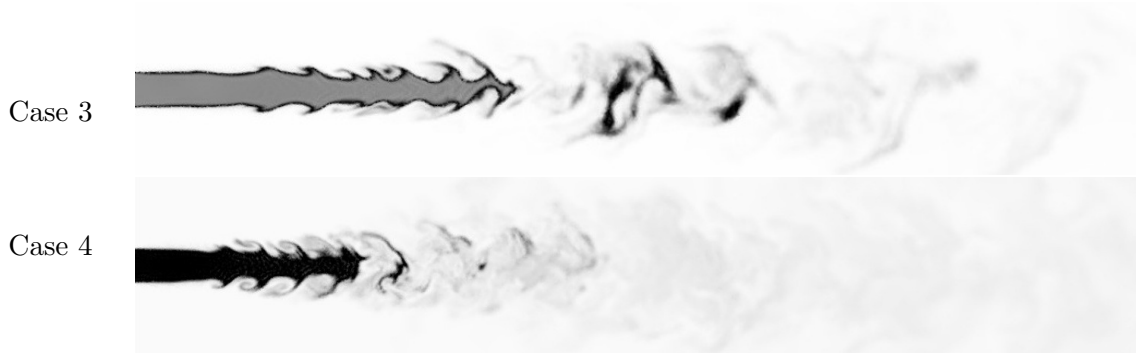


Figure 11: Cuts of heat capacity at constant pressure Cp in the near injector zone (30 diameters). Black: maximum value reached during computation (14.4 $kJ/(K.kg)$ for case 3 and 3.0 $kJ/(K.kg)$ for case 4) ; White : minimum value (1.1 $kJ/(K.kg)$).

angle, measured from the injector exit lips (Fig. 14).

The spreading angle θ_{HWHM} is sketched in Fig. 12 and is obtained using the slope of the Half Width Half Max (HWHM) L_ρ of the density profile in the self-similar region. This is the method employed to calculate spreading angle in experiments when Raman scattering, proportional to density, is used [9] [40]. As shown in Fig. 13 (a), for both cases the HWHM of density L_ρ follows a linear increase after the potential core. This was also experimentally observed by Oschwald *et al.* [41]. For $x > 15d$, the HWHM of density L_ρ may be expressed as a linear function of the axial distance:

$$L_\rho \quad = \quad E_\rho^{HWHM} \left(x - x_{0,L_\rho} \right) \tag{18}$$

where x is the stream-wise coordinate, x_{0,L_ρ} is called the virtual origin and is mainly linked to the potential core length, and the density spreading rate E_ρ^{HWHM} is introduced. This last quantity is directly linked to the density spreading angle θ_{HWHM} as $E_\rho^{HWHM} = \tan(\theta_{HWHM})$. Chen and Rodi [19] indicate that the spreading rate should be only weakly dependent of the initial density ratio, and a spreading rate of 0.11 is suggested. This behavior was highlighted by Richards *et al.* [42] for low-pressure variable-density round jets.

Fig. 13 (b) shows spreading-rates plotted against the density ratio ρ_{inj}/ρ_∞ from the current simulations and the high-pressure spreading-rate measurements coming from Mayer *et al.* [36] and Oschwald *et al.* [8]. Experimental results from Mayer *et al.* [36] being strongly scattered, the data are not used for the present discussion. Numerical results for case 3 are in very good agreement with the results of Oschwald *et al.* [8], while an under-estimation of 22 % of E_ρ^{HWHM} is noticeable for case 4. Data is completed for low density ratio with low-pressure variable-density measurements from Richards *et al.* and their extensive review (only data prior to 1982 are used) [42]. Zong [18] performed the simulation of 2 real-gas variable-density round jets with density ratio of 7.8 and 6. His results are also reported on Fig. 13 (b) and are found to be close

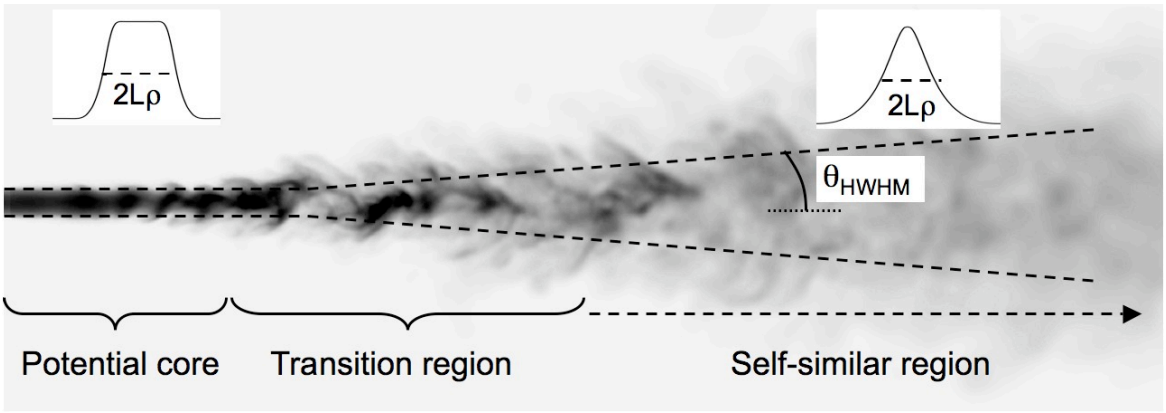


Figure 12: Schematic representation of the spreading rate based on the density Half Width Half Max (HWHM).

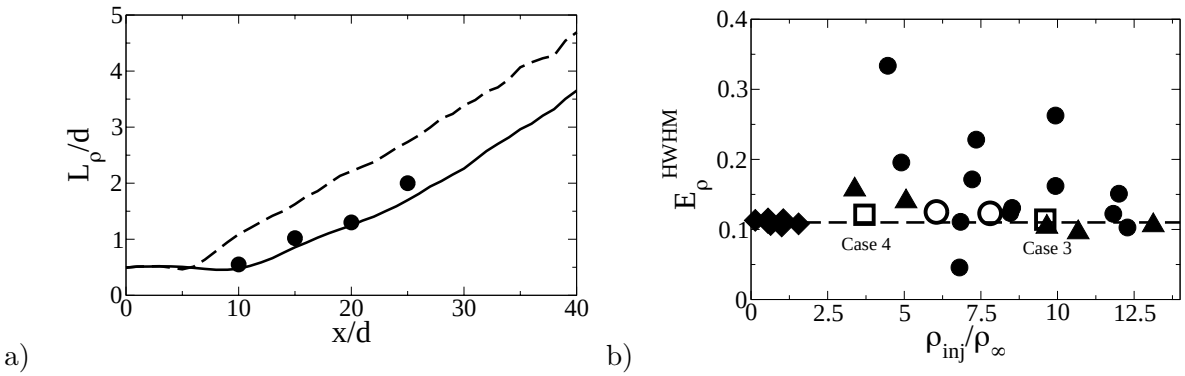


Figure 13: (a) Half Width Half Max (HWHM) of density L_ρ as a function of the distance from the injector x/d. — Case 3 ; − − Case 4 ; • Experimental results of Mayer *et al.* [36] for case 3. (b) Density spreading rate from HWHM measurements. • Mayer *et al.* [36] ; ▲ Oschwald and Micci [41] ; ♦ Richards *et al.* [42] (low pressure experiment) ; − − Chen and Rodi [19] (0.11) ; ○ Real-gas LES results of Zong [17] ; □ Current simulations.

to those of the current study. Interestingly, both the numerical results and the experimental results, follow the trend suggested by Chen and Rodi [19].

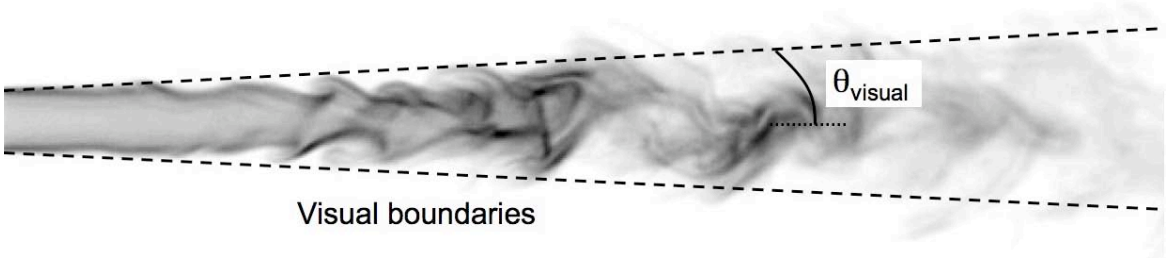


Figure 14: Schematic representation of the spreading rate based on density gradient (Shadowgraph), using Raman scattering.

Shadowgraphs are sensitive to density gradients, and allow to mesure the initial visual spreading angle θ_{vis} by drawing a line from the injector lip to the "outer most observable extent of the jet" [10] (Fig. 14). Contrary to Raman scattering (Fig. 12), shadowgraphs indicate the initial growth rate of the jet [8]. Shadowgraphs have been numerically reconstructed. To obtain the initial visual spreading rate $E_\rho^{vis} = \tan(\theta_{vis})$, the same methodology as in Chehroudi *et al.* [43] is used, based on the visible contour of the averaged density gradient field over a distance of 20 injector diameters. Unfortunately, this methodology is very sensitive to the cut-off density gradient (*i.e.* the minimum visible density gradient) and the result is only qualitative. Here, two thresholds have been tested: $\|\overrightarrow{\nabla}\rho\|_1^{min} = 10^4 kg.m^{-4}$ and $\|\overrightarrow{\nabla}\rho\|_2^{min} = 5000 kg.m^{-4}$. The maximum density gradient in case 3 is $\approx 2.10^6 kg.m^{-4}$ and $\approx 7.10^5 kg.m^{-4}$ in case 4. Results are reported on Fig. 15 (blanked circles) and good agreement is found for case 3.

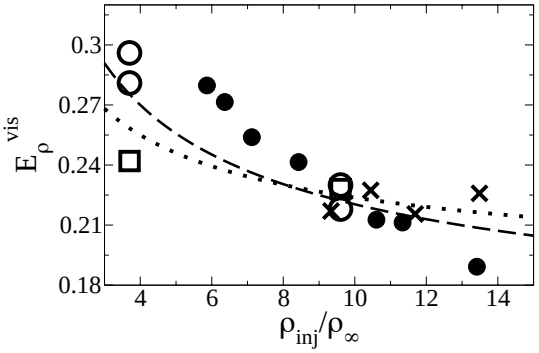


Figure 15: Visual spreading rate as a function of the density ratio. $--$ Chehroudi *et al.* [43] ; $\cdots$ Papamoschou and Roshko [44]. • Chehroudi *et al.* [10] for LN_2/N_2 ; × Chehroudi *et al.* [10] for LO_2/N_2 ; □ current results ($2E_{HWHM}$) ; ◯ current results (visual spreading rate from numerically reconstructed shadowgraphs) .

Case	Chehroudi *et al* [43]	Papamoschou *et al* [44]	$E^{vis}_{\rho,1}$	$E^{vis}_{\rho,2}$	$2E_{HWHM}$
3	0.222	0.225	0.22	0.23	0.227
4	0.275	0.258	0.28	0.30	0.241

Table 2: Visual spreading rate taken from twice the HWHM, $2E_{HWHM}$, or obtained from numerical reconstruction of the visual initial boundaries ($E_{vis,1}$: cut-off=10^4 kg.m^{-4}, $E_{vis,1}$: cut-off=5 000 kg.m^{-4}) and comparison with Chehroudi's [43] and Papamoschou's [44] models.

LES results, $E^{vis}_{\rho,1}$ and $E^{vis}_{\rho,2}$ for $\|\overrightarrow{\nabla}\rho\|_1^{min}$ and $\|\overrightarrow{\nabla}\rho\|_2^{min}$, respectively, are also compared with Papamoschou and Roshko's formulation [44] (Eq. 19) for incompressible variable-density mixing layers (the constant 0.17 in Eq. 19 was obtained experimentally from Brown and Roshko [45]) and the formulation of Chehroudi *et al.* [43] (Eq. 20) fitted on high-pressure round jets (both plotted on Fig. 15, dotted and dashed lines), which express the initial visual growth rate in terms of density ratio. Eqs. 19 and 20 are valid for no co-flow ($u_\infty = 0$). Results are given in Tab. 2. In both cases 3 and 4, the E^{vis}_ρ numerically reconstructed agree remarkably well with Chehroudi's formulation [43], and are in overall good agreement with Papamoshou et al. theory [44].

$$E^{vis}_\rho = 0.17\left(1+\left(\frac{\rho_\infty}{\rho_{inj}}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \tag{19}$$

$$E^{vis}_\rho = 0.27\left(0.5+\left(\frac{\rho_\infty}{\rho_{inj}}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \tag{20}$$

Chehroudi *et al.* [43] suggested that taking twice the HWHM value leads to the shadowgraph value. Visual spreading rates obtained using twice the HWHM are plotted on Fig. 15 (blanked squares). Case 3 accurately matches the experimental values of Chehroudi *et al.* [10], who effectively reported a good correspondence between E^{vis}_ρ and $2E_{HWHM}$ has been reported for $\rho_{inj}/\rho_\infty > 6$. This is not true for case 4 where $\rho_{inj}/\rho_\infty < 6$ and $E_{vis} \neq 2E_{HWHM}$.

7.3.2 Velocity spreading rate

The same methodology is now used to compute the spreading rate of velocity in the similarity region. The HWHM of velocity L_u is written in terms of velocity spreading rate E_u:

$$L_u = E_u\,(x - x_{0,L_u}) \tag{21}$$

where x_{0,L_u} is the virtual origin. The HWHM of velocity is plotted in Fig. 16. The velocity spreading-rates are computed for $15d < x < 35d$. Spreading rate of velocity were not available from Mayer *et al.* [36], and other round jet experiments at low pressure [46] [47] [48] [49] are used for comparison (summarized in Tab. 3).The spreading rates of velocity is in good agreement with experiments for which $\rho_{inj}/\rho_\infty > 1$ and is found to be only weakly dependent on the density ratio.

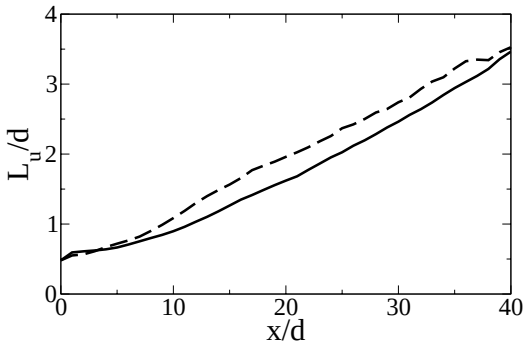


Figure 16: Half Width Half Max (HWHM) of velocity L_u as a function of the distance from the injector x/d. — Case 3 ; − − Case 4.

Sources	[46] [47]	[49] [48] [46] [47]	[49]	Current simulation	Current simulation
ρ_{inj}/ρ_∞	0.14	1	1.54	3.7	9.6
E_u	0.109, 0.116	0.088 - 0.096	0.085	0.080	0.090

Table 3: Spreading rates of velocity E_u in terms of density ratio and comparison with available data for variable density jets from literature [46] [47] [49] [48].

7.4 Pseudo-similarity

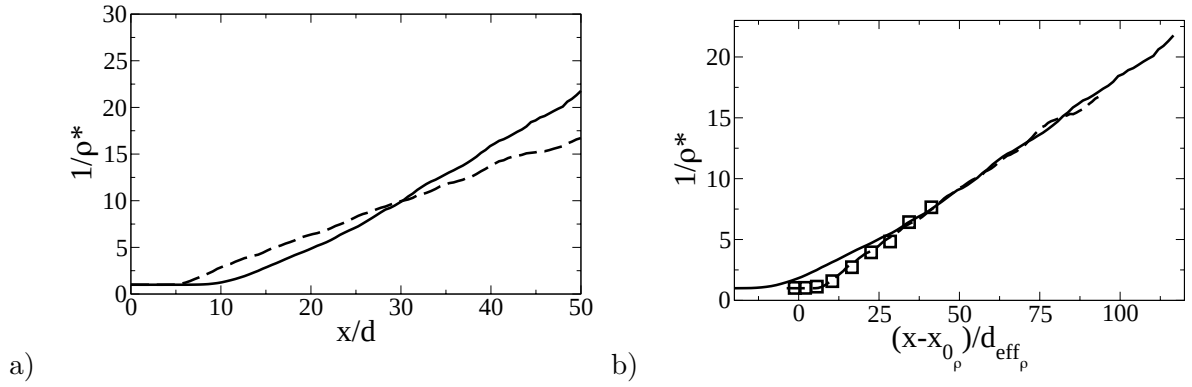
7.4.1 Center-line density decay

Fig. 17 (a) shows the inverse of the normalized density $1/\rho^*$ (Eq. 17) along the center-line of the jet. After the potential core, the quantity $(\rho^*)^{-1}$ follows a linear evolution. Introducing the effective diameter for density (Eq. 22) [19], the inverse normalized density may be written as:

$$\frac{1}{\rho^*} = K_\rho \frac{x - x_{0_\rho}}{d_{eff_\rho}} \qquad \text{with} \qquad d_{eff_\rho} = d\sqrt{\rho_\infty/\rho_{inj}} \tag{22}$$

where x_{0_ρ} is the virtual origin. K_ρ is the density decay rate. Fig. 17 (b) plots the normalized density versus the normalized distance for cases 3 and 4, compared to other results from the literature.

The two curves of cases 3 and 4 merge after $x > 25d$, showing that pseudo-similarity is recovered in the calculation. The rate is found to be $K_\rho = 0.183$. Experimental results of Chassaing [49] from a air/CO_2 variable density turbulent round jet (ρ_{inj}/ρ_∞=1.42) indicated in Fig. 17 (b) and are in good agreement with case 4 in the transition region (before the linear evolution). In case 3, the final linear evolution is obtained only for $x > 25d$, which seems to indicate a much longer transition region. It leads to a large value of the virtual origin when



a) b)

Figure 17: (a) inverse of the normalized density $(\rho^*)^{-1}$ (Eq. 17) along the jet center-line. (b) inverse of the normalized density $(\rho^*)^{-1}$ in terms of distance from injector normalized by the effective diameter $d_{eff} = d\sqrt{\rho_\infty/\rho_{inj}}$ (Eq. 22). — ρ_{inj}/ρ_∞=9.6: case 3 ; − − ρ_{inj}/ρ_∞=3.7: case 4 ; □ ρ_{inj}/ρ_∞=1.42: Chassaing [49].

compared to other cases ($x_{0_\rho} \approx 12d$ for case 3 while $x_{0_\rho} \approx 3.5d$ and $x_{0_\rho} \approx 4.5d$ for case 4 and Chassaing [49]). This point is discussed in Sec. 7.5.
LES values of K_ρ are compared on Fig. 18 to high pressure data from Oschwald *et al.* [41] and low pressure measurement from Pitts [50]. Case 3 ($\rho_{inj}/\rho_\infty \approx 10$) is close to Oschwald *et al.* [41] results, whereas case 4 ($\rho_{inj}/\rho_\infty \approx 3.7$) shows a better agreement with the measurements of Pitts [50]. As for the spreading rate of density, there is a strong disagreement between simulation and experiments for case 4 when Raman scattering is used. With $K_\rho = 0.183$, both cases 3 and 4 are close to the value $K_\rho = 0.2$ suggested by Chen and Rodi [19].

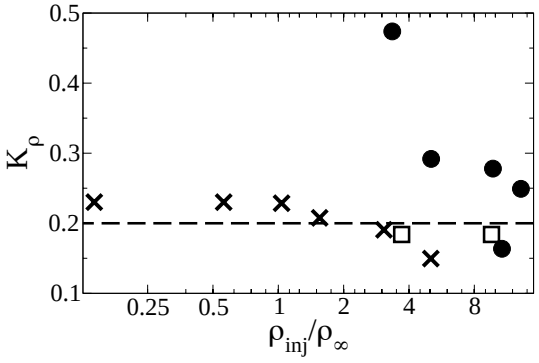


Figure 18: Density decay coefficient K_ρ versus density ratio. − − Chen and Rodi (0.2) ; □ current simulations ; • Oschwald *et al.* [41] (Raman) ; × Pitts [50] (low pressure measurements).

7.4.2 Center-line velocity decay

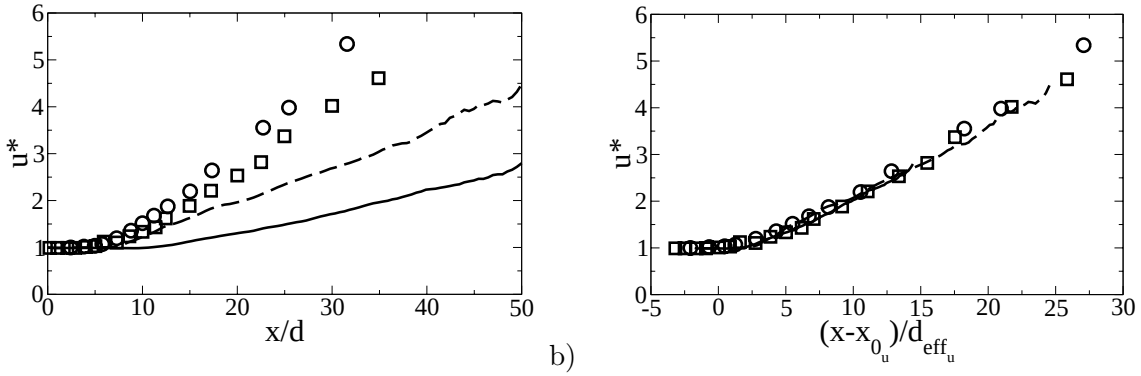
The normalized axial velocity u^* (Eq. 23) along the center-line of the jet is plotted on Fig. 19.

$$u^* = \frac{u_{inj}}{u_c} \tag{23}$$

where u_c is the center-line axial velocity. Experimental result of Chassaing [49] for axi-symmetric jets, with $\rho_{inj}/\rho_\infty = 1$ and $\rho_{inj}/\rho_\infty = 1.43$, are also plotted on Fig. 19 for qualitative comparison. Fig. 19 (a) shows that the velocity decay is lowered when the density ratio ρ_{inj}/ρ_∞ is increased. Fig. 19 (b) presents the normalized velocity u^* along the center-line versus the distance from the injector normalized by the effective injector diameter suggested by Chen and Rodi [19]. The pseudo-similarity law of Chen and Rodi [19] writes:

$$u^* = K_u \frac{x - x_{0_u}}{d_{eff_u}} \qquad \text{with} \qquad d_{eff_u} = d\sqrt{\rho_{inj}/\rho_\infty} \tag{24}$$

where K_u is the velocity decay rate. Eq. 24 indicates that, when written in terms of effective diameter, independently of the ratio ρ_{inj}/ρ_∞ the velocity decay u^* always follows the same slope in the pseudo-similarity region. This behavior is qualitatively recovered in Fig. 19 (b). The virtual origins x_{0_u} are respectively equal to 5.4d, 2.42d, 4.0d and 4.5d for case 3, case 4, ρ_{inj}/ρ_∞=1.43 [49] and ρ_{inj}/ρ_∞=1 [49]. Tab. 4 compares simulation results with other available values for K_u. Based on literature review, Chen & Rodi [19] indicate a value of 0.161 for K_u. Simulation results are globally in good agreement with experimental results.



a) b)

Figure 19: (a) normalized velocity u^* (Eq. 23) along the jet center-line. (b) velocity decay u^* in terms of distance from injector normalized by the effective diameter d_{eff_u}. — ρ_{inj}/ρ_∞=9.6: case 3 ; − − ρ_{inj}/ρ_∞=3.7: case 4 ; □ ρ_{inj}/ρ_∞=1.43: Chassaing [49] ; ∘ ρ_{inj}/ρ_∞=1: Chassaing [49].

ρ_{inj}/ρ_∞	0.14 [47]	1 [49] [48] [47]	1.43 [49]	3.7 (*)	9.6 (*)
K_u	0.153	0.165 - 0.193	0.183	0.160	0.150

Table 4: Velocity decay rate K_u in terms of density ratio and comparison with available data for variable density jet from literature [47] [49] [48]. (*) current simulation.

7.5 Centerline density fluctuations

Fig. 20 (a) plots the centerline normalized density root-mean-square (rms) fluctuations $\rho^{+\prime}$, where $\rho^+ = (\rho - \rho_\infty)/(< \rho_c > -\rho_\infty)$ ($< \bullet >$ is the temporal averaging operator). The initial increase of fluctuating density is faster for case 4 than for case 3. Case 4 reaches a maximum value for $x \approx 8d$ while the maximum is reached at $x \approx 15d$ for case 3. The subsequent decrease does not present the same shape in both case. While case 4 shows a cubic shape and reaches the asymptotic range suggested by Chen and Rodi (0.21-0.24) for $x > 25d$, the decrease in case 3 is more linear and the asymptotic value is not reached at the end of the region of interest. This difference is highlighted by the high value of the turbulent mass flux $< \rho^+ u' > / < u >$ observed in case 3, when compared to case 4 (Fig. 20 (b)). In case 3, large pockets of high density fluid are ejected from the initial dense core (see Fig. 7), while they rapidly dissolve in the light gas in case 4. This could explain the different trend observed for both cases for the centerline density profile before similarity in Fig. 17 (b). It is tempting to link the existence of such dense gas pockets to the strong non-ideality of the enthalpy of case 3 (Figs. 4 and 11), which means that density pockets require much more energy to be heated (and thus dissolved) than in case 4. Further investigations are needed to conclude on this particular point.

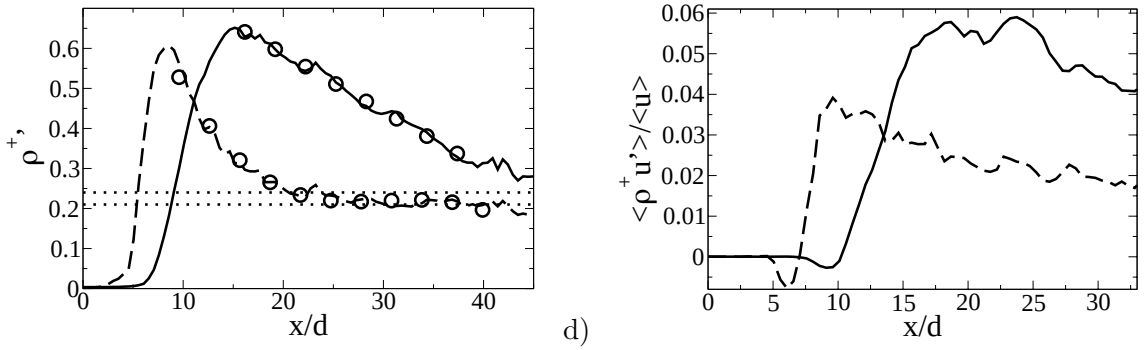


Figure 20: — case 3 ; − − case 4.
(a) Centerline density rms fluctuations $\rho^{+\prime}(\equiv < (\rho^{+\prime})^2 >^{0.5})$. · · · Asymptotic range suggested by Chen and Rodi [19] ; ∘ curve fitting : linear for case 3 and cubic for case 4.
(b) Centerline turbulent mass flux $< \rho^+ u' > / < u >$.

Fig. 21 compares transverse profiles of density fluctuations at different axial locations with

experiment from a air/He turbulent variable density round jet from Panchapakesan *et al.* [47] ($\rho_{inj}/\rho_\infty = 0.14$). Case 4 shows good agreement, while case 3 is still far from self-similarity. The latter result is consistent with Fig. 20 (a).

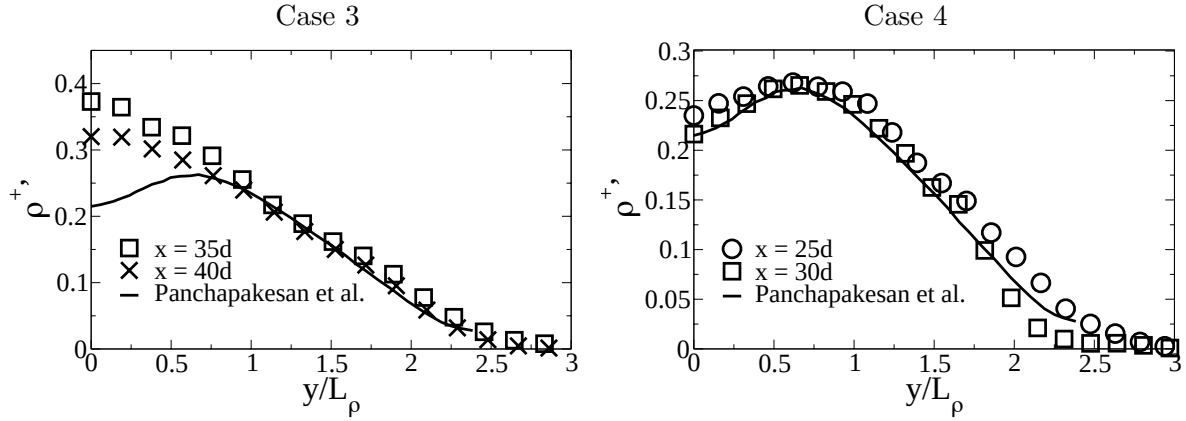


Figure 21: Radial profiles of density fluctuations $\rho^{+\prime}$ and comparison with similarity profile from [47].

8 Conclusions

The simulation of two round-jet configurations at supercritical pressure of Mayer *et al.* [36] (cases 3 and 4) have been performed with the LES solver AVBP. This solver has been updated to handle supercritical thermodynamics by including the Peng-Robinson equation of state [20] and appropriate transport coefficients using the Chung *et al.* method [28]. Case 3 is injected below the pseudo-boiling temperature T^* and presents a higher density ratio with ambient gas than case 4 injected at a temperature higher than T^*.

Density spreading rate and density profile along the jet centerline form simulations agree with high-pressure experiments. Interestingly, the pseudo-similarity laws are recovered in the similarity region, and are in good agreement with low-pressure experiments, indicating that the jet behavior in this region is close to that of a perfect gas.

Nevertheless, in case 3, dynamics are characterized by large density pockets, that emerge from the dense potential core, while they rapidly dissolve in ambient gases in case 4. These pockets notably lengthen the transition region in case 3, and unusual density fluctuations are still observable after 40 injector diameters. The disappearance of the high density structures is slowed down in case 3 when compared to case 4, a behavior which seems to differ from a low pressure case.

References

[1] H. Meng and V. Yang. A unified treatment of general fluid thermodynamics and its application to a preconditioning scheme. *Journal of Computational Physics*, 189:277–304, 2003.

[2] J. Bellan. Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26:329–366, 2000.

[3] J. C. Oefelein and V. Yang. Modeling high-pressured mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *Journal of Propulsion and Power*, 14:843, 1998.

[4] V. Yang. Modeling of supercritical vaporization, mixing and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. In *Proceeding of the Combustion Institute*, 2000.

[5] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O'Connel. *The properties of gases and liquids.* McGraw-Hill, fifth edition, 2001.

[6] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combustion Science and Technology*, 178:253–281, 2006.

[7] K. Harstad and J. Bellan. High-pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applicaions. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43:645–654, 2004.

[8] M. Oschwald, J. J. Smith, R. Branam, J. Hussong, A. Shick, B. Chehroudi, and D. Talley. Injection of fluids into supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178:49–100, 2006.

[9] R. Branam and W. Mayer. Characterisation of cryogenic injection at supercritical pressure. *Journal of Propulsion and Power*, 19(3):342–355, May-June 2003.

[10] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy. Visual characteristics and initial growth rate of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures. *Physics of Fluids*, 14(2):850–861, february 2002.

[11] N. Zong, H. Meng, S.-Y. Hsieh, and V. Yang. A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. *Physics of Fluids*, 16(12):4248–4261, 2004.

[12] L. C. Selle, N. A. Okong'o, J. Bellan, and K. G. Harstad. Modelling of subgrid-scale phenomena in supercritical transitional mixing layers: an *a priori* study. *Journal of Fluid Mechanics*, 593:57–91, 2007.

[13] J. C. Oefelein. Thermophysical characteristics of shear-coaxial lox-h2 flames at supercritical pressure. In *Proceeding of the Combustion Institute*, number 30, 2005.

[14] J. Oefelein. Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178(1-3):229–252, 2006.

[15] S. Matsuyama, J. Shinjo, Y. Mizobuchi, and S. Ogawa. A numerical investigation on shear coaxial lox/gh2 jet flame at supercritical pressure. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeeting and Exhibit, Reno, Nevada*, 2006.

[16] N. Tramecourt, S. Menon, M. Lal, and J. Amaya. Controllable atomization for supercritical combustion: A combined experimental and numerical study. Technical report, Georgia Institute of Technology, CCL report 2004-011, 2004.

[17] N. Zong. *Modeling and simulation of cryogenic fluid injection and mixing dynamics under supercritical conditions*. PhD thesis, Departemet of Mechanical and Nuclear Engineering, Pennsylvania State University, 2005.

[18] N. Zong and V. Yang. Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178:193–227, 2006.

[19] C. J. Chen and W. Rodi. *Vertical turbulent buoyant jets: A review of experimental data*. Pergamon Press, 1980.

[20] D. B. Robinson and D. Peng. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15:59–64, 1976.

[21] R. S. Miller, K. G. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulation of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen. *Journal of Fluid Mechanics*, 436:1–39, 2001.

[22] D. R. Stull and H. Prophet. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Technical Report NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.

[23] *http://webbook.nist.gov*.

[24] J. Keizer. *Statistical Thermodynamics of Nonequilibrium Processes*. Springer Verlag, 1987.

[25] R. S. Miller, K. Harstad, and J. Bellan. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(6):1025–1055, 1998.

[26] J. Bellan K. Harstad. The lewis number under supercritical conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(6):961–970, 1999.

[27] J. Bellan K. Harstad. An all-pressure fluid drop model applied to a bianry mixture: heptane in nitrogen. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(10):1675–1706, October 2000.

[28] T. H. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee, and K. E. Starling. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 27(4):671–679, 1988.

[29] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3):183–200, 1999. JX.

[30] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics*, 202(2):710–736, 2005.

[31] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 162(2):338–371, 2000.

[32] A. G. Kravchenko and P. Moin. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 131:310–322, 1996.

[33] J. Gullbrand and F. K. Chow. The effect of numerical errors of turbulence models in large eddy simulations of channel flow, with and without explicit filtering. *Journal of Fluid Mechanics*, 495:323–341, 2003.

[34] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.

[35] T. Poinsot and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1):104–129, 1992.

[36] W. Mayer, J. Tellar, R. Branam, G. Schneider, and J. Hussong. Raman measurement of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39:709–719, 2003.

[37] J. Hirschfelder, C. Curtis, and B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, 1954 edition, 1954.

[38] R.H. Kraichnan. Diffusion by a random velocity field. *Physics of Fluids*, 13:22–31, 1970.

[39] A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *Trans. ASME. Journal of Fluids Engineering*, 123:359–371, 2001.

[40] M. Oschwald. Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous raman scattering. *Experiments in Fluids*, 27:497–506, 1999.

[41] M. Oschwald and M. M. Micci. Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atomization and Sprays*, 11:91–106, 2002.

[42] C. D. Richards and W. M. Pitts. Global density effects on the self-preservation behavior of turbulent free jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 254:417–435, 1993.

[43] B. Chehroudi, R. Cohn, and D. Talley. Cryogenic shear layers : Experiments and phenomenological modeling of the initial growth rate under subcritical and supercritical conditions. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23(5):554–563, October 2002.

[44] D. Papamoschou and A. Roshko. The compressible turbulent shear layer: an experimental study. *Journal of Fluid Mechanics*, 197:453–477, 1988.

[45] G. L. Brown and A. Roshko. On density effect on large structure in turbulent mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(Part 4):775–816, 1974.

[46] M. Amielh, T. Djeridane, F. Anselmet, and L. Fulachier. Velocity near-field of variable density turbulent jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(10):2149–2164, 1996.

[47] N. R. Panchapakesan and J. L. Lumley. Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. *Journal of Fluid Mechanics*, 246:197–247, 1993.

[48] H. J. Hussein, S. P. Capp, and W. K. George. Velocity measurements in a high-reynolds-number, momentum-conservative, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 258:31–75, 1994.

[49] P. Chassaing. *Mélange turbulent de gaz inertes dans un jet de tube libre.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1979.

[50] W. M. Pitts. Effects of global density ratio on the centerline mixing bahvior of axisymmetric turbulent jets. *Experiments in Fluids*, 11:125–134, 1991.

6.4 Compléments sur la zone similaire

6.4.1 Profils dans la zone similaire

Des comparaisons avec les profils expérimentaux de Hussein *et al.* [58] et Panchapakesan *et al.* [109] dans la zone auto-similaire sont tracées Fig. 6.5 et 6.6. La vitesse axiale normalisée u^+ et la densité normalisée ρ^+ sont données par :

$$u^+ = \frac{< u >}{< u_c >} \tag{6.1}$$

$$\rho^+ = \frac{< \rho > -\rho_\infty}{< \rho_c > -\rho_\infty} \tag{6.2}$$

où $< u >$ est la vitesse axiale moyenne, $< u_c >$ la vitesse axiale moyenne le long de l'axe central du jet, $< \rho >$ la densité moyenne, $< \rho_c >$ la densité moyenne le long de l'axe central du jet et ρ_∞ la densité initiale du réservoir. Dans les deux cas de calcul, la vitesse axiale moyenne (Fig. 6.5 (a) et (b)) et la densité moyenne (Fig. 6.5 (c) et (d)) sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Cependant, alors que les fluctuations radiales de vitesse sont proches des résultats de Panchapakesan *et al.* [109] (Fig. 6.6 (b)), un déficit sur les fluctuations axiales est notable (Fig. 6.6 (a)). La simulation semble en effet indiquer une valeur asymtoptique de 0.21, contre 0.275 et 0.24 pour Hussein *et al.* [58] et Panchapakesan *et al.* [109], respectivement. La forme globale du profil est cependant bien retrouvée. Ces résultats indiquent que le calcul SGE est capable de reproduire de manière correcte le comportement fluctuant des jets dans la zone auto-similaire.

6.4.2 Comparaison avec les simulations de Zong

Dans la région similaire, de fortes différences sont présentes avec les SGE de Zong [166], qui a également simulé des jets rond à pression supercritique. Deux cas ont été simulés par Zong : $\rho_{inj}/\rho_\infty = 6$ et $\rho_{inj}/\rho_\infty = 7.9$. Dans cette section, seul le cas $\rho_{inj}/\rho_\infty = 7.9$ est utilisé pour les comparaisons, car ce saut de densité est proche du cas 3. La Fig. 6.7 (a) présente l'évolution de la vitesse normalisée u^* le long de l'axe central central du jet. La définition de la vitesse axiale normalisée u^* est rappelée Eq. 6.3 :

$$u^* = \frac{u_{inj}}{u_c} \tag{6.3}$$

$$u^* = K_u \frac{x - x_{0_u}}{d_{eff_u}} \qquad \text{avec} \qquad d_{eff_u} = d\sqrt{\rho_{inj}/\rho_\infty} \tag{6.4}$$

où u_c est la vitesse axiale le long de l'axe central du jet. Les expériences de Chassaing [17] (ρ_{inj}/ρ_∞=1 et ρ_{inj}/ρ_∞=1.43) sont également tracées afin d'observer l'évolution de la décroissance en vitesse avec le rapport de densité ρ_{inj}/ρ_∞. Les simulations de cette thèse et l'expérience indiquent qu'une augmentation de ρ_{inj}/ρ_∞ diminue la décroissance de la vitesse le long de l'axe. Le résultat de Zong est très proche du résultat pour ρ_{inj}/ρ_∞=1.43. La vitesse normalisée est

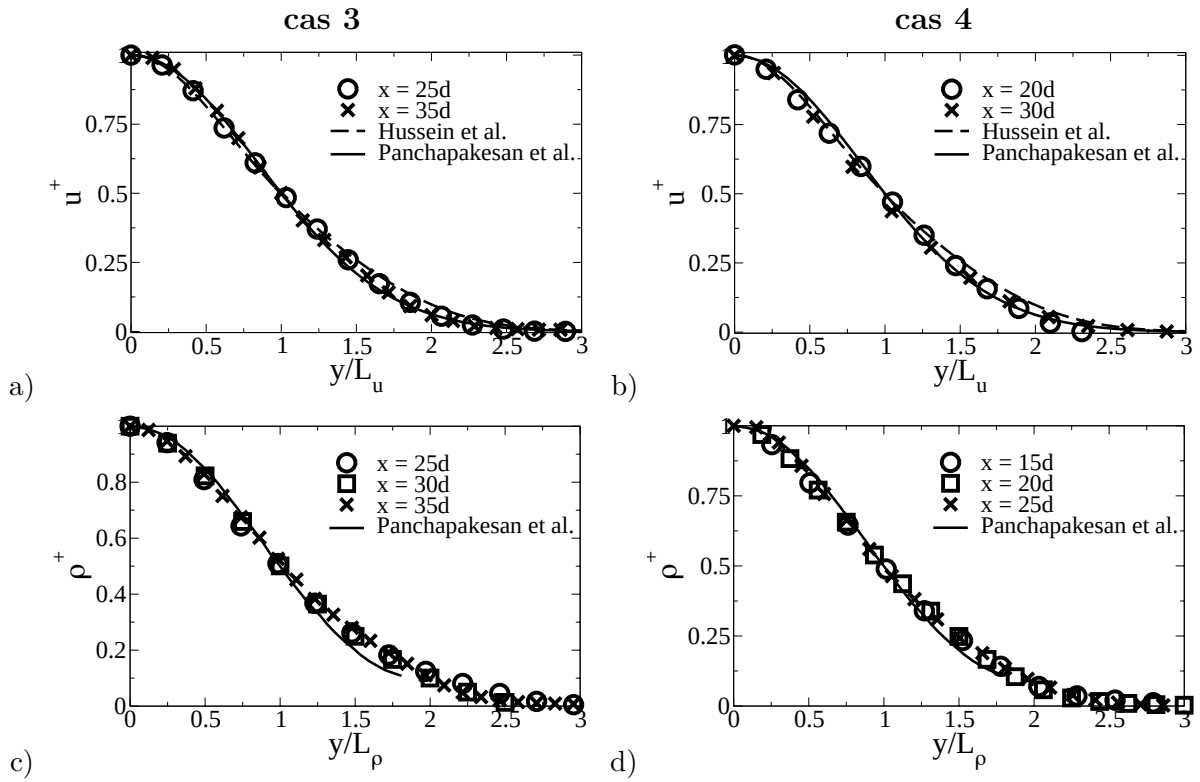


FIGURE 6.5 – (a) et (b) : Coupes transverses de la vitesse axiale normalisée u^+ et comparaison avec les profils expérimentaux de Hussein *et al.* [58] et Panchapakesan *et al.* [109].
(c) et (d) : Coupes transverses de la densité normalisée ρ^+ et comparaison avec les profils expérimentaux de Panchapakesan *et al.* [109].

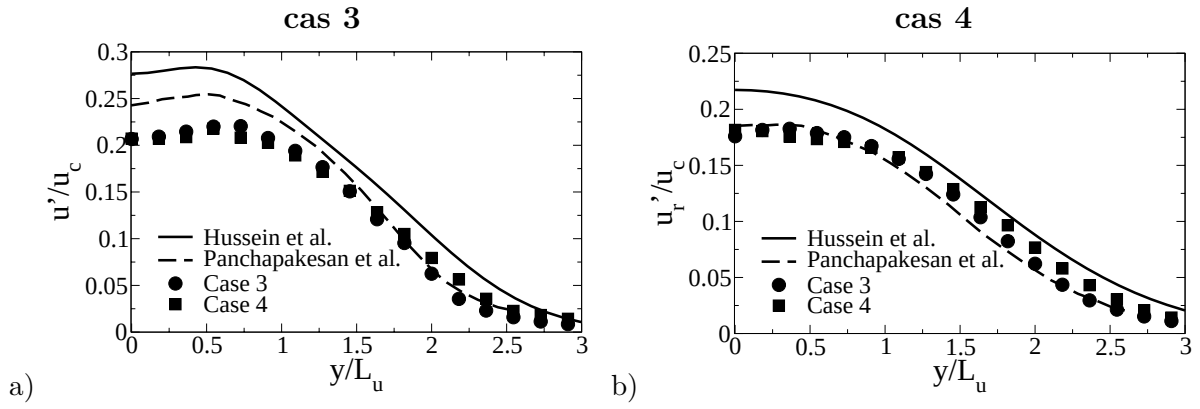


FIGURE 6.6 – Coupes transverses de la vitesse axiale fluctuante normalisée u'/u_c (a) et de la vitesse radiale normalisée u_r'/u_c (b) et comparaison avec les profils expérimentaux de Hussein *et al.* [58] et Panchapakesan *et al.* [109]. Moyennes obtenues entre 35 et 40 diamètres d'injecteur.

tracée en fonction du diamètre effectif d_{eff_u} en Fig. 6.7 (b). Alors que l'ensemble des courbes de confondent, avec une pente K_u située entre 0.15 et 0.19, la décroissance associée au calcul de Zong est plus forte et vaut 0.39. Dans ce cas, le comportement est loin du comportement de pseudo-similarité suggéré par Chen et Rodi [23] ($K_u = 0.161$). De la même manière, le coefficient de décroissance en densité (Eq. 6.5 et 6.6) vaut 0.183 pour les simulations de cette thèse et le comportement de pseudo-similarité [23] est retrouvé ($K_\rho = 0.2$), tandis qu'une valeur de 0.86 est calculée pour le calcul de Zong (Fig. 6.7 (c)).

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_\infty}{\rho_{inj} - \rho_\infty} \tag{6.5}$$

$$\frac{1}{\rho^*} = K_\rho \frac{x - x_{0_\rho}}{d_{eff_\rho}} \qquad \text{avec} \qquad d_{eff_\rho} = d\sqrt{\rho_\infty/\rho_{inj}} \tag{6.6}$$

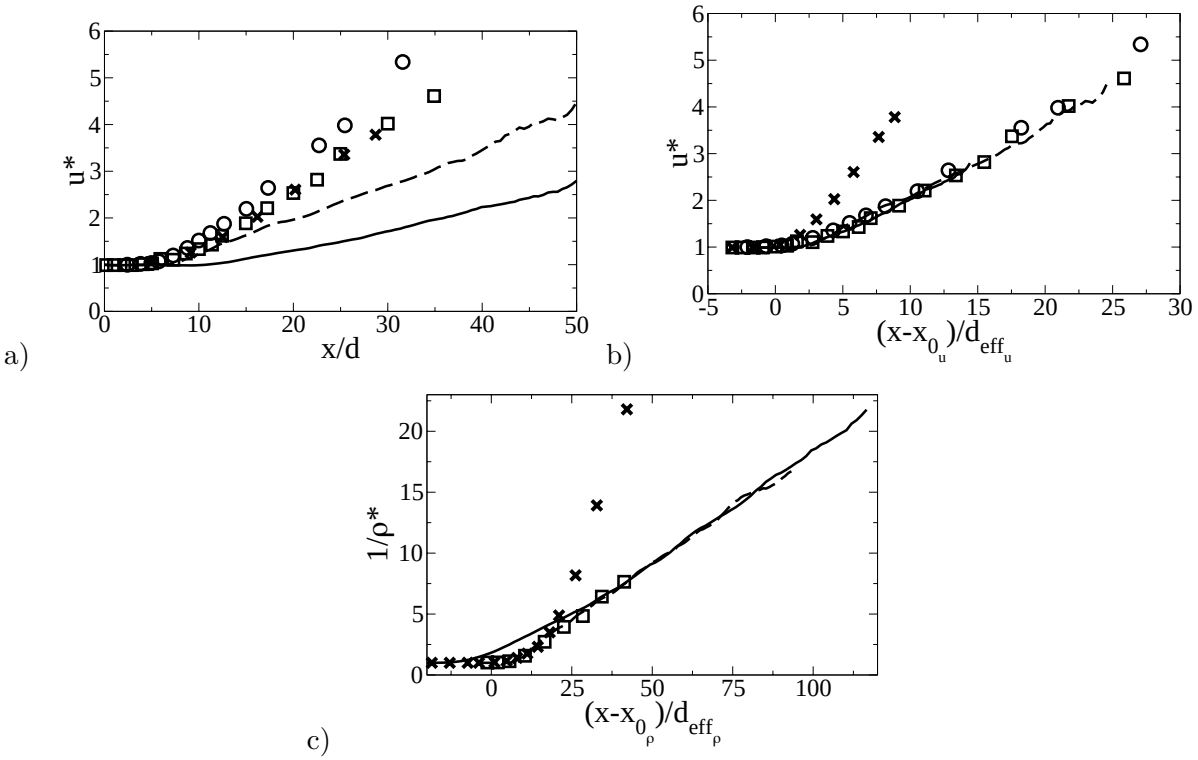


FIGURE 6.7 – (a) vitesse normalisée u^* (Eq. 6.3) le long de l'axe central du jet. (b) décroissance de la vitesse u^* en fonction de la distance à l'injecteur normalisée par le diamètre effectif $d_{eff_u} = d\sqrt{\rho_{inj}/\rho_\infty}$. (c) inverse de la densité normalisée $(\rho^*)^{-1}$ en fonction de la distance à l'injecteur normalisée par le diamètre effectif $d_{eff_\rho} = d\sqrt{\rho_\infty/\rho_{inj}}$ (Eq. 6.6). — ρ_{inj}/ρ_∞=9.6 : case 3 ; – – ρ_{inj}/ρ_∞=3.7 : case 4 ; □ ρ_{inj}/ρ_∞=1.43 : Chassaing [17] ; ∘ ρ_{inj}/ρ_∞=1 : Chassaing [17] ; × ρ_{inj}/ρ_∞=7.9 Zong [166].

On constate donc de très fortes différences entre les simulations réalisée dans ce travail et le

calcul de Zong. Les calculs de ce chapitre sont cependant en bon accord avec l'expérience dans la région de similarité. De telles différences sont surprenantes, d'autant que l'expansion en densité des simulation de cette thèse et de Zong est comparable (Sec. 6.3). Les modélisations thermodynamiques entre ce travail et celui de Zong sont très semblables, cependant des différences sont notables sur la modélisation de sous-maille et le domaine de calcul, et permettent de formuler des hypothèses pour expliquer les différences :

1. Zong utilise un maillage structuré (1 500 000 points) dans lequel la taille caractéristique des mailles augmente avec la distance à l'injecteur : cela peu conduire à des mailles fortement étirée et peut modifier l'écoulement dans la région de similarité.
2. Le modèle de sous-maille choisit par Zong est celui de Smagorinsky. Il est connu pour être particulièrement dissipatif et n'est peut être pas adapté pour ce type de calcul.
3. Le domaine de calcul est limité, avec un diamètre de 12 diamètres d'injecteur, et s'étend jusqu'à 40 diamètres d'injecteur dans Zong [166]. Des effets de confinement sont peut être notables et la proximité de la condition limite de sortie peut contraindre le jet et donc perturber l'écoulement.

D'autres simulations numériques seraient nécessaires pour permettre de conclure.

6.5 Etude de la dynamique du jet

Dans cette section des éléments sur la dynamique du jet le long du coeur potentiel (Sec. 6.5.2) et dans la région de transition sont discutés (Sec. 6.5.3).
Dans les calculs présentés ici, le maillage proche injecteur n'est pas adapté à une étude précise de la couche de mélange initiale, l'épaisseur de quantité de mouvement "physique" en sortie d'injecteur étant en effet plus petite que la taille de maille à cet endroit si on se réfère à Crow *et al.* [32] qui rapportent un rapport entre l'épaisseur de couche de mélange et le diamètre de l'injecteur de 0.02 pour des Reynolds de 50 000. Dans la simulation, cette épaisseur est en réalité fixée par la taille de maille. Dans un cas parfaitement résolu (*i.e.* de type simulation numérique directe), des anneaux tourbillonnaires issus de la couche de mélange se développent rapidement après la sortie de l'injecteur (instabilité primaire axisymmétrique) et connaissent plusieurs appariements (instabilités secondaires axisymmétriques). Le maillage utilisé ici ne permet pas d'obtenir l'apparition de ces structures tourbillonnaires initiales, mais permet uniquement la résolution des structures de plus grande taille. De ce fait, de manière générale, aucun appariement n'est observé le long de la couche de mélange et la longueur d'onde associée à l'instabilité initiale, en sortie d'injecteur, ne correspond pas à celle obtenue dans un cas parfaitement résolu.

Cependant, la croissance de l'instabilité initiale du jet ainsi que la formation des structures tourbillonnaires doivent tout de même être liées aux caractéristiques physiques de chacun des jets comme, par exemple, la variation de densité entre l'injection et le gaz ambiant. Les deux cas de calcul peuvent alors être comparés et une étude permettant d'améliorer la compréhension de la dynamique des jets denses le long de la couche de mélange initiale peut être réalisée, permettant de mettre en avant les paramètres influents.

6.5.1 Comportement général

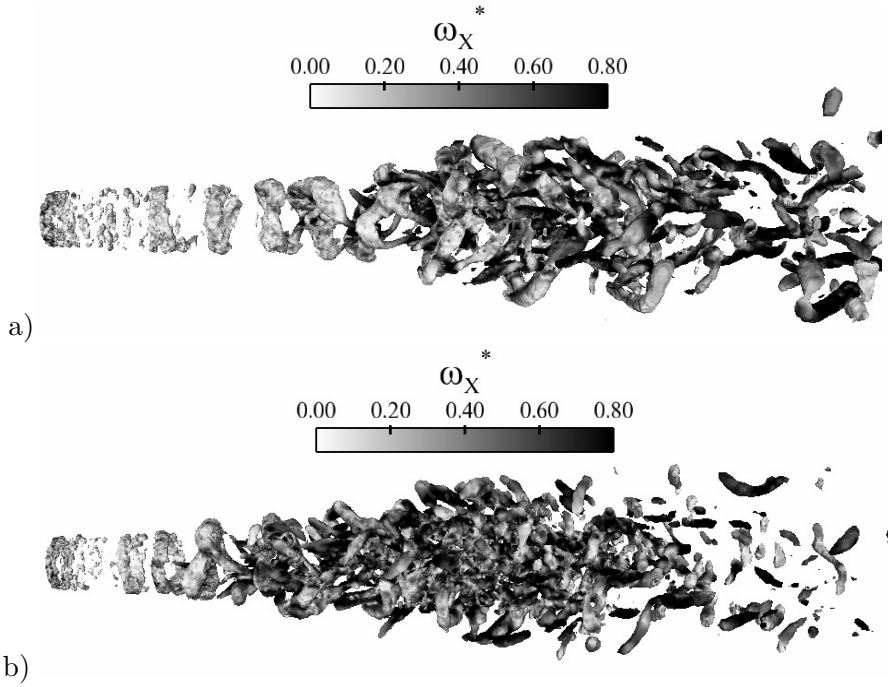


FIGURE 6.8 – Iso-contour de critère $Q = 0.5u_{inj}^2/d^2$ (sur 20 diamètres d'injecteur). (a) cas 3 (b) cas 4.

La Fig. 6.8 montre un iso-contour de critère Q [56, 57] pour les cas 3 et 4. Cet opérateur permet de mettre en évidence les structures tourbillonnaires présentes dans les jets et est défini par l'Eq. 6.7 :

$$Q = -\frac{1}{2}\left(S_{ij}S_{ij} - \frac{1}{2}\overrightarrow{||\omega||}^2\right) \tag{6.7}$$

où S_{ij} est le tenseur des déformations. On constate l'apparition de tourbillons axisymétriques le long du coeur dense, propre à l'instabilité primaire axisymétrique issue de l'instabilité de Kelvin-Helmoltz en sortie d'injecteur. Les anneaux tourbillonnaires sont observables sur une bien plus grande distance après la sortie de l'injecteur dans le cas 3 que dans la cas 4, ce qui laisse présager un coeur dense plus long.
La tridimensionalisation de l'instabilité primaire est associée à l'apparition de tubes de vorticité longitudinaux, localisés entre deux tourbillons axisymétriques. Les iso-contours de la Fig. 6.8 sont coloriés par l'amplitude de vorticité longitudinale ω_X normalisée par la norme de la vorticité ω, $\omega_X^* = \omega_X/\|\overrightarrow{\omega}\|$, permettant de mettre en évidence les structures tourbillonnaires longitudinales. Dans les deux cas, l'axisymétrie des structures cohérentes issues de l'instabilité primaire est brisée avec l'apparition de vortex longitudinaux. La composante longitudinale de vorticité apparaît plus rapidement dans le cas 4 et l'activité tourbillonnaire y est plus intense. On constate en effet une

homogénéisation des structures de vorticité plus rapide dans le cas 4. Ce comportement est une forte indication d'un mélange plus efficace à la fin du coeur potentiel.
Finalement, cette étude qualitative de la dynamique dans les jets permet de remarquer que l'on retrouve les phénomènes habituellement rencontrés lors de la déstabilisation de jet et la transition vers la turbulence (*cf* Sec. 6.1), ce qui semble indiquer que la simulation reproduit correctement les principales caractéristiques de ce type d'écoulement.

Les deux jets ont une dynamique différente. Pour le comprendre, une séquence de coupes de densité espacées de 0.8 ms est construite Fig. 6.9 pour le cas 4. Nous avons déjà vu (*c.f.* Sec. 6.3) que le coeur potentiel vaut environ 5.1 diamètres d'injecteur. On y observe la formation des structures cohérentes qui ont déjà pu être identifiées sur l'iso-contour de critère Q. A la fin de la zone potentielle, le coeur dense est fortement déformé et de petites parcelles à forte densité en sont éjectées. Ces dernières sont rapidement dissoutes dans le gaz environnant. La caractéristique remarquable de cette région de transition est l'efficacité du mélange entre les poches denses issues du coeur potentiel et le gaz ambiant, qui donne rapidement lieu à la formation d'un champ turbulent composé de fines structures tourbillonnaires. Ces dernières homogénéisent efficacement les parcelles denses avec le gaz ambiant. De ce fait, un peu plus en aval, le champ de densité ne présente plus de poches de densité clairement discernables du gaz environnant. Ce comportement fait fortement penser à celui d'un jet gazeux [36, 32].
Le même type de séquence est proposé en Fig. 6.10 pour le cas 3, avec un espacement de 1.3 ms. Le coeur potentiel est cette fois de 7.9 diamètres d'injecteur. Comme pour le cas 4, des structures tourbillonnaires se forment à la surface du coeur potentiel. Le premier phénomène remarquable, est la formation de structures ligamenteuses en fin de coeur dense. Ces structures étirées sont d'ailleurs une caractéristique propre au cas 3. Une très importante différence entre le cas 3 et le cas 4 est notable dans la région de transition. En effet, on observe cette fois, non plus une disparition soudaine des parcelles denses, mais des lâchés de poches de densité élevée qui ne sont plus aussi rapidement dissoutes dans le gaz que dans le cas 4. Notons que ces poches denses sont projetées dans la direction axiale. Le cisaillement avec le gaz environnant déforme les parcelles, et on observe encore une fois la formation de structures étirées. Ces structures sont clairement identifiables sur une grande distance de jet. Le mélange en fin de coeur potentiel est nettement moins efficace dans ce cas 3 que dans le cas 4, les poches denses étant plus résistantes à leur destruction par la turbulence et les inhomogénéités semblent être plus marquées. Par son coeur potentiel nettement plus long que celui d'un jet gazeux et la présence de formes ligamenteuses autour du coeur dense, ce jet possède des propriétés semblables à celles d'un jet liquide. Mais il n'y pas de gouttes présentes dans le domaine et le fluide dense forme des parcelles de densité élevées qui sont dissoutes dans le gaz ambiant.

Pour résumer, les principales différences entre les deux jets simulés sont les suivantes :
- Le cas 3 a un coeur potentiel plus long que le cas 4 : il est donc plus stable face au cisaillement.
- L'activité tourbillonnaire en fin de coeur potentiel, responsable du mélange, est bien plus intense dans le cas 4 que dans le cas 3.
- Des poches denses sont présentes loin en aval du coeur potentiel dans le cas 3, suggérant

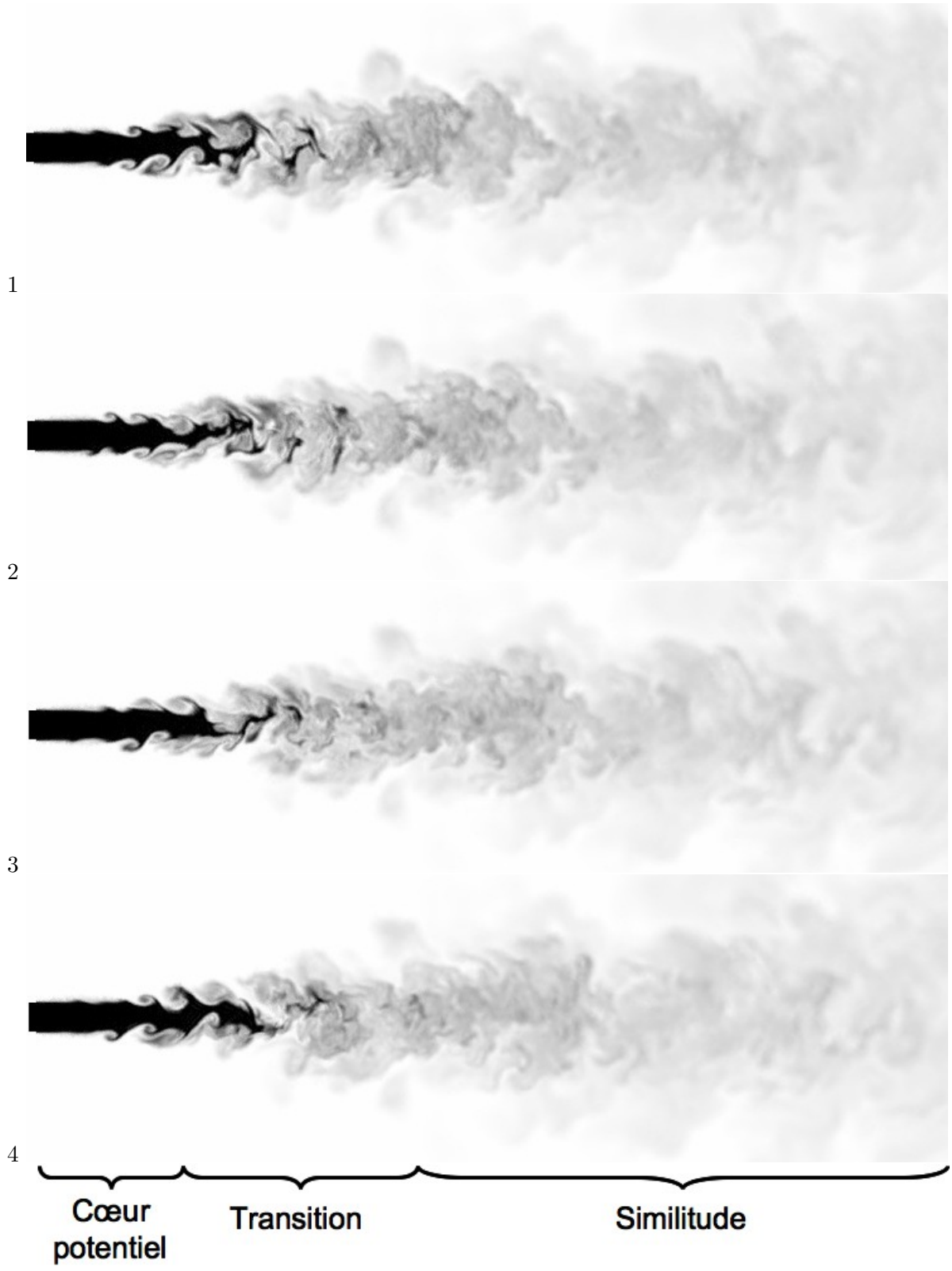


FIGURE 6.9 – Coupe de champs de densité instantanée pour le cas 4 (noir : densité à l'injection ; blanc : densité du réservoir). Chaque image est espacée de 0.8 ms.

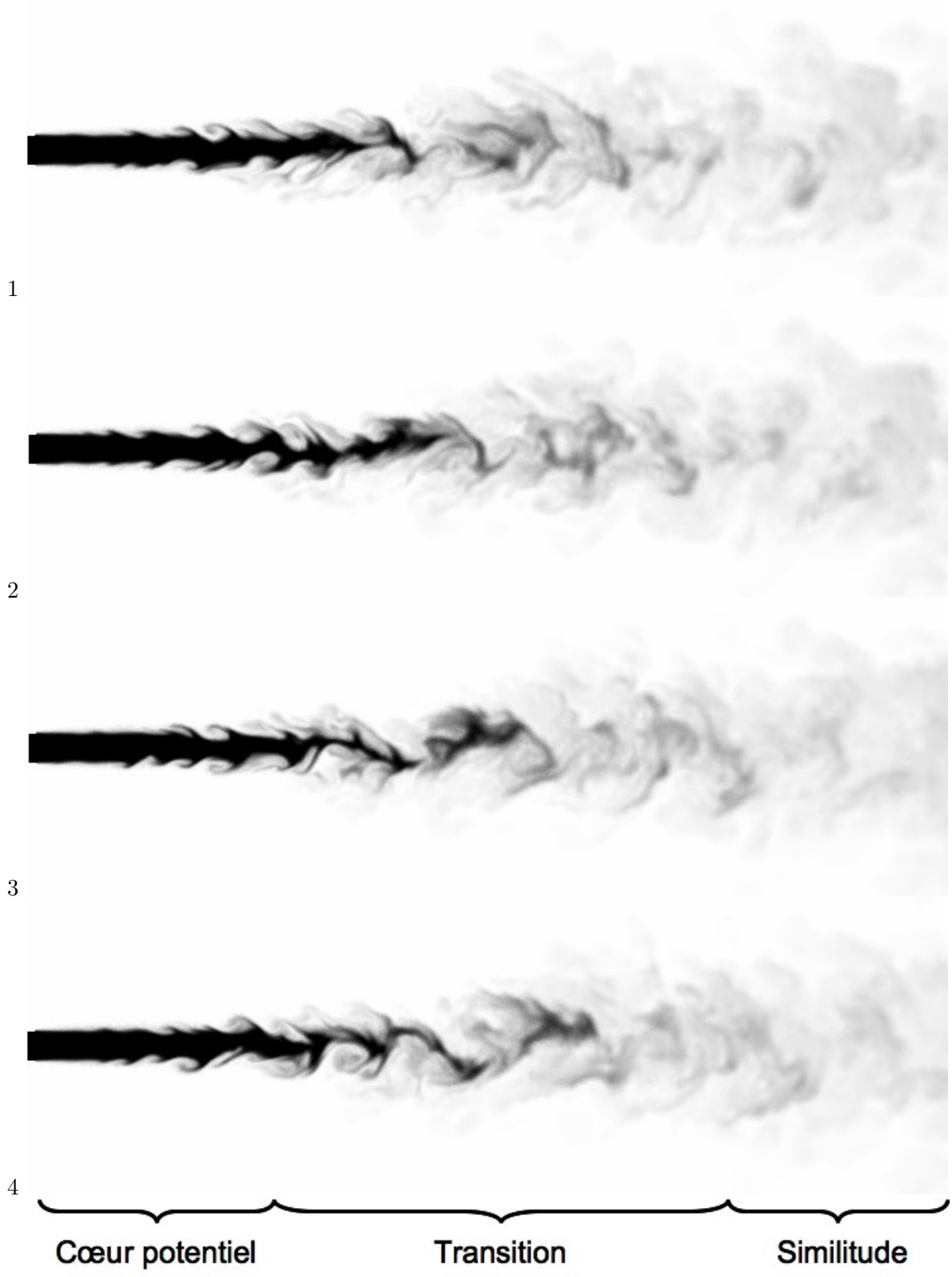


FIGURE 6.10 – Coupe de champs de densité instantanée pour le cas 3 (noir : densité à l'injection ; blanc : densité du réservoir). Chaque image est espacée de 1.3 ms.

une région de transition plus longue pour ce jet.

6.5.2 Dynamique le long du coeur potentiel

Le coeur potentiel du cas 3 est plus long que celui du cas 4 ($\approx$ 7.9 contre $\approx$ 5.1 diamètres d'injecteur). Dans le cas d'un jet gazeux, le coeur potentiel est approximativement de 3 à 5 diamètres d'injecteur [55, 45]. Par rapport aux jets isovolumes, la densité varie fortement au travers de la couche de mélange et influence la dynamique le long du coeur dense.

Nous avons vu que cette zone de l'écoulement est propice à la formation de structures cohérentes de vorticité. Pour étudier l'impact de la variation de densité sur le développement des structures tourbillonnaire, un bilan d'enstrophie $\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\omega}$ (*i.e.* la norme de la vorticité $\overrightarrow{\omega}$ au carré) est réalisé. L'équation 6.8 rappelle les termes de création ou de destruction de vorticité. Le moment barocline, qui n'est pas présent dans un jet à densité constante, fait directement intervenir le gradient de densité.

$$\frac{D\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\omega}}{Dt} = \overbrace{2\overrightarrow{\omega}\cdot(\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\nabla})\overrightarrow{u}}^{etirement} - \overbrace{2(\overrightarrow{\nabla}\cdot\overrightarrow{u})\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\omega}}^{dilatation} - \overbrace{2\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\nabla}(\frac{1}{\rho})\times\overrightarrow{\nabla}P}^{moment\ \ barocline} + \overbrace{2\overrightarrow{\omega}\cdot\overrightarrow{\nabla}\times(\frac{1}{\rho}\overrightarrow{\nabla}\cdot\overline{\overline{\tau}})}^{dissipation} \tag{6.8}$$

Le terme de dissipation de l'Eq. 6.8 contient la dissipation laminaire, turbulente (*i.e.* de sous-maille) et artificielle. Elle joue un rôle stabilisateur nécessaire dans le calcul en diffusant le gradient de quantité de mouvement pour en permettre la résolution sur le maillage SGE, ce qui s'apparente fortement a de la viscosité et doit alors être comptabilisé dans le bilan. Elle est cependant très localisée et les validations précédentes montrent que son utilisation n'affecte pas notablement les résultats et que le comportement expérimental a été retrouvé. La Fig. 6.11 présente des coupes transverse des termes sources/puits d'enstrophie de l'Eq. 6.8 en différentes positions axiales le long du coeur dense des jets. Ces termes sont moyennés en espace autour de l'axe de symétrie du jet et temporellement sur 13 ms de temps physique. Les premiers profils à $x = 4d$ (Fig. 6.11 (a)), pour le cas 3, et $x = 2d$ (Fig. 6.11 (b)), pour le cas 4, correspondent à la position où les formations tourbillonnaires sont observées. Le terme de dilatation est très faible par rapport aux autres contributions. On note que dans les deux cas de calcul, le terme de dissipation est du même ordre de grandeur que le terme associé à l'étirement, si bien que le moment barocline joue un rôle très important dans le processus de formation tourbillonnaire. Ce dernier est en effet un terme puits dans la zone de gradient de densité (*i.e.* quand $y \approx r$, où r est le rayon de l'injecteur) et un terme source dans la zone de gaz léger ($y > r$). Ce comportement a été observé expérimentalement et numériquement [11, 121, 19]. Ainsi, lors de la formation des structures cohérentes de vorticité proche de l'injecteur, le fort gradient de densité génère un moment barocline important qui "redistribue" l'énergie de vorticité de la couche de mélange initiale vers les gaz légers. Cet effet est clairement observable à la Fig. 6.12, représentant des

profils de vorticité azimutale (*i.e.* les structures tourbillonnaires associées à l'instabilité primaire) le long du coeur potentiel. L'abscisse est normalisée par la demi-largeur à mi-hauteur de densité, pour positionner la vorticité par rapport au gradient de densité. On constate clairement un positionnement de la vorticité azimutale vers les zones de faible densité. Cet effet est légèrement plus prononcé dans le cas 3. Ce phénomène est également noté dans Chassaing *et al* [19].

Plus en aval et à un diamètre d'injecteur de la fin du coeur potentiel (Figs. 6.11 (c) et (d)),

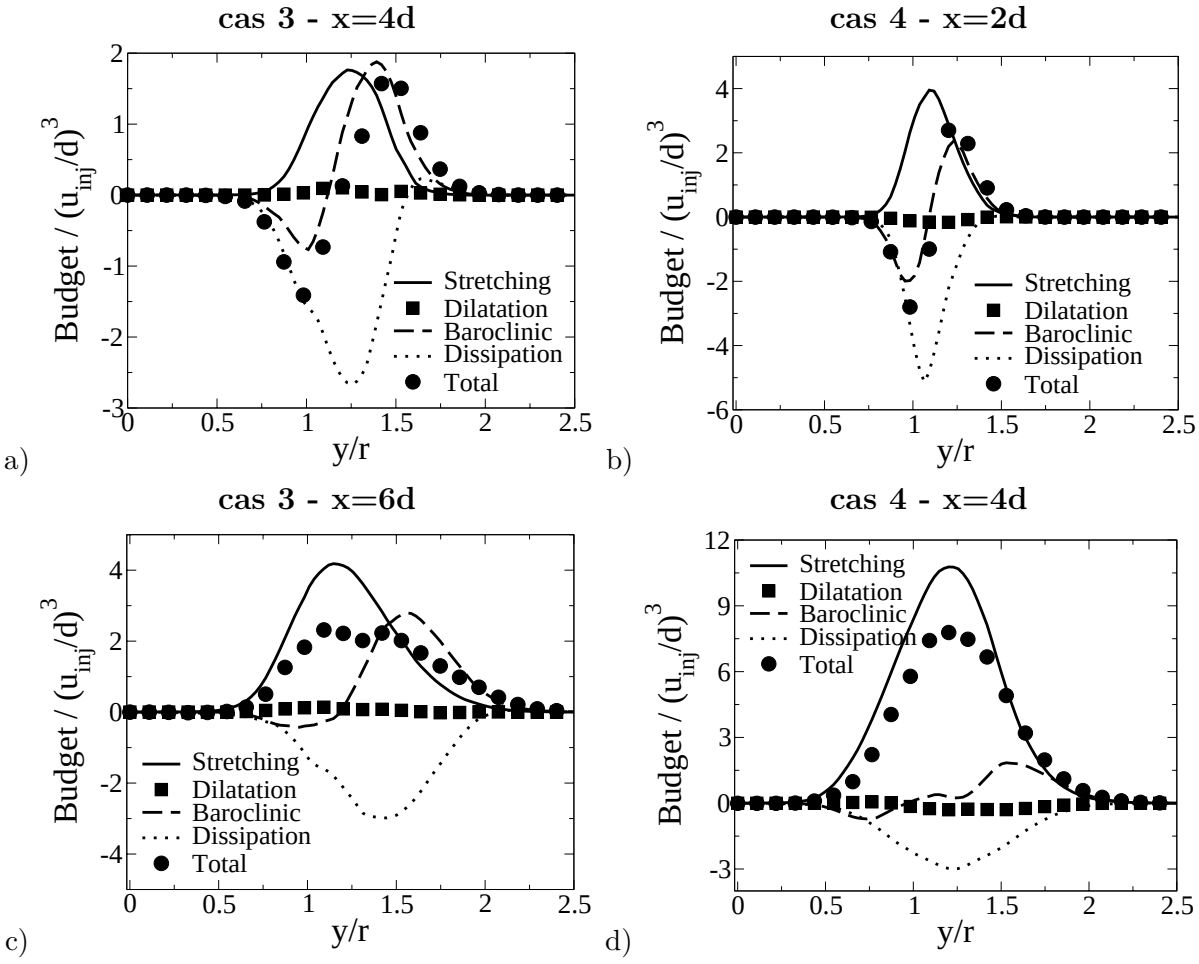


FIGURE 6.11 – Coupe transverse du bilan moyen d'enstrophie. (a) cas 3 à 4 diamètres d'injecteur. (b) cas 4 à 2 diamètres d'injecteur. (c) cas 3 à 6 diamètres d'injecteur. (d) cas 4 à 4 diamètres d'injecteur.

les gradients de densité sont plus faibles, réduisant l'effet du moment barocline par rapport au terme d'étirement. On remarque que la production d'enstrophie par étirement tourbillonnaire est plus importante dans le cas 4 que dans le cas 3, indiquant une dynamique plus développée dans la couche de mélange et attestant de la croissance plus rapide de l'instabilité pour le cas 4. Le taux de croissance de l'instabilité de Kelvin-Helmoltz est en effet affecté par le saut de densité.

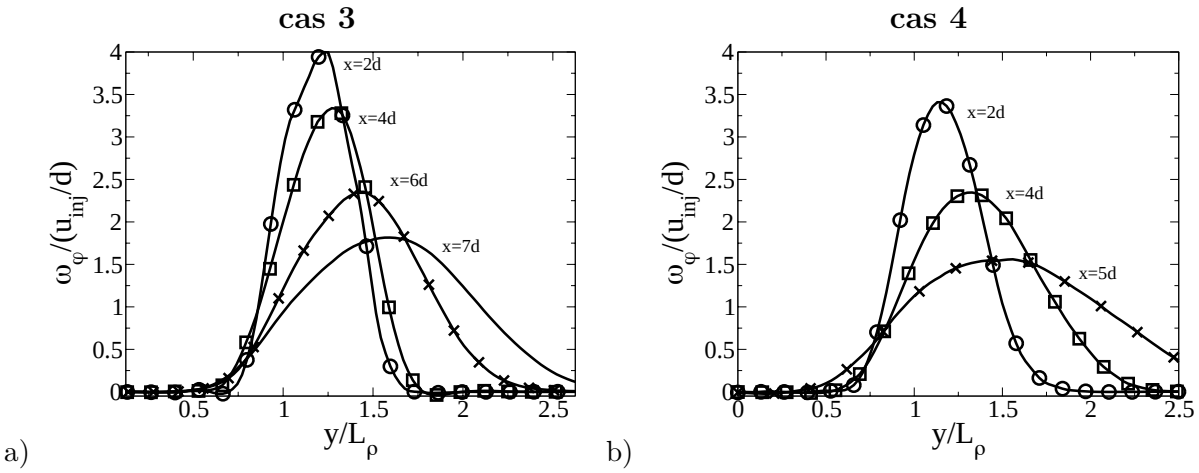


FIGURE 6.12 – Coupes transverse de vorticité azimutale moyenne. (a) cas 3. (b) cas 4.

Des simulations de couche de mélange en gaz réel à densité variable, associées à une étude de stabilité linéaire, de Zong *et al.* [166] et de Okong'o *et al.* [101] montrent que l'augmentation de la stratification en densité diminue le taux de croissance de l'instabilité initiale. Ce comportement est retrouvé sur l'évolution de l'écart type des fluctuations de vitesse radiale le long de la couche de mélange (y=0.5d) en Fig. 6.13. On constate ainsi que le taux de d'amplification spatial d'une perturbation de la forme $\exp(ikx - iwt)$, où ω est la pulsation et k le nombre d'onde, est environ 2.5 fois plus grand dans le cas 4 que dans le cas 3.

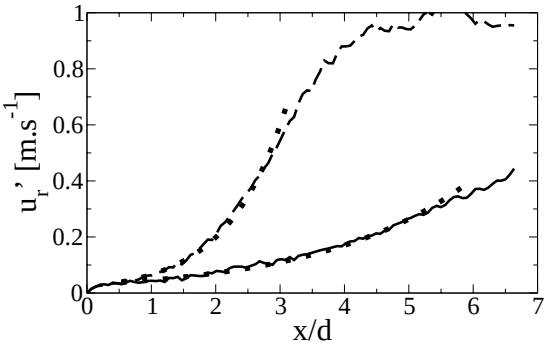


FIGURE 6.13 – Evolution de la vitesse radiale fluctuante le long du coeur potentiel dans la couche de mélange (y=d/2). — Cas 3 ; – – Cas 4 ; · · · ajustage sur une fonction exponentielle.

De plus, la longueur d'onde la plus instable augmente avec le saut de densité. Ce dernier résultat est qualitativement observé dans le calcul. Pour cela, les longueurs d'ondes moyennes

ont été obtenues à partir 10 solutions instantanées. La longueur d'onde moyenne obtenue dans le cas 3 est 1,4 fois plus grande que dans le cas 4 (voir par exemple la Fig. 6.8).
L'impact du saut de densité sur les taux de croissance peut aussi être perçu à partir l'équation de dispersion développée pour un cas limite de discontinuité de vitesse et de densité, qui se résout analytiquement (dans ce cas la couche de mélange est instable pour toutes les longueurs d'onde, car aucune échelle de coupure, associée à l'épaisseur de couche de mélange, n'est imposée dans la configuration) [74] [120] :

$$\omega = k u_{inj} \frac{\rho_{inj} \pm i\sqrt{\rho_{inj}\rho_\infty}}{\rho_{inj} + \rho_\infty} \tag{6.9}$$

où ω est la pulsation et k le nombre d'onde. Si l'on suppose une perturbation temporelle uniforme ($Im(\omega) = 0$), le taux de croissance spatial $-k_i = Im(k)$ est donné par :

$$-k_i = 2\pi f \frac{1}{u_{inj}} \sqrt{\frac{\rho_\infty}{\rho_{inj}}} \tag{6.10}$$

où f est la fréquence de l'instabilité. Les densités spectrales de puissance (le carré du module de la transformée de Fourier divisée par la période d'intégration) de vitesse radiale tracées en Fig. 6.14 dans la couche de mélange nous indiquent la fréquence de l'instabilité de Kelvin-Helmoltz obtenue dans les simulations. La fréquence la plus instable est $f_3 = 1360$ Hz dans le cas 3 et $f_4 = 1650$ Hz dans le cas 4. En utilisant l'Eq. 6.10, on trouve alors que le taux de croissance linéaire du cas 4 est alors environ 1.7 fois plus grand que celui du cas 3. Ce résultat n'est pas exactement en accord avec la croissance obtenue en Fig. 6.13, mais il reproduit bien l'effet du saut de densité qui diminue le taux de croissance des instabilités.

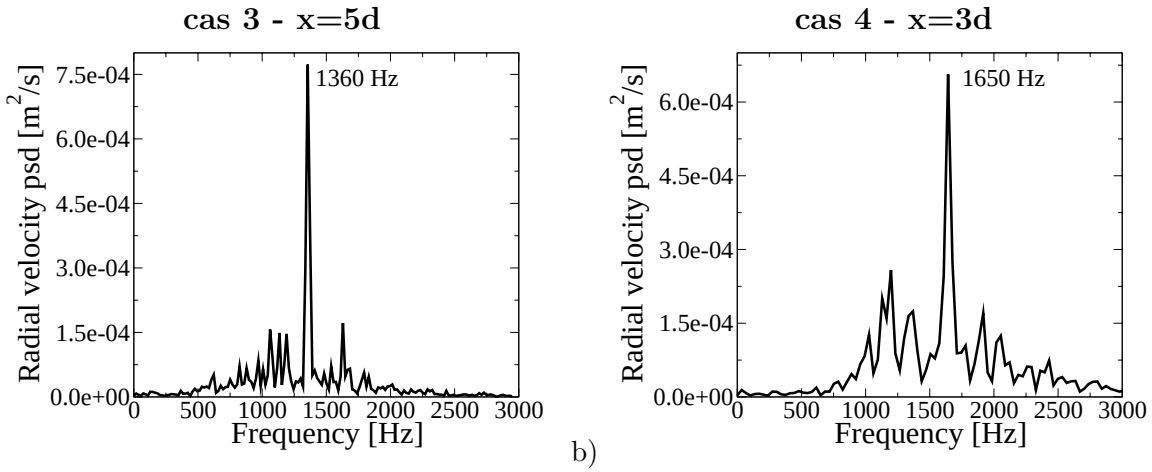


FIGURE 6.14 – Densité spectrale de puissance de la vitesse radiale pour le cas 3 (a) et le cas 4 (b) dans la couche de mélange (y=0.5d) et à $x = 5d$ pour le cas 3 et $x = 3d$ pour le cas 4.

Les fluctuations de vitesse axiale et transverse le long du coeur potentiel sont tracées en Fig. 6.15. De manière consistante avec la redistribution de vorticité vers les gaz légers, les fluctuations

axiales se développent principalement dans la zone de plus faible densité dans chacun des cas. On constate très clairement une forte atténuation des fluctuations radiales dans le cas 3 par rapport au cas 4, tandis que les niveaux de fluctuation de la vitesse axiale sont sensiblement plus élevés dans le cas 3 que dans le cas 4. Ce phénomène traduit un transfert de l'énergie fluctuante radiale dans la direction axiale. Cela est observé expérimentalement et est associé à la stratification en densité de la couche de mélange [48]. Ce comportement est le signe d'une forte anisotropie des structures cohérentes dans le cas 3. Cette anisotropie a également été observée expérimentalement [108]. Dans le cas le plus dense, le coeur du jet (y≈0) n'est que peu fluctuant. La "barrière" formée par le gradient de densité limite l'impact du champ fluctuant sur le centre du jet en contenant l'essentiel des fluctuations de vitesse en périphérie, dans les gaz légers.

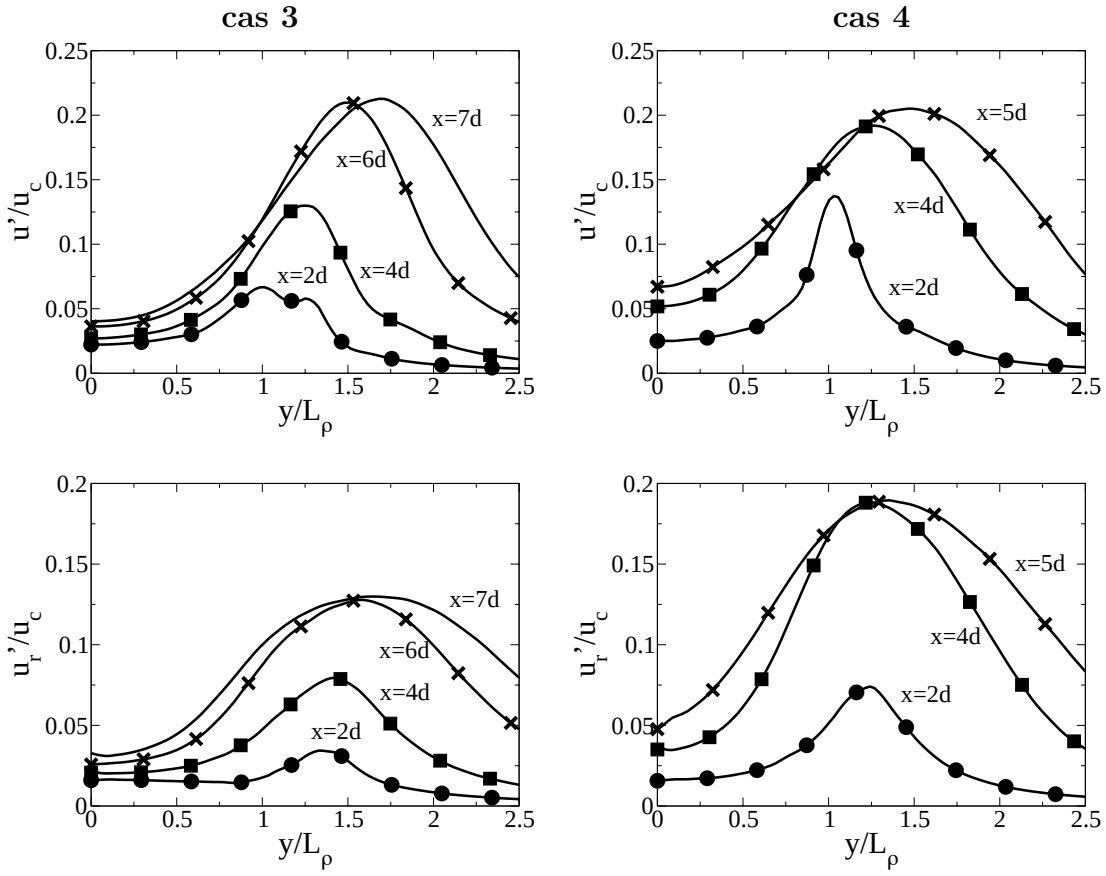


FIGURE 6.15 – Coupes transverses du champ de vitesse axiale et radiale fluctuantes, u' et u'_r, le long du coeur potentiel. u_c est la vitesse en $y = 0$.

Les fluctuations de vitesse axiale et radiale en fin de coeur potentiel sont à nouveau tracées en Fig. 6.16, en moyenne de Reynolds (Eq. 6.11) et en moyenne de Favre (*i.e.* pondéré par la

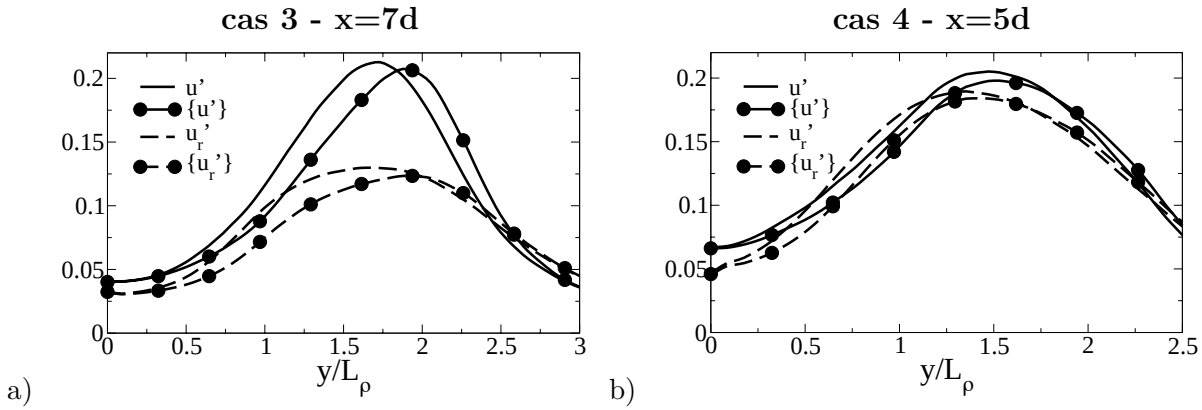


FIGURE 6.16 – Coupes transverses des fluctuations de vitesse longitudinale — et radiale – –. • moyenne de Favre.

densité) (Eq. 6.12) afin de mettre en avant l'impact de la variation de densité sur les fluctuations de vitesse.

$$u' \equiv < u^2 - < u >^2 >^{0.5} \qquad u_r{}' \equiv < u_r{}^2 - < u_r >^2 >^{0.5} \tag{6.11}$$

$$\{u'\} \equiv \left(\frac{< \rho(u - < u >)^2 >}{< \rho >} \right)^{0.5} \qquad \{u_r{}'\} \equiv \left(\frac{< \rho(u_r - < u_r >)^2 >}{< \rho >} \right)^{0.5} \tag{6.12}$$

où $< \cdot >$ est l'opérateur de moyenne temporelle. Dans chaque cas, la fluctuation pondérée par la masse est plus faible que celle calculée directement : les régions de densité plus élevée sont donc moins fluctuantes que les régions gazeuses. La différence est plus marquée dans le cas 3.

Pour résumer, il est montré dans cette section que le gradient de densité a un impact important tout le long du coeur potentiel : les fluctuations radiales et au centre du jet sont fortement atténuées, le taux de croissance des instabilités est réduit et la création de vorticité est favorisée dans les gaz légers. Ce sont des éléments qui permettent de mieux comprendre l'allongement du coeur potentiel dans le cas 3 par rapport au cas 4.

6.5.3 Région de transition

La région de transition est la région juste en aval du coeur potentiel et où les propriétés de l'écoulement se modifient pour atteindre leur comportement auto-similaire. Dans le cas de jets à densité variable, de fortes fluctuations de densité peuvent être observées, comme l'illustre la Fig. 6.17 (a), où la fluctuation de densité normalisée $\rho^{+\prime} = \rho'/(\rho_c - \rho_\infty)$ est tracée le long de l'axe central du jet. Rapidement après la fin du coeur potentiel ($\approx 5d$ pour le cas 4 et $\approx 7d$ pour le cas 3), on constate en effet un net accroissement de $\rho^{+\prime}$ jusqu'à une valeur d'environ 0.6. Cette augmentation est plus rapide dans le cas 4 ($\approx 3d$) que dans le cas 3 ($\approx 7d$) et peut être expliquée par l'important déficit d'énergie cinétique turbulente du cas 3 par rapport au cas 4 observée précédemment en fin de coeur potentiel. Durant cette phase, hormis une croissance

plus faible dans le cas 3, peu de différences sont notables entre les jets. Mais la distinction entre les deux cas de calcul est marquante dans la zone de décroissance de la fluctuation de densité. Dans le cas 4, les fluctuations chutent rapidement (la courbe suit qualitativement une fonction cubique) et convergent vers une valeur limite proche de 0.21, qui est situé dans la fourchette de valeurs proposées par Chen et Rodi [23] marquée en pointillées sur la Fig. 6.17 (a). Le cas 3 suit un comportement très différent : la décroissance est bien plus faible et semble être linéaire. Le flux de masse turbulent $< \rho^{+} u' > / < u >$ tracé en Fig. 6.17 (b) montre que la corrélation entre les fluctuations de densité et les fluctuations de masse est nettement plus importante pour le cas 3 que pour le cas 4 : on retrouve ici l'expression statistique des lâchés de poches denses qui avaient été observés qualitativement en Fig. 6.10. Cela signifie que dans le cas 3, les fortes fluctuations de densité qui naissent à la fin du coeur potentiel ne sont pas rapidement atténuées comme cela est le cas dans le cas 4.

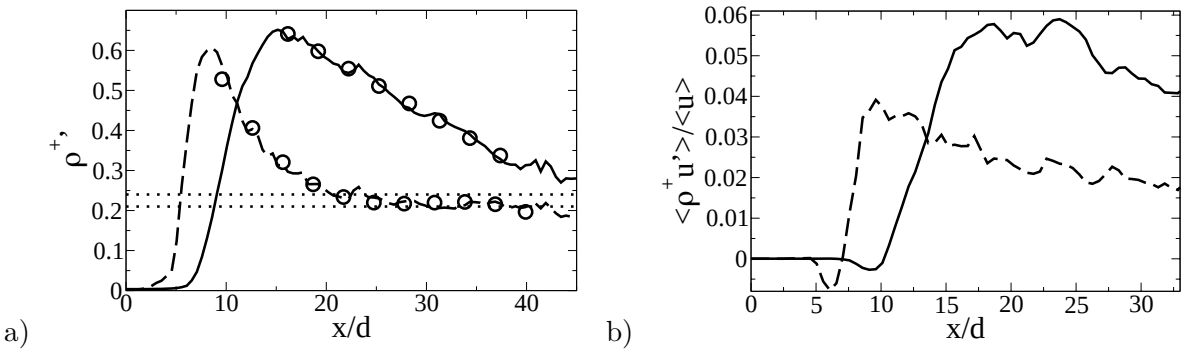


FIGURE 6.17 – (a) profils longitudinaux le long de l'axe central du jet de la fluctuation de densité normalisée et (b) profils longitudinaux le long de l'axe central du jet du flux turbulent longitudinal.

La présence de ces poches denses dans le cas 3 est également observable sur les écarts-types de vitesse axiale et radiale le long de l'axe central du jet (Fig. 6.18). Les variances sont calculées de deux manières : par moyenne de Reynolds (Eq. 6.11) et par moyenne de Favre (Eq. 6.12). Les zones les plus denses ont, dans tous les cas, un niveau de fluctuation plus faible que celles de plus faible densité. Ce comportement est très similaire à celui observé le long du coeur potentiel, où les zones denses sont moins fluctuantes (Fig. 6.16). Encore une fois, le cas 3, plus dense, est plus affecté par les effets de densité. Pour le cas 4, les fluctuations de densité sont maximales à $x \approx 8.5d$ (Fig. 6.17 (a)), puis chutent rapidement et les niveaux de fluctuations de vitesse atteignent leurs valeurs asymptotiques (0.21 et 0.19). Dans le cas 3, la croissance de fluctuation de vitesse radiale est marquée par un changement de pente lorsque la fluctuation de densité est maximale ($x \approx 15d$) et semble être fortement associée à la présence des poches denses dans l'écoulement et à leur dissolution plus lente dans le gaz ambiant.

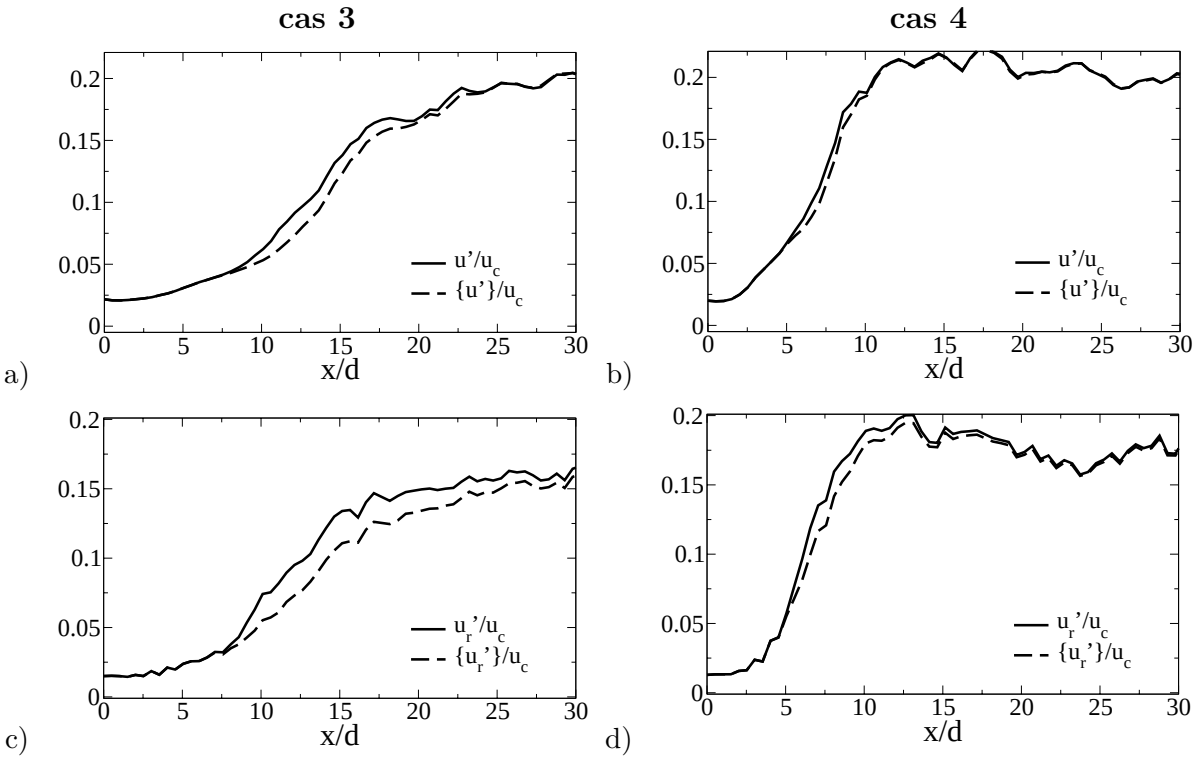


FIGURE 6.18 – profils longitudinaux le long de l'axe central du jet de la fluctuation de vitesse axiale pour le cas 3 (a) et le cas 4 (b) et profils longitudinaux le long de l'axe central du jet de la fluctuation de vitesse radiale pour le cas 3 (c) et le cas 4 (d).
— moyenne de Reynolds ; − − moyenne de Favre.

On peut maintenant apporter des éléments de réponse à la question de savoir pourquoi on observe la formation de poches denses dans le cas 3. On a vu qu'en sortie de coeur potentiel, les vitesses fluctuantes au sein du jet ainsi que les fluctuations radiales dans la couche de mélange sont plus faibles dans le cas 3. On peut légitimement penser que ces conditions dynamiques sont propices à la création de poches denses de plus grande tailles que dans le cas 4. Cependant cela ne semble pas être suffisant pour expliquer la différence de comportement observée en Fig. 6.17 (a) au moment de la décroissance. Il est alors possible que la non-idéalité de l'énergie interne joue un rôle important dans cette zone (Fig. 6.19) : il faut en effet un apport d'énergie bien plus important pour réchauffer le fluide dans le cas 3 par rapport au cas 4.

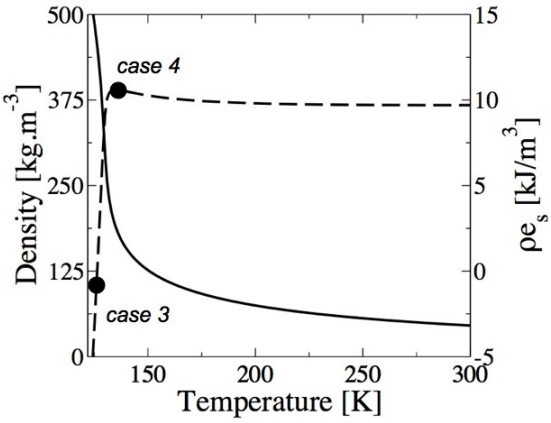


FIGURE 6.19 – Densité et énergie interne volumique en fonction de la température.

6.6 Modélisation de sous-maille

Dans les simulations de ce chapitre, le modèle de sous-maille est le modèle WALE développé pour les gaz parfaits. Les effets gaz réel sur le modèle de sous-maille ne sont donc pas pris en compte. Selle *et al.* [135] ont mis en évidence l'importance prise par certains termes des équations filtrées par rapport au gaz parfait (voir Sec. 4.2). A partir de simulations numériques directes, ils ont notamment montré que, pour le cas simulé dans ce chapitre, le terme de sous-maille associé au filtrage de $\overrightarrow{\nabla} P$, donné par $\overrightarrow{\nabla}(\overline{P(\phi)} - P(\overline{\phi}))$, où ϕ est le vecteur des variables conservatives, n'est plus nécessairement négligeable par rapport aux autres contributions proche de la zone critique thermodynamique du fluide.
Cependant, bien que ce terme ait été négligé, les résultats du cas 3 sont en très bon accord avec l'expérience à haute pression, ce qui semble indiquer que l'impact de ce terme n'est pas de première importance en vue d'une analyse globale du jet.
Il peut néanmoins jouer un rôle pour l'étude de phénomènes plus fins et localisés, qu'il semble *a priori* difficile de capturer avec la finesse de maillage utilisée pour l'instant. Ce terme sera important dans la zone de fort gradient de densité en sortie d'injecteur. Pour être capable d'observer l'influence de sous-maille liée à $\overrightarrow{\nabla}(\overline{P(\phi)} - P(\overline{\phi}))$, le terme de dissipation artificielle ajouté afin de pouvoir résoudre les gradients sur le maillage SGE doit être négligeable par rapport aux contributions de la sous-maille, ce qui n'est pas encore le cas dans cette région de forts gradients. L'ajout d'un modèle pour $\overrightarrow{\nabla}(\overline{P(\phi)} - P(\overline{\phi}))$ ne semble donc pas nécessaire pour l'instant.
Enfin, les simulations sont réalisées avec le modèle de sous-maille WALE [96] et donnent de bon résultats. Ce modèle semble donc approprié pour la simulation de jets transcritiques.

6.7 Conclusion

Les calculs de jets ronds axisymétriques présentés dans ce chapitre permettent de valider le code AVBP gaz réel dans une configuration représentative d'un calcul SGE. Le code est robuste et capable de fournir des résultats représentatifs de la physique des jets à densité variable.

Les deux jets d'azote à 40 bar simulés proviennent de l'expérience de Mayer *et al* [88] (cas 3 et 4) et présentent une forte variation de densité avec le gaz environnant (3,7 pour cas 4 et 9,6 pour le cas 3). La topologie des jets obtenue par la simulation correspond qualitativement aux images expérimentales obtenues par ombroscopie. Les comparaisons avec les profils axiaux de densité issus de l'expérience sont très bonnes pour le cas 3, mais des incertitudes ne permettent pas de conclure sur le cas 4.

La région de similarité des jets est étudiée. Le taux d'expansion en densité pour le cas 3 est très proche de celui obtenu lors des expériences à haute pression de Oschwald *et al.* [108], tandis qu'une sous-estimation de 20 % est constatée pour le cas 4. Chehroudi *et al.* [22], qui mesurent l'angle d'ouverture "visuel" initial des jets à partir d'images obtenues par ombroscopie, indiquent que leurs résultats sont comparables au double du taux d'expansion en densité. Ce comportement est effectivement retrouvé pour le cas 3, mais pas pour le cas 4. A partir d'une reconstruction numérique d'images obtenue par ombroscopie, on constate en effet que les angles obtenus pour le cas 4 ne sont pas identiques si l'on utilise l'angle initial et deux fois le taux d'expansion. Lorsque les résultats d'ombroscopie numériques sont utilisés, l'accord entre la correlation de Chehroudi [20] et la simulation sont bons dans les deux cas de calcul.

Il convient ici de souligner le très bon accord du cas 3 avec toutes les données disponibles à haute pression. Ce cas est représentatif de l'injection d'oxygène transcritique rencontrée dans les moteurs fusées cryotechniques, et constitue donc une première indication forte de la capacité du code à simuler de telles configurations. Ce point constitue l'un des objectifs de la thèse.

Ces données sont complétées avec des expériences à basse pression. Les taux d'expansion en densité et vitesse sont proches de ceux des jets basse pression. Finalement, les simulations indiquent que les taux d'expansion ne sont pas notablement dépendants du saut de densité initial des jets. Ce comportement avait déjà été suggéré par Pitts [110] et Chen et Rodi [23].

Les décroissances en vitesse et densité sont également étudiées. La pseudo-similarité suggérée par Chen et Rodi [23] est retrouvée. Lorsque les calculs sont comparés avec les SGE de Zong *et al.* [168, 166, 165] (qui, d'après l'auteur de cette thèse est la seule SGE de jet rond à pression supercritique disponible), de très forts écarts sont observés dans la zone de similitude où la pseudo-similarité n'est pas obtenue.

Une étude de la dynamique le long du coeur potentiel est réalisée. Le gradient de densité limite la croissance des instabilités de Kelvin-Helmholtz. Les fluctuations de vitesse radiale sont grandement atténuées dans le cas le plus dense. De plus, le moment barocline joue un rôle important en limitant l'apparition de vorticité dans le gradient de densité et en favorisant la création de vorticité dans les gaz légers. Le gradient de densité semble donc jouer un rôle très

important dans la stabilité, et donc la longueur, du coeur potentiel. Tous ces comportements sont en accord avec des observations venant de la littérature et indiquent que les simulation sont capables de reproduire les principaux phénomènes responsables de la déstabilisation d'un jet dense. Ce point est très important en vue de la simulation d'une configuration de type moteur fusée, dans laquelle l'oxygène est injecté avec une densité élevée par rapport aux gaz environnants, et où une bonne prédiction de la déstabilisation du jet dense aura certainement un impact majeur.

Dans la zone de transition, des lâchés de poches de fluide dense sont observés dans le cas 3 alors qu'elles sont rapidement dissoutes dans le cas 4. Il semble alors que les forts gradients de densité, particulièrement résistants aux fluctuations turbulentes, mais peut-être aussi la forte non-idéalité sur l'énergie sensible, modifie l'efficacité du mélange dans la région de transition.

Finalement, les jets à pression supercritique ont un comportement semblable aux jets à basse pression dans la région de similarité, et on retrouve les caractéristiques d'un jet à densité variable, avec cependant une très forte variation de densité qui ne peut être que difficilement atteinte à basse pression. L'évolution de l'écoulement dans la région de transition présente une dynamique particulière, qui semble être différente d'un jet gazeux.

Chapitre 7

SGE de jets coaxiaux réactifs cryotechniques

7.1 Introduction

Le banc Mascotte a été développé dans le but d'étudier des injecteurs coaxiaux cryotechniques dans des conditions représentatives de celles rencontrées dans les moteurs fusées [156, 158]. La version V03, qui permet la combustion de LOx/GH_2, est capable de supporter une pression chambre de 75 bar, supérieure à la pression critique de l'oxygène (voir Chap. 1). L'objectif premier est de montrer que les développements réalisés au cours de cette thèse permettent le calcul de systèmes réactifs à pression supercritique représentatifs de moteurs fusées et donnent des résultats en accord avec les données expérimentales disponibles. Deux cas sont simulés : le cas A60 et le cas C60 [14, 46]. Ces cas diffèrent uniquement par le débit d'hydrogène à l'injection (remarque : tous les autres paramètres, numériques et physiques, sont identiques) et sont détaillés en Sec. 7.2. La cinétique chimique utilisée dans les simulations est détaillée Sec. 7.3. Les paramètres numériques de la simulation sont donnés en Sec. 7.4. Les caractéristiques générales de l'écoulement sont présentées en Sec. 7.5. Après quelques vérifications simples (Sec. 7.6), les simulations numériques sont comparées avec l'expérience en Sec. 7.7. L'effet du débit d'hydrogène sur la flamme est présenté en Sec. 7.8.

7.2 Description des cas simulés

7.2.1 Domaine de simulation

Le domaine utilisé reprend la géométrie du banc expérimental Mascotte [158] et est représenté Fig. 7.1. Ce dernier est à section carrée de 50 mm x 50 mm et de longueur 400 mm. Dans l'expérience, une tuyère est placée en sortie afin de maintenir la pression. Pour ces calculs, la

pression est maintenue via la condition limite de sortie et la tuyère n'est pas simulée. Le film de refroidissement d'hélium utilisé dans l'expérience est également représenté dans la simulation. L'injecteur est représenté Fig. 7.2 (b). Il n'est pas biseauté comme dans l'expérience (Fig. 7.2 (a)) et conserve une épaisseur de 1 mm en sortie, contre 0.3 mm dans la configuration réelle. Ce choix a été dicté par des contraintes numériques. Une lèvre d'injecteur très fine nécessite l'utilisation de mailles de très petite taille. La conséquence directe en schéma explicite compressible est une pénalisation du pas de temps dans la simulation, car $\Delta t \approx CFL * \Delta x/(\|\overrightarrow{u}\| + c)$ où Δx est la taille caractéristique de la maille, c la vitesse du son, Δt est le pas de temps et CFL est le nombre de Courant-Frederich-Levy fixé à 0.9 dans la simulation. Le diamètre de l'injecteur d'oxygène est ainsi réduit à 3.6 mm (contre 5 mm dans l'expérience) et celui d'hydrogène reste inchangé à 10 mm. Il est à noter que l'injecteur pénètre de 10 mm dans la chambre.

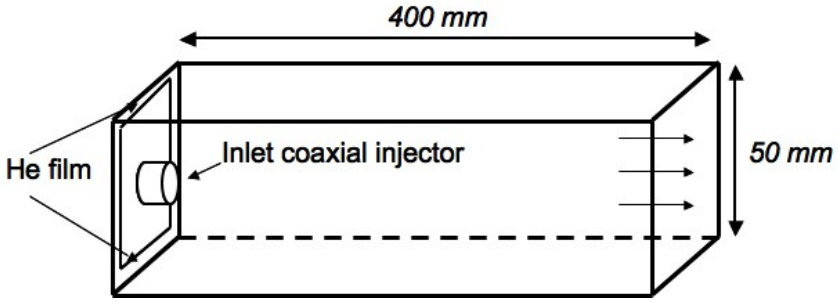


FIGURE 7.1 – Domaine de calcul.

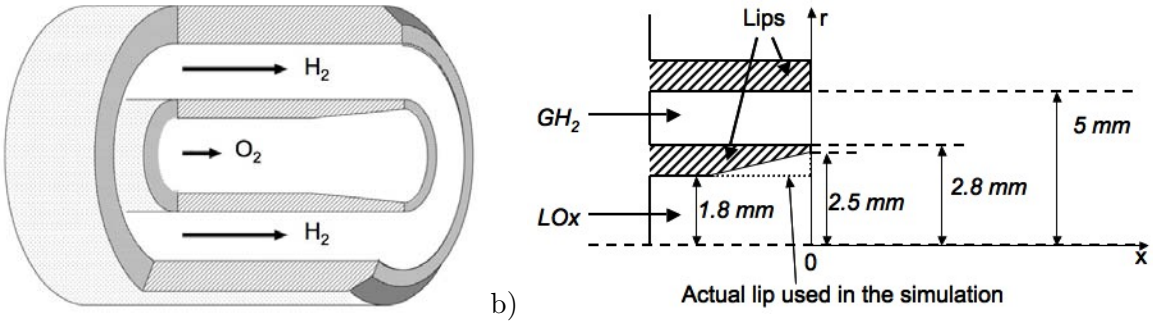


FIGURE 7.2 – a) Injecteur du banc expérimental Mascotte (Tiré de Candel *et al.* [14]). b) Injecteur utilisé dans la simulation.

7.2.2 Conditions d'injection

Le Tab. 7.1 rappelle les conditions d'injection des configurations A60 et C60. Les deux cas simulés, A60 et C60 [46] [63], sont à 60 bars, donc à pression supercritique au niveau de l'injection.

Ils diffèrent uniquement par le débit (*i.e.* la vitesse) de l'hydrogène à l'injection. La vitesse d'injection de l'oxygène est 7.8 m/s, celle de l'hydrogène vaut $u_{inj} = 160$ m/s pour le cas C60 et $u_{inj} = 242$ m/s pour le cas A60. L'oxygène est injecté à une température inférieure à sa valeur critique et est donc transcritique, tandis que l'hydrogène et l'hélium sont supercritiques et gazeux. Dans de telles conditions, la densité de l'oxygène est bien plus grande que celle de l'hydrogène (1340 kg.m^{-3} contre 5.25 kg.m^{-3}).

Espèce	Débit [g/s]	T_{inj} [K]	T_C [K]	P_C [bar]	ρ_{inj} [kg/m^3]
O_2	105	83	154	50.4	1340
H_2	A60 : 68 / C60 : 45	275	33	12.8	5.25
He	24.5	280	5.19	2.27	10

TABLE 7.1 – Conditions d'injection communes aux cas Mascotte A60 et C60. T_{inj} est la température d'injection, T_C et P_C sont la température et la pression critique de l'espèce considérée et ρ_{inj} est la densité à l'injection.

La modification de la géométrie de l'injecteur d'oxygène impose, afin de respecter le débit d'oxygène, une vitesse débitante accrue. De ce fait, le rapport des flux de quantité de mouvement $J = (\rho_{H_2} u_{H_2}^2)/(\rho_{O_2} u_{O_2}^2)$, ρ_k et u_k représentant la densité et la vitesse de l'espèce k, ne peut être respecté par rapport à l'expérience.
Le Tab. 7.2 donne quelques grandeurs caractéristiques distinguant les deux cas simulés. Le rapport des débits entre l'hydrogène et l'oxygène $E = \dot{m}_{O_2}/\dot{m}_{H_2}$, où $\dot{m}_{H_2}$ est le débit d'hydrogène et $\dot{m}_{O_2}$ est le débit d'oxygène, et donc la richesse globale $\phi = s\dot{m}_{H_2}/\dot{m}_{O_2}$, où $s = 8$ est le rapport de masse entre l'oxygène et l'hydrogène à la stœchiométrie, sont respectés dans les simulations. Remarquons que le mélange est très riche, avec de l'hydrogène toujours en excès.
Le rapport des flux de quantité de mouvement J est fortement modifié par rapport à l'expérience. Ce facteur impacte l'ouverture initiale de la flamme, qui diminue lorsque J augmente. Des résultats expérimentaux obtenus par Juniper [63] sont tracés en Fig. 7.3. L'angle d'ouverture reste proche de 4° pour $4 < J < 13$. L'effet semble donc moins important à pression supercritique qu'à pression souscritique [14, 63]. On peut donc supposer que le non respect de J dans la simulation aura un effet faible, avec une ouverture de jet légèrement sur-estimée.

Cas	u_{inj,H_2} [m/s]	u_{inj,O_2} [m/s]	E	ϕ	$J_{simulation}$	$J_{experience}$
A60	242	7,8	1,54	5,19	3,77	13,8
C60	160	7,8	2,33	3,43	1,65	6,15

TABLE 7.2 – Rapport des débits entre l'oxygène et l'hydrogène E, richesse globale ϕ et rapport des flux de quantité de mouvement de la simulation $J_{simulation}$ et de l'expérience $J_{experience}$ pour les deux cas A60 et C60.

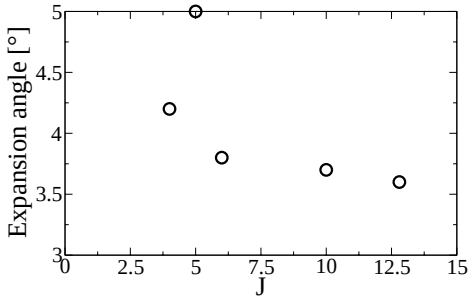


FIGURE 7.3 – Angles d'ouverture initiaux de la flamme (mesurée sur une distance de 35 mm) en fonction du rapport de flux de quantité de mouvement J obtenus par Juniper [63]. L'erreur sur l'estimation des angle est de l'ordre de 10 %.

7.3 Cinétique chimique

La cinétique chimique utilisée est une chimie à deux étapes issue des travaux de Rogers et Chinitz [127] (Tab. 7.3). Les nombres de Schmidt utilisés dans cette étude sont les mêmes que

n°	**Réaction**	**A** $[\mathbf{cm^3/mole.sec}]$	β	**Ea** **[cal/mole]**
1	$h2 + o2 => 2oh$	3.7E+015	0.000	3.0E+004
2	$2oh + h2 => 2h2o$	1.0E+017	0.000	5.0E+003

TABLE 7.3 – Cinétique réduite H2-O2 à deux étapes adaptée des travaux de Rogers [127]. A, β et Ea sont la constante pré-exponentielle, l'exposant de température et l'énergie d'activation.

ceux utilisés par G. Lacaze [72] dans ses travaux sur l'allumage des moteurs de fusée LOx/H_2, pour lesquels une cinétique réduite à 7 étapes est utilisée, et sont indiqués Tab. 7.4.

	H2	O2	OH	H2O
Sc	0,28	0,99	0,65	0,77

TABLE 7.4 – Nombres de Schmidt pour les différentes espèces.

En vue d'une application Mascotte où le régime de combustion est diffusif, le schéma à deux étapes a tout d'abord été validé par comparaison avec le schéma complexe (21 étapes, 8 espèces) de Conaire [30], sur une flamme mono-dimensionnelle laminaire de pré-mélange à richesse 1 et à 60 bar. Pour réaliser cette étude, le logiciel Cosilab développé par Softpredict (http ://www.SoftPredict.com) a été utilisé. La vitesse de flamme obtenue avec la chimie 2 étapes est satisfaisante, puisqu'elle vaut 11,7 m/s contre 10,3 m/s pour la chimie complexe. La température dans les gaz brûlés vaut 3810 K pour la chimie 2 étapes et 3660 K pour la chimie complexe, soit un écart acceptable de 4%.

La flamme de pré-mélange est ensuite calculée avec AVBP et comparée aux résultats de Cosilab en Figs. 7.4 et 7.5. La vitesse de flamme obtenue dans AVBP est 9.4 m/s, plus faible que celle de Cosilab. Cette différence est liée à la sous-estimation du coefficient de conductivité thermique de l'hydrogène (Sec. 2.9.3). Cette valeur est néanmoins proche de la valeur obtenue en chimie complexe sous Cosilab (10,3 m/s) et est donc satisfaisante. Les profils de température et d'espèce sont en très bon accord avec Cosilab et permet de conclure au bon comportement d'AVBP gaz réel pour le calcul d'une flamme mono-dimensionnelle de pré-mélange. Les équilibres thermo-chimiques dans les gaz brûlés sont bien retrouvés (Fig. 7.5).

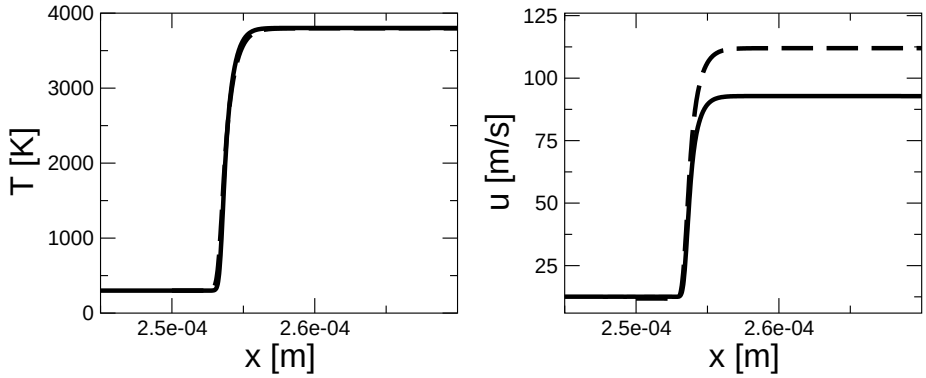


FIGURE 7.4 – Profils de température T et de vitesse u de la flamme de pré-mélange. — AVBP ; – – Cosilab.

Dans la configuration Mascotte, le régime de combustion est purement un régime de diffusion. Une flamme de diffusion laminaire à contre courant est donc calculée avec AVBP, à la fois pour tester la chimie et pour servir de référence dans l'analyse des résultats. Le maillage utilisé est présenté Fig. 7.6 et est construit selon les propositions de L. Pons [118] : le domaine est défini de manière à suivre les lignes de courant d'un écoulement potentiel 2D, décrites de manière générale par la relation :

$$xy = cte \tag{7.1}$$

où x et y sont les coordonnées dans les deux directions. La taille selon y du domaine est de 0.34 mm et le schéma numérique utilisé est TTG4A (*cf* Sec. 5.1). Le domaine présentant une symétrie axiale, seule une moitié de l'écoulement à contre-courant est simulée et une condition limite de symétrie est utilisée sur l'axe. Les bords du domaine sont modélisés par des parois adiabatiques glissantes. Puisque l'écoulement simulé est potentiel, les conditions d'injection sont données par la relation suivante :

$$u_{inj,O_2} = ax \qquad v_{inj,O_2} = -ay \tag{7.2}$$

où a est une constante (homogène à un taux d'étirement), et u et v sont les vitesse axiale et longitudinales. Afin de stabiliser la flamme au centre du domaine, il convient d'injecter le

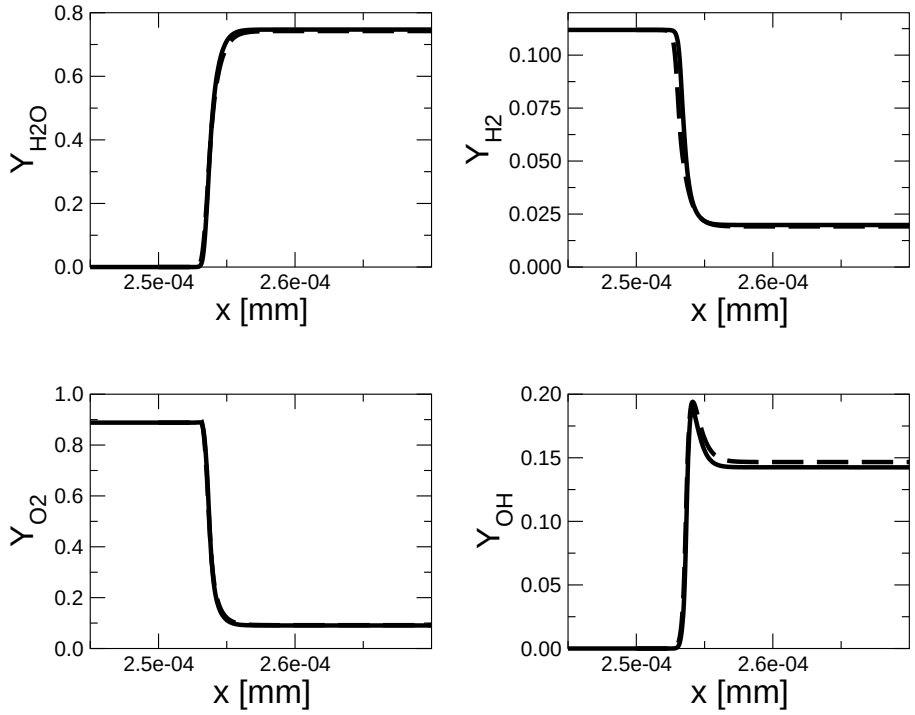


FIGURE 7.5 – Profils de fraction massique de O_2, H_2, OH et H_2O de la flamme de pré-mélange. — AVBP ; – – Cosilab.

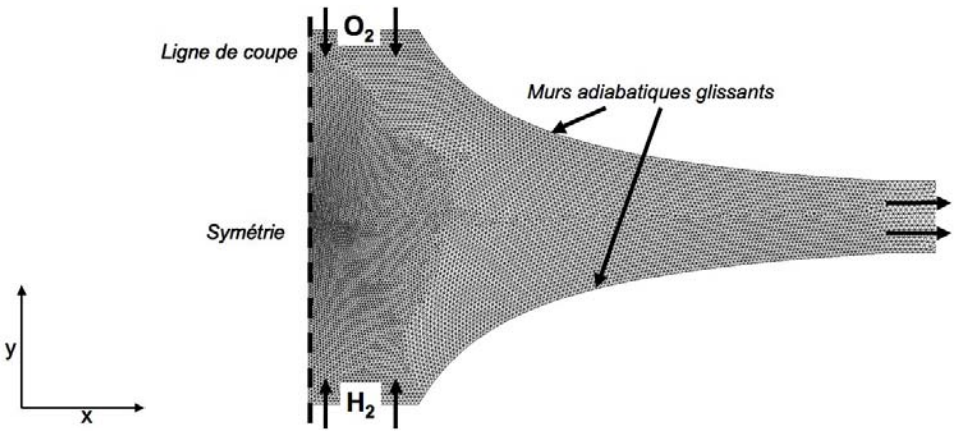


FIGURE 7.6 – Maillage utilisé pour la flamme à contre-courant.

même flux de quantité de mouvement à chaque entrée, ce qui donne la relation entre la vitesse

d'injection de l'hydrogène et de l'oxygène :

$$u_{inj,H_2} = u_{inj,O_2}\sqrt{\frac{\rho_{inj,O_2}}{\rho_{inj,H_2}}} = ax * 4.12 \qquad v_{inj,H_2} = -v_{inj,O_2}\sqrt{\frac{\rho_{inj,O_2}}{\rho_{inj,H_2}}} = ay * 4.12 \tag{7.3}$$

Les conditions d'injection du cas simulé sont données Tab. 7.5. La pression est proche de celle de Mascotte (65 bar contre 60 bar), tandis que la température de l'oxygène est plus élevée (300 K contre 83 K dans Mascotte), cette dernière ayant un impact limité sur la flamme (Ribert *et al.* [123] et Pons [116]). L'étirement au centre $\epsilon \approx (u_{O_2} + u_{H_2})/2$ vaut $\epsilon = 51800$ s^{-1}, représentatif de l'étirement dans Mascotte qui est de l'ordre de 200 000 s^{-1} en sortie d'injecteur (Sec. 7.4). Les lignes de courant obtenues sont tracées Fig. 7.7 (a). A titre d'exemple, le champ de OH est montré Fig. 7.7 (b).

T_{inj,O_2}	T_{inj,H_2}	P	ϵ	v_{inj,O_2} (x=0)	v_{inj,H_2} (x=0)
300 K	300 K	65 bar	51 800 s^{-1}	3,4 m/s	14 m/s

TABLE 7.5 – Conditions thermodynamiques de la flamme de diffusion à contre-courant.

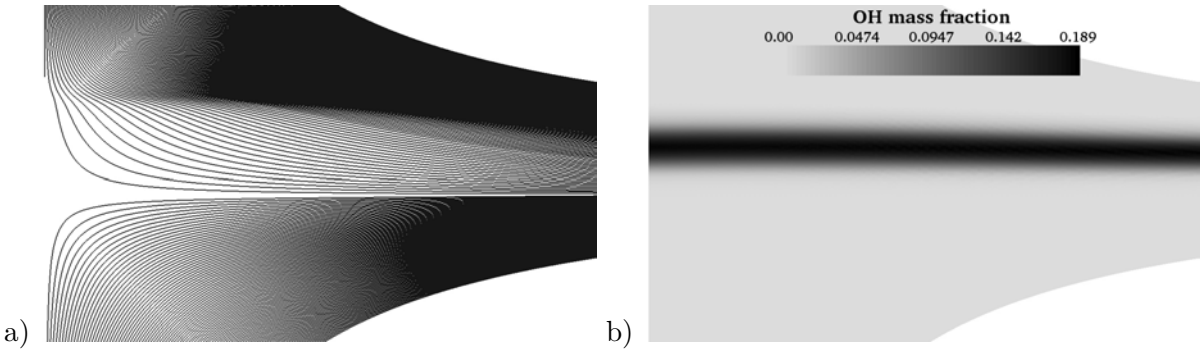
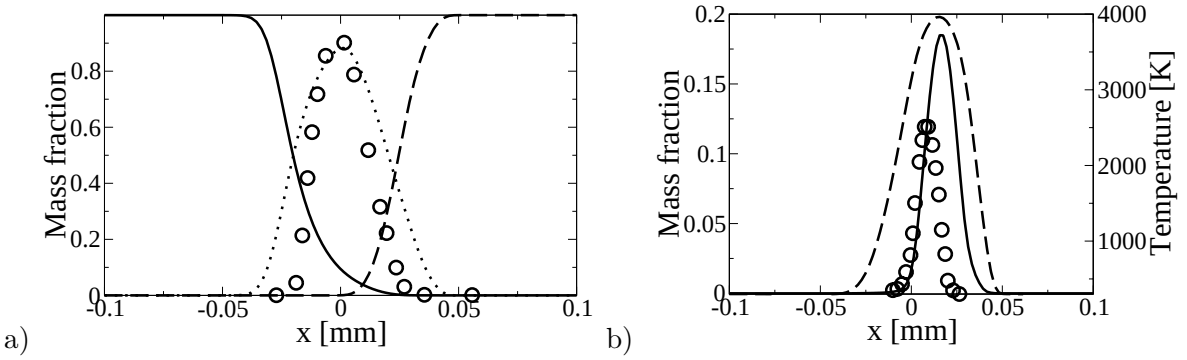


FIGURE 7.7 – Lignes de courant (a) et champ de OH pour la flamme à contre courant.

Les fractions massiques de chacune des espèces sont tracées Fig. 7.8 (a) (b). Des comparaisons avec les calculs de flamme à contre courant de Ribert *et al.* [123] en chimie et transport complexes sont effectués sur les champs de H_2O et de OH. Ces valeurs sont issues d'un calcul dans des conditions différentes à 100 bar et avec un taux d'étirement de 2000 s^{-1}. Il est cependant possible de comparer les résultats en utilisant les règles de similarité des flammes de diffusion (qui est une hypothèse de chimie infiniment rapide, valable dans notre cas loin de l'extinction). L'épaisseur de flamme par exemple est proportionnelle à $\sqrt{P}$ et $\sqrt{\epsilon}$. En multipliant l'épaisseur de la flamme issue de [123] par : $\sqrt{100/65} * \sqrt{2000/51800} \approx 0.24$ on obtient des profils comparables. On voit sur la Fig. 7.8 que la correspondance entre le présent calcul et Ribert et al. [123] est bonne. L'épaisseur de la flamme AVBP est plus grande et fait environ 0.08 mm d'épaisseur. Cette information est à retenir pour la SGE et l'épaississement à appliquer. On voit aussi que le positionnement de OH est correct, ce qui permettra des comparaisons avec les mesures.



a) b)

FIGURE 7.8 – Fractions massiques d'H_2, d'O_2 et d'H_2O (a) et fraction massique d'OH (b) le long de la ligne de coupe (Fig. 7.6).
(a) — H_2 ; − − O_2 ; · · · H_2O ; ∘ H_2O (Ribert *et al.* [123]).
(b) — OH ; − − température ; ∘ OH (Ribert *et al.* [123]).

La comparaison est faite également pour le dégagement de chaleur intégré au travers de la flamme et la température maximale (Tab. 7.6). La température maximale est sur-estimée de 8%, ce qui reste acceptable en vue d'une application SGE. L'accord entre les dégagements de chaleur est très bon.

	AVBP	Ribert et al. [123]
Dégagement de chaleur	14 300 W.cm^{-2}	14 700 W.cm^{-2}
Température maximale	3970 K	3660 K

TABLE 7.6 – Comparaison entre le dégagement de chaleur intégré au travers de la flamme et la température maximale obtenus par AVBP et Ribert et al. [123]

La structure des flammes de diffusion est plus claire sur les courbes en scalaire passif ou fraction de mélange. On utilise ici le scalaire Z_H (Eq. 7.4) dont la valeur à la stœchiométrie correspond à $Z_{H_{st}} = 0.11$:

$$Z_H = 2 * \frac{Y_{H_2}}{2} + 2 * \frac{Y_{H_2O}}{18} + \frac{Y_{OH}}{17} \tag{7.4}$$

La température est tracée en fonction de Z_H sur la Fig. 7.9 (a) et comparée à la température d'équilibre obtenue sous Cosilab. La température de la flamme à contre-courant est proche de la température à l'équ ilibre car la chimie est très rapide. Côté riche ($Z_H > 0.11$), l'écart entre les deux température est liée à la forte diffusivité de l'hydrogène. Cependant, à la stœchiométrie ($Z_H = 0.11$), la température obtenue en contre-courant est supérieure de 160K à la température d'équilibre, qui est la température maximale pouvant être atteinte. Ce comportement ne peut être attribué à une mauvaise prédiction de l'équilibre thermo-chimique par le code, puisqu'il est correctement retrouvé dans la flamme de pré-mélange (Figs. 7.4 et 7.5). Un mauvais calcul de

diffusion ne peut non plus être à l'origine d'un tel comportement, puisque la diffusion ne peut que diminuer la température maximale. Finalement, le problème est peut être du à la résolution en maillage insuffisante dans la zone réactive, ce qui peut modifier l'équilibre chimique local et la température. Ce point est à approfondir.

Le taux de dégagement de chaleur est tracé en fonction de Z_H sur la Fig. 7.9 (b). Il est intéressant de constater que les maxima de dégagement de chaleur ne sont pas localisés à la stœchiométrie ($Z_{H_{st}} \approx 0,11$), mais que deux pics sont notables à $Z_H \approx 0,17$ et $Z_H \approx 0,03$. Le dégagement de chaleur reste significativement non nul de $Z_H = 0$ à $Z_H = 0,3$. Le taux de

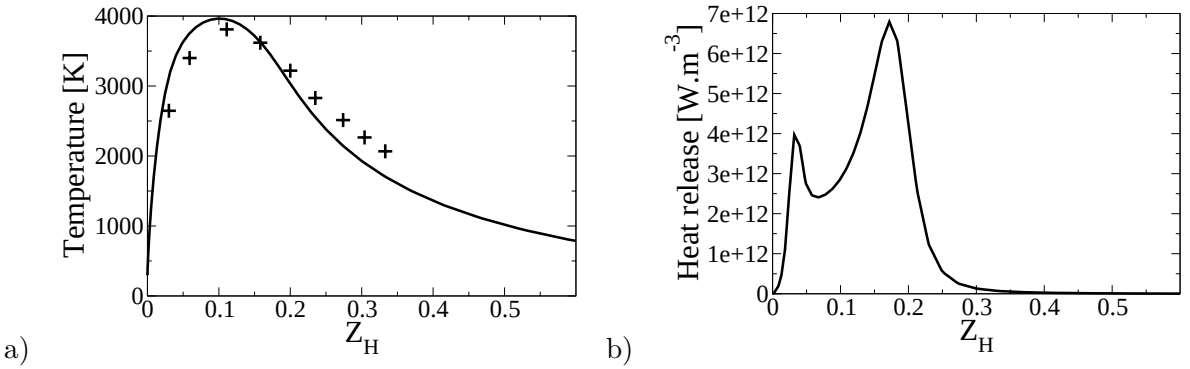


FIGURE 7.9 – (a) Température de la flamme à contre-courant en fonction du scalaire passif Z_H. + Température d'équilibre. (b) Taux de dégagement de chaleur en fonction du scalaire passif Z_H.

production des espèces et les taux de réaction nets (réaction "directe" moins réaction "inverse") sont tracés en fonction de Z_H sur la Fig. 7.10. La diminution du taux de dégagement de chaleur Fig. 7.9 pour $0,03 < Z_H < 0,17$ est associée à la production de OH, tandis que les pics de dégagement de chaleur pour $Z_H \approx 0,17$ et $Z_H \approx 0,03$ sont liés à la formation de H_2O.

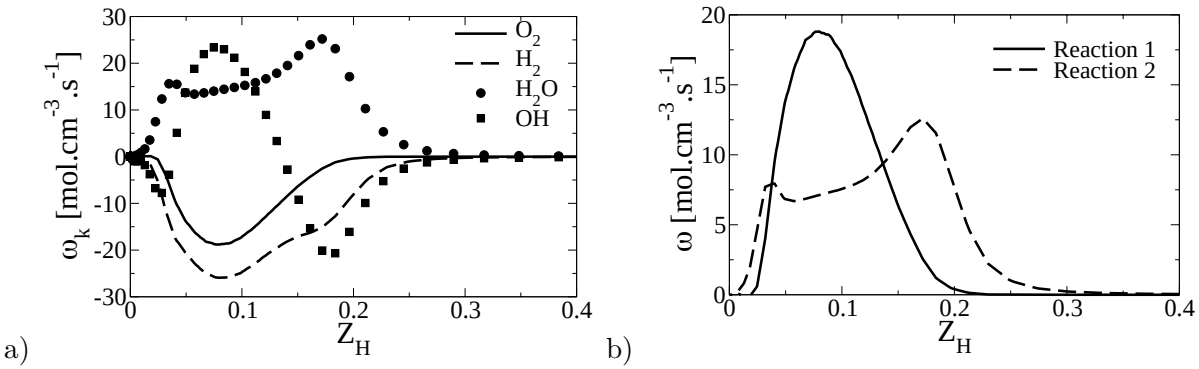


FIGURE 7.10 – Taux de production / consommation des espèces (a) et taux de réaction nets (b).

7.4 Paramètres numériques

Les simulations sont réalisées sur un domaine tri-dimensionel contenant 850 000 points et 5 000 000 tétraèdres. Des coupes du maillage sont données Figs. 7.11 et 7.12. La plus petite cellule, dont la taille caractéristique vaut 0.16 mm, est située au niveau de la lèvre d'injecteur entre l'oxygène et l'hydrogène. Il y a donc 6 cellules derrière cette lèvre, ce qui peut permettre à la flamme de s'accrocher.
Toutes les parois du domaine sont adiabatiques. Les entrées et la sortie utilisent des conditions partiellement réfléchissantes. Suite aux résultats obtenus sur les jets ronds non-réactifs (voir Chap. 6), des fluctuations turbulentes sont superposés aux vitesses à l'injection d'oxygène et d'hydrogène avec une intensité de 3% [69] [141].
Le schéma numérique utilisé est TTG4A (voir Chap. 5) et le modèle de sous-maille est WALE (voir Chap. 4).
Le modèle de combustion utilisé pour la simulation numérique est le modèle de flamme épaissie dynamique. Une estimation de l'étirement en sortie d'injecteur est $\epsilon \approx (u_{H_2} - u_{O_2})/\Delta_l \approx 200/0,001 = 2.10^5 s^{-1}$ (Δ_l est l'épaisseur de la lèvre entre l'oxygène et l'hydrogène). L'épaisseur de flamme (laminaire) juste derrière la lèvre vaut alors : $\delta_f^0 \approx 0,08/\sqrt{2.10^5/51800} \approx 0.04$ mm. Pour avoir au moins 3 points dans le front de flamme, il faut épaissir la flamme de $\sqrt{F} \approx 11$, soit $F = 120$. La constante pour le modèle d'efficacité (*i.e.* plissement de la flamme, Eq. 4.42, Sec. 4.4.2) est $\beta = 0.05$ (plus faible que la valeur 0.3 généralement utilisée). La solution initiale est construite à partir de produits de combustion chauds (2500K) jusqu'en fin de domaine sauf dans la partie amont du domaine proche des injecteurs d'hélium (région où le maillage est grossier sur la Fig. 7.11) où de l'hydrogène à 275 K est utilisé.

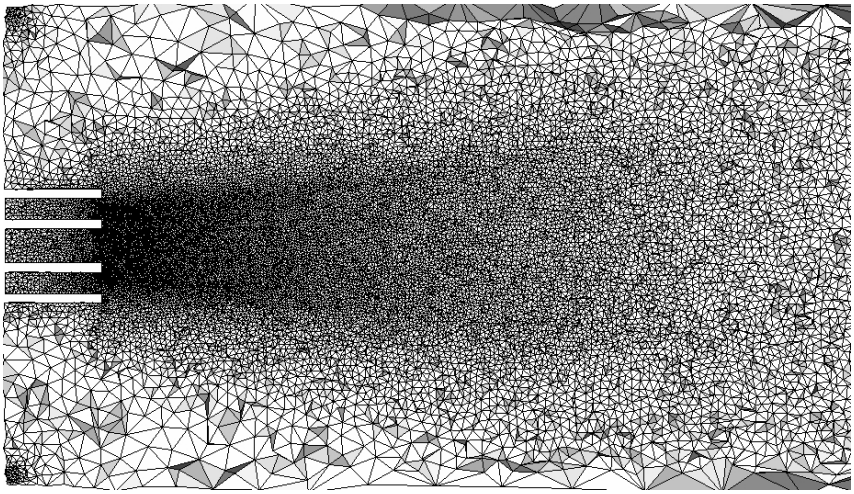


FIGURE 7.11 – Coupe du maillage dans le plan médian proche de l'injecteur.

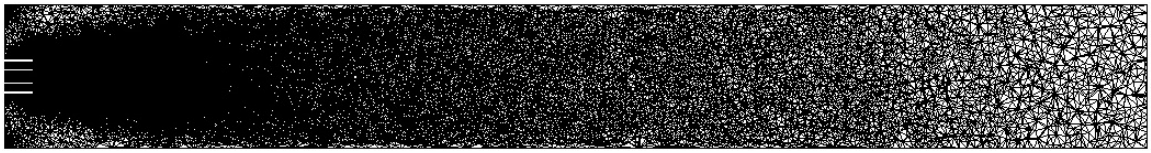


FIGURE 7.12 – Coupe du maillage dans le plan médian sur tout le domaine (400 mm).

7.5 Résultats

Des coupes de champs moyens et instantanés représentatifs du comportement des jets sont montrées Figs. 7.13 à 7.18. Dans les deux cas de calcul, trois régions peuvent être distinguées en fonction de la distance à l'injecteur x :

- Pour x<40 mm : L'ouverture de la flamme est faible et se développe autour du jet d'oxygène dense (Figs. 7.13 et 7.17). Le jet d'hydrogène gazeux injecté à plus de 100 m.s^{-1} cisaille fortement le jet d'oxygène dense injecté à moins de 10 m.s^{-1} (Fig. 7.14) et étire notablement la flamme. De petites et intenses structures cohérentes habituellement rencontrées dans la dynamique de jet entourent le jet d'oxygène dense. La taille caractéristique de ces structures est liée au diamètre du jet et au cisaillement. Du fait du fort étirement de la flamme, le dégagement de chaleur est plus intense dans cette région que dans le reste du domaine (Fig. 7.15) et on observe une forte interaction entre les structures cohérentes et le dégagement de chaleur (Fig. 7.16).
- Pour 40 mm<x<70 mm : L'ouverture de la flamme s'accentue (Fig. 7.13). L'activité tourbillonnaire intense observée le long du jet dense, générée par le fort cisaillement initial entre le jet d'hydrogène gazeux et l'oxygène dense, change de topologie et les structures de vorticité perdent en intensité et augmentent en taille (Fig. 7.14). Cette région marque une transition d'un écoulement localisé autour d'un jet dense rectiligne, entouré de structures cohérentes très énergétiques, vers une dynamique de plus grande échelle. Le jet dense se déstabilise fortement dans cette région (Fig. 7.17).
- Lorsque x>70 mm : La flamme atteint son expansion maximale. Il semble que les structures cohérentes adoptent une taille caractéristique plus grande du fait du confinement (Fig. 7.14 et Sec. 7.8.2). La flamme qui était initialement très fine et fortement étirée est désormais plus diffuse et présente des plissements de grande échelle (Fig. 7.18). Des interactions entre la dynamique (grande échelle) et la combustion sont encore notables ("poches" de réaction, Fig. 7.16 à $50 < x < 150$), cependant le dégagement de chaleur est au moins d'un ordre de grandeur inférieur à celui de la zone proche injecteur.

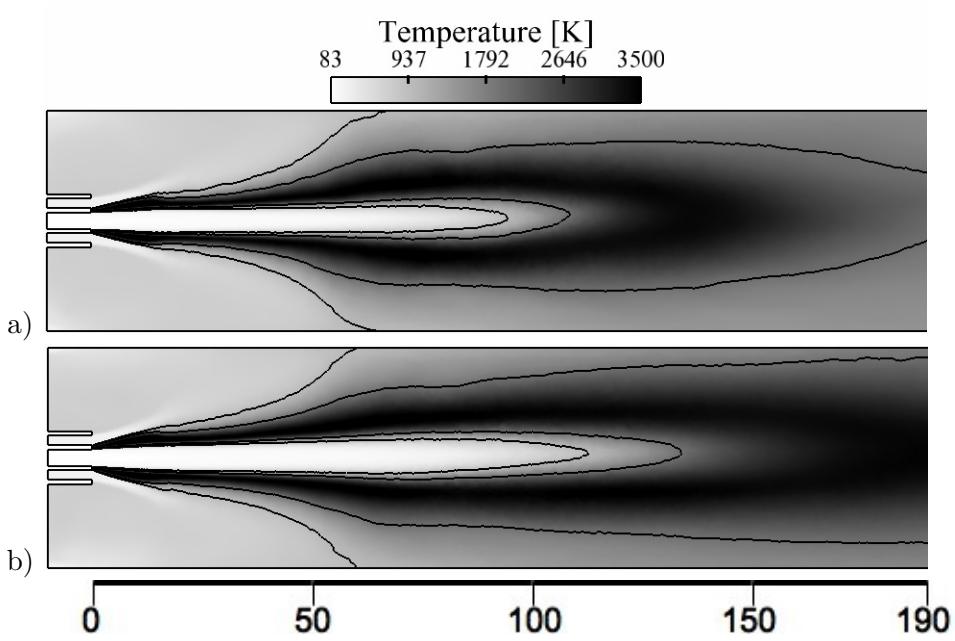


FIGURE 7.13 – Coupe du champ moyen de température dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours T=1000 K et T=2000 K.

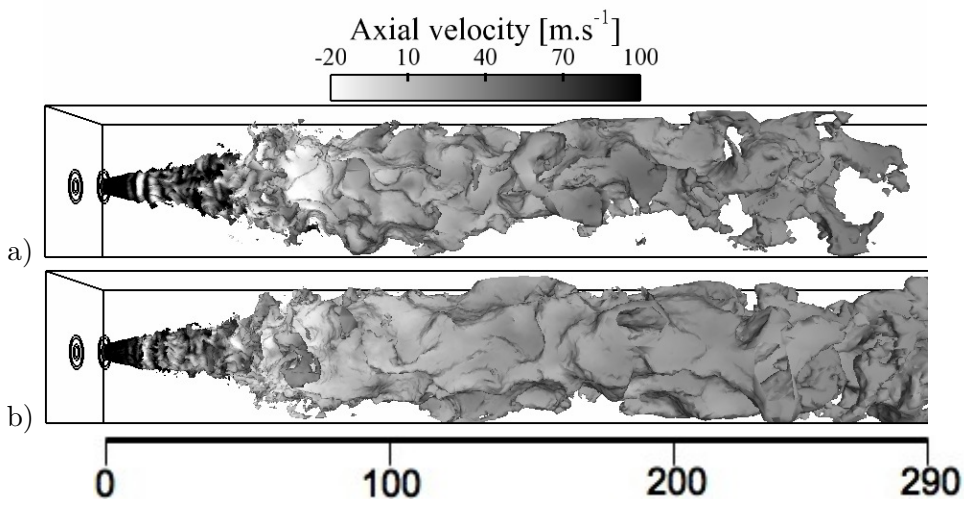


FIGURE 7.14 – Iso-contour de température (2000 K), sur une distance de 300 mm (3/4 du domaine). (a) A60 ; (b) C60.

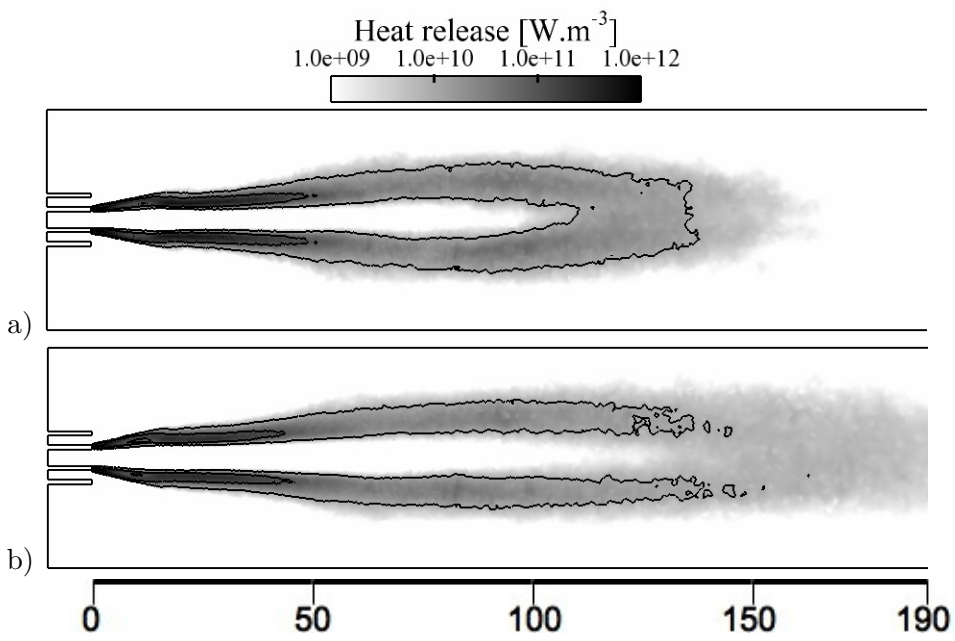


FIGURE 7.15 – Coupe du champ moyen de taux de dégagement de chaleur Q sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours Q=10^{11} W.m^{-3} et Q=10^{10} W.m^{-3}.

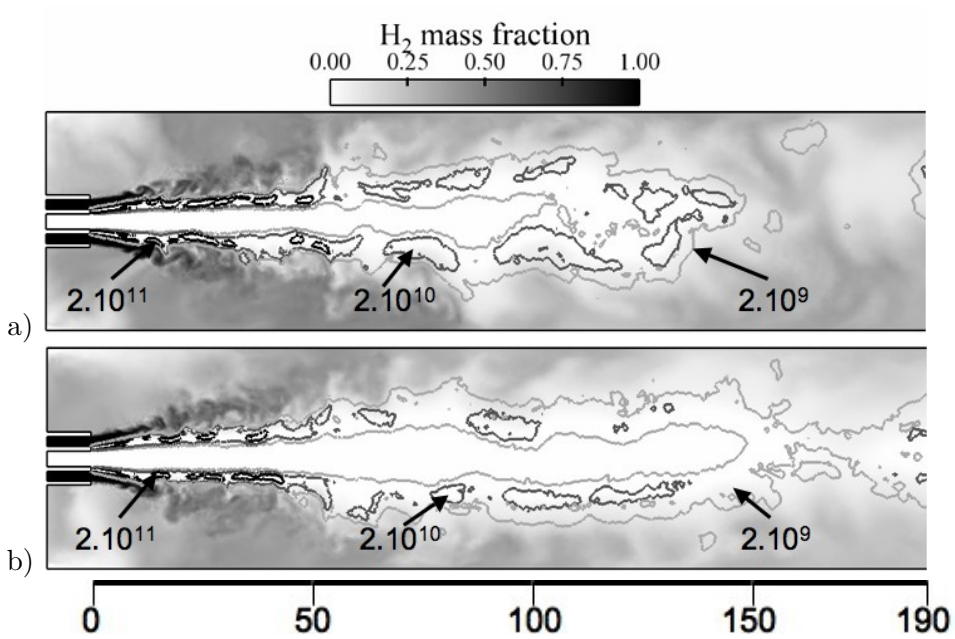


FIGURE 7.16 – Coupe du champ instantané de la fraction massique de H_2 sur une distance de 200 mm et iso-contours de dégagement de chaleur 2.10^{11}, 2.10^{10} et 2.10^9 W/m^3. (a) A60 ; (b) C60.

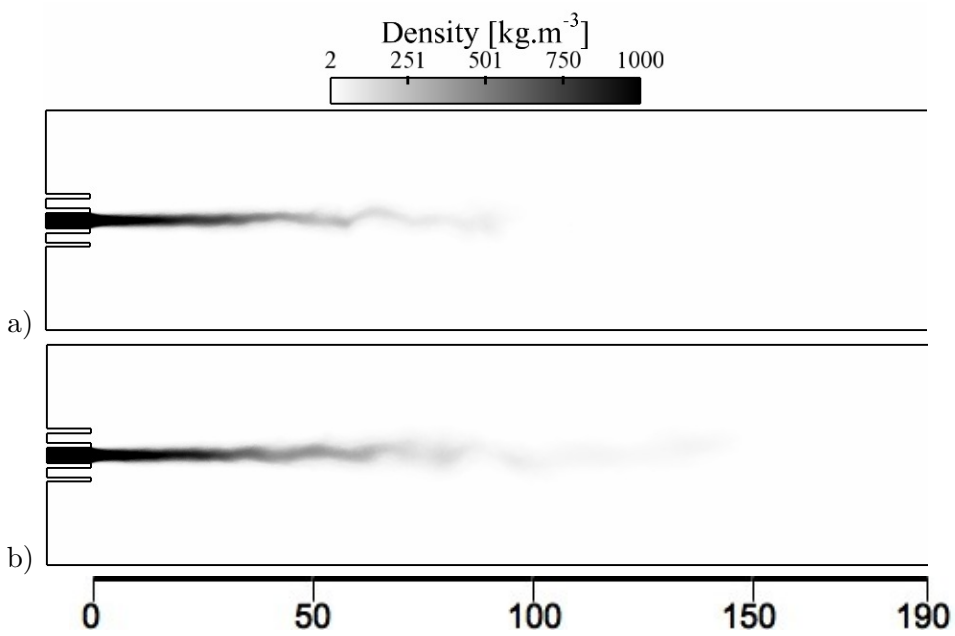


FIGURE 7.17 – Coupe du champ instantané de densité dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60.

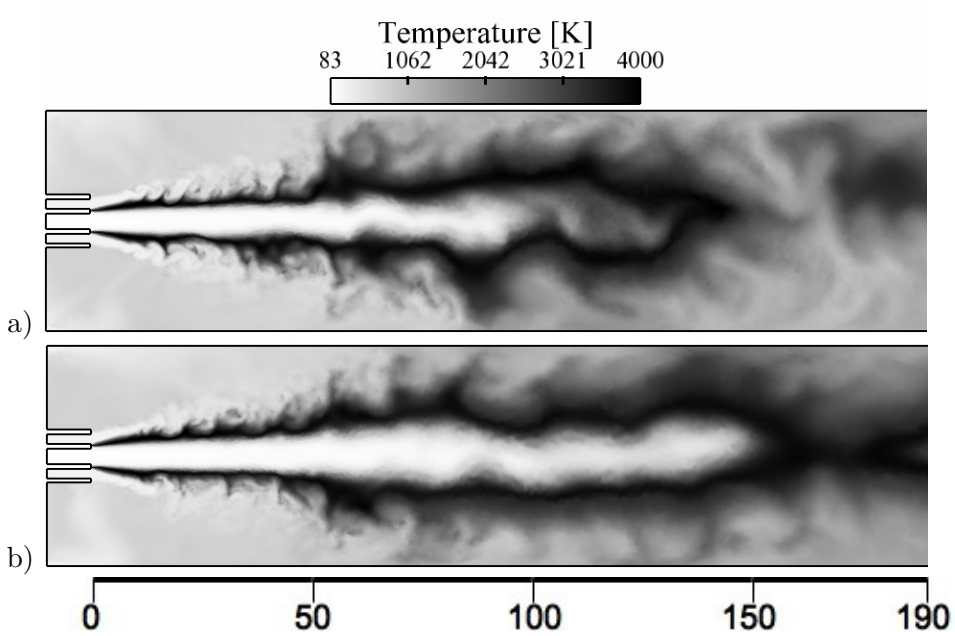


FIGURE 7.18 – Coupe du champ instantané de température dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60.

7.6 Structure de flamme

7.6.1 Température de sortie

Il est possible de calculer analytiquement la température des gaz brûlés en fin de domaine, qui est la température d'équilibre du mélange H_2,O_2 et He à la stœchiométrie d'injection. Dans les deux cas, A60 et C60, la combustion est complète en fin de domaine et on peut comparer la température de sortie à la température théorique. Le mélange avec les gaz frais entourant la flamme n'est pas parfait et la température de sortie est obtenue en moyennant la température sur un plan de coupe à 10 mm en amont de la sortie (notamment pour le cas C60, qui a la flamme la plus longue). Le Tab. 7.7 donne les températures de sortie obtenues par la simulation et les températures théoriques. On obtient un bon accord, avec une déviation maximale de 1,2% pour le cas C60.

Cas	$T_{theorique}$	$T_{simulation}$	ΔT relatif
A60	1539 K	1532 K	$\approx$ 0,5 %
C60	1960 K	1935 K	$\approx$ 1,2 %

TABLE 7.7 – Température moyenne de sortie pour les cas A60 et C60, comparé à la température théorique.

7.6.2 Structure en scalaire passif

Dans la mesure où l'on obtient une flamme de diffusion pure, il est naturel d'étudier la structure de flamme en fonction de Z_H, et de comparer avec les résultats de la flamme à contre-courant de la Sec. 7.3. La chimie hydrogène/oxygène est très rapide, avec un nombre de Dämköhler [1] $Da = \tau_f/\tau_c$ de l'ordre de 10^4. Les effets dus à l'étirement local sont alors peu visibles si bien qu'une flamme laminaire à contre-courant à Da suffisamment élevé, même si on n'a pas exactement le même étirement, aura une structure similaire. Les résultats pour le cas A60 sont présentés Fig. 7.19 où 9 000 points pris sur une coupe axiale à travers le domaine sont représentés. On retrouve un très bon accord avec la structure de flamme à contre courant. Les points "froids" à une température inférieure à 1000 K sur la Fig. 7.19 (a) représentent le mélange entre

1. il est possible de définir un nombre de Damköler pour la flamme à contre courant [114] : $Da = \frac{\tau_f}{\tau_c}$ 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 caractéristique de la chimie. Le taux de dissipation scalaire au niveau de la flamme dépend uniquement de l'étirement : $\chi_f = \frac{a}{\pi} exp\left[-2\left(erf^{-1}\left(\frac{\phi-1}{\phi+1}\right)\right)^2\right]$, où ϕ est définie par : $\phi = \frac{sY_{H_2,inj}}{Y_{O_2,inj}} = 8$ dans le cas de la combustion $H_2 - O_2$. Un développement limité au premier ordre de la fonction erreur inverse permet de simplifier la relation : $erf^{-1}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}x + \circ(x^2)$ et finalement $\chi_f \approx 0.1a \sim 10^4 \mathrm{s}^{-1}$ pour les moteurs fusée [123] et $\tau_c \approx 10^{-8}\mathrm{s}^{-1}$ pour la combustion $H_2 - O_2$ ce qui donne $Da \approx 10^4$.

l'hydrogène et l'hélium. Ils sont également sur la Fig. 7.19 (b).

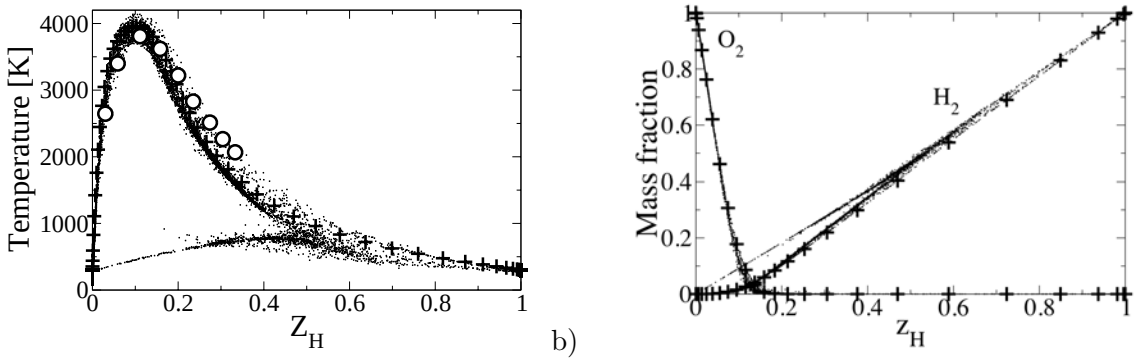


FIGURE 7.19 – (a) Température en fonction de Z_H. (b) Fractions massiques de O_2 et H_2 en fonctions de Z_H. + Résultats de flamme à contre courant (Sec. 7.3) ; ∘ Calcul d'équilibre. Cas A60.

L'épaississement de la plage de températures, dans la zone réactive, est très certainement lié à des effets d'étirement de la flamme. On a vu en effet que les étirements rencontrés dans la simulation Mascotte sont, par exemple en sortie d'injecteur, de l'ordre de 200 000 s^{-1} contre 50 000 s^{-1} dans le calcul à contre-courant. Lorsque la flamme est fortement étirée, la température maximale dans la zone réactive $(0,03 < Z_H < 0,25)$ diminue [114]. Cet effet est d'autant plus marqué que les conditions sont proches de la stœchiométrie ($Z_H \approx 0.11$). Dans la région riche ($Z_H > 0.11$), on observe la présence de températures supérieures à la température de la flamme à contre-courant et inférieures à la température d'équilibre. L'écart entre ces deux températures en dehors de la zone réactive est associé à la grande diffusivité de l'hydrogène. Les températures situées dans la région intermédiaire sont alors très probablement liées à une modification de la diffusion d'espèces par l'activation de viscosité turbulente (sous-maille) ou de diffusion artificielle qui ne dépendent pas des nombres de Schmidt Sc_k de chaque espèce. Le nombre de points dans cette région reste cependant très faible.

On note des températures légèrement supérieures (de 300 K) à la température d'équilibre à la stœchiométrie qui ne sont *a priori* pas physiques, puisque la température d'équilibre est la température maximale qu'il est possible d'atteindre à une richesse donnée. La région du domaine de calcul où la température est supérieure à la température maximale théorique est proche de l'injecteur, là où de très forts gradients sont présents et où la résolution numérique peut s'avérer insuffisante. Comme cela avait été suggéré pour la flamme à contre-courant (Sec. 7.3), l'équilibre chimique local peut alors être légèrement modifié, conduisant à des changements de température. Cette région est représentée par un iso-contour de température égale à 4000 K sur la Fig. 7.20 pour le cas A60.

Pour mieux comprendre ce qui se passe dans cette zone, la température ainsi que les fractions massiques le long des coupes A et B sont tracées Fig. 7.21. Alors que sur la ligne de coupe B, la

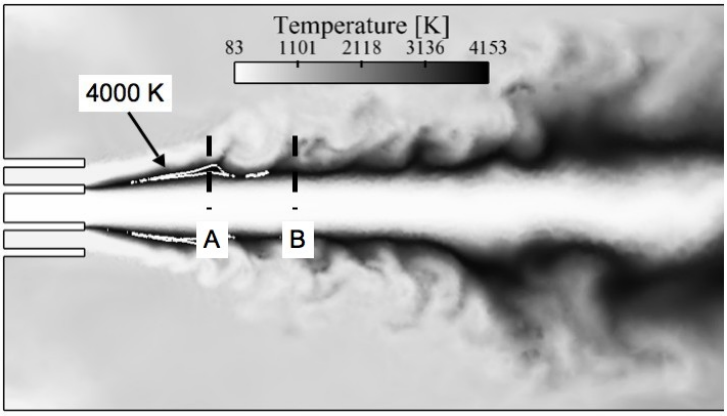


FIGURE 7.20 – Champ instantané de température pour le cas A60. L'iso-contour permet de visualiser la zone où la température est supérieure à 4000 K. – – lignes de coupes.

structure de flamme est très proche de la flamme à contre-courantet reste toujours en-dessous de l'équilibre chimique, la température le long de la coupe A dépasse la température d'équilibre du côté hydrogène. Dans les deux cas, les fractions massiques sont très bonnes, ce qui indique un bon calcul du mélange local et de Z_H.

7.6.3 Epaississement de la flamme

Une coupe du champ instantané du taux de réaction net (bilan entre la réaction directe et la réaction inverse) de la réaction 2 est présentée en Fig. 7.22. Un iso-contour d'épaississement égal à 50 nous permet de constater que l'épaississement localise correctement la zone réactive. Un autre exemple est donné en Fig. 7.23 où les réactions "directes" 1 et 2, ainsi que le senseur d'épaississement, sont tracés le long des coupes A et B (Fig. 7.23). L'épaississement est correctement localisé autour de la zone réactive et est à sont maximum lorsque la réaction devient importante.

7.7 Comparaison avec les résultats expérimentaux

7.7.1 Zone proche injecteur

La région proche injecteur (20 mm) est comparée aux mesures d'émission OH* de Juniper [63] sur la Fig. 7.24. Les émissions OH* sont mesurées sur un côté du domaine expérimental, et le signal obtenu représente donc l'intégrale des émission au travers de la flamme, si bien que les résultats ont été traités par transformées d'Abel pour obtenir les coupes présentées (la technique est détaillée dans la thèse de Juniper [63]). D'après Juniper [63], il y a émission OH* lors de la

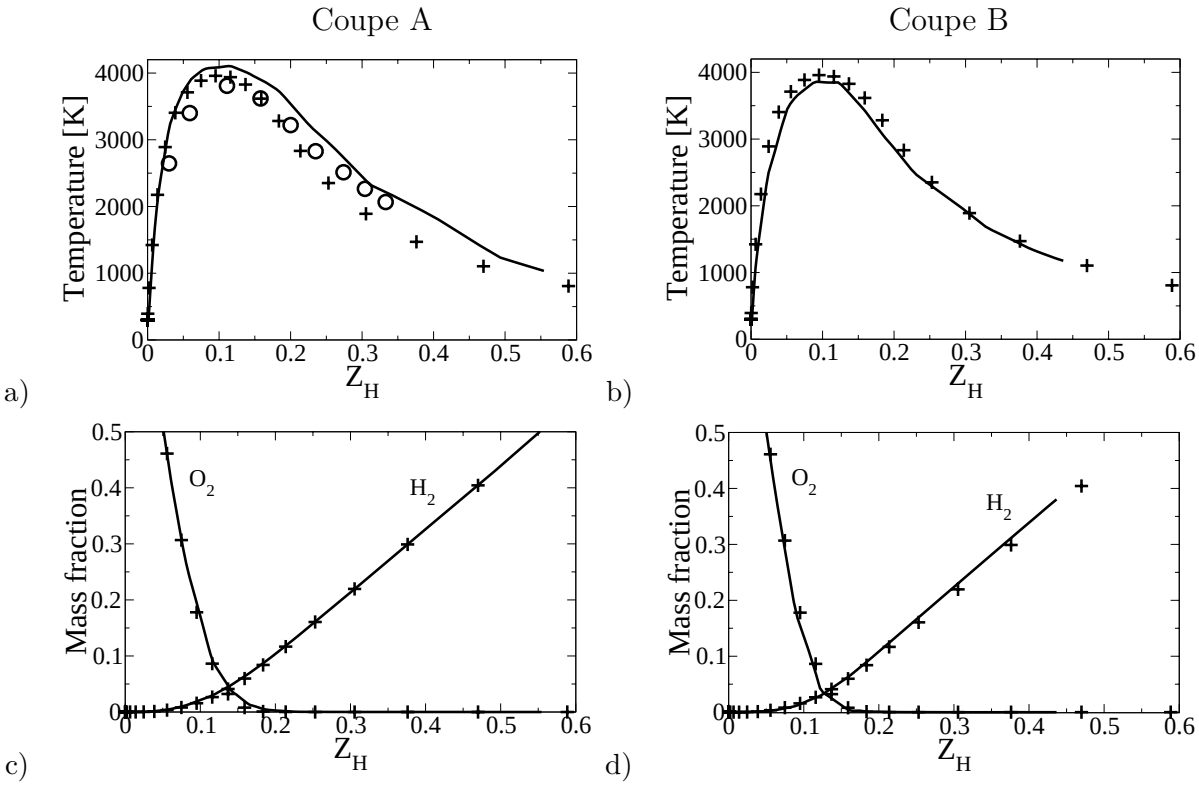


FIGURE 7.21 – (a) et (b) Coupe 1D de température en fonction de Z_H le long des lignes de coupe A et B respectivement. (c) et (d) Coupe 1D des fractions massiques de O_2 et H_2 en fonction de Z_H le long des lignes de coupe A et B respectivement. — Simulations ; + Résultats de flamme à contre courant (Sec. 7.3) ; ∘ Température d'équilibre.

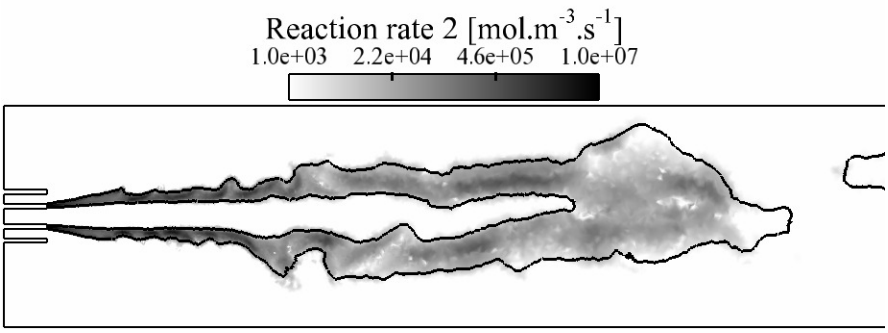


FIGURE 7.22 – Champ instantané du taux de réaction net 2 (réaction directe - réaction inverse). — iso-contour d'épaississement égal à 50.

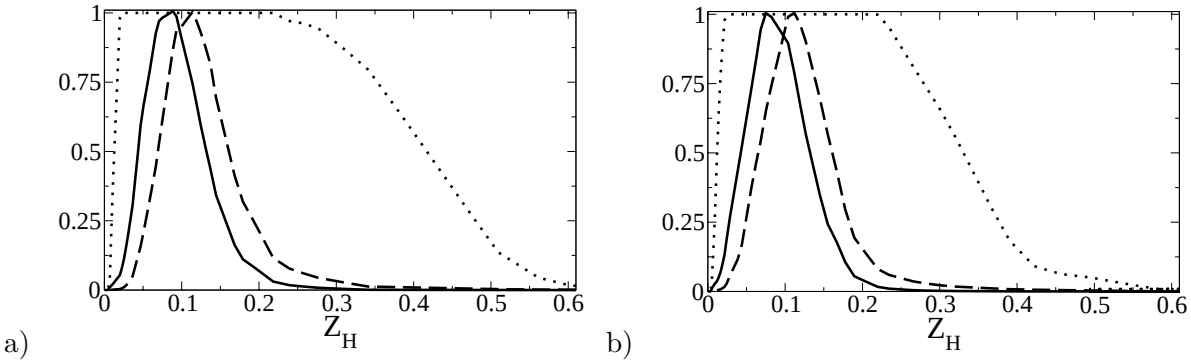


FIGURE 7.23 – Coupes à x=23 mm (a) et à 33 mm (b) de l'injecteur à travers la flamme en fonction de Z_H. —— taux de réaction 1 normalisé (direct) ; − − taux de réaction 2 normalisé (direct) ; · · · senseur d'épaississement .

création du radical OH, ce qui permet de localiser la zone réactive. Dans la simulation, l'émission OH* est reconstruite à partir des réactions chimiques productrices de OH :

$$\dot{\omega}_{OH} \quad = \quad W_{OH}(\dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_{r2}) \tag{7.5}$$

où $\dot{\omega}_{OH}$ représente le taux de production du radical OH, W_{OH} est la masse molaire de OH, $\dot{\omega}_1$ est le taux de réaction direct ("forward") de la réaction 1 et $\dot{\omega}_{r2}$ est le taux de réaction inverse ("backward") de la réaction 2.

A partir de la Fig. 7.24, on constate que la flamme simulée est accrochée aux lèvres de l'injecteur, alors que dans l'expérience la flamme se stabilise à une très courte distance de l'injecteur [139]. Ce comportement est lié à la condition limite de paroi adiabatique. Dans l'expérience, les lèvres sont refroidies par l'oxygène et l'hydrogène injectés à très faible température. Il faudrait prendre cet effet thermique en compte pour améliorer le calcul.

Au niveau de la lèvre, la flamme est plus épaisse que celle observée expérimentalement du fait de la modification de géométrie (Sec. 7.2) dans la simulation qui explique une couche de mélange plus épaissie. De plus, l'épaississement numérique du modèle de flamme épaissie génère un épaississement de la flamme de 10 à cet endroit.

Le comportement initial de la zone réactive est néanmoins en bon accord avec l'expérience puisque dans les deux cas on observe, juste derrière la lèvre, une zone où la flamme se contracte faiblement avant de s'élargir. L'expansion de la flamme est bien retrouvée, au bon endroit, avec cependant une ouverture légèrement plus importante. Dans l'expérience comme dans le calcul, la flamme est positionnée immédiatement autour du jet dense (zone sombre). En fait, la zone réactive est contrainte par ce jet (voir Pons [116]). Côté oxygène, ce phénomène est bien capturé et l'accord entre expérience et calcul est bon. La différence apparaît côté hydrogène où l'expansion de la zone réactive est plus grande dans la simulation que dans l'expérience.

Les champs instantanés de production de OH de la simulation sont également comparés à des mesures instantanées de dégagement de OH* en zone proche injecteur (40 mm) obtenues

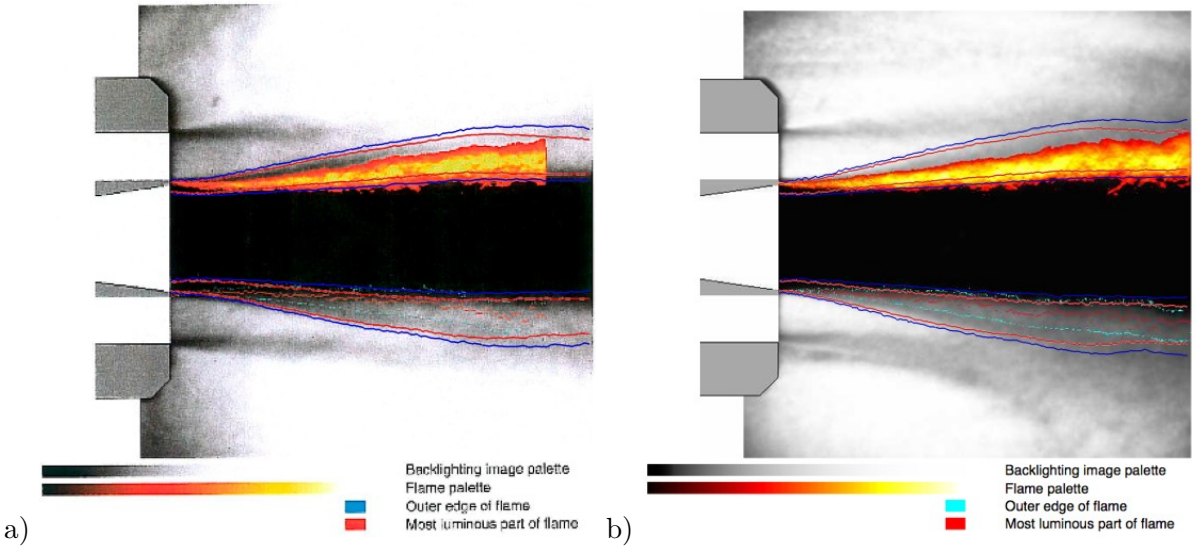


FIGURE 7.24 – Comparaison des émissions de OH*, zone proche injecteur (20 mm). (a) : A60 ; (b) : C60. — $\dot{\omega}_{OH} = 5.10^5\ kg.m^{-3}.s^{-1}$ (simulation) ; — $\dot{\omega}_{OH} = 1.10^5\ kg.m^{-3}.s^{-1}$ (simulation). Les résultats expérimentaux proviennent de Juniper [63] et Candel *et al* [14].

par fluorescence induite par laser par Singla [137] [139] sur la Fig. 7.25. La fluorescence induite par laser permet d'obtenir des mesures instantanées et locales : le champ final ne nécessite donc pas de transformée d'Abel (contrairement aux résultats de la Fig. 7.24, par exemple). Les résultats expérimentaux ont permis de mettre en évidence la dynamique de la zone réactive dans cette zone. Directement en sortie d'injecteur, la flamme est très fine et peu fluctuante. Plus en aval, la dynamique de la flamme est plus importante et la zone réactive est plissée. Ce comportement est qualitativement retrouvé par la simulation. Cependant, dans la simulation, la première zone peu fluctuante est légèrement plus longue, jusqu'à 10 mm de l'injecteur.

Une comparaison de la position radiale moyenne du maximum de production de OH et du maximum d'émission de OH* est proposée Fig. 7.26 pour le cas A60. On retrouve le comportement observé précédemment, où l'ouverture initiale de la zone réactive est plus grande que dans l'expérience. L'expérience indique une ouverture quasi-linéraire après 4 mm. Ce comportement n'est pas retrouvé numériquement, où, après une expansion soudaine jusqu'à 14 mm, la zone réactive se contracte. Lorsque $x > 14$ mm, la flamme se repositionne comme dans l'expérience.

7.7.2 Zone avale

Les transformées d'Abel du dégagement de OH* obtenues expérimentalement sur une longueur de 120 mm [63, 14, 150] sont montrées en Fig. 7.27. Des iso-contours de production de OH provenant de la simulation numérique ont été superposés. Les résultats sont en bon accord

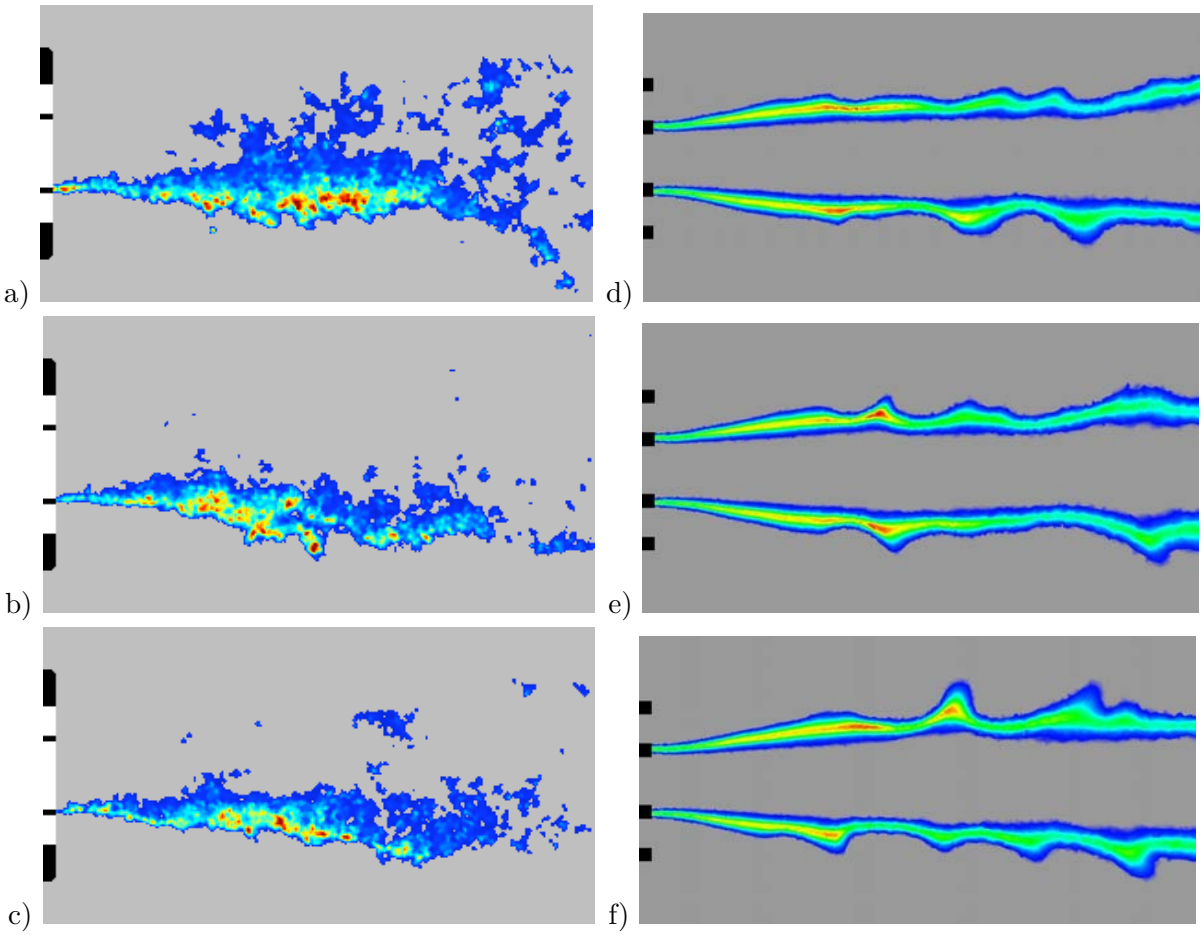


FIGURE 7.25 – (a) (b) (c) Emission de OH* obtenues par fluorescence induite par laser [137] [139]. (d) (e) (f) Champ instantané de $\dot{\omega}_{OH}$ en zone proche injecteur (simulation). Cas A60.

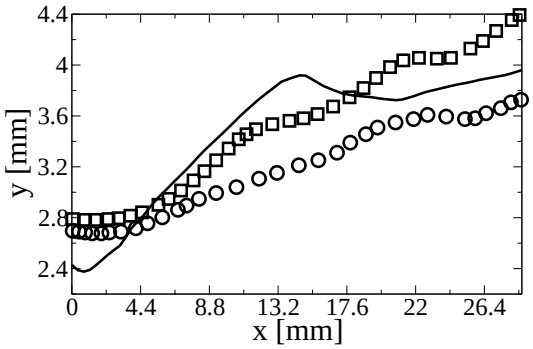


FIGURE 7.26 – Position radiale y du maximum d'émission OH* en région proche injecteur (28 mm) pour le cas A60 [139]. x est la position axiale depuis la sortie d'injecteur. □ émission de OH* (transformée d'Abel). ∘ émission de OH* obtenue par fluorescence induite par laser. — $\dot{\omega}_{OH}$ de la simulation numérique.

général avec l'expérience dans les deux cas, puisque la topologie des jets est qualitativement retrouvée et l'ouverture est capturée à la bonne position axiale. La zone de maximum d'émission OH* se referme en fin de visualisation dans le cas A60, tandis que pour le cas C60 elle est encore ouverte, à la fois dans l'expérience et le calcul. Dans les deux cas, l'ouverture de la flamme semble faiblement sous-prédite en comparaison avec l'expérience, mais la forme des jets est néanmoins très fidèle à l'expérience.

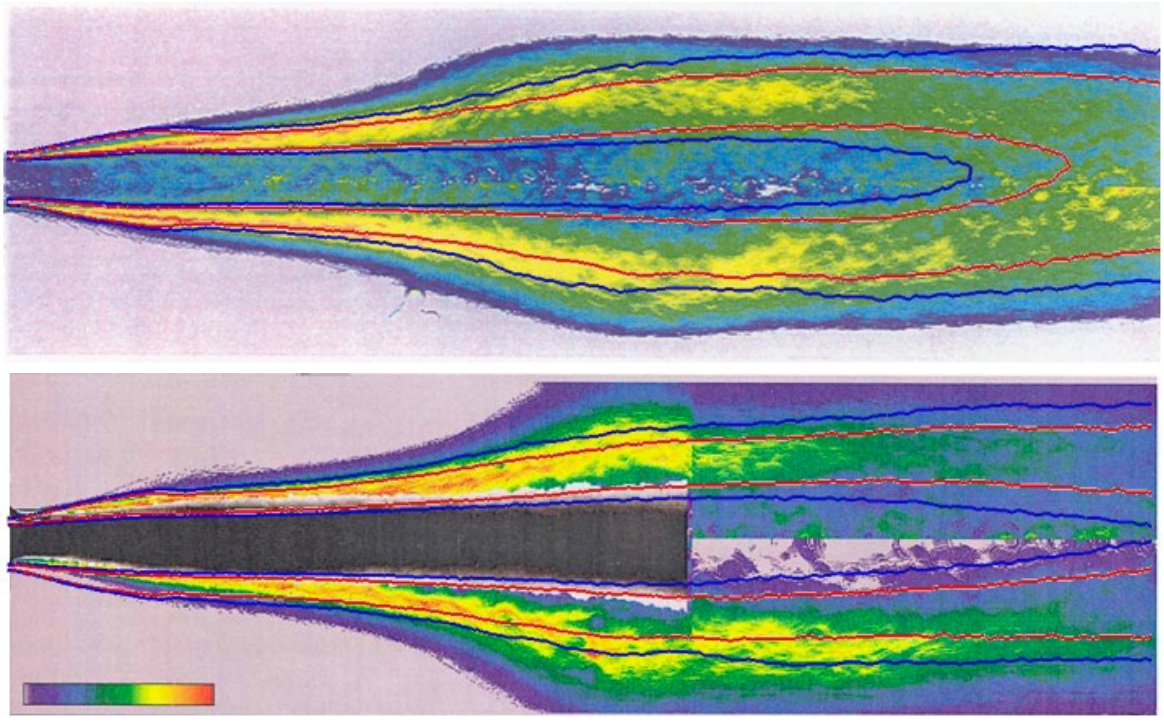
Longueur de la flamme (cas A60)

La Fig. 7.28 compare les résultats numériques de production de OH avec des mesures expérimentales réalisées à l'Onera (non publiées) fournies par Snecma pour le cas A60, le long de l'axe central du jet. L'émission de OH* a été intégrée le long de la ligne de visualisation, au travers du jet coaxial. La longueur de flamme est en très bon accord (≈ 175 mm).

Températures (cas C60)

La Fig. 7.29 montre le champ de température moyenne du calcul pour le cas C60, ainsi que les lignes de coupes utilisés pour les comparaisons expérimentales. Des coupes transverses de température à 15 mm, 50 mm et 100 mm de l'injecteur sont tracées Fig. 7.30 (a) (b) et (c). Les résultats à x=15 mm et x=50 mm sont clairement en désaccord avec les résultats mesures de Diffusion Raman anti-Stokes cohérente (DRASC) de l'Onera [46, 169], où la présence de la flamme n'est pas capturée puisque la température reste inférieure à 1000 K. Comme cela a été indiqué par Habiballah *et al.* [46], la température moyenne de la flamme est faible car la flamme est très fine et fluctue fortement. Ce comportement est peut être mal capturé par la SGE, du fait du maillage requis. La technique de mesure DRASC sonde les molécules d'hydrogène et

a)



b)

FIGURE 7.27 – Champ moyen expérimental d'émission de OH* (transformée d'Abel) [14, 63]. — $\dot{\omega}_{OH} = 5.10^5\ kg.m^{-3}.s^{-1}$; — $\dot{\omega}_{OH} = 1.10^5\ kg.m^{-3}.s^{-1}$. (a) Cas A60 ; (b) Cas C60.

a)

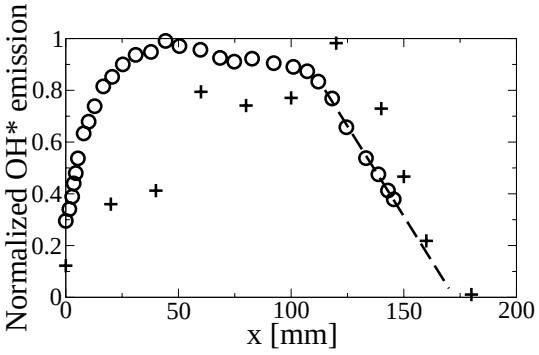


FIGURE 7.28 – Profil axial d'émission de OH* obtenu expérimentalement (non publié) et profil de production de OH obtenu numériquement. Cas A60. ∘ expérience ; + AVBP.

analyse leur spectre d'émission à partir duquel la température dans l'écoulement est obtenue. En conséquence la validité des mesures peut être remise en cause dans les régions de l'écoulement où la concentration d'hydrogène est faible, proche de l'oxygène et les températures mesurées peuvent être sous-estimées. De plus, la présence du fort gradient de densité autour du jet dense d'oxygène peut interagir avec les faisceaux lasers utilisés pour la mesure. Enfin, il semble qu'il y ai un désaccord entre les mesures de température et les émissions de OH*, qui attestent de la présence d'une zone réactive dans la couche de mélange (Fig. 7.27).
A x=100 mm, l'accord n'est toujours pas très bon, cependant, cette fois la température est supérieure à 1500 K à la fois en SGE et en expérience. Encore une fois, on note une contradiction entre les mesures de température, qui semblent indiquer que la flamme est fermée à x=100 mm et les mesures de OH* (Fig. 7.27 (b)) ainsi que la simulation, qui montrent que la flamme est encore ouverte.

Le même comportement est constaté sur les profils de température axiaux (Fig. 7.31), où la flamme est apparente à y=4 mm sur la simulation (la coupe passe au travers de la flamme) et pas dans l'expérience, et où la température est nettement supérieure à l'expérience.

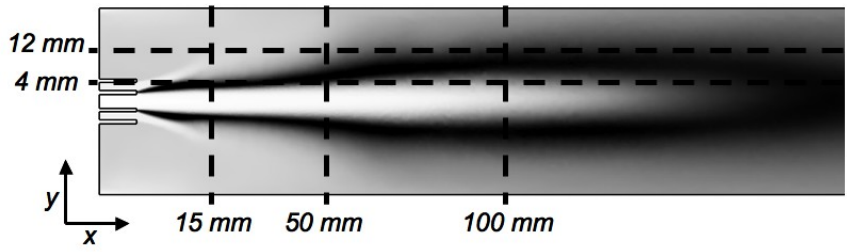


FIGURE 7.29 – Champ de température moyenne du cas C60 et lignes de coupe.

7.7.3 Conclusion des validations

Les comparaisons avec les émission OH* nous permettent de constater que le comportement général des jets est retrouvé. Les mesures de température expérimentales ne nous ont pas permis de conclure. En zone proche injecteur, l'ouverture de la flamme paraît être trop importante, probablement à cause d'une résolution limitée de la flamme dans cette zone. Cependant, le calcul semble fidèle aux expériences et une analyse des résultats peut alors être effectuée.

7.8 Comparaison entre les cas A60 et C60

La comparaison est effectuée en analysant dans un premier temps la région proche injecteur, où le jet n'est pas encore ouvert, puis la zone d'expansion avale dans un deuxième temps.

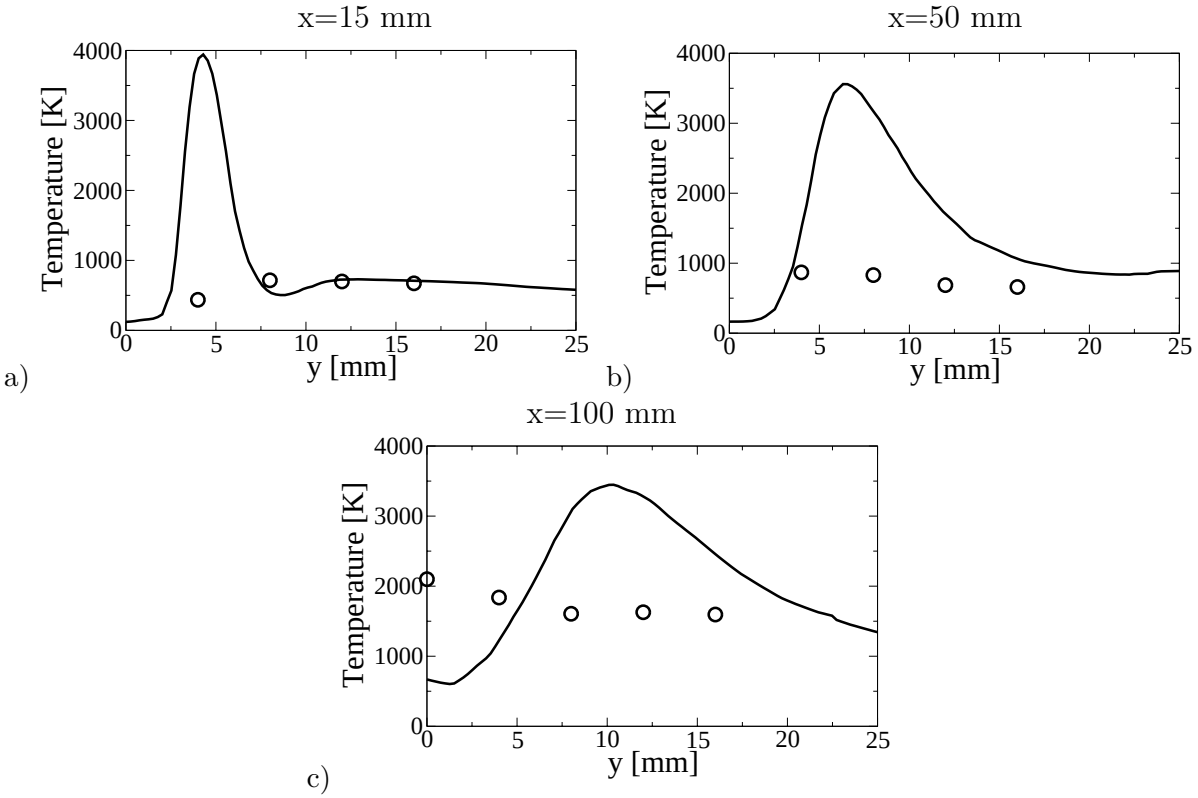


FIGURE 7.30 – Profil radial de température à x=15 mm (a), x=50 mm (b) et x=100 mm (c) de l'injecteur. ∘ Résultats expérimentaux de Habiballah *et al.* [46]. — SGE - cas C60.

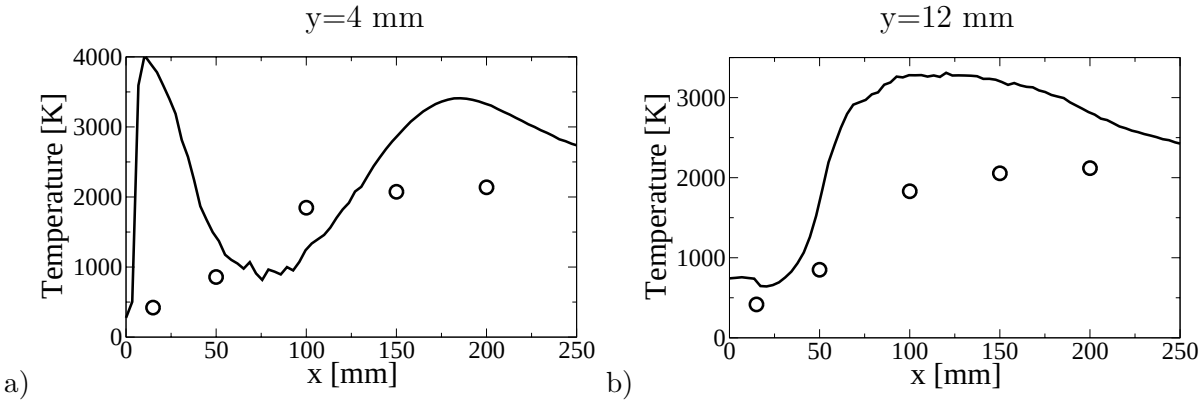


FIGURE 7.31 – Profil longitudinal de température à y=4 mm (a) et y=12 mm (b) de l'axe central du jet. ∘ Résultats expérimentaux [169]. — SGE - cas C60.

7.8.1 Zone proche injecteur (x<70 mm)

Le jet central possède une densité très élevée par rapport aux gaz environnants (Fig. 7.32) et est fortement cisaillé par le jet extérieur à vitesse élevée qui l'entoure (Fig. 7.40). La longueur du coeur potentiel de densité (*i.e.* où la densité est égale à 99% de celle de l'injection) varie peu entre les deux cas A60 (variation de 9 %). Cette faible sensibilité est en bon accord avec les résultats expérimentaux de Oschwald *et al* [105] sur des jets coaxiaux non réactifs à pression supercritique. Il a en effet été montré que lorsque la densité à l'injection est élevée, la longueur du coeur dense, mais aussi la longueur de décroissance de la densité, ne sont que peu affectées par un accroissement du cisaillement. On constate en effet seulement 11% d'écart entre les 2 cas sur la distance à laquelle la densité du jet central atteint 50% de sa valeur à l'injection (Figs. 7.32 et 7.34 (a)). La différence de fluctuation de densité au centre du jet est également faible (Fig. 7.34 (b)). L'accroissement du cisaillement entre les cas A60 et C60 n'a finalement que peu d'effet sur la déstabilisation du jet dense.

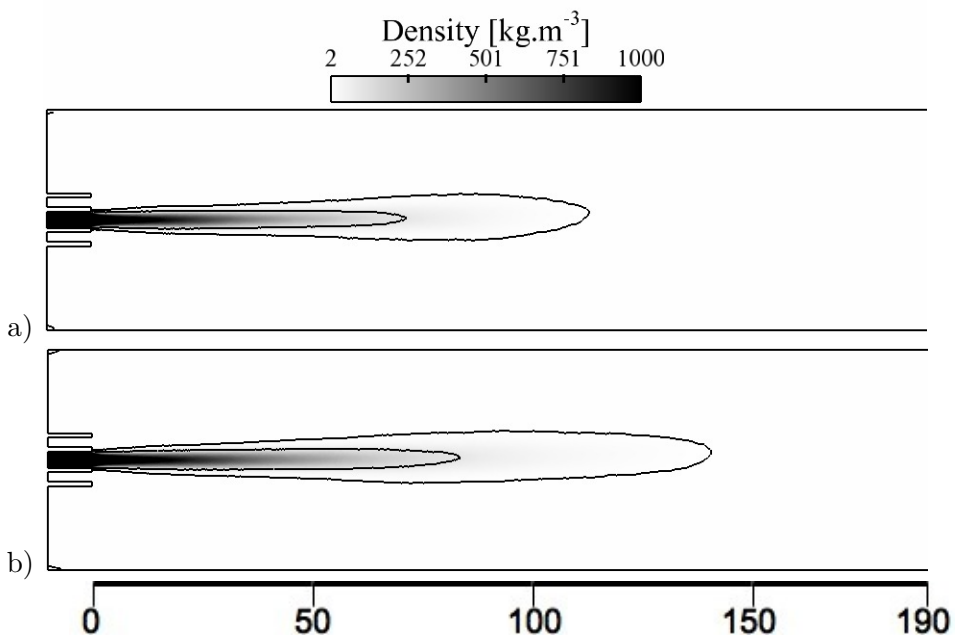


FIGURE 7.32 – Coupe du champ moyen de densité dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours ρ=10 kg.m^{-3} et ρ=100 kg.m^{-3}.

Remarquons que, dans cette même région et lorsque $x > 10$ mm, la température (Fig. 7.35) augmente lentement pour atteindre un pallier autour de 159 K, qui correspond à la température de pseudo-ébullition de l'oxygène à 60 bars. A cette température, la capacité calorifique à pression constante du fluide est très élevée, si bien que l'essentiel de l'énergie thermique est consommée par l'expansion du fluide et que la température varie très peu.

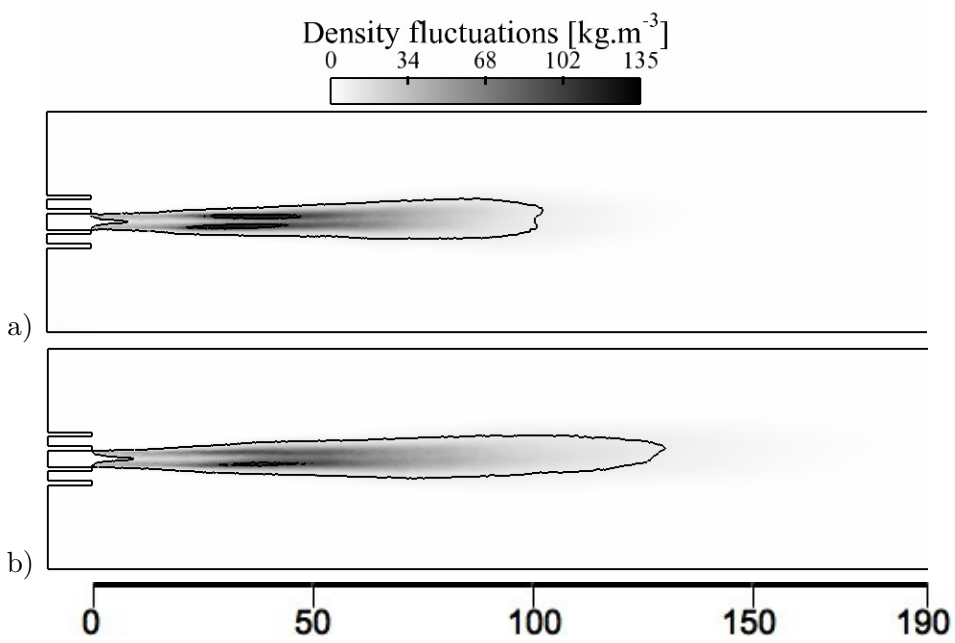


FIGURE 7.33 – Coupe du champ moyen de fluctuation de densité ρ' dans le plan médian du domaine (200 mm). (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours ρ'=100 kg.m^{-3} et ρ'=10 kg.m^{-3}.

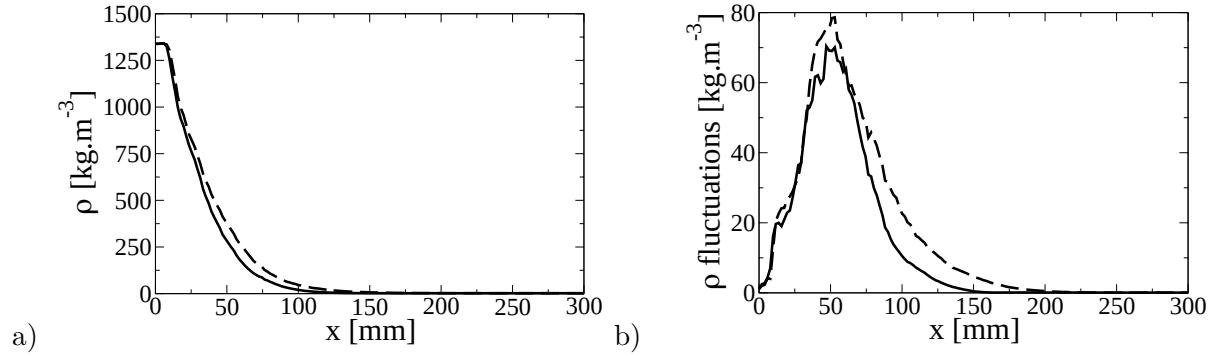


FIGURE 7.34 – Evolution de la densité ρ (a) et de la fluctuation de densité (b) le long de l'axe central du jet. — Cas A60 ; – – Cas C60.

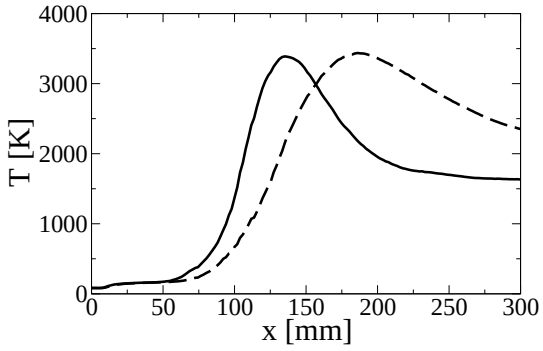


FIGURE 7.35 – Evolution de la température T le long de l'axe central du jet. — Cas A60 ; – – Cas C60.

Dans la région où l'oxygène est dense, le mélange est très faible et la fraction massique d'oxygène reste proche de 1 (Fig. 7.36 (a)) dans les deux cas simulés. Cependant, la longueur du coeur potentiel d'oxygène (99% de fraction massique d'oxygène) est 20% plus longue dans le cas C60 par rapport au cas A60 (75 mm contre 63 mm). L'accroissement de la vitesse de l'hydrogène du A60 par rapport au C60 implique un accroissement du taux de réaction dans la couche de mélange et donc du dégagement de chaleur et de la consommation d'oxygène (Fig. 7.37). Le coeur potentiel d'oxygène plus court dans le cas A60 semble donc être principalement lié à l'augmentation du dégagement de chaleur du fait du cisaillement plus grand.

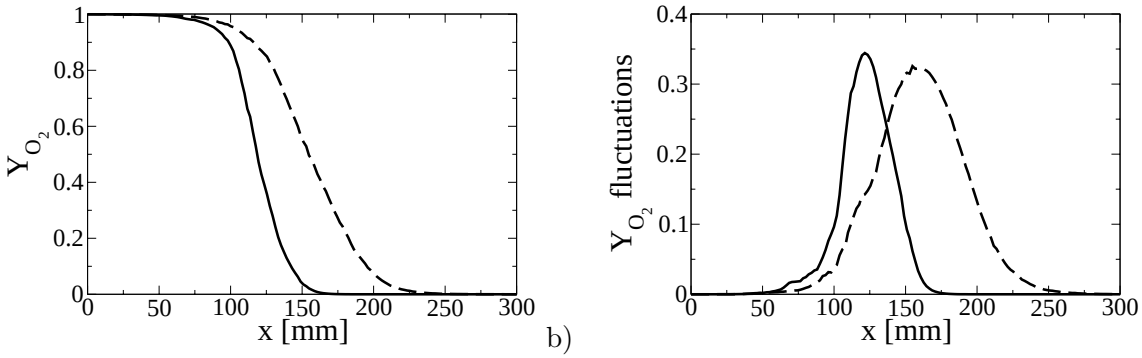


FIGURE 7.36 – Evolution de la fraction massique d'oxygène (a) et de sa fluctuation (b) le long de l'axe central du jet. — Cas A60 ; – – Cas C60.

Du fait de l'interaction entre le jet d'hydrogène et le jet dense, des fluctuations sont apparentes sur la température dans la couche de mélange (Fig. 7.38) et sur la fraction massique

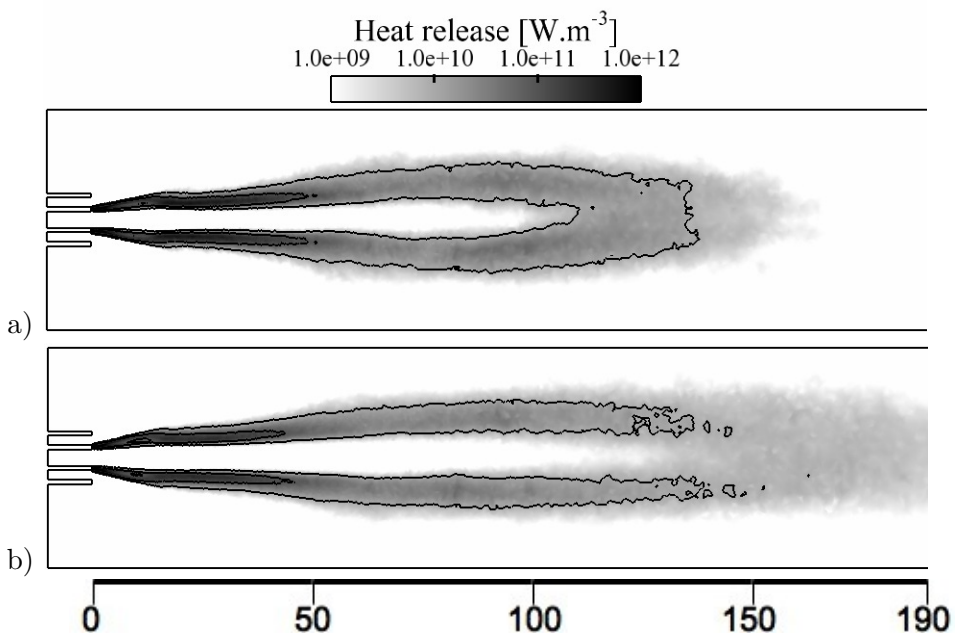


FIGURE 7.37 – Coupe du champ moyen de taux de dégagement de chaleur Q dans le plan médian du domaine (200 mm). (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours Q=10^{11} W.m^{-3} et Q=10^{10} W.m^{-3}.

d'oxygène autour du jet dense (Fig. 7.39). Pour $x < 70$ mm, les différences sont faibles, avec cependant une fluctuation de température plus grande dans le cas A60 autour du jet d'oxygène. Dans cette zone, les fluctuations de densité sont également plus fortes (Fig. 7.33). Ces fluctuations semblent être liées à l'interaction entre les jet d'hydrogène et la zone réactive, qui génère des fluctuations de dégagement de chaleur dans la couche de mélange. Ce comportement est plus marqué dans le cas A60, puisque l'étirement est plus important (Fig. 7.16).

De manière générale, il est intéressant de remarquer que les deux cas A60 et C60 ont finalement un comportement qualitativement similaire pour x<70 mm.

7.8.2 Zone d'expansion (x>70 mm)

Le comportement des jets d'hydrogène est initialement similaire au comportement de la zone réactive : en sortie d'injecteur, les jets sont fortement déviés, puis leur angle d'ouverture diminue pour finalement croître à nouveau vers 40 mm. La forte quantité de mouvement associée à ces jets génère une zone de recirculation à la paroi pour 20 mm<x<50 mm dans le cas A60 et pour 30 mm<x<50 mm pour le cas C60. Cette recirculation accroît l'ouverture des jets d'hydrogène qui sont alors projetés vers les parois du domaine (Fig. 7.40 à 60 mm). Dans les deux cas de calcul, le jet d'hydrogène atteint la paroi à une même distance de l'injecteur, et ce malgré la

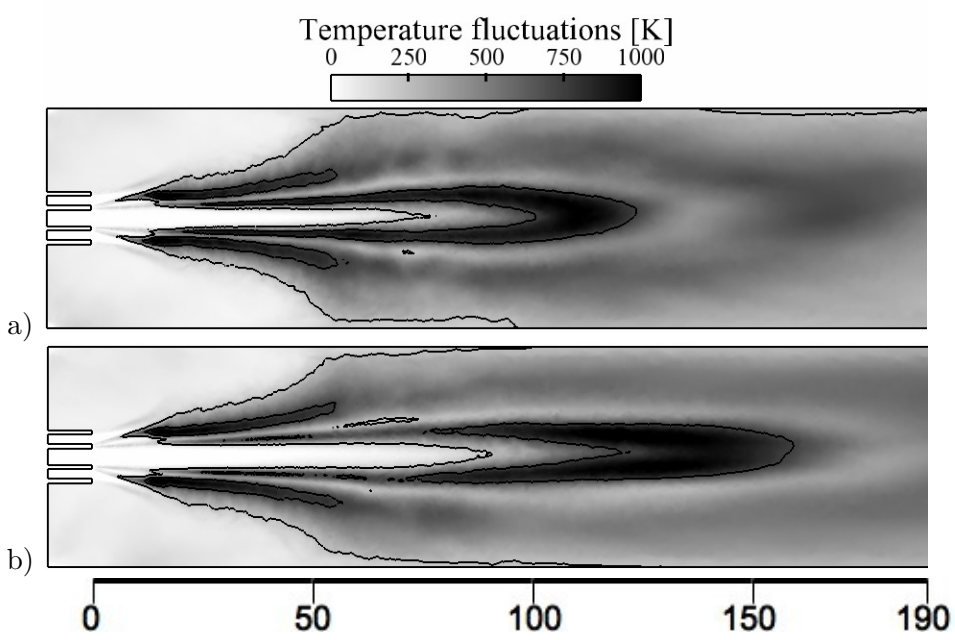


FIGURE 7.38 – Coupe de fluctuation de température T' dans le plan médian du domaine (200 mm). (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours T'=250 K et T'=750 K.

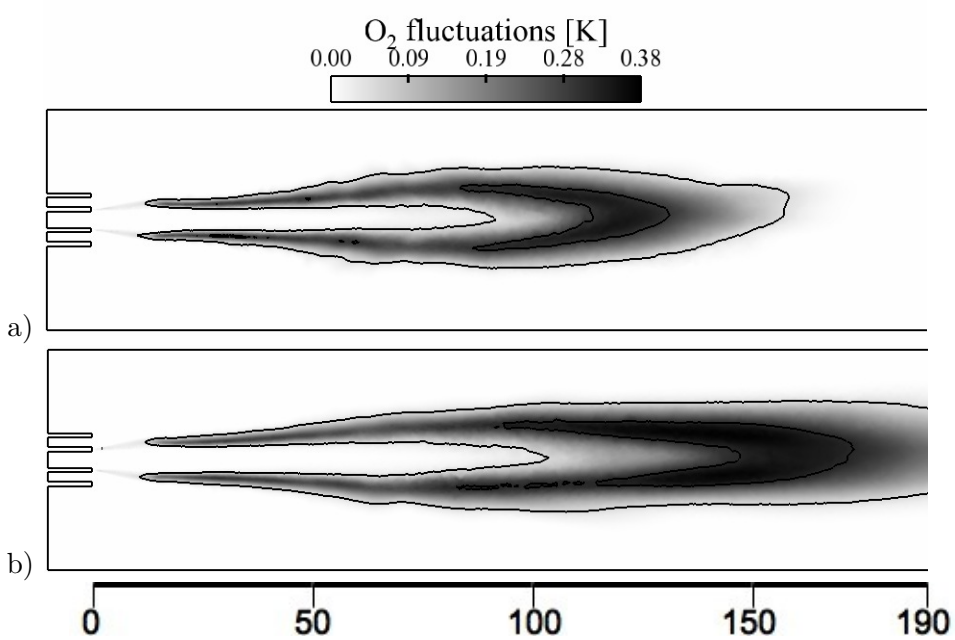


FIGURE 7.39 – Coupe de fluctuation de la fraction massique de O_2, O_2',dans le plan médian du domaine (200 mm). (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours O_2'=3.10^{-1} et O_2'=5.10^{-2}.

grande différence de vitesse entre les deux simulations. Ce comportement est certainement lié au faible impact de la différence de cisaillement sur la déstabilisation du jet dense (Figs. 7.32 et 7.42) et donc sur la position initiale d'ouverture des jets d'hydrogène.

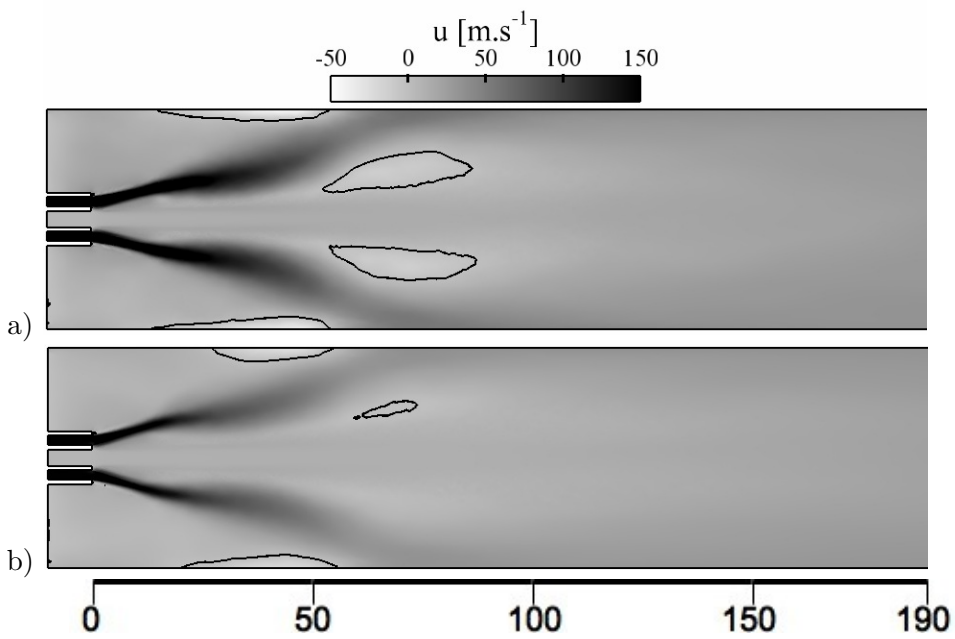


FIGURE 7.40 – Coupe du champ moyen de la vitesse axiale u dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60. — iso-contour u=0 m.s^{-1}.

Le jet central (qui a encore une densité de l'ordre de 100 kg.m^{-3} à x=60 mm, Fig. 7.32) est bien moins ouvert que le jet d'hydrogène et une zone de recirculation apparaît alors nécessairement entre le jet d'oxygène dense et les jets d'hydrogène à x>60 mm, ce qui explique le changement dans la taille caractéristique des structures tourbillonnaires (Figs. 7.14 et 7.18). Cette recirculation est nettement plus importante pour le cas A60 que pour le cas C60 (Fig. 7.40). Elle joue un rôle primordial car elle permet d'accroître de manière significative le flux turbulent d'hydrogène vers la zone de combustion pour x>50mm (Fig. 7.41), et génère donc une combustion plus efficace (Fig. 7.37). Elle ajoute également des perturbations au jet central, ce qui accélère probablement sa déstabilisation.

Pour x>70 mm, la décroissance de la fraction massique d'oxygène (Fig. 7.36 (a)) et la montée de la température (Fig. 7.35) sont plus rapides dans le cas A60. La fraction massique d'oxygène ne vaut plus que 1% (*i.e.* on peut donc considérer que l'oxygène est consommé) à x=159 mm pour le cas A60 et à x=227 mm pour le cas C60 (variation de 43 %) (Fig. 7.42).

Pour mesurer la longueur de flamme, deux méthodes peuvent être utilisées. A partir de la position du maximum de température, on obtient x=133 mm dans le cas A60 et x=186 mm dans le cas C60 (les positions de ces maxima sont les même que ceux de OH (Fig. 7.43) et de production de OH). On peut aussi regarder la distance maximale L_{OH*} à laquelle le radical

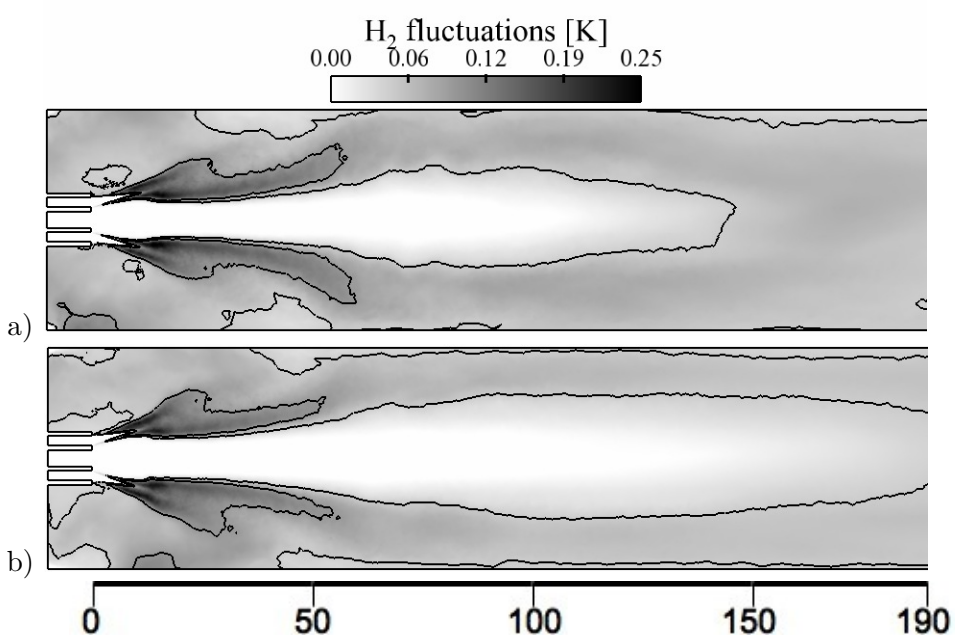


FIGURE 7.41 – Coupe du champ moyen de fluctuation de la fraction massique de H_2, H_2',dans le plan médian du domaine (200 mm). (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours H_2'=2.10^{-1} et H_2'=5.10^{-2}.

OH* (associé à la combustion) est encore décelable (Fig. 7.44). Le seuil fixé à 1% de la valeur maximale de la fraction massique de OH* le long de l'axe donne $L_{OH*} = 179$ mm dans le cas A60 et $L_{OH*} = 274$ mm dans le cas C60, soit une flamme 53% plus longue dans le cas C60 par rapport au cas A60.

La longueur de la zone réactive le long de l'axe central du jet Δ_{OH*} (*i.e.* la zone où OH*, indicateur de la réaction, est supérieure à 1% de sa valeur maximale) est environ 1.9 fois plus longue dans le cas C60 que dans le cas A60 (Fig. 7.44). Le même constat peut être fait sur la consommation de l'oxygène : la distance nécessaire pour faire passer la fraction massique de O_2 de 0.99 à 0.01 est 1.6 fois plus longue dans le cas C60.

7.8.3 Longueurs caractéristiques

Les longueurs représentatives de l'évolution des jets sont rappelées en Tab. 7.8 pour les deux cas, où les colonnes 1 à 4 représentent les positions auxquelles 99% et 50% de la densité à l'injection d'oxygène ρ_{inj} et 99% et 1% de la fraction massique d'oxygène est atteinte le long de l'axe central du jet. La cinquième colonne indique la position du maximum d'emission OH* le long de l'axe central du jet. La dernière colonne du Tab. 7.8 indique la plage sur laquelle la création de OH est supérieure à 1%. Δ représente le pourcentage de variation entre les cas A60

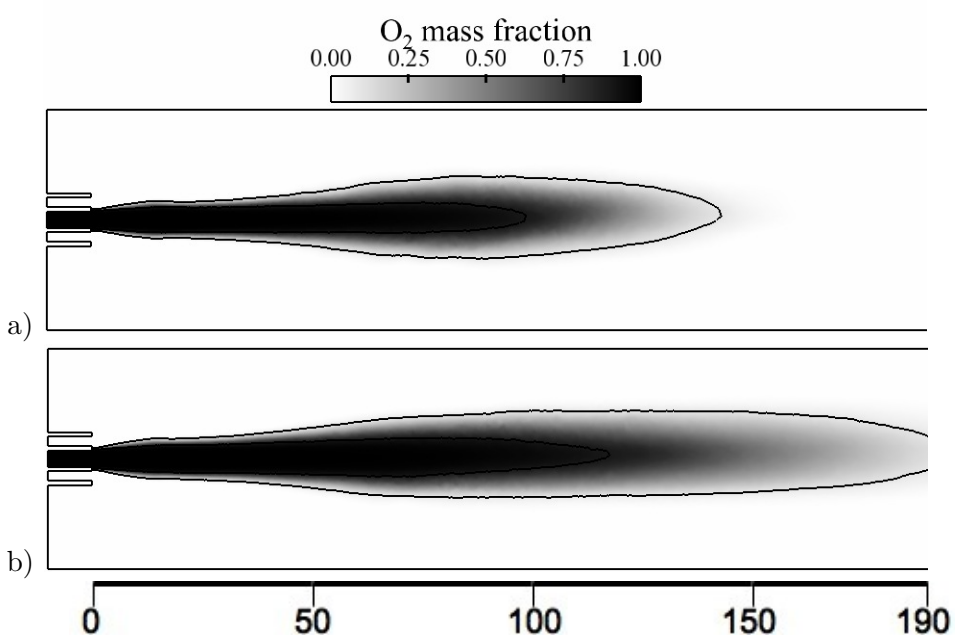


FIGURE 7.42 – Coupe du champ moyen de la fraction massique de O_2 dans le plan médian du domaine, sur une distance de 200 mm. (a) A60 ; (b) C60. — iso-contours O_2=0.9 et O_2=0.1.

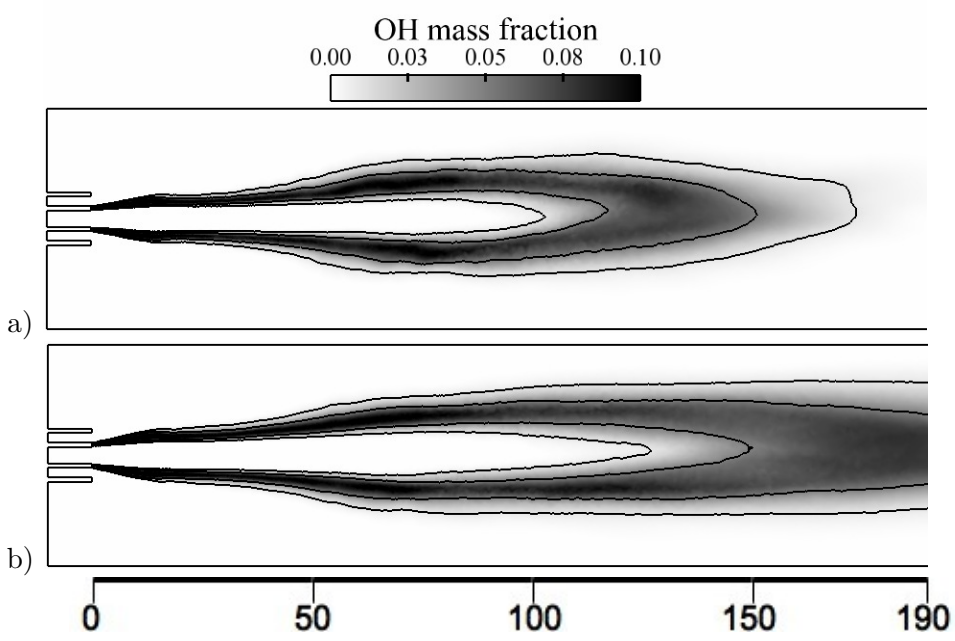


FIGURE 7.43 – Coupe du champ moyen de la fraction massique de OH (a) cas A60 ; (b) cas C60. — iso-contours Y_{OH}=0.05 et Y_{OH}=0.01.

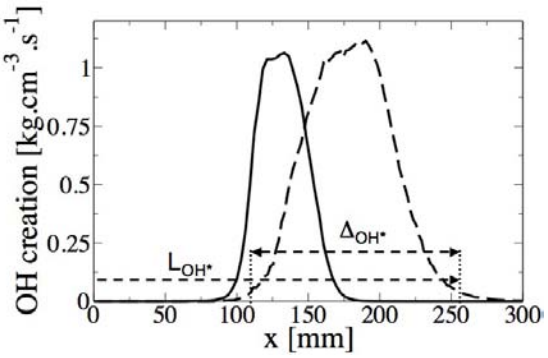


FIGURE 7.44 – Evolution de la production de OH le long de l'axe central du jet. — Cas A60 ; – – Cas C60. L_{OH*} est la distance depuis l'injecteur pour laquelle il ne reste plus que 1% de la valeur maximale de production de OH. Δ_{OH*} représente la plage où la production de OH est supérieure à 1% de la valeur maximale. Ici, L_{OH*} et Δ_{OH*} sont représentés pour le cas C60.

et C60 par rapport au cas A60.

Cas	99% ρ_{inj}	50% ρ_{inj}	99% O_2	1% O_2	OH^*_{max}	Δ_{OH*}
A60	7.8 mm	29.1 mm	63 mm	159 mm	133 mm	88 mm - 179 mm
C60	8.5 mm	32.3 mm	75 mm	227 mm	186 mm	100 mm - 274 mm
Δ	9%	11%	20%	43%	40%	93%

TABLE 7.8 – Longueurs caractéristiques des cas A60 et C60.

Il ne semble pas que la forte différence de longueur de flamme puisse venir de la déstabilisation du jet dense, ce dernier n'étant que peu affecté par la différence de cisaillement entre les deux cas. La longueur du coeur potentiel d'oxygène est sans doute affectée par la différence du dégagement de chaleur et du taux de consommation d'oxygène. Cependant la différence entre les longueurs des coeurs potentiels d'oxygène (20%) ne semble pas être un facteur suffisant pour expliquer les écarts entre les longueurs de flamme (≈50%). La zone de réaction le long de l'axe central Δ_{OH*} (où des radicaux OH sont crées) est fortement raccourcie dans le cas A60 par rapport au cas C60 (≈ 90%). La combustion semble donc plus efficace dans le cas A60.

Afin de mieux comprendre la répartition de la consommation d'oxygène le long du jet et de pouvoir analyser l'effet du débit d'hydrogène sur la longueur de flamme, le taux de dégagement de chaleur est intégré en volume dans plusieurs zones représentatives (Tab. 7.9). La première zone est située juste en sortie d'injecteur et s'étend jusqu'à 50 mm, soit qualitativement la position à partir de laquelle le jet se déstabilise effectivement. Dans cette région, le jet est encore peu ouvert et le jet d'oxygène est dense. On constate que 22% de chaleur supplémentaire est dégagé par le cas A60 par rapport au cas C60. La zone qui s'étend de 50 mm à 100 mm

de l'injecteur correspond à la région où la flamme s'ouvre et où des zones de récirculation sont observées. Encore une fois, le dégagement de chaleur est accru dans le cas A60 par rapport au cas C60. La différence est de 18%. La troisième région correspond au reste du domaine de calcul et s'étend donc de 100 mm jusqu'à la fin du maillage (400 mm). Dans cette zone, puisque en fin de chambre tout l'oxygène est consommé, le dégagement de chaleur correspond à l'énergie fournie par la combustion du mélange réactif encore imbrûlé à x=100 mm. On constate ainsi qu'il reste 70% d'oxygène supplémentaire dans le cas C60 par rapport au cas A60.

Cas	0-50 mm	50-100 mm	100-400 mm	0-400 mm
A60	$7,69.10^5$ W	$5,16.10^5$ W	$2,75.10^5$ W	$1,56.10^6$ W
C60	$6,31.10^5$ W	$4,35.10^5$ W	$4,64.10^5$ W	$1,53.10^6$ W
Δ	22%	18%	-41%	2%

TABLE 7.9 – Taux de dégagement de chaleur moyen, intégré sur un volume du domaine compris entre 0 et 50 mm, 50 et 100 mm puis 100 et 400 mm. Δ représente la variation relative au cas C60.

La Fig. 7.45 (a) trace le dégagement de chaleur intégré au travers de différentes sections du domaine de calcul, perpendiculaires à l'axe du jet. Proche injecteur, le dégagement de chaleur est élevé du fait du fort étirement de la flamme. Une décroissance, associée à la baisse de l'intensité du cisaillement, est ensuite observée jusqu'à 60 mm. Entre 60 mm et 100 mm, le mélange est accru par la zone de recirculation (Fig. 7.40) et la combustion s'accentue. Le confinement du jet semble donc avoir un impact sur la longueur de la flamme en améliorant le mélange lorsque le jet s'ouvre. Il s'en suit une diminution progressive du dégagement de chaleur au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur, le mélange et le cisaillement étant moins efficace car l'intensité de la dynamique turbulente a diminué. La chute du dégagement de chaleur dans le cas A60 lorsque $x > 110$ mm signifie la fin de la flamme et la disparition d'oxygène.

Dans la région proche injecteur ($x < 50$ mm), le taux de dégagement de chaleur est 25% plus grand dans le cas A60 (Fig. 7.45 (b)). Ce résultat s'explique par l'effet du cisaillement sur le taux de réaction. On retrouve par ailleurs une bonne correspondance entre la dépendance en $\sqrt{\epsilon}$, où ϵ est l'étirement, et le dégagement de chaleur : la vitesse de l'hydrogène étant 1,5 fois plus importante dans le cas A60, l'étirement est approximativement 1.5 fois supérieur et le dégagement de chaleur est $\sqrt{1,5} \approx 1.22$ fois plus important. Jusqu'à 100 mm, le dégagement de chaleur est globalement 20% plus fort dans le cas A60, si bien qu'à $x = 100$ mm, 20% d'oxygène supplémentaire a été consommé. Lorsque $x > 100mm$, l'efficacité de la combustion ayant diminué, une plus grande distance est nécessaire pour brûler une quantité donnée d'oxygène, si bien que lorsque la flamme du A60 se termine, il reste encore de l'oxygène dans le cas C60, mais qui sera ensuite consommé bien moins efficacement que dans la région proche injecteur. Ainsi, cette quantité d'oxygène qu'il reste à brûler dans le cas C60 rallonge notablement la flamme.

Pour résumer, le fort raccourcissement de la flamme dans le cas A60 par rapport au cas C60

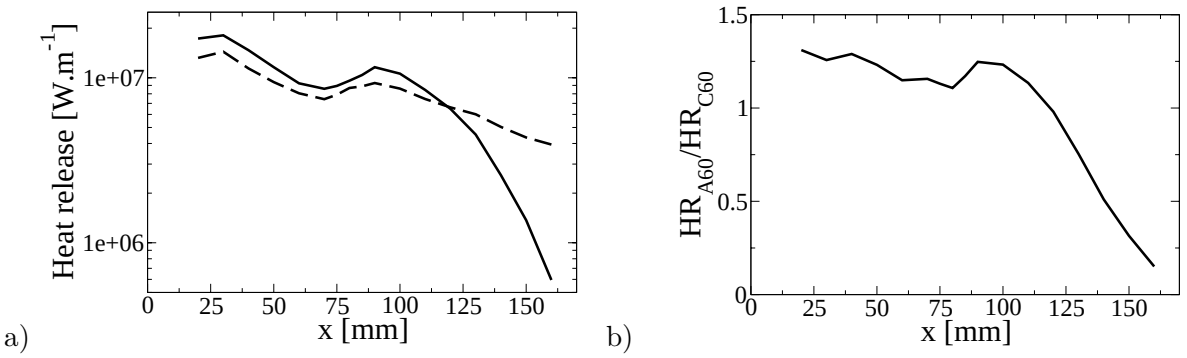


FIGURE 7.45 – Taux de dégagement de chaleur intégré en différentes sections à x constant (a) et rapport des dégagements de chaleur entre les deux cas de calcul (b) en fonction de la distance à l'injecteur x.

semble être un effet du cisaillement sur l'augmentation de la consommation d'oxygène, associé à la diminution progressive de l'efficacité de la combustion lorsque que l'on s'éloigne de l'injecteur. La relativement faible différence de consommation liée à l'augmentation du cisaillement ($\approx 20\%$) entraîne en fait une différence de longueur de flamme très importante ($\approx 50\%$). C'est donc l'effet du cisaillement sur la flamme, et non l'effet du cisaillement sur la déstabilisation du jet dense qui est à l'origine de la différence entre la longueur de flamme de A60 et du C60.

7.9 Conclusion

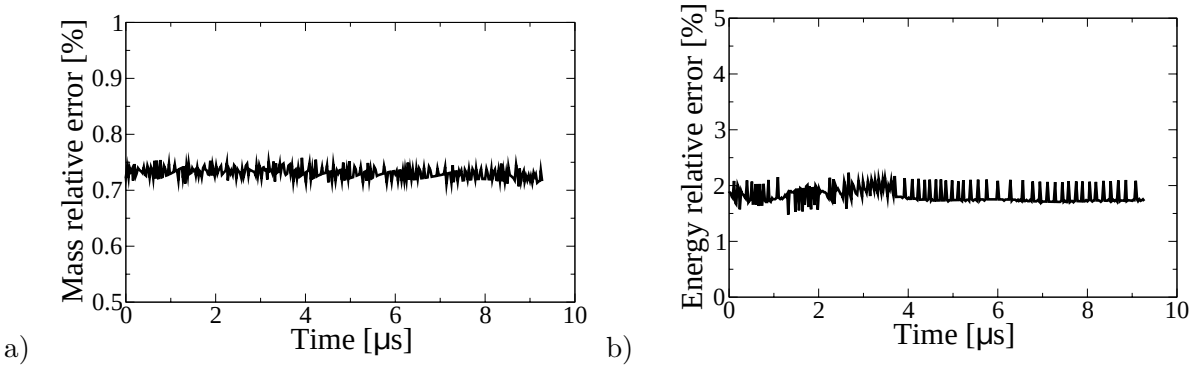
Dans ce chapitre, la simulation numérique de deux jets coaxiaux réactifs à pression supercritique est réalisée. Ces deux calculs sont basés sur la configuration du banc Mascotte de l'Onera [158] et correspondent aux cas A60 et C60 [46, 14]. Les cas A60 et C60 ont tout deux une configuration numérique et physique identique, la seule différence provenant de la vitesse d'injection de l'hydrogène qui est 1,5 fois plus grande dans le cas A60.
Les comparaisons avec l'expérience sont satisfaisantes. On constate en effet une topologie de flamme semblable à celle observée expérimentalement par émission de OH* [14, 63]. L'ouverture initiale de la flamme immédiatement en sortie d'injecteur, et sur une distance de 14 mm, semble supérieure aux résultats expérimentaux. Cependant, la région plus en aval présente un comportement en bon accord avec les résultats expérimentaux. Un fort désaccord est constaté avec les températures obtenues par l'Onera [46] pour le cas C60. La présence de la flamme n'est pas clairement identifiable dans l'expérience et les mesures de température ne semblent pas consistantes avec les émissions de OH* [63], si bien que les comparaisons avec les températures sont difficiles à interpréter.

Les calculs ont permis d'identifier le processus de déstabilisation des jets. Proche injecteur, la flamme est fortement étirée par le cisaillement du jet d'hydrogène et est localisée autour du

jet dense d'oxygène. Après 40 mm, le jet dense se déstabilise et la flamme s'ouvre lentement. Au fur et à mesure de leur expansion, les jets d'hydrogène entrent en interaction avec la paroi de la chambre et génèrent deux zones de recirculation : une dans la partie amont du domaine et l'autre autour du jet d'oxygène dense. Cette recirculation améliore localement le mélange et donc la combustion. Le confinement doit donc probablement raccourcir la flamme dans les deux cas. Les cas A60 et C60 ont un comportement très similaire. La différence principale est un taux de dégagement de chaleur (et donc une consommation d'oxygène) plus fort dans le cas A60 du fait de l'étirement plus important de la zone réactive. La déstabilisation du jet dense ne semble cependant que peu affectée par la différence de cisaillement entre les deux cas. L'ouverture des jets intervient ainsi à une position axiale similaire.
Du fait de la diffusion turbulente, l'intensité du cisaillement et du mélange diminue plus en aval de l'injecteur. La combustion est donc moins efficace. Ainsi, une quantité donnée d'oxygène nécessite une distance plus importante pour être consommée au fur et à mesure que l'on s'éloigne du jet. Puisque la combustion est plus faible dans le cas C60 par rapport au cas A60 (un écart de 20% est mesuré et correspond au rapport de cisaillement entre les deux cas), lorsque l'oxygène est consommé dans le cas A60, de l'oxygène est encore présent dans le cas C60. L'efficacité de la combustion diminuant avec la distance à l'injecteur, la distance nécessaire pour brûler l'oxygène restant est très importante et rallonge notablement la flamme du cas C60 par rapport au cas A60.
Il semble donc que la différence de longueur de flamme entre les deux cas n'est pas liée à un comportement dynamique propre à chaque jet, mais est due à une intensité accrue de la combustion dans le cas A60 directement du fait du cisaillement accru, associée à une diminution progressive de l'efficacité de la combustion.

Ces deux calculs de cas réactifs ont permis de montrer la faisabilité d'une simulation réactive à pression supercritique. Ces calculs sont de plus en bon accord avec l'expérience et ont permis d'analyser la dynamique des deux cas simulés, afin de mieux comprendre la dynamique des jets réactifs cryotechniques, et de proposer une explication pour la différence de longueur de flamme entre les deux cas. Ces résultats sont très encourageants.

Cela ne doit pas néanmoins masquer les difficultés restantes. La conservation de la masse et de l'énergie ne sont pas parfaitement garanties. Des bilans de masse et d'enthalpie totale pour le cas A60 sont tracés en Fig. 7.46. La variation de masse et d'énergie intégrée dans tout le domaine est comparée à la masse entrante et sortante par les conditions limites et à l'enthalpie provenant des termes sources de la combustion ($\approx$ 1.5 MW dans notre cas). On constate une erreur de 0.7% pour la masse et de 2% pour l'énergie. Ces erreurs, bien qu'étant faibles, doivent être limitées. Nous savons que la modification apportée à l'opérateur de viscosité artificielle n'est pas conservative pour l'énergie (*cf* Chap. 5) et peut donc expliquer une part de l'erreur observée sur l'énergie, mais pas celle sur la masse.



a) b)

FIGURE 7.46 – Erreur relative sur le bilan de masse (a) et d'enthalpie totale (par rapport au terme source de la chimie) (b) pour le cas A60.

Chapitre 8

Conclusions et perspectives

L'objectif de cette thèse est de construire un outil numérique à partir du code de Simulation des Grandes Echelles (SGE) AVBP pour étudier la combustion au sein des moteurs cryotechniques. La pression dans les moteurs cryotechniques étant supérieure à la pression critique des réactifs, les fluides ne suivent plus le comportement décrit par la loi des gaz parfaits, dont la validité reste limitée aux calculs à basse pression. Les interactions moléculaires ne sont plus négligeables et une équation d'état appropriée doit être utilisée. Le choix s'est porté vers l'utilisation de l'équation d'état cubique de Peng-Robinson, il résulte d'un compromis entre coût de calcul et précision. A partir de cette équation d'état, la dépendance en densité de l'ensemble des variables thermodynamiques est obtenue. Des tests simples ont permis de constater qu'elle est capable de prédire avec des erreurs raisonnables (inférieures à 12% sur la densité) le comportement d'un fluide réel (*i.e.* qui considère les interactions moléculaires), tant pour la densité que les variables thermodynamiques. La non-idéalité du fluide est également présente sur les coefficients de transport. Ainsi, les coefficients de conductivité thermiques et de viscosité ont été modélisés à partir du modèle de Chung et al.. Les résultats sont en très bon accord avec la référence NIST pour l'oxygène, l'eau et le méthane, tandis que des erreurs, qui restent acceptables, de l'ordre de 30% sont constatées pour le calcul de la conductivité thermique de l'hydrogène. Bien que des modèles soient disponibles, le calcul de la diffusion d'espèce ne peut être validé par manque de données expérimentales à haute pression et l'hypothèse de nombre de Schmidt constants est utilisée.

L'intégration de ces modèles au sein d'AVBP nécessite l'adaptation du code. Ainsi, les conditions aux limites ainsi que les schémas numériques doivent être consistents avec la nouvelle thermodynamique. Les modifications apportées ont été validées sur des cas tests simples.

Les jets cryotechniques à pression supercritique se distinguent par la présence de très forts gradients de densité autour du jet dense. De telles variations de densité ne sont pas rencontrées dans les calculs basse pression pour lesquels AVBP a été initialement développé. Il a alors été nécessaire d'adapter la viscosité artificielle utilisée dans AVBP, indispensable à la stabilité numérique du code. La première étape est l'optimisation du senseur de viscosité artificielle, qui

détecte les régions potentiellement affectées par des erreurs numériques, pour les forts gradients de densité typiques des configurations cryotechniques. L'opérateur de diffusion artificielle original d'AVBP génère de très fortes fluctuations de pression dans la région fortement non-linéaire et peut mener à un arrêt intempestif du calcul. Une fois la difficulté identifiée, l'opérateur de diffusion artificielle a été adapté au gaz réel. Cette modification nécessaire, mais non-conservative, est limitée aux régions fortement non-idéales de la simulation, si bien que son impact sur la conservation de l'énergie totale reste très limitée.

Deux jets ronds mono-espèce à pression supercritique provenant de l'expérience de Mayer *et al.* [88] sont simulés et permettent une première validation dans une configuration réelle. Ces deux jets diffèrent par le saut de densité initial entre l'injection et le gaz ambiant (9.6 et 3.7). Les simulations sont en bon accord avec les données expérimentales à haute pression. Ces calculs permettent également de consolider les connaissances sur les jets à densité fortement variable. Il est notamment montré que les taux d'expansion en densité et en vitesse ne sont que faiblement dépendants du rapport de densité initial entre les jets et le gaz ambiant. De plus, la région de similarité suit la loi de pseudo-similarité de Chen et Rodi [23]. Le gradient de densité stabilise la couche de mélange initiale du jet, et rallonge notablement la longueur du coeur potentiel. La dynamique des deux jets diffère dans la région de transition. Dans le cas le plus dense, des poches à densité élevée sont éjectées du coeur potentiel et sont observables sur une distance importante après l'injection, alors que dans l'autre jet simulé, les poches sont rapidement dissoutes dans le gaz environnant.

Deux cas représentatifs d'injecteurs coaxiaux réactifs de moteur fusée issus du banc Mascotte de l'ONERA [158] sont calculés. Les simulations numériques sont en bon accord avec l'expérience. Ces simulations permettent d'identifier l'influence du rapport des vitesses entre l'hydrogène et l'oxygène sur la topologie de la flamme. La déstabilisation du jet dense d'oxygène est peu impactée par l'augmentation du cisaillement, un comportement qui diffère d'un système équivalent à pression souscritique. Le jet se déstabilise alors à une distance de l'injecteur similaire dans les deux cas. A cette déstabilisation est associée l'ouverture de la flamme. Il est montré que l'expansion de la flamme est accentuée par le confinement des jets. Cependant, un cisaillement plus fort génère une augmentation du taux de réaction, et, de fait, une consommation d'oxygène plus importante. De plus, le cisaillement, et donc l'efficacité de la combustion, diminuent avec la distance à l'injecteur. En conséquence, le cas simulé ayant le cisaillement le plus faible a une longueur de flamme bien plus importante.

Les configurations simulées durant la thèse permettent une première validation du code AVBP gaz réel et ont permis d'apporter de nouveaux éléments sur les systèmes à pression supercritique. Un effort de consolidation des résultats est cependant nécessaire. La diffusion d'espèce, qui a été abordée durant la thèse, n'a mené à aucune modification du fait de l'absence de données expérimentales. De plus, les effets Soret et Dufour ont été négligés. Les conséquence de ces simplifications ne sont pas identifiées et devraient être analysées.

Ces résultats sont néanmoins très encourageants et offrent de nombreuses perspectives dans un domaine jusqu'à présent peu exploré. Le code est opérationnel et peut être utilisé pour des études supplémentaires. Ainsi, l'étude numérique du retrait de l'injecteur, connu pour avoir un

effet majeur sur la déstabilisation d'un jet coaxial à pression supercritique [63, 14], permettrait un apport de connaissances important. Les études de cette thèse portent sur le couples oxygène/hydrogène. La simulation de cas oxygène/méthane semble intéressante, dans la mesure où des résultats expérimentaux portant sur la flamme complète sont disponibles [137, 14]. De plus, dans cette configuration, des résultats expérimentaux où les deux réactifs sont injectés sous forme dense sont disponibles. Ils ont permis la mise en évidence d'une structure de flamme particulière [137], qu'il serait intéressant d'étudier numériquement. Enfin, il serait également envisageable d'étudier des systèmes multi-injecteurs, ainsi que leur réaction à des perturbations acoustiques [125] afin d'étudier les instabilités de combustion à haute pression.

Bibliographie

[1] M. Amielh, T. Djeridane, F. Anselmet, and L. Fulachier. Velocity near-field of variable density turbulent jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(10) :2149–2164, 1996.

[2] C. Angelberger, F. Egolfopoulos, and D. Veynante. Large eddy simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities. *Flow, Turbulence and Combustion*, 65(2) :205–22, 2000.

[3] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.

[4] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combustion Science and Technology*, 178 :253–281, 2006.

[5] L. P. Bernal and A. Roshko. Streamwise vortex structure in plane mixing layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 179 :499–525, 1986.

[6] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena.* John Wiley, New York, 1960.

[7] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, and C. Bérat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, in press, 2008.

[8] R. Branam and W. Mayer. Characterisation of cryogenic injection at supercritical pressure. *Journal of Propulsion and Power*, 19(3) :342–355, May-June 2003.

[9] P. Brancher. *Etude numérique des instabilités secondaires de jets.* PhD thesis, Ecole Polytechnique, 1996.

[10] P. Brancher, J. M. Chomaz, and P. Huerre. Direct numerical simulation of round jets : Vortex induction and side jets. *Physics of Fluids*, 6(5) :1768–1774, May 1994.

[11] G. L. Brown and A. Roshko. On density effect on large structure in turbulent mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(Part 4) :775–816, 1974.

[12] T. D. Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1503 – 1515. The Combustion Institute, 1977.

[13] S. Candel, G. Herding, P. Scouflaire, C. Rolon, L. Vingert, M. Habiballah, F. Grisch, M. Pealat, P. Bouchardy, D. Stepowski, A. Cessou, and P. Colin. Experiemental investiga-

tion of shear coaxial cryogenic jet flames. *Journal of Propulsion and Power*, 14 :826–834, 1998.

[14] S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scouflaire, and C. Rolon. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178 :161–192, 2006.

[15] CERFACS. *AVBP Handbook - http ://cerfacs.fr/∼ avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK.*

[16] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131 :159–180, 2002.

[17] P. Chassaing. *Mélange turbulent de gaz inertes dans un jet de tube libre.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1979.

[18] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur.* Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000.

[19] P. Chassaing. *Variable density fluid turbulence.* Kluwer Academic Publishers, 2002.

[20] B. Chehroudi, R. Cohn, and D. Talley. Cryogenic shear layers : Experiments and phenomenological modeling of the initial growth rate under subcritical and supercritical conditions. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23(5) :554–563, October 2002.

[21] B. Chehroudi and D. Talley. Interaction of acoustic waves with a cryogenic nitrogen jet at sub- and supercritical pressures. In *40th AIAA, Aerospace Science Meeting & Exhibit, Reno, Nevada*, January 2002.

[22] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy. Visual characteristics and initial growth rate of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures. *Physics of Fluids*, 14(2) :850–861, february 2002.

[23] C. J. Chen and W. Rodi. *Vertical turbulent buoyant jets : A review of experimental data.* Pergamon Press, 1980.

[24] G. C. Cheng and R. Farmer. Real fluid modeling of multiphase flows in liuid rocket engine combustors. *Journal of Propulsion and Power*, 22(6), November-December 2006.

[25] T. H. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee, and K. E. Starling. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 27(4) :671–679, 1988.

[26] Tony Clifford. *Fundamentals of supercritical fluids.* Oxford Science Publications, 2002.

[27] CNES, editor. *Combustion dans les moteurs fusées*, 2001.

[28] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.

[29] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :338–371, 2000.

[30] M. Conaire, H. Curran, J. Simmie, W. Pits, and C. Westbrook. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *Int. J. Chem. Kin.*, 11 :603–622, 2004.

[31] A. Congiunty, C. Bruno, and E. Giacomazzi. Supercritical combustion properties. In *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 6-9 January, Reno, Nevada*, 2003.

[32] S. .C Crow and F. H. Champagne. Orderly structure in jet turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 48(3) :547–591, 1971.

[33] P. I. Crumpton, J. A. Mackenzie, and K. W. Morton. Cell vertex algorithms for the compressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 109 :1–15, 1993.

[34] R. Dehoff. *Thermodynamics in Materials Science*. Taylor & Francis, second edition edition, 2006.

[35] F.-X. Demoulin, A. Mura, and S. Zurbach. Single flow modelling of high-pressure turbulent cryogenic injection and combustion. In *Proceedings of the 3rd International Workshop Rocket Combustion Modeling*. Snecma, march 2006.

[36] P. E. Dimotakis, R. C. Miake-lye, and D. A. Papantoniou. Structure and dynamics of round turbulent jets. *Physics of Fluids*, 26(11) :3185–3192, 1983.

[37] P. G. Drazin and W. H. Reid. *Hydrodynamic stability*. Cambridge University Press, London, 1981.

[38] J. F. Ely and H. J. M. Hanley. Prediction of transport properties. 1. viscosity of fluids and mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20 :323–332, 1981.

[39] J. F. Ely and H. J. M. Hanley. Prediction of transport properties. 1. thermal conductivity of pure fluids and mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 22 :90–97, 1983.

[40] E. N. Fuller, P. D. Schettler, and J. C. Giddings. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Ind. Eng. Chem.*, 58(5) :18–27, 1966.

[41] M. Garcia. *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

[42] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser, Boston, 1999.

[43] F. F. Grinstein, E. J. Gutmark, T. P. Parr, D. M. Hanson-Parr, and U. Obeysekare. Streamwise and spanwise vortex interaction in an axisymmetric jet. a computational and experimental study. *Physics of Fluids*, 8(6) :1515–1524, June 1996.

[44] J. Gullbrand and F. K. Chow. The effect of numerical errors of turbulence models in large eddy simulations of channel flow, with and without explicit filtering. *Journal of Fluid Mechanics*, 495 :323–341, 2003.

[45] E. Gutmark and C. M. Ho. Preferred modes and the spreading angle of jets. *Physics of Fluids*, 26(10) :2932–2938, October 1983.

[46] M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert, and P. Gicquel. Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the mascotte facility. *Combustion Science and Technology*, 178 :101–128, 2006.

[47] M. Habiballah, L. Vingert, and J. Traineau. Mascotte : A test bench for cryogenic combustion research. In *47th International Astronautical Congress, Beijing*, 1996.

[48] I. A. Hannoun, H. J. S. Fernando, and E. J. List. Turbulence structure near a sharp density interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 189 :189–209, 1988.

[49] K. Harstad and J. Bellan. Evaluation of commonly used assumptions for isolated and cluster heptane drops in nitrogen at all pressures. *Combustion and Flame*, 127 :1861–1879, 2001.

[50] K. Harstad and J. Bellan. High-pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applicaions. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43 :645–654, 2004.

[51] K. Harstad, R. S. Miller, and J. Bellan. Efficient high-pressure state-equation. *AIChE Journal*, 43(6) :1605–1610, 1997.

[52] C. Hirsch. *Numerical Computation of internal and external flows.* John Wiley, New York, 1988.

[53] J. Hirschfelder, C. Curtis, and B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids.* John Wiley & Sons, 1954 edition, 1954.

[54] C.-H. Ho and L.-S. Huang. Subharmonics and vortex merging in mixing layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 119 :443–473, 1982.

[55] C. M. Ho and P. Huerre. Perturbed free shear layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 16 :365, 1984.

[56] J. C. R. Hunt, A. A. Wray, and P. Moin. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 193–208. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1988.

[57] F. Hussain and J. Jeong. On the identification of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 285 :69–94, 1995.

[58] H. J. Hussein, S. P. Capp, and W. K. George. Velocity measurements in a high-reynolds-number, momentum-conservative, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 258 :31–75, 1994.

[59] B. Ivancic and W. Mayer. Time and length scales of mixing and combustion processes in high pressure lox/gh2 rocket combustors. *Journal of Propulsion and Power*, 18(2) :247–253, 2002.

[60] A. Jameson and D. J. Mavriplis. Finite volume solution of the two-dimensional euler on a regular triangular mesh. *AIAA Journal*, 24(4) :611–618, 1986.

[61] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.

[62] L. Joly. *Ecoulements turbulents cisaillés libres à masse volumique variable : analyse physique et modélisation.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1994.

[63] M. Juniper. *Structure et stabilisation des flammes cryotechniques.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2001.

[64] M. Juniper and S. Candel. The stability of ducted compound flows and consequences for the geometry of coaxial injectors. *Journal of Fluid Mechanics*, 482 :257–269, 2003.

[65] M. Juniper and S. Candel. Stabilization of an edge diffusion flame behind a step over a liquid reactant. *Journal of Propulsion and Power*, 19 :332–342, 2003.

[66] M. Juniper, A. Tripathi, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Structure of cryogenic flames at elevated pressures. In *Proceeding of the Combustion Institute*, volume 28, pages 1103–1109, 2000.

[67] J. Bellan K. Harstad. An all-pressure fluid drop model applied to a bianry mixture : heptane in nitrogen. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(10) :1675–1706, October 2000.

[68] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR*, 30 :301, 1941.

[69] R.H. Kraichnan. Diffusion by a random velocity field. *Physics of Fluids*, 13 :22–31, 1970.

[70] A. G. Kravchenko and P. Moin. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 131 :310–322, 1996.

[71] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.

[72] G. Lacaze. *Simulation aux grandes échelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

[73] N. Lamarque. *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, 2007.

[74] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique Theorique - Tome 6 : Mecanique des Fluides*. Ed. Librairie du Globe- Editions MIR, 1984.

[75] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique Théorique - Physique statistique*. Ellipses, 4ème edition, 1994.

[76] P. D. Lax and B. Wendroff. Systems of conservation laws. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 13 :217–237, 1960.

[77] J.-Ph. Légier. *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001.

[78] J.-Ph. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000.

[79] M. Masquelet and S. Menon. Les of lox-gh2 combustion in an astrium rocket motor. Technical report, Georgia Institute of Technology,CCL report 2004-006, 2004.

[80] P. M. Mathias, T. Naheiri, and E. M. OH. A density correction for the peng-robinson equation of state. *Fluid phase equilibria*, 47(1) :77–87, 1989.

[81] S. Matsuyama, J. Shinjo, Y. Mizobuchi, and S. Ogawa. A numerical investigation on shear coaxial lox/gh2 jet flame at supercritical pressure. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeeting and Exhibit, Reno, Nevada*, 2006.

[82] L. Matuszewski, F. Dupoirieux, and V. Giovangigli. Combustion supercritique lox-h2. In *2nd Colloque INCA*, 2008.

[83] W. Mayer and R. Branan. Atomization characteristics on the surface of a round liquid jet. *Experiments in Fluids*, 36 :528–539, 2004.

[84] W. Mayer, B. Ivancic, A. Schik, and U. Hornung. Propellant atomization and ignition phenomena in liquid oxygen / gaseous hydrogen rocket combustors. *Journal of Propulsion and Power*, 17 :794, 2001.

[85] W. Mayer, A. Schik, M. Schäffler, and H. Tamura. Injection and mixing processes in high-pressure liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustor. *Journal of Propulsion and Power*, 16(5) :823–828, September-October 2000.

[86] W. Mayer, A. Schik, B. Vielle, C. Chaveau, I. Gökalp, and D. Talley. Atomization and breakup of cryogenic propellants under high pressure subcritical and supercritical conditions. *Journal of Propulsion and Power*, 14(5) :835–842, 1998.

[87] W. Mayer and H. Tamura. Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *Journal of Propulsion and Power*, 12(6) :1137–1147, November-December 1996.

[88] W. Mayer, J. Tellar, R. Branam, G. Schneider, and J. Hussong. Raman measurement of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39 :709–719, 2003.

[89] C. Meneveau and T. Poinsot. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86 :311–332, 1991.

[90] H. Meng and V. Yang. A unified treatment of general fluid thermodynamics and its application to a preconditioning scheme. *Journal of Computational Physics*, 189 :277–304, 2003.

[91] R. S. Miller, K. G. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulation of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen. *Journal of Fluid Mechanics*, 436 :1–39, 2001.

[92] K. W. Morton and M. F. Paisley. A finite volume scheme with shock fitting for the steady euler equations. *Journal of Computational Physics*, 80 :168–203, 1989.

[93] J. Bellan N. Okong'o. Turbulence and fluid-front area production in binary-speceis, supercritical, transistional mixing layers. *Physics of Fluids*, 16(5) :1023, 2004.

[94] R.-H. Ni. A multiple grid scheme for solving the euler equations. *AIAA Journal*, 20 :418–422, 1982.

[95] F. Nicoud, J. Baggett, P. Moin, and W. Cabot. New approximate boundary conditions for les. part 1 : Finding the answer via an optimal control strategy. In *APS/DFD meeting*, volume 44 of *Bull. Amer. Phys. Soc.*, New York, 1999.

[96] F. Nicoud and T. Poinsot. Dns of a channel flow with variable properties. In *Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena.*, Santa Barbara, Sept 12-15., 1999.

[97] J. Oefelein. Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178(1-3) :229–252, 2006.

[98] J. C. Oefelein. *Simulation and analysis of turbulent multiphase combustion processes at high pressures*. PhD thesis, Pennsylvania State University, 1997.

[99] J. C. Oefelein. Thermophysical characteristics of shear-coaxial lox-h2 flames at supercritical pressure. In *Proceeding of the Combustion Institute*, number 30, 2005.

[100] J. C. Oefelein and V. Yang. Modeling high-pressured mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *Journal of Propulsion and Power*, 14 :843, 1998.

[101] N. Okong'o and J. Bellan. Real-gas effects on mean flow and temporal stability of binary mixing layers. *AIAA*, 41(12) :2429–2443, 20003.

[102] N. Okong'o and J. Bellan. Consistent boundary conditions for multicompoment real gas mixtures based on characteristic waves. *Journal of Computational Physics*, 176 :330–344, 2002.

[103] N. Okong'o and J. Bellan. Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer : heptane and nitrogen. *Journal of Fluid Mechanics*, 2002.

[104] N. Okong'o, K. Harstad, and J. Bellan. Direct numerical simulation of o2/h2 temporal mixing layers under supercritical conditions. *AIAA Journal*, 40(5) :914, 2002.

[105] M. Oschwald. Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous raman scattering. *Experiments in Fluids*, 27 :497–506, 1999.

[106] M. Oschwald and M. M. Micci. Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atomization and Sprays*, 11 :91–106, 2002.

[107] M. Oschwald, A. Schik, M. Klar, and W. Mayer. Investigation of coaxial ln2-gh2-injection at supercritical pressure by spontaneous raman scattering. In *AIAA 99-2887, 35th Joint Propulsion Conference, Los Angeles, CA*, 1999.

[108] M. Oschwald, J. J. Smith, R. Branam, J. Hussong, A. Shick, B. Chehroudi, and D. Talley. Injection of fluids into supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178 :49–100, 2006.

[109] N. R. Panchapakesan and J. L. Lumley. Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. *Journal of Fluid Mechanics*, 246 :197–247, 1993.

[110] W. M. Pitts. Effects of global density ratio on the centerline mixing bahvior of axisymmetric turbulent jets. *Experiments in Fluids*, 11 :125–134, 1991.

[111] W. M. Pitts. Reynolds number effects on the mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. *Experiments in Fluids*, 11 :135–141, 1991.

[112] K. S. Pitzer. The volumetric and thermodynamic properties of fluids. 1. theoretical basis. *Journal of the American Chemical Society*, 77(13) :3427–3433, 1955.

[113] T. Poinsot. Controle actif indirect des instabilites de combustion. *Centralien*, 1991.

[114] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion.* R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

[115] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O'Connel. *The properties of gases and liquids.* McGraw-Hill, fifth edition, 2001.

[116] L. Pons. *Modélisation et simulation de la combustion cryotechnique transcritique.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2009.

[117] L. Pons, N. Darabiha, and S. Candel. Pressure effects on nonpremixed strained flames. *Combustion and Flame*, 152(1-2) :218–229, January 2008.

[118] L. Pons, N. Darabiha, S. Candel, T. Schmitt, and B. Cuenot. The structure of multidimensional strained flames under transcritical conditions. In *2nd Colloque INCA*, October 2008.

[119] S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.

[120] Stéphane Ravier. *Etude des instabilités d'un jet plan à masse volumique variable*. PhD thesis, Université Aix-Marseille II, 2004.

[121] J. Reinaud, L. Joly, and P. Chassaing. The baroclinic secondary instability of the two-dimensional shear layer. *Physics of Fluids*, 12(10) :2489–2505, October 2000.

[122] M. R. Riazi and C. H. Whitson. Estimating diffusion coefficients of dense fluids. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32 :3081–3088, 1993.

[123] G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, and S. Candel. Counterflow diffusion flames of general fluids : Oxygen/hydrogen mixtures. *Combustion and Flame*, 154 :319–330, 2008.

[124] C. D. Richards and W. M. Pitts. Global density effects on the self-preservation behavior of turbulent free jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 254 :417–435, 1993.

[125] F. Richecoeur. *Expérimentations et simulations numériques des interactions entre modes acoustiques transverses et flammes cryotechniques*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2006.

[126] D. B. Robinson and D. Peng. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15 :59–64, 1976.

[127] R. C. Rogers and W. Chinitz. Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations. *AIAA Journal*, 21(4) :586–592, 1983.

[128] A. Roux, L. Y. M. Gicquel, Y. Sommerer, and T. J. Poinsot. Large eddy simulation of mean and oscillating flow in a side-dump ramjet combustor. *Combustion and Flame*, 152(1-2) :154–176, 2007.

[129] M. A. Rudgyard. *Cell Vertex methods for compressible gas flows*. Phd thesis, Oxford University Computing Laboratory, 1990.

[130] P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles*. Springer, mathématiques & applications edition, 1998.

[131] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998.

[132] L. Selle. *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme-acoustique dans un écoulement vrillé*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004.

[133] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combustion and Flame*, 137(4) :489–505, 2004.

[134] L. Selle, F. Nicoud, and T. Poinsot. The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators. *AIAA Journal*, 42(5) :958–964, 2004.

[135] L. C. Selle, N. A. Okong'o, J. Bellan, and K. G. Harstad. Modelling of subgrid-scale phenomena in supercritical transitional mixing layers : an *a priori* study. *Journal of Fluid Mechanics*, 593 :57–91, 2007.

[136] A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, and T. Poinsot. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1729–1736, 2007.

[137] G. Singla. *Etude des Flammes Cryotechniques Oxygène Liquide/Méthane à Haute Pression.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2005.

[138] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. In *Proceedings of the Combustion Institute*, volume 30, pages 2921–2928, 2005.

[139] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Planar laser-induced fuorescence of oh in high-pressure cryogenic lox/gh2 jet flames. *Combustion and Flame*, 144 :151–169, 2006.

[140] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963.

[141] A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *Trans. ASME. Journal of Fluids Engineering*, 123 :359–371, 2001.

[142] J. J. Smith, G. Schneider, D. Suslov, M. Oschwald, and O. Haidn. Steady-state high pressure lox/h2 rocket engine combustion. *Aerospace Science and Technology*, 11 :39–47, 2007.

[143] R. Snyder, G. Herding, J.C. Rolon, and S. Candel. Analysis of flame patterns in cryogenic propellant combustion. *Combustion Science and Technology*, 124 :331–370, 1997.

[144] G. Soave. Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state. *Chemical Engineering Science*, 27 :1197–1203, 1972.

[145] G. Staffelbach, L. Y. M. Gicquel, and T. Poinsot. Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation*, 2005.

[146] R. Struijs. *A multi-dimensional upwind discretization method fot the Euler equations on unstructured grids.* Phd thesis, Technical University of Delft, 1994.

[147] S. Takahashi. Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficient of gases at high pressures. *J. Chem. Eng. Japan*, 7(6) :417–420, 1974.

[148] M. W. Thring and M. P. Newby. Combustion length of enclosed turbulent jet flames. In *Fourth Symposium (Internatioanl) on Combustion*, pages 789–796. Pittsburgh : The Standing Committee on Combustion, 1953.

[149] N. Tramecourt, S. Menon, M. Lal, and J. Amaya. Controllable atomization for supercritical combustion : A combined experimental and numerical study. Technical report, Georgia Institute of Technology, CCL report 2004-011, 2004.

[150] A. Tripathi. *Structure des flammes cryotechniques à haute pression.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2001.

[151] K. Truffin. *Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé.* Phd thesis, INP Toulouse, 2005.

[152] P. K. Tucker, S. Menon, C. L. Merkle, J. C. Oefelein, and V. Yang. An approach to improved credibility of cfd simulations for rocket injector design. In *43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2007.

[153] G. Urbin, C. Brun, and O. Metais. Large eddy simulations of three-dimensional spatially evolving round jets. In *Symposium on turbulent shear flows, 11th, Grenoble, France*, 1997.

[154] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Multicycle LES simulations of flow and combustion in a PFI SI 4-valve production engine. *SAE*, (2007-01-0151), 2007.

[155] R. Vichnevetsky and J. B. Bowles. *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*. SIAM Studies in Applied Mechanics, Philadelphia, 1982.

[156] L. Vingert, M. Habiballah, P. Hervat, F. Dugue, and P. Vuillermoz. Evolution of the mascotte test bench ti high pressure operation and related combustor technology issues. In *Third French-German Colloquium on Rocket Engine Propulsion, Marseille, France*, 1997.

[157] L. Vingert, M. Habiballah, and J.C. Traineau. Mascotte, a research test facility for high pressure combustion of cryogenic propellants. In *12th European Aerospace Conference, 3rd European Conference of cryogenic propellants, Paris, France*, 1999.

[158] L. Vingert, M. Habiballah, P. Vuillermoz, and S. Zurbach. Mascotte, a test facility for cryogenic combustion research at high pressure. In *51st International Astronautical Congress, Rio de Janeiro, Brazil*, 2000.

[159] F. A. Williams. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

[160] I. Wygnanski, D. Oscter, H. Fiedler, and B. Dziomba. On the perseverance of a quasi-two-dimensional eddy-structure in a turbulent mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 93(2) :325–335, 1979.

[161] B. Yang and S. B. Pope. Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms - in situ adaptive tabulation in principal directions - premixed combustion. *Combustion and Flame*, 112 :85–112, 1998.

[162] V. Yang. Modeling of supercritical vaporization, mixing and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. In *Proceeding of the Combustion Institute*, 2000.

[163] V. Yang, M. Habiballah, J. Hulka, and M. Popp. *Liquid rocket thrust chambers : aspects of modeling, analysis, and design*. American institue of Aeronautics and Astronautics, 2004.

[164] M. H. Yu and P. A. Monkewitz. The effect of nonuniform density on the absolute instability of two-dimensional intertial jets and wakes. *Physics of Fluids*, 2(7) :1175–1181, 1990.

[165] N. Zong. *Modeling and simulation of cryogenic fluid injection and mixing dynamics under supercritical conditions*. PhD thesis, Departemet of Mechanical and Nuclear Engineering, Pennsylvania State University, 2005.

[166] N. Zong, H. Meng, S.-Y. Hsieh, and V. Yang. A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. *Physics of Fluids*, 16(12) :4248–4261, 2004.

[167] N. Zong and V. Yang. A numerical study of high-pressure oxygen/methane mixing and combustion of a shear coaxial injector. In *AIAA Paper*, 2005.

[168] N. Zong and V. Yang. Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178 :193–227, 2006.

[169] Stephan Zurbach, editor. *Supercritical Combustion Modeling of the RCM-2 test-case : Mascotte 60 bar*, 2006.

Annexe
Article Soumis à *Comptes Rendus Mécanique*

Large-Eddy Simulation of transcritical flows

T. Schmitt [a], L. Selle [b], B. Cuenot [a], T. Poinsot [b]

[a] *CERFACS, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France*

[b] *Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

The present study uses the LES code AVBP, developed at CERFACS, to simulate transcritical flows. Real gas effects are accounted for by the use of a cubic equation of state, in conjunction with appropriate viscosity and thermal conductivity coefficients. First a single nitrogen round jet at supercritical pressure injected in a gaseous reservoir is simulated. Two cases are considered, one experiencing a transcritical injection (high density injection), the other being directly injected at supercritical temperature (lower density injection). Comparison with available measurements is in good agreement. Finally, the simulation of a reacting case from the Mascotte bench (ONERA) is performed, consisting in a single coaxial injector injecting transcritical oxygen and supercritical hydrogen in a 60 bar chamber. Mean flow characteristics are in good agreement with the experimental observations of OH* emission, whereas temperature comparisons are more difficult to interpret.

Résumé

Simulation aux Grandes Echelles d'écoulement transcritiques. L'étude est basée sur l'utilisation du code de Simulation des Grandes Echelles AVBP, développé au CERFACS, pour simuler des écoulements transcritiques. Les effets gaz réels sont modélisés via une équation d'état cubique et des coefficients de viscosité et de conductivité thermique appropriés. D'abord, un jet rond axisymétrique à pression supercritique injecté dans un réservoir gazeux est simulé. Deux cas d'injection sont considérés : l'un en condition transcritique (densité élevée à l'injection) et l'autre à température supercritique (densité faible à l'injection). Un bon accord avec les expériences disponibles est constaté. Finalement, la simulation d'un cas Mascoote réactif (ONERA), où l'oxygène et l'hydrogène sont respectivement injectés en condition transcritique et supercritique dans une chambre à 60 bars, est présenté. Le calcul est en bon accord avec les résultats expérimentaux d'émission de OH*. La comparaison des températures le long de la couche de mélange est plus délicate à interpréter.

Key words: Computational fluid mechanics ; Large-eddy Simulation ; Combustion ; Supercritical

Mots-clés : Mécanique des fluides numérique ; Simulation des grandes échelles ; Combustion ; Supercritique

Email address: thomas.schmitt@cerfacs.fr (T. Schmitt).

1. Introduction

Fluids encountered in cryogenic rocket engines and advanced gas turbines or internal combustion engines may be at supercritical pressure condition, *i.e.* at a pressure higher than the critical pressure of the mixture. In such conditions, fluid behavior may strongly differ from that of a perfect gas [1,2].

Over the past ten years, the need to get a better understanding of high pressure systems resulted in numerous studies on supercritical fluids. Both AFRL (Air Force Research Laboratory) and DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) experimentally studied round jets at supercritical pressure [3,4,5]. The impact of the supercritical pressure on the jet topology was evidenced, showing that rather than breaking into several drops, the ligaments classically observed in two phase jet dissolve in the ambient gas, with no longer evidence of drops creation. Further increase in pressure leads to a more perfect-gas-like jet. The influence of acoustic perturbations was also studied [6], highlighting their reduced effect in supercritical conditions in comparison with subcritical environment, suggesting that the coupling mechanism between acoustics and jets may be different for supercritical pressure jets than for subcritical pressure jets.

Cryogenic rocket engines at supercritical pressure were experimentally tested using LOx/GH2 [7,8,9], LOx/CH4 and LOx/LCH4 [10]. Using OH* emission, Candel et al. [7] investigated the role of momentum fluxes ratio between LOx and GH2 on the shape of the flame, showing that increasing the ratio reduces the spreading angle of the flame, *i.e.* an opposite behavior than in subcritical conditions. Singla et al. [11] obtained instantaneous and average distribution of OH radicals thanks to the use of OH planar laser-induced fluorescence, showing the wrinkling of the flame due to turbulence interaction along the mixing layer.

Because of the tremendous difficulties associated with high pressure measurements, data are, at the present time, restricted to OH* emission fields [7,11], shadowgraph [8,7] and Coherent Anti-Stokes Raman Scattering (CARS) temperature [8,12]. Unfortunately, no quantitative information about the velocity field is available.

This topic was also studied numerically, in particular with direct numerical simulation of mixing layers, showing the role of density gradients on the global layer stability and turbulence characteristics and the strong effect on the molecular mixing of the reduced species diffusion near critical conditions [13]. This highlighted the need for approriate subgrid-scale models for Large Eddy Simulation (LES) under supercritical pressure conditions [14]. Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) simulations of the Mascotte test rig [15] have been performed by Demoulin et al. [16].

Only few LES have been performed under transcritical conditions. An extensive review of the non-reacting LES up to 2006 can be found in Zong et al. [17]. A single nitrogen round jet was studied by Zong [18,19]. The stabilizing effect of the density gradient, and its role on turbulent energy redistribution along the mixing layer was identified. Shear coaxial injection and mixing of oxygen and methane has also been simulated by Zong and Yang [20].

A shear coaxial LOx/GH2 jet flame at supercritical pressure was investigated by both Matsuyama [21] and Oefelein [22], highlighting that the flame stabilization mechanism near the injector lips is linked to the presence of a strong recirculation zone of burnt gases.

Unfortunately, all these reacting simulations were in the vicinity of the injector lips. The objective of the present study is to build a real gas LES solver that can compute large configurations with intricate geometries. This is achieved by using the AVBP solver, in conjunction with appropriate thermodynamics, equation of state and transport coefficients.

Section 2 is devoted to the presentation of the AVBP LES solver and the necessary modifications for real gas implementation. Then Sec. 3 presents the validation of the solver on single nitrogen round jet cases [4] under supercritical pressure. Finally, Sec. 4 describes the simulation of case C60 of the Mascotte test rig [8].

2. Methodology and models for LES of transcritical combustion

2.1. *Description of the LES solver*

The unstructured explicit solver AVBP is used to compute the compressible Navier-Stokes equations for a multi-species gas [23]. Third order (in time and space) low dissipative centered scheme [24] is used to obtain accurate turbulence intensities [25]. Because of the high density gradients encountered in transcritical systems, artificial viscosity is used to avoid spurious oscillations [26]. Note that, compared to the original formulation of Jameson [26], the sensor is modified to work on density and be less dissipative. The 2nd order artificial dissipation operator is built to manage gradient by keeping the local pressure untouched. Characteristic boundary conditions are set with the NSCBC method [27,23], adapted to the real gas thermodynamics. For reacting case, the dynamically thickened flame model (TFLES) is used [28], in conjunction with a 2 steps - 4 species kinetic scheme for H_2/O_2, adapted from the work of Rogers and Chinitz [29].

2.2. *Real-Gas thermodynamics*

In this study, the Peng-Robinson [30] equation of state is used to model the high pressure thermodynamics :

$$P = \frac{\rho r T}{1 - \rho b_m} - \frac{\rho^2 a_m}{1 + 2\rho b_m - \rho^2 b_m^2} \tag{1}$$

where T is the temperature, P the pressure, ρ the density, $r = R/W$ with R being the gas constant and W the molar mass, $a_m(T)$ and b_m are the Peng-Robinson coefficients, that depend on the critical values of the substances involved in the computation and the mixture. The latter coefficients are computed using the classical Van Der Waals mixing rule. Details may be found in Poling et al. [2]. Comparisons with the NIST database for pure species show very good agreement in the critical zone and for temperature higher than the critical temperature. Nevertheless, 10 % errors on the density appear in the dense zone.

Changing the equation of state has consequences on the thermodynamic behavior, and all thermodynamic coefficients, that are linked to the equation of state [2], are computed using the Peng-Robinson equation of state. Complete formulations for the computation of internal energy, sound speed, ... may be found in [1]. Note that, for consistency reasons, modified thermodynamics have an impact on the formulation of boundary conditions and jacobian matrices of the numerical schemes.

2.3. *Assumptions and subgrid-scale (SGS) models*

Pressure gradient contribution on the heat flux and temperature gradient effect on mass flux may become significant in high pressure situations. The so-called Dufour and Soret effects have nevertheless been neglected in the present study, since,1) in the scope of LES simulation SGS fluxes are predominant prior to laminar fluxes, and 2) Oefelein et al. [31], using (fine) LES results indicate only weak effects of these additional terms. The heat flux is then computed using the classical Fick's law for heat conduction and inter-diffusion because heat transport through species diffusion. Species diffusion fluxes are computed using the Hirschfelder-Curtiss approximation [1].

Transport coefficients also show considerable changes when real gas effects are important. Here, the method proposed by Chung et al. [32] is used to compute the viscosity and thermal conductivity. Choosing the same method for both viscosity and thermal conductivity allows a significant gain on computational

time. The model is based on a low pressure, perfect gas formulation, corrected with an empirical expression to account for high density effects. Used in conjunction with the Peng-Robinson equation of state [30], the model gives good results when compared to the NIST database. Detail of the formulation can be found in [32] or [2]. Calculating mass diffusion coefficients is a difficult task in supercritical regime, and no reliable methodology exists. A detailed discussion is given in [33]. At the moment, constant, species dependent, Schmidt numbers are used.

SGS modeling in supercritical systems is still an open question. Selle et al. [14] and Bellan et al. [13] point out that the generally neglected sub-grid terms in low pressure cases may become important at high pressure. They also highlight the necessity to take into account the strong non-ideality of the thermodynamics and transport terms in the models. However no closure for sub-grid terms are available today and classical closure models are used here, such as the WALE model [34], which take into account local strain and rotation rates and provides low dissipation in pure shear zones. This model allows a better jet destabilization and more resolved turbulence and therefore better statistics.

The SGS energy and mass fluxes are modeled using the gradient transport assumption with turbulent Schmidt and Prandtl numbers set to 0.6.

3. LES of transcritical round jet

As a first step towards the simulation of reacting systems, a simulation of a round nitrogen jet at supercritical pressure is performed. The configuration corresponds to the experimental setup of DLR for the study of cryogenic systems [4].

3.1. *Flow configuration*

The configuration is made of a single round jet injected in a cylindrical reservoir (Fig. 1) pressurized at 40 bar with a temperature initially at 298 K. Two cases are computed, corresponding to cases 3 and 4 in Mayer et al. [4], summarized in Table 1.

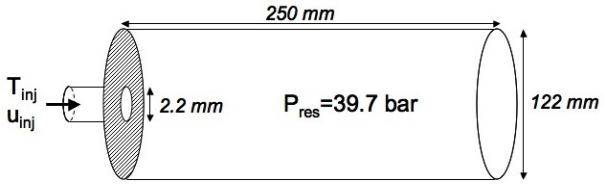


Figure 1. Sketch of the experiment of Mayer *et al.* [4].

The main difference between the two cases is the injection temperature T_{inj}, which is to be compared to the pseudo-boiling temperature T^*. The pseudo-boiling temperature is the temperature at which, for a given pressure, the heat capacity at constant pressure reaches its maximum. In this case, the reservoir pressure is 39.7 bar and the corresponding pseudo-boling temperature is 129.5 K (see Fig. 2). In case 3, the injection temperature, $T_{inj,3} = 126.9$ K, is slightly below the pseudo-boiling temperature T^*, while, for case 4, the temperature $T_{inj,4} = 137$ K is slightly higher than the pseudo-boiling temperature. Near the pseudo-boiling point, properties of the fluid are known to be strongly sensitive to the temperature [35,1], so that, for Case 3, the injection density $\rho_{inj,3} = 435 kg.m^{-3}$, is much higher than for case 4, $\rho_{inj,4} = 171 kg.m^{-3}$, whereas in the reservoir, density is equal in both cases to $\rho_\infty = 45.5 kg.m^{-3}$. This leads to strong density ratios between the jet and the ambiant fluid (ρ_{inj}/ρ_∞=9.6 for case 3 and ρ_{inj}/ρ_∞=3.7 for case 4).

It should also be pointed out that, because of the strong increase in the dynamic viscosity near the pseudo-boiling temperature, the Reynolds numbers at injection for case 3 and case 4 are similar (Table 1).

Case	T_{inj} [K]	u_{inj} [m.s^{-1}]	T/T^*	$\frac{\rho_{inj}}{\rho_\infty}$	Re_{inj}
3	126.9	4.9	0.98	9.6	1.7 10^5
4	137	5.4	1.06	3.7	1.6 10^5

Table 1
Injection conditions [4].

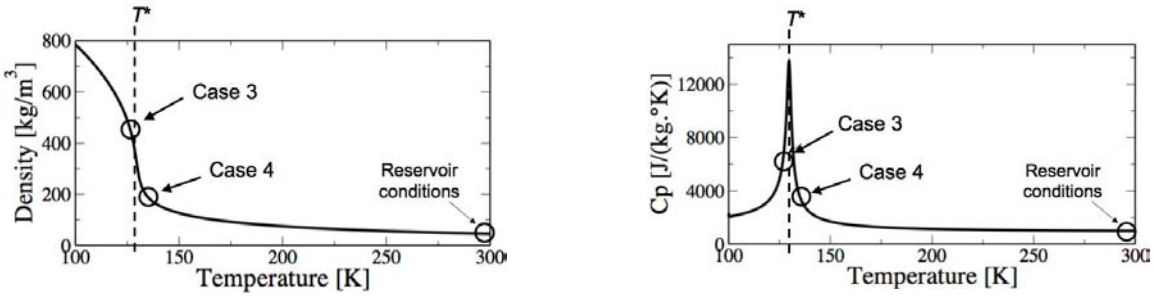


Figure 2. Density and heat capacity for the two test cases.

3.2. *Numerical setup*

The computational domain consists in a cylindrical reservoir, with a diameter of 122 mm. The diameter of the round injector is 2.2 mm. A planar cut of the mesh is shown on fig. 3 (left). The grid is refined near the injector, with a constant cell size of 0.1 mm on a distance of almost 10 diameters. This zone is followed by a smooth coarsening region towards the exit. The mesh contains 950 000 points and 5 500 000 tetrahedra.

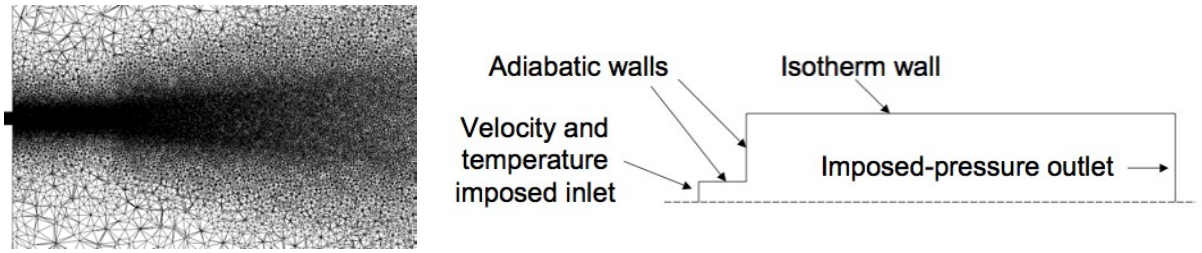


Figure 3. Plane cut of the mesh over a length of 30 injector diameters (left) and sketch of the boundary conditions used in the simulation (right).

Boundary conditions are also depicted in fig. 3 (right). The pressure in the reservoir is maintained by a non-reflecting outlet with imposed pressure. The walls near the injector are modeled as adiabatic. The outer walls of the reservoir are isotherm, with an imposed temperature of 298 K. Velocity and temperature are imposed at the inlet. Turbulent perturbations are added to the mean flow at the inlet using the procedure of Kraichnan/Smirnov [36] [37], with an intensity of 2.5 %, which is a typical value for turbulent round jets.

3.3. *Results and discussion*

3.3.1. *Flow visualization*

Fig. 4 shows two cuts, for cases 3 and 4, of an instantaneous density field. As presented in section 3.1, the injection density for case 3 (435 kg.m^{-3}) is much higher than for case 4 (171 kg.m^{-3}). The two jets are both affected by large Kelvin-Helmoltz like vortical structures. However, case 3, which has a much larger density is less affected than case 4 and the eventual destruction of the inner dense core is slower.

In case 3, stretched structures emerge from the central core. The structures, generally referred to as ligaments, are typical of transcritical jets, and have been previously evidenced in experiments [3].

The mixing layer seems to be stabilized by the density gradient, since structures need a longer distance to develop in case 3 than in case 4. Note the strong injection temperature dependence of supercritical flows in the vicinity of the critical temperature, since it only differs of 10 K between case 3 and case 4, but behaviors are highly different.

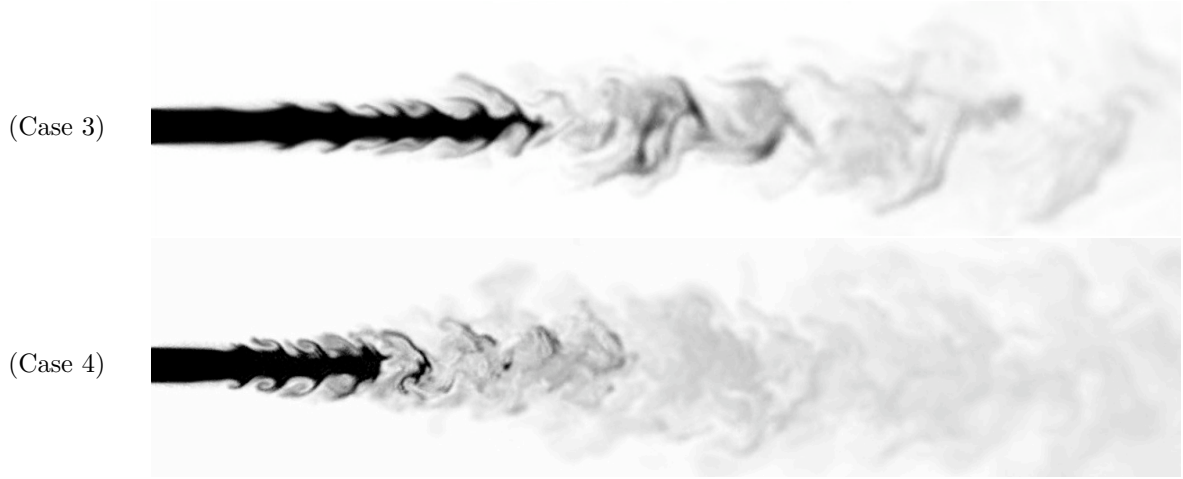


Figure 4. Instantaneous cuts of density in the near injector zone (30 diameters). White: 45 kg/m^3 ; Black: 435 kg/m^3 (case3) and 171 kg/m^3 (case 4).

3.3.2. *Comparison with experimental data*

Because of the very high pressure, only few data concerning the density field are available. Measurements have been performed using 2-D Raman imaging, giving informations on density and spreading angle [4].

Comparisons of the center-line density of the computation with the experimental results obtained by Mayer et al. [4] at DLR, for case 3 and case 4, are shown on fig. 5. Results compare fairly well with the experiment for case 3. Differences between measured and computed density in the potential core zone (*i.e.* where the density keeps its injection value) for case 3 is due to the tendency of Raman imaging technique to predict lower density values when density is very high (see Mayer et al. [4]). However, Case 4 shows important discrepancies with the experimental results. They may originate from the strong uncertainty on the injection temperature (see Mayer et al. [4]), which has a strong influence on the injection density and then on the potential core length (Fig. 2, left). Note that the dense-core length is around 7.9 diameters for case 3 and falls to 5.1 diameters for case 4 (taken at 99 % of the injection density).

The tangent of the spreading angle of density is given in table 2, obtained by linear interpolation of the Full Width Half Maximum (FWHM) of density between x/d=15 and x/d=25 (Oschwald et al. [38]). The FWHM is the width of the jet measured between the 2 median density values. Computation is in

good agreement with the experimental observations for case 3. FWHM of density were not available for the case 4. Again, LES results are also compared with other results from similar experiments of Oschwald et al. [38,35] in Tab. 2. LES results for case 3 are in good agreement with experiments, while, for case 4, simulation indicates a lower spreading angle than the measurements of Oschwald et al. [38]. Contrary to experiments, LES shows weak influence of the density ratio at injection on the spreading rate of the jet for $x > 15d$. The strong variability of the measurements outlined in Oschwald et al. [35] (see Figs. 17 and 18) between each experiment highlight the strong uncertainties in high-pressure systems.

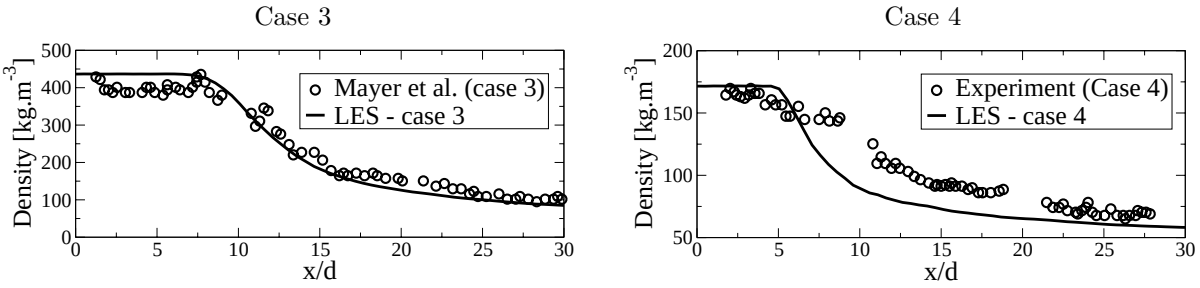


Figure 5. Comparison between experimental and LES results of the center-line density in terms of normamized distance from the injector. Left : case 3 ; Right : case 4.

Case	LES	Experiment [4]	Oschwald [38]
3	0.227	0.196	0.206
4	0.241	-	0.312

Table 2
Tangent of the spreading angle obtained by LES, and comparisons with experimental results of Mayer et al. [4] and Oschwald et al. [38]. Angles are computed between x/d=15 and x/d=25.

4. LES of reacting coaxial LOx/GH2 injector

This section is devoted to the simulation of a reacting coaxial LOx/GH2 injector, using the experimental results of the Mascotte test rig (case C60) [15]. The Mascotte cryogenic combustion test facility is operated by ONERA to study fundamental processes involved in the combustion of cryogenic propellants.

4.1. *Flow configuration*

The domain (Fig. 6, left) is a 50 mm x 50 mm square-section box. The total length is 400 mm. The outlet nozzle used in the experiment is replaced by a non-reflecting constant-pressure outlet in the simulation. A helium film is injected along the side walls for cooling purpose. The coaxial injector, and its dimensions, are represented on Fig. 6 (right). Note that the initially tapered lip is replaced by a rectangular one. The width of the lip used in the computation is 1 mm.

Boundary conditions are given in Table 3 and the pressure in the domain is 6 MPa. Note that the oxygen is injected in transcritical state, while hydrogen is gaseous. The global equivalence ratio is very rich ($\phi = 3.2$). The corresponding mass flux ratio E is 2.5. Because the lips between oxygen and hydrogen are widen, the momentum flux ratio J is 1.43 whereas it is 4 in the experiment. This parameter is known to influence the initial spreading of the flame in coaxial systems [7]. Nevertheless, the effect seems to be

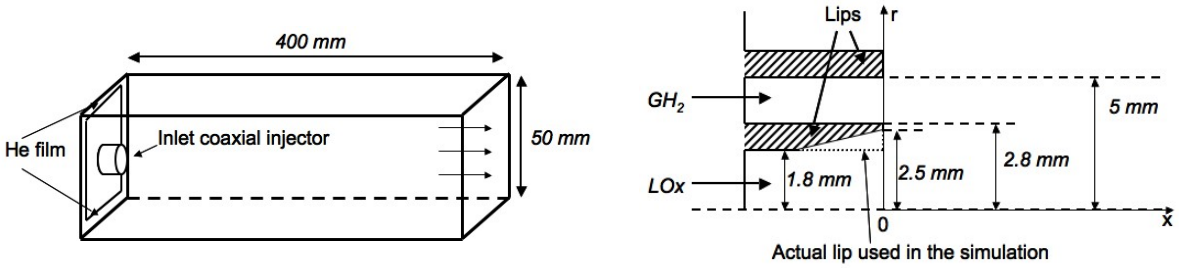


Figure 6. Sketch of the computational domain (left). Sketch of the coaxial injector (right). Mascotte case.

more limited in supercritical systems when compared with subcritical cases [7,39] so that it is expected not to notably alter the result considering the purpose of the current study.

Species	Mass flux [g/s]	T_{inj} [K]	T_c [K]	P_c [bar]	ρ_{inj} [kg/m^3]
O_2	105	83	154	50.4	1340
H_2	42	275	33	12.8	5.25
He	24.5	280	5.19	2.27	10

Table 3
Injection conditions for the Mascotte case.

4.2. *Numerical setup*

The simulation is performed on a tri-dimensional domain containing 850 000 nodes and 5 000 000 tetrahedra, based on prior experience. Walls are adiabatic. Turbulent perturbations on velocity, corresponding to a turbulence intensity of 3 % of the mean flow, are imposed in oxygen and hydrogen injectors.

4.3. *Results and discussion*

4.3.1. *Instantaneous fields*

An instantaneous iso-surface of temperature taken at 2000K, colored by the axial velocity, is plotted on fig. 7. The length of the view is 200 mm. One can notice the strong shear between the outer - light and fast - hydrogen and the central oxygen jet. Downstream the injector, after 50 - 60 mm, a strong change in the dynamics occurs. Indeed, the initially low-spreading jet, widens quickly together with the rapid transformation of small intense vortical structures into larger vortices.

The hydrogen mass-fraction field is presented in fig. 8, with iso-lines of heat release. The hydrogen jet is initially deviated by the thermal expansion of the central dense jet and destabilizes few millimeters after injection, exhibiting intense vortical structures. On the contrary, the dense oxygen jet is stable until 60 mm.

The heat-release iso-contours of fig. 8 show that the flame topology is close to the oxygen jet behavior, with an initially low spreading angle, until 60 mm, with no appearance of vortices, followed by the apparition of large structures. After 90 mm, the flame is still open. The heat release is higher by at least 1 order of magnitude (from 5.10^9 to 5.10^{10} W/m^3) in the first 60 mm than at 90 mm, mainly due to the strong shear between the fast hydrogen jet ($\approx$ 140 m/s) and the central jet ($\approx$ 7.8 m/s). Moreover, as indicated by the presence of heat release pockets equal to 5.10^{11}, the vortical structures locally enhance

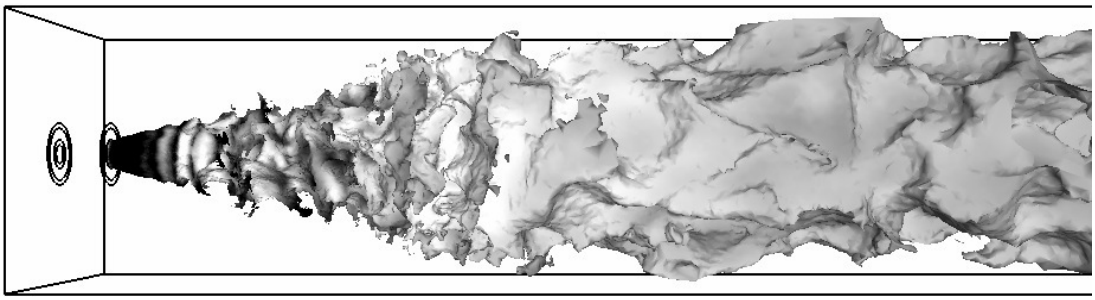


Figure 7. Iso-contour of temperature (2000 K) colored by (saturated) axial velocity (Black: 100 m/s ; White: 0 m/s ; length of view = half of the total length). Actual axial velocity reaches 150 m/s in the hydrogen outer flow.

the heat release, highlighting the importance of dynamics in the combustion processes occurring in the mixing layer.

The heat release iso-contours also indicate that the flame is anchored to the lips. This is consistent with experimental observations [39]. The stabilization is associated with an intense reactive zone. The latter is able to attach to the lips because of the use of adiabatic boundaries and sufficient grid resolution. The study of the stabilization mechanisms is not the goal of this calculation.

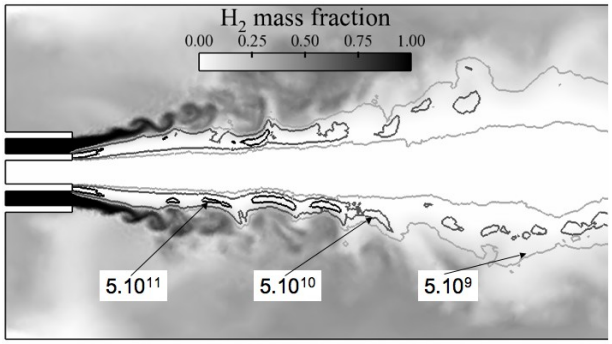


Figure 8. Cut of the hydrogen mass fraction field in the median plan of the domain (length of view $\approx$ 90 mm) and iso-contours of heat release (5.10^9, 5.10^{10} and 5.10^{11} W/m^3).

4.3.2. *Average fields and experimental comparisons*

The mean OH mass fraction is shown on fig. 9 (left), indicating the location of the turbulent flame brush, togeteher with iso-contours of OH mass fraction, at 10^{-2} and 10^{-4}. The average OH* emission image obtained by the EM2C team [7] [39] is given on the right of fig. 9, for qualitative comparison (this picture represents emitted OH radicals, which may differ slightly from OH field). The overall shape of the flame is recovered by the simulation, nevertheless, the spreading angle of the flame seems to be slightly under-predicted. In both the LES and the experiment, the flame is not closed at the end of the observation box.

A cut of the average temperature field is given on fig. 10 (left). Comparison along the dashed lines of fig. 10 (left) with experimental data from ONERA [8] [12] is plotted on fig. 10 (right). Lines represent LES results and indicate the presence of a hot burning layer surrounding the central oxygen jet. The maximum temperature is around 2400 K. The radial position r of the maximum temperature increases with the distance to the injector x, pointing out that the flame widens and is still open. This is consistent

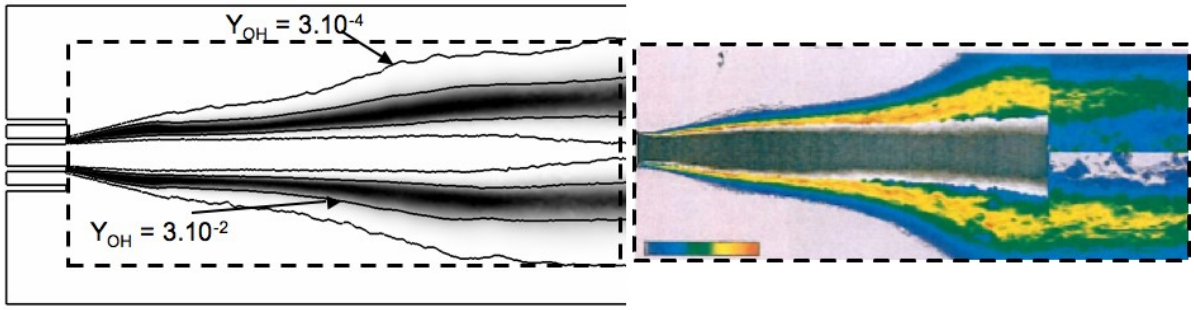


Figure 9. Cut of the average OH mass fraction field in the median plan (left). The length of view is 200 mm (half of the domain). Right picture is an averaged OH* emission image obtained by Juniper et al. [39] [7].

with the experimental observation shown in fig. 9. Initially, close to the injector, for $x = 15$ mm, the flame is very thin and confined around the oxygen jet. The high-temperature zone broadens as distance from injector is increased.

Symbols on fig. 10 are experimental results of Habiballah et al. [8,12]. For x=15 and x=50 mm, LES results clearly exhibit strong discrepancies with the experiment, where no flame can be clearly evidenced, since the maximum mean temperature is below 1000 K. As indicated by Habiballah et al. [8], the mean flame temperature is low because the flame is very thin, and is strongly fluctuating. This behavior may not be correctly captured in the LES simulation, because of the required grid resolution. Nevertheless, the previous comparison with mean OH* emission images [7] shows overall good agreements. The CARS measurement technique used in this work [8] probes H2 molecules in the reacting flow and analyses their spectrum of emission from which the temperature of the flow is obtained. Therefore, the validity of the temperature measurement can be questioned in regions of the flow featuring low concentrations of H2 molecules, mainly the LOx dense core for low mixture ratio operating points. At $x = 100$ mm, both LES and experiment indicate temperatures higher than 2000 K, but the maximum value is found at $r = 0$ for experiment, whereas it is located around $r = 10$ mm in the LES. It seems that, at $x = 100$ mm, the flame is closed in the experiment whereas it is not in the simulation.

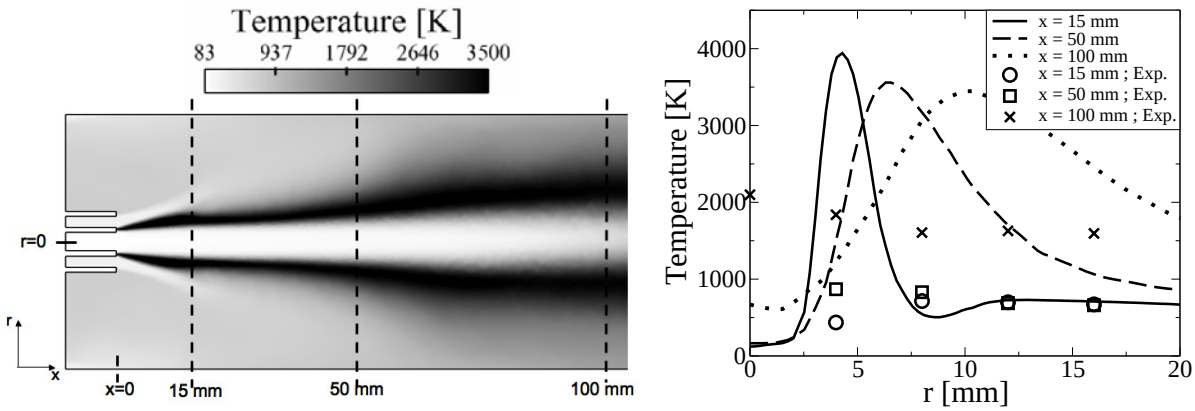


Figure 10. Left : cut of the average temperature field in the median plan. Right : plots of temperature profiles in the radial direction. r is the radial distance from injector centerline and x is the longitudinal distance from injector exit. Symbols are temperatures measured by Habiballah et al. [8] [12]. Lines are the LES results.

5. Conclusions

The AVBP solver has been extended to real gas applications by use of a cubic equation of state and the corresponding real-gas thermodynamics. The computation of two single nitrogen jets [4] at supercritical pressure is performed. Two cases from [4] are computed : Case 3, with an injection temperature lower than the pseudo-boiling temperature, and Case 4, with a temperature higher than the pseudo-boiling temperature. As a consequence, the injection density in case 3 is much higher than in case 4 and the dynamics of the jets are highly different, with a potential core equal to 7.9 for case 3 and to 5.1 in case 4. The spreading angle falls close to experiments in case 3, while discrepancies are noticed for case 4. The simulation of a supercritical coaxial LOx/H2 reacting case, from the Mascotte test rig [15], is also performed. Results indicate an initially low-spreading jet over 60 mm, which then widens quickly. The heat release in the shear layer is enhanced by the strong shear and vortical activity between the outer fast hydrogen jet and the central low-velocity oxygen jet. LES results and experimental results of OH* emission [7] are in good agreement. Comparison with experimental temperature [8] in the first 50 mm shows strong discrepancies, with computed temperature much higher in the simulation than in the experiment. Moreover, experimental temperature measurements seems to indicate that the flame is closed after 100 mm, which is not in accordance with both LES and OH* emission measurements.

Acknowledgment

The funding for this research is provided by Snecma, which is the prime contractor for European launcher Ariane 5 cryogenic propulsion systems, and CNES (Centre National d'Etude Spatiale). The authors thank S. Candel (EM2C) and L. Pons (EM2C) and M. Oschwald (DLR) for helpful discussions.

References

[1] J. Hirschfelder, C. Curtis, and B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids.* John Wiley & Sons, 1954 edition, 1954.

[2] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O'Connel. *The properties of gases and liquids.* McGraw-Hill, fifth edition, 2001.

[3] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy. Visual characteristics and initial growth rate of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures. *Physics of Fluids*, 14(2):850–861, february 2002.

[4] W. Mayer, J. Tellar, R. Branam, G. Schneider, and J. Hussong. Raman measurement of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39:709–719, 2003.

[5] M. Oschwald. Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous raman scattering. *Experiments in Fluids*, 27:497–506, 1999.

[6] D. W. Davis and B. Chehroudi. Measurements in an acoutically-driven coaxial jet under sub-, near-, and supercritical conditions. *Journal of Propulsion and Power*, 23(2):364–374, 2007.

[7] S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scouflaire, and C. Rolon. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178:161–192, 2006.

[8] M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert, and P. Gicquel. Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the mascotte facility. *Combustion Science and Technology*, 178:101–128, 2006.

[9] J. J. Smith, G. Schneider, D. Suslov, M. Oschwald, and O. Haidn. Steady-state high pressure lox/h2 rocket engine combustion. *Aerospace Science and Technology*, 11:39–47, 2007.

[10] G. Singla. *Etude des Flammes Cryotechniques Oxygène Liquide/Méthane à Haute Pression.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2005.

[11] G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon, and S. Candel. Planar laser-induced fuorescence of oh in high-pressure cryogenic lox/gh2 jet flames. *Combustion and Flame*, 144:151–169, 2006.

[12] L. Vingert, A. Nicole, and M. Habiballah. The mascotte single injector 60 bar hot test for code validation - test-case specifications and some more experimental data. In *Proceedings of the 3rd International Workshop Rocket Combustion Modeling*. Snecma, march 2006.
[13] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combustion Science and Technology*, 178:253–281, 2006.
[14] L. C. Selle, N. A. Okong'o, J. Bellan, and K. G. Harstad. Modelling of subgrid-scale phenomena in supercritical transitional mixing layers: an *a priori* study. *Journal of Fluid Mechanics*, 593:57–91, 2007.
[15] L. Vingert, M. Habiballah, P. Vuillermoz, and S. Zurbach. Mascotte, a test facility for cryogenic combustion research at high pressure. In *51st International Astronautical Congress, Rio de Janeiro, Brazil*, 2000.
[16] F.-X. Demoulin, A. Mura, and S. Zurbach. Single flow modelling of high-pressure turbulent cryogenic injection and combustion. In *Proceedings of the 3rd International Workshop Rocket Combustion Modeling*. Snecma, march 2006.
[17] N. Zong and V. Yang. Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178:193–227, 2006.
[18] N. Zong, H. Meng, S.-Y. Hsieh, and V. Yang. A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. *Physics of Fluids*, 16(12):4248–4261, 2004.
[19] N. Zong. *Modeling and simulation of cryogenic fluid injection and mixing dynamics under supercritical conditions*. PhD thesis, Departemet of Mechanical and Nuclear Engineering, Pennsylvania State University, 2005.
[20] N. Zong and V. Yang. A numerical study of high-pressure oxygen/methane mixing and combustion of a shear coaxial injector. In *AIAA Paper*, 2005.
[21] S. Matsuyama, J. Shinjo, Y. Mizobuchi, and S. Ogawa. A numerical investigation on shear coaxial lox/gh2 jet flame at supercritical pressure. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeeting and Exhibit, Reno, Nevada*, 2006.
[22] J. C. Oefelein. Thermophysical characteristics of shear-coaxial lox-h2 flames at supercritical pressure. In *Proceeding of the Combustion Institute*, number 30, 2005.
[23] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics*, 202(2):710–736, 2005.
[24] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 162(2):338–371, 2000.
[25] A. G. Kravchenko and P. Moin. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 131:310–322, 1996.
[26] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.
[27] T. Poinsot and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1):104–129, 1992.
[28] J.-Ph. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000.
[29] R. C. Rogers and W. Chinitz. Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations. *AIAA Journal*, 21(4):586–592, 1983.
[30] D. B. Robinson and D. Peng. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15:59–64, 1976.
[31] J. C. Oefelein. Large eddy simulation of a shear-coaxial lox-h2 jet at supercritical pressure. In *38th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Indianapolis, IN*, 2002.
[32] T. H. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee, and K. E. Starling. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 27(4):671–679, 1988.
[33] K. Harstad and J. Bellan. High-pressure binary mass diffusion coefficients for combustion applicaions. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43:645–654, 2004.
[34] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3):183–200, 1999.
[35] M. Oschwald, J. J. Smith, R. Branam, J. Hussong, A. Shick, B. Chehroudi, and D. Talley. Injection of fluids into supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178:49–100, 2006.
[36] R.H. Kraichnan. Diffusion by a random velocity field. *Physics of Fluids*, 13:22–31, 1970.
[37] A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *Trans. ASME. Journal of Fluids Engineering*, 123:359–371, 2001.
[38] M. Oschwald and M. M. Micci. Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atomization and Sprays*, 11:91–106, 2002.
[39] M. Juniper. *Structure et stabilisation des flammes cryotechniques*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2001.

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Doctorat d'Université, spécialité *Dynamique des Fluides*

19 juin 2009

Thomas Schmitt

Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente à pression supercritique

Dans les chambres de combustion des moteurs fusées cryotechniques, la pression excède la pression critique des réactifs. Les interactions moléculaires ne sont plus négligeables et le comportement du fluide n'est plus celui d'un gaz parfait. Le but de cette thèse est de développer un outil de Simulation des Grandes Echelles (SGE) pour étudier la combustion et la dynamique dans des géométries réalistes de moteur fusées. L'utilisation de l'équation d'état de Peng-Robinson, associé à une formulation thermodynamique généralisée, et des coefficients de transports appropriés permettent au code de SGE AVBP du CERFACS de simuler des systèmes réactifs à pression supercritique. Les changements thermodynamiques au sein d'AVBP nécessitent également l'adaptation des conditions limites et des schémas numériques. L'outil est validé sur une configuration mono-espèce à pression supercritique, puis sur un cas représentatif d'un injecteur coaxial de moteur-fusée. Les résultats obtenus sont en bon accord avec l'expérience et offrent des perspectives encourageantes pour des études futures, telles que des configurations multi-injecteurs ou l'analyse des instabilités de combustion haute fréquence.

Mots clefs : thermodynamique, supercritique, combustion, turbulence, simulation des grandes échelles, jets ronds, jets coaxiaux

Large eddy simulation of supercritical-pressure turbulent combustion

In cryogenic engines combustion chambers, pressure exceeds the propellants critical pressure. Molecular interactions are generally no longer negligible and fluid behavior deviates from that of a perfect gas. The objective of this thesis is to develop a Large-Eddy Simulation (LES) tool to study combustion and dynamics in realistic geometries of rocket engines. The use of the Peng-Robinson equation of state, in conjunction with a generalized treatment of thermodynamics and appropriate transport coefficients, allows the CERFACS' LES code AVBP to handle reactive systems at supercritical pressure. Change of the thermodynamics in AVBP necessarily leads to an adaptation of boundary conditions treatment and numerical schemes. The tool is validated on a mono-species configuration at supercritical pressure, and a reactive single coaxial injector, representative of a rocket injector. Results are in good agreement with experiments and provide encouraging perspectives for future studies, such as multi-injector configurations and high-frequency combustion instabilities.

Keywords : thermodynamics, turbulence, supercritical, combustion, large eddy simulation, round jets, coaxial jets